

Algoritmo para el Diseño y Optimización de Códigos de Aperturas Booleanas para un Sistema Codificado de Patrones de Difracción de Rayos X de Bajo Costo

Jhon James Angarita Pallares

**Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingenierías Físicomecánicas
Escuela de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones
Bucaramanga
2017**

Algoritmo para el diseño y optimización de códigos de aperturas booleanas para un sistema codificado de patrones de difracción de rayos X de bajo costo

Jhon James Angarita Pallares

Trabajo de Grado para optar al título de:
Ingeniero Electrónico

Director: **Samuel Eduardo Pinilla Sánchez**
Ph.D(e) Ingeniería electrónica

Codirector: **Henry Arguello Fuentes**
Ph.D Electrical Engineering and Computing

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingenierías Físicomecánicas
Escuela de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones
Bucaramanga

2017

Contenido

Introducción	10	
1	CONCEPTOS Y ESTADO DEL ARTE	12
1.1	DIFRACCIÓN	12
1.2	CRISTALOGRAFÍA	15
1.2.1	Modelo discreto	16
1.3	ALGORITMOS DE RECUPERACIÓN DE LA FASE	17
2	SISTEMA CODIFICADO DE PATRONES DE DIFRACCIÓN	21
2.1	APERTURA CODIFICADA <i>OCTANARY</i>	21
2.2	APERTURAS CODIFICADAS BOOLEANAS DEL ESTADO DEL ARTE	22
2.3	PATRONES DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X CODIFICADOS	24
2.3.1	Limitaciones del modelo de codificación teórica	26
2.4	ESTIMACIÓN DE LA APERTURA DE FASE EQUIVALENTE	26
2.5	APROXIMACIÓN BOOLEANA DE LA APERTURA CODIFICADA DE FASE USANDO EL MÉTODO <i>DETOUR-PHASE</i>	28
3	SIMULACIONES Y RESULTADOS	31
3.1	CONFIGURACIÓN FACTIBLE A LOS ALGORITMOS PARA UNA IMPLEMENTACIÓN REAL	31
3.2	ALGORITMO PARA CALCULAR LAS APERTURAS CODIFICADAS ÓPTIMAS	34
3.3	SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO TRUN- CATED WIRTINGER FLOW (TWFM)	37
3.4	SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO RESHAPED WIRTINGER FLOW (RWFM)	38
3.5	SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO TRUN- CATED AMPLITUDE FLOW (TAFM)	40
4	CONCLUSIONES	44
Bibliografía		46

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Representación esquemática de un sistema de patrones de difracción codificados teórico. Note que, la apertura codificada se coloca en frente de la muestra.	11
Figura 2	Geometría de difracción	12
Figura 3	Configuración ilustrativa para adquirir los patrones de difracción.	16
Figura 4	Estructura esquemática de un sensor de imagen CCD/CMOS. (Tomada de [21])	17
Figura 5	Apertura codificada <i>Octanary</i> . Los elementos $\{-1, 1, i, -i\}$ modifican la fase de los haces de rayos X difractados.	21
Figura 6	Ejemplo de aperturas codificadas aleatorias no diseñadas con diferentes transmitancias. (A) $t_r = 0.1$, (b) $t_r = 0.7$. Los píxeles blancos y negros representan los elementos transmisivos y de bloqueo, respectivamente.	22
Figura 7	Ejemplo de aperturas codificadas Hadamard con transmitancias (a) $t_r = 0.3$ y (b) $t_r = 0.5$	23
Figura 8	(a) Apertura codificada aleatoria (b) Apertura codificada con patrón de ruido azul, denominada apertura codificada uniforme, que reduce los clusters. La transmitancia en (a) y (b) es 0.5.	24
Figura 9	Ejemplo de apertura codificada basada en DFT para transmitancias (a) $t_r = 0.1$, (b) $t_r = 0.7$	24
Figura 10	Sistema de patrones codificados de difracción. La apertura codificada $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ modula la señal \mathbf{X} , donde, al ser iluminada con la fuente de rayos X se obtienen los patrones codificados de difracción $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, los cuales son capturados en el detector.	25
Figura 11	Representación esquemática de un sistema de patrones de difracción codificados. Observe que se introduce una apertura codificada entre el punto difractado y el detector con el fin de modular la señal, ya sea bloqueando, desbloqueando o cambiando la fase del haz difractado.	26
Figura 12	(a) Apertura codificada de fase compleja, y su aproximación, (b) Apertura codificada de fase binaria <i>detour-phase</i> . (Tomada de [21])	29
Figura 13	Figura intencionalmente colocada para ilustrar las aperturas codificadas óptimas obtenidas con el algoritmo propuesto.	30
Figura 14	Rejilla de las aperturas codificadas. Fuente:[21]	35

Figura 15	Aperturas codificadas booleanas. (a) $d = 4$ y $c = 2$, (b) $d = 4$ y $c = 1$	36
Figura 16	Diseño de Aperturas codificadas usando diferentes números de captura d y constantes de complementariedad c . (a) $d = 2$ y $c = 1$, (b) $d = 16$ y $c = 4$, (c) $d = 16$ y $c = 8$, (d) $d = 8$ y $c = 4$, (e) $d = 16$ y $c = 1$, (f) $d = 16$ y $c = 2$, (g) $d = 8$ y $c = 2$, (h) $d = 8$ y $c = 1$	37
Figura 17	Recuperación de la fase utilizando el algoritmo TWFM. (a) Imagen original, (b) Imagen recuperada con una calidad de 5 dB.	38
Figura 18	Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. TWFM	39
Figura 19	Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. RWFM	40
Figura 20	Reconstrucciones obtenidas usando las aperturas codificadas booleanas óptimas y el Algoritmo RWFM. (a) Imagen original, (b) $d = 4$ y $c = 2$, PSNR 24.00 dB, (c) $d = 8$ y $c = 4$, PSNR 16.00 dB, (d) $d = 16$ y $c = 8$, PSNR 10.00 dB.	41
Figura 21	Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. TAFM	42
Figura 22	Reconstrucciones obtenidas usando las aperturas codificadas booleanas óptimas y el Algoritmo TAFM. (a) Imagen original, (b) $d = 4$ y $c = 2$, PSNR 21.92 dB, (c) $d = 8$ y $c = 4$, PSNR 16.00 dB, (d) $d = 16$ y $c = 8$, PSNR 10.02 dB,	43
Figura 23	Reconstrucciones obtenidas usando la apertura codificada booleana óptima con $d = 4$ y $c = 2$ usando los Algoritmos. (a) Imagen original, (b) RWFM 24 dB, (c) TAFM 21.21 dB, (d) TWFM 5 dB	43

RESUMEN

TÍTULO: Algoritmo para el diseño y optimización de códigos de aperturas booleanas para un sistema codificado de patrones de difracción de rayos X de bajo costo.¹

AUTOR: Jhon James Angarita Pallares²

PALABRAS CLAVE: Códigos de apertura, recuperación de la fase, difracción, cristalografía, rayos X.

DESCRIPCIÓN:

La recuperación de la fase es un problema presente en muchas aplicaciones como óptica, imágenes astronómicas, biología computacional y cristalografía de rayos X. Este último es el objeto de estudio de este proyecto. La cristalografía de rayos X es una técnica experimental utilizada en el análisis de materiales, que permite medir las posiciones atómicas de los elementos presentes en un cristal. Esta técnica se basa en los patrones de difracción de rayos X, que proporcionan propiedades electrónicas y elásticas del cristal de interés. De este modo, el cristal se puede identificar de forma única mediante la fase de sus patrones de difracción que también se utilizan para analizar el material de interés. La fase de los haces difractados no puede ser medida directamente por el detector, sin embargo, puede recuperarse de la intensidad de los patrones de difracción. Adicionalmente, trabajos recientes de investigación prueban que incluyendo un elemento óptico llamado apertura codificada en la arquitectura tradicional de adquisición de los datos, se puede recuperar la fase de una señal de manera más eficiente. Sin embargo, una implementación real de los códigos de aperturas del estado del arte no es viable, ya que requiere cambiar la fase de los haces difractados. Por tanto, este proyecto propone usar los diseños de aperturas codificadas tradicionales de paso y bloqueo también conocidos como booleanas, que en la práctica se han utilizado en diferentes implementaciones reales de rayos X. Además, este trabajo determina las características de diseño óptimas para las aperturas codificadas booleanas. Por otro lado, este trabajo desarrolla un algoritmo para construir las aperturas booleanas óptimas. Asimismo, simulaciones numéricas sugieren que los códigos de aperturas booleanos óptimos propuestos exhiben un rendimiento más alto en la recuperación de la fase en comparación con un conjunto aperturas codificadas aleatorio no diseñado.

¹Trabajo de Investigación

²Facultad de Ingenierías Físicomecánica. Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones

ABSTRACT

TITLE: Design and optimization algorithm of Boolean coded apertures to a low cost coded X-ray diffraction patterns system.³

AUTHOR: Jhon James Angarita Pallares.⁴

KEYWORDS: X-ray coded apertures, X-ray imaging, Diffraction .

DESCRIPTION:

The phase retrieval is a problem present in many applications such as optics, astronomical imaging, computational biology and X-ray crystallography, the latter one is the object of study of this project. X-ray crystallography is an experimental technique used in material analysis that allows to measure the atomic positions of the elements present in a crystal. This technique is based on the X-ray diffraction patterns that provide electronic and elastic properties of the crystal of interest. Thus, the crystal can be uniquely identified by means of the phase of its diffraction patterns that are also used to analyze the material of interest. The phase of the X-ray cannot be directly measured; however, it can be recovered from the intensity of diffraction patterns. In addition, a recent research shows that by including an optical element called an coded aperture in the traditional data acquisition architecture, the signal phase can be more efficiently recovered. However, a real implementation of the state of art coded apertures are not feasible, since it requires changing the phase of the diffracted beams. Therefore, this project proposes to use the traditional block-unblock coded aperture designs also know as boolean, which in practice they have been used in different real X-ray implementations. Further, this work determines the optimal design characteristics for the block-unblock coded apertures and we develop an algorithm to construct them. Moreover, numerical simulations suggest that the proposed optimal Boolean coded apertures exhibit a higher performance to retrieve the phase in comparison with a random non-designed coded apertures set.

³Research Work

⁴Facultad de Ingenierías Físicomecánica. Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones

INTRODUCCIÓN

La cristalografía de rayos X es una técnica que permite determinar la posición atómica de un cristal en el espacio tridimensional usando la fase de los patrones de difracción muestreados ópticamente [1]. Este modelo 3D del cristal, permite el desarrollo de nuevos materiales y diseño de nuevos medicamentos [24, 11, 9]. Las intensidades de las reflexiones en los patrones de difracción se miden mediante un sensor óptico. Sin embargo, estos sensores ópticos que se utilizan para medir la intensidad de la reflexión de los haces difractados no están diseñados para medir la fase de dichos patrones de difracción [6]. Es así, que esto abre paso al diseño de algoritmos para recuperar la fase de la señal, con el fin de construir un modelo 3D de la estructura molecular del cristal bajo estudio.

Un trabajo reciente ha demostrado que se puede recuperar la fase de manera mas eficiente cuando en la arquitectura se incluye un elemento óptico conocido como código de apertura, el cual modula la señal antes de ser difractada, tal que la señal es recuperada a partir de los patrones codificados de difracción [6]. La señal se modula cambiando su fase o bloqueando algunos haces difractados. La selección de haces modulados se realiza convencionalmente de una manera aleatoria. El porcentaje de rayos X difractados que pasan a través de la apertura codificada se conoce como transmitancia [14]. Este tipo de modulación, antes de ser difractada, puede obtenerse mediante el uso de códigos de apertura de fase, justo en frente de la muestra en estudio como se ilustra en la Figura 1.

En la actualidad existen diversos métodos que permiten recuperar la fase a partir de los patrones codificados de difracción de rayos X aplicando técnicas como programación convexa, como *PhaseLift* [6], resolviendo un problema de optimización inspirado en la literatura reciente sobre completación de matrices [5], formulaciones no convexas mediante el algoritmo Wirtinger Flow (WF) [8] y el método Truncated Wirtinger Flow (TWF) [10]. Estas técnicas han propuesto diferentes diseños de códigos de apertura que mejoran la calidad de la recuperación de la fase. Sin embargo, su implementación física en arquitecturas reales es altamente costosa, ya que requiere el uso de un material que cambie la fase de los haces difractados, dado que sus elementos son modelados con entradas complejas. En contraste, este proyecto propone usar los diseños de aperturas codificadas tradicionales de paso y bloqueo, también conocidos como códigos de aperturas booleanas, que permiten la recuperación de

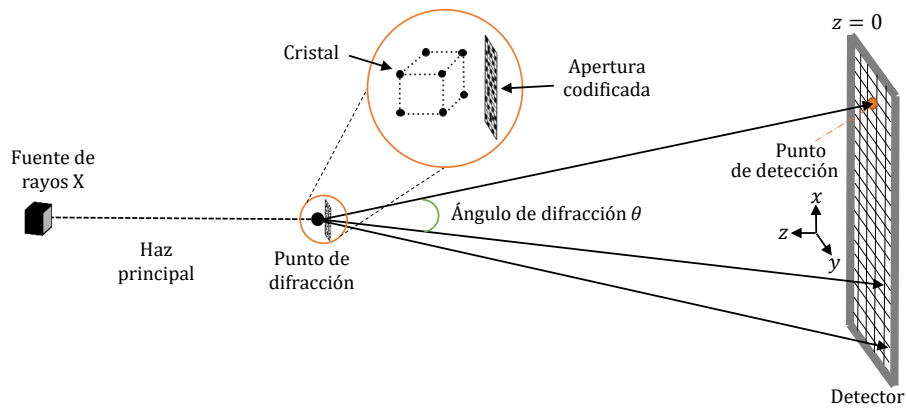


Figura 1: Representación esquemática de un sistema de patrones de difracción codificados teórico. Note que, la apertura codificada se coloca en frente de la muestra.

fase de patrones de difracción de rayos X codificados, y su modulación en la señal consiste sólo en permitir que pasen unos pocos haces difractados. Siendo su construcción física factible y posible de utilizar en un sistema de patrón de difracción codificado real. Además, este trabajo determina las características de diseño óptimas para las aperturas codificadas booleanas. Por otro lado, este trabajo desarrolla un algoritmo para construir las aperturas booleanas óptimas. Adicionalmente, se desarrollaron modificaciones a los algoritmos Truncated Wirtinger Flow (TWF), Reshaped Wirtinger Flow (RWF) y Truncated Amplituded Flow (TAF) con el fin de recuperar la fase de los patrones de difracción codificados.

Capítulo 1

CONCEPTOS Y ESTADO DEL ARTE

El principal objetivo de este capítulo consiste en presentar algunos conceptos necesarios para el desarrollo de este trabajo, como el de difracción y su respectivo modelado matemático y la técnica de cristalografía de rayos X. Por otro lado, se expone la relación del problema de la recuperación de la fase con cristalografía de rayos X. Además, se discuten algunos algoritmos que existen en el estado del arte que permiten la recuperación de la fase.

1.1 DIFRACCIÓN

Para una onda plana incidente sobre una apertura o una pantalla de difracción, es decir, una pantalla opaca con algunas aperturas que permiten que pase la luz, se desea encontrar la distribución de campo que sale de la apertura o del campo difractado. Para abordar el problema de difracción, se encuentra la solución de la ecuación de onda escalar bajo alguna condición inicial [21]. Supongamos que la apertura está representada por una transparencia con una amplitud, a menudo denominada función de transparencia [16], dada por $t(x, y)$, situada en el plano $z = 0$ como se muestra en la Figura 2.

