

**ALGORITMO DE RECONSTRUCCIÓN CRISTALOGRÁFICA PARA LA
RECUPERACIÓN DE LA FASE DE UNA SEÑAL MUESTREADA MEDIANTE UN
SISTEMA DE MEDIDA COMPRESIVO POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X**

**LUIS MIGUEL DÍAZ MORALES
HANS YECID GARCIA ARENAS**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y DE
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA
2016**

**ALGORITMO DE RECONSTRUCCIÓN CRISTALOGRAFICA PARA LA
RECUPERACIÓN DE LA FASE DE UNA SEÑAL MUESTREADA MEDIANTE UN
SISTEMA DE MEDIDA COMPRESIVO POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X**

**LUIS MIGUEL DÍAZ MORALES
HANS YECID GARCIA ARENAS**

Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero electrónico

**DIRECTOR
PhD. HENRY ARGUELLO FUENTES
Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y DE
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA
2016**

AGRADECIMIENTOS

Al Grupo de Investigación en Diseño de Algoritmos y Procesamiento de Datos Multidimensionales (HDSP), por habernos aceptado como integrantes de su grupo y acompañarnos a lo largo del desarrollo de este proyecto.

A nuestro director de proyecto, Henry Arguello Fuentes, por su ayuda, apoyo y acompañamiento a lo largo de este proyecto, y por la oportunidad que me ofrece al permitirme ser parte del grupo.

A mis compañeros y amigos del grupo HDSP quienes estuvieron ahí para colaborar siempre que su ayuda fue requerida.

A la Universidad Industrial de Santander, por haber sido la promotora de nuestra formación profesional.

TABLA DE CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	13
1. OBJETIVOS	16
1.1. OBJETIVO GENERAL	16
1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	16
2. MARCO TEÓRICO	17
2.1. CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X.....	17
2.2. CÓDIGOS DE APERTURA	19
2.3. PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS	19
2.4. RECUPERACIÓN DE LA FASE DE UNA SEÑAL	20
2.5. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	21
3. DISEÑO DE LOS CÓDIGOS DE APERTURA.....	23
4. RECUPERACIÓN DE LA FASE EN PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS PROVENIENTES DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X.....	24
4.1. RECUPERACIÓN DE LA FASE VÍA <i>WIRTINGER FLOW (WF)</i>	24
4.1.1. Inicialización espectral.	25
4.1.2. Esquema gradiente descendente estocástico.	25
4.1.3. Código de apertura para WF.	26
4.2. RECUPERACIÓN DE LA FASE VÍA <i>WIRTINGER FLOW TRUNCATED</i> (WFT)	27
4.2.1. CÓDIGO DE APERTURA PARA EL WFT.....	29
4.2.1.1 Códigos de apertura aleatorios.....	29
4.2.1.2 Códigos de apertura con estructura dada por la matriz Hadamard	30
4.2.1.3 Códigos de apertura uniformes	31
4.2.1.4 Códigos de apertura con la transformada discreta de Fourier (DFT). ...	31
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	33
5.1. SIMULACIÓN Y RESULTADOS DEL ALGORITMO WINTINGER FLOW	35

5.2.	SIMULACIÓN Y RESULTADOS PARA EL ALGORITMO WIRTINGER FLOW TRUNCATED	38
5.2.1.	Empleando Códigos De Apertura aleatorios.....	38
5.2.2.	Empleando Códigos De Apertura con la estructura de la matriz Hadamard	40
5.2.3.	Empleando Códigos de Apertura Uniformes	42
5.2.4.	Empleando Códigos De Apertura con la transformada discreta de Fourier (DFT)	44
5.3.	Resumen de resultados	46
6.	CONCLUSIONES	51
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	52
	BIBLIOGRAFÍA	55

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Montaje del cristal para una medición cristalográfica.....	18
Figura 2. Configuración ilustrativa para adquirir los patrones de difracción codificados.....	20
Figura 3. Códigos de apertura, con transmitancia: a) $tr=0.1$ b) $tr = 0.5$ c) $tr = 0.7$	23
Figura 4. Código de apertura octonario.....	27
Figura 5. Códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard con transmitancia a) $tr = 0.1$ b) $tr = 0.3$ c) $tr = 0.5$	30
Figura 6. (a) Código aleatorio con clústeres. (b) Código uniforme generado.....	31
Figura 7. Códigos de apertura con la operación DFT en los vectores Galois, y con transmitancia: a) $tr = 0.1$ b) $tr = 0.5$ c) $tr = 0.7$	32
Figura 8. a) Imagen parte real R tamaño 100×100 px. b) Imagen de la fase A tamaño 100×100 px.	33
Figura 9. Matrices más representativas dentro del algoritmo.....	34
Figura 10. Ejemplo de cuatro códigos de apertura del mismo tipo empleados para simulación con cuatro tomas.....	34
Figura 11. Análisis de transmitancia para WF, con $2 \leq L \leq 8$	36
Figura 12. Análisis de transmitancia para WF, con $9 \leq L \leq 14$	37
Figura 13. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura aleatorios, con $2 \leq L \leq 8$	39
Figura 14. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura aleatorios, con $9 \leq L \leq 14$	40
Figura 15. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard, con $2 \leq L \leq 8$	41
Figura 16. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard, con $9 \leq L \leq 14$	42

Figura 17. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura uniformes, con $2 \leq L \leq 8$	43
Figura 18. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura uniformes, con $9 \leq L \leq 14$	44
Figura 19. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la DFT, con $2 \leq L \leq 8$	45
Figura 20. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la DFT, con $9 \leq L \leq 14$	46
Figura 21. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura aleatorios octonarios y algoritmo WF con 4 tomas y $tr = 0.399$, a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=10.7501 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=7.3919 [dB].	48
Figura 22. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura aleatorios y algoritmo TWF con 4 tomas y $tr = 0.5998$, a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=22.1328 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=22.2368 [dB].	48
Figura 23. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura con estructura Hadamard y algoritmo TWF con 4 tomas y $tr = 0.3473$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=13.8323 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=18.8934 [dB].	49
Figura 24. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura DFT y algoritmo TWF con 4 tomas y $tr = 0.7155$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=22.9786 [dB] b) PSNR fase 18.0444 [dB].	49
Figura 25. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura uniformes y algoritmo TWF con 4 tomas y $tr = 0.5$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=35.4684 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=23.9741 [dB].	50

RESUMEN

TÍTULO: ALGORITMO DE RECONSTRUCCIÓN CRISTALOGRÁFICA PARA LA RECUPERACIÓN DE LA FASE DE UNA SEÑAL MUESTREADA MEDIANTE UN SISTEMA DE MEDIDA COMPRESIVO POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X*

AUTORES: LUIS MIGUEL DÍAZ MORALES**
HANS YECID GARCIA ARENAS**

PALABRAS CLAVES: Código de apertura, Muestreo Compresivo, recuperación de la fase, transmitancia, patrones de difracción.

DESCRIPCIÓN:

La Cristalografía de rayos X es una técnica experimental para el estudio y análisis de materiales, permite reconstruir la estructura tridimensional (3D) de un cristal mediante la solución de la función densidad electrónica a partir de la estimación de la fase de los patrones de difracción, con el fin de proporcionar información sobre las propiedades electrónicas o elásticas inusuales de la muestra, sin embargo la fase no puede ser registrada directamente por el sensor óptico, por lo tanto es necesaria la reconstrucción de los patrones de difracción. Investigaciones recientes muestran que se puede recuperar la fase modificando la arquitectura de medición incluyendo un elemento óptico conocido como código de apertura, que modula la señal de interés. La modulación que realiza el código de apertura consiste en el paso o bloqueo de cierta cantidad de haces de rayos X. Al porcentaje de la cantidad haces que no fueron bloqueados se conoce como transmitancia. Este trabajo presenta el análisis de diferentes códigos de apertura con una variación de transmitancia para encontrar una óptima recuperación de la fase en términos de la relación pico señal a ruido (PSNR), cuando se emplean los algoritmos de recuperación de la fase Wirtinger Flow (WF) y Truncated Wirtinger Flow (TWF).

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físico – Mecánicas. Escuela de Ingeniería eléctrica, electrónica y telecomunicaciones. Director PhD. Henry Arguello Fuentes.

ABSTRACT

TITLE: CRYSTALLOGRAPHIC RECONSTRUCTION ALGORITHM FOR RECOVERING THE PHASE OF A SIGNAL SAMPLED BY A COMPRESSION SYSTEM AS MEASURED BY X-RAY DIFFRACTION*

AUTHOR: LUIS MIGUEL DÍAZ MORALES**
HANS YECID GARCIA ARENAS**

KEY WORDS: Coded aperture; phase retrieval, transmittance; diffraction patterns.

DESCRIPTION:

X-ray crystallography is an experimental technique for studying and analyzing the materials, allows to reconstruct the three-dimensional structure (3D) of a crystal based on the solution of the equation electron density with the phase of the diffraction patterns, to provide information about the electronics or elastics unusual properties. However the phase of the diffraction patterns cannot be measured directly by the optic sensor as a Charge Coupled Device (CCD), Complementary Metal-Oxide Semiconductor (CMOS) or Hybrid Pixel Array Detector (HPAD), therefore is necessary its reconstruction. Recent research shows that the phase can be recovery by modifying the measurement architecture including an optic element known as coded aperture, that it modulated the interest signal. Modulation is the pass or block of certain amount of beam of X-ray. The percentage of the amount of beams that is not blocking is called transmittance. This work presents the optimal transmittance of the coded aperture that guarantees the phase retrieval when the coded aperture are used in different recovery methods. This work presents the analysis of different coded apertures with a transmittance varying for finding an optimal phase retrieval based on the Peak Signal to Noise Ratio (PSNR), when it uses the phase retrieval algorithms Wirtinger Flow (WF) and Truncated Wirtinger Flow (TWF).

* Bachelor thesis

**Faculty of Physical – Mechanics Engineering. Electrical, electronic and telecommunication engineering and Informatics School. Director PhD. Henry Arguello Fuentes.

INTRODUCCIÓN

La cristalografía de rayos-X es una técnica que permite determinar las posiciones atómicas representadas en el espacio tridimensional de un sólido cristalino [1]. Para una medida de difracción de rayos-X, el cristal se ubica sobre un goniómetro y se gira gradualmente mientras se bombardea con un haz monocromático de rayos X, de esta forma se produce un patrón de difracción, debido a que la longitud de onda de los rayos X está en el mismo orden que las distancias inter-atómicas de una estructura cristalina. Las intensidades son registradas por un sensor óptico como un CCD (*Charge Coupled Device*), CMOS (*Complementary Metal-Oxide Semiconductor*) o HPAD (*Hybrid Pixel Array Detector*), que mediante un sistema de procesamiento de señales obtienen imágenes bidimensionales de los patrones de difracción, tomadas en diferentes rotaciones del cristal. La componente de la fase de los patrones de difracción no puede ser registrada directamente por el sensor y por lo tanto es necesaria su recuperación. Para crear un modelo tridimensional de la estructura molecular del cristal, se debe resolver la función densidad electrónica usando las fases recuperadas. Las medidas que llegan al detector son aproximadas a la magnitud de la transformada de Fourier, basándose en el principio de difracción de Fraunhofer de campo lejano [2].

Con base en la solución de la función densidad electrónica se logran determinar las posiciones medias de los átomos en el cristal, así como sus enlaces químicos, las propiedades electrónicas o elásticas inusuales de un material, dar información sobre las interacciones y los procesos químicos, servir como base para el diseño de fármacos contra enfermedades [3] y desarrollo de nuevos materiales [4].

Investigaciones recientes en el problema de recuperación de la fase muestran que se puede modificar la arquitectura de medición, adicionando un elemento óptico conocido como código de apertura. Este elemento modula el patrón de difracción

de rayos-X antes de llegar al detector. La señal se modula cambiando la fase de algunos haces difractados o bloqueando el paso de algunos de éstos. La selección de los haces modulados se realiza de manera aleatoria. El porcentaje de los rayos-X difractados que pasan a través del código de apertura, se conoce como transmitancia.

Algunas de las aplicaciones de los códigos de apertura incluyen: mejora en el rendimiento de los sensores [5], matrices uniformemente redundantes para formación de imágenes sin lentes [6], transformación de Hadamard en espectroscopia [7] y arquitecturas de compresión de imágenes hiperespectrales [8]-[9]. Además, han sido utilizados para la reconstrucción de imágenes de Espectroscopia Raman usando técnicas de *Compressed Sensing* (CS) [10] con las que se ha demostrado que, matemáticamente, es posible reconstruir una señal que ha sido muestreada por debajo del criterio de Nyquist, explorando la posibilidad de disminuir los periodos de tiempo para la adquisición de datos.

Algunos métodos como *PhaseLift* [11], basado en la técnica de programación convexa; solución de problemas de optimización inspirados en la reciente literatura de *Matrix Completion* [12]; formulación no convexa del problema de recuperación de la fase vía *Wirtinger Flow* (WF) [13] y *Wirtinger Flow Truncated* (WFT) [14], permiten recuperar la fase a partir de los patrones de difracción de rayos-X obtenidos utilizando códigos de apertura. Sin embargo, el problema converge a soluciones erróneas cuando no se elige la configuración correcta de transmitancia en los códigos de apertura al utilizar los diferentes métodos para la reconstrucción de la fase. Este trabajo presenta el análisis realizado a la respuesta de los algoritmos WF y WFT ante variaciones en los parámetros de los códigos de apertura para lograr mejorar la Relación Pico de Señal a Ruido (PSNR, por sus siglas en inglés) de la fase recuperada. Se construyó un conjunto de imágenes en fase de manera sintética y se realizaron experimentos numéricos empleando dichos

algoritmos con las variaciones necesarias para incluir los códigos de apertura a analizar. En las diversas simulaciones se realizó un barrido en el valor de la transmitancia y se calculó la PSNR para determinar la calidad de la reconstrucción obtenida.

