

TRABAJO FINAL
CARRERA DE ESPECIALIZACIÓN EN APLICACIONES
TECNOLÓGICAS DE LA ENERGÍA NUCLEAR

**Restauración de información en mapas
bidimensionales obtenidos en experimentos
por dispersión de rayos X.**

Lic. Gustavo Quintero

Director: Dr. Cristián Huck Iriat

Mayo-2021
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional de Cuyo (Instituto Balseiro)
Universidad de Buenos Aires (Facultad de Ingeniería)

A mi familia.

Índice general

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 2 |
| 1.1. SAXS | 2 |
| 1.2. Imagen Digital | 3 |
| 1.3. Convolución | 5 |
| 1.3.1. Convolución unidimensional y bidimensional de dos funciones | 6 |
| 1.4. Transformada de Fourier | 11 |
| 1.5. Problemas mal condicionados. | 15 |
| 1.5.1. Deconvolución | 15 |
| 2. Metodología | 21 |
| 3. Resultados | 26 |
| 3.1. Mapa de transmisión y absorción. | 26 |
| 3.1.1. Deconvolución | 29 |
| 3.1.2. Resultados de la restauración. | 32 |
| 3.2. Problema con dos densidades electrónicas diferentes. | 36 |
| 3.2.1. Deconvolución | 39 |
| 4. Conclusiones y perspectivas | 41 |
| Comparación entre el filtro Wiener y el método de Richardson-Lucy. | 43 |
| Bibliografía | 45 |

Abstract

In the face of the great technological advance that is changing the way we live, work and relate to each other, scientific development is underlying in multiple areas of knowledge, mainly driven by a field within computer science that encompasses machine learning, computer vision and data mining. Digital image processing is one of the pillars on which part of this progress and development is sustained, mainly by obtaining digital images in areas such as astronomy, medical sciences, biology, remote sensing, biometrics, among others. Emerging the need to improve, classify, quantify and restore the information they provide, thus giving their contribution to the great progress we are experiencing.

The different techniques for studying the internal structure of matter are not exempt from this reality, as shown in this work. Within digital image processing there are different restoration methods, whose objective is to improve an image in a predefined sense, modeling the degradation process that it suffers at the time of being acquired and applying the corresponding inverse process to recover the original image. Different restoration methods used in astronomy for microscopy have been adapted, obtaining good results and improving the quality of the information obtained at the mesoscopic scale, and it is at this scale that the study of different nanostructured materials such as polymers, films, fatty materials, colloids, etc. Therefore, the idea of applying these image restoration methods to the two dimensional maps obtained in experiments by small angle X-ray scattering (SAXS) arises, which allows analyzing large sample areas and detailing their morphological properties or describing the structural parameters that constitute it with better precision and greater statistical weight.

In the present work, two image restoration methods are implemented in transmission, absorption and dispersion maps obtained with SAXS. Achieving an improvement in the quality of the information they provide on the sample under study.

Keywords: Image Restoration, Deconvolution, SAXS, Wiener Filter, Richardson-Lucy Iterative Method.

Resumen

De cara al gran avance tecnológico que esta cambiando la forma en que vivimos, trabajamos y nos relacionamos, se encuentra subyacente el desarrollo científico en múltiples áreas del conocimiento, impulsado principalmente por un campo dentro de las ciencias de la computación que abarca el aprendizaje automático, la visión por computador y la minería de datos. El procesamiento digital de imágenes es uno de los pilares en los que se sostiene parte de este avance y desarrollo, principalmente por la obtención de imágenes digitales en áreas como la astronomía, ciencias médicas, biología, teledetección, biometría, entre otras. Surgiendo la necesidad de mejorar, clasificar, cuantificar y restaurar la información que estas proporcionan, dando así su aporte en el gran avance que estamos viviendo.

Las diferentes técnicas de estudio de la estructura interna de la materia no están exceptas de esta realidad, como se muestra en el presente trabajo. Dentro del procesamiento digital de imágenes existen diferentes métodos de restauración, cuyo objetivo es mejorar una imagen en un sentido predefinido, modelando el proceso de degradación que esta sufre al momento de ser adquirida y aplicar el proceso inverso correspondiente para recuperar la imagen original. Se han adaptado diferentes métodos de restauración empleados en astronomía para microscopía, obteniendo buenos resultados y mejorando la calidad de la información obtenida en la escala mesoscópica, y es en esta escala donde ocurre el estudio de diferentes materiales nanoestructurados tales como polímeros, films, materiales grasos, coloides, etc. Por lo que, surge la idea de aplicar estos métodos de restauración de imagen en los mapas bidimensionales obtenidos en experimentos por dispersión de rayos X a bajos ángulos (SAXS), lo que permite analizar grandes áreas de muestra y detallar sus propiedades morfológicas o bien describir los parámetros estructurales que la constituyen con una mejor precisión y un mayor peso estadístico.

En el presente trabajo se implementan dos métodos de restauración de imágenes en mapas de transmisión, absorción y dispersión obtenidos con SAXS. Logrando una mejora en la calidad de la información que estos proporcionan sobre la muestra en estudio.

Palabras claves: Restauración de Imagen, Deconvolución, SAXS, Filtro Wiener, Método Iterativo de Richardson-Lucy.

Capítulo 1

Introducción

Entender como esta estructurada internamente la materia ha permitido no solamente comprender sus propiedades, sino también modificarlas para el beneficio y creación de nuevo conocimiento en múltiples áreas tales como la física, química, biología, medicina, geología, ciencia de los materiales, etc. Trayendo consigo avances importantes en la comprensión de los principios básicos de diferentes procesos químicos, biológicos, genéticos, metalúrgicos; constituyendo así el pilar fundamental para el desarrollo de una amplia gama de industrias, como la farmacéutica, agroalimentaria, aeronáutica, automotriz, informática, minera, petrolera entre otras.

Este entendimiento es posible gracias al desarrollo de diferentes métodos y técnicas de análisis estructural entre la escala atómica y molecular de la materia, entre ellas la dispersión de rayos X a bajos ángulos (SAXS).

1.1. SAXS

Es una técnica de baja resolución espacial (\sim nm) que permite determinar parámetros estructurales importantes (forma, tamaño, estructura interna, cristalinidad, porosidad y orientación) en una muestra en términos promedios de los tamaños y formas de las partículas que la conforman [1]. La técnica consiste en registrar la distribución de fotones elásticamente dispersados de una fuente puntual con sección eficaz pequeña, colimada y monocromática de longitud de onda del orden de las décimas de nanómetros.

Para alcanzar bajos ángulos, el plano de detección se suele ubicar lejos de la muestra. Los fotones dispersados están caracterizados por una ley recíproca a las distancias características entre la estructura de los átomos y las moléculas que constituyen la muestra y el ángulo de dispersión; por lo que, la relación entre el espacio de detección y la muestra está descrita por la transformada de Fourier del espacio real (espacio recíproco), donde la variable es el módulo del momento transferido $q = 4\pi \sin(\theta)/\lambda$ para el caso de dispersión isotrópica [2], o bien, su

descomposición en las contribuciones vectoriales $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_x, \mathbf{q}_y, \mathbf{q}_z)$ para los experimentos de dispersión anisotrópica [3].

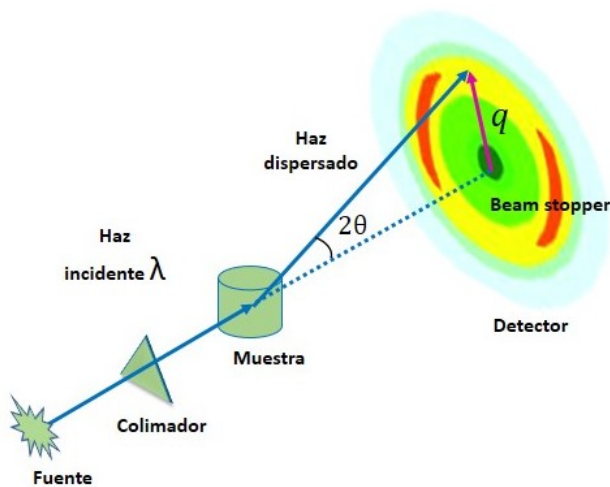


Figura 1.1: Esquema experimental de SAXS.