Suponga una onda plana $A \exp(j\omega_0 t)$, de amplitud compleja A y frecuencia angu-

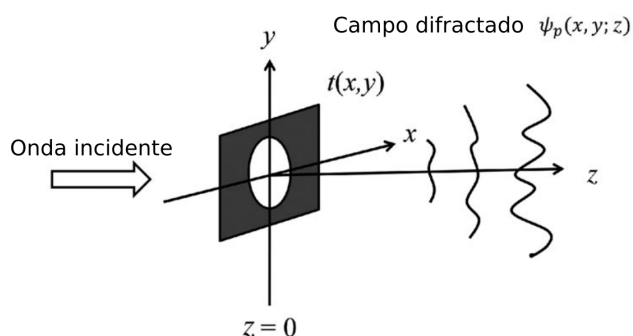


Figura 2: Geometría de difracción: $t(x, y)$ es una pantalla de difracción. (Fuente: [21])

lar ω_0 , que incide en la apertura $t(x, y)$. La distribución de campo inmediatamente después de la apertura es $\Psi(x, y, z = 0, t) = At(x, y) \exp(j\omega_0 t)$ [16]. En general,

$t(x, y)$ es una función compleja que modifica la distribución del campo incidente en la apertura, y se ha supuesto que la transparencia es infinitamente delgada [21]. Para desarrollar $\Psi(x, y, z = 0, t)$ matemáticamente, escribimos

$$\Psi(x, y, z = 0, t) = \Psi_{p0}(x, y) \exp(j\omega_0 t), \quad (1.1)$$

donde $\Psi_{p0}(x, y) = At(x, y)$ es llamada la amplitud compleja en óptica. Esta amplitud compleja es la condición inicial, la cual está dada por la amplitud de la onda plana incidente multiplicada por la función de transparencia de la apertura. Para encontrar la distribución de campo en z lejos de la apertura, se modela la solución como

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi_p(x, y, z) \exp(j\omega_0 t), \quad (1.2)$$

donde $\Psi_p(x, y, z)$ es desconocido. Para encontrar $\Psi_p(x, y, z)$, se sustituye la Ecuación (1.2) en la ecuación de onda tridimensional, para obtener la ecuación de *Helmholtz* para $\Psi_p(x, y, z)$ [21, 16], la cual es dada por

$$\frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial z^2} + k_0^2 \Psi_p = 0. \quad (1.3)$$

donde k_0 se conoce como el *número de onda*. Para lograr resolver la ecuación anterior, se elige utilizar la técnica de la transformación de Fourier. La transformación de Fourier bidimensional de una señal espacial $f(x, y)$ se define como

$$\mathcal{F}\{f(x, y)\} = F(k_x, k_y) = \iint_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{jk_x x + jk_y y} dx dy, \quad (1.4)$$

y la transformación de Fourier inversa es dada por

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(k_x, k_y)\} = f(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} F(k_x, k_y) e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y, \quad (1.5)$$

donde k_x y k_y se denominan frecuencias radiales espaciales ya que tienen unidades de radian por unidad de longitud, y $j = \sqrt{-1}$. Las funciones $f(x, y)$ y $F(k_x, k_y)$ forman un par transformado de Fourier. Así, tomando la transformada de Fourier bidimensional de la Ecuación (1.3) y considerando como condición inicial $\mathcal{F}\{\Psi(x, y, z = 0)\} = \Psi_p(k_x, k_y, z = 0) = \Psi_{p0}(k_x, k_y)$, la solución a la anterior ecuación diferencial está dada por

$$\Psi_p(k_x, k_y, z) = \Psi_{p0}(k_x, k_y) \mathcal{H}(k_x, k_y, z), \quad (1.6)$$

donde $\mathcal{H}(k_x, k_y, z) = e^{-jk_0 \sqrt{(1 - k_x^2/k_0^2 - k_y^2/k_0^2)}z}$ es definida como la función de transferencia de frecuencia espacial de propagación a través de una distancia z [21, 16]. Por lo tanto, la amplitud compleja $\Psi_p(x, y, z)$ viene dada por la transformada de Fourier inversa de la Ecuación (1.6)

$$\begin{aligned} \Psi_p(x, y, z) &= \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_p(k_x, k_y, z)\} = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_{p0}(k_x, k_y) \mathcal{H}(k_x, k_y, z)\} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(k_x, k_y) e^{-jk_0 \sqrt{(1 - k_x^2/k_0^2 - k_y^2/k_0^2)}z} e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y. \end{aligned} \quad (1.7)$$

La ecuación anterior es un resultado muy importante ya que para una distribución de campo dada a lo largo del plano $z = 0$, es decir, $\Psi_{p0}(x, y)$, se puede encontrar la distribución del campo a través de un plano paralelo al plano (x, y) pero a una distancia z de él, calculando la Ecuación (1.7).

Aproximación de Fresnel y Fraunhofer: Cuando las ondas de propagación forman pequeños ángulos, es decir, bajo la denominada aproximación paraxial, $k_x^2 + k_y^2 \ll k_0^2$, se puede concluir que

$$\sqrt{(1 - k_x^2/k_0^2 - k_y^2/k_0^2)} \approx 1 - k_x^2/2k_0^2 - k_y^2/2k_0^2. \quad (1.8)$$

Entonces la Ecuación (1.7) se puede reescribir como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(k_x, k_y) e^{-jk_0z + j(k_x^2 + k_y^2)z/2k_0} e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y, \quad (1.9)$$

la cual puede expresarse de manera compacta como

$$\Psi_p(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_{p0}(k_x, k_y)H(k_x, k_y, z)\}, \quad (1.10)$$

donde $H(k_x, k_y, z) = e^{-jk_0z} e^{j(k_x^2 + k_y^2)z/2k_0}$. Además, $H(k_x, k_y, z)$ se denomina la función de transferencia espacial de frecuencia en la óptica de Fourier [21, 16]. Para encontrar la transformada inversa de la Ecuación (1.9), se puede reexpresar esta ecuación en términos de la amplitud compleja inicial $\Psi_{p0}(x, y)$ como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0z} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{-jk_0/2z[(x-x')^2 + (y-y')^2]} dx' dy', \quad (1.11)$$

la cual puede expresarse como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0z} e^{-\frac{jk_0}{2z}[x^2 + y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{-\frac{jk_0}{2z}[(x')^2 + (y')^2]} e^{\frac{jk_0}{z}(xx' + yy')} dx' dy'. \quad (1.12)$$

La Ecuación (1.12) se denomina fórmula de difracción de Fresnel y describe la difracción de un haz durante la propagación que tiene una amplitud compleja inicial dada por $\Psi_{p0}(x, y)$.

Por otro lado si se considera que $\frac{k_0}{2} [(x')^2 + (y')^2] \ll z$, la Ecuación (1.12) se puede simplificar como sigue

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0z} e^{-\frac{jk_0}{2z}[x^2 + y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z}(xx' + yy')} dx' dy'. \quad (1.13)$$

La Ecuación (1.13) se denomina fórmula de difracción de Fraunhofer y es el caso límite de la difracción de Fresnel [21, 16]. Por lo tanto, la Ecuación (1.13) se denomina aproximación de Fraunhofer o aproximación de campo lejano, ya que la difracción se observa a una distancia lejano.

En resumen, esta sección presento el fenómeno de difracción, y las diferentes aproximaciones en la teoría clásica de la óptica de Fourier. Además, el concepto de campo cercano se da cuando la difracción se observa cerca de una apertura o de un obstáculo y este se denomina diagrama de difracción de Fresnel. Por el contrario, cuando se observa a grandes distancias de la apertura se denomina difracción de Fraunhofer o difracción de campo lejano. Adicionalmente, la aproximación de campo lejano juega un papel fundamental en química, debido a que la amplitud de campo difractado corresponden con los patrones de difracción en cristalografía [24], La cual se explicara en la siguiente sección.

1.2 CRISTALOGRAFÍA

La cristalografía de rayos X es una técnica que permite determinar la disposición de los átomos dentro de un cristal, cuando un haz de rayos X interacciona con éste y se difracta en varias direcciones específicas [12]. A partir de los ángulos e intensidades de estos haces difractados, un cristalógrafo puede producir una imagen tridimensional de la densidad de electrones [24]. De esta densidad de electrones se pueden determinar las posiciones medias de los átomos en el cristal, así como sus enlaces químicos [9], siendo fundamental en la creación de nuevos materiales, dado que pueden formar cristales [9] - tales como sales, metales, minerales, semiconductores, así como diversas moléculas inorgánicas, orgánicas y biológicas. Además, la cristalografía de rayos X ha sido fundamental en el desarrollo de otras áreas científicas tal como el diseño de nuevos medicamentos [9]. Por tanto, la cristalografía de rayos X sigue siendo el principal método para la caracterización de la estructura atómica de nuevos materiales y sistemas con muchas similitudes ante la evidencia de otras espectroscopías [14, 4]. La estructura de materiales analizada por rayos X también puede dar cuenta de las propiedades electrónicas o elásticas inusuales de un material, dar información sobre las interacciones y los procesos químicos, o servir como base para el diseño de fármacos contra enfermedades.

Por otro lado, la cristalografía de rayos X está relacionada con otros métodos para la determinación de estructuras atómicas [19]. Patrones de difracción similares pueden ser producidos por la dispersión de electrones o neutrones, que son interpretados mediante la transformación de Fourier [2, 19]. Si no se pueden obtener monocristales de tamaño suficiente, otros métodos de rayos X se pueden aplicar para obtener una información menos detallada; tales métodos incluyen la difracción de fibra, difracción de polvo y de dispersión de rayos X de bajo ángulo (SAXS) [2]. Si el material investigado sólo está disponible en forma de polvos nanocristalinos o posee pobre cristalinidad, se pueden aplicar los métodos de cristalografía de electrones para la determinación de la estructura atómica.

La Figura 3 ilustra el proceso de captura de los patrones de difracción en cristalografía de rayos X. En una medición de cristalografía de rayos X, un cristal está montado sobre un goniómetro y se hace girar gradualmente mientras que es bombardeado con rayos X, de esta forma se produce un patrón de difracción de puntos regularmente espaciados [2]. Las imágenes bidimensionales tomadas en diferentes rotaciones se convierten en un modelo tridimensional de la densidad de electrones

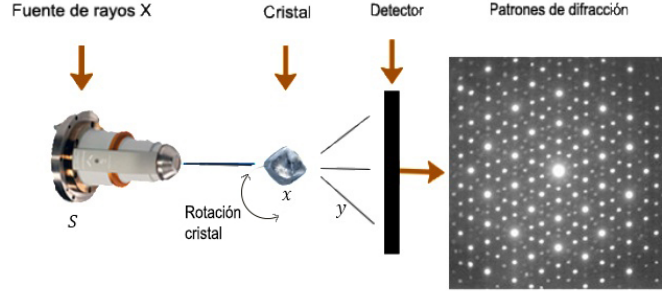


Figura 3: Configuración ilustrativa para adquirir los patrones de difracción.

dentro del cristal. Dado que, en general los sensores ópticos solo pueden medir las intensidades de los patrones de difracción, la amplitud del campo difractado en la zona del detector, de acuerdo a la Figura 3, y la formula de difracción de Fraunhofer en la Ecuación (1.13), está dada por

$$\begin{aligned}
 |\Psi_p(x, y, z)|^2 &= \left| \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0 z} e^{\frac{-jk_0}{2z}[x^2+y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z}(xx'+yy')} dx' dy' \right|^2 \\
 &= \frac{k_0}{2\pi z} \left| \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z}(xx'+yy')} dx' dy' \right|^2 \\
 &= \frac{k_0}{2\pi z} |\mathcal{F}\{\Psi_{p0}(x, y)\}|^2 \\
 &\propto |\mathcal{F}\{\Psi_{p0}(x, y)\}|^2.
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

Por otro lado, dado que el detector es un arreglo bidimensional finito de pixeles, se hace necesario obtener una versión discreta de la amplitud del campo difractado de la Ecuación (1.14). El modelo discreto se presenta en la subsección 1.2.1.

1.2.1 Modelo discreto

Esta subsección presenta la amplitud del campo difractado capturado por un arreglo bidimensional finito de pixeles el cual se ilustra en la Figura 4. Suponga que el pitch del detector en sus correspondientes direcciones, está dado por $\Delta\xi$ y $\Delta\eta$. Además, suponga que el número de pixeles en sus correspondientes direcciones es M y N . Así, los periodos de muestreo espaciales están dados por $\Delta x = z\lambda/(M\Delta\xi)$ y $\Delta y = z\lambda/(N\Delta\eta)$, donde λ es la longitud de onda de la fuente. Así, la versión discreta de la Ecuación (1.14) se expresa como

$$|\Psi_p(m\Delta x, n\Delta y, z)|^2 \propto \left| \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=1}^{N-1} \Psi_{p0}(k\Delta x, l\Delta y) e^{-2j\pi\left(\frac{km}{M} + \frac{ln}{N}\right)} \right|^2, \tag{1.15}$$

donde la doble sumatoria representa la transformación discreta de Fourier y $m = 0, \dots, M-1, n = 0, \dots, N-1$. Al definir las matrices $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{M \times N}$ y $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ como

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}[m, n] &= \Psi_{p0}(m\Delta x, n\Delta y) \\
 \mathbf{Y}[m, n] &= |\Psi_p(m\Delta x, n\Delta y, z)|^2,
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

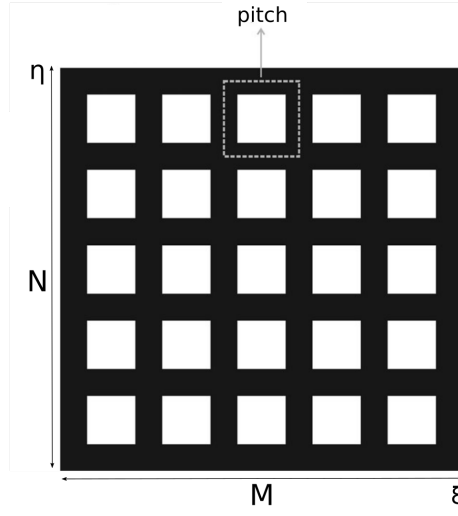


Figura 4: Estructura esquemática de un sensor de imagen CCD/CMOS. (Tomada de [21])

entonces la Ecuación (1.15) puede reescribirse como

$$\mathbf{Y} \propto |\text{DFT}_{2D}(\mathbf{X})|^2, \quad (1.17)$$

donde la función $|\cdot|$ se aplica en cada componente de la matriz \mathbf{X} y $\text{DFT}_{2D}(\cdot)$ es la transformación bidimensional discreta de Fourier. Note que la Ecuación (1.17) puede aproximarse como

$$\bar{\mathbf{y}} \approx |\mathbf{F}\bar{\mathbf{x}}|^2, \quad (1.18)$$

donde $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{MN \times MN}$ es la matriz de la transformación discreta de Fourier, $\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^{MN}$ y $\bar{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{MN}$ representan las versiones vectorizadas de las matrices \mathbf{X} y \mathbf{Y} respectivamente. Por otra parte, la Ecuación (1.18) se conoce como el problema de recuperación de la fase, dado que solo se captura la amplitud del campo difractado.

1.3 ALGORITMOS DE RECUPERACIÓN DE LA FASE

Esta sección introducirá algunos algoritmos del estado del arte que estudian el problema de la recuperación de la fase de los haces difractados.

