

ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN PARA RECUPERAR UNA SEÑAL COMPLEJA
A PARTIR DE PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS EN
CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

JHON JAMES ANGARITA PALLARES

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
MAESTRÍA EN MATEMÁTICA APLICADA
BUCARAMANGA

2021

ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN PARA RECUPERAR UNA SEÑAL COMPLEJA
A PARTIR DE PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS EN
CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

JHON JAMES ANGARITA PALLARES

Trabajo de Grado para optar al título de
Magíster en Matemática Aplicada

Director

Henry Arguello Fuentes

Ph.D. Electrical and Computer Engineering

Co-Director

Samuel Pinilla Sanchez

Ph.D. Ingeniería Electrónica

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

MAESTRÍA EN MATEMÁTICA APLICADA

BUCARAMANGA

2021

DEDICATORIA

Este trabajo va dedicado al camino de la vida quien me ha dado tantas enseñanzas y aprendizajes a través de mis caídas y éxitos. También a mi querida madre quien es mi fuente de inspiración.

En especial reconozco la guía de Dios en mi camino de vida.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco el apoyo incondicional de mi querida madre. Es un ejemplo a seguir.

Ofrezco mi total gratitud a mi director de trabajo de investigación por permitirme hacer parte de la familia HDSP. También, ofrezco un reconocimiento especial a mi co-director por dedicar su tiempo y conocimiento en la guía de mi proyecto.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	11
1. OBJETIVOS	16
1.1. Objetivo general	16
1.2. Objetivos específicos	16
2. MARCO TEÓRICO	17
2.1. DIFRACCIÓN	17
2.1.1. Aproximación de Fresnel y Fraunhofer.	20
2.2. DIFRACCIÓN EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X	21
2.2.1. Recuperación de la fase.	23
2.2.2. Modelo discreto.	24
3. SISTEMA DE ADQUISICIÓN DE PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X	26
3.1. LIMITACIONES DE LA RECUPERACIÓN DE LA FASE	26
3.2. PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS	26
3.3. REPRESENTACIÓN ESCASA DE UNA SEÑAL COMPLEJA EN EL DOMINIO DE FOURIER	28
3.4. ALGORITMOS DE RECUPERACIÓN DE LA FASE	30
3.4.1. Algoritmo SPARTA	31
3.4.2. Algoritmo SWF	31
3.4.3. Algoritmo SPRSF	32
4. METODOLOGÍA DE MULTI-RESOLUCIÓN	34

4.1. ESTIMACIÓN DE LOS COEFICIENTES DISTINTOS DE CERO	34
4.2. CONSTRUCCIÓN DE SÚPER-PÍXELES	36
4.2.1. Algoritmo de decimación rectangular.	37
4.2.2. Matriz de decimación usando K-means	38
4.3. ALGORITMO DE RECONSTRUCCIÓN	41
5. SIMULACIONES Y RESULTADOS	44
5.1. ESTIMACIÓN DE LOS COEFICIENTES DISTINTOS DE CERO	45
5.2. NIVEL DE DECIMACIÓN	46
5.3. RECUPERACIÓN EXITOSA	47
5.4. COMPARACIÓN DE TIEMPO DE RECONSTRUCCIÓN	48
6. CONCLUSIONES	50
BIBLIOGRAFÍA	51

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Geometría de difracción	17
Figura 2. Configuración ilustrativa para adquirir los patrones de difracción.	22
Figura 3. Estructura esquemática de un sensor de imagen CCD/CMOS.	24
Figura 4. Configuración ilustrativa para adquirir el patrón de difracción codificado en XC	27
Figura 5. Medidas de intensidad real $ \mathbf{F}\mathbf{D}\mathbf{x} ^2$ en XC, donde $\mathbf{D} = \mathbf{I}$ la matriz identidad. Los píxeles blancos y negros representan elementos de baja y alta intensidad, respectivamente.	29
Figura 6. Ilustración de la estrategia de multi-resolución agrupando conjuntos de píxeles cero de la representación escasa. Los píxeles distintos de cero no están agrupados.	37
Figura 7. Configuración ilustrativa de súper-píxeles usando K-means.	40
Figura 8. Comparación entre los niveles de decimación usando el algoritmo de decimación rectangular y el algoritmo de decimación basado en K-means.	42
Figura 9. Rendimiento de algunas variables aleatorias admisibles que estiman los coeficientes distintos de cero de la representación escasa.	45
Figura 10. Probabilidad de recuperación frente al nivel de compresión q vs escasez k .	46
Figura 11. Probabilidad de recuperación frente al nivel de escasez (k).	47
Figura 12. Tiempo de reconstrucción de los algoritmos basados en decimación frente al nivel de dispersión de θ .	49

GLOSARIO

APERTURA CODIFICADA: Elemento óptico que modula una señal ó un frente de onda. Esta modulación consiste en cambiar o bloquear el haz difractado.

CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X: Técnica experimental usada en el análisis de materiales para determinar la estructura tridimensional de un cristal.

PATRONES DE DIFRACCIÓN EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X: Haz difractado por un cristal cuando este es irradiado por una fuente de rayos X.

PÍXEL: Menor unidad homogénea que forma parte de una imagen digital.

RECUPERACIÓN DE LA FASE: Problema inverso mal condicionado el cual consiste en recuperar una señal a partir de medidas intensidad sin fase.

SEÑAL ESCASA: Señal con pocos coeficientes distintos de ceros.

SÚPER-PÍXEL: Agrupamiento de un conjunto de coeficientes (píxeles) de una señal en un solo píxel.

RESUMEN

TÍTULO: ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN PARA RECUPERAR UNA SEÑAL COMPLEJA A PARTIR DE PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X *

AUTOR: JHON JAMES ANGARITA PALLARES **

PALABRAS CLAVE: CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X, RECUPERACIÓN DE LA FASE, SÚPER-PÍXELES, REPRESENTACIÓN ESCASA.

DESCRIPCIÓN:

La recuperación de la fase (PR, de sus siglas en inglés *Phase Retrieval*) es un problema presente en muchas aplicaciones como óptica, imágenes astronómicas, biología computacional y cristalografía de rayos X (XC, de sus siglas en inglés *X-ray Crystallography*). Este último es el objeto de estudio de este proyecto. PR en cristalografía de rayos X es un problema inverso mal condicionado que consiste en recuperar una señal compleja a partir de medidas de intensidad sin fase capturadas en un sensor óptico. Recientemente, se ha demostrado que una señal en XC se puede representar de forma escasa en el dominio de Fourier. Este hecho implica que el número de medidas de intensidad requeridas para recuperar la fase en XC está determinada por la escasez de la señal en el dominio Fourier, la cual es mucho más pequeña que el tamaño de la misma. Sin embargo, la complejidad computacional de los algoritmos para recuperar la fase aún depende del tamaño de la señal a reconstruir, lo que implica una mayor complejidad computacional y elevados tiempos de cómputo. Por lo tanto, este trabajo propone un algoritmo de reconstrucción que explota la escasez de la señal al agrupar conjuntos de píxeles en su representación escasa, llamados súper-píxeles, con el fin de reducir el número total de incógnitas en el problema inverso. De esta forma, disminuir sustancialmente el costo computacional de su reconstrucción.

* Trabajo de Investigación

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Henry Arguello Fuentes, Ph.D. Electrical and Computer Engineering. Co-Director: Samuel Pinilla Sanchez, Ph.D. Ingeniería Electrónica.

ABSTRACT

TITLE: OPTIMIZATION ALGORITHM TO RETRIEVE A COMPLEX SIGNAL FROM CODED DIFFRACTION PATTERNS IN X-RAY CRYSTALLOGRAPHY *

AUTHOR: JHON JAMES ANGARITA PALLARES **

KEYWORDS: X-RAY CRYSTALLOGRAPHY, PHASE RETRIEVAL, SUPER-PIXELS, SPARSE REPRESENTATION .

DESCRIPTION:

Phase retrieval (PR) is a problem present in many applications such as optics, astronomical imaging, computational biology and X-ray crystallography (XC). The latter is the object of study of this project. PR in X-ray crystallography is an ill-posed inverse problem that consists on recovering a complex signal from phaseless measurements captured in an optical sensor. Recently, it has been shown that a signal in XC can be sparsely represented in the Fourier domain. This fact implies that the number of required measurements to retrieve the phase is determined by the signal sparsity, which is much smaller than its size. However, the computational complexity to retrieve the phase still depends on the size of the signal to be reconstructed, which implies more time to solve this problem in XC. Therefore, this work proposes a reconstruction algorithm that exploits the sparsity of the signal by grouping sets of pixels in its sparse representation, called super-pixels, in order to reduce the total number of unknowns in the inverse problem, and thus, to substantially reduce the computational cost of its reconstruction.

* Research Work

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Henry Arguello Fuentes, Ph.D. Electrical and Computer Engineering. Co-Director: Samuel Pinilla Sanchez, Ph.D. Ingeniería Electrónica.

INTRODUCCIÓN

El problema de recuperación de la fase (PR, de sus siglas en inglés *Phase Retrieval*) es un desafío teórico presente en una amplia gama de aplicaciones de ingeniería y física, tales como imágenes ópticas ¹, astronomía ², imágenes de difracción coherente ³ y cristalografía de rayos X (XC, de sus siglas en inglés *X-ray Crystallography*) ⁴. En particular, XC es una técnica experimental ampliamente utilizada para determinar las estructuras tridimensionales (3D) de materiales cristalinos ⁵. Esta técnica permite determinar la disposición de los átomos dentro de un cristal a partir de la fase de los patrones de difracción ⁶. Conocer la fase en XC puede brindar información útil de la estructura molecular, adicionalmente, la habilidad para determinar esta estructura es tremendamente importante en varios campos que van desde la

-
- ¹ A. WALTHER. "The question of phase retrieval in optics". En: *Optica Acta: International Journal of Optics* 10.1 (1963), págs. 41-49.
- ² C. FIENUP y J. DAINITY. "Phase retrieval and image reconstruction for astronomy". En: *Image Recovery: Theory and Application* 231 (1987), pág. 275.
- ³ J. MIAO y P. CHARALAMBOUS. "Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens". En: *Nature* 400.6742 (1999), pág. 342.
- ⁴ H. A. HAUPTMAN. "History of x-ray crystallography". En: *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 10.1-2 (1991), págs. 13-18.
- ⁵ D. GALVIS, Y. MEJIA y H. ARGUELLO. "Efficient reconstruction of Raman spectroscopy imaging based on compressive sensing". En: *Dyna* 81.188 (2014), págs. 116-124.
- ⁶ M. SMYTH y J. MARTIN. "x Ray crystallography". En: *Journal of Clinical Pathology* 53.1 (2000), pág. 8.

ciencia de los materiales y la física de estado sólido ⁷ hasta la ciencia bioquímica ⁸ y el diseño de fármacos ⁹.

El patrón de difracción es un fenómeno físico que se genera por la interacción entre un cristal y un haz de rayos X ⁴. Este suceso se presenta debido a que la longitud de onda de los fotones de rayos X es del mismo orden de la distancia entre los núcleos atómicos en la estructura cristalina ¹⁰. En general, los sensores ópticos que miden las intensidades de los patrones de difracción no pueden medir la fase ¹¹. Entonces, la fase es típicamente recuperada utilizando algoritmos iterativos los cuales permiten construir un modelo 3D de la estructura molecular del cristal en estudio ¹²; además, la recuperación de una señal, dada su intensidad en el dominio de Fourier, se conoce como el problema de recuperación de fase. Las mediciones en Fourier provienen del hecho que en cristalografía de rayos X, su comportamiento se modela a partir de la ecuación de campo lejano, donde el campo óptico en el detector está bien aproximado por la transformada de Fourier del objeto de interés ¹³.