En abril de 2019 se instaló un instrumento Xeuss 2.0 SAXS/WAXS de Xenocs en el Laboratorio de Cristalografía Aplicada (LCA) de la Universidad Nacional de San Martín (UNSAM), Argentina. Este instrumento cuenta con una microfuelle de cobre (cuya longitud de onda incidente es de 0,154 nm), un espejo curvo multicapa que monocroma y genera un haz incidente paralelo, y un portamuestras motorizado (con precisión de 0,05 mm), el cual le otorga al instrumento la capacidad de obtener mapas bidimensionales (imágenes digitales monocromáticas) transformándolo en un microscopio. Además, el tamaño del haz incidente sobre la muestra se obtiene mediante dos conjuntos de 4 cuchillas monocristalinas, cada una para darle la forma y el tamaño deseado. Esto permite la posibilidad de analizar grandes áreas de muestra para detallar su homogeneidad, espesor, o bien describir los parámetros estructurales con mayor peso estadístico [4]. La resolución espacial de los mapas bidimensionales obtenidos está dictaminada por la apertura física del haz incidente (0,5 mm). Sin embargo, el portamuestras motorizado tiene una mejor precisión (0,05 mm) que el tamaño de apertura del haz incidente empleado; por lo que, se puede mejorar la resolución espacial de los mapas bidimensionales obtenidos, ya que contienen información espacial degradada asociada a la precisión del motor a través de la operación de deconvolución.

1.2. Imagen Digital

Una imagen digital corresponde a un arreglo en dos o tres dimensiones (dependiendo si es una imagen monocromática ó cromática), donde a cada elemento del arreglo se le denomina **píxel**, y dado que ella almacena información, la cantidad que contenga se mide en bits

o bytes (unidad de almacenamiento más pequeña de información digital). Así, cada píxel esta compuesto por bits. Usualmente, se emplean escalas de 2^k bits, denotadas k – bits o unidades, que determinan los rangos que representan una intensidad de nivel de gris o de color primario (rojo, verde y azul). Se define **el rango** como el conjunto de valores entre 0 y $2^k - 1$, en notación $[0, 2^k - 1]$, que pueden tomar los píxel. Matemáticamente una imagen digital se define como

Definición 1.1. Para cada $M, N, L \in \mathbb{N}$ definimos $I_{M-1} = \{0, 1, 2, \dots, M - 1\}$, $I_{N-1} = \{0, 1, 2, \dots, N - 1\}$, $I_3 = \{1, 2, 3\}$ y $I_{L-1} = \{0, 1, 2, \dots, L - 1\}$. Una aplicación:

a.

$$\begin{aligned} f : I_{M-1} \times I_{N-1} &\longrightarrow I_{L-1} \\ (i, j) &\longrightarrow f(i, j) = f(i, j) \end{aligned}$$

que denotaremos $f = (f_{ij})$ recibe el nombre de **arreglo bidimensional** de orden $N \times M$,

b.

$$\begin{aligned} f : I_{M-1} \times I_{N-1} \times I_3 &\longrightarrow I_{L-1} \\ (i, j, k) &\longrightarrow f(i, j, k) = f_k(i, j) \end{aligned}$$

que denotaremos $f_k = (f_k(i, j))$ es llamada **arreglo tridimensional** de orden $M \times N \times 3$.

- c. Una **imagen digital monocromática** corresponde a un arreglo $f = (f(i, j))$ donde cada $f(i, j) \in I_{L-1}$, representa una intensidad de color gris (o escala de grises) en el punto $(i, j) \in I_{M-1} \times I_{N-1}$
- d. Una **imagen digital cromática** corresponde a un arreglo $f_k = (f_k(i, j))$ donde cada $f_k(i, j) \in I_{L-1}$ con $k \in I_3$ representa, tres imágenes monocromáticas individuales, denominadas las imágenes primarias o intensidades de un color primario (rojo, verde y azul)

En la Fig. (1.2) se representa una imagen digital de orden 8×10 pixels

- a. Representa una imagen monocromática con rango $[0, 255]$.
- b. Representa una imagen cromática, compuesta por tres imágenes monocromáticas individuales (rojo, verde y azul).

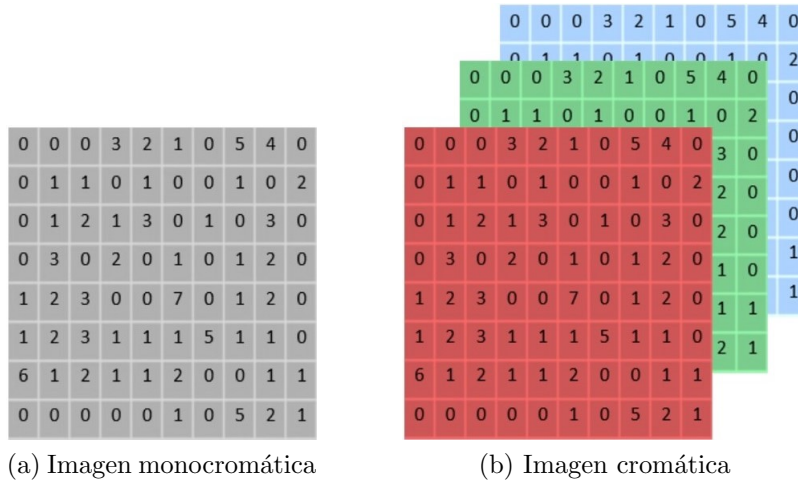


Figura 1.2: Representación de una imagen digital.

1.3. Convolución

La convolución es una operación matemática que involucra dos funciones para producir una tercera, que generalmente se considera una modificación de una de las funciones originales [5]. A continuación se dan las definiciones y resultados necesarios para la comprensión del proceso de formación de una imagen, en el cual sufre degradación por desenfoque y ruido.

Definición 1.2. El conjunto de todas las funciones $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ tales que f es integrable y

$$\int_{\mathbb{R}^N} |f(x)| dx < \infty$$

Lo denotaremos por $L^1(\mathbb{R}^N) = L^1$, el cual es un espacio vectorial con las operaciones usuales. Además, el funcional $\| \cdot \|_{L^1} : L^1 \rightarrow \mathbb{R}$ definido por

$$\|f\|_{L^1} = \int_{\mathbb{R}^N} |f(x)| dx \quad \forall f \in L^1$$

es una norma.

Definición 1.3. Sean $f, g \in L^1$ funciones, la aplicación $*$ definida por

$$(f * h)(x) = \int_{\mathbb{R}^N} f(y)h(y - x) dy \quad \forall x \in \mathbb{R}^N \tag{1.1}$$

genera una nueva función g llamada la **convolución de funciones** f y h , que denotaremos $g = f * h$

La siguiente tabla muestra algunas propiedades básicas de la convolución.

Tabla 1.1: Propiedades básicas de la convolución.

| | |
|-----------------|--|
| Conmutativa | $f * h = h * f$ |
| Asociativa | $(f * h) * l = f * (h * l)$ |
| Distributiva | $f * (h + l) = f * h + f * l$ |
| Elemento neutro | $f * 0 = 0 * f = 0$ $f * (\alpha h) = \alpha f * h$ |

La proposición dada a continuación es importante para la existencia de la convolución.

Proposición 1.1. *Si $f, h \in L^1$, entonces $f * h \in L^1$ y además*

$$\|f * h\|_{L^1} \leq \|f\|_{L^1} \cdot \|h\|_{L^1}$$

1.3.1. Convolución unidimensional y bidimensional de dos funciones

La convolución tiene múltiples aplicaciones en áreas como el análisis numérico, álgebra lineal numérica, ecuaciones diferenciales, ecuaciones integrales, probabilidad y estadística y en el procesamiento digital de señales. Una señal digital es la representación discretizada de una magnitud física, por lo que, la convolución en el caso discreto se define como

Definición 1.4. *Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua y tomemos $x_0 \in \mathbb{R}$ como punto inicial y $\Delta x \in \mathbb{Z}_+$, para generar $[M - 1]$ puntos.*

$$x_1 = x_0 + \Delta x, x_2 = x_1 + \Delta x, \dots, x_{M-1} = x_{M-2} + \Delta x$$

equivalente a

$$x_1 = x_0 + \Delta x, x_2 = x_0 + 2\Delta x, \dots, x_{M-1} = x_0 + [M - 1]\Delta x$$

los cuales producen M muestras

$$\{f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_{M-1})\}$$

equivalente a

$$\{f(x_0), f(x_0 + \Delta x), \dots, f(x_0 + [M - 1]\Delta x)\}$$

Se denota $f_i = f(x_i) = f(x_0 + i\Delta x)$; la cual se empleará según el contexto de trabajo en adelante.

Ahora, si $x_0 = 0$ y $\Delta x = 1$, se obtiene el siguiente conjunto

$$\{f(0), f(1), f(2), \dots, f(M - 1)\}$$

llamada **muestra uniformemente espaciada** o **muestra espacial** de f .

El proceso de hallar la muestra espacial de una función continua de f se conoce como **discretización** de f .