PhaseLift: En el problema de recuperación de la fase, de acuerdo a la Ecuación (1.18), se tiene una señal discreta $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ y se miden proyecciones de la forma $y_k = |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2$, donde $\mathbf{a}_k \in \mathbb{C}^n$ son vectores de muestreo de sinusoidales complejas, comúnmente encontradas en cristalografía de rayos X [3]. Sin embargo, debido a las limitaciones de los detectores, solo se puede observar la magnitud de estas proyecciones. Para solucionar el problema de recuperación de la fase, se desea encontrar $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ a través de algoritmos de programación convexa sujetos a la siguiente restricción

$$\text{Tr}(\mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^H \mathbf{x} \mathbf{x}^H) = y_k, k = 1, \dots, m, \quad (1.19)$$

donde $Tr(\cdot)$ es la función que calcula la traza de una matriz y \mathbf{x}^H representa el vector conjugado transpuesto de \mathbf{x} . Si se quiere plantear la recuperación de \mathbf{x} en dos dimensiones, se introduce la matriz Hermitiana $\mathbf{X} \in \mathbb{S}^{n \times n}$ ($\mathbb{S}^{n \times n}$ es el conjunto de las matrices simétricas positivas semidefinidas), donde el problema de fase en 2D es equivalente a encontrar \mathbf{X} tal que:

$$\mathbf{X} \succeq 0, \text{rank}(\mathbf{X}) = 1, Tr(\mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^H \mathbf{x} \mathbf{x}^H) = y_k, \text{ para } k = 1, \dots, m, \quad (1.20)$$

donde $\mathbf{X} \succeq 0$ significa que \mathbf{X} es positiva semidefinida. Aunque este problema no es tratable computacionalmente, si se ignora la restricción del rango de la matriz, se puede relajar el problema a

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\mathbf{X} \in \mathbb{S}^{n \times n}} Tr(\mathbf{X}) \\ \text{Sujeto a } & \mathbf{X} \succeq 0 \\ & Tr(\mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^H \mathbf{x} \mathbf{x}^H) = y_k, k = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Este problema de optimización se puede solucionar a través de un programa semidefinido propuesto recientemente con el nombre de *PhaseLift* [7]. Si la solución a este problema es de rango-1 y es igual a $\mathbf{x} \mathbf{x}^H$, entonces a través de *PhaseLift* la factorización es posible recuperar, al igual que su fase.

Algoritmo Truncated Wirtinger Flow (TWF): El algoritmo *Truncated Wirtinger Flow* propuesto en [10], permite resolver el problema de la recuperación de fase. Este algoritmo resuelve las ecuaciones cuadráticas de la forma

$$\mathbf{y}_k = |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2, k = 1, \dots, n, \quad (1.22)$$

donde los vectores de muestreo \mathbf{a}_k se distribuyen normalmente, es decir, $\mathbf{a}_k \sim \mathcal{CN}(0, \mathbf{I}) = \mathcal{N}(0, \frac{1}{2}\mathbf{I}) + j\mathcal{N}(0, \frac{1}{2}\mathbf{I}), \forall k = 1, \dots, n$ [10].

Por otra parte, las muestras adquiridas casi siempre están corrompidas por cierta cantidad de ruido, concretamente,

$$\mathbf{y}_i \approx |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2, k = 1, \dots, n. \quad (1.23)$$

Por ejemplo, en aplicaciones de imágenes, los datos son mejor modelados por variables aleatorias de Poisson,

$$\mathbf{y}_i \sim Poisson(|\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2), k = 1, \dots, n, \quad (1.24)$$

que captura la variación en el número de fotones detectados por un sensor. Asumiendo muestras independientes, lo primero a hacer es buscar la máxima estimación likelihood (MLE):

$$l(x; y_k) = y_k \log(|\mathbf{a}_k^* \mathbf{x}|^2) - |\mathbf{a}_k^* \mathbf{x}|^2 \quad (1.25)$$

donde $l(\mathbf{x}; y_i)$ representa el logaritmo de la función likelihood de una solución \mathbf{x} dado los resultados y_k . La Ecuación (1.25) puede se puede expresar como

$$\text{minimize}_x - \sum_{k=1}^n l(\mathbf{x}; y_k) \quad (1.26)$$

Sin embargo, la Ecuación 1.26 es en general intratable, ya que $l(\mathbf{x}; y_k)$ no es cóncavo en \mathbf{x} . Pero, bajo sistemas aleatorios no estructurados, el problema de optimización esta mejor condicionado, y se puede resolver mediante programas convexos convenientes con garantías estadísticas óptimas. El paradigma básico es elevar el problema de restricción cuadrática a un problema de restricción lineal introduciendo una variable de matriz $\mathbf{X} = \mathbf{x}\mathbf{x}^*$ y relajar la restricción de primer rango. Por tanto, este problema de optimización se puede solucionar a través del algoritmo *Truncated Wirtinger Flow* (TWF).

Algoritmo Reshaped Wirtinger Flow (RWF): En aplicaciones de recuperación de la fase, como cristalografía de rayos X, ya mencionado anteriormente, la estructura del objeto puede ser recuperado a partir de las mediciones de la intensidad del campo difractado, cuando el objeto es iluminado por una fuente de rayos X. Es así, que muchos problemas en procesamiento de señales pueden ser reducidos a un sistema de ecuaciones cuadráticas. El algoritmo *Reshaped Wirtinger Flow* propuesto en [18], estudia el problema de la recuperación de la fase, donde resuelve un sistema de ecuaciones cuadráticas, con fin de recuperar el vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ a partir de las mediciones de la magnitud, con la forma,

$$y_i = |\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{x} \rangle|, 1 \leq i \leq m \quad (1.27)$$

donde $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n / \mathbb{C}^n$ son vectores conocidos que comúnmente son diseñados aleatoriamente, generados de forma independiente por una distribución Gaussiana, es decir, $\tilde{\mathbf{a}}_i \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{n \times n})$.

Además, el algoritmo *Reshaped Wirtinger Flow* (RWF) adopta la siguiente función de pérdida

$$l(\mathbf{x}) =: \frac{1}{2n} \sum_{k=1}^n (|\mathbf{a}_k^T \mathbf{x}| - y_i)^2 \quad (1.28)$$

donde desarrolla una pendiente descendente, que establece cero para el componente "gradiente" que corresponde a muestras no suaves, junto con una inicialización utilizando un método espectral. La curvatura de la función de pérdida $l(\mathbf{x})$ se comporta de manera similar a la de una función de pérdida de mínimos cuadrados en la vecindad de los óptimos globales, y por lo tanto, la RWF converge rápidamente.

Algoritmo Truncated Amplituded Flow (TAF): El algoritmo *Truncated Amplituded Flow* propuesto en [15], explica como recuperar un vector \mathbf{x} desconocido a partir de una ecuación cuadrática de la forma,

$$\mathbf{y}_k = |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2, \quad 1 \leq i \leq m \quad (1.29)$$

donde el vector de datos $\mathbf{y}_k := [y_1 \dots y_m]^T$ y el vector característico $\mathbf{a}_k \in \mathbb{R}^n$ o \mathbb{C}^n son conocidos, mientras el vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ o \mathbb{C}^n es desconocido. Los vectores de muestreo \mathbf{a}_k usan el modelo gaussiano de valor complejo con $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$, es decir, $\mathbf{a}_k \sim \mathcal{CN}(0, \mathbf{I}) = \mathcal{N}(0, \frac{1}{2}\mathbf{I}) + j\mathcal{N}(0, \frac{1}{2}\mathbf{I}), \forall k = 1, \dots, n$ [15]. Asumiendo que el sistema de ecuaciones cuadráticas en (1.29) admite una única solución para el vector \mathbf{x} ,

entonces el objetivo principal es reconstruir \mathbf{x} a partir de las m ecuaciones cuadráticas, o lo que es equivalente, a recuperar la señal faltante de $\{\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{x} \rangle\}_{i=1}^m$ bajo una configuración de valores reales/complejos. Por tanto, el algoritmo *Truncated Amplitude Flow* (TAF) adopta el criterio de mínimos cuadrados, con el objetivo principal de recuperar \mathbf{x} a partir de los datos y_i adquiridos, las cuales en un caso más realista están corrompidas por el ruido blanco gaussiano aditivo (AWGN) por sus siglas en inglés. Por lo cual, es formulada como la de minimización de la pérdida empírica basada en la intensidad

$$\text{minimize } f(\mathbf{x}) =: \frac{1}{2n} \sum_{k=1}^n (y_i - |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2)^2 \quad (1.30)$$

con el fin de simplificar el problema en la ecuación (1.30) y hacerlo menos complejo computacionalmente, se considera una función de costo basada en la amplitud, en la que $\psi_i = \{\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{x} \rangle\}$ se observa en lugar de y_i en AWGN

$$\text{minimize } h(\mathbf{x}) =: \frac{1}{2n} \sum_{k=1}^n (\psi_i - |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|)^2 \quad (1.31)$$

En la recuperación de fase clásica discreta unidimensional (1D), el vector de amplitud $\psi = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m]^T$ corresponde a la transformada de Fourier de la señal n -dimensional \mathbf{x} . En general, no hay una solución única para la recuperación de fase 1D.

Capítulo 2

SISTEMA CODIFICADO DE PATRONES DE DIFRACCIÓN

En este capítulo se presenta una breve descripción de las aperturas codificadas *octanary* y sus principales desventajas. Además, se introduce las aperturas codificadas Booleanas y los diferentes diseños que existen en el estado del arte. Por otra parte, se describe la arquitectura para la captura de patrones codificados de difracción, la cual hace uso del método *Detour-phase* para determinar el diseño óptimo de las aperturas codificadas.

2.1 APERTURA CODIFICADA OCTANARY

Una apertura codificada *octanary* consta de elementos que modifican la fase de los rayos X difractados. La principal desventaja de los diseños *octanary* es que su implementación física en una arquitectura de rayos X real es impráctica, ya que requiere cambiar la fase de un haz difractado, y encontrar un material que permita estos cambios es muy costoso. La Figura 5 ilustra un ejemplo de un código de apertura *octanary*.

Por el contrario, las aperturas codificadas de paso y bloqueo, presentadas en este

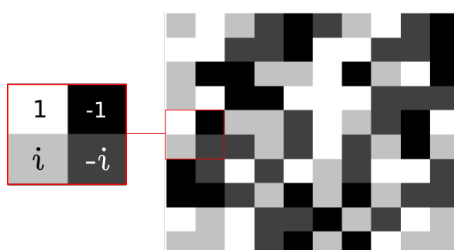


Figura 5: Apertura codificada *Octanary*. Los elementos $\{-1, 1, i, -i\}$ modifican la fase de los haces de rayos X difractados.

trabajo, conocidas como aperturas codificadas Booleanas, pueden ser fácilmente implementadas en aplicaciones de difracción de rayos X [20, 17]. Además, los elementos de bloqueo de estas aperturas codificadas se pueden fabricar usando tungsteno, ya que este material puede detener un haz de difracción de rayos X, lo que resulta en bajos costos de fabricación.

Con el fin de acercarse a una posible implementación real de un sistema de patrones de difracción codificados con aperturas codificadas Booleanas, la siguiente sección introduce las aperturas codificadas Booleanas que se han usado en el estado del arte para la recuperación de la fase.

2.2 APERTURAS CODIFICADAS BOOLEANAS DEL ESTADO DEL ARTE

Los códigos de aperturas booleanas teóricamente son diseñados como una matriz $\mathbf{D} \in \{0, 1\}^{n \times n}$, donde $(\mathbf{D})_{k,j} = 1$ representa un elemento transmisivo, y $(\mathbf{D})_{k,j} = 0$ representa un elemento de bloqueo. Estos códigos permiten recuperar la fase, y, a diferencia de las aperturas codificadas *octanary*, estos pueden ser fácilmente fabricados para ser usados en sistemas de patrones de difracción reales. La calidad de la señal reconstruida depende de la selección correcta del valor de transmitancia (t_r) que se calcula como

$$t_r = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n (\mathbf{D})_{k,j}. \quad (2.1)$$

Por ejemplo, $t_r = 0.3$ significa que 30% de los elementos de la apertura codificada son transmisivos y el 70% restante son de bloqueo.

En el estado del arte existen un variedad de diseños de códigos de aperturas booleanas, en donde la forma en que las entradas se distribuyen en el patrón determina el tipo de apertura codificada.

Aperturas codificadas aleatorias no diseñadas: Las entradas de este tipo de apertura codificada pueden ser modeladas como una variable aleatoria de Bernoulli con el parámetro t_r , es decir, $(\mathbf{D})_{k,j}$, donde $\mathbf{D} \in \{0, 1\}^{n \times n}$. Para visualizar la matriz \mathbf{D} , considere una apertura codificada con resolución espacial $n = 25$. La Figura 6 muestra un ejemplo de dos aperturas codificadas aleatorias no diseñadas con transmitancias de $t_r = 0.1$ y $t_r = 0.7$, respectivamente.

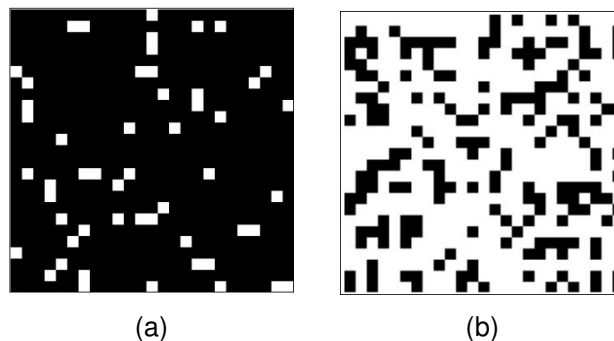


Figura 6: Ejemplo de aperturas codificadas aleatorias no diseñadas con diferentes transmitancias. (A) $t_r = 0.1$, (b) $t_r = 0.7$. Los píxeles blancos y negros representan los elementos transmisivos y de bloqueo, respectivamente.

Aperturas codificadas Hadamard: Una matriz de Hadamard exhibe dos características principales: sus entradas son 1 o -1 , y sus columnas son ortogonales [4]. Un caso especial de este tipo de matrices se obtiene reemplazando los elementos -1 por valores cero. Estas estructuras se pueden utilizar para generar las aperturas codificadas Booleanas Hadamard en las cuales los elementos -1 se substituyen por 0. La transformación cambia la condición de la ortogonalidad pero mantiene la estructura espacial, donde la transmitancia calculada con la Ecuación (2.1) es aproximadamente igual a 0.5, debido a su característica ortogonal. La Figura 7 muestra dos realizaciones de este tipo de aperturas codificadas con transmitancias $t_r = 0.3$ y $t_r = 0.5$, respectivamente.

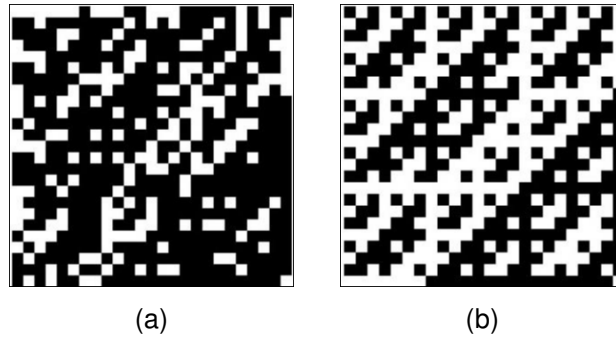


Figura 7: Ejemplo de aperturas codificadas Hadamard con transmitancias (a) $t_r = 0.3$ y (b) $t_r = 0.5$.