⁷ T. LI, A. SENESI y B. LEE. "Small angle X-ray scattering for nanoparticle research". En: *Chemical reviews* 116.18 (2016), págs. 11128-11180.

⁸ M. STEFIK. "Inferring DNA structures from segmentation data". En: *Artificial Intelligence* 11.1-2 (1978), págs. 85-114.

⁹ A. DAVIS, S. TEAGUE y G. KLEYWEGT. "Application and limitations of X-ray crystallographic data in structure-based ligand and drug design". En: *Angewandte Chemie International Edition* 42.24 (2003), págs. 2718-2736.

¹⁰ E. N. ECONOMOU. *The Physics of Solids: Essentials and Beyond*. Springer Science & Business Media, 2010.

¹¹ M. BORN y E. WOLF. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013.

¹² E. CANDÉS, X. LI y M. SOLTANOLKOTABI. "Phase retrieval from coded diffraction patterns". En: *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39.2 (2015), págs. 277-299.

¹³ T. POON y J. LIU. *Introduction to modern digital holography: with MATLAB*. Cambridge University Press, 2014.

Tradicionalmente, PR en XC presenta tres simetrías triviales: si la señal original se escala por una constante unimodular, o se desplaza, o se conjuga en el tiempo, se observa el mismo patrón de difracción ¹⁴. Las señales obtenidas por estas operaciones se consideran equivalentes, implicando un problema desafiante para garantizar una recuperación única. En efecto, es necesario capturar una gran cantidad de datos para garantizar que la señal estimada sea la señal verdadera. Recientemente, se ha demostrado que la fase se puede recuperar de manera más eficiente (hasta una constante unimodular global) a partir de mediciones adquiridas con arquitecturas que incluyen un elemento óptico conocido como apertura codificada ¹⁵, la cual es asumida como una matriz aleatoria. Este elemento modula los patrones de difracción de rayos X antes de ser medido por el sensor ¹⁶. Como resultado, se produce un patrón de difracción codificado (CDP). Hasta la fecha, las aperturas codificadas se han empleado con éxito en la recuperación de la fase ¹²¹⁵. Las aperturas codificadas se han aplicado para superar la no unicidad dadas las simetrías triviales presentes en el problema PR, desde que el desplazamiento espacial y el conjugado en el tiempo ya no ocurrirían ¹². Esto implica que recuperar la señal a partir de CDP es mucho más fácil en comparación con el sistema tradicional de XC.

En términos matemáticos, el problema de recuperación de fase en cristalografía de rayos X se puede formular como el problema de reconstruir una señal desconocida

¹⁴ Y. SHECHTMAN y col. "Phase retrieval with application to optical imaging: a contemporary overview". En: *IEEE signal processing magazine* 32.3 (2015), págs. 87-109.

¹⁵ E. J. CANDLES, X. LI y M. SOLTANOLKOTABI. "Phase retrieval via Wirtinger flow: Theory and algorithms". En: *IEEE Transactions on Information Theory* 61.4 (2015), págs. 1985-2007.

¹⁶ E. J. CANDLES, X. LI y M. SOLTANOLKOTABI. "Phase retrieval from coded diffraction patterns". En: *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39.2 (2015), págs. 277-299.

de valores complejos $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ a partir de un conjunto de proyecciones cuadráticas absolutas dadas por $\mathbf{y} = |\mathbf{F}\bar{\mathbf{D}}\mathbf{x}|^2$, donde $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}/\mathbb{C}^{n \times n}$ es la apertura codificada diseñada como una matriz diagonal, $(\bar{\cdot})$ es la operación transpuesta conjugada y $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ es la matriz de transformación de Fourier. Debido a la pérdida de la información de la fase de Fourier, el problema de PR es mal condicionado.

Particularmente, este trabajo muestra que la imagen en XC se puede representar de manera escasa en el dominio de Fourier, es decir, $\|\boldsymbol{\theta}\|_0 = k \ll n$, donde $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{F}\mathbf{x}$, y $\|\cdot\|_0$ es la pseudonorma ℓ_0 , siendo un indicador de los coeficientes distintos de cero. Este hecho implica que el número de mediciones codificadas requeridas para recuperar la fase en XC está determinado por la escasez, que es mucho más pequeña que el tamaño de la imagen. Sin embargo, la complejidad computacional para recuperar la fase aún depende del tamaño de la señal a reconstruir, implicando largos tiempos de reconstrucción para XC. En efecto, suponiendo una señal con un tamaño mas grande que n , con escasez k , el costo computacional de su reconstrucción será más alto comparado con la señal de tamaño n , así tengan la misma escasez.

Este trabajo propone un algoritmo de reconstrucción que explota la dispersión k de la imagen al agrupar conjuntos de píxeles, llamados súper-píxeles, en la representación escasa, para sustancialmente reducir el numero total de incógnitas en el problema inverso. El concepto de super-píxel se ha utilizado previamente para comprimir imágenes como agrupamientos iterativos lineales simples ¹⁷ e imágenes espectrales compresivas ¹⁸. Además, vale la pena mencionar que estos trabajos del estado del arte operan directamente sobre la escena; en contraste, nuestra metodología

¹⁷ R. ACHANTA, A. SHAJI y K. SMITH. *Slic superpixels*. Inf. téc. 2010.

¹⁸ H. GARCIA, C. V. CORREA y H. ARGUELLO. "Multi-Resolution Compressive Spectral Imaging Reconstruction From Single Pixel Measurements". En: *IEEE Transactions on Image Processing* 27.12 (2018), págs. 6174-6184.

se enfoca en procesar la representación escasa haciendo que este proyecto sea el primero en su tipo. Adicionalmente, un enfoque de super-píxel no se ha extendido hasta la fecha al problema de PR.

Resultados numéricos demuestran que el método propuesto conlleva una reducción del tiempo de reconstrucción de hasta un 92 % menos tiempo de cómputo en comparación con los esquemas sin súper-píxeles. Además, la metodología de recuperación propuesta obtiene una mayor tasa de recuperación exitosa que las contrapartes de última generación.

1. OBJETIVOS

1.1. Objetivo general

- Diseñar un algoritmo de reconstrucción de la representación decimada de una señal compleja escasa en el dominio de Fourier a partir de patrones de difracción codificados en cristalografía de rayos X.

1.2. Objetivos específicos

- Determinar un modelo matemático de un sistema de patrones de difracción codificados para cristalografía de rayos X.
- Desarrollar una estrategia estadística para la estimación de la representación escasa de una señal compleja en el dominio de Fourier a partir de patrones de difracción codificados.
- Diseñar un algoritmo para la construcción de una matriz de decimación para disminuir la resolución espacial de la representación escasa de un señal.
- Determinar teóricamente características de diseño optimizado de las aperturas codificadas para la estimación de la representación escasa en el dominio de Fourier.
- Evaluar el rendimiento del diseño de aperturas codificadas diseñadas con no diseñadas en términos de la estimación de la representación escasa.
- Desarrollar un algoritmo de reconstrucción a partir de las medidas adquiridas de aperturas codificadas optimizadas usando el esquema de decimación diseñado.

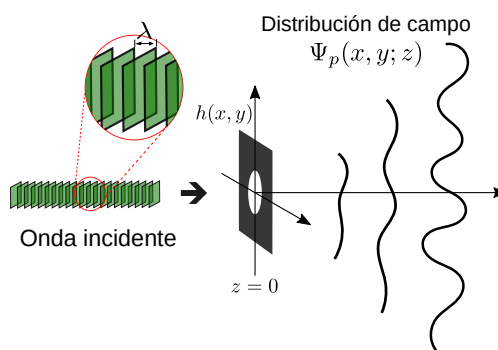
2. MARCO TEÓRICO

El presente capítulo introduce los aspectos generales y teóricos que son fundamentales para el desarrollo del proyecto de investigación, tales como: teoría de la difracción y su modelado matemático, y cristalografía de rayos X.

2.1. DIFRACCIÓN

Considere una onda plana incidente sobre una apertura o una pantalla de difracción, es decir, una pantalla opaca con algunas aperturas que permiten el paso de la luz a través de esta. 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 ¹³. Asuma que la apertura está representada por una transparencia con una amplitud, a menudo denominada función de transparencia ¹⁹, dada por $h(x, y)$, situada en el plano $z = 0$ como se muestra en la Figura 1.

Figura 1. Geometría de difracción: $h(x, y)$ es una pantalla de difracción.



¹⁹ J. W. GOODMAN. *Introduction to Fourier optics*. Roberts y Company Publishers, 2005.

Sea $Ae^{j\omega_0 t}$ la función que describe una onda plana, de amplitud compleja A y frecuencia angular ω_0 , que incide en la apertura $h(x, y)$. La distribución de campo inmediatamente después de la apertura es $\Psi(x, y, z = 0, t) = Ah(x, y)e^{j\omega_0 t}$ ¹⁹, donde, $h(x, y)$ es una función compleja que modifica la distribución del campo incidente, suponiendo que la transparencia es infinitamente delgada¹³. Para desarrollar $\Psi(x, y, z = 0, t)$ matemáticamente, escribimos

$$\Psi(x, y, z = 0, t) = \Psi_{p0}(x, y)e^{j\omega_0 t}, \quad (1)$$

donde $\Psi_{p0}(x, y) = Ah(x, y)$ 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

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi_p(x, y, z)e^{j\omega_0 t}, \quad (2)$$

donde $\Psi_p(x, y, z)$ es desconocido. Para encontrar $\Psi_p(x, y, z)$, se sustituye la Ecuación (2) en la ecuación de onda tridimensional, para obtener la ecuación de *Helmholtz* para $\Psi_p(x, y, z)$ ¹³¹⁹, la cual es dada por

$$\frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_p}{\partial z^2} + k_0^2 \Psi_p = 0, \quad (3)$$

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

$$\mathcal{F}\{f(x, y)\} = F(k_x, k_y) = \iint_{-\infty}^{\infty} f(x, y)e^{jk_x x + jk_y y} dx dy, \quad (4)$$

y la transformación de Fourier inversa es dada por

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(k_x, k_y)\} = f(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} F(k_x, k_y) e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y, \quad (5)$$

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 bi-dimensional de la Ecuación (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

$$\Psi_p(k_x, k_y, z) = \Psi_{p0}(k_x, k_y) \mathcal{H}(k_x, k_y, z), \quad (6)$$

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 ¹³¹⁹. Por lo tanto, la amplitud compleja $\Psi_p(x, y, z)$ viene dada por la transformada de Fourier inversa de la Ecuación (6)

$$\begin{aligned} \Psi_p(x, y, z) &= \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_p(k_x, k_y, z)\} = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_{p0}(k_x, k_y) \mathcal{H}(k_x, k_y, z)\} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(k_x, k_y) e^{-jk_0 \sqrt{(1-k_x^2/k_0^2 - k_y^2/k_0^2)}z} e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y. \end{aligned} \quad (7)$$

La ecuación (7) es un resultado muy importante ya que para una distribución de campo dada en el 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 a lo largo de este.