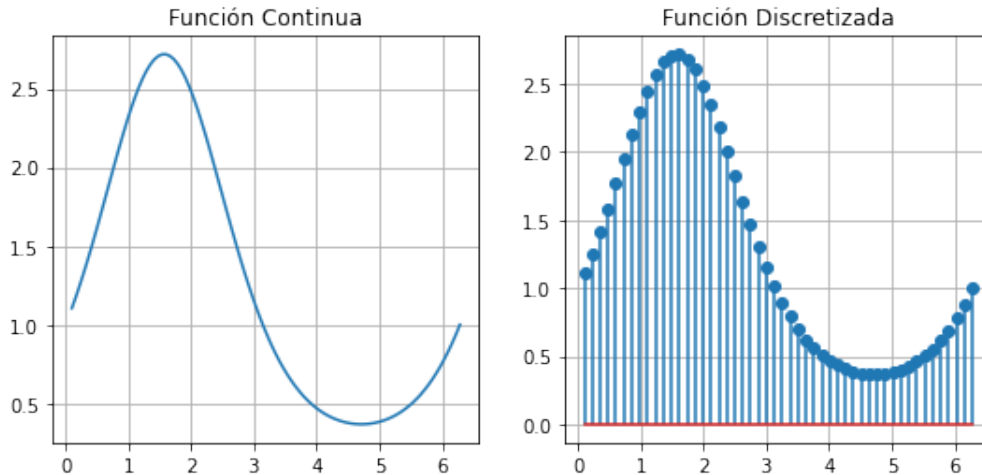


Figura 1.3: Muestreo de una función continua.

Definición 1.5. Sea $A \subset \mathbb{R}$ y $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua discretizada, se define el **sopORTE** de f como

$$\text{Sop}(f) = \{x \in A : f(x) \neq 0\}$$

esto es, el conjunto abierto más grande donde f no se anula.

Definición 1.6. Sean $f, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dos funciones, la aplicación $*$ se define como

$$g(x) = (f * h)(x) = \int_{\mathbb{R}} f(y)h(x - y)dy \quad (1.2)$$

es llamado la **convolución unidimensional** de f con h .

Sean $f, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dos funciones discretizadas y $x_0 = 0$ y $\Delta x = 1$ tal que

- $\text{Sop}(f) = \{x_0, x_1, \dots, x_{M-1}\} = \{x_i : i \in I_{M-1}\}$ donde $I_{M-1} = \{0, 1, \dots, M - 1\}$

$$\text{Sop}(h) = \{x_i : x \in I_{-r,r}\} \text{ donde } I_{-r,r} = \{-r, -(r - 1), \dots, -1, 0, 1, \dots, r - 1, r\}$$

- $\{f_i : i \in I_{M-1}\}$ es la **muestra espacial** de f

y $\{h_i : i \in I_{-r,r}\}$ es la **muestra espacial** de h .

Así, la Ec.(1.2) se puede reescribir como:

$$g_j = \sum_{i=0}^{M-1} f_i h_{j-i} \quad j \in I_{-r,(M-1)+r} \quad (1.3)$$

donde $I_{-r,(M-1)+r} = \{-r, -(r-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (M-1)+r\}$ esto es, la Ec. (1.3) nos proporciona una muestra de g sobre $Sop(g)$ con $x_0 = 0$ y $\Delta x = 1$ de modo que

- $Sop(g) = \{x_j : j \in I_{-r,(M-1)+r}\}$
- $\{g_j : j \in I_{-r,(M-1)+r}\}$ es la **muestra espacial** de g

En un contexto relativo al tratamiento digital de señales unidimensionales, la convolución de una muestra de la señal $f(x)$ de longitud $(M-1)$ con una muestra de señal $h(x)$ de longitud $(2r+1)$ proporciona una nueva muestra de la señal de convolución $g(x)$ de longitud $(M-1)+2r$. Aquí se considera $x_0 = 0$ y $\Delta x = 1$.

Generalmente a la función $h(x)$ se le conoce como el **núcleo de la convolución** y al valor r se le denomina **alcance de la convolución**.

De donde se sigue:

Definición 1.7. Sean $f, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ funciones discretizadas con soporte, la aplicación $*$ definida por

$$g(x_j) = (f * h)(x_j) = \sum_{i=0}^{N-1} f(y_i) h(x_j - y_i) \quad j \in \mathbb{Z} \quad (1.4)$$

es llamada **convolución discreta unidimensional** de f con h .

Definición 1.8. Sean $f, h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ funciones continuas, la aplicación $*$ definida por

$$g(x, y) = (f * h)(x, y) = \iint_{\mathbb{R}^2} f(\xi, \zeta) h(x - \xi, y - \zeta) d\xi d\zeta \quad (1.5)$$

es llamada la **convolución bidimensional** de f con h .

Sean $f, h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ funciones discretizadas y con $(x_0, y_0) = (0, 0)$ y $\Delta x = \Delta y = 1$ tales que

- $Sop(f) = \{(x_i, y_j) : i \in I_{M-1} \wedge j \in I_{N-1}\}$

donde $I_{M-1} = \{0, 1, \dots, M-1\}$ y $I_{N-1} = \{0, 1, \dots, N-1\}$

$Sop(h) = \{(x_i, y_j) : i \in I_{-r_1, r_1} \wedge j \in I_{-r_2, r_2}\}$

donde $I_{-r_1, r_1} = \{-r_1, -(r_1-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (r_1-1), r_1\}$

y $I_{-r_2, r_2} = \{-r_2, -(r_2-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (r_2-1), r_2\}$

- Consideremos las muestras espaciales sobre los soportes de las funciones f y h , esto es, $\{f_{ij} : i \in I_{M-1} \wedge j \in I_{N-1}\}$ **muestra espacial** de f donde $f_{ij} = f(x_i, y_j)$ y $\{h_{ij} : i \in I_{-r_1, r_1} \wedge j \in I_{-r_2, r_2}\}$ **muestra espacial** de h , donde $h_{ij} = h(x_i, y_j)$.

Así, la Ec. (1.4) se transforma en

$$g_{ij} = \sum_{\xi=0}^{M-1} \sum_{\zeta=0}^{N-1} f_{\xi\zeta} h_{i-\xi, j-\zeta} \quad i \in I_{-r_1, (M-1)+r_1}, j \in I_{-r_2, (N-1)+r_2} \quad (1.6)$$

donde

$$I_{-r_1, (M-1)+r_1} = \{-r_1, -(r_1-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (M-1)+r_1\}$$

$$I_{-r_2, (N-1)+r_2} = \{-r_2, -(r_2-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (N-1)+r_2\}$$

La Ec. (1.5) nos proporciona una muestra de g sobre $Sop(g)$ con $(x_0, y_0) = (0, 0)$ y $\Delta x = \Delta y = 1$ de modo

- $Sop(g) = \{(x_i, y_j) : i \in I_{-r_1, (M-1)+r_1} \wedge j \in I_{-r_2, (N-1)+r_2}\}$
- la **muestra espacial** de g , es $\{g_{ij} : i \in I_{-r_1, (M-1)+r_1} \wedge j \in I_{-r_2, (N-1)+r_2}\}$ donde $g_{ij} = g(x_i, y_i)$

En el contexto relativo al procesamiento digital de imágenes, la convolución de una imagen (matriz) $f(x, y)$ de tamaño $(M-1) \times (N-1)$ con un núcleo $h(x, y)$ representada, mediante una matriz de tamaño $2r_1 \times 2r_2$, proporciona una nueva imagen de convolución $g(x, y)$ de tamaño $(M-1) + 2r_1 \times (N-1) + 2r_2$. La imagen asociada a la matriz de h se conoce comunmente como **función de dispersión de punto** (PSF). En este contexto, la unidad mínima del soporte de la imagen es un píxel, por lo que tenemos $\Delta x = \Delta y = 1$. Los valores (r_1, r_2) determinan el alcance de la convolución.

De donde se sigue:

Definición 1.9. Sean $f, h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ funciones discretizadas con soporte, la aplicación $*$ definida por

$$g(x_i, y_j) = (f * h)(x_i, y_j) = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} f(\xi_i, \zeta_j) h(x_i - \xi_i, y_j - \zeta_j) \quad (i, j) \in \mathbb{Z}^2 \quad (1.7)$$

es llamada **convolución discreta bidimensional** de f con h .

Tabla 1.2: Resumen de la convolución.

| | |
|-------------------------|--|
| Convolución continua 1D | $g(x) = (f * h)(x) = \int f(y)h(x - y)dy$ |
| Convolucion discreta 1D | $g(x_i) = (f * h)(x_j) = \sum_{i=0}^{n-1} f(y_i)h(x_j - y_i)$ |
| Convolucion continua 2D | $g(x, y) = (f * h)(x, y) = \iint f(\xi, \zeta)h(x - \xi, y - \zeta)d\xi d\zeta$ |
| Convolucion discreta 2D | $g(x_i, y_j) = (f * h)(x_i, y_j) = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} f(\xi_i, \zeta_j)h(x_i - \xi_i, y_j - \zeta_j)$ |

En resumen, la convolución proporciona una forma de “multiplicar” dos matrices, generalmente de diferentes tamaños, para producir una tercera. Dicha operación se asocia al proceso de degradación que sufre una imagen $f(x_i, y_j)$ cuando es adquirida por un sistema con un núcleo $h(x_i, y_j)$ característico, obteniendo una imagen $g(x_i, y_j)$.