1. OBJETIVOS

1.1. OBJETIVO GENERAL

Diseñar un algoritmo de reconstrucción de la fase de una señal proveniente de un sistema de cristalografía basado en códigos de apertura, usando la técnica de muestreo compresivo por difracción de rayos-X.

1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Diseñar e implementar los algoritmos de sensado y reconstrucción de fase de una señal sintética de cristalografía captada mediante un sistema de rayos-X basado en códigos de apertura.
- Optimizar la estructura espacial de los códigos de apertura para mejorar la calidad de las señales de cristalografía reconstruidas usando un número reducido de proyecciones.
- Determinar el desempeño de las estructuras de códigos diseñados mediante simulación numérica usando señales seleccionadas de cristalografía.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X

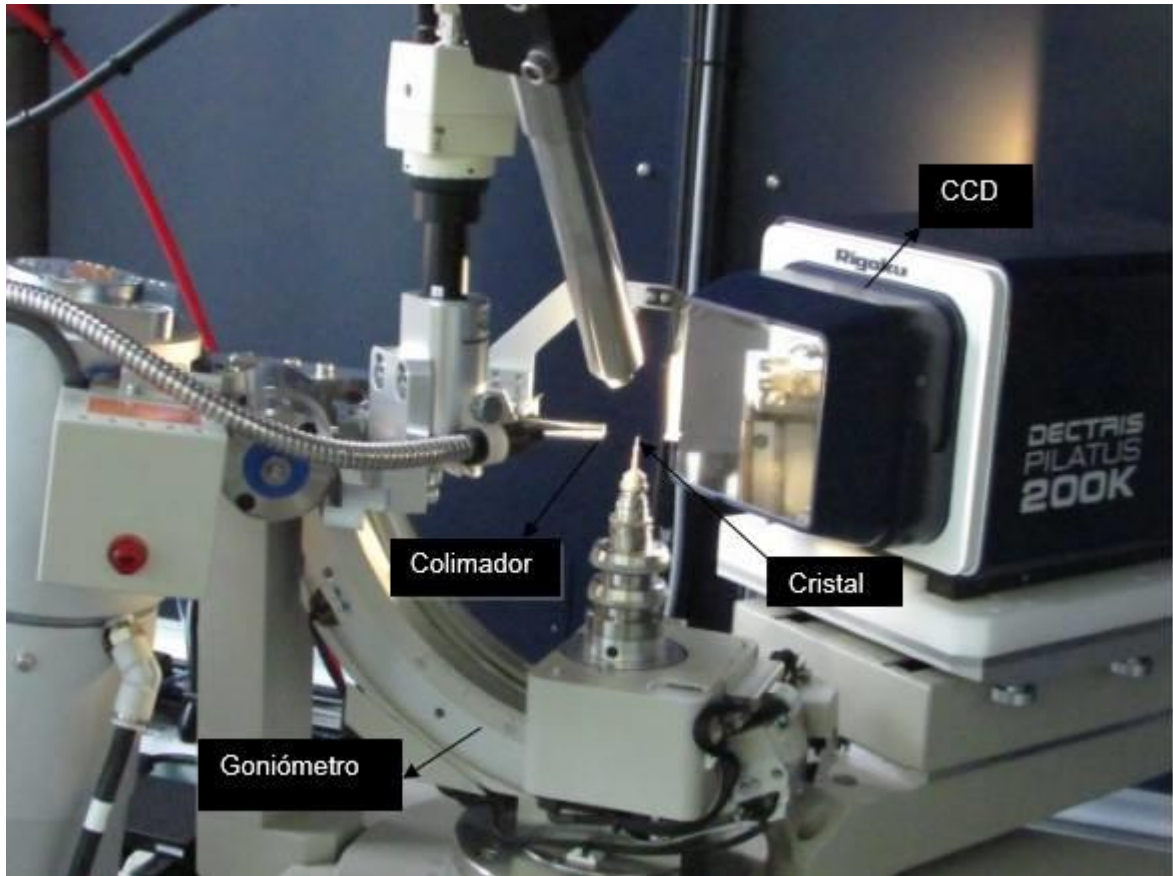
La cristalografía de rayos-X es un método científico que permite determinar las posiciones atómicas representadas en el espacio tridimensional para un sólido cristalino [15], cuando un haz de rayos-X interactúa con este y se difracta en muchas direcciones; este fenómeno de difracción es posible, debido a que la longitud de onda de los rayos X está en el mismo orden que las distancias interatómicas de una estructura cristalina. A partir de los ángulos e intensidades de los haces difractados, un cristalógrafo puede producir una imagen tridimensional de la densidad de electrones y con base a ello se logran determinar las posiciones medias de los átomos en el cristal, así como sus enlaces químicos.

Dado que muchos materiales como sales, metales, minerales, semiconductores, así como diversas moléculas inorgánicas, orgánicas y biológicas pueden formar cristales, la cristalografía de rayos-X ha sido fundamental en el desarrollo de otras áreas científicas y sigue siendo el principal método para la caracterización de la estructura atómica de nuevos materiales. La estructura de materiales analizada con rayos-X también permite estudiar 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 [3].

Para una medida de difracción de rayos X, el cristal se ubica sobre un goniómetro (Figura 1) y se hace girar gradualmente mientras se bombardea con un haz monocromático de rayos X, de esta forma se produce un patrón de difracción cuyas intensidades son registradas por un dispositivo foto multiplicador, que mediante un sistema de procesamiento de señales obtiene imágenes bidimensionales de los haces difractados, tomadas en diferentes rotaciones del cristal. De esta manera se

crea un modelo tridimensional de la densidad de los electrones utilizando el modelo matemático de la transformada de Fourier.

Figura 1. Montaje del cristal para una medición cristalográfica



La cristalografía de rayos-X está relacionada con otros métodos para la determinación de estructuras atómicas. Patrones de difracción similares pueden ser producidos por la dispersión de electrones o neutrones, que son interpretados mediante la transformada de Fourier. Si no se pueden obtener monocristales de tamaño suficiente, otros métodos de rayos-X pueden ser aplicados para obtener información menos detallada. Estos métodos incluyen la difracción de fibra, difracción de polvo y de dispersión de rayos-X de bajo ángulo (SAXS). Si el material estudiado solo está disponible en forma de polvos nanocristalinos o posee pobre

cristalinidad, se pueden aplicar los métodos de cristalografía de electrones para determinar su estructura atómica.

2.2. CÓDIGOS DE APERTURA

Un código de apertura es una matriz que modula la intensidad de una fuente antes de llegar al detector, es decir, permite o bloquea el paso de la radiación electromagnética en diferentes puntos del espacio. Los códigos de apertura han sido ampliamente usados para mejorar el rendimiento de los sensores [5]. La mayor cantidad de aplicaciones incluyen matrices uniformemente redundantes para formación de imágenes sin lentes [6], transformación de Hadamard en espectroscopia [7] y arquitecturas de compresión de imágenes hiperespectrales [8]-[9]. Además, pueden ser vistos como codificadores de campo de luz que permiten hacer medidas de radiación usando detectores de irradiancia [16].

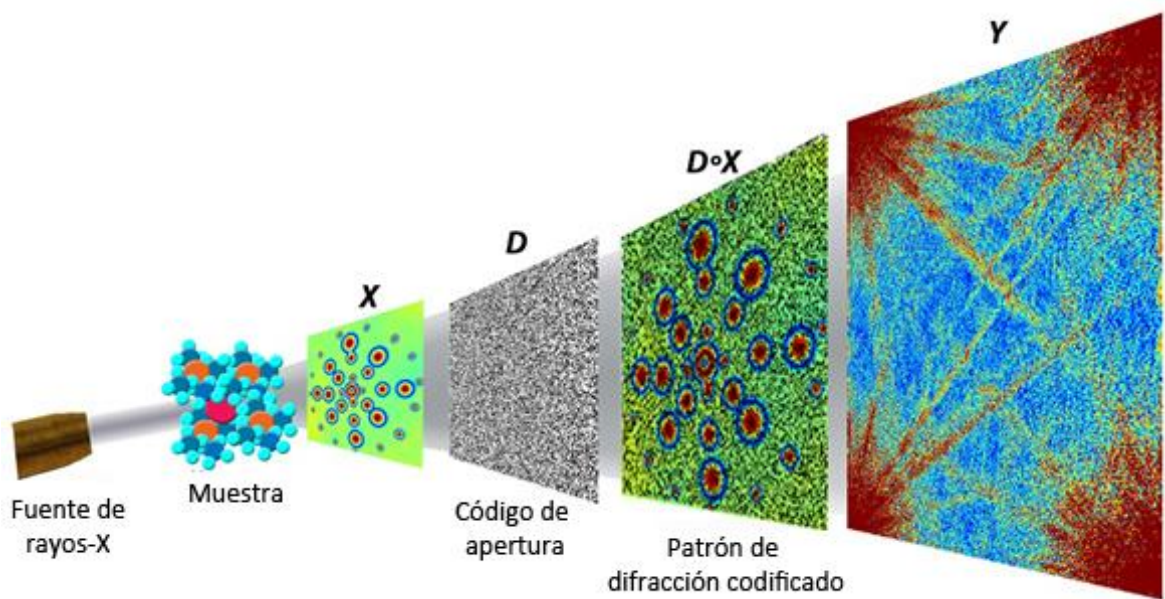
2.3. PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS

Los patrones de difracción codificados consisten en modular la señal proveniente de la difracción de los rayos-X mediante códigos de apertura como se muestra en la Figura 2. Para el procesado de los patrones de difracción codificados, que permiten solucionar el problema de recuperación de la fase, es necesario usar un número suficiente de códigos de apertura diseñados apropiadamente para que haya una alta probabilidad de encontrar la solución exacta del problema. Esta modulación consiste en bloquear ciertos haces de rayos-X con el fin de captar una imagen codificada en menor tiempo, comparado con una adquisición tradicional.

En una configuración práctica el cristal se ubica entre la fuente de rayos-X y un código de apertura. Las señales generadas cuando el haz de rayos-X irradia, en diferentes ángulos, sobre el cristal son moduladas por el código de apertura. Cada

proyección obtenida es un patrón de difracción que es adquirido por un sensor CCD, con el que sólo es posible medir la intensidad. La implementación, además de la construcción de los códigos de apertura que permiten bloquear los rayos-X, requiere de un dispositivo de alta precisión para posicionar la máscara dentro de la arquitectura de medición.

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



2.4. RECUPERACIÓN DE LA FASE DE UNA SEÑAL

El problema de recuperación de la fase se debe a que los detectores miden la magnitud de la radiación de las proyecciones difractadas y no pueden registrar su fase. Suponiendo un proceso de medición $\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle$ de algunas muestras de un objeto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, donde $(\mathbf{a}_k) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ representa la matriz de transformada de Fourier, que solo tiene acceso a medidas sin fase de la forma:

$$y_k = |\langle a_k, x \rangle|^2, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

con la información contenida en y_k se puede encontrar el vector x resolviendo un sistema de ecuaciones lineales. El problema consiste en recuperar la fase de la señal x a partir del módulo de su transformada de Fourier [11], en donde $x = \{x[t]\}_{t=0}^{n-1} \in \mathbb{C}^n$ proviene de medidas del tipo:

$$y_k = \left\| \sum_{t=0}^{n-1} x[t] e^{-i2\pi\omega_k t} \right\|^2, \quad \omega_k \in \Omega \quad (2)$$

donde $0 \leq \omega_k \leq 2\pi$ y Ω denota el espacio de frecuencias en radianes por segundo.

2.5. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Los sensores ópticos tales como los dispositivos de carga acoplada (CCD por su sigla en Inglés) o placas fotográficas, solo miden la intensidad de luz proveniente de los objetos bajo observación [17]. Esta medida es incompleta porque los campos de luz no sólo tienen amplitud, relacionada directamente con la intensidad, sino que además tienen una fase, que se pierde en las mediciones. Las mediciones que solo contienen magnitud o intensidad son aceptables en áreas como fotografía, debido a que se satisfacen los requerimientos con dicha información. Sin embargo, en ciertas aplicaciones, la fase de la señal contiene información esencial, por ejemplo, es necesaria para identificar ciertos materiales [18]. Para los que las medidas de magnitud o intensidad no son factores diferenciables. Esto gracias a que la fase es única para cada señal.

La base del problema de recuperación de la fase consiste en reconstruir una señal a partir de la magnitud de su transformada de Fourier [19]-[20]. Esto se debe a que la toma de imágenes en rayos-X coherentes sigue el principio de difracción de

Fraunhofer, en donde el campo óptico en el detector puede aproximarse como la transformada de Fourier del objeto de interés.

El fenómeno de difracción de rayos-X en cristalografía puede modelarse como un problema de recuperación de la fase [21], que puede usarse para la identificación de los materiales en evaluación. Las técnicas convencionales de reconstrucción requieren tiempos de medición que pueden alcanzar horas e incluso días, la exposición excesiva de la muestra a la radiación puede causar su degradación o cambios estructurales, que además de la pérdida de la muestra, generan baja calidad en las señales que se reconstruyen. Adicionalmente, la mayoría de los algoritmos de reconstrucción propuestos o existentes requieren que la muestra sea suficientemente pequeña y de extensión finita, para que los correspondientes patrones de difracción sean muestreados adecuadamente.