2.1.1. 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

$$\sqrt{(1 - k_x^2/k_0^2 - k_y^2/k_0^2)} \approx 1 - k_x^2/2k_0^2 - k_y^2/2k_0^2. \quad (8)$$

Entonces la Ecuación (7) se puede reescribir como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(k_x, k_y) e^{-jk_0 z + j(k_x^2 + k_y^2)z/2k_0} e^{-jk_x x - jk_y y} dk_x dk_y, \quad (9)$$

la cual puede expresarse de manera compacta como

$$\Psi_p(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_{p0}(k_x, k_y)H(k_x, k_y, z)\}, \quad (10)$$

donde $H(k_x, k_y, z) = e^{-jk_0 z} e^{j(k_x^2 + k_y^2)z/2k_0}$. Además, $H(k_x, k_y, z)$ se denomina la función de transferencia espacial de frecuencia en la óptica de Fourier ¹³¹⁹. Para encontrar la transformada inversa de la Ecuación (9), esta se puede reexpresar en términos de la amplitud compleja inicial $\Psi_{p0}(x, y)$ como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0 z} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{-jk_0/2z[(x-x')^2 + (y-y')^2]} dx' dy', \quad (11)$$

la cual puede expresarse como

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0 z} e^{\frac{-jk_0}{2z}[x^2 + y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{-jk_0}{2z}[(x')^2 + (y')^2]} e^{\frac{jk_0}{z}(xx' + yy')} dx' dy'. \quad (12)$$

La Ecuación (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 (12) se puede simplificar como sigue

$$\Psi_p(x, y, z) = \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0 z} e^{\frac{-jk_0}{2z}[x^2 + y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z}(xx' + yy')} dx' dy'. \quad (13)$$

La Ecuación (13) se denomina fórmula de difracción de Fraunhofer y es el caso límite de la difracción de Fresnel ¹³¹⁹. Por lo tanto, la Ecuación (13) se denomina aproximación de Fraunhofer o aproximación de campo lejano, ya que la difracción se observa a una distancia lejana.

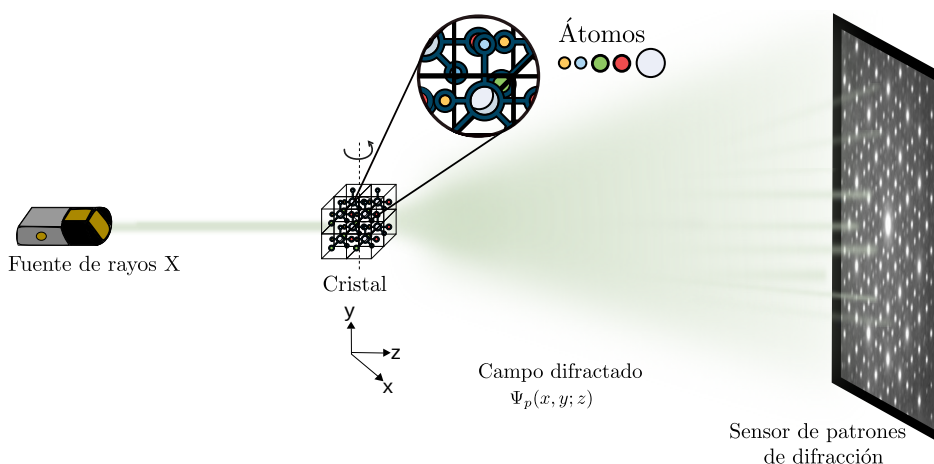
En resumen, esta sección presentó el fenómeno de difracción, y las diferentes aproximaciones en la teoría clásica de la óptica de Fourier. Además, el concepto de campo cercano se da cuando la difracción se observa cerca de una apertura ó de un obstáculo, y este se denomina diagrama de difracción de Fresnel. 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 la ciencia de los materiales ⁷, debido a que la amplitud de campo difractado corresponde con los patrones de difracción en cristalografía ²⁰, la cual se explicará en la siguiente sección.

2.2. DIFRACCIÓN EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

Cristalografía de rayos X (XC) es una técnica experimental ampliamente utilizada para determinar la estructura tridimensional (3D) de un cristal. Esta técnica se basa en la difracción de rayos X para determinar la disposición de los átomos dentro de

²⁰ M. SMYTH y J. MARTIN. "x Ray crystallography". En: *Journal of Clinical Pathology* 53.1 (2000), pág. 8.

Figura 2. Configuración ilustrativa para adquirir los patrones de difracción.



un cristal a partir de la fase de sus patrones de difracción ²¹, un suceso que ocurre debido que la longitud de onda de los fotones de rayos X es del mismo orden de la distancia entre los núcleos atómicos en la estructura cristalina ¹⁰. La capacidad de determinar la estructura molecular es tremendamente importante en varios campos que van desde la ciencia de los materiales y la física de estado sólido ⁷ hasta la ciencia bioquímica ⁸ y el diseño de fármacos ⁹.

La Figura 2 ilustra el proceso de captura de los patrones de difracción en cristalografía de rayos X. En una medición de XC, un cristal está montado sobre un goniómetro y se hace girar gradualmente mientras que es irradiado con rayos X, el cristal dispersa el haz incidente en direcciones diferentes y con diferentes intensidades que están determinadas por los parámetros de su estructura molecular ⁴. De esta forma se produce un patrón de difracción de puntos regularmente espaciados ²². Estos

²¹ R. P. MILLANE. "Phase retrieval in crystallography and optics". En: *JOSA A* 7.3 (1990), págs. 394-411.

²² J. BECKER y M. BREMHOLM. "Experimental setup for in situ X-ray SAXS/WAXS/PDF studies of the formation and growth of nanoparticles in near-and supercritical fluids". En: *Journal of Applied Crystallography* 43.4 (2010), págs. 729-736.

rayos dispersos golpean placas fotográficas, detectores CCD (dispositivo de carga acoplada) u otros sensores de luz, provocando una pigmentación en los puntos de impacto, y la cantidad de la pigmentación dependerá de las intensidades de los rayos dispersos. En este sentido, se obtienen los patrones de difracción: las direcciones, intensidades y fases de los rayos dispersos.

Las imágenes bidimensionales tomadas en diferentes rotaciones se convierten en un modelo tridimensional de la densidad de electrones dentro del cristal. En general los sensores ópticos solo pueden medir las intensidades de los patrones de difracción. Así, la amplitud del campo difractado en la zona del detector, de acuerdo a la Figura 2, y la formula de difracción de Fraunhofer en la Ecuación (13), está dada por

$$\begin{aligned}
 |\Psi_p(x, y, z)|^2 &= \left| \frac{jk_0}{2\pi z} e^{-jk_0 z} e^{\frac{-jk_0}{2z} [x^2 + y^2]} \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z} (xx' + yy')} dx' dy' \right|^2 \\
 &= \frac{k_0}{2\pi z} \left| \iint_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p0}(x', y') e^{\frac{jk_0}{z} (xx' + yy')} dx' dy' \right|^2 \\
 &= \frac{k_0}{2\pi z} |\mathcal{F}\{\Psi_{p0}(x, y)\}|^2 \\
 &\propto |\mathcal{F}\{\Psi_{p0}(x, y)\}|^2.
 \end{aligned} \tag{14}$$

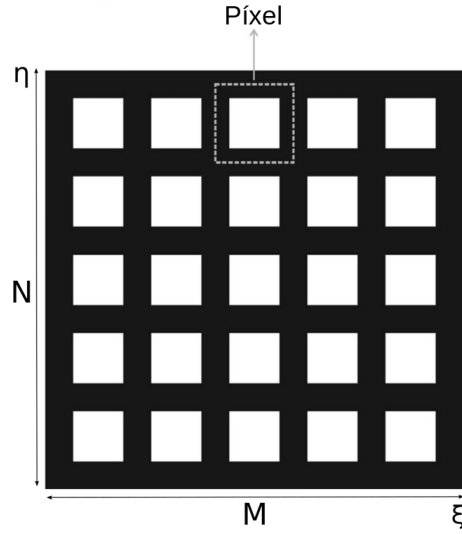
2.2.1. Recuperación de la fase. Debido a las limitaciones de los detectores, y de acuerdo a la Ecuación (14) la fase de los patrones de difracción se pierde en el proceso de grabado, esto constituye el problema de la recuperación de la fase. La señal de interés $\Psi_{p0}(x, y)$ debe ser recuperada a través de la solución de un problema inverso mal condicionado.

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 (14). El modelo discreto se presenta en la sección 2.2.2.

2.2.2. Modelo discreto. Esta sección presenta la amplitud del campo difractado capturado por un arreglo bidimensional finito de pixeles el cual se ilustra en la Figura 3 (modificado de ¹³).

Figura 3. Estructura esquemática de un sensor de imagen CCD/CMOS.



Fuente: 13.

Suponga que el píxel 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 (14) se expresa como

$$|\Psi_p(m\Delta x, n\Delta y, z)|^2 \propto \left| \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=1}^{N-1} \Psi_{p0}(k\Delta x, l\Delta y) e^{-2j\pi\left(\frac{km}{M} + \frac{ln}{N}\right)} \right|^2, \quad (15)$$

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

$$\begin{aligned}\mathbf{X}[m, n] &= \Psi_{p0}(m\Delta x, n\Delta y) \\ \mathbf{Y}[m, n] &= |\Psi_p(m\Delta x, n\Delta y, z)|^2,\end{aligned}\tag{16}$$

entonces la Ecuación (15) puede reescribirse como

$$\mathbf{Y} \propto |\text{DFT}_{2D}(\mathbf{X})|^2,\tag{17}$$

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 (17) puede aproximarse como

$$\bar{\mathbf{y}} \propto |\mathbf{F}\bar{\mathbf{x}}|^2,\tag{18}$$

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 (18) es el modelo de sensado típico en el problema de la recuperación de la fase. Observe que en la Ecuación (18) solo se captura la amplitud del campo difractado.

3. SISTEMA DE ADQUISICIÓN DE PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS EN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

Este capítulo describe una arquitectura para la captura de patrones de difracción codificados propuesta en ¹⁶. Esta arquitectura incluye un elemento óptico conocido como apertura codificada. Además, se modela de manera teórica la captura de los patrones codificados de difracción.

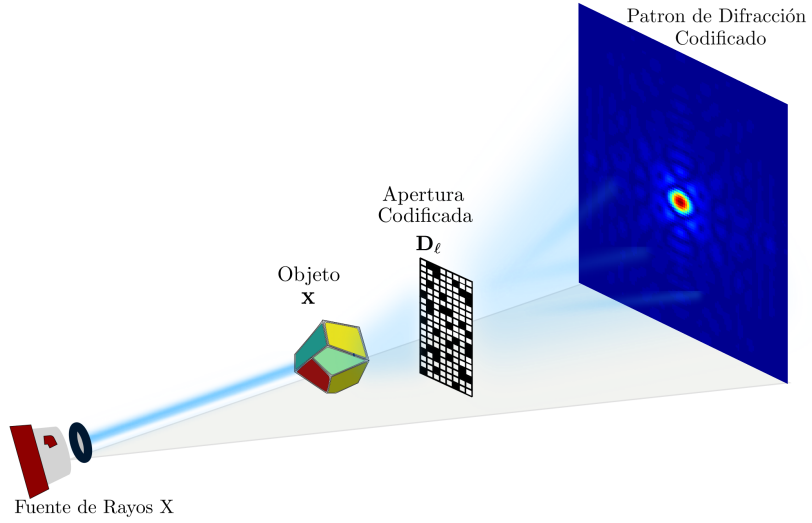
3.1. LIMITACIONES DE LA RECUPERACIÓN DE LA FASE

Recuperar una señal compleja a partir de las medidas de intensidad en (18), en general, no conduce a una solución única. Este problema inverso exhibe tres ambigüedades. Específicamente, si la señal original $\mathbf{x}$ se escala por una constante unimodular, o se desplaza, o se conjuga en el tiempo, entonces se observa el mismo patrón de difracción ¹⁴. Los autores de ¹⁵ han mostrado que la fase puede ser recuperada de manera más eficiente (hasta una constante unimodular global) a partir de mediciones adquiridas con arquitecturas que incluyen un elemento óptico conocido como apertura codificada, la cual es asumida ser una matriz aleatoria. Quiere decir que $\mathbf{x}$ solo puede ser recuperada hasta una ambigüedad de fase global como $\mathbf{x}e^{j\phi}$ para algún $\phi \in [0, 2\pi]$. La modulación de los patrones consiste en cambiar la fase o bloquear el haz difractado, lo que produce patrones de difracción codificados ¹².