La convolución se realiza desplazando el núcleo $h(x_i, y_j)$ sobre la imagen $f(x_i, y_j)$, generalmente comenzando en la esquina superior izquierda, para mover el núcleo a través de todas las posiciones donde éste encaja completamente dentro de los límites de la imagen $f(x_i, y_j)$. Cada posición del núcleo corresponde a un solo píxel de salida, cuyo valor se calcula multiplicando el valor del cada píxel del núcleo con el valor del píxel correspondiente en la imagen y luego sumando todos estos números, como indica la Ec. (1.7) y se ilustra en la siguiente figura.

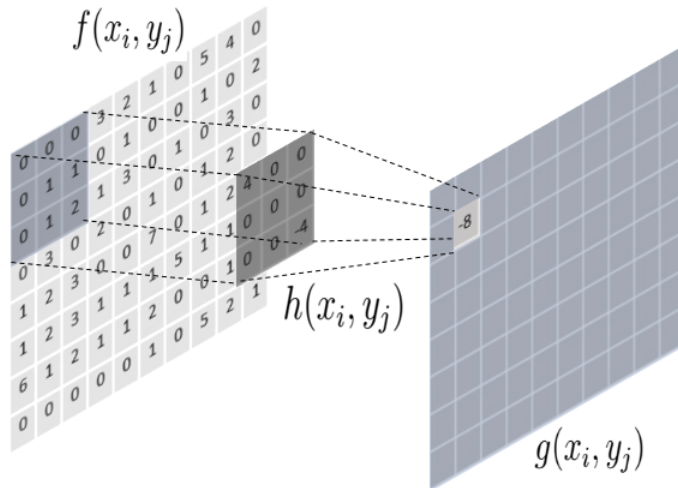


Figura 1.4: Ilustración de la operación de convolución entre una imagen $f(x_i, y_j)$ y un núcleo $h(x_i, y_j)$ para producir una imagen $g(x_i, y_j)$.

1.4. Transformada de Fourier

La Transformada de Fourier se utiliza ampliamente en el área del procesamiento digital de señales e imágenes, por que la mayor parte del análisis de varios problemas difíciles de resolver se vuelven sencillos aplicando la transformada (haciendo el análisis en el dominio de la frecuencia), por lo que, el entendimiento y comprensión de la teoría de Fourier constituye uno de los pilares fundamentales en estas disciplinas.

En esta sección precisaremos la Transformada de Fourier, su Inversa y el Teorema de Convolución.

Definición 1.10. Si $f \in L^1$, el operador $F = \mathcal{F}[f]$ definido por

$$F(u) = \mathcal{F}[f](u) = \int f(x) \exp(-2\pi i(x, u)) dx$$

donde $(x, u) = \sum_{j=1}^N x_j u_j$ ($x, u \in \mathbb{R}^N$), es llamado la **Transformada de Fourier** de f .

El siguiente ejemplo muestra como calcular la Transformada de Fourier de $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x) := \begin{cases} 1 & , \text{ si } x \in [-\pi, \pi] \\ 0 & , \text{ si } x \notin [-\pi, \pi] \end{cases} \quad (1.8)$$

Es decir,

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[f](u) &= \int_{\mathbb{R}} f(x) \exp(-2\pi i(x, u)) dx \\ &= \int_{[-\pi, \pi]} 1 \cdot \exp(-2\pi i x \cdot u) dx + \int_{[-\pi, \pi]} 0 \cdot \exp(-2\pi i x \cdot u) dx \\ &= \int_{[-\pi, \pi]} \exp(-2\pi i x \cdot u) dx\end{aligned}$$

Como $\exp(2\pi i x \cdot u) = \cos(2\pi u) - i \sin(2\pi u)$, entonces

$$\mathcal{F}[f](u) = \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos(2\pi u) dx}_{I_1} - i \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \sin(2\pi u) dx}_{I_2}$$

donde $I_1 = 2\pi \frac{\sin(2\pi^2 u)}{2\pi^2 u}$ y $I_2 = 0$. Así,

$$\mathcal{F}[f](u) = 2\pi \frac{\sin(2\pi^2 u)}{2\pi^2 u}$$

La siguiente figura ilustra el efecto de la Transformada de Fourier sobre una función.

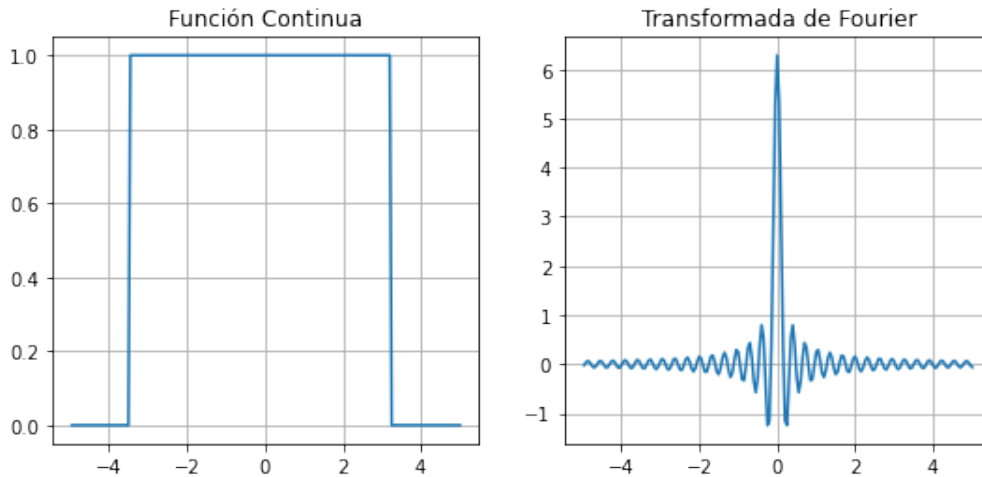


Figura 1.5: Transformada de Fourier.

Definición 1.11. Sea $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ y $h \in \mathbb{R}^N$. El **operador de traslación** es definido como $\mathcal{T}_h f(x) = f(h + y)$ o por $f_h(y) = f(h + y) \quad \forall y \in \mathbb{R}^N$, esto es, $f_h = \mathcal{T}_h \circ f$

La siguiente tabla muestra algunas propiedades básicas de la Transformada de Fourier.

Tabla 1.3: Propiedades básicas de la Transformada de Fourier.

| Propiedad | Función | Imagen de Fourier |
|--------------|-----------------------------------|---|
| | $f(x)$ | $F(\xi) = \mathcal{F}[f](\xi)$ |
| Conjugada | $f^*(x)$ | $\mathcal{F}[f^*](\xi) = \mathcal{F}[f](-\xi)$ |
| Linealidad | $(\alpha f + \beta h)(x)$ | $\mathcal{F}[\alpha f + \beta h](\xi) = \alpha \mathcal{F}[f](\xi) + \beta \mathcal{F}[h](\xi)$ |
| Traslación | $(\mathcal{T}_h \circ f)(x)$ | $\mathcal{F}[\mathcal{T}_h \circ f](\xi) = \exp(-2\pi i(x, \xi)) \mathcal{F}[f](\xi)$ |
| Modulación | $\exp(-2\pi i(x, \xi)) f(x)$ | $\mathcal{F}[\exp(2\pi i(x, \xi)) f](\xi) = (\mathcal{T}_h \circ \mathcal{F}[f])(\xi)$ |
| Escalamiento | $h(x) = f(\lambda x) \lambda > 0$ | $\mathcal{F}[h](\xi) = 1/\lambda_N \mathcal{F}[\exp(2\pi i(x, \xi)) f](\xi/\lambda), \lambda > 0$ |

El siguiente resultado establece que la transformada de Fourier de la convolución de dos funciones coincide con el producto de la transformada de cada una de ellas y es de gran importancia en el procesamiento digital de imágenes.