Recientemente, se han analizado arquitecturas de medición de señales incluyendo un elemento óptico en el sistema, denominado código de apertura. Inspirado en el éxito del uso de estos códigos de apertura en espectroscopia, la adquisición de imágenes espectrales [8]-[22] y tomografía [23], se propone hacer uso de este elemento óptico en cristalografía de rayos-X. Los códigos de apertura, codifican o modulan la señal bajo análisis, facilitando la solución del problema inverso de recuperación de la fase [23]. De esta forma, el problema que se busca solucionar en este proyecto es el diseño de los códigos de apertura para incluir en el sistema de adquisición y el análisis de las ganancias que se pueden obtener al incluir estos elementos en arquitecturas de cristalografía de rayos-X. Para su simulación se implementan los algoritmos de muestreo y reconstrucción de señales de cristalografía basadas en la técnica de muestreo compresivo.

3. DISEÑO DE LOS CÓDIGOS DE APERTURA

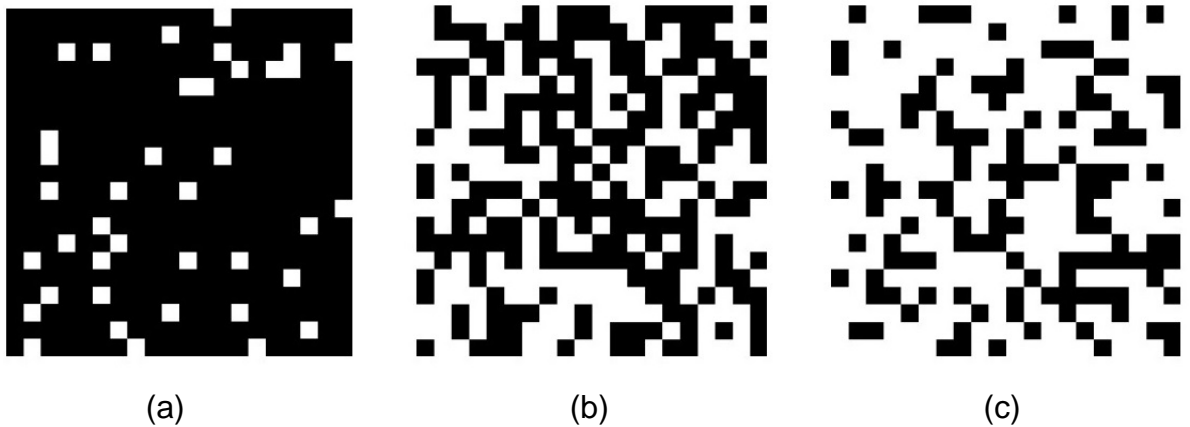
Las aperturas codificadas se diseñan como una matriz $\mathbf{D} = (d_{ij}) \in \mathbb{C}^{m \times n}$, si $d_{ij} \in \{0,1\}$ es Booleana y si $d_{ij} \in \{0,1,-1,j,-j\}$ se dice que es de tipo octonaria. En este sentido, $d_{ij} = 1$ representa un elemento del código de apertura que permite el paso del haz de rayos-X y $d_{ij} = 0$ representa un elemento de bloqueo. Los elementos $d_{ij} \in \{-1,j,-j\}$ corresponden a elementos del código de apertura que cambian la fase del haz de rayos-X [11].

La calidad de la señal reconstruida depende de la correcta selección de transmitancia en los códigos de apertura Booleanos, calculada mediante:

$$t_r = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m-1} \frac{\|d_{ij}\|}{m * n}, \quad (3)$$

donde n representa la cantidad de pixeles horizontales y m representa la cantidad de pixeles verticales. En la Figura 3 se muestran ejemplos de 3 códigos de apertura con transmitancia del 0.1, 0.5 y 0.7, donde 0.1 hace referencia a que un 10% de los elementos del código permiten el paso de radiación y los restantes la bloquean.

Figura 3. Códigos de apertura, con transmitancia: a) $t_r=0.1$ b) $t_r = 0.5$ c) $t_r = 0.7$



4. RECUPERACIÓN DE LA FASE EN PATRONES DE DIFRACCIÓN CODIFICADOS PROVENIENTES DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Con base en el modelo de difracción de Fraunhofer, el campo óptico visto desde el detector se aproxima a la transformada de Fourier del objeto de interés, las mediciones del sensor tienen la forma de (1); si se desea recuperar x cuando la señal se modula por un código de apertura \mathbf{d}_p el proceso de muestreo puede ser expresado como:

$$y_r = \left| \sum_{t=0}^{n-1} x[t] \mathbf{d}_p(t) e^{-\frac{i2\pi kt}{n}} \right|^2 \quad (4)$$

$$r = (p, k), \quad 0 \leq k \leq n - 1,$$

$$1 \leq p \leq L$$

donde L es el número de proyecciones necesarias que modulan el patrón de difracción.

4.1. RECUPERACIÓN DE LA FASE VÍA WIRTINGER FLOW (WF)

El algoritmo WF se basa en la solución del problema de optimización no convexa

$$\min f(x) := \frac{1}{2 * m * n * L} \sum_{k=1}^{m*n*L} \ell(y_k, |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n \quad (5)$$

donde se busca minimizar la función de pérdida según

$$\ell(y_k, |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2) = (y_k - |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2)^2, \quad (6)$$

El algoritmo WF está compuesto de dos partes: inicialización espectral y estimación iterativa aplicando el esquema del gradiente descendente [13].

4.1.1. Inicialización espectral. El parámetro inicial $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ es el vector propio construido a partir de los coeficientes \mathbf{a}_k del vector de muestreo, en (1) hace referencia a los coeficientes de la transformada de Fourier, sin embargo, varios sustitutos convexos [24], [25], [26] sugieren que la elección del vector de muestreo sea aleatoria, por lo tanto, la inicialización espectral descrita en WF [13] se detalla en el Algoritmo 1.

Algoritmo 1 Inicialización espectral

Entrada: observaciones $\{y_k\} \in \mathbb{R}^m$.

Establecer: $\|\mathbf{x}_0\|^2 = n \frac{\sum_{k=1}^m y_k}{\sum_{k=1}^m \|\widehat{\mathbf{a}}_k\|^2}$

Establecer \mathbf{x}_0 , normalizando con $\|\mathbf{x}_0\|$, vector propio correspondiente al valor propio más grande de

$$\mathbf{Y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k \widehat{\mathbf{a}}_k \widehat{\mathbf{a}}_k^*$$

Salida: valor supuesto de \mathbf{x}_0 .

De acuerdo a la forma como se detectan las mediciones (1), el vector de muestreo aleatorio se recalcula según

$$\widehat{\mathbf{a}}_k = |\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x}_0 \rangle|^2, \quad (7)$$

4.1.2. Esquema gradiente descendente estocástico. Teniendo en cuenta la inicialización \mathbf{x}_0 se resuelve iterativamente $\mathbf{x}_{\tau+1}$ de acuerdo con

$$\mathbf{x}_{\tau+1} = \mathbf{x}_{\tau} - \frac{\mu_{\tau+1}}{\|\mathbf{x}_0\|^2} \nabla f(\mathbf{x}_{\tau}), \quad \tau = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

donde $\nabla f(\mathbf{x}_{\tau}) = \left(\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m (|\mathbf{a}_k^* \mathbf{x}|^2 - y_k) (\mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^*) \mathbf{x} \right)$, τ es el número de iteraciones necesarias y μ_{τ} es el tamaño de paso variable; Por medio del gradiente descendente, hasta encontrar una solución convergente.

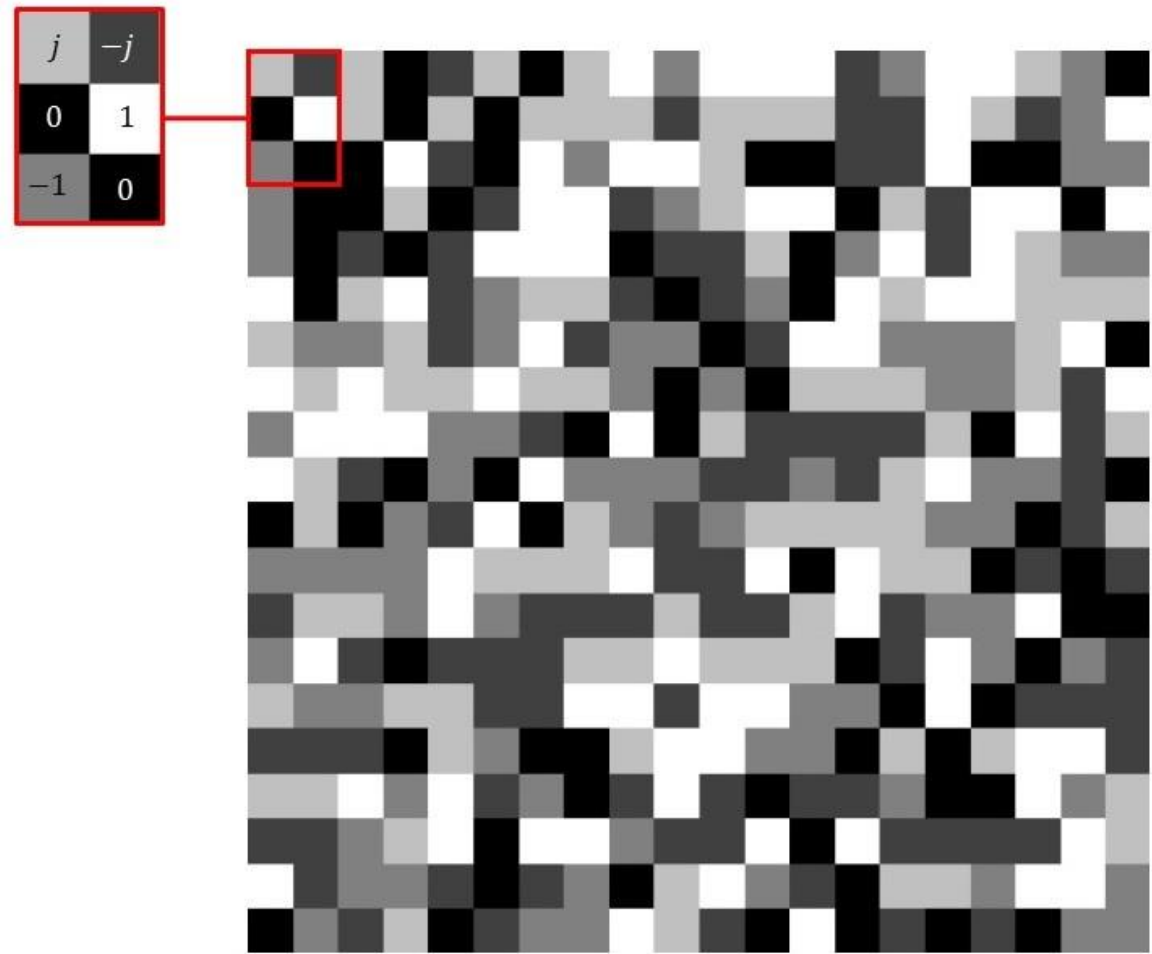
4.1.3. Código de apertura para WF. Considerando el modelo de adquisición de datos en (4) el código de apertura que se ajusta al algoritmo WF es de tipo octonario como se muestra en la Figura 4, tiene la forma $\mathbf{d}_p = \mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2$, donde \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 son independientes y están distribuidas como

$$\mathbf{b}_1 = \begin{cases} -1 & \text{Con prob. } 1/4 \\ 1 & \text{Con prob. } 1/4 \\ j & \text{Con prob. } 1/4 \\ -j & \text{Con prob. } 1/4 \end{cases}, \quad (9)$$

$$\mathbf{b}_2 = \begin{cases} 1 & \text{Con prob } t_r \\ 0 & \text{Con prob } 1 - t_r \end{cases}$$

donde parámetro $0 < t_r < 1$ hace referencia a la transmitancia. En el momento de construcción física de la nueva arquitectura de medición, el proceso de cambio de fase de un haz de rayos-X es complejo si se realiza mediante modulación por códigos de apertura, debido a que es necesaria la construcción de materiales que puedan desfasar un haz de rayo-X 90° , -90° y 180° , motivo por el cual existen limitaciones a la hora de construir este tipo de máscaras.

Figura 4. Código de apertura octonario



4.2. RECUPERACIÓN DE LA FASE VÍA *WIRTINGER FLOW TRUNCATED* (WFT)

La solución del problema de recuperación de la fase vía WFT [14] presta particular atención al modelo probabilístico de Poisson por el hecho de que en la naturaleza el número de fotones detectados por un sensor óptico cumplen ésta distribución, por lo tanto, los datos que llegan al detector tienen la forma

$$y_k \sim \text{Poisson}(|\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle|^2), \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (10)$$

Estimando el logaritmo de la función máximo *Likelihood* donde las muestras provenientes del modelo estocástico son independientes, el problema se resuelve encontrando \mathbf{x} en

$$\min_{\mathbf{x}} - \sum_{k=1}^m y_k \log(|\mathbf{a}_k^* \mathbf{x}|^2) - |\mathbf{a}_k^* \mathbf{x}|^2, \quad (11)$$

para linealizar las restricciones cuadráticas se usa el rango-uno de una matriz $\mathbf{X} = \mathbf{x}\mathbf{x}^*$, donde (11) se convierte en el problema de optimización

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \sum_{k=1}^m (\mu_k^2 - y_k \log \mu_k) + \lambda \text{Tr}(\mathbf{X}) \\ \text{sujeto a } & \mu_k = \mathbf{a}_k^* \mathbf{X} \mathbf{a}_k, \quad 1 \leq k \leq m \\ & \mathbf{X} \succeq 0 \end{aligned} \quad (12)$$

la función *Likelihood* es aumentada por la traza funcional cuyo rol es promover soluciones de bajo-rango de la matriz \mathbf{X} [27]. Para solucionar el problema de optimización (12) se usa el Algoritmo 2, que se fundamenta en WF donde los parámetros de truncamiento restringen el gradiente descendente.