3.2. PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS

La Figura 4 muestra el sistema de adquisición de patrones de difracción codificados propuesto en ¹² para estimar de manera eficiente la fase en XC. Los elementos prin-

Figura 4. Configuración ilustrativa para adquirir el patrón de difracción codificado en XC



Los componentes principales del sistema son la fuente de rayos X, la apertura codificada $D \in \mathbb{R}^{n \times n} / \mathbb{C}^{n \times n}$ y el sensor bidimensional $Y \in \mathbb{R}^{n \times n}$. La apertura codificada D modula la señal $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ obteniendo la señal codificada $D \odot X$, donde $\odot$ 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 Y . Específicamente, las mediciones del detector considerando la Ecuación (18) están dadas por

$$\bar{y} = |\mathbf{F}\bar{D}\bar{x}|^2, \quad (19)$$

donde $\bar{D} \in \mathbb{R}^{n \times n} / \mathbb{C}^{n \times n}$ (con $n = \sqrt{n}$ para fácil explicación) es modelada como una matriz diagonal con entradas $\{d[0], d[1], \dots, d[n-1]\}$, correspondiente a la vectorización de la matriz D . Adicionalmente, $\bar{y} \in \mathbb{R}^n$ y $\bar{x} \in \mathbb{C}^n$ son las vectorizaciones de las matrices Y y X respectivamente.

Observe que los patrones de difracción codificados en la Ecuación (19) son capturados en una única proyección. El sistema de patrones de difracción de rayos X

codificados de la Figura 4 permite obtener varias proyecciones cambiando la apertura codificada. Luego, considere el esquema de recopilación de datos en el que son utilizadas varias modulaciones cambiando la apertura codificada. Para ser preciso, sea L el número de proyecciones, y $\mathbf{D}_\ell$ sea un apertura codificada con una arreglo espacial diferente en la correspondiente proyección ℓ -th con $\ell = 1, \dots, L$. Entonces, la Ecuación (19), incluyendo la apertura codificada especificada $\mathbf{D}_\ell$, puede ser reescrita como

$$\bar{y}_\ell = |\mathbf{F}\bar{\mathbf{D}}_\ell\bar{\mathbf{x}}|^2, \quad \ell = 1, \dots, L. \quad (20)$$

Así, de la Ecuación (20) el sistema de capturas de patrones de difracción codificados, ilustrado en la Figura 4, se considera de múltiples capturas. Observe que, a partir de (20), solo recopilamos un conjunto de mediciones de intensidad (o energía) y perdemos la información de fase de $\bar{y}_\ell$. Definiendo $\mathbf{y} = [\bar{\mathbf{y}}_1^T, \dots, \bar{\mathbf{y}}_L^T]^T \in \mathbb{R}^m$ con $m = nL$ y la matriz de mediciones $\mathbf{A} = [\bar{\mathbf{D}}_1\mathbf{F}, \dots, \bar{\mathbf{D}}_L\mathbf{F}]^T$, entonces, se puede reescribir el modelo cuadrático en (20) como

$$\mathbf{y} = |\mathbf{A}\mathbf{x}|^2, \quad (21)$$

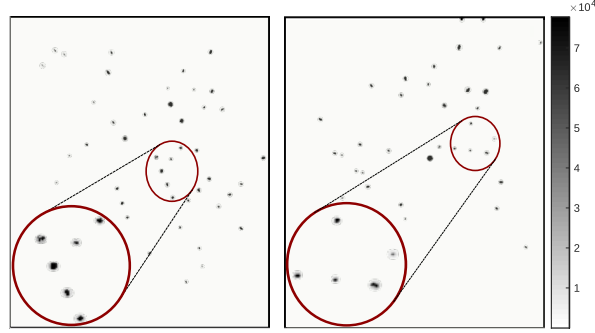
donde cada fila de $\mathbf{A}$ es dada por $\mathbf{a}_i = \bar{\mathbf{D}}_{r_i}\mathbf{f}_{u_i}$ con $r_i = \lfloor (i-1)/n \rfloor + 1$, $u_i = [(i-1) \bmod n] + 1$, y $\mathbf{f}_{u_i}$ son las filas de $\mathbf{F}$, para $i = 1, \dots, nL$.

3.3. REPRESENTACIÓN ESCASA DE UNA SEÑAL COMPLEJA EN EL DOMINIO DE FOURIER

La Figura 5 ilustra un típico patrón observado $|\mathbf{F}\mathbf{D}\mathbf{x}|^2$ en XC con $\mathbf{D} = \mathbf{I}$ siendo una matriz identidad. Específicamente, se ilustra la magnitud del patrón de difracción que genera un cristal de *Citidina* al ser irradiado con rayos X. Los píxeles blancos y negros representan elementos de baja y alta intensidad, respectivamente. Así, esto muestra que la imagen de interés $\mathbf{x}$ en XC puede ser representada escasa en el

dominio de Fourier, esto es, $\mathbf{F}\mathbf{x} = \boldsymbol{\theta}$ donde $\|\boldsymbol{\theta}\|_0 = k$ con $k \ll n$ y $k \in \mathbb{R}$.

Figura 5. Medidas de intensidad real $|\mathbf{F}\mathbf{D}\mathbf{x}|^2$ en XC, donde $\mathbf{D} = \mathbf{I}$ la matriz identidad. Los píxeles blancos y negros representan elementos de baja y alta intensidad, respectivamente.



Considerando esta observación previa, y el modelo de difracción codificado en (21), la imagen $\mathbf{x}$ en XC puede ser reconstruida como

$$\begin{aligned} & \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{C}^n}{\text{mín}} & f(\boldsymbol{\theta}) &= \|\sqrt{\mathbf{y}} - |\mathbf{A}\mathbf{F}^H \boldsymbol{\theta}|\|_2^2 \\ & \text{sujeeto a} & & \|\boldsymbol{\theta}\|_0 = k, \end{aligned} \tag{22}$$

donde $\sqrt{\cdot}$ denota la raíz cuadrada de un vector. Observe que, la imagen de interés puede entonces ser estimada como $\mathbf{x} = \mathbf{F}^H \boldsymbol{\theta}$. Sin embargo, la complejidad computacional para resolver (22) depende del tamaño de la imagen n , lo cual implica altos tiempos de reconstrucción.

Para aliviar la complejidad computacional de PR en XC, proponemos diseñar una matriz de decimación $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{r \times n}$ con $k < r < n$, para construir super-píxeles los cuales agrupan en un único píxel grupos de coeficientes iguales a cero de $\boldsymbol{\theta}$. En efecto, usando la matriz $\mathbf{M}$, la representación escasa de una imagen de alta resolución espacial se asigna a una de menor resolución, reduciendo el número total de incógnitas y, por lo tanto, el tiempo de reconstrucción. Matemáticamente, al introdu-

cir el efecto de la matriz de decimación $\mathbf{M}$, nosotros podemos reformular (22) como

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{C}^n} \quad & f(\boldsymbol{\theta}) = \|\sqrt{\mathbf{y}} - |\mathbf{A}\mathbf{F}^H \mathbf{M}^T \mathbf{M} \boldsymbol{\theta}|\|_2^2 \\ \text{sujecto a} \quad & \|\boldsymbol{\theta}\|_0 \leq k. \end{aligned} \quad (23)$$

Tenga en cuenta que el problema de optimización propuesto en (23) es equivalente a (22), debido que se asume que el vector $\boldsymbol{\theta}$ es escaso, y $\mathbf{M}$ está formando grupos con los coeficientes iguales a cero, lo que implica que $\mathbf{F}^H \mathbf{M}^T \mathbf{M} \boldsymbol{\theta} = \mathbf{F}^H \boldsymbol{\theta}$, preservando el nivel de dispersión. Por lo tanto, definiendo $\mathbf{M} \boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{C}^r$ y $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \mathbf{F}^H \mathbf{M}^T$, obtenemos que (23) puede ser reescrito como

$$\begin{aligned} \min_{\hat{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{C}^r} \quad & f(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \|\sqrt{\mathbf{y}} - |\hat{\mathbf{A}} \hat{\boldsymbol{\theta}}|\|_2^2 \\ \text{sujecto a} \quad & \|\hat{\boldsymbol{\theta}}\|_0 \leq k. \end{aligned} \quad (24)$$

Considerando (24), en el siguiente capítulo se desarrolla una estrategia para diseñar la matriz $\mathbf{M}$, la que llamamos “reconstrucción de multi-resolución” debido a que los coeficientes distintos de cero no se diezman y los coeficientes cero se diezman de forma irregular, lo que conlleva a la formación de súper-píxeles de diferentes tamaños, como se explicará en la Sección 4.

3.4. ALGORITMOS DE RECUPERACIÓN DE LA FASE

Asumiendo escasez sobre la señal de interés, recientemente se han desarrollado algoritmos que buscan resolver el problema de la recuperación de la fase. Algunos ejemplos incluyen el flujo de Wirtinger escaso (SWF, de sus siglas en ingles *Sparse Wirtinger Flow*), la recuperación de fase escasa a través del flujo de amplitud truncado (SPARTA, de sus siglas en ingles *Sparse Truncated Amplitude Flow*) y la

recuperación de fase escasa mediante una función de suavizado (SPRSF, de sus siglas en inglés *Sparse Phase Retrieval via Smoothing Function*).

3.4.1. Algoritmo SPARTA El algoritmo SPARTA introducido en ²³ adopta una formulación no convexa basada en la amplitud. Este algoritmo trabaja iterativamente en dos etapas: en la etapa uno, el soporte de la señal escasa es recuperado, y posteriormente, una inicialización que promueve la ortogonalidad es obtenida a través de iteraciones restringidas en el soporte; luego, en una segunda etapa, esta previa inicialización de la señal se refina sucesivamente por medio de iteraciones de tipo gradiente basadas en umbrales fuertes. El problema de recuperar una señal compleja subyacente $\mathbf{z}$ con nivel de escasez k , a partir de medidas cuadráticas sin fase, se reduce a minimizar la siguiente función de costo empírica basada en la amplitud²³

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{C}^n} \quad & \ell(\mathbf{z}) := \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (\mathbf{y}_i - |\mathbf{a}_i^T \mathbf{z}|)^2 \\ \text{subject to} \quad & \|\mathbf{z}\|_0 \leq k. \end{aligned} \tag{25}$$

donde $\mathbf{a}_i$ es el vector de muestreo y T es la operador transpuesta.

3.4.2. Algoritmo SWF El algoritmo SWF propuesto en ²⁴ se basa en el algoritmo SPARTA, pero a diferencia de este, el algoritmo SWF trabaja con inicializaciones basadas en el método espectral truncado para evaluar la inicialización, la cual se en-

²³ Z. YUAN, H. WANG y Q. WANG. “Phase retrieval via sparse wirtinger flow”. En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* (2019).

²⁴ G. WANG, L. ZHANG y G. B. GIANNAKIS. “Sparse phase retrieval via truncated amplitude flow”. En: *IEEE Transactions on Signal Processing* 66.2 (2018), págs. 479-491.

cuentra restringida a una estimación del soporte de la señal previamente calculado. Luego, esta inicialización se refina constantemente mediante el método de gradiente descendiente basado en un umbral fuerte. El problema de optimización se convierte en

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{C}^n} \quad & \ell(\mathbf{z}) := \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m ((|\mathbf{a}_i^T \mathbf{z}|)^2 - y_i)^2 \\ \text{subject to} \quad & \|\mathbf{z}\|_0 \leq k. \end{aligned} \tag{26}$$

donde las medidas en el detector están dadas por $y_i = (|\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}|)^2$, $i = 1, \dots, m$.