Proposición 1.2. Sean $f, h \in L^1(\mathbb{R}^N)$. Entonces

$$\mathcal{F}[f * h](u) = \mathcal{F}[f](u) \cdot \mathcal{F}[g](u) \quad u \in \mathbb{R}^N$$

Definición 1.12. Para cada $f \in L^1$, el operador $\mathcal{F}^{-1}[f]$ definido por

$$\mathcal{F}^{-1}[f](x) = \int f(x) \exp(2\pi i(x, u)) du \quad x \in \mathbb{R}^N$$

es llamado la **Inversa de la Transformación de Fourier** de f

Proposición 1.3. Si $f, h \in L^1$, entonces

- $\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]](x) = f(x) \quad x \in \mathbb{R}^N$
- $\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f] \cdot \mathcal{F}[g]](x) = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f * g]](x) = (f * h)(x)$

Transformada Discreta de Fourier unidimensional y bidimensional.

Definición 1.13. Si $f \in C(\mathbb{R})$ discretizada, el operador $F_d = \mathcal{F}_d[f]$ definido por

$$F_d(u) = \mathcal{F}_d[f](u) = \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{N-1} f(x) \exp(-2\pi i \frac{ux}{N})$$

es llamado la **Transformada Discreta de Fourier Unidimensional** de f

Definición 1.14. Si $f \in C(\mathbb{R})$ discretizada, el operador $\mathcal{F}^{-1}[f]$ definido por

$$\mathcal{F}^{-1}[f](x) = \sum_{u=0}^{N-1} f(u) \exp(2\pi i ux)$$

es llamado la **Inversa de la Transformada Discreta de Fourier Unidimensional** de f .

En el caso bidimensional:

- Si $f \in C(\mathbb{R}^2)$ discretizada, el operador $\mathcal{F}_d[f]$ definido por:

$$\mathcal{F}_d[f](u, v) = \frac{1}{MN} \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{ux}{M} + \frac{vy}{N}\right)\right)$$

es llamado la **Transformada Discreta de Fourier Bidimensional** de f . Además, $\Delta u = \frac{1}{M\Delta x}$ y $\Delta v = \frac{1}{N\Delta y}$.

- Si $f \in C(\mathbb{R}^2)$ discretizada, el operador \mathcal{F}_d^{-1} definido por

$$\mathcal{F}_d^{-1}[f](x, y) = \frac{1}{MN} \sum_{u=0}^{M-1} \sum_{v=0}^{N-1} f(u, v) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{ux}{M} + \frac{vy}{N}\right)\right)$$

es llamado la **Inversa de la Transformada Discreta de Fourier Bidimensional** de f .

Se puede calcular la transformada discreta bidimensional como iteraciones de la transformada discreta unidimensional:

Sean $(u, v) \in I_{M-1} \times I_{N-1}$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_d[f](u, v) &= \frac{1}{MN} \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{ux}{M} + \frac{vy}{N}\right)\right) \\ &= \frac{1}{M} \sum_{x=0}^{M-1} \exp\left(-2\pi i \left(\frac{ux}{M}\right)\right) \sum_{y=0}^{N-1} f(x, y) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{vy}{N}\right)\right) \\ &= \frac{1}{M} \sum_{x=0}^{M-1} \mathcal{F}_d[f](x, \zeta) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{\xi x}{M}\right)\right) \end{aligned}$$

es decir

$$\mathcal{F}_d[f](u, v) = \frac{1}{M} \sum_{x=0}^{M-1} \mathcal{F}_d[f](x, \zeta) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{\xi x}{M}\right)\right)$$

donde

$$\mathcal{F}_d[f](x, y) = \frac{1}{N} \sum_{y=0}^{N-1} \mathcal{F}_d[f](\xi, y) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{\zeta y}{N}\right)\right)$$

Por otro lado, para cada $(x, y) \in I_{M-1} \times I_{N-1}$

$$\mathcal{F}_d^{-1}[\mathcal{F}_d[f]](x, y) = f(x, y) = \sum_{u=0}^{M-1} \exp\left(-2\pi i \left(\frac{ux}{M}\right)\right) \sum_{v=0}^{N-1} \mathcal{F}_d[f](u, v) \exp\left(-2\pi i \left(\frac{vy}{N}\right)\right)$$

Tabla 1.4: Propiedades de la transformada discreta de Fourier.

| | |
|------------|---|
| Linealidad | $\mathcal{F}_d[f + \alpha h](u, v) = \mathcal{F}_d[f](u, v) + \alpha \mathcal{F}_d[h](u, v),$ |
| Traslación | $\mathcal{F}_d[\mathcal{T}_{u_0, v_0} \circ f](u, v) = (\mathcal{T}_{(u_0, v_0)} \circ \mathcal{F}_d[f])(u, v)$ |
| Modulación | $\mathcal{F}_d[\exp(2\pi i \frac{xu}{M} + \frac{yv}{N}) f](u, v) = (\mathcal{T}_{(u_0, v_0)} \circ \mathcal{F}_d[f])(u, v)$ |

Una de las características más importantes del uso de la transformada de Fourier es que una señal digital, expresada en una serie de Fourier o en una transformada, se puede reconstruir (recuperar) completamente mediante un proceso inverso, sin pérdida de información.

1.5. Problemas mal condicionados.

Los términos “problemas inversos” y “problemas mal planteados”, han ido ganando popularidad de manera constante y segura en la ciencia moderna desde mediados del siglo XX. Un poco más de cincuenta años de estudio de problemas de este tipo han demostrado que un gran número de problemas de diversas ramas de la matemática (álgebra computacional, ecuaciones diferenciales e integrales, ecuaciones diferenciales parciales, análisis funcional) se pueden clasificar como inversos o mal planteados, y se encuentran entre los más complicados (ya que son inestables y generalmente no lineales)[6].

Un área en la que aparecen numerosos problemas inversos es en el procesamiento digital de señales, específicamente en el procesamiento digital de imágenes, clasificándose en dos grandes grupos.

- Restauración de imágenes: Consiste en recuperar una imagen de la que se dispone una versión degradada de ella, conocida o no la causa de la degradación.
- Reconstrucción de imágenes: Consiste en recuperar una imagen de la que se posee cierta información, la cual no tiene por qué ser ninguna otra imagen.

Existen métodos para resolver problemas en el procesamiento digital de imágenes, en particular en la restauración, que pueden describirse mediante el proceso inverso de la convolución, llamados **Deconvolución**.

1.5.1. Deconvolución

La ecuación que modela el proceso de restauración de una imagen, conocida la convolución $g(x, y)$ y la función de dispersión de punto $h(x, y)$ esta dada por:

$$g(x, y) = f(x, y) * h(x, y) \tag{1.9}$$

donde $f(x, y)$ es la imagen a restaurar.

Dentro de la restauración de imágenes digitales, nos interesa particularmente, aquellos casos donde el proceso de degradación (desenfoque, borrosidad, ruido y artefactos presentes en la imagen.) es lineal e invariante espacialmente, afectando a todos los píxeles de la imagen de la misma forma [7], dicho proceso se modela a través de la siguiente ecuación

$$g(x, y) = f(x, y) * h(x, y) + \eta(x, y) \quad (1.10)$$

Donde $f(x, y)$ es la imagen original, $h(x, y)$ es la función dispersión de punto y $\eta(x, y)$ representa el ruido que se adquiere en el proceso de degradación o discretización de la muestra.

El correspondiente problema inverso, consiste en recuperar la imagen original $f(x, y)$ a partir de su versión degradada $g(x, y)$ y el conocimiento del proceso de degradación con $h(x, y)$, e incluyendo algunos conocimientos sobre el término de ruido aditivo $\eta(x, y)$. A esto se le conoce como **deconvolución clásica** de imágenes.

Una forma discreta y matricial de la Ec. (1.10) es

$$\mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f} + \mathbf{n} \quad (1.11)$$

Conocida la matriz \mathbf{g} y alguna información sobre la matriz de degradación \mathbf{H} y de la matriz de ruido aditivo \mathbf{n} . Se puede observar de la Ec. (2.3) que la descripción de una imagen digital observada en el dominio espacial, se representa como un sistema matricial.

El objetivo de la restauración es obtener una aproximación $\hat{\mathbf{f}}$ de la imagen original. Queremos que la estimación sea lo más cercana posible a la imagen original de entrada. En general, a mayor información sobre \mathbf{H} y \mathbf{n} mejor será la aproximación $\hat{\mathbf{f}}$ a \mathbf{f} .