Aperturas codificadas uniformes: Las aperturas codificadas aleatorias no diseñadas tienden a formar agrupaciones como se ilustra en la Figura 8(a). Específicamente, las zonas encerradas en rojo de la apertura codificada de la Figura. 8(a) contienen una alta densidad de elementos distintos de cero, mientras que las áreas amarillas contienen clústers de ceros. Las aperturas codificadas uniformes se han utilizado recientemente en la formación de imágenes espectrales con el fin de reducir los conglomerados y lograr una detección uniforme [13]. Específicamente, estas aperturas codificadas emplean conceptos de ruido azul de [22]. La Figura 8(b) muestra una apertura codificada uniforme cuando se utiliza la síntesis de patrón de ruido azul.

Sea $\mathbf{A} = \{\mathbf{D}_l | 1 \leq l \leq L\}$ un conjunto de aperturas codificadas uniformes, donde L es el número de proyecciones requeridas. La transmitancia de cada apertura codificada uniforme \mathbf{D}_l se calcula como $t_r = 1/L$ y el conjunto completo satisface la restricción dada por

$$\sum_{l=1}^L \mathbf{D}_l = \mathbf{1}, \quad (2.2)$$

donde $\mathbf{1}$ es una matriz $n \times n$ con todos los elementos iguales a 1.

Aperturas codificadas basadas en la DFT: Sea $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ la matriz de la transformación discreta de Fourier. $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $\mathbf{B} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la componente real y

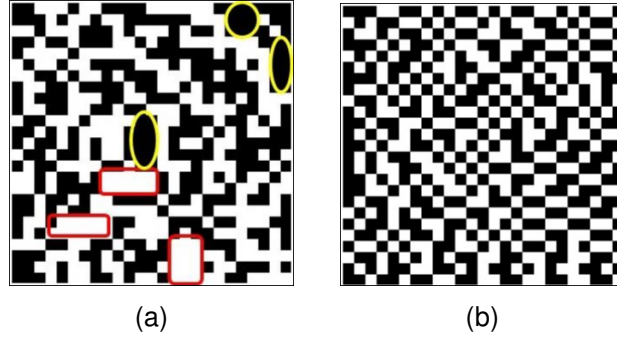


Figura 8: (a) Apertura codificada aleatoria (b) Apertura codificada con patrón de ruido azul, denominada apertura codificada uniforme, que reduce los clusters. La transmitancia en (a) y (b) es 0.5.

compleja de \mathbf{F} respectivamente, *i.e.* $\mathbf{F} = \mathbf{A} + i\mathbf{B}$.

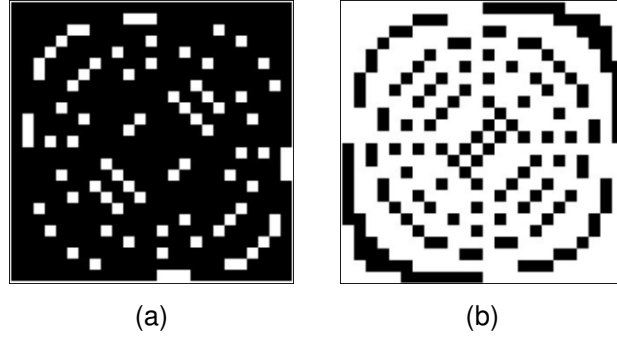


Figura 9: Ejemplo de apertura codificada basada en DFT para transmitancias (a) $t_r = 0.1$, (b) $t_r = 0.7$.

La fase $\theta \in [0, 1]^{n \times n}$ de la matriz \mathbf{F} es dada por

$$(\theta)_{k,j} = \frac{\left(\tan^{-1} \left(\frac{(\mathbf{A})_{k,j}}{(\mathbf{B})_{k,j}} \right) + \pi \right)}{2\pi}. \quad (2.3)$$

Una apertura codificada con DFT es una matriz $\mathbf{D} \in \{0, 1\}^{n \times n}$ cuyas entradas se distribuyen con una variable aleatoria de Bernoulli basada en la fase θ de la matriz \mathbf{F} , dada una transmitancia deseada t_r , *i.e.*, $(\mathbf{D})_{k,j} = 1$ if $(\theta)_{k,j} \leq t_r$ y $(\theta)_{k,j} = 0$, en otro caso. La Figura 9 muestra estos dos ejemplos de aperturas codificadas DFT con valores de transmitancia $t_r = 0.1$ y $t_r = 0.7$, respectivamente.

2.3 PATRONES DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X CODIFICADOS

Esta sección describe una arquitectura para la captura de patrones codificados de difracción, la cual incluye un elemento óptico conocido como apertura codificada. Además, se modela de manera teórica la captura de los patrones codificados de difracción.

La Figura 10 muestra un diagrama de un sistema de patrones de difracción codificados. Los elementos principales del sistema son la fuente de rayos X , la apertura codificada $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ y el detector bidimensional $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. En particular, la muestra se ilumina utilizando una fuente de rayos X que conduce a los patrones de difracción $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. La apertura codificada \mathbf{D} modula la señal \mathbf{X} obteniendo la señal codificada $\mathbf{D} \cdot \mathbf{X}$, donde \cdot representa el producto Hadamard. Finalmente, la intensidad en el dominio de Fourier de los patrones de difracción codificados se mide en el detector la cual es representada por la matriz \mathbf{Y} . Específicamente, las mediciones del detector considerando la Ecuación (1.17) están dadas por

$$\bar{\mathbf{y}} = |\mathbf{F}\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{x}}|^2, \quad (2.4)$$

donde $\bar{\mathbf{D}} \in \mathbb{C}^{n^2 \times n^2}$ es una matriz diagonal, cuya diagonal es la vectorización de la matriz \mathbf{D} , $\bar{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{n^2}$ y $\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^{n^2}$ son las vectorizaciones de las matrices \mathbf{Y} y \mathbf{X} respectivamente.

Observe que los patrones de difracción codificados en la Ecuación (2.4) pueden

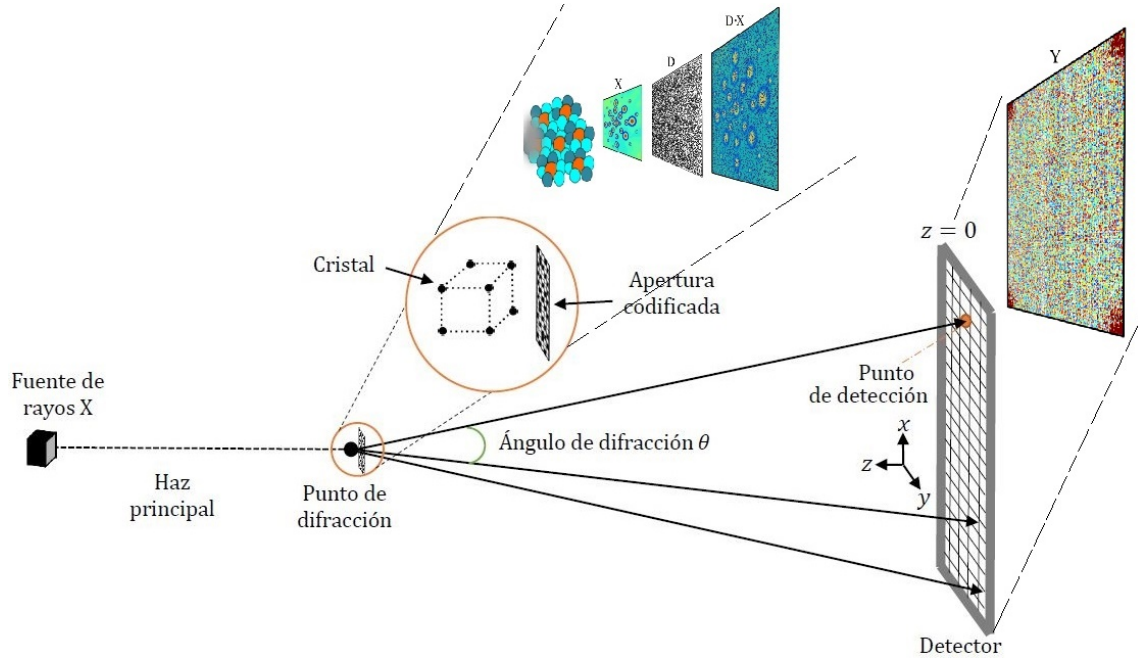


Figura 10: Sistema de patrones codificados de difracción. La apertura codificada $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ modula la señal \mathbf{X} , donde, al ser iluminada con la fuente de rayos X se obtienen los patrones codificados de difracción $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, los cuales son capturados en el detector.

considerarse como una única proyección. El sistema de patrones codificados de difracción en la Figura 10 permite obtener varias proyecciones cambiando la apertura codificada. Así, sea L el número de proyecciones, y \mathbf{D}_l sea una apertura codificada diferente correspondiente a cada proyección. Entonces, la Ecuación (2.4), incluyendo la apertura codificada especificada \mathbf{D}_l , puede ser reescrita como

$$\bar{\mathbf{y}}_l = |\mathbf{F}\mathbf{D}_l\bar{\mathbf{x}}|^2, l = 1, \dots, L. \quad (2.5)$$

Así, de la ecuación 2.5 el sistema de capturas de patrones de difracción codificados ilustrado en la Figura 10, es multicaptura.

2.3.1 Limitaciones del modelo de codificación teórica

En la Ecuación (2.5) se introdujo el modelo teórico de los patrones codificados de difracción. Note que de acuerdo a la Figura 10, la apertura codificada D debe introducirse al frente del cristal. El hecho de que la apertura codificada está situada en frente de la muestra limita su implementación real, principalmente por las dimensiones del cristal, ya que de manera común la muestra es de tamaño 0.43 nm. Por tanto, con el fin de aumentar el tamaño de la apertura codificada para una posible implementación real, se debe alejar la apertura codificada de la muestra una distancia S del punto de difracción, como se ilustra en la Figura 11. Teniendo en cuenta el problema del tamaño de la apertura codificada, la siguiente sección determina una apertura codificada P , conocida como apertura codificada de fase, equivalente a D en la Ecuación (2.5), la cual está posicionada a una distancia S del objeto de tal manera que la dimensión de la apertura P sea físicamente implementable.

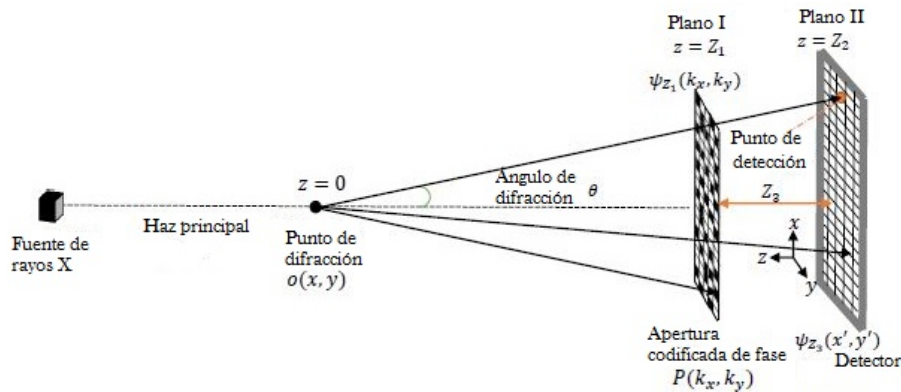


Figura 11: Representación esquemática de un sistema de patrones de difracción codificados. Observe que se introduce una apertura codificada entre el punto difractado y el detector con el fin de modular la señal, ya sea bloqueando, desbloqueando o cambiando la fase del haz difractado.

2.4 ESTIMACIÓN DE LA APERTURA DE FASE EQUIVALENTE

Previamente se discutió la problemática que tiene el sistema de patrones de difracción codificados teórico, cuando se introduce la apertura codificada en frente del cristal bajo estudio (ver Figura 10). Por tanto, se desea ubicar la apertura codificada de fase $P(k_x, k_y)$ a una distancia adecuadamente seleccionada de la muestra y el detector, de modo que la dimensión de $P(k_x, k_y)$ se pueda ajustar para implementarse, tal como está ilustrado en la Figura 11. Específicamente, este trabajo elige la distancia $z = Z_1$ para obtener la difracción Fraunhofer del objeto estudiado $o(x, y)$

en el plano I. Entonces, el campo resultante ψ_{Z_1} en el plano I antes de la difracción, considerando la Ecuación (1.13), se puede aproximar como

$$\psi_{Z_1}(k_x, k_y) = \mathcal{F}\{o(x, y)\}P(k_x, k_y), \quad (2.6)$$

Además, el campo resultante en el plano I difracta y es medido en el plano II. Así, la distancia $z = Z_2$ se elige de tal manera que el campo difractado, capturado en el detector en el plano II, pertenece a la zona del espectro angular. Por lo tanto, considerando la Ecuación (2.6) y las condiciones anteriores, el campo difractado ψ_{Z_3} antes de ser capturado en el detector en el sistema de codificación de fase en la Figura 11, es dado por

$$\begin{aligned} \psi_{Z_3}(x', y', z = Z_3) &= \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\psi_{Z_1}(k_x, k_y)\}\mathcal{H}(k_x, k_y; z = Z_3)\} \\ &= \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{H}(k_x, k_y; z = Z_3)\} * \psi_{Z_1}(k_x, k_y), \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde $Z_3 = Z_2 - Z_1$ y * denota la operación de convolución. Note que la Ecuación (2.7) puede reescribirse como

$$\psi_{Z_3}(x', y'; z = S) = \mathcal{W}_1\{o(x, y)\}, \quad (2.8)$$

donde $\mathcal{W}_1\{\cdot\}$ es un operador definido como

$$\mathcal{W}_1\{\cdot\} = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{H}(k_x, k_y; z = Z_3)\} * P(k_x, k_y)\mathcal{F}\{\cdot\}. \quad (2.9)$$

Así, el operador $\mathcal{W}_1\{\cdot\}$ en Ecuación (2.9) calcula el campo difractado $\psi_{Z_3}(x', y'; z = Z_3)$ por la aplicación de la transformación de Fourier sobre la entrada $o(x, y)$, entonces la transformación resultante se multiplica por $P(k_x, k_y)$ y finalmente este producto es convolucionado con la señal $\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{H}(k_x, k_y; z = Z_3)\}$. Por otra parte, considerando las medidas teóricas de patrones de difracción codificados modeladas en Ecuación (2.4), el campo difractado ψ_S antes de ser medido en el detector puede expresarse como

$$\psi_S(x', y'; z = S) = \mathcal{F}\{o(x, y)D(x, y)\} = \mathcal{F}\{D(x, y)\} * \mathcal{F}\{o(x, y)\}, \quad (2.10)$$

usando la propiedad de convolución de la transformada de Fourier. Entonces, a partir de la Ecuación (2.10) el campo ψ_S puede reescribirse como

$$\psi_S(x', y'; z = S) = \mathcal{F}\{D(x, y)\} * K(k_x, k_y)\mathcal{F}\{o(x, y)\}, \quad (2.11)$$

donde $K(k_x, k_y)$ es la única función *i.e.* $K(k_x, k_y) = 1$. Así, análogamente a la Ecuación (2.8) el campo difractado ψ_S puede expresarse como

$$\psi_S(x', y'; z = S) = \mathcal{W}_2\{o(x, y)\}, \quad (2.12)$$

donde $\mathcal{W}_2\{\cdot\}$ es un operador definido como $\mathcal{W}_2\{\cdot\} = \mathcal{F}\{D(x, y)\} * K(k_x, k_y)\mathcal{F}\{\cdot\}$. Note que \mathcal{W}_2 aplica la transformada de Fourier sobre la entrada $o(x, y)$, entonces el resultado de la transformación es multiplicado por $K(k_x, k_y)$ y finalmente este producto es convolucionado con la señal $\mathcal{F}\{D(x, y)\}$ para calcular $\psi_S(x', y'; z = S)$.