3.4.3. Algoritmo SPRSF Los algoritmos SPARTA y SWF presentan funciones de optimización no convexas y no suaves. Para corregir la falta de suavidad de la función de costo, el método SPARTA utiliza umbrales de truncamiento para calcular una dirección de actualización de paso truncada. En la práctica, el procedimiento de truncamiento requiere calcular más parámetros para obtener el rendimiento deseado en la recuperación de fase. Por lo tanto, el algoritmo SPRSF introducido en ²⁵ resuelve el problema de la recuperación de la fase introduciendo una función de suavizado. SPRSF es un algoritmo iterativo en el que el paso de actualización se obtiene mediante un umbral fuerte sobre la dirección del gradiente descendiente. Además, SPRSF no requiere el procedimiento de truncamiento utilizado en SPARTA. El problema de optimización se convierte en

²⁵ S. PINILLA, J. BACCA y H. ARGUELLO. "Sprsf: Sparse phase retrieval via smoothing function". En: *arXiv preprint arXiv:1807.09703* (2018).

$$\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{C}^n} & \ell(\mathbf{z}) &:= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (\sqrt{(\mathbf{a}_i^T \mathbf{z})^2 + \mu^2} - \mathbf{y}_i)^2 \\
& \text{subject to} & \|\mathbf{z}\|_0 &\leq k.
\end{aligned} \tag{27}$$

donde las medidas están dadas por $\mathbf{y}_i = |\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}|$.

4. METODOLOGÍA DE MULTI-RESOLUCIÓN

En el presente capítulo se describen los principios de diseño de la matriz de decimación $\mathbf{M}$ siguiendo los dos pasos siguientes:

- (a) *Estimación de los coeficientes distintos de cero:* Estimamos estadísticamente los coeficientes distintos de cero de θ , a partir de las medidas codificadas en (21). En efecto, las aperturas codificadas pueden ser optimizadas para lograr la mejor estimación de los coeficientes distintos de cero de θ .
- (b) *Construcción de súper-píxeles:* A partir del resultado del primer paso, se pueden formar súper-píxeles irregulares de diferentes tamaños agrupando coeficientes ceros vecinos de θ dentro de súper-píxeles.

4.1. ESTIMACIÓN DE LOS COEFICIENTES DISTINTOS DE CERO

A fin de estimar los coeficientes distintos de cero de θ , ampliamos la estrategia desarrollada en ²³ para patrones de difracción codificados. Primero, especificamos que las entradas de cada matriz $\mathbf{D}_\ell$ cumplen con ser copias independientes e idénticamente distribuidas (*i.i.d.*, de sus siglas en inglés *independent and identically distributed*) de una variable aleatoria admisible d definida de la siguiente manera.

Definición 1 (*Variable aleatoria admisible*). Una variable aleatoria discreta que obedece al menos $|d| \leq 1$, se dice que es admisible.

Teniendo en cuenta que $\mathbf{D}_\ell$, para $\ell = 1, \dots, L$, son matrices aleatorias, defina $Z_{r,s} := y_r |b_{r,s}|^2$, $1 \leq r \leq m$, $1 \leq s \leq n$, donde $b_{r,s}$ es el elemento en la fila r y columna s de una matriz $\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{F}^H$. Entonces, tenemos que

$$\mathbb{E}[Z_{q,p}] = c_1(n-1)\|\mathbf{x}\|_2^2 + c_2|\theta_p|^2, \quad (28)$$

donde $c_1, c_2 > 0$ son constantes dependientes de d . Además, dado el hecho de que θ es escasa, $\theta_p \neq 0$ ó $\theta_p = 0$. Entonces es que, claro a partir de (28), siempre que la constante c_2 sea suficientemente grande, los coeficientes distintos de cero de θ puede identificarse de esta manera. Es decir, los k coeficientes distintos de cero de θ son los k índices más grandes de $Z_{q,p}$. En efecto, estamos interesados en optimizar el conjunto de aperturas codificadas para obtener la mejor estimación de los coeficientes distintos de cero de θ . Específicamente, el siguiente lema prueba teóricamente (28) y establece que una variable aleatoria admisible d satisfaciendo $\mathbb{E}[d], \mathbb{E}[\bar{d}] \neq 0$ obtiene el mejor desempeño.

Lema 1. *Considerando las medidas codificadas y en (21) y la Definición 1, una variable aleatoria admisible d satisfaciendo $\mathbb{E}[d], \mathbb{E}[\bar{d}] \neq 0$ logra el mejor rendimiento para estimar los coeficientes distintos de cero de θ .*

Demostración del Lema 1

Para dos enteros a y b usamos $a \stackrel{n}{\equiv} b$ para denotar congruencia de a y b modulo n (n divide $a - b$). Ajuste $\omega = e^{\frac{2\pi j}{n}}$ para ser la n th raíz de la unidad, así que $\mathbf{f}_i = [\omega^{-0(i-1)}, \dots, \omega^{-(n-1)(i-1)}]$. Entonces, tomando $z_p = \frac{1}{n} \sum_{q=1}^n Z_{q,p}$ obtenemos que

$$\begin{aligned} z_p &= \sum_{a,b,c,e=1}^n d_a \bar{d}_b d_c \bar{d}_e x_a \bar{x}_b \omega^{(c-e)(p-1)} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \omega^{(b-a+e-c)(i-1)} \right) \\ &= \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \sum_{c=1}^n \sum_{e=1}^n d_a \bar{d}_b d_c \bar{d}_e x_a \bar{x}_b \omega^{(c-e)(p-1)} \mathbb{1}_{\{b+e \stackrel{n}{\equiv} a+c\}}, \end{aligned} \quad (29)$$

donde la notación $\mathbb{1}_{\{b+e \stackrel{n}{\equiv} a+c\}}$ significa que $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \omega^{(b-a+e-c)(i-1)}$ es diferente de cero. En particular, cuando la condición $b+e \stackrel{n}{\equiv} a+c$ es satisfecha, el resultado es igual a 1. Defina $\mu = \mathbb{E}[d]$ y $h = d - \mu$. Por lo tanto, a partir de (29) tenemos que $\mathbb{E}[z_p]$ puede ser reescrita como

$$\sum_{a,b,c,e=1}^n (\mathbb{E}[h_a \bar{h}_b h_c \bar{h}_e] x_a \bar{x}_b + |\mu|^4 x_a \bar{x}_b) \omega^{(c-e)(p-1)} \mathbb{1}_{\{b+e \stackrel{n}{\equiv} a+c\}}. \quad (30)$$

Observe que $\mathbb{E}[h_a \bar{h}_b h_c \bar{h}_e] = 0$ a no ser que $(a = e, b = c)$, o $(a = b, c = e, a \neq c)$, donde estas dos condiciones también satisfacen que $b+e \stackrel{n}{\equiv} a+c$. Así, definiendo $\mathbb{E}[\bar{h}_a h_b \bar{h}_c h_e] = \mathbb{E}[|h_a|^2 |h_b|^2] = v \leq 1$ tenemos que:

- $(a = e, b = c)$: Entonces, el termino en (30) puede ser expresado como

$$\left(\sum_{a=1}^n v \omega^{-(a-1)(p-1)} x_a \right) \left(\sum_{b=1}^n v \omega^{(b-1)(p-1)} \bar{x}_b \right) = v^2 |\theta_p|^2. \quad (31)$$

- $(a = b, c = e, a \neq c)$: Así, el termino en (30) puede ser reescrito como

$$\sum_{a=1}^n (v |x_a|^2) \sum_{c \neq a}^n v = v^2 (n-1) \|\mathbf{x}\|_2^2. \quad (32)$$

Combinando (30), (31), y (32) se puede concluir que

$$\mathbb{E}[z_p] = v^2 (n-1) \|\mathbf{x}\|_2^2 + (v^2 + |\mu|^4) |\theta_p|^2. \quad (33)$$

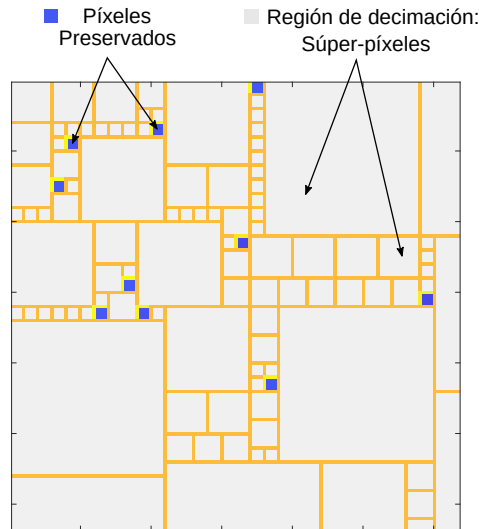
Desde v siempre es mayor que cero, queda claro, a partir de (33), que cuando $\mathbb{E}[d] \neq 0$, los coeficientes distintos de cero se pueden estimar mejor.

4.2. CONSTRUCCIÓN DE SÚPER-PÍXELES

En esta sección, describimos cómo agrupar conjuntos de coeficientes cero de θ dentro de súper-píxeles de diferentes tamaños. Más precisamente, una vez que los coeficientes distintos de cero se estiman como fue explicado en la Sección 4.1, estamos en condiciones de diezmar θ . Para tal propósito, este proyecto de investigación propone dos algoritmos de decimación:

4.2.1. Algoritmo de decimación rectangular. Una versión modificada del algoritmo de decimación introducido en ¹⁸ es presentado, el cual permite formar súper-píxeles de forma rectangular. Los detalles de diseño de la matriz de decimación se resumen en Algoritmo 1. Observe que una versión matricial $\tilde{\theta}$ de θ es requerida en Línea 3 para crear súper-píxeles. Luego, el Algoritmo 1 genera un punto aleatorio $(\hat{i}, \hat{j})$ en Línea 8 y crea el conjunto $\mathcal{B}$ que contiene las coordenadas espaciales de un $2^n \times 2^n$ súper-píxel cuya esquina superior izquierda es el punto $(\hat{i}, \hat{j})$. Por lo tanto, el Algoritmo 1 calcula el promedio de las intensidades normalizadas de $\tilde{\theta}_{\mathcal{B}}$ para determinar la similitud con cada punto de $\tilde{\theta}$ contenido en $\mathcal{B}$, considerando como métrica su error cuadrático medio, como se muestra en la Línea 11. Así, esta similitud espacial se utiliza para crear los súper-píxeles de tamaño $2^n \times 2^n$, siempre que el error cuadrático medio máximo sea menor que el umbral fijo σ . Además, es importante observar que las filas de $\mathbf{M}$ están normalizadas por la cardinalidad de $\mathcal{B}$, como se muestra en la Línea 13. Este enfoque de decimación permite agrupar los coeficientes cero de la representación escasa, lo que conlleva a reducir el número de incógnitas.

Figura 6. Ilustración de la estrategia de multi-resolución agrupando conjuntos de píxeles cero de la representación escasa. Los píxeles distintos de cero no están agrupados.



La Figura 6 muestra un ejemplo de una cuadrícula de diezmado de la imagen escasa $\tilde{\theta}$. Observe que los coeficientes distintos de cero no se diezman.