Para ello, aplicamos la transformada discreta de Fourier en el dominio de frecuencia a ambos lados de la Ec.(1.11), así

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_d[g](u, v) &= \mathcal{F}_d[f * h + \eta](u, v) \\ &= \mathcal{F}_d[f * h](u, v) + \mathcal{F}_d[\eta](u, v) \\ &= \mathcal{F}_d[f](u, v) \cdot \mathcal{F}_d[h](u, v) + \mathcal{F}_d[\eta](u, v) \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\mathcal{F}_d[g](u, v) = \mathcal{F}_d[f](u, v) \cdot \mathcal{F}_d[h](u, v) + \mathcal{F}_d[\eta](u, v) \quad (1.12)$$

Y en virtud de la notación de la Definición 1.13, la Ec.(2.4) se puede reescribir

$$G(u, v) = F(u, v)H(u, v) + N(u, v) \quad (1.13)$$

Observe que la imagen descrita por la Ec.(1.12) en el dominio espacial, ahora transformada, está representada por la Ec.(1.13) en el dominio de la frecuencia. A partir de la ecuación (1.13) obtenemos la primera aproximación de \hat{F} de F

$$\hat{F}(u, v) = \frac{G(u, v)}{H(u, v)} = F(u, v) + \frac{N(u, v)}{H(u, v)} \quad (1.14)$$

Con $\hat{F}(u, v) = \mathcal{F}_d[\hat{f}](u, v)$ transformada discreta de Fourier de \hat{f} .

De la Ec.(1.14) se aprecia que la imagen original $f(x, y)$ no puede ser restaurada debido a que la función de ruido aleatorio es desconocida. Además, si la función de degradación $H(u, v)$ tiene valores muy próximos a cero o ceros, el cociente $N(u, v)/H(u, v)$ sería muy grande o infinito y la aproximación $\hat{f}(x, y)$ estaría dominada por éste término; y es posible que \hat{f} (imagen restaurada) sea muy distinta a f (imagen original) o complemente irreconocible. Este problema puede ser resuelto reduciendo el análisis a las frecuencias cercanas al origen, debido a que éstas representa el valor promedio de $h(x, y)$ y éste es normalmente el valor mayor de $H(u, v)$ en el dominio de la frecuencia. Por lo tanto, utilizando métodos que empleen filtros de alta frecuencia atribuidos al ruido como el filtro de Wiener, se puede hallar \hat{f}

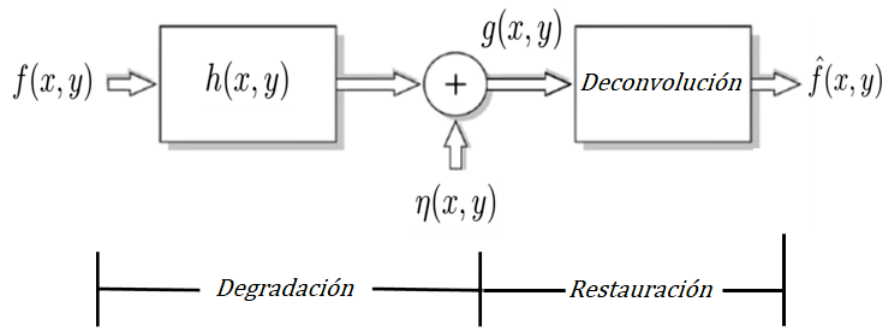


Figura 1.6: Modelo de degradación y restauración de una imagen digital[8].

1.5.1.1. Filtros digitales

Los filtros en el dominio espacial y en el dominio de la frecuencia se clasifican como lineales y no lineales.

Los filtros en el procesamiento digital de imágenes son operaciones que se aplican a los píxeles de una imagen para mejorarla, enfatizar cierta información o conseguir un efecto especial. El resultado sobre cada píxel depende de los píxeles de su entorno.

Un filtro se puede aplicar en el dominio espacial, trabajando directamente sobre los píxeles de la imagen, o en el dominio frecuencial donde las operaciones se llevan a cabo con la transformada de Fourier de la imagen. El propósito de aplicar un filtro es suavizar la imagen, eliminar ruido y/o detectar bordes.

Los filtros que producen suavizado se denominan de paso bajo y los que producen realce de bordes se llaman de paso alto, en atención a las modificaciones que producen en el espectro de magnitud de la imagen. Los filtros en el dominio de la frecuencia se usan para eliminar altas o bajas frecuencias de la imagen, lo que se traduce en suavizar la imagen o bien, realzar

o detectar bordes.

1.5.1.2. Filtro Wiener

El filtro de Wiener es un método de restauración de imágenes en presencia de la transformada discreta de Fourier de $h(x, y)$ (función de degradación de punto) y de la transformada discreta de Fourier de $\eta(x, y)$ (ruido).

Este filtro busca resolver el problema de hallar una aproximación \hat{f} que minimice la función de error estadístico dada por

$$e^2 = E[(f - \hat{f})^2]$$

donde $E[\cdot]$ es el operador del valor esperado (la esperanza) y f es la imagen de entrada (imagen original) mediante el siguiente algoritmo.

Restauración con el filtro Wiener de la imagen original.

- a. Hallar la transformada discreta de Fourier bidimensional de la imagen degradada $g(x, y)$ para obtener $G(u, v)$.
- b. Hallar las Transformadas discretas de Fourier bidimensional de
 - La imagen de $f(x, y)$ para obtener $F(u, v)$
 - La función de degradación $h(x, y)$ para obtener $H(u, v)$.
 - El ruido aditivo $\eta(x, y)$ para obtener $N(u, v)$
- c. Calcular el filtro de Wiener:

$$\hat{F}(u, v) = \left[\frac{1}{H(u, v)} \cdot \frac{|H(u, v)|^2}{|H(u, v)|^2 + S_n(u, v)/S_f(u, v)} \right] \cdot G(u, v) \quad (1.15)$$

donde

- $H(u, v)$: Es la función de degradación.
 - $|H(u, v)|^2 = H^*(u, v) \cdot H(u, v)$
 - $H^*(u, v)$: Es el conjugado de $H(u, v)$
 - $S_n(u, v) = |N(u, v)|^2$: Es el espectro de potencia del ruido $\eta(x, y)$.
 - $S_f(u, v) = |F(u, v)|^2$: Es el espectro de potencia de la imagen original $f(x, y)$ sin degradación
 - $S_n(u, v)/S_f(u, v)$ es la relación señal ruido.
- d. Calcular la inversa de la transformada discreta de Fourier bidimensional de $\hat{F}(u, v)$ para obtener $\hat{f}(x, y)$

El filtro Wiener es computacionalmente rápido, pero sus restauraciones no son buenas para imágenes degradadas con ruido aditivo de naturaleza no gaussiana, y a veces la imagen restaurada presenta distorsiones conocidas como “ringing artifacts”. El método de restauración empleado en este trabajo es una variante de este filtro, conocido como “Unsupervised Wiener”, este algoritmo es aplicable a modelos de degradación linealmente invariantes en el tiempo que se encuentra a menudo en astronomía, imágenes médicas, ensayos no destructivos y especialmente en problemas ópticos. También se puede emplear en otras áreas como la espectrometría o la microscopía de fluorescencia [9]. Lo que lo diferencia del filtro Wiener es que los parámetros de regularización (como por ejemplo el ruido) se estiman automáticamente y no son un parámetro de entrada para el cálculo de la restauración.

1.5.1.3. Restauración no lineal iterativa de Richardson-Lucy

El método de restauración de imágenes digitales por iteración no lineal desarrollado por Richardson en 1972 [10] y Lucy en 1974[11], trabajando en forma independiente es referido como el algoritmo de Richardson-Lucy (R-L) y surge de una formulación de probabilidad máxima donde la imagen es modelada con estadística de Poisson. Maximizando la función de probabilidad del modelo, se obtiene una ecuación que se verifica cuando la sucesión dada por la siguiente iteración converge a $\hat{f}(x, y)$ (imagen restaurada).

Sea $\hat{f}_0(x, y)$ una aproximación inicial de $\hat{f}(x, y)$ y para $k \in \mathbb{N}$,

$$\hat{f}_{k+1}(x, y) = \hat{f}_k(x, y) \left[h(-x, -y) * \frac{g(x, y)}{h(x, y) * \hat{f}_k(x, y)} \right] \quad (1.16)$$

donde

- $h(x, y)$: función de degradación de punto conocida, en el dominio espacial.
- $g(x, y)$: función degradada (imagen borrosa) en el dominio espacial.
- $h(-x, -y)$: función simétrica de $h(x, y)$
- $\hat{f}_{k+1}(x, y)$: (k+1)-ésima aproximación de $\hat{f}(x, y)$ positiva.

Es difícil saber cuando detener las iteraciones del método de R-L, por lo que, usualmente se observa la imagen de salida $\hat{f}_{k+1}(x, y)$ y se para el proceso cuando el resultado de ésta es aceptable en la aplicación determinada.

Restauración con el algoritmo de R-L.