Luego para hacer que los sistemas en las Figuras 10 y 11 sean equivalentes, se debe satisfacer que $\mathcal{W}_1 = \mathcal{W}_2$, lo cual implica

$$\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{H}(k_x, k_y; z = S)\} * P(k_x, k_y) = \mathcal{F}\{D(x, y)\} * K(k_x, k_y). \quad (2.13)$$

Así, aplicando la transformada de Fourier a ambos lados de la igualdad en la Ecuación (2.13) y usando la propiedad de la convolución de la transformada de Fourier, se puede obtener que

$$\mathcal{F}\{P(k_x, k_y)\}\mathcal{H}(k_x, k_y; z = S) = \mathcal{F}\{\mathcal{F}\{D(x, y)\}\}. \quad (2.14)$$

dando que $\mathcal{F}\{K(k_x, k_y)\} = \delta(\zeta, \eta)$, donde $\delta(\zeta, \eta)$ es la función Dirac. Defina $\mathcal{H}^{-1}(k_x, k_y; z = S) = \mathcal{H}(k_x, k_y; z = -S)$ y note que $\mathcal{H}^{-1}(k_x, k_y; z = -S)\mathcal{H}(k_x, k_y; z = S) = \delta(k_x, k_y)$. Entonces, la Ecuación (2.14) puede reescribirse como

$$\mathcal{F}\{P(k_x, k_y)\} = \mathcal{F}\{\mathcal{F}\{D(x, y)\}\}\mathcal{H}^{-1}(k_x, k_y; z = S). \quad (2.15)$$

Ahora, aplicando la transformada inversa de Fourier a ambos lados de la Ecuación (2.15), $P(k_x, k_y)$ se puede obtener a partir de una apertura codificada $D(x, y)$, la cual es calculada como

$$P(k_x, k_y) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{D(k_x, k_y)\}\mathcal{H}^{-1}(k_x, k_y; z = S)\}, \quad (2.16)$$

donde $D(k_x, k_y) = \mathcal{F}\{D(x, y)\}$. Note que en general el cálculo de la apertura codificada de fase $P(k_x, k_y)$ en la Ecuación (2.16) es una función compleja, la cual no es factible en una implementación real de un sistema de patrones de difracción codificados, ya que requiere de encontrar un material que cambie la fase de los patrones de difracción, lo cual puede resultar en un material muy costoso. Por tanto, la siguiente sección explica como aproximar $P(k_x, k_y)$ en una función con elementos de amplitudes binarias haciendo uso de un método denominado *detour-phase*[21], que en contraste, estas aperturas codificadas son de fácil implementación física.

2.5 APROXIMACIÓN BOOLEANA DE LA APERTURA CODIFICADA DE FASE USANDO EL MÉTODO *DETOUR-PHASE*

En esta sección se presenta el diseño de aperturas codificadas Booleanas basado en el método de *detour-phase*[21], la cual permite aproximar una función compleja $P(k_x, k_y)$ en una función $P_b(k_x, k_y)$ cuyos elementos están compuestos por elementos binarios de ceros y unos.

En la Figura 11 se presentó el esquema general de un sistema de patrones de difracción. Allí, el código de apertura $P(k_x, k_y)$ está conformada por valores complejos y como se mencionó anteriormente esto no es práctico. Por tanto, se hará uso del método de *detour-phase* [21] para aproximar $P(k_x, k_y)$ a una apertura codificada en fase basada solamente en elementos binarios de bloqueo o transmitancia $\{0, 1\}$. $P(k_x, k_y)$ y la amplitud compleja del código de apertura de fase $\phi_P(x, y; z)$ están relacionados por,

$$\phi_P(x, y; z) = \mathcal{F}\{P(k_x, k_y)\phi_r(x, y)\}, \quad (2.17)$$

donde $\phi_r(x, y) = e^{-ik_0 \sin(\theta x)}$ denota la amplitud compleja del plano de onda en reconstrucción, y θ es el ángulo de inclinación. Además, el código de apertura de fase es una función compleja dada por $P(k_x, k_y) = a(k_x, k_y)e^{-i\varphi(k_x, k_y)}$, donde $a(k_x, k_y)$ y $\varphi(k_x, k_y)$ son el módulo y la fase del código de apertura de fase, respectivamente. Por lo tanto, el objetivo es diseñar patrones de amplitud binaria $P_b(k_x, k_y)$ para aproximar la función compleja $P(k_x, k_y)$.

Si el problema de diseño es limitado a una ventana de tamaño $d_x \times d_y$ en el plano de reconstrucción, entonces es posible encontrar $P_b(k_x, k_y)$ tal que,

$$\mathcal{F}\{P_b(k_x, k_y)\phi_r(x, y)\} \approx \mathcal{F}\{P(k_x, k_y)\phi_r(x, y)\}, \quad (2.18)$$

dentro de la ventana. Para esto, el área de $P(k_x, k_y)$ es dividido dentro de un arreglo de celdas unitarias, y el tamaño de cada celda es $w \times w$, como se muestra en la Figura 12.

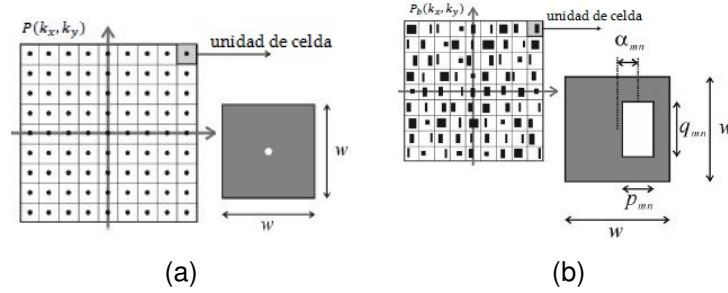


Figura 12: (a) Apertura codificada de fase compleja, y su aproximación, (b) Apertura codificada de fase binaria *detour-phase*. (Tomada de [21])

Para la función compleja $P(k_x, k_y)$ suponemos que tanto $a(k_x, k_y)$ y $\varphi(k_x, k_y)$ varían suavemente dentro de cada celda; las celdas pueden entonces ser reemplazadas por un arreglo de fuentes puntuales suministrando una muestra de la apertura codificada compleja como,

$$P_s(k_x, k_y) = \sum_{m,n} a_{m,n} e^{-i\varphi_{m,n}} \times \delta(k_x - k_{x_m}, k_y - k_{y_n}), \quad (2.19)$$

donde (m, n) son los índices de la celda centrada, donde $k_{x_m} = mw$, y, $k_{y_n} = nw$; $a_{m,n} = a(k_{x_m}, k_{y_n})$ y $\varphi_{m,n} = \varphi(k_{x_m}, k_{y_n})$.

Bajo la irradiación de un plano de onda inclinado, cada fuente puntual en la muestra del código de apertura de fase produce un plano de onda en el plano de reconstrucción, dando un campo complejo en la reconstrucción del plano como,

$$\phi_s(x, y) = \mathcal{F}\{e^{-ik_0 \sin(\theta x)} P_s(k_x, k_y)\} \quad (2.20)$$

Sin embargo, se puede eliminar el término de fase $e^{-ik_0 \sin(\theta x)}$ en la Ecuación (2.20) haciendo un diseño con el ancho de las celdas como,

$$w = \frac{2\pi\ell}{k_0 \sin(\theta)}, \ell = 1, 2, 3, \dots \quad (2.21)$$

tal que $e^{-i2\pi\ell m} = 1$. Esto produce

$$\phi_s(x, y) = \sum_{m,n} e^{-i\varphi_{m,n}} e^{-i\frac{k_0}{f}(k_{xm}x+k_{yn}y)}, \quad (2.22)$$

donde f denota la frecuencia de la radiación, y $\phi_s(x, y)$ representa la aproximación de una transformación de Fourier de la muestra del término complejo $a_{m,n}e^{-i\varphi_{m,n}}$. A partir de la Ecuación (2.21), se puede determinar el cambio de la apertura dentro de cada celda dado por,

$$\alpha_{m,n} = \frac{\varphi_{m,n}}{k_0 \sin(\theta)} = \frac{\varphi_{m,n} w}{2\pi \ell} \quad (2.23)$$

Como $\varphi_{m,n}$ se encuentra dentro del rango π y $-\pi$, entonces $\alpha_{m,n}$ se encuentra dentro de $\pm w/2\ell$

En la Figura 13 se presenta un ejemplo de una apertura codificada, la cual fue diseñada utilizando el método *detour-Phase*.

En resumen el método *detour-phase* permite aproximar una función compleja $P(k_x, k_y)$

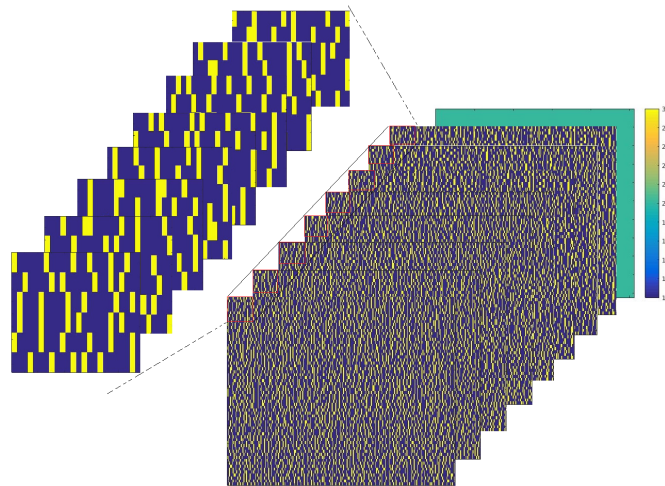


Figura 13: Figura intencionalmente colocada para ilustrar las aperturas codificadas óptimas obtenidas con el algoritmo propuesto.

en una función con patrones de amplitud binaria $P_b(k_x, k_y)$ siempre y cuando, el problema de diseño sea acotado dentro de una ventana. Por lo tanto, la función $P_b(k_x, k_y)$ permite hacer diseños de aperturas codificadas booleanas que permitan recuperar la fase de los haces difractados.

Capítulo 3

SIMULACIONES Y RESULTADOS

Se realizaron simulaciones para evaluar el desempeño de los diseños óptimos de las aperturas codificadas Booleanas. Estas aperturas codificadas no se pueden implementar directamente en los algoritmos que existen en el estado del arte, ya que no convergen. De este modo, se realizaron modificaciones a los algoritmos TWF, RWF y TAF mencionados en el capítulo 1, con el fin de poder recuperar la fase de los patrones de difracción codificados. Además, se presenta el algoritmo para construir las aperturas codificadas óptimas. Por otra parte, el rendimiento de estas aproximaciones booleanas se midió mediante el cálculo de la calidad de la reconstrucción en términos de la relación señal a ruido pico (PSNR) por sus siglas en ingles. Todos los experimentos se llevaron a cabo en Matlab 2015a en un Intel Core i7-4790 3.6 GHz 8 con 32 GB de memoria RAM

3.1 CONFIGURACIÓN FACTIBLE A LOS ALGORITMOS PARA UNA IMPLEMENTACIÓN REAL

En general, los algoritmos *Truncated Wirtinger Flow* (TWF), *Reshaped Wirtinger Flow* (RWF) y *Truncated Amplituded Flow* (TAF) no puede aplicarse directamente para recuperar la fase de las mediciones codificadas con aperturas Booleanas, dado que siempre fallan en la recuperación de la fase. Por lo tanto, este trabajo adaptó los algoritmos TWF, RWF Y TAF de tal manera que la fase pueda ser recuperada a partir de las patrones de difracción codificados con aperturas Booleanas.

Teniendo en cuenta el hecho de que los algoritmos TWF, RWF Y TAF no pueden aplicarse directamente para recuperar la fase de las mediciones codificadas Booleanas, en este documento se proponen dos modificaciones principales para los algoritmos. La primera modificación cambia el proceso de muestreo que consistía en obtener un muestreo normalmente distribuido basado en el modelo obtenido en Ecuación (1.18). Suponga que el vector de muestro $\tilde{\mathbf{a}}_k$ esta dado por $\tilde{\mathbf{a}}_k = \mathbf{D}\mathbf{f}_k$ donde \mathbf{f}_k es la k -ésima fila de la matriz de la transformación discreta de Fourier \mathbf{F} y \mathbf{D} una matriz diagonal cuyos valores $\in \{1, -1, i, -i\}^{n \times n}$, y con el fin de obtener un proceso de muestreo

distribuido normalmente, se consideraba la siguiente variable aleatoria

$$b_1 = \begin{cases} +1 & \text{con prob. } \frac{1}{4} \\ -1 & \text{con prob. } \frac{1}{4} \\ +i & \text{con prob. } \frac{1}{4} \\ -i & \text{con prob. } \frac{1}{4}, \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $\mathbb{E}[b_1] = 0$ y $\mathbb{E}[\cdot]$ es la función valor esperado. Luego, considerando cada medición codificada para una sola proyección de la Ecuación 2.5 se puede obtener que

$$y_k = \left| \sum_{j=1}^n \overbrace{(\mathbf{a}_k)_j (\mathbf{x})_j}^{v_k} \right|^2, k = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

que se puede reescribir como

$$(\bar{y})_k = \left| \sum_{j=1}^n \overbrace{(\mathbf{F}_k)_j (\mathbf{D})_{j,j} (\mathbf{x})_j}^{v_k} \right|^2, k = 1, \dots, n, \quad (3.3)$$

donde v_k puede ser aproximado como $v_k \sim \mathcal{CN}(0, \sigma^2)$, usando el teorema del limite central y el hecho de que $\mathbb{E}[b_1] = 0$, en la medida que $n \rightarrow \infty$ [10, 1].

Ahora, este sistema de muestreo de patrones *octanary* es cambiado por un muestreo que consta de aperturas codificadas Booleanas donde el vector de muestreo \mathbf{a}_k se cambia por las filas de la transformación de Fourier \mathbf{F} y $\mathbf{D} \in \{0, +1\}$ es una matriz diagonal.

La segunda modificación consiste en determinar los valores de los parámetros de truncamiento adecuados $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ y α_3 , para la modulación propuesta, utilizando un método Monte Carlo basado en cadenas de Markov (MCMC) por sus siglas en ingles. A continuación, se presentan los algoritmos TWF, RWF Y TAF modificados.

Algoritmo Truncated Wirtinger Flow (TWF): En el Algoritmo 1 se presenta el algoritmo TWF modificado considerando el proceso de muestreo alternativo mostrado y los parámetros óptimos de truncamiento, calculados usando un esquema MCMC. En el Algoritmo 1 las variables de entrada son $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ and α_3 , los parámetros de truncamiento. Los conjuntos ϵ_1^k y ϵ_2^k definidos en las líneas 10 y 11, respectivamente, son dos colecciones de eventos *i.e.* el valor de ϵ_1^k y ϵ_2^k es 1 cuando se cumple su respectiva restricción y 0 cualquier otro caso. Además, la notación de truncamiento $\epsilon_1^k \cap \epsilon_2^k$ simplemente descarta los valores v^k en la línea 8 cuando $\epsilon_1^k \cap \epsilon_2^k = \emptyset$. Finalmente, el efecto de la notación $|y_k| \leq \alpha_y^2 \lambda_0^2$ en la inicialización de la matriz \mathbf{H} , es descartar aquellas medidas que son varias veces más grandes que la media.