Algorithm 1 Algoritmo para determinar la matriz $\mathbf{M}$

```

1: Input: señal escasa  $\theta$ , parámetro umbral  $\sigma$ , parámetro del tamaño del súper-píxel  $\eta$ .
2: Permita  $\mathbf{s} = [2^\eta, 2^{\eta-1}, \dots, 1]$  ser los tamaños de los súper-píxeles e inicializar  $\alpha = 0, \rho = 0$ .
3:  $\tilde{\theta} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2} \leftarrow$  versión matricial de  $\theta$ 
4: Defina el conjunto de puntos de coordenadas como  $\mathcal{I} = \{(i, j) | \forall i, j \in \{1, \dots, N_1\}, \{1, \dots, N_2\}\}$ 
5: while  $\text{card}(\mathcal{I}) > 0$  do
6:    $\hat{\mathcal{I}} = \mathcal{I}$  Generar un nuevo conjunto de puntos disponibles.
7:   while  $\text{card}(\hat{\mathcal{I}}) > 0$  do
8:     Generar un punto aleatorio  $(\hat{i}, \hat{j}) \in \hat{\mathcal{I}}$ 
9:     Construir un súper-píxel  $\mathcal{B} = \{(i, j) | i = [\hat{i}, \dots, \hat{i} + \mathbf{s}(\alpha)], j = [\hat{j}, \dots, \hat{j} + \mathbf{s}(\alpha)]\}$  de tamaño  $\mathbf{s}(\alpha)$  y un nuevo punto de esquina superior izquierda  $(\hat{i}, \hat{j}) \in \hat{\mathcal{I}}$ 
10:     $\mathbf{p} \leftarrow E\{\tilde{\theta}_{\mathcal{B}}\}$  ▷ Calcule el promedio normalizado de  $\tilde{\theta}$  en  $\mathcal{B}$ 
11:    if  $\max(MSE(\mathbf{p}, \tilde{\theta}_{\mathcal{B}})) < \sigma$  then
12:       $\mathbf{\Gamma} \leftarrow \mathbf{0}_{N_1 \times N_2}$ 
13:       $\mathbf{\Gamma}_{(i,j)} \leftarrow \frac{1}{\text{card}(\mathcal{B})}$  for  $(i, j) \in \mathcal{B}$  ▷ Indicador de súper-píxel
14:       $(\mathbf{M})_\rho = \text{vec}(\mathbf{\Gamma})$  ▷ Asignación de una nueva fila a  $\mathbf{M}$ 
15:       $\rho = \rho + 1$  ▷ Actualizar el contador de súper-píxeles
16:       $\mathcal{I} = \mathcal{I} - \mathcal{B}$  ▷ Actualizar puntos disponibles
17:       $\hat{\mathcal{I}} = \hat{\mathcal{I}} - \mathcal{B}$  ▷ Actualice los puntos elegibles de la esquina superior izquierda
18:    else
19:       $\hat{\mathcal{I}} = \hat{\mathcal{I}} - (\hat{i}, \hat{j})$  ▷ Eliminar el punto de esquina  $(\hat{i}, \hat{j}) \in \hat{\mathcal{I}}$ 
20:     $\alpha = \alpha + 1$  ▷ Cambiar el índice de tamaño de súper-píxel
21: Output: matriz  $\mathbf{M}$ 

```

4.2.2. Matriz de decimación usando K-means Este proyecto también ofrece otra alternativa de decimación la cual consiste en usar el método de agrupamiento K-medias (K-means, como es comúnmente conocido en la literatura), el cual, al igual que el Algoritmo 1 busca explotar la escasez de la señal θ .

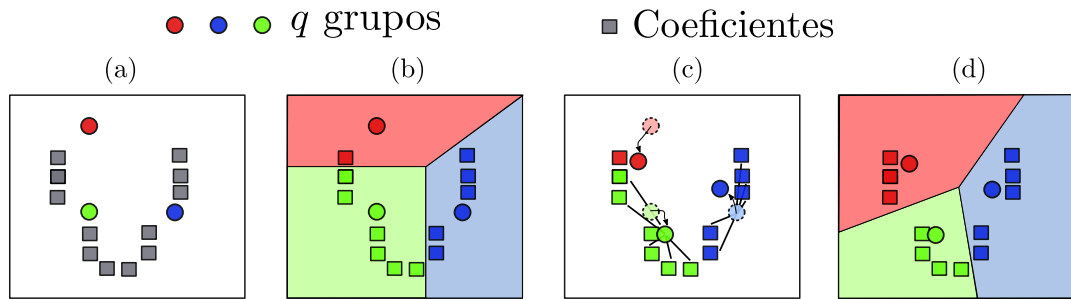
La idea principal de este algoritmo consiste en agrupar el conjunto dado de coeficientes de θ en q grupos disjuntos (súper-píxeles), donde el valor de q es definido de antemano. La agrupación se realiza de tal manera que los coeficientes de θ dentro de un grupo son más similares entre sí que los coeficientes que pertenecen a

otros grupos. Por lo tanto, la organización de los datos mediante el análisis de agrupamiento a través de K-means emplea alguna métrica para determinar la similitud entre el conjunto de coeficientes con el fin de dividir los datos en un número específico de súper-píxeles. El criterio de agrupamiento más utilizado es la distancia euclidiana al cuadrado entre cada punto de datos de θ y los q centroides (uno para cada conglomerado) del subconjunto formado. Estos centroides están definidos como la media de los coeficientes en los q grupos formados.

El algoritmo para determinar la matriz de decimación M usando K-means consta de tres etapas: el primer paso denominado inicialización, asigna aleatoriamente q centroides dentro del conjunto de datos. La siguiente etapa consiste en tomar cada coeficiente de θ y asociarlo al centroide más cercano a través de la distancia euclidiana. En este punto, necesitamos recalculamos los nuevos centroides, ya que la inclusión de nuevos puntos puede conducir a un cambio en los centroides del grupo. Una vez definido los q nuevos centroides, se crea un nuevo enlace entre los mismos puntos de datos y el nuevo centroide más cercano, generando un bucle. Como resultado de este ciclo, los q centroides pueden cambiar su posición paso a paso debido a que los puntos se incluirán en nuevos o antiguos grupos. Finalmente, el algoritmo converge hasta que los centroides ya no cambien. Esto significa que el criterio de convergencia para la agrupación es minimizar la suma de cuadrados dentro del grupo (WCSS, de sus siglas en inglés within-cluster sum of squares), es decir, la media de los puntos en el grupo. Finalmente, a partir de particiones de datos en q grupos (súper-píxeles), procedemos a construir la matriz de decimación M . La Figura 7 (modificado de ²⁶) ilustra gráficamente el proceso previamente explicado.

²⁶ WIKIPEDIA. *K-medias* — *Wikipedia, La enciclopedia libre*. [Internet; descargado 26-febrero-2020]. 2019.

Figura 7. Configuración ilustrativa de súper-píxeles usando K-means. (a) Primer paso: asignación aleatoria de q centroides, (b) q grupos son generados por medio de WCSS, (c) Recalculación de los centroides en cada grupo, (d) Pasos 2 y 3 se repiten hasta que se logre la convergencia.



Fuente: 26.

Algoritmo 2 resume el paso a paso del agrupamiento de coeficientes cero en súper-píxeles utilizando la metodología de K-means.

La Figura 8 ilustra una comparación entre los niveles de decimación utilizando el Algoritmo 1 y Algoritmo 2. En particular, la grilla de decimación de una señal escasa es visualizada para ambos algoritmos. Observe que, los coeficientes de alta intensidad no son diezmos. A partir de la Figura 8, se puede evidenciar que el Algoritmo 2, basado en la metodología de K-means permite hacer un mayor nivel de decimación. Esto se debe a que el Algoritmo 2 permite definir de antemano la cantidad de súper-píxeles que se desean formar, conllevando de ser necesario a agrupar todos los coeficientes cero en un solo súper-píxel, como ilustra la Figura 8. Mientras que, debido a la estructura de agrupamiento del Algoritmo 1 nunca se puede llegar a un nivel de decimación de tal caso.

Algorithm 2 Algoritmo de decimación usando K-means

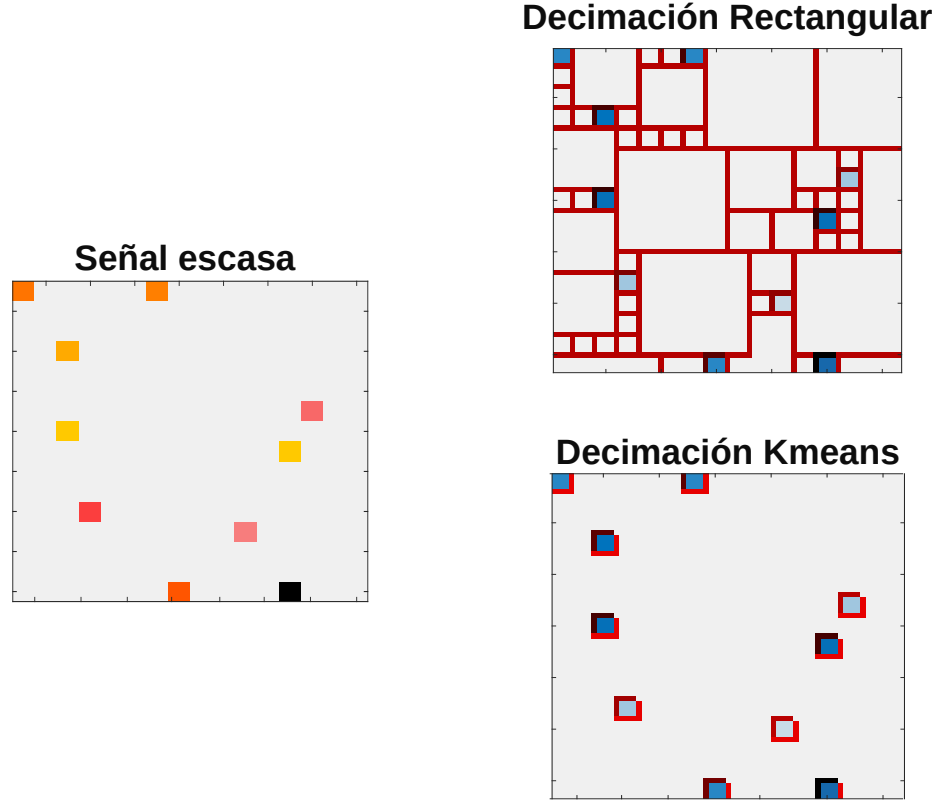
- 1: **Input:** Señal escasa θ , número de grupos q .
 - 2: **Inicialización:** Asignación aleatoria de un conjunto de q centroides $s_1, \dots, s_q$.
 - 3: **while** $\mathbf{E}$ no cambie significativamente **do**
 - 4: $\mathcal{B}_i = \{\theta_p : \|\theta_p - s_i\|^2 \leq \|\theta_p - s_j\|^2 \forall j, 1 \leq j \leq q\}$ ▷ Donde θ_p es cada p -th coeficiente de θ , el cual es asignado a un nuevo grupo $\mathcal{B}_i$ cuya media tiene la menor distancia euclidiana cuadrada.
 - 5: Calcular $s_i = \frac{1}{|\mathcal{B}_i|} \sum_{\theta_j \in \mathcal{B}_i} \theta_j$
 - 6: Calcular la función error $\mathbf{E} = \sum_{i=1}^q \sum_{\theta_j \in \mathcal{B}_i} \|\theta_j - s_i\|^2$
 - 7: **for** $\rho = 1 : q$ **do**
 - 8: Defina el conjunto de puntos de coordenadas $\mathcal{I} = \{p \mid \forall p \in \mathcal{B}_\rho\}$ ▷ Coordenadas del súper-píxel
 - 9: $(\mathbf{M})_{(\rho, \mathcal{I})} = \frac{1}{\text{card}(\mathcal{B}_\rho)}$ ▷ Asignando la ρ -th fila a $\mathbf{M}$
 - 10: **Output:** Matriz $\mathbf{M}$
-

4.3. ALGORITMO DE RECONSTRUCCIÓN

Esta sección presenta el algoritmo de reconstrucción propuesto que explota la escasez de θ a fin de reducir sustancialmente el número total de incógnitas en XC. Más precisamente, teniendo en cuenta el hecho de que los algoritmos del estado del arte no se pueden aplicar directamente para resolver (24), entonces una versión modificada del algoritmo Sparse Phase Retrieval via Smoothing Function (SPRSF) introducido en ²⁵ es presentado. Específicamente, el método propuesto se resume en el Algoritmo 3.