Algoritmo 2 inicialización espectral con parámetros de truncamiento
<p>Entrada: Mediciones $\{y_i \mid 1 \leq i \leq m\}$ y Vectores muestreados $\{a_i \mid 1 \leq i \leq m\}$; valores de umbralización a_z^{lb}, a_z^{ub}, a_h, y a_y.</p> <p>Inicializar: $\mathbf{x}_0 = \sqrt{\frac{mn}{\sum_{t=1}^m \ a_t\ ^2}} \lambda_0 \tilde{\mathbf{x}}$, donde $\lambda_0 = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{t=1}^m y_t}$, y $\tilde{\mathbf{x}}$ es el <i>leading eigenvector</i> de $\mathbf{Y} = \frac{1}{m} \sum_{t=1}^m y_t a_t a_t^* \mathbf{1}_{\{ y_t \leq a_y^2 \lambda_0^2\}}$.</p>

Para $t \leftarrow 0$ hasta T hacer

$$\mathbf{x}^{(t+1)} = \mathbf{x}^{(t)} + \frac{2\mu_t}{m} \sum_{i=1}^m \frac{(y_i - |a_i^* \mathbf{x}^{(t)}|^2)}{\mathbf{x}^{(t)*} a_i} a_i 1_{\varepsilon_1^i} \cap \varepsilon_2^i,$$

Fin para

donde

$$\varepsilon_1^i := \left\{ a_z^{lb} \leq \frac{\sqrt{n} |a_i^* \mathbf{x}^{(t)}|}{\|a_i\| \|\mathbf{x}^{(t)}\|} \leq a_z^{ub} \right\}, \quad \varepsilon_2^i := \left\{ |y_i - |a_i^* \mathbf{x}^{(t)}|^2| \leq \frac{a_h K_t \sqrt{n} |a_i^* z^{(t)}|}{\|a_i\| \|\mathbf{x}^{(t)}\|} \right\}, \quad y$$

$$K_t := \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m |y_l - |a_l^* \mathbf{x}^{(t)}|^2|.$$

Salida: x_T

4.2.1. CÓDIGO DE APERTURA PARA EL WFT. Los parámetros de truncamiento en WFT permiten el uso de códigos apertura Booleanos. Este tipo de código juega un papel importante a la hora de modular rayos-X debido a que sólo son necesarios dos materiales, uno para que bloquee y otro para que permita el paso de rayos X. Este tipo de códigos ya han sido probados con rayos-X en el campo de la tomografía computarizada [23].

4.2.1.1 Códigos de apertura aleatorios. Estos códigos de apertura \mathcal{C} están dados por

$$\mathcal{C} = \mathbf{R} \leq t_r, \quad (13)$$

donde \mathbf{R} corresponde a una matriz de distribución uniforme aleatoria de números en el intervalo $[0,1]$, en la Figura 3 se muestran códigos de este tipo.

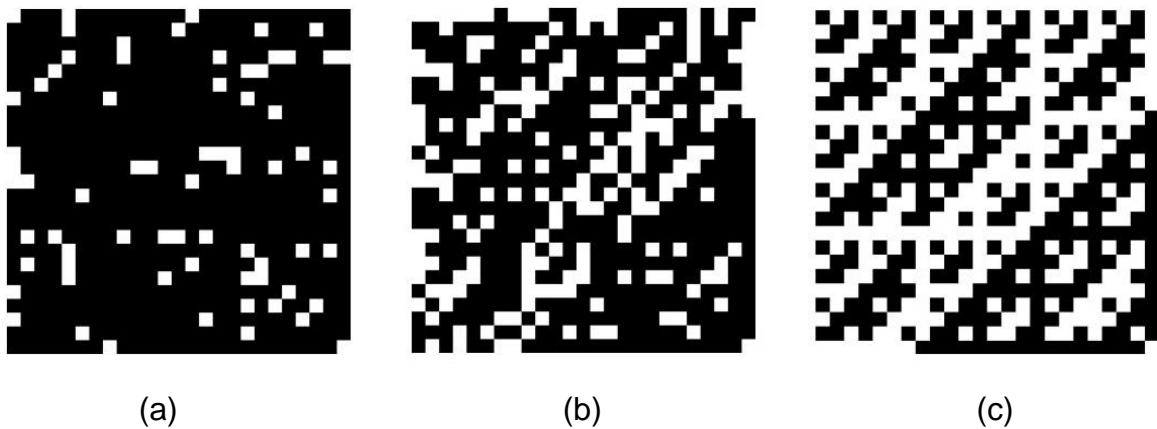
4.2.1.2 Códigos de apertura con estructura dada por la matriz Hadamard.

Las matrices Hadamard son matrices compuestas por [1,-1] con columnas ortogonales. Para códigos de apertura Booleanos con la estructura Hadamard los -1 son reemplazados por 0, esta transformación modifica la condición de ortogonalidad manteniendo la estructura espacial donde la transmitancia calculada por medio de (3) es aproximadamente 0.5, dichos códigos de apertura se modelan como:

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{H} + \mathbf{1}}{2} \circ \mathbf{C}, \quad (14)$$

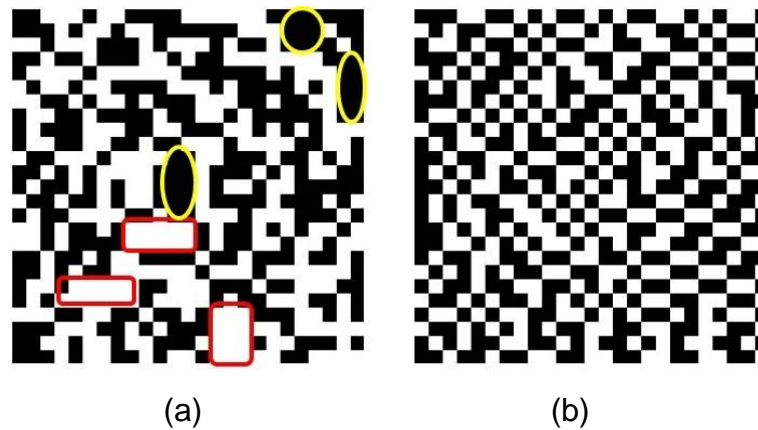
donde \mathbf{H} es la matriz Hadamard. En la Figura 5 se muestran ejemplos de códigos de este tipo.

Figura 5. Códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard con transmitancia a) $t_r = 0.1$ b) $t_r = 0.3$ c) $t_r = 0.5$



4.2.1.3 Códigos de apertura uniformes. Los códigos aleatorios tienden a formar clústeres como los mostrados en Figura 6a, en la que el área encerrada contiene una gran densidad de elementos diferentes de cero contiguos. Con códigos con esta distribución se requiere una gran cantidad de tomas para obtener una buena reconstrucción. Con el fin de reducir los clústeres y lograr un muestreo uniforme, se aplica *blue noise pattern synthesis* [28] - [29] en la figura 6(b) se muestra un ejemplo del resultado de esta operación.

Figura 6. (a) Código aleatorio con clústeres. (b) Código uniforme generado



La transmitancia en un código uniforme \mathbf{U} es $t_r = 1/L$ y satisface la condición:

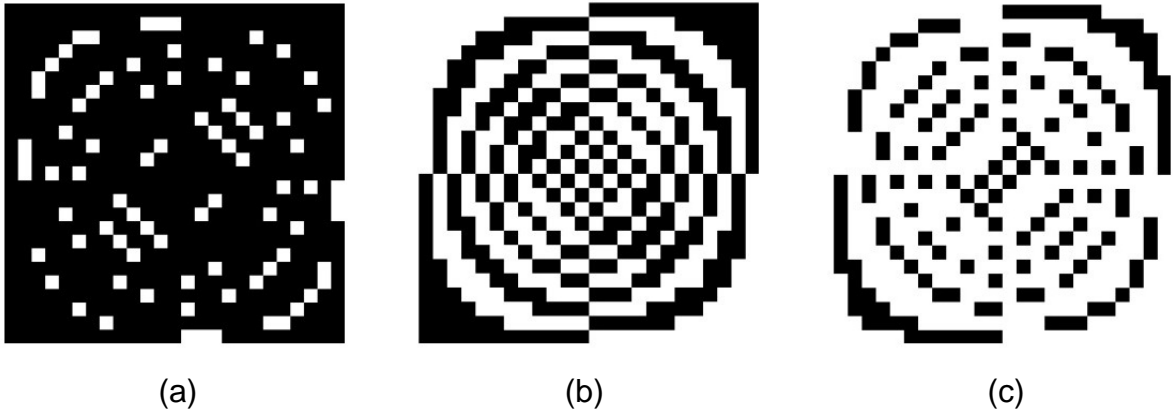
$$\sum_{l=1}^L \mathbf{U}_l = 1. \quad (15)$$

4.2.1.4 Códigos de apertura con la transformada discreta de Fourier (DFT). La operación DFT sobre un vector *Galois* retorna un arreglo, donde la información necesaria para la creación de los códigos de apertura se encuentra en la fase de la DFT esta operación se encuentra descrita por

$$\mathbf{F}_{i,j} = \frac{\left(\tan^{-1} \left(\frac{\Im\{\mathbf{G}_{i,j}\}}{\Re\{\mathbf{G}_{i,j}\}} \right) + \pi \right)}{2\pi} \leq t_r \quad (16)$$

donde $\mathbf{G} = \sum_{t=0}^{n-1} \mathbf{g}[t] e^{-\frac{i2\pi kt}{n}}$, $k = 0, 1, 2, \dots, n-1$ representa el vector *Galois*, t la posición dentro del vector, t_r la transmitancia y n el número mayor de n_1 o n_2 ; la Figura 7 presenta una comparación entre la transmitancia y los valores de la fase se emplean para la construcción de una una matriz con valores Booleanos la cual representa el código de apertura.

Figura 7. Códigos de apertura con la operación DFT en los vectores *Galois*, y con transmitancia: a) $t_r = 0.1$ b) $t_r = 0.5$ c) $t_r = 0.7$



5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con base en la forma polar de un número complejo, los datos de entrada poseen magnitud y fase como las mostradas en la Figura 8, descritos por:

$$\mathbf{X} = |\mathbf{R}| \circ e^{j\mathbf{A}}, \quad (17)$$

donde $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ corresponde a la imagen de la magnitud y \mathbf{A} representa la matriz de fase. Para reconstruir \mathbf{X} completamente se utilizan los algoritmos WF y WFT. En la Figura 2 se muestra una ilustración del proceso de adquisición de los datos de la forma (4), además en la Figura 9 se presentan gráficamente las matrices más representativas dentro del algoritmo. En cuanto a la forma como se emplean los códigos de apertura, se utiliza una matriz diferente para cada toma aun siendo todas del mismo tipo, un ejemplo se aprecia en la Figura 10 donde podemos ver cuatro códigos de apertura uniformes, en orden de visualizar estos códigos de apertura, se redujo su resolución espacial a 25×25 px, que pueden ser usados en una simulación con el algoritmo TWF empleando cuatro tomas.

Figura 8. a) Imagen parte real \mathbf{R} tamaño 100×100 px. b) Imagen de la fase \mathbf{A} tamaño 100×100 px.