Algoritmo Reshaped Wirtinger Flow (RWF): En el Algoritmo 2 se presenta el algoritmo RWF modificado. En la fila 4 se detallan los parámetros de truncamiento

Algorithm 1 Algoritmo TWF modificado (TWFM) [10, 23]

- 1: **function** TWFM –Algorithm (\mathbf{y}, T)
- 2: $\{\hat{\mathbf{a}}_k \in \mathbb{C}^n \mid k = 1, \dots, n\}$ (vectores de muestreo booleanos)
- 3: $\alpha_0 \leftarrow 0.045, \alpha_1 \leftarrow 5, \alpha_2 \leftarrow 6, \alpha_3 \leftarrow 3$, (Parámetros de truncamiento calculados)
- 4: $\lambda_0 \leftarrow \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k}$
- 5: $\mathbf{H} \leftarrow \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k \hat{\mathbf{a}}_k \hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{1}_{\{|y_k| \leq \alpha_3 \lambda_0^2\}}$
- 6: $\mathbf{x}^{(0)} \leftarrow \sqrt{\frac{n^2}{\sum_{k=1}^n \|\hat{\mathbf{a}}_k\|^2}} \lambda_0 \tilde{\mathbf{x}}$ ($\tilde{\mathbf{x}}$ es del eigenvector líder de la matriz \mathbf{H})
- 7: **for** $t = 1$ to T **do**
- 8: $\mathbf{x}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{x}^{(t)} + \frac{2\mu t}{n} \sum_{k=1}^n \underbrace{\frac{(y_k - |\hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{x}^{(t)}|^2)}{\mathbf{x}^{(t)H} \hat{\mathbf{a}}_k}}_{v^k} \hat{\mathbf{a}}_k \mathbf{1}_{\epsilon_1^k} \cap \epsilon_2^k$
- 9: **where:**
- 10: $\epsilon_1^k \leftarrow \{\alpha_0 \leq \frac{\sqrt{n} |\hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{x}^{(t)}|}{\|\hat{\mathbf{a}}_k\| \|\mathbf{x}^{(t)}\|} \leq \alpha_1\}$
- 11: $\epsilon_2^k \leftarrow \{|y_k - |\hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{x}^{(t)}|^2| \leq \frac{\alpha_2 K_t \sqrt{n} |\hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{x}^{(t)}|}{\|\hat{\mathbf{a}}_k\| \|\mathbf{x}^{(t)}\|}\}$
- 12: $K_t \leftarrow \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n |y_k - |\hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{x}^{(t)}|^2|$
- 13: **end for**
- 14: $l \leftarrow \sum_{k=1}^n (y_k \log(|\langle \hat{\mathbf{a}}_k, \mathbf{x}^{(T)} \rangle|^2) - |\langle \hat{\mathbf{a}}_k, \mathbf{x}^{(T)} \rangle|^2)$
- 15: **return** $\mathbf{x}^{(T)}, l$
- 16: **end function**

calculados para que el algoritmo converja y, además, presente la mayor calidad de recuperación de fase. Al igual que al algoritmo 2 los parámetros α_l, α_u, T y μ fueron calculados, en este caso maximizando la calidad de la reconstrucción, medidos en la métrica de PSNR por sus siglas en ingles.

Algorithm 2 Algoritmo RWF modificado (RWFm)

- 1: **Input:** Mediciones $\{y_i \mid 1 \leq m \leq m\}$ y vector característico $\{\mathbf{a}_i \mid 1 \leq m \leq m\}$
- 2: $\alpha_z^b, \alpha_z^u, T$, y μ (Parámetros de truncamiento)
- 3: $\{\hat{\mathbf{a}}_k \in \mathbb{C}^n \mid k = 1, \dots, n\}$ (vectores de muestreo booleanos)
- 4: $\alpha_l \leftarrow 0.5, \alpha_u \leftarrow 1000, T \leftarrow 500$, y $\mu \leftarrow 0.49$ (Parámetros de truncamiento calculados)
- 5: $\lambda_0 \leftarrow \frac{mn}{\sum_{k=1}^n \|\hat{\mathbf{a}}_k\|_1} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k$
- 6: $\mathbf{H} \leftarrow \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k \hat{\mathbf{a}}_k \hat{\mathbf{a}}_k^* \mathbf{1}_{\{\alpha_l \lambda_0 \leq |y_k| \leq \alpha_u \lambda_0\}}$
- 7: $\mathbf{x}^{(0)} \leftarrow \lambda_0 \tilde{\mathbf{x}}$ ($\tilde{\mathbf{x}}$ es del eigenvector líder de la matriz \mathbf{H})
- 8: **for** $t = 1$ to T **do**
- 9: $\mathbf{x}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{x}^{(t)} - \frac{\mu}{n} \sum_{k=1}^n \hat{\mathbf{a}}_k \mathbf{x}^t - \mathbf{y}_k \frac{\hat{\mathbf{a}}_k \mathbf{x}^t}{|\hat{\mathbf{a}}_k \mathbf{x}^t|}$
- 10: **end for**
- 11: **return** $\mathbf{x}^{(T)}$

El parámetro de escala en λ_0 y el conjugado $\hat{\mathbf{a}}_i$ permiten que el algoritmo sea fácilmente aplicable a casos complejos y el caso con el patrón de difracción codificada (CDP). Por otra parte, la inicialización \mathbf{x}^0 consiste en la estimación tanto de la norma como de la dirección de \mathbf{x} . La estimación de la norma de \mathbf{x} está dada por λ_0 en el Algoritmo 2.

Algoritmo Truncated Amplituded Flow (TAF) En el Algoritmo 3 se presenta la modificación del algoritmo TAF. En la fila 4 se muestran los parámetros de truncamiento calculados para que el algoritmo converja y además, arrojen el mejor resultado en la recuperación de la fase usando las aperturas codificadas booleanas óptimas. Por otra parte, el algoritmo TAF reconstruye exactamente el vector \mathbf{x} cuanto el número de ecuaciones es aproximadamente el número de incógnitas, que es teóricamente el orden óptimo.

Algorithm 3 Algoritmo TAF modificado (TAFM)

```

1: function TAFM –Algorithm ( $\mathbf{y}, \mathbf{a}_i, T$ )
2:   Input: Amplitud del vector de datos  $\{y_i := |\langle \mathbf{a}_i; \mathbf{x} \rangle|\}_{i=1}^m$ 
3:    $\{\hat{\mathbf{a}}_k \in \mathbb{C}^n \mid k = 1, \dots, n\}$  (vectores de muestreo booleanos)
4:    $y \leftarrow 100, p \leftarrow 150, T \leftarrow 500, \text{ y } \mu \leftarrow 0.49$ , (Parámetros de truncamiento calculados)
5:    $\mathbf{H} \leftarrow \frac{1}{|\lambda_0|} \sum_{i \in \lambda_0} \frac{\mathbf{a}_i \mathbf{a}_i^T}{\|\mathbf{a}_i\|^2}$ 
6:    $\mathbf{x}^{(0)} \leftarrow \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^m y_i^2}{m}} \hat{\mathbf{x}}_0$ , es del eigenvector líder normalizado de la matriz ( $\mathbf{H}$ )
7:   for  $t = 1$  to  $T$  do
8:      $\mathbf{x}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{x}^{(t)} - \frac{\mu}{n} \sum_{i=1}^m \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^t - y_i \frac{\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^t}{|\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^t|} \mathbf{a}_i$ 
9:   end for
10:  return  $\mathbf{x}^{(T)}$ 
11: end function

```

3.2 ALGORITMO PARA CALCULAR LAS APERTURAS CODIFICADAS ÓPTIMAS

Siempre y cuando el problema de diseño sea acotado dentro de una ventana de tamaño $d_x \times d_y$ el método *detour-phase* permite aproximar una función compleja $P(k_x, k_y)$ en una función con patrones de amplitud binaria $P_b(k_x, k_y)$. Por tanto, en el presente trabajo se diseñaron aperturas codificadas de tamaño de celda de $w \times w = 16 \times 16$, en donde cada captura esta compuesta por 64×64 celdas, proporcionando un tamaño de 1024×1024 píxeles. Estas celdas están compuestas por rendijas de dimensiones $q_{m,n} \times p_{m,n}$ como se muestra en la Figura 14. En nuestro caso, se ajusto $q_{m,n}$, a 16 píxeles, $p_{m,n} = 1 \sim 16$ y $\alpha_{m,n} = 1 \sim 16$ píxeles para representar los distintos niveles de fase que varían de acuerdo al número de capturas (d) y la constante de complementaria (c) del conjunto de códigos de aperturas booleanas.

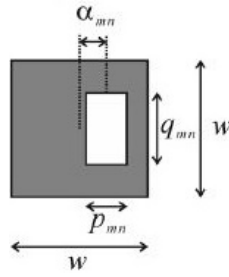


Figura 14: Rejilla de las aperturas codificadas. Fuente:[21]

En el Algoritmo 4 se resume el método para calcular las aperturas codificadas $P_b(k_x, k_y)$, observe que las variables de entrada d y c hacen referencia al número de capturas y constante de complementariedad, respectivamente. El vector \mathbf{x} definido en la línea 9 contiene las posiciones aleatorias de las rendijas de las distintas capturas de la apertura codificada. Este vector \mathbf{x} es variable en cada ciclo *for*, dándole mayor aleatoriedad a las rendijas de las celdas. Además, los coeficientes del vector \mathbf{x} se repiten en función del parámetro de la constante de complementariedad. Por otra parte, \mathbf{H} es una matriz que contiene la información de las celdas y \mathbf{M} es una matriz donde se almacena de forma cíclica la información de los distintos canales de la apertura codificada

Algorithm 4 Algoritmo Coded Aperture Generation- Detour-Phase (CAG-DP)

```

1: function CAG-DP –Algorithm (d,c)
2:    $\{\mathbf{d} = 2^n \in \mathbb{R} \mid n = 1, 2, 3 \text{ y } 4\}$  (número de capturas de la apertura codificada booleana)
3:    $\{\mathbf{c} = 2^l \in \mathbb{R} \mid l = 0, 1, 2 \text{ y } 3\}$  (número de complemento de la apertura codificada booleana)
4:    $p_{mn} \leftarrow \frac{w \cdot c}{d}$ 
5:    $k_c \leftarrow 64$  (número de celdas verticales que contiene la apertura codificada)
6:    $k_f \leftarrow 64$  (número de celdas horizontales que contiene la apertura codificada)

7:   for  $m = 1$  to  $k_c$  do
8:     for  $n = 1$  to  $k_f$  do
9:       Initialize  $\mathbf{x} \leftarrow [x_1, x_2, \dots, x_d]$  (Vector con las posiciones de las rendijas para las
10:        distintas capturas)
11:       for  $f = 1$  to  $\text{length}(\mathbf{x})$  do
12:          $\mathbf{P} \leftarrow \text{zeros}(w)$ 
13:          $\mathbf{P}^{(1:w, \mathbf{x}_f \cdot p_{mn} + 1 : \mathbf{x}_f \cdot p_{mn} + p_{mn})} \leftarrow 1$  (selecciona el ancho  $p_{m,n}$  de las rendijas de las
diversas
14:        celdas )
15:          $\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{P}$ 
16:          $\mathbf{M} \leftarrow [\mathbf{M} \ \mathbf{H}]$ 
17:       end for
18:     end for
19:   end for
20:   return  $\mathbf{M}$ 
21: end function

```

No obstante, el objetivo principal es generar un conjunto de aperturas codificadas, con distintos números de capturas d y con distintos valores para la contante de com-

plementariedad c , para luego determinar cual apertura codificada booleana presenta el mejor rendimiento en la reconstrucción de la recuperación de la fase, que serán medidos en términos de la relación señal a ruido de pico o PSNR por sus siglas en ingles.

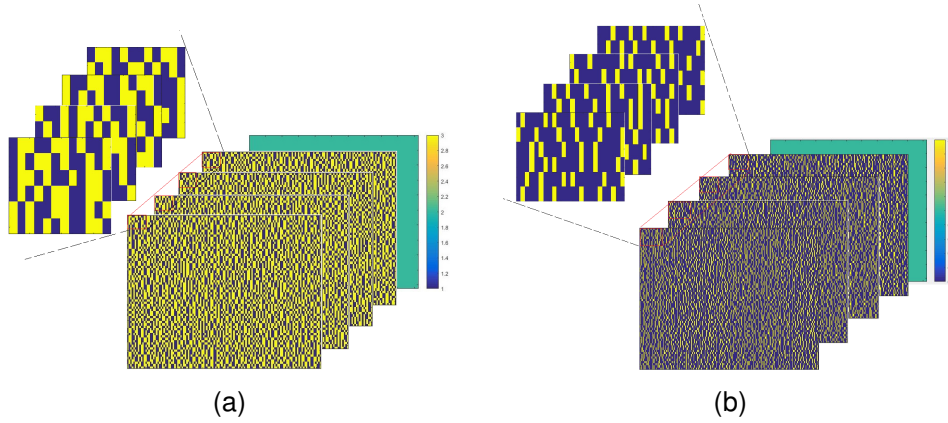


Figura 15: Aperturas codificadas booleanas. (a) $d = 4$ y $c = 2$, (b) $d = 4$ y $c = 1$

Para entender un poco más este conjunto de aperturas codificadas tomemos como ejemplo la Figura 15, en esta imagen se ilustran dos diseños de aperturas booleanas con igual número de capturas ($d = 4$), pero con diferente constante de complementariedad. Entendiéndose por este último, la sumatoria píxel a píxel de las capturas dan como resultado c , que se puede escribir de la siguiente manera,

$$c = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^d D_l(k_i, k_j) \quad (3.4)$$

lo que indica, que la apertura codificada resultante, consta de elementos que al sumar las proyecciones proporciona una sola intensidad de valor c .

Por otra parte, para el desarrollo del presente proyecto, se diseñaron aperturas codificadas con $d = 2, 4, 8$ y 16 o lo que es equivalente decir $d = 2^n, n = 1, 2, 3, 4$. Estas aperturas booleanas tienen diversas constantes de complementarias c , tomando valores de $c = 1, 2, 4$ y 8 . En la Figura 16 se ilustran las diversas aperturas codificadas que fueron diseñadas en el presente proyecto.

Observe en la Figura 16, que las rendijas (trazas de color amarillo) de las diversas aperturas codificadas booleanas presentan un ancho $p_{m,n}$ variable en función de la característica de la apertura booleana (número de captura y constante de complementariedad).

En resumen se realizaron 10 de diseños de aperturas codificadas booleanas, que presentan distintos números de capturas d y constante de complementariedad c . Estas aperturas booleanas fueron simuladas con las modificaciones realizadas a los algoritmos *Truncated Wirtinger Flow*, *Reshaped Wirtinger Flow* y *Truncated Amplitude Flow* con el fin de recuperar la fase de los patrones de difracción codificados Booleanos. A continuación, se detallan los resultados obtenidos con los algoritmos TWFM (Algoritmo 1), RWFM (Algoritmo 2) y TAFM (Algoritmo 3).