El Algoritmo 3 comienza con una adecuada inicialización, que se resume desde la Línea 2 a 6. Observe que en la Línea 2, el Algoritmo 3 estima los coeficientes distintos de cero de θ siguiendo la metodología explicada en la Sección 4.1. De esta manera, la matriz $\mathbf{M}$ puede ser creada, como se muestra en la Línea 3, la cual permite calcular la versión escasa decimada θ_e en Línea 7. Para el algoritmo de decimación pueden ser utilizados los Algoritmos 1 o 2. Por último, bajo refinamientos sucesivos basados en una secuencia de iteraciones de gradiente, $\hat{\theta}_e$ es estimado en la Línea 8. En estas iteraciones de gradiente se pueden usar los métodos tradicionales de reconstrucción basados en dispersión tales como SWF ²³, SPARTA ²⁴ o

Figura 8. Comparación entre los niveles de decimación usando el algoritmo de decimación rectangular y el algoritmo de decimación basado en K-means.



SPRSF²⁷. Note que, el computo de la matriz $\hat{\mathbf{A}} \in \mathbb{C}^{m \times r}$ en la Línea 4 es necesaria. En efecto, $\hat{\mathbf{A}}$ permite que el Algoritmo 3 reduzca el tiempo de reconstrucción, porque $r \ll n$. Finalmente, la complejidad computacional general del Algoritmo 3 es $\mathcal{O}(Tr^2)$ en contraste con $\mathcal{O}(Tn^2)$ de algoritmos que no diezman la representación escasa.

²⁷ S. PINILLA, J. BACCA y H. ARGUELLO. “SPRSF: Sparse Phase Retrieval via Smoothing Function”. En: *arXiv preprint arXiv:1807.09703* (2018).

Algorithm 3 Método de reconstrucción multi-resolución para XC

- 1: **Input:** Datos $\{(\mathbf{a}_i; \mathbf{y}_i)\}_{i=1}^m$, nivel de escasez k . El tamaño del paso $\tau \in (0, 1)$, variables de control $\gamma, \gamma_1 \in (0, 1)$, $\mu_{(0)} \in \mathbb{R}_{++}$, numero de iteraciones T .
 - 2: **Inicialización:** S_0 es ajustado para ser el conjunto de k índices más grandes $\{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m q_i^2 a_{i,j}^2\}_{1 \leq j \leq n}$, con $q_i = \sqrt{\mathbf{y}_i}$.
 - 3: $\mathbf{M} \leftarrow \mathbf{Algoritmo_decimación}(S_0)$
 - 4: Calcular $\hat{\mathbf{A}} = [\hat{a}_1^T, \dots, \hat{a}_{nL}^T]^H = \mathbf{A} \mathbf{F}^H \mathbf{M}^T$
 - 5: Permita $\tilde{\boldsymbol{\theta}}^{(0)}$ ser el eigenvector principal de $\mathbf{Y} := \frac{1}{m} \sum_{i \in I_0} \sqrt{q_i} \frac{\hat{\mathbf{a}}_{i,S_0} \hat{\mathbf{a}}_{i,S_0}^H}{\|\hat{\mathbf{a}}_{i,S_0}\|_2^2}$
 - 6: Defina el punto inicial como $\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(0)} := \lambda_0 \tilde{\boldsymbol{\theta}}^{(0)}$, donde $\lambda_0 := \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m q_i^2}{m}}$.
 - 7: $\boldsymbol{\theta}_e \leftarrow \mathbf{M} \hat{\boldsymbol{\theta}}^{(0)}$
 - 8: $\hat{\boldsymbol{\theta}}_e \leftarrow \mathbf{Algoritmo_reconstrucción}(\boldsymbol{\theta}_e, \hat{\mathbf{A}}, \mathbf{y})$
 - 9: **Output:** $\mathbf{F}^H \mathbf{M}^T \hat{\boldsymbol{\theta}}_e$
-

5. SIMULACIONES Y RESULTADOS

En el presente capítulo, el rendimiento del algoritmo de reconstrucción y la estrategia de decimación propuesta se evalúan mediante cuatro pruebas diferentes: primero, determinamos el rendimiento de algunas variables aleatorias admisibles para estimar los coeficientes distintos de cero de θ . Segundo, determinamos la probabilidad de recuperación exitosa frente a distintos niveles de decimación q vs el nivel de escasez k de la señal θ . Esto nos permite definir el valor óptimo de q súper-píxeles en la matriz de decimación para determinar la tasa de recuperación exitosa de la señal compleja con el algoritmo propuesto contra los métodos tradicionales, es decir, sin un esquema de multi-resolución, y finalmente, comparamos el tiempo de reconstrucción del método propuesto con las alternativas del estado del arte.

Para la primera prueba, la señal compleja es generada para varios valores de $n \in [128, 4096]$. Para la prueba dos, se utilizó el Algoritmo 2 para construir la matriz de decimación, ya que este permite con facilidad definir de ante mano la cantidad de q súper-píxeles. En esta prueba, la métrica de rendimiento utilizada es el error relativo definido como $Error_relativo = dist(\hat{\theta}, \theta) / \|\theta\|_2$, donde $\hat{\theta}$ es la estimación numérica de θ y $dist$ es definida como

$$dist(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) = \min_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\mathbf{w}_1 e^{-j\theta} - \mathbf{w}_2\|_2, \quad (34)$$

donde $j = \sqrt{-1}$. Específicamente, se establece que una prueba es exitosa cuando el error relativo es menor a 10^{-5} . En la prueba tres y cuatro, la señal compleja es $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{1000}) + j\mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{1000})$. Los valores predeterminados de los parámetros del Algoritmo 3 se determinaron utilizando una estrategia de validación cruzada. Estos fueron definidos como $\tau = 0.9$, $\gamma = 5$, $\gamma_1 = 0.015$, $\mu_{(0)} = 0.04$, $T = 500$, $\eta = 4$, $\sigma = 1e^{-3}$. Además, con el fin de validar que nuestro enfoque de súper-píxel se pue-

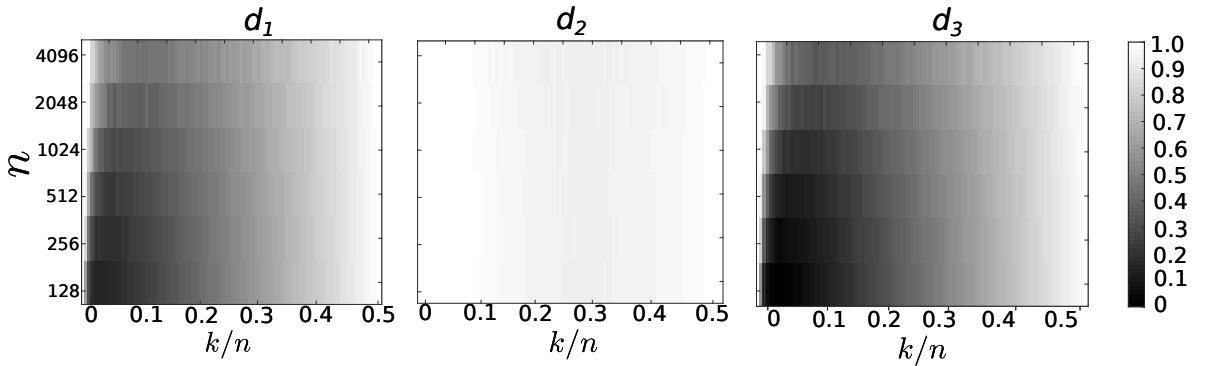
de utilizar con cualquier algoritmo basado en reconstrucción de señales escasas, modificamos dos algoritmos del estado del arte, SWF y SPARTA para introducir la matriz de decimación M .

5.1. ESTIMACIÓN DE LOS COEFICIENTES DISTINTOS DE CERO

Esta sección presenta el rendimiento para estimar los coeficientes distintos de cero de θ con base en las variables aleatorias admisibles dadas por

$$d_1 = \begin{cases} -1, & \text{prob. } 1/4 \\ 1, & \text{prob. } 1/4 \\ j, & \text{prob. } 1/4 \\ -j, & \text{prob. } 1/4 \end{cases}, d_2 = \begin{cases} 0, & \text{prob. } 1/2 \\ 1, & \text{prob. } 1/2 \end{cases}, d_3 = \begin{cases} -1, & \text{prob. } 1/2 \\ 1, & \text{prob. } 1/2 \end{cases}. \quad (35)$$

Figura 9. Rendimiento de algunas variables aleatorias admisibles que estiman los coeficientes distintos de cero de la representación escasa.



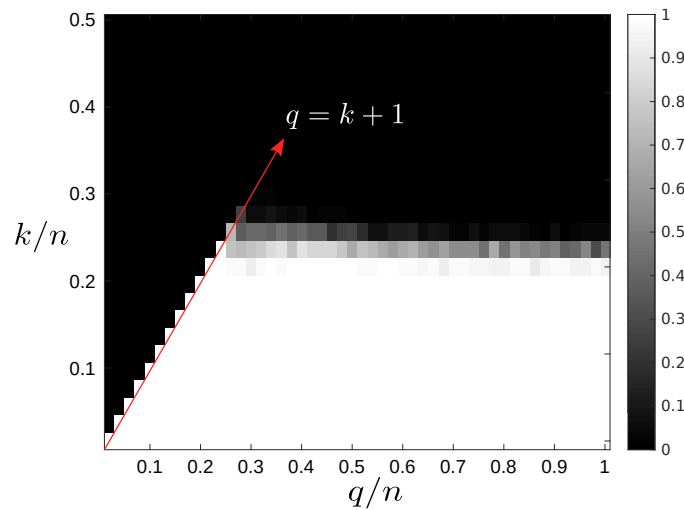
Realizamos 100 ensayos para determinar la tasa de éxito de las variables aleatorias admisibles en (35) para estimar los coeficientes distintos de cero de θ como se explica en la Sección 4.1. Los resultados numéricos se resumen en la Figura 9, donde el color representa el porcentaje de estimación obtenido para las diferentes variables

aleatorias admisibles en (35). En particular, observe que d_2 alcanza el rendimiento más alto en comparación con d_1 y d_3 . Esta observación valida el resultado teórico establecido en Lema 1, porque $\mathbb{E}[d_2] \neq 0$. A partir de este resultado, las siguientes pruebas son desarrolladas con la variable aleatoria admisible d_2 . De esta forma, estamos en condición de formar súper-píxeles irregulares agrupando los coeficientes ceros de θ , como se muestra en la siguiente prueba.

5.2. NIVEL DE DECIMACIÓN

En esta prueba, examinamos la tasa de éxito de recuperación de la señal frente al nivel de compresión q vs el nivel de la escasez k de θ . Así, evaluamos el rendimiento con la tasa de éxito entre 100 ejecuciones de prueba. Los resultados numéricos de la tasa de recuperación de la señal se muestran en la Figura 10, donde el color representa el porcentaje de estimación obtenido para los respectivos niveles de compresión y dispersión.

Figura 10. Probabilidad de recuperación frente al nivel de compresión q vs escasez k .