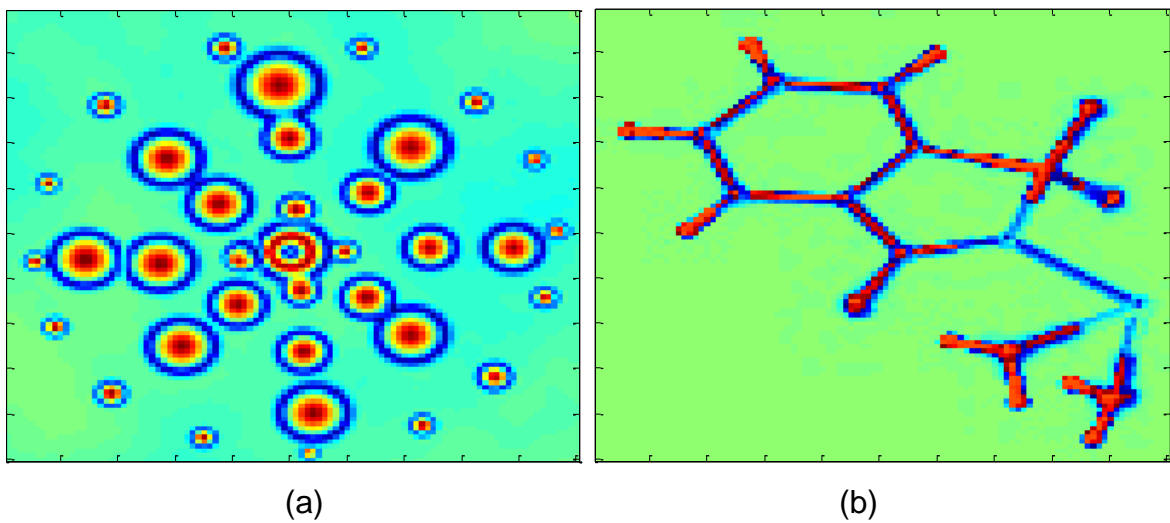


Figura 9. Matrices más representativas dentro del algoritmo

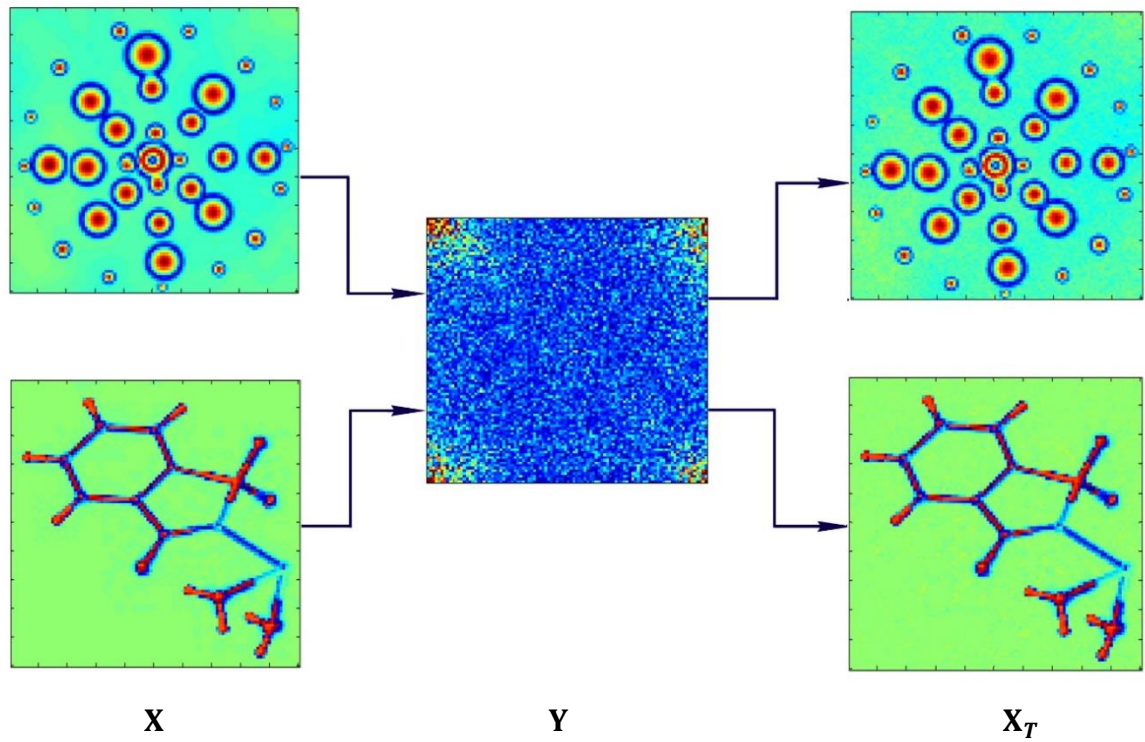
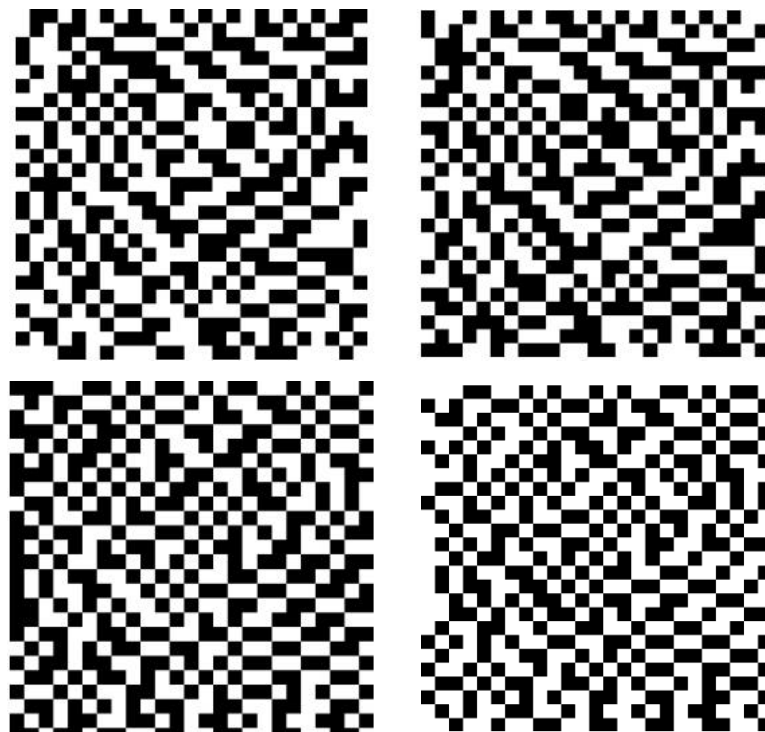


Figura 10. Ejemplo de cuatro códigos de apertura del mismo tipo empleados para simulación con cuatro tomas



Todos los experimentos se realizaron en un Hewlett Packard ENVY15 Intel Core i7 4712HQ a 3.3 GHz y 12 GB de memoria RAM.

5.1. SIMULACIÓN Y RESULTADOS DEL ALGORITMO WINTINGER FLOW

Para el análisis del algoritmo WF fueron realizadas diferentes simulaciones. Con este algoritmo se usaron mascararas del tipo descrito en (9). La transmitancia dada en (3) se empleó con los valores $0.1 \leq t_r \leq 0.9$ con intervalos de 0.1, para determinar el valor óptimo de este parámetro. Además, la cantidad de tomas se varió en $2 \leq L \leq 14$. Los resultados de estas simulaciones se analizaron en términos del PSNR de la fase recuperada. En las Figura 11 y 12 se muestran los resultados obtenidos del barrido de transmitancia y cantidad de tomas, cuando el número mínimo de tomas permite la reconstrucción. Cada experimento fue repetido cien veces y se promediaron los resultados respectivos para cada valor en los parámetros que se variaron.

Figura 11. Análisis de transmitancia para WF, con $2 \leq L \leq 8$

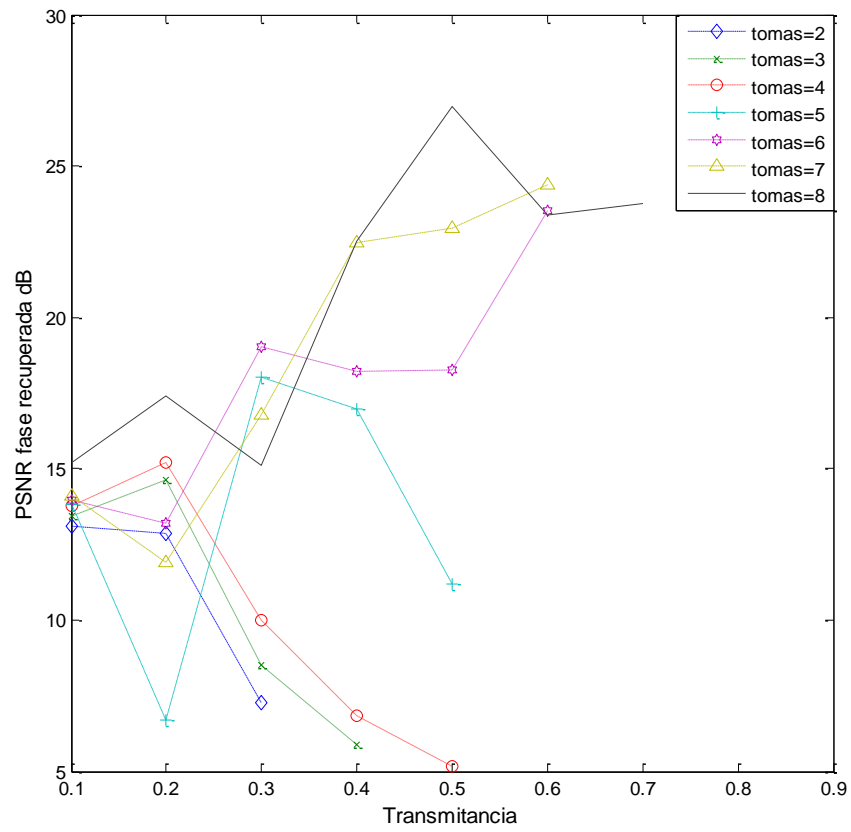
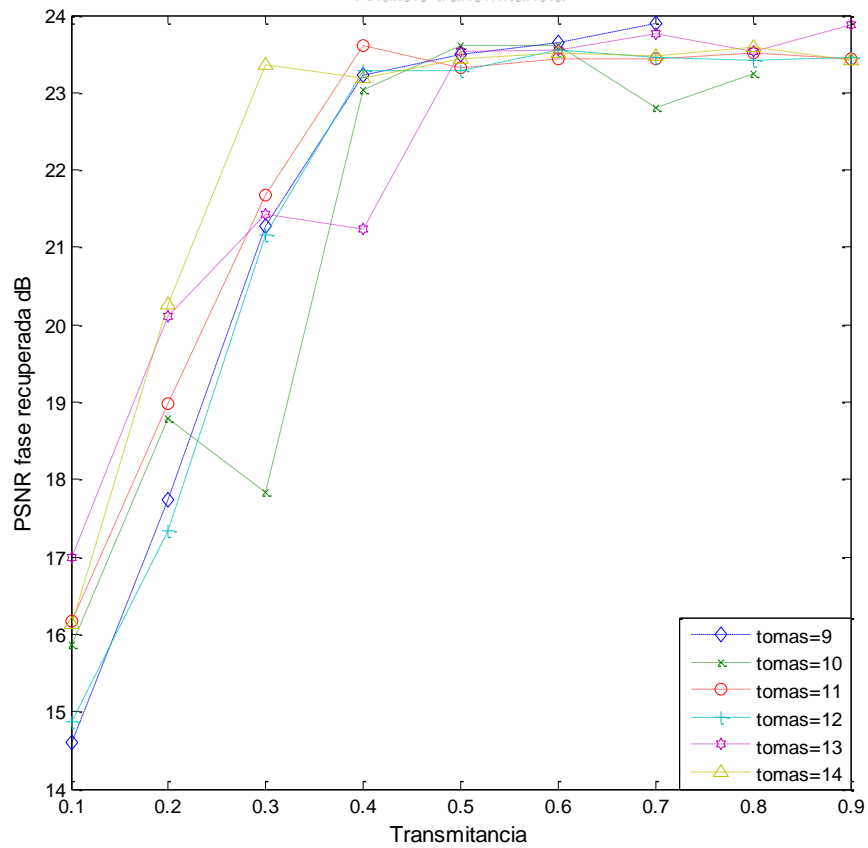


Figura 12. Análisis de transmitancia para WF, con $9 \leq L \leq 14$



De acuerdo con las Figura 11 y 12, el análisis se enfoca principalmente en el PSNR de la fase recuperada, que determina el valor mínimo de transmitancia para una reconstrucción aceptable en $0.5 \leq t_r \leq 0.6$, garantizando $L = 9$ como la mínima cantidad de tomas para lograr una reconstrucción aceptable. Además también se puede notar que aunque el número de tomas incremente, el PSNR de la fase recuperada no presenta un incremento. El análisis del PSNR de la magnitud recuperada en ambos casos es suficientemente alto, por ello no se tomó como criterio de decisión.

5.2. SIMULACIÓN Y RESULTADOS PARA EL ALGORITMO WIRTINGER FLOW TRUNCATED

5.2.1. Empleando Códigos De Apertura aleatorios. Fueron realizadas pruebas utilizando los códigos de apertura dados por (13) la transmitancia dada por (3) se varió en $0.1 \leq t_r \leq 0.9$ con intervalos de 0.1 con el objetivo de determinar el valor óptimo para este parámetro cuando en número de tomas se varia en $2 \leq L \leq 14$. Los resultados de las simulaciones fueron analizados en términos del PSNR de la fase y la magnitud reconstruidas. En las Figura 13 y 14 se presentan los resultados obtenidos mediante las variaciones en estos dos parámetros, cuando la cantidad de tomas es suficiente para realizar la reconstrucción. Cada experimento fue repetido cien veces y los resultados respectivos fueron promediados para cada pareja de parámetros.

De acuerdo a los resultados presentados en PSNR de la fase reconstruida, con este tipo de código de apertura, las transmitancia con las que se obtienen mejores resultados están entre 0.5 y 0.7 y la mínima cantidad de tomas debe ser 8.