- a. Darse $\hat{f}_0(x, y)$ una aproximación inicial de la imagen restaurada.
- b. Determinar:

- $h(x, y) * \hat{f}_0(x, y)$
- $g(x, y) / (h(x, y) * \hat{f}_0(x, y))$
- $h(-x, -y) * \frac{g(x, y)}{h(x, y) * \hat{f}_0(x, y)}$

c. Calcular

$$\hat{f}_1(x, y) = \hat{f}_0(x, y) \left[h(-x, -y) * \frac{g(x, y)}{h(x, y) * \hat{f}_0(x, y)} \right]$$

d. Repetir el proceso ($k + 1$) veces, hasta obtener la restauración deseada, es decir, $\hat{f}(x, y)$

Una de las principales ventajas de este método es que incorpora un modelo de ruido más eficiente, y permite obtener una restauración de mejor calidad, pero si se emplean un gran número de iteraciones para obtener la restauración el ruido en la imagen se amplificará.

Una comparación entre el filtro Wiener y el método iterativo de Richardson-Lucy se puede ver en el Apéndice de este trabajo.

Capítulo 2

Metodología

Con el objetivo de mejorar la resolución espacial en los mapas bidimensionales obtenidos con el instrumento Xeuss 2.0 SAXS/WAXS de Xenocs, se implementaron los métodos de deconvolución descritos en el capítulo anterior. Una semilla de chíá se seleccionó como muestra para la obtención de los mapas (transmisión, absorción y dispersión) en dos experiencias distintas. Python(v-3.8.5)[12] fue el lenguaje de programación seleccionado para manipular, analizar y realizar el proceso de deconvolución, ya que este lenguaje cuenta con múltiples librerías para la manipulación de datos (Numpy, Pandas, Matplotlib...) y el procesamiento digital de imágenes. Además, los métodos de deconvolución correspondientes al filtro de Wiener y el método iterativo de Richardson-Lucy se encuentran disponibles en este lenguaje en la librería Scikit-Image[13].

En la primera experiencia se obtuvo el mapa de transmisión y absorción de una semilla de chíá seca, quitando el beam stopper del instrumento y estableciendo un paso de 0,05 mm para el portamuestra motorizado, obteniendo un total de 60×61 posiciones de dimensiones $(3 \times 3,05)$ mm. En la segunda experiencia se hidrató una semilla de chíá diferente, y se realizó la medición para obtener los mapas de transmisión, absorción y los patrones de dispersión. La medición para el mapa de transmisión y absorción se efectuó de manera similar a la experiencia anterior, mientras que, para la medición de los patrones de dispersión se colocó el beam stopper (eliminando la transmisión de la muestra) del instrumento. En ambas mediciones efectuadas en la segunda experiencia (mapa de transmisión y patrones de dispersión), se estableció un paso de 0,167 mm del portamuestra motorizado, obteniendo un total de 30×31 posiciones con dimensiones de $(5 \times 5,177)$ mm. En ambas experiencias la distancia entre la muestra y el detector fue de 2,5 m, pero la forma del haz directo se registró a 1 m para reducir los efectos de la divergencia del haz.

Para poder construir el mapa de dispersión, se realizó un enmascaramiento de las zonas muestras presentes en los patrones de dispersión dados; ya que la señal de SAXS proviene de la integral de todos los fotones registrados en el detector (descontando las zonas enmascaradas). La primera de estas zonas fue un rectángulo, que correspondía al espaciado entre los detectores, y la segunda correspondió al beam stopper del instrumento (Fig. 2.1). El criterio

para identificar la primera zona, fueron los valores que la conforman, porque en esta zona se ubican los únicos valores negativos dentro del patrón de dispersión, mientras que, para identificar la segunda zona el criterio fue un poco más complejo.

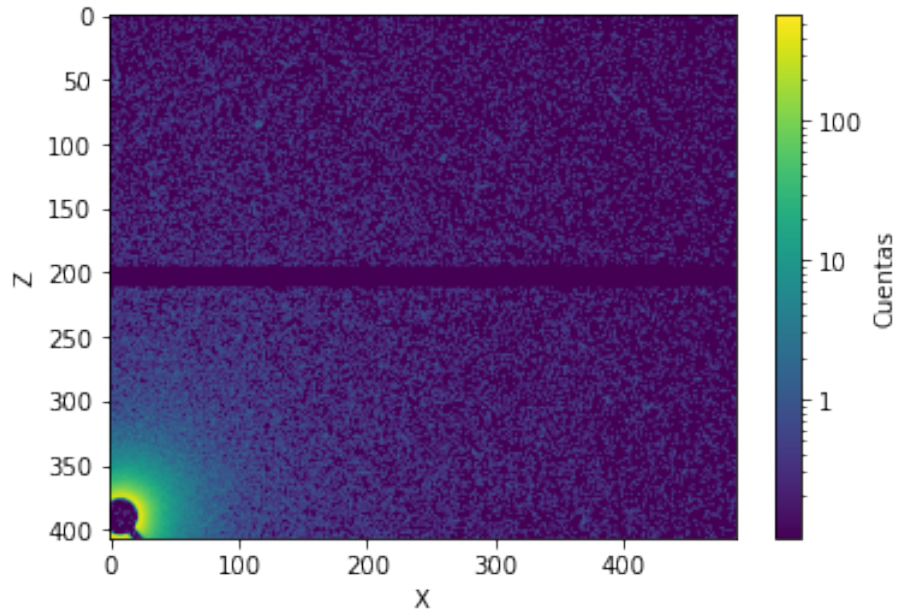


Figura 2.1: Patrón de dispersión asociado a la semilla hidratada.

El primer paso para identificar la segunda zona, fue seleccionar un corte de un patrón de dispersión con buen contraste que contuviera al beam stopper (Fig. 2.2), para luego aplicar segmentación por regiones, siguiendo el criterio del valor umbral.

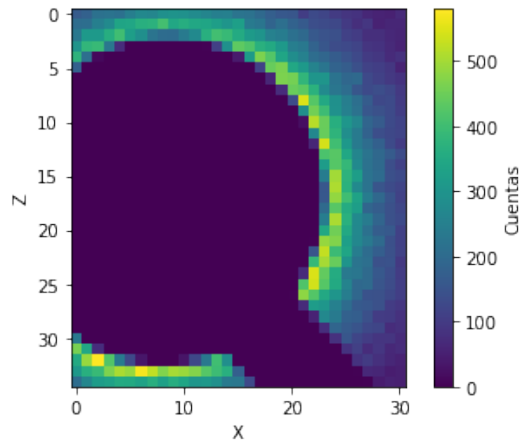


Figura 2.2: Corte del patrón de dispersión de la Fig. 2.1.

El resultado de la segmentación a partir del criterio del valor umbral fue una imagen

binarizada, donde los valores mayores que el umbral, toman el valor de 1 y los valores menores o igual al umbral, toman el valor de 0. Existen varios métodos que implementan este criterio, y proponen una función objetivo que indica el grado de calidad de la segmentación. Planteando una función objetivo adecuada se pueda minimizar o maximizar, para encontrar el mejor umbral. Dentro de estos métodos se empleó el método de Otsu[14].

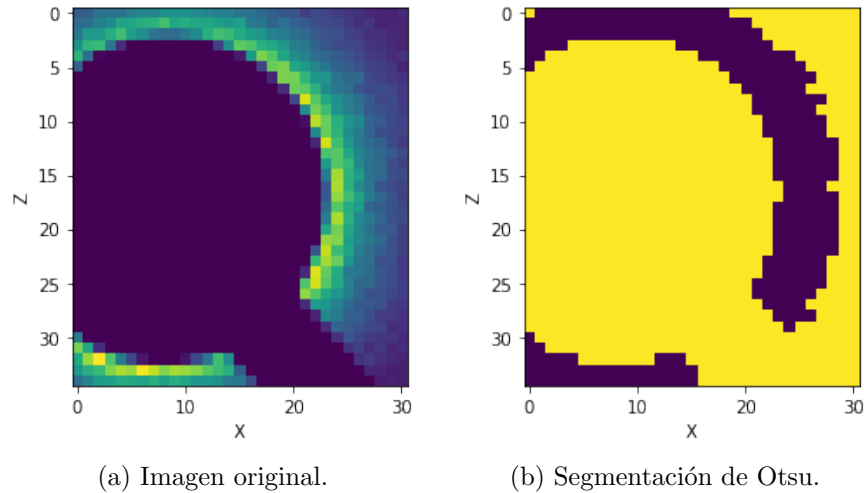


Figura 2.3: Resultado de la segmentación aplicando el método de Otsu.

Como se observa en la Fig. 2.3 (b), el resultado del método de Otsu, no fue bueno, esto se debe a que los algoritmos que emplean el criterio del valor umbral proponiendo una función objetivo son buenos en imágenes cuyos histogramas son bimodales (de dos picos, crestas o jorobas) y el histograma del corte de la imagen empleada no tiene esta característica (Fig. 2.4).