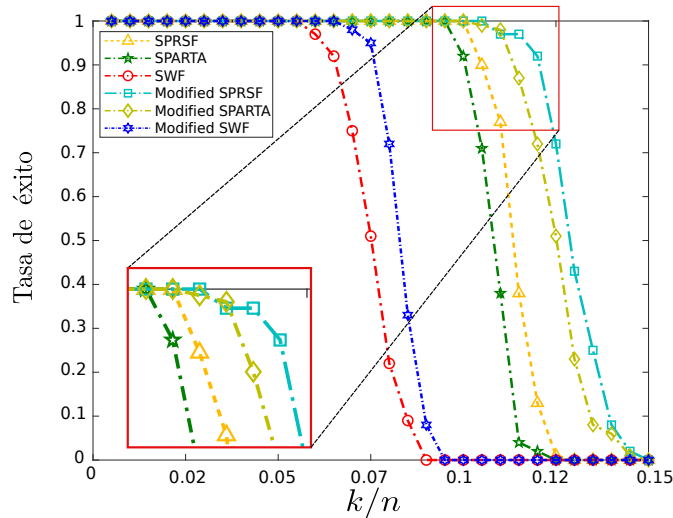


A partir de la Figura 10, se puede observar que el mejor desempeño se obtiene cuando el nivel de compresión (súper-píxeles) es igual a $q = k + 1$, lo que significa preservar los coeficientes distintos de cero y los coeficientes cero agruparlos todos en un súper-píxel. Además, es claro que se obtiene un mejor desempeño usando el Algoritmo 2 para hacer decimación, ya que este permite agrupar todos los coeficientes cero de la señal en un solo súper-píxel, mientras, dada la forma de construcción de los súper-píxeles irregular del Algoritmo 1 (súper-píxeles rectangulares) no se puede lograr un nivel de decimación $q = k + 1$.

5.3. RECUPERACIÓN EXITOSA

En esta prueba, examinamos tasa de éxito vs el nivel de la escasez de la señal, dejando como parámetro fijo el valor de decimación $q = k + 1$, lo que se traduce en q súper-píxeles. Evaluamos el rendimiento entre 100 ejecuciones de prueba. Los resultados numéricos de la probabilidad de recuperación se muestran en la Figura 11.

Figura 11. Probabilidad de recuperación frente al nivel de escasez (k).

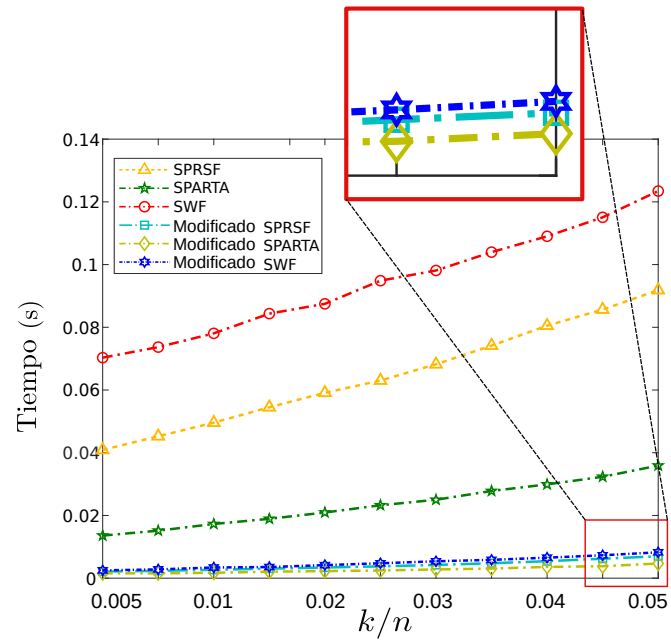


A partir de la Figura 11, podemos ver que el método propuesto obtiene un mejor desempeño en comparación a los métodos SPRSF, SPARTA Y SWF. Más precisamente, descubrimos que usando el enfoque de reconstrucción de multi-resolución, la tasa de recuperación es superior a los métodos tradicionales. El algoritmo propuesto puede tener una tasa de recuperación de aproximadamente 100 % para un nivel de dispersión de $k/n = 0.12$, mientras que su versión basada en no diezmado propuesta en ²⁷ solo hasta $k/n = 1.0$. Además, las versiones modificadas de SPARTA y SWF tienen un rendimiento similar al Algoritmo 3, informando una tasa de recuperación exitosa en hasta un nivel de escasez de $k/n = 1.0\%$ y $k/n = 0.6\%$, respectivamente.

5.4. COMPARACIÓN DE TIEMPO DE RECONSTRUCCIÓN

Esta sección resume la comparación del tiempo de reconstrucción entre el algoritmo propuesto y los enfoques basados en no decimación. Específicamente, comparamos Algoritmo 3 con su versión no basada en la decimación propuesta en ²⁷. Además, para demostrar que nuestra metodología de súper-píxel es independiente de la metodología de reconstrucción, los algoritmos SWF y SPARTA se adaptaron para resolver (24). Específicamente, la Línea 8 en el Algoritmo 3 se puede reemplazar por SPARTA o SWF para resolver (24). La Figura 12 muestra los resultados obtenidos en función de la tasa de compresión k/n . De la Figura 12 podemos encontrar que el Algoritmo 3 presenta una reducción del tiempo de reconstrucción en al menos 92 % en comparación con la versión original. Además, las versiones basadas en decimación de SPARTA y SWF informan una reducción en el tiempo de reconstrucción con respecto a sus versiones originales de al menos 93 % y 87 %, respectivamente.

Figura 12. Tiempo de reconstrucción de los algoritmos basados en decimación frente al nivel de dispersión de θ .



6. CONCLUSIONES

A partir de los desarrollos presentados y los resultados obtenidos en el presente trabajo de investigación, es posible destacar que las entradas de una apertura codificada con $\mathbb{E}[d] \neq 0$ logra el mejor desempeño para estimar los coeficientes distintos de cero de θ . Adicionalmente, este trabajo presentó un algoritmo para la recuperación de una señal compleja en cristalografía de rayos X que explota la escasez de θ para reducir el número total de incógnitas en el problema inverso, lo cual permite reducir la complejidad computacional. Este hecho conduce a una reducción del tiempo de reconstrucción de al menos el 92 % y una mejora en la tasa de éxito de hasta 20 %. Además, a través de simulaciones, validamos que nuestro enfoque de súper-píxel puede usarse mediante métodos de reconstrucción basados en dispersos tradicionales, para reducir el tiempo de reconstrucción en XC.

BIBLIOGRAFÍA

- ACHANTA, R., A. SHAJI y K. SMITH. *Slic superpixels*. Inf. téc. 2010 (vid. pág. 14).
- BECKER, J. y M. BREMHOLM. “Experimental setup for in situ X-ray SAXS/WAXS/PDF studies of the formation and growth of nanoparticles in near-and supercritical fluids”. En: *Journal of Applied Crystallography* 43.4 (2010), págs. 729-736 (vid. pág. 22).
- BORN, M. y E. WOLF. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013 (vid. pág. 12).
- CANDES, E., X. LI y M. SOLTANOLKOTABI. “Phase retrieval from coded diffraction patterns”. En: *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39.2 (2015), págs. 277-299 (vid. págs. 12, 13, 26).
- CANDES, E. J., X. LI y M. SOLTANOLKOTABI. “Phase retrieval from coded diffraction patterns”. En: *Applied and Computational Harmonic Analysis* 39.2 (2015), págs. 277-299 (vid. págs. 13, 26).
- “Phase retrieval via Wirtinger flow: Theory and algorithms”. En: *IEEE Transactions on Information Theory* 61.4 (2015), págs. 1985-2007 (vid. págs. 13, 26).
- DAVIS, A., S. TEAGUE y G. KLEYWEGT. “Application and limitations of X-ray crystallographic data in structure-based ligand and drug design”. En: *Angewandte Chemie International Edition* 42.24 (2003), págs. 2718-2736 (vid. págs. 12, 22).
- ECONOMOU, E. N. *The Physics of Solids: Essentials and Beyond*. Springer Science & Business Media, 2010 (vid. págs. 12, 22).

- FIENUP, C. y J. DAINITY. "Phase retrieval and image reconstruction for astronomy". En: *Image Recovery: Theory and Application* 231 (1987), pág. 275 (vid. pág. 11).
- GALVIS, D., Y. MEJIA y H. ARGUELLO. "Efficient reconstruction of Raman spectroscopy imaging based on compressive sensing". En: *Dyna* 81.188 (2014), págs. 116-124 (vid. pág. 11).
- GARCIA, H., C. V. CORREA y H. ARGUELLO. "Multi-Resolution Compressive Spectral Imaging Reconstruction From Single Pixel Measurements". En: *IEEE Transactions on Image Processing* 27.12 (2018), págs. 6174-6184 (vid. págs. 14, 37).
- GOODMAN, J. W. *Introduction to Fourier optics*. Roberts y Company Publishers, 2005 (vid. págs. 17-21).
- HAUPTMAN, H. A. "History of x-ray crystallography". En: *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 10.1-2 (1991), págs. 13-18 (vid. págs. 11, 12, 22).
- LI, T., A. SENESI y B. LEE. "Small angle X-ray scattering for nanoparticle research". En: *Chemical reviews* 116.18 (2016), págs. 11128-11180 (vid. págs. 12, 21, 22).
- MIAO, J. y P. CHARALAMBOUS. "Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens". En: *Nature* 400.6742 (1999), pág. 342 (vid. pág. 11).
- MILLANE, R. P. "Phase retrieval in crystallography and optics". En: *JOSA A* 7.3 (1990), págs. 394-411 (vid. pág. 22).
- PINILLA, S., J. BACCA y H. ARGUELLO. "Sprsf: Sparse phase retrieval via smoothing function". En: *arXiv preprint arXiv:1807.09703* (2018) (vid. págs. 32, 41).

- PINILLA, S., J. BACCA y H. ARGUELLO. "SPRSF: Sparse Phase Retrieval via Smoothing Function". En: *arXiv preprint arXiv:1807.09703* (2018) (vid. págs. 42, 48).
- POON, T. y J. LIU. *Introduction to modern digital holography: with MATLAB*. Cambridge University Press, 2014 (vid. págs. 12, 17-21, 24).
- SHECHTMAN, Y. y col. "Phase retrieval with application to optical imaging: a contemporary overview". En: *IEEE signal processing magazine* 32.3 (2015), págs. 87-109 (vid. págs. 13, 26).
- SMYTH, M. y J. MARTIN. "x Ray crystallography". En: *Journal of Clinical Pathology* 53.1 (2000), pág. 8 (vid. pág. 11).
- "x Ray crystallography". En: *Journal of Clinical Pathology* 53.1 (2000), pág. 8 (vid. pág. 21).
- STEFIK, M. "Inferring DNA structures from segmentation data". En: *Artificial Intelligence* 11.1-2 (1978), págs. 85-114 (vid. págs. 12, 22).
- WALTHER, A. "The question of phase retrieval in optics". En: *Optica Acta: International Journal of Optics* 10.1 (1963), págs. 41-49 (vid. pág. 11).
- WANG, G., L. ZHANG y G. B. GIANNAKIS. "Sparse phase retrieval via truncated amplitude flow". En: *IEEE Transactions on Signal Processing* 66.2 (2018), págs. 479-491 (vid. págs. 31, 41).
- WIKIPEDIA. *K-medias* — *Wikipedia, La enciclopedia libre*. [Internet; descargado 26-febrero-2020]. 2019 (vid. pág. 39).

YUAN, Z., H. WANG y Q. WANG. "Phase retrieval via sparse wirtinger flow". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* (2019) (vid. págs. 31, 34, 41).