Figura 13. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura aleatorios, con $2 \leq L \leq 8$

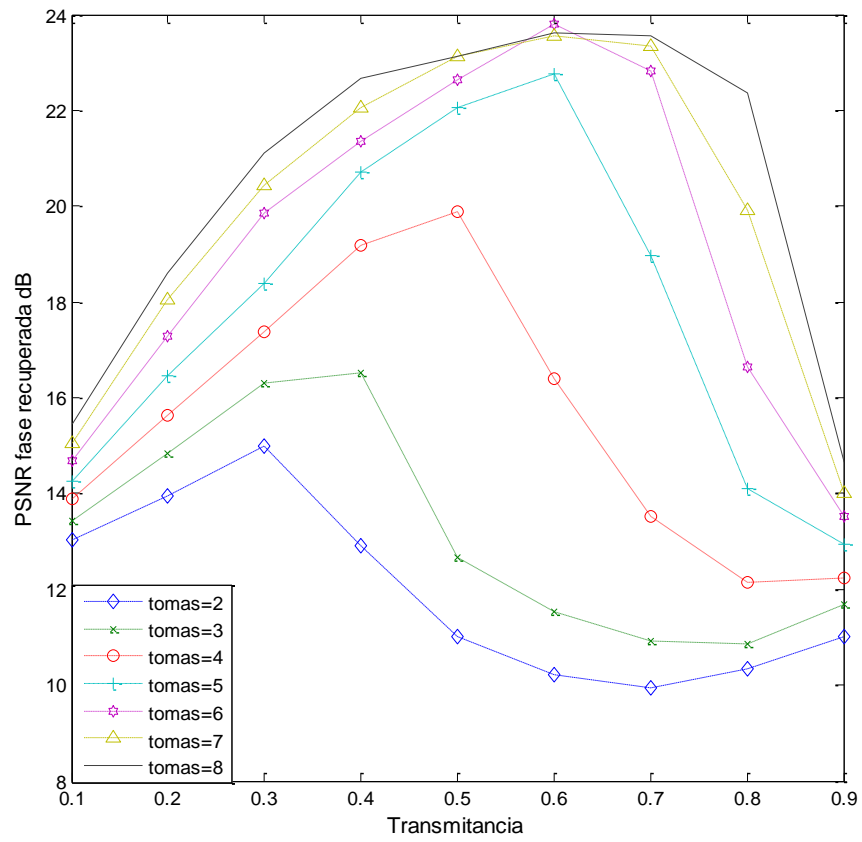
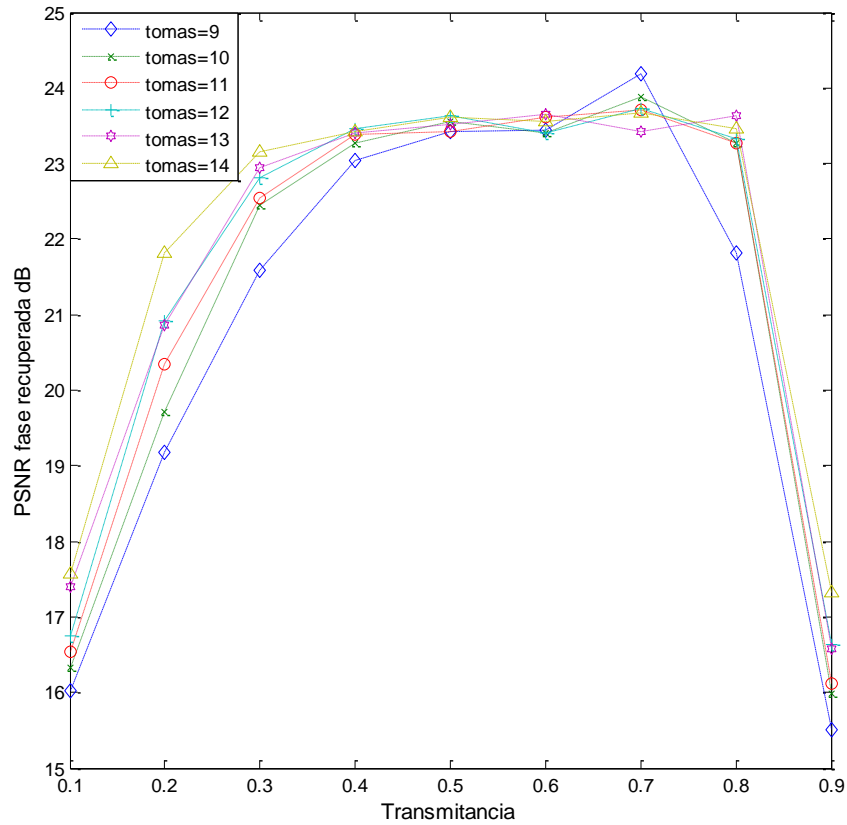


Figura 14. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura aleatorios, con $9 \leq L \leq 14$



5.2.2. Empleando Códigos De Apertura con la estructura de la matriz Hadamard. Para este tipo de código de apertura se realizaron variaciones de transmitancia en $0.05 \leq t_r \leq 0.5$, debido a que la máxima transmitancia que se puede lograr con esta estructura es de 0.5. En las Figura 15 y 16 se muestran los resultados promediados de cien experimentos por cada pareja de valores de transmitancia y cantidad de tomas. Estos resultados muestran que se logran mejores reconstrucciones empleando códigos de apertura con transmitancia de 0.5 y con una cantidad de tomas mínima de 7. Estos resultados son similares a los códigos de apertura aleatorios donde también se encontró un valor óptimo en transmitancia de 0.5.

Figura 15. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard, con $2 \leq L \leq 8$

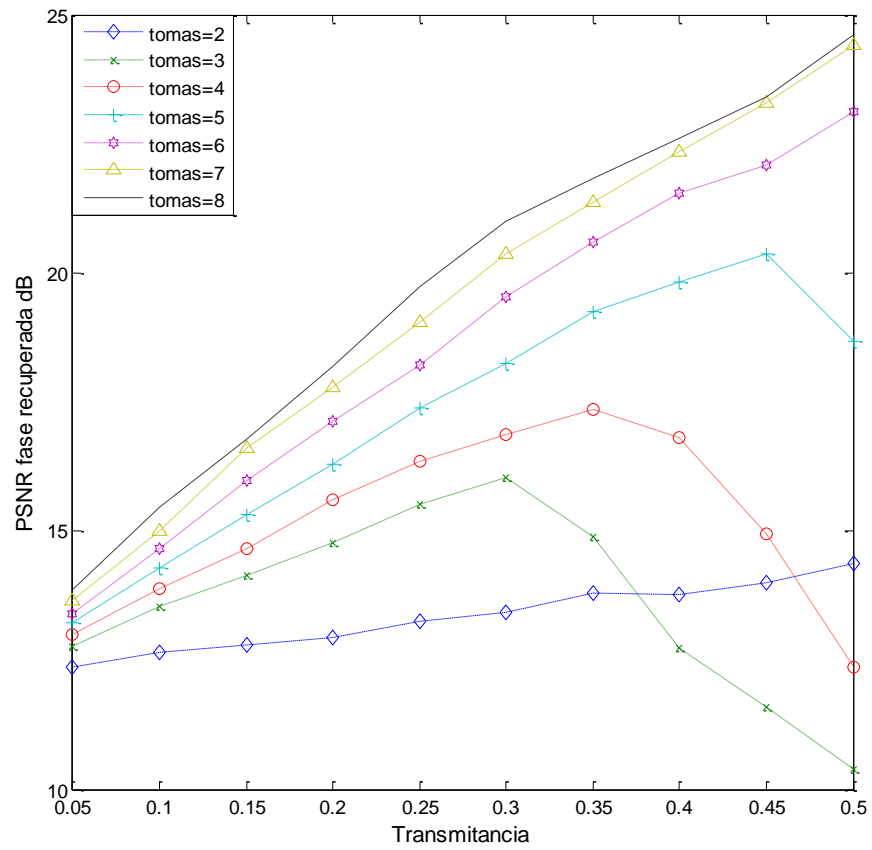
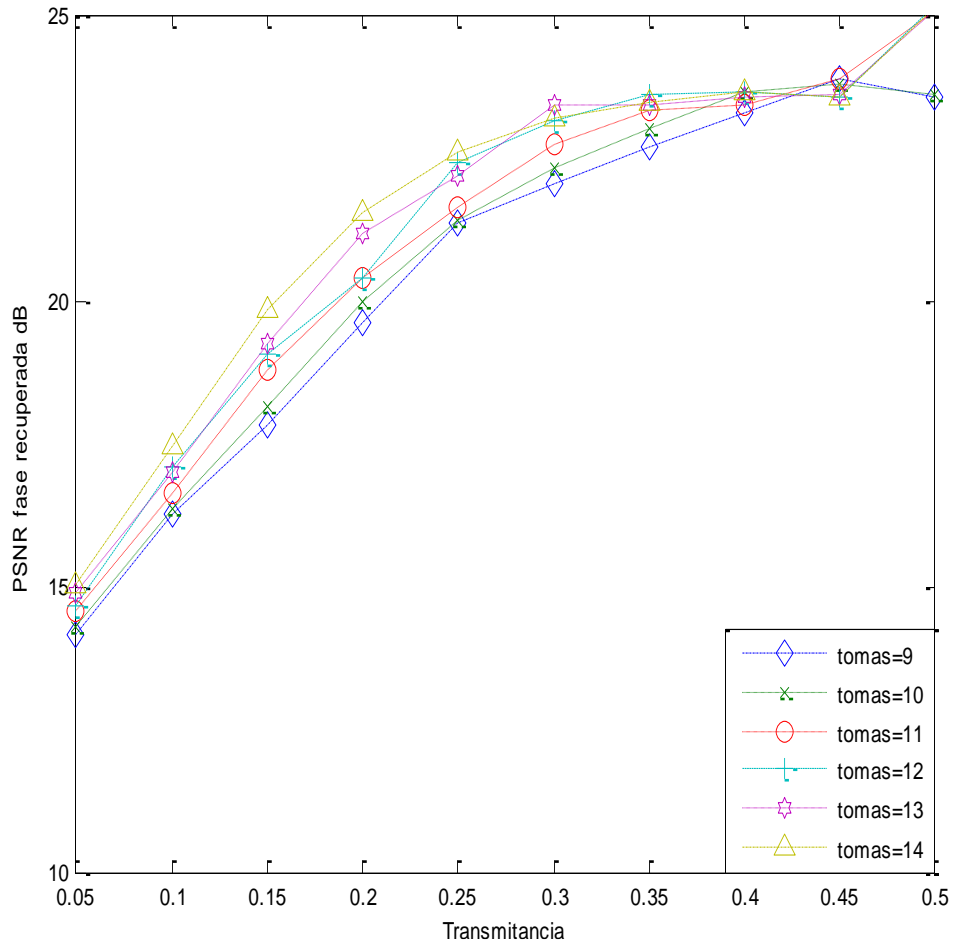


Figura 16. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la estructura de la matriz Hadamard, con $9 \leq L \leq 14$



5.2.3. Empleando Códigos de Apertura Uniformes. Los códigos de apertura uniformes permiten un máximo de transmitancia de 0.5, basándonos en los resultados mostrados en Figura 17 y 18, para la cual se realizaron cien experimentos por cada punto con lo cual se logra concluir que la mínima cantidad de tomas para obtener aceptables resultados en las reconstrucciones es 4 utilizando una transmitancia de 0.5.

Figura 17. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura uniformes, con $2 \leq L \leq 8$

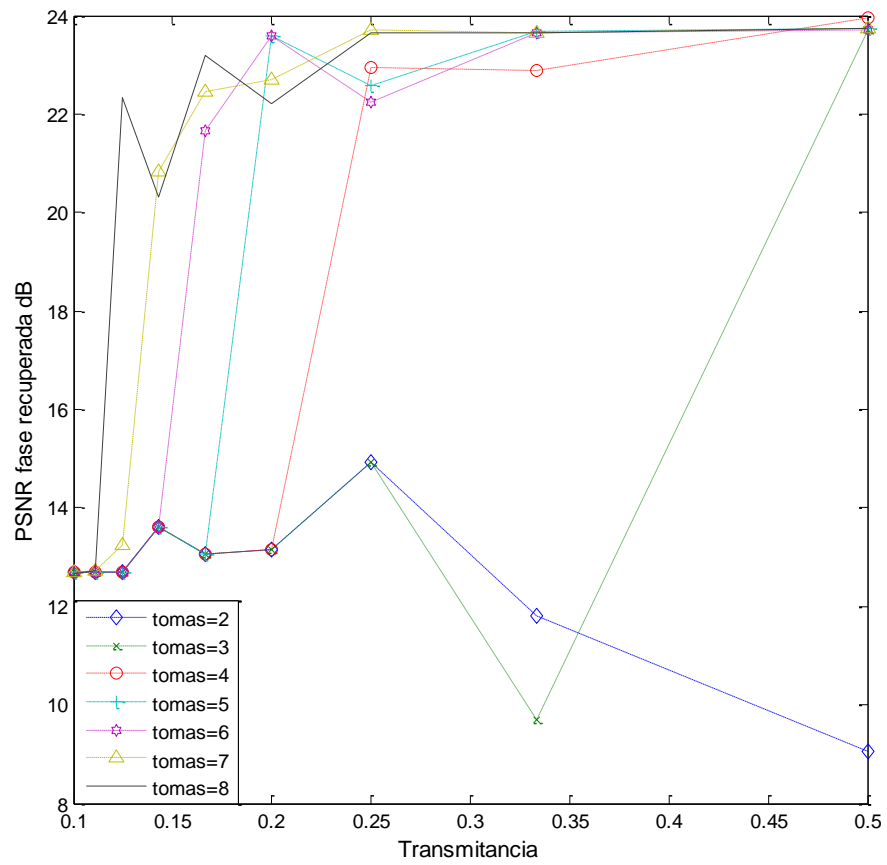
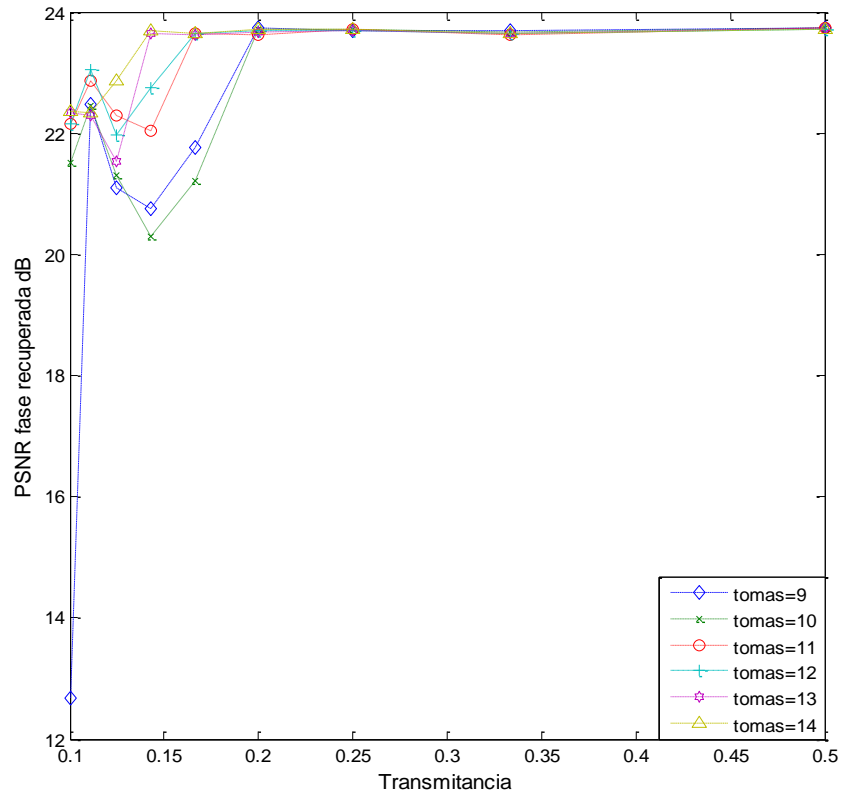


Figura 18. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura uniformes, con $9 \leq L \leq 14$



5.2.4. Empleando Códigos De Apertura con la transformada discreta de Fourier (DFT). A partir de la difracción de Fraunhofer, el código de apertura tiene una simetría dada por la operación DFT, por ello, se decidió analizar esta estructura para los códigos de apertura. Como en los casos anteriores se realizaron cien simulaciones y los PSNR resultantes fueron promediados, la transmitancia fue variada en $0.1 \leq t_r \leq 0.9$ y la cantidad de tomas en $2 \leq L \leq 14$. En la Figura 19 y 20 se muestran los resultados de PSNR de la fase reconstruida mostrando el valor más alto para una transmitancia de 0.8 con 6 tomas.