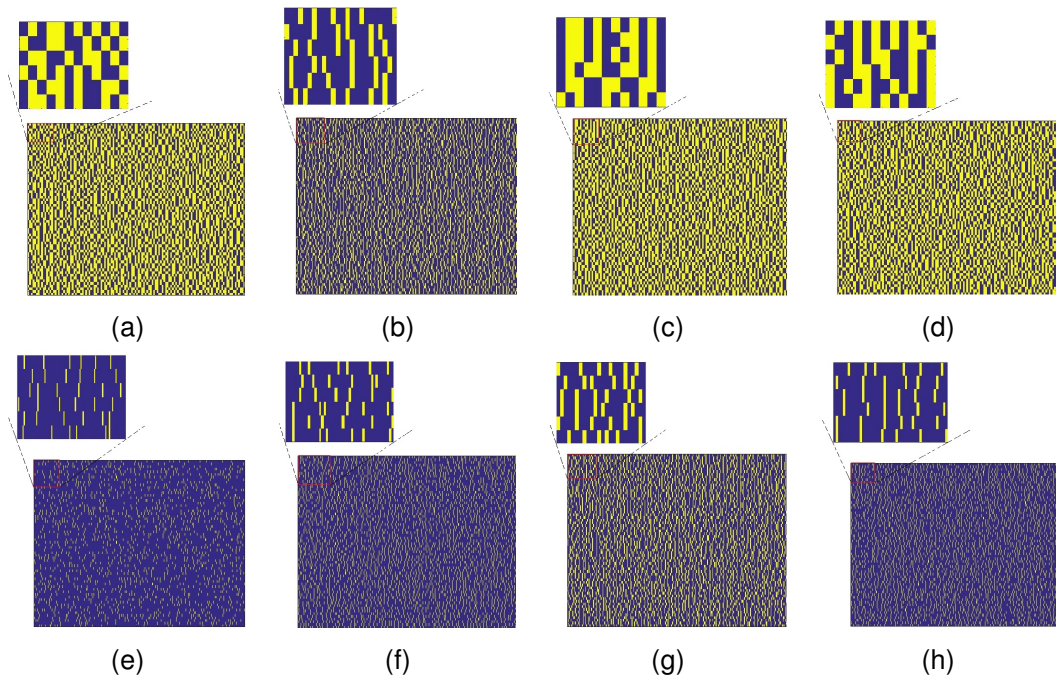


Figura 16: Diseño de Aperturas codificadas usando diferentes números de captura d y constantes de complementariedad c . (a) $d = 2$ y $c = 1$, (b) $d = 16$ y $c = 4$, (c) $d = 16$ y $c = 8$, (d) $d = 8$ y $c = 4$, (e) $d = 16$ y $c = 1$, (f) $d = 16$ y $c = 2$, (g) $d = 8$ y $c = 2$, (h) $d = 8$ y $c = 1$.

3.3 SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO TRUNCATED WIRTINGER FLOW (TWFM)

Los patrones de difracción codificados por códigos de aperturas booleanas y el problema de la reconstrucción de la fase, fueron simulados y resueltos utilizando el Algoritmo TWF (Algoritmo 1). Después de una búsqueda exhaustiva se encontraron los parámetros de truncamiento buscando maximizar la calidad de la reconstrucción, estos valores resultaron en $\alpha_{lb} \leftarrow 0.01$, $\alpha_{ub} \leftarrow 2000$, $\alpha_h \leftarrow 100$, $\alpha_y \leftarrow 1500$ y $\mu \leftarrow 0.4$. En términos generales, el rendimiento de las aperturas codificadas Booleanas utilizando el Algoritmo 1 no presentaron resultados óptimos, proporcionando baja calidad en la reconstrucción. Además, en promedio la recuperación de la fase con las distintas aperturas codificadas propuestas en este trabajo presentó una calidad de 3 dB. En la Figura 17b se ilustra un ejemplo del grado de calidad obtenido con el Algoritmo 1. Observe que si se compara las imágenes de la Figura 17 se visualiza una baja calidad en la reconstrucción de la fase. Por otra parte, en la Figura 18 se muestra los resultados obtenidos del análisis de la constante de complementariedad y del número de proyecciones requeridos en la apertura codificada booleana para recuperar la fase. Observe que la calidad de la reconstrucción no sobrepasa los 5 dB para ninguna apertura codificada. Por último, en la Tabla 3.1 se muestra el tiempo computacional empleado por las diversas aperturas codificadas booleanas propuestas en este trabajo, este tiempo es medido en segundos (s). Además, el tiempo computacional es aproximadamente constante cuando se emplea una apertura codificada

con un número de capturas fijo, pero se varía la constante de complementariedad, como se observa en la Tabla 3.1. Adicionalmente, se puede detallar que a medida que aumenta el número de capturas el tiempo que se emplea la apertura codificada aumenta de manera proporcional.

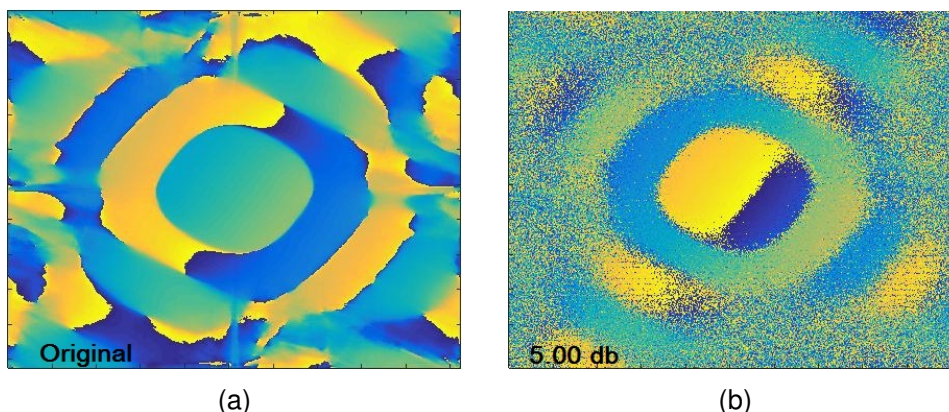


Figura 17: Recuperación de la fase utilizando el algoritmo TWFM. (a) Imagen original, (b) Imagen recuperada con una calidad de 5 dB.

Tabla 3.1: Tiempo computacional TWFM

Número de captura d	Constante de complementariedad c	Tiempo computacional (s)
2	1	800.41
4	1,2	1310.07
8	1,2,3	1730.87
16	1,2,3,4	2305.15

3.4 SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO RESHAPED WIRTINGER FLOW (RWFM)

Los patrones de difracción codificados por códigos de aperturas booleanas y el problema de la reconstrucción de la fase, fueron simulados y resueltos utilizando el algoritmo 2. Luego de una búsqueda exhaustiva se encontraron los valores óptimos para los parámetros de truncamiento que rigen el Algoritmo 2, que resultó en $\alpha_l \leftarrow 0.5$, $\alpha_u \leftarrow 1000$, $T \leftarrow 500$, y $\mu \leftarrow 0.49$. Para dar con los valores de los parámetros de truncamiento, inicialmente se eligieron valores aleatorios hasta conseguir que el algoritmo RWFM converja. Luego, teniendo estas constantes, se determinó que los parámetros α_l y μ eran más relevantes, cambiando de manera significativa la calidad de la reconstrucción. Estas constantes deben oscilar entre $0 \leq \alpha_l, \mu \leq 2$, para que el algoritmo RWFM pueda recuperar la fase de los patrones codificados de difracción. Por otra parte, al realizar las simulaciones numéricas con las distintas aperturas codificadas booleanas propuestas, se encontraron los valores para el número de capturas

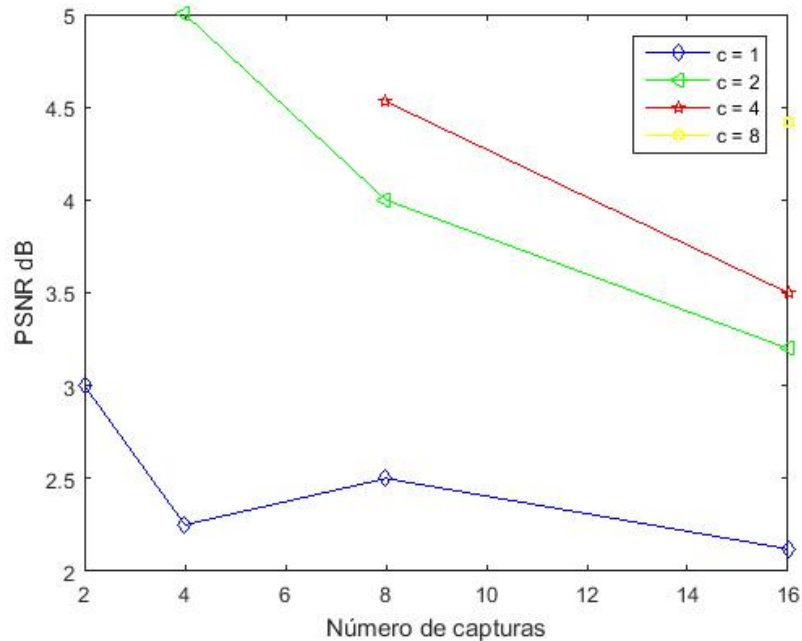


Figura 18: Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. TWFM

d y la constante de complementariedad c , que hacen que la reconstrucción obtenida tenga la mas alta calidad en términos de PSNR por sus siglas en ingles.

En la Figura 19 se presenta la calidad obtenida en la reconstrucción de la recuperación de la fase usando las aperturas codificadas booleanas diseñadas cuando se varía el número de capturas d y la constante de complementariedad c . Observe que la calidad mas alta en la reconstrucción se presenta cuando el número de capturas es igual a $d = 4$ y la constante de complementariedad es $c = 2$, proporcionando un rendimiento en la recuperación de la fase de 24 dB de PSNR. Además, si se analiza los resultados de la Figura 19, se puede detallar que los mejores resultados se obtienen cuando la constante de complementariedad es igual a la mitad del numero de capturas. Por otra parte, en la Figura 20 se ilustra la calidad de la reconstrucción de la fase de la imagen recuperada con los parámetros óptimos encontrados para d y c , que para este caso, los mejores resultados se lograron con $d = 4$ y $c = 2$.

Adicionalmente, en la Tabla 3.2 se presentan los tiempos empleados por las distintas aperturas codificadas booleanas, variando el número de capturas. Note que la igual que la Tabla 3.1, los valores de los tiempos se dejan fijos, cuando el numero de proyecciones d no cambia, dado que eran aproximadamente iguales al variar solo la constante de complementariedad. Observe en la Tabla 3.2 que es evidente que a medida que aumenta el número de capturas d , el tiempo también lo hace de manera proporcional, esto se debe al aumento de procesamiento de datos, donde por cada captura d que se aumente a la apertura codificada, se aportan 1024×1024 píxeles aumentando la cantidad de datos para procesar.

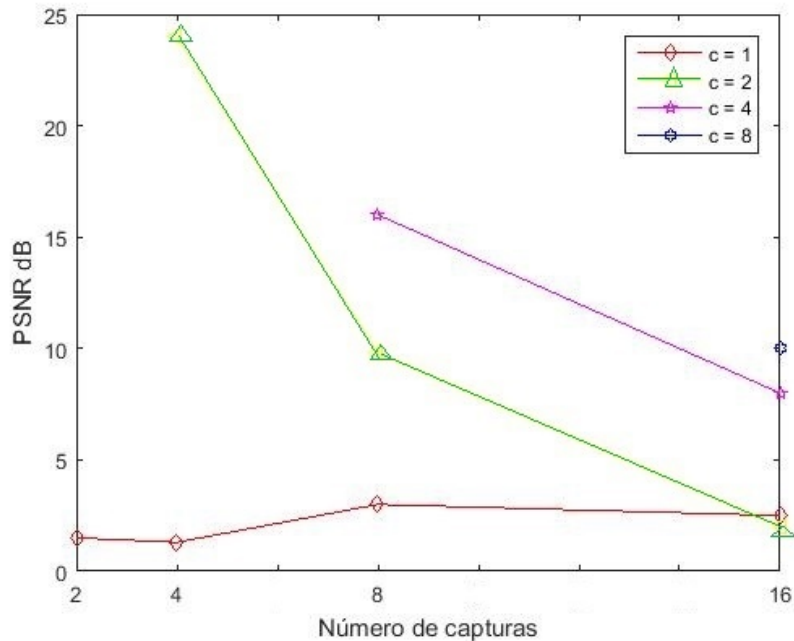


Figura 19: Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. RWFM

Tabla 3.2: Tiempo computacional RWFM

Número de captura d	Constante de complementariedad c	Tiempo computacional (s)
2	1	260.41
4	1,2	414.26
8	1,2,3	613.88
16	1,2,3,4	1215.06

3.5 SIMULACIÓN Y RESULTADO CON EL ALGORITMO MODIFICADO TRUNCATED AMPLITUDE FLOW (TAFM)

Luego de hacer las modificaciones pertinentes al algoritmo *Truncated Amplituded Flow* (Algoritmo 3), se procedió a realizar las simulaciones con las aperturas booleanas, proporcionando que los valores óptimos para los parámetros de truncamiento en el Algoritmo TAFM son, $y = 100$, $p = 150$, $T = 500$, y $\mu = 0.49$. Al igual que el Algoritmo RWFM, para encontrar los valores de los parámetros de truncamiento, inicialmente se eligieron valores aleatorios hasta lograr que el algoritmo converja. Luego de lograr la convergencia, se determinó que la constante μ debe oscilar entre $0 \leq \mu \leq 2$. Los parámetros μ y y juegan un papel fundamental en la reconstrucción de la fase, ya que la calidad en la recuperación era sensible a estos parámetros. Por otra parte, después de realizar las simulaciones con el conjunto de aperturas codificadas booleanas diseñadas, se encontró que la mejor calidad en la recuperación de la fase se obtuvo con la apertura codificada diseñada con un número de capturas $d = 4$ y constante de complementariedad $c = 2$. Con esta apertura booleana y con parámetros óptimos de

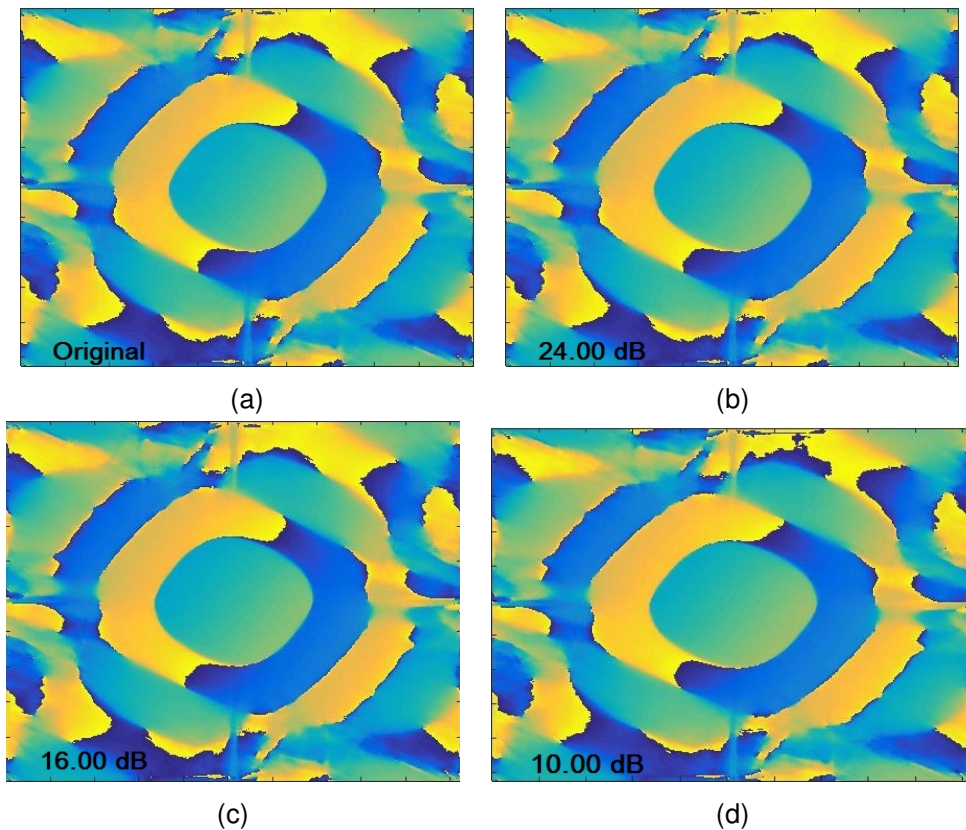


Figura 20: Reconstrucciones obtenidas usando las aperturas codificadas booleanas óptimas y el Algoritmo RWFM. (a) Imagen original, (b) $d = 4$ y $c = 2$, PSNR 24.00 dB, (c) $d = 8$ y $c = 4$, PSNR 16.00 dB, (d) $d = 16$ y $c = 8$, PSNR 10.00 dB.

truncamiento y , p , T y μ se logró una calidad en la recuperación de la fase de hasta 21.21 dB de PSNR. En la Figura 21 se ilustra las calidades de la recuperación de la fase en términos de métrica PSNR con las diferentes aperturas codificadas booleanas. Note que, al igual que los resultados obtenidos con el Algoritmo 2, los mejores resultados con el Algoritmo 3 se presentan cuando el número de capturas es el doble que la constante de complementariedad. Por otra parte, en la Figura 22 se visualiza la calidad de la reconstrucción de la fase utilizando los parámetros óptimos de truncamiento teniendo en cuenta que se presentan mejores resultados cuando el número de capturas es el doble de la constante de complementariedad. Adicionalmente, en la Tabla 3.3 se presenta los tiempos computacionales empleados para las diversas aperturas booleanas.