Figura 19. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la DFT, con $2 \leq L \leq 8$

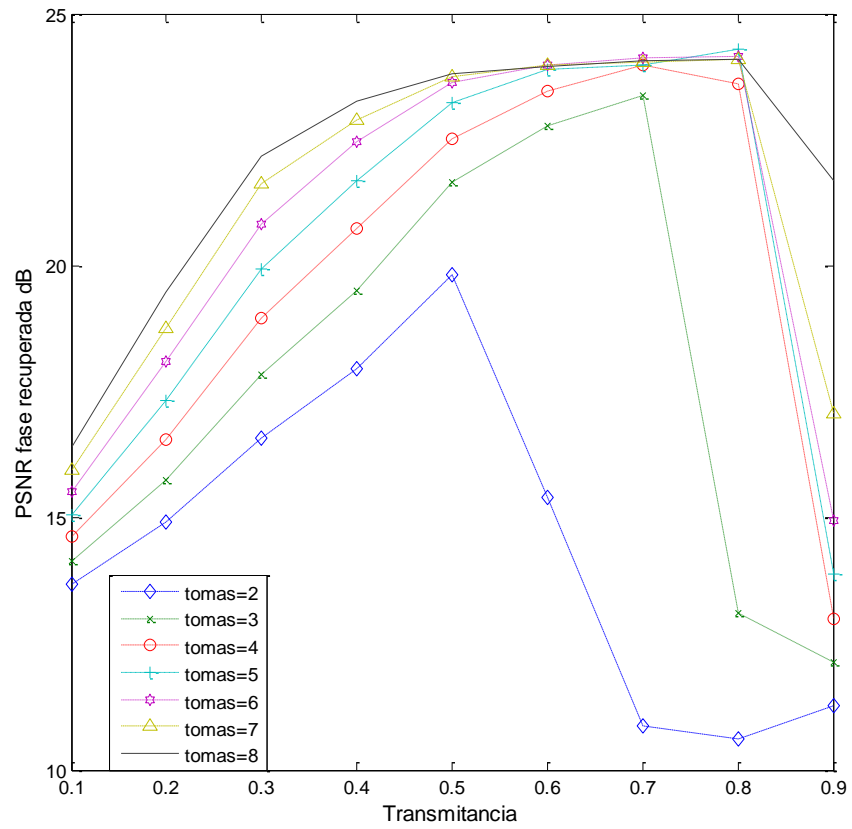
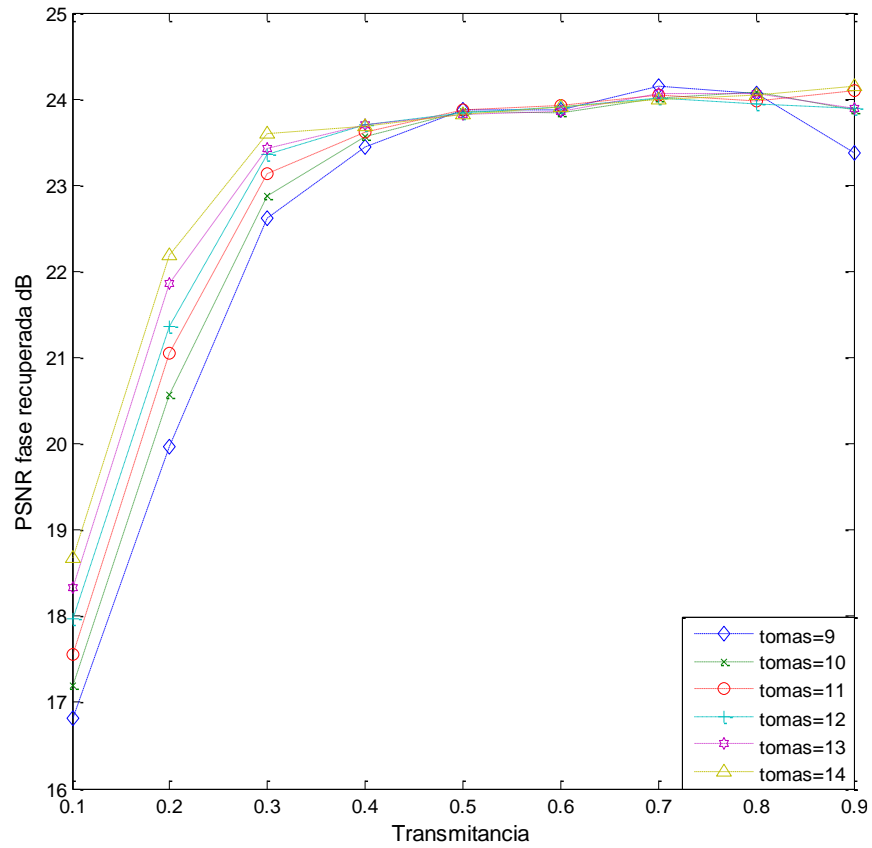


Figura 20. Resultados de la reconstrucción empleando códigos de apertura con la DFT, con $9 \leq L \leq 14$



5.3. Resumen de resultados

En la Tabla 1 se presentan los resultados obtenidos cuando se compara PSRN de la fase recuperada de diferentes tipos de códigos de apertura para ambos algoritmos para la mínima cantidad de tomas. La mejora en la calidad de la fase reconstruida de los patrones de difracción codificados con códigos de apertura uniformes utilizando el algoritmo TWF fue lograda con una menor cantidad de tomas comparada con las otras codificaciones para este mismo algoritmo. En una implementación real esto reduce el tiempo de exposición de la muestra a los rayos-X.

Tabla 1

Tipo de mascara	Algoritmo	Número de tomas	t_r	PSNR de la fase reconstruida [dB]
Aleatoria (Otonaria)	WF	10	0.5	23.82
Uniforme	WFT	4	0.5	23.97
Operación DTF	WFT	6	0.8	24.29
Estructura Hadamard	WFT	7	0.5	24.42
Aleatoria (Booleana)	WFT	8	0.6	23.13

Las figuras 15 a 18 presentan las imágenes de las reconstrucciones en magnitud y fase de la matriz X , cuando se emplean 4 tomas, número mínimo obtenido de la Tabla 1, para los códigos de apertura octonarios, booleanos (aleatorios, con estructura de la matriz Hadamard, DFT y uniforme), con base en los resultados del PSNR de reconstrucción de la fase mostrados en las gráficas 9 a 14 se obtuvo la transmitancia que logra el PSNR más alto para 4 tomas cuando se usan los diferentes códigos de apertura.

Figura 21. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura aleatorios octonarios y algoritmo WF con 4 tomas y $t_r = 0.399$, a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=10.7501 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=7.3919 [dB].

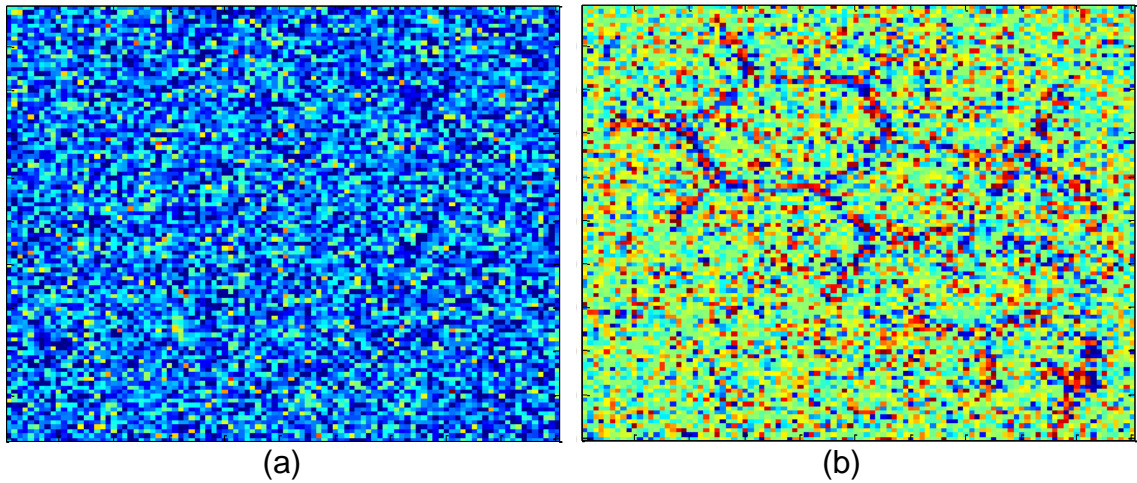


Figura 22. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura aleatorios y algoritmo TWF con 4 tomas y $t_r = 0.5998$, a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=22.1328 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=22.2368 [dB].

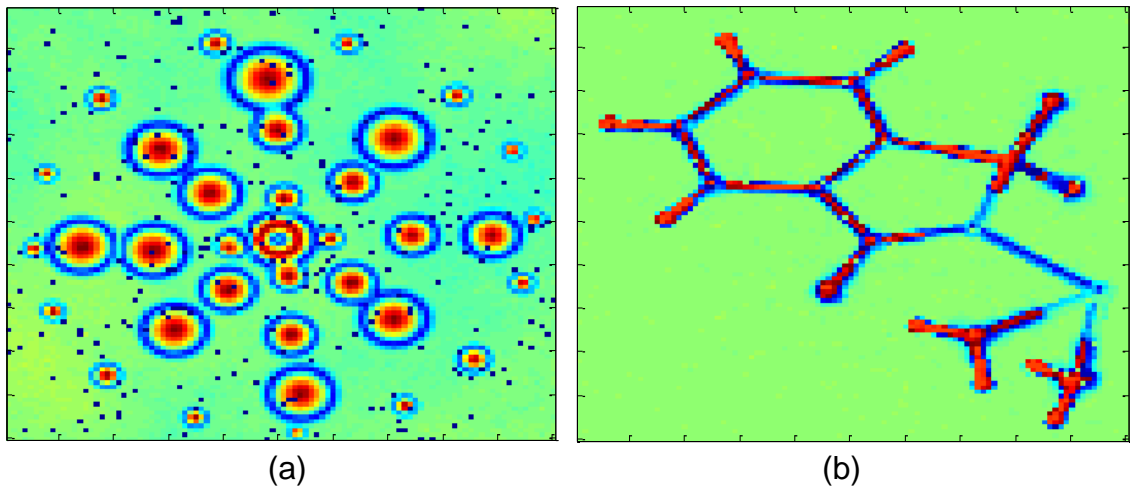


Figura 23. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura con estructura Hadamard y algoritmo TWF con 4 tomas y $t_r = 0.3473$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=13.8323 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=18.8934 [dB].

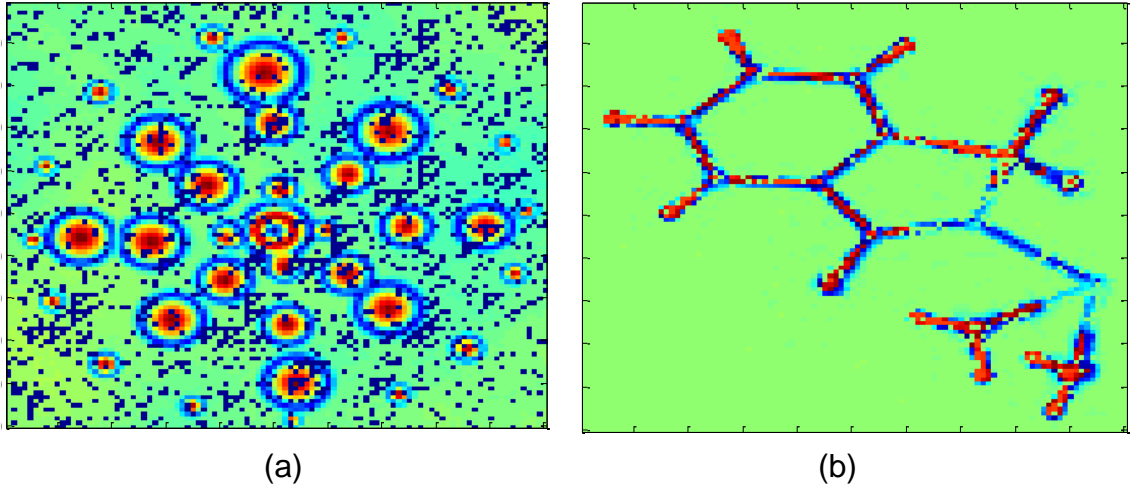


Figura 24. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura DFT y algoritmo TWF con 4 tomas y $t_r = 0.7155$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=22.9786 [dB] b) PSNR fase 18.0444 [dB].

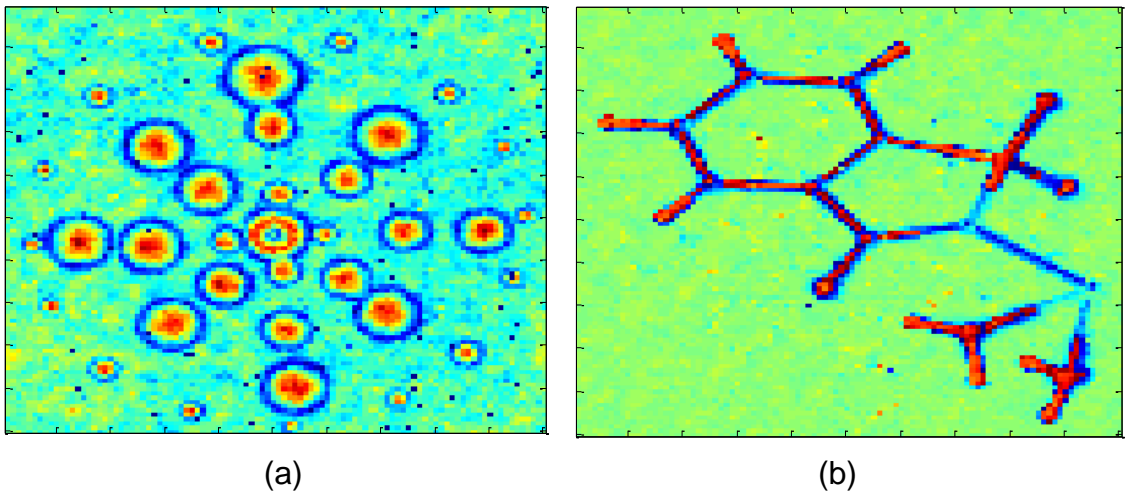
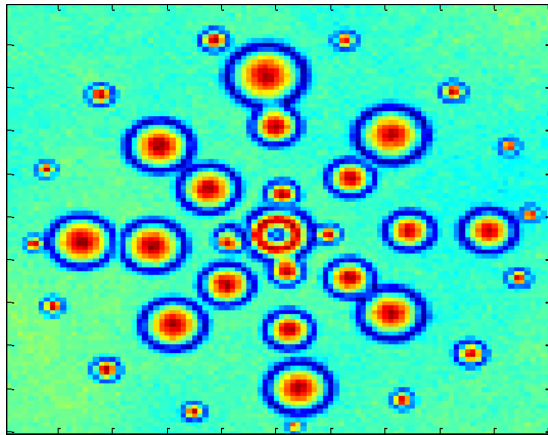
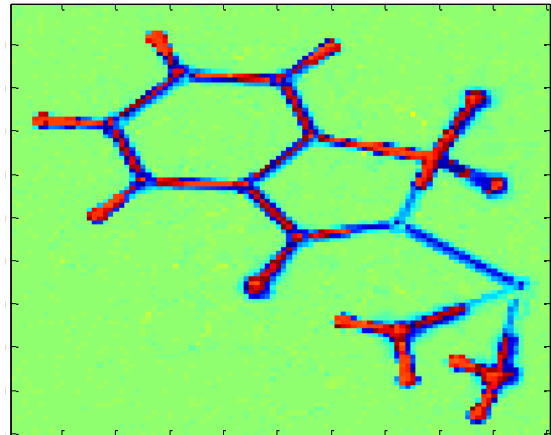


Figura 25. Imágenes reconstruidas empleando códigos de apertura uniformes y algoritmo TWF con 4 tomas y $t_r = 0.5$ a) Imagen de la magnitud reconstruida PSNR=35.4684 [dB] b) Imagen de la fase reconstruida PSNR=23.9741 [dB]



(a)



(b)

6. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un análisis de transmitancia, cantidad de tomas y estructuras de códigos de apertura usados en algoritmos para la recuperación de la fase de una señal proveniente de un sistema de muestreo compresivo por difracción de rayos-X, los resultados de las simulaciones concluyen que:

- Con el uso de códigos de apertura Booleanos junto con el algoritmo TWF se logra reducir la cantidad de tomas hasta en 6 comparado con el WF para obtener resultados similares en el PSNR utilizando como entrada del sistema las matrices presentadas en este trabajo.
- Con ambos algoritmos (WF y TWF) se lograron reconstrucciones que superaron los 23 dB en el PSNR de la fase reconstruida.
- Las simulaciones muestran que el uso de códigos de apertura Booleanos para resolver el problema de recuperación de la fase permite su correcta reconstrucción cuando se utiliza el algoritmo TWF.
- Los códigos de apertura uniformes empleados para el algoritmo TWF permiten obtener reconstrucciones con 4 tomas y 23.71 [dB] de PSNR, lo cual comparado con los códigos de apertura aleatorios, DFT y estructura de la matriz Hadamard logro una reducción de hasta 4 tomas para obtener resultados similares.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M. S. Smyth and J. H. J. Martin, "X-Ray Crystallography," *Mol. Pathol.*, vol. 53, pp. 8–14, 2000.
- [2] E. J. Candes, X. Li, and M. Soltanollotabi, "Phase Retrieval from Coded Diffraction Patterns," 2013.
- [3] J. Drenth, *Principles of Protein X-Ray Crystallography*. Springer Science & Business Media, LLC, 2007.
- [4] R. J. Cernik, W. Clegg, C. R. A. Catlow, G. Bushnell-Wye, J. V Flaherty, G. N. Greaves, I. Burrows, D. J. Taylor, S. J. Teat, and M. Hamichi, "A New High-Flux Chemical and Materials Crystallography Station at the SRS Daresbury. 1. Design, Construction and Test Results," *J. Synchrotron Radiat.*, vol. 4, no. 5, pp. 279–286, Sep. 1997.
- [5] D. Brady, "Optical Imaging and Spectroscopy," *Wiley-OSA 2009*, 2009.
- [6] S. Gottesman and E. Fenimore, "New family of binary arrays for coded aperture imaging," *Appl. Opt.*, vol. 28, pp. 4344–4352, 1989.
- [7] M. Harwit and N. J. Sloane, "Hadamard Transform Optics," *Acad. Press*, 1979.
- [8] H. Arguello and G. R. Arce, "Rank minimization code aperture design for spectrally selective compressive imaging," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 22, no. 3, pp. 941–954, 2013.
- [9] H. Arguello, Y. Wu, H. Rueda, W. Prather, and G. Arce, "Higher-order computational model for coded aperture spectral imaging," *Appl. Opt.*, vol. 52, no. 10, pp. D12– D21, 2013.
- [10] D. F. Galvis-carreño, Y. H. Mejía-melgarejo, and H. Arguello-fuentes, "Efficient reconstruction of Raman spectroscopy imaging based on compressive sensing Reconstrucción eficiente de imágenes a partir de espectroscopia Raman basada en la técnica de sensado compresivo," *DYNA*, vol. 81, no. 188, pp. 116–124, 2014.
- [11] E. J. Candès, X. Li, and M. Soltanollotabi, "Phase Retrieval from Coded Diffraction Patterns," *Arxiv*, 2013.
- [12] E. J. Candes, Y. Eldar, T. Strohmer, and V. Voroninski, "Phase Retrieval via Matrix Completion," *Electr. Eng.*, vol. abs/1109.0, no. 2, pp. 1–2, 2011.

- [13] E. J. Candes, X. Li, and M. Soltanolkotabi, "Phase Retrieval via Wirtinger Flow: Theory and Algorithms Algorithm: Wirtinger Flow," *Inf. Theory, IEEE Trans.*, vol. 61, no. January, pp. 1985–2007, 2015.
- [14] Y. Chen and E. J. Candes, "Solving Random Quadratic Systems of Equations Is Nearly as Easy as Solving Linear Systems," May 2015.
- [15] UC Davis ChemWiki, "X-ray Crystallography." .
- [16] A. Veeraraghavan, R. Raskar, A. Agrawal, A. Mohan, and J. Tumblin, "Dappled photography: Mask enhanced cameras for heterodyned light fields and coded apertures refocusing," *ACM Trans. Graph*, vol. 26, no. 69–1–69–12, 2007.
- [17] DALSA Corp., "Image Sensor Architectures for Digital Cinematography," 2015.
- [18] E. Maire, A. Fazekas, L. Salvo, R. Dendievel, S. Youssef, P. Cloetens, and J. M. Letang, "X-ray tomography applied to the characterization of cellular materials. Related finite element modeling problems," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 63, no. 16, pp. 2431–2443, Dec. 2003.
- [19] J. Fienup and C. C. Wackerman, "Phase retrieval stagnation problems and solutions," *Journal of Optical Society of America A*, vol. 3, no. 11. pp. 1897–1907, 1986.
- [20] M. Klivanov, P. Sacks, and A. Tikhonravov, "The phase retrieval problem." 1995.
- [21] R. P. Millane, "Phase retrieval in crystallography and optics," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 7, no. 3, pp. 394–411, 1990.
- [22] H. Arguello and G. Arce, "Code aperture design for compressive spectral imaging," in *European Signal Processing Conference*, 2010, no. 1, pp. 1434–1438.
- [23] K. P. MacCabe, A. D. Holmgren, M. P. Tornai, and D. J. Brady, "Snapshot 2D tomography via coded aperture x-ray scatter imaging," *Appl. Opt.*, vol. 52, no. 19, pp. 4582–4589, 2013.
- [24] T. T. Cai and A. Zhang, "ROP: Matrix recovery via rank-one projections," *Ann. Stat.*, vol. 43, no. 1, pp. 102–138, Feb. 2015.
- [25] E. J. Candes and X. Li, "Solving Quadratic Equations via PhaseLift when There Are About As Many Equations As Unknowns," p. 6, Aug. 2012.

- [26] E. J. Candès, T. Strohmer, and V. Voroninski, "PhaseLift: Exact and stable signal recovery from magnitude measurements via convex programming," *Commun. Pure Appl. Math.*, vol. 66, no. 8, pp. 1241–1274, 2013.
- [27] M. Fazel, H. Hindi, and S. Boyd, "Rank minimization and applications in system theory," *Proc. Am. Control Conf.*, vol. 4, pp. 3273–3278, 2004.
- [28] J. Bacca Rodriguez, G. R. Arce, and D. L. Lau, "Blue-noise multitone dithering," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 17, no. 8, pp. 1368–1382, 2008.
- [29] C. Fu, H. Arguello, B. M. Sadler, and G. R. Arce, "Compressive spectral polarization imaging by a pixelized polarizer and colored patterned detector," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 32, no. 11, pp. 2178–2188, Nov. 2015.

BIBLIOGRAFÍA

- C. Fu, H. Arguello, B. M. Sadler, and G. R. Arce. Compressive spectral polarization imaging by a pixelized polarizer and colored patterned detector. En: *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 32, no. 11, pp. 2178–2188. 2015.
- D. F. Galvis-carreño, Y. H. Mejía-melgarejo, and H. Arguello-fuentes. Efficient reconstruction of Raman spectroscopy imaging based on compressive sensing
Reconstrucción eficiente de imágenes a partir de espectroscopia Raman basada en la técnica de sensado compresivo. En: *DYNA*. 2014. vol. 81, no. 188, pp. 116–124.
- E. J. Candes, X. Li, and M. Soltanollotabi. Phase Retrieval from Coded Diffraction Patterns. En: Computer research repository. 2013.
- E. J. Candes, Y. Eldar, T. Strohmer, and V. Voroninski. Phase Retrieval via Matrix Completion. En: *Electr. Eng.* 2011. vol. abs/1109.0, no. 2, pp. 1–2.
- E. J. Candes, X. Li, and M. Soltanolkotabi. Phase Retrieval via Wirtinger Flow : Theory and Algorithms Algorithm : Wirtinger Flow. En: *Inf. Theory, IEEE Trans.* 2015. vol. 61, no. January, pp. 1985–2007.
- E. Maire, A. Fazekas, L. Salvo, R. Dendievel, S. Youssef, P. Cloetens, and J. M. Letang. X-ray tomography applied to the characterization of cellular materials. Related finite element modeling problems. En: *Compos. Sci. Technol.* 2003. , vol. 63, no. 16, pp. 2431–2443.
- H. Arguello and G. Arce. Code aperture design for compressive spectral imaging. En: *European Signal Processing Conference*, 2010, no. 1, pp. 1434–1438.
- J. Bacca Rodriguez, G. R. Arce, and D. L. Lau. Blue-noise multitone dithering. En: *IEEE Trans. Image Process.* 2008. vol. 17, no. 8, pp. 1368–1382.
- R. P. Millane. Phase retrieval in crystallography and optics. En: *J. Opt. Soc. Am. A*, 1990. vol. 7, no. 3, pp. 394–411.
- Y. Chen and E. J. Candes. Solving Random Quadratic Systems of Equations Is Nearly as Easy as Solving Linear Systems. En: Computer research repository. 2015.