Resumen de los resultados

La Tabla 3.4 resume los resultados obtenidos con los tres Algoritmos empleados en la reconstrucción de la fase. Los resultados se muestran en base a que los rendimientos óptimos se obtienen cuando la apertura codificada booleana esta constituida por un número de capturas que son del doble que la constante de complementariedad, dado

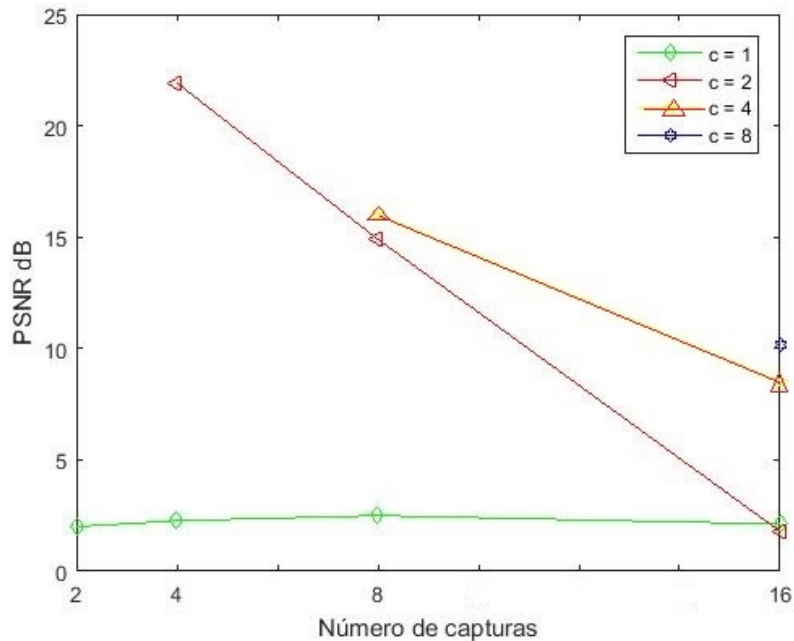


Figura 21: Análisis del número de capturas y constante de complementariedad para las aperturas codificadas diseñadas. TAFM

Tabla 3.3: Tiempo computacional TAFM

Número de captura d	Constante de complementariedad c	Tiempo computacional (s)
2	1	225.08
4	1,2	314.93
8	1,2,3	510.05
16	1,2,3,4	920.28

que estos maximizan la calidad de la reconstrucción. Por otra parte, la Tabla 3.4 indica que el algoritmo que emplea menos tiempo de procesamiento es el Algoritmo TAFM, por el contrario, el Algoritmo TWFM utiliza mas tiempo computacional para reconstruir la fase de la señal de interés.

Por último, en la Figura 23 se comparan los resultados obtenidos con la apertura codificada óptima, la cual está constituida por un número de captura $d = 4$ y una constante de complementariedad $c = 2$. Note que el mejor desempeño se presenta cuando los patrones de difracción codificados por la apertura codificada booleana son recuperados por el Algoritmo RWFM.

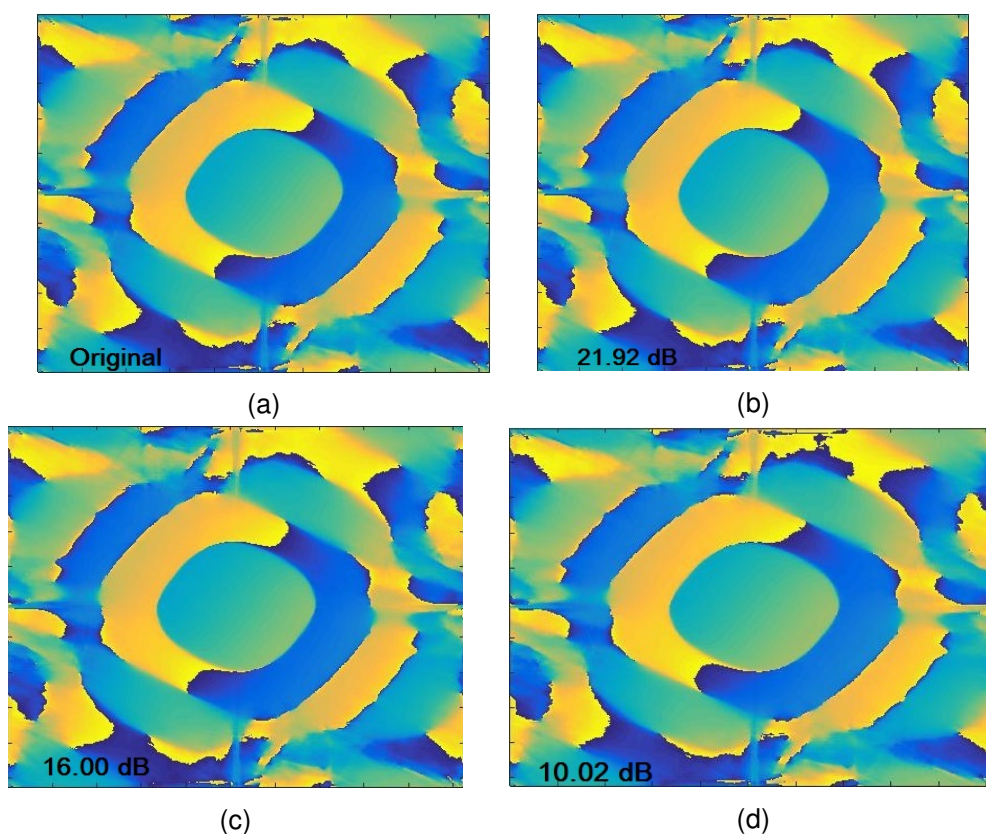


Figura 22: Reconstrucciones obtenidas usando las aperturas codificadas booleanas óptimas y el Algoritmo TAFM. (a) Imagen original, (b) $d = 4$ y $c = 2$, PSNR 21.92 dB, (c) $d = 8$ y $c = 4$, PSNR 16.00 dB, (d) $d = 16$ y $c = 8$, PSNR 10.02 dB,

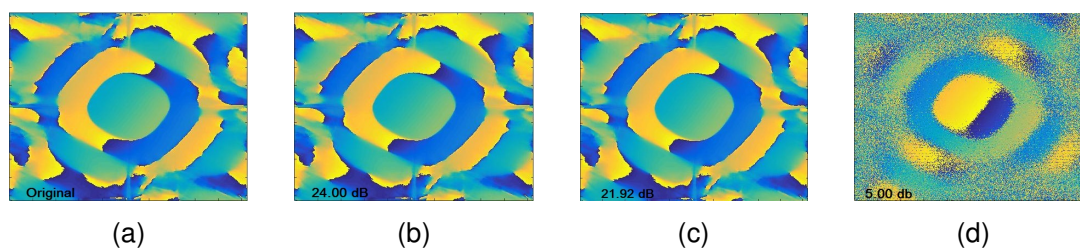


Figura 23: Reconstrucciones obtenidas usando la apertura codificada booleana óptima con $d = 4$ y $c = 2$ usando los Algoritmos. (a) Imagen original, (b) RWFM 24 dB, (c) TAFM 21.21 dB, (d) TWFM 5 dB

Tabla 3.4: Resumen de los resultados

Aperture codificada con		TAFM		RWFM		TWFM	
		PSNR dB	Tiempo (s)	PSNR dB	Tiempo (s)	PSNR dB	Tiempo (s)
$d = 2,$	$c = 1$	2	225.08	1.52	260.41	3.00	800.41
$d = 4,$	$c = 2$	21.92	314.93	24.00	414.26	5.00	1310.07
$d = 8,$	$c = 4$	16	510.05	16.00	613.88	4.53	1730.87
$d = 16,$	$c = 8$	10.02	920.28	10.00	1215.06	4.42	2305.15

Capítulo 4

CONCLUSIONES

Se ha introducido un nuevo diseño de apertura codificada Booleana utilizando el método *detour-Phase*, que haciendo uso de los algoritmos modificados *Truncated Wirtinger Flow* (TWFM), *Reshaped Wirtinger Flow* (RWFM) y *Truncated Amplituded Flow* (TAFM) se resuelve el problema de la recuperación de la fase de los patrones de difracción codificados. Además, en general el rendimiento más alto en la recuperación de la fase se obtuvo utilizando la apertura codificada diseñada con un número de capturas $d = 4$ y una constante de complementariedad $c = 2$, exhibiendo un rendimiento en la recuperación de la fase de 24.00 dB con el Algoritmo RWFM, 21.92 dB con el Algoritmo TAFM y 5.00 dB con el Algoritmo TWFM. Además, el mejor desempeño se logró usando el algoritmo RWF, el cual proporcionando el mejor rendimiento en la reconstrucción de hasta 24 dB de PSNR. Por otra parte, las aperturas codificadas booleanas diseñadas en este proyecto, tienen un mejor rendimiento cuando el número de capturas d es el doble de la constante de complementariedad c . Por último, los tiempos de computo usando los algoritmos TAFM Y RWFM fueron bastantes similares y reducidos en comparación con el algoritmo TWFM, el gasta un tiempo de procesamiento de aproximadamente 3 veces de lo que emplean los algoritmos RWFM Y TAFM.

Bibliografía

- [1] Arguello, H., and Arce, G. R. Colored coded aperture design by concentration of measure in compressive spectral imaging. *IEEE Transactions on Image Processing* 23, 4 (2014), 1896–1908.
- [2] Becker, J., Bremholm, M., Tyrsted, C., Pauw, B., Jensen, K., Eltzholt, J., Christensen, M., and Iversen, B. B. Experimental setup for in situ x-ray saxs/waxs/pdf studies of the formation and growth of nanoparticles in near-and supercritical fluids. *Journal of Applied Crystallography* 43, 4 (2010), 729–736.
- [3] Bloss, F. D. *An introduction to the methods of optical crystallography*. Holt Rinehart and Winston, 1961.
- [4] Brady, D. J. *Optical imaging and spectroscopy*. John Wiley & Sons, 2009.
- [5] Candes, E. J., Eldar, Y. C., Strohmer, T., and Voroninski, V. Phase retrieval via matrix completion. *SIAM review* 57, 2 (2015), 225–251.
- [6] Candes, E. J., Li, X., and Soltanolkotabi, M. Phase retrieval from coded diffraction patterns. *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39, 2 (2015), 277–299.
- [7] Candes, E. J., Li, X., and Soltanolkotabi, M. Phase retrieval from coded diffraction patterns. *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39, 2 (2015), 277–299.
- [8] Candes, E. J., Li, X., and Soltanolkotabi, M. Phase retrieval via wirtinger flow: Theory and algorithms. *IEEE Transactions on Information Theory* 61, 4 (2015), 1985–2007.
- [9] Cernik, R. J., Clegg, W., Catlow, C. R. A., Bushnell-Wye, G., Flaherty, J. V., Greaves, G. N., Burrows, I., Taylor, D. J., Teat, S. J., and Hamichi, M. A new high-flux chemical and materials crystallography station at the srs daresbury. 1. design, construction and test results. corrigendum. *Journal of Synchrotron Radiation* 7, 1 (2000), 40–40.
- [10] Chen, Y., and Candes, E. Solving random quadratic systems of equations is nearly as easy as solving linear systems. In *Advances in Neural Information Processing Systems* (2015), pp. 739–747.

- [11] Drenth, J. *Principles of protein X-ray crystallography*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [12] Drenth, J. *Principles of protein X-ray crystallography*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [13] Fu, C., Arguello, H., Sadler, B. M., and Arce, G. R. Compressive spectral polarization imaging by a pixelized polarizer and colored patterned detector. *JOSA A* 32, 11 (2015), 2178–2188.
- [14] Galvis-Carreño, D. F., Mejía-Melgarejo, Y. H., and Arguello-Fuentes, H. Efficient reconstruction of raman spectroscopy imaging based on compressive sensing. *Dyna* 81, 188 (2014), 116–124.
- [15] Gang, Y. C. Solving systems of random quadratic equations via truncated amplitude flow.
- [16] Goodman, J. W. *Introduction to Fourier optics*. Roberts and Company Publishers, 2005.
- [17] Greenberg, J. A., Krishnamurthy, K., Lakshmanan, M., MacCabe, K., Wolter, S., Kapadia, A., and Brady, D. Coding and sampling for compressive x-ray diffraction tomography. In *SPIE Optical Engineering+ Applications* (2013), International Society for Optics and Photonics, pp. 885813–885813.
- [18] Huishuai Zhang, Yi Zhou, Y. L. Y. C. Reshaped wirtinger flow and incremental algorithm for solving quadratic system of equations. *Machine Learning Research* 2 (2016).
- [19] Li, T., Senesi, A. J., and Lee, B. Small angle x-ray scattering for nanoparticle research. *Chemical reviews* 116, 18 (2016), 11128–11180.
- [20] MacCabe, K. P., Holmgren, A. D., Tornai, M. P., and Brady, D. J. Snapshot 2d tomography via coded aperture x-ray scatter imaging. *Applied optics* 52, 19 (2013), 4582–4589.
- [21] Poon, T.-C., and Liu, J.-P. *Introduction to modern digital holography: with MATLAB*. Cambridge University Press, 2014.
- [22] Rodriguez, J. B., Arce, G. R., and Lau, D. L. Blue-noise multitone dithering. *IEEE Transactions on Image Processing* 17, 8 (2008), 1368–1382.
- [23] Samuel Pinilla, Camilo Noriega, H. A. Stochastic truncated wirtinger flow algorithm for phase retrieval using boolean coded apertures.
- [24] Smyth, M., and Martin, J. x ray crystallography. *Journal of Clinical Pathology* 53, 1 (2000), 8.