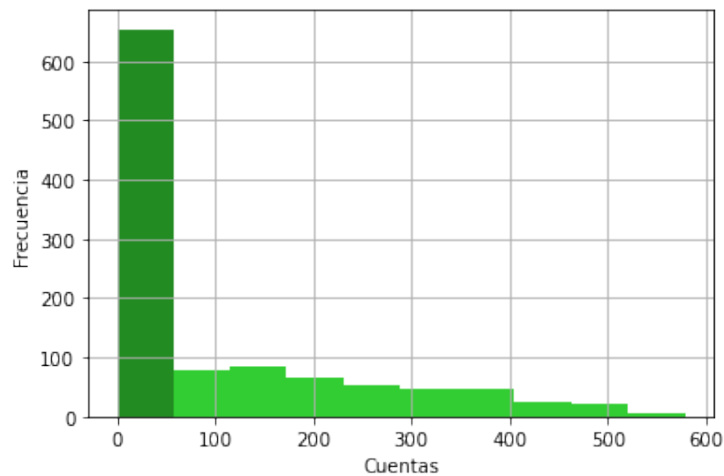


Figura 2.4: Histograma del la Fig. (2.10).

Por lo que, para lograr la segmentación del beam stopper se siguió trabajando con el criterio del valor umbral, pero esta vez sin usar métodos que propongan una función objetivo, sino tomando el valor umbral a partir de la información proporcionada por el histograma. En la Fig. 2.3 se observa el resultado de la segmentación para diferentes valores, se comenzó con el valor de 57, ya que correspondía al límite superior del intervalo donde se encontraban la mayor cantidad de píxeles (zona del beam stopper), y a partir de este valor, se comenzó a disminuir el umbral. Cabe destacar que la función del beam stopper es atrapar los fotones que inciden paralelamente sobre la muestra, y como los valores del mapa de dispersión representan “cuentas” o número de fotones detectados, esta región debería identificarse con el valor 0 en el corte de nuestra imagen seleccionada. Sin embargo, se puede ver en la Fig. 2.4 (d), que esto no se cumple, en parte por la naturaleza probabilística de la interacción de los fotones con la materia. Así el valor umbral escogido para la segmentación fue 2.

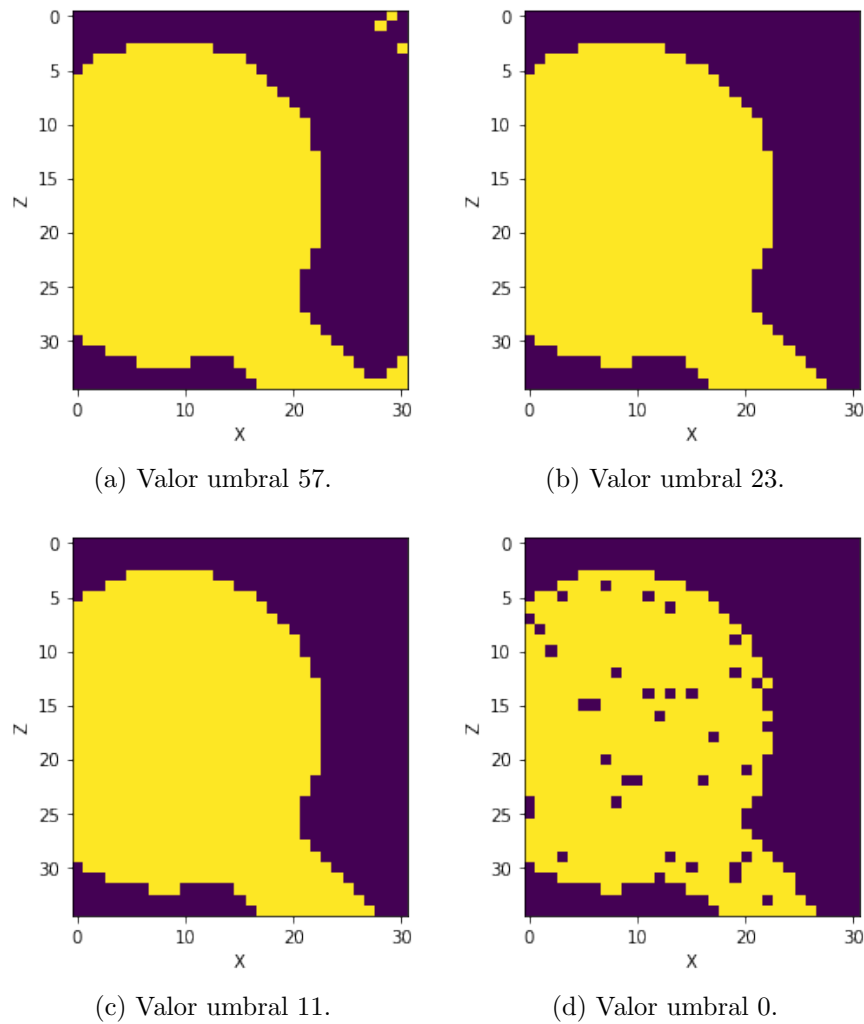


Figura 2.5: Segmentación aplicada seleccionando diferentes valores de umbral.

se aumentó el tamaño del paso con respecto a la experiencia anterior por dos motivos, el primero es porque se quiso que el paso sea lo mas cercano a las dimensiones del elemento de medición del detector (0,172 mm), y el segundo porque la medición de cada patrón de dispersión toma un minuto aproximadamente (se miden 900 patrones de dispersión), lo que implica que un paso menor aumenta la cantidad de patrones de dispersión a medir y se traduce en un aumento considerable en el tiempo de obtención de los datos. En ambas experiencias la distancia entre la muestra y el detector es de 2.5 m .

Capítulo 3

Resultados

3.1. Mapa de transmisión y absorción.

En la primera experiencia, se realizó la toma de datos correspondientes a los mapas de transmisión y absorción para la semilla, los resultados fueron proporcionados en dos archivos diferentes, el primero con la información de la intensidad transmitida en función de la posición (data de la semilla) y el segundo con la información de la salida del detector bidimensional (data del haz incidente). Del primer archivo se tomaron los datos de interés que se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 3.1: Organización de la data obtenida en la primera experiencia.

| Exp | X | Epoch | Seconds | ... | Roi0 |
|------------|--------------|----------------|----------------|------------|-----------------|
| 1 | [-2.297,...] | [36.533,...] | [0.504,...] | ... | [3228381.7,...] |
| 2 | [-2.297,...] | [164.421,...] | [0.505,...] | ... | [3233527.3,...] |
| 3 | [-2.297,...] | [292.364,...] | [0.504,...] | ... | [3237735.7,...] |
| ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ |
| 60 | [-2.297,...] | [7586.312,...] | [0.503,...] | ... | [3174701.2...] |

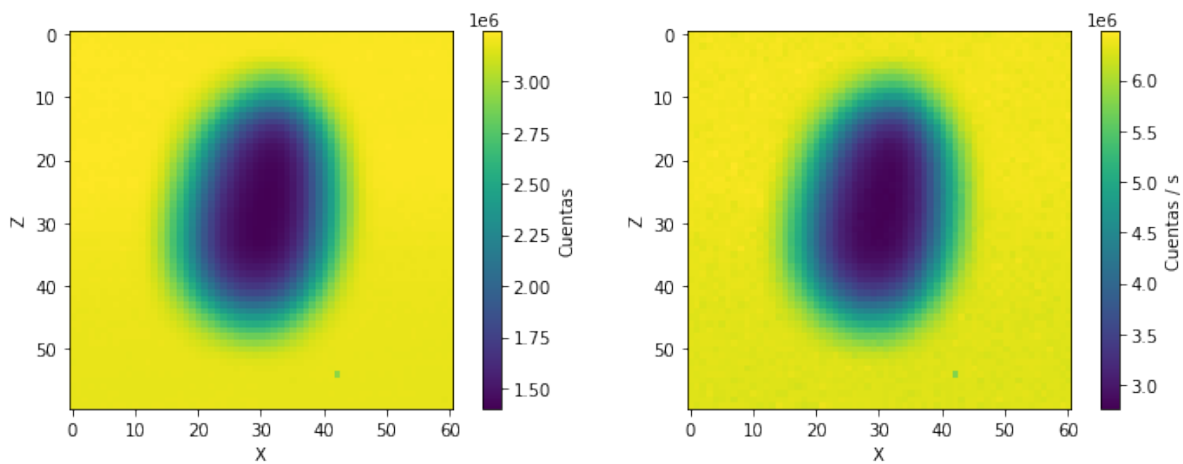
En la Tabla 3.1 los elementos de la primera columna (**Exp**) indican experimentos diferentes, en cada experimento se realizó la medición de 12 parámetros (**X**, **Epoch**, **Seconds**...), donde cada parámetro tiene un valor asociado al movimiento en el eje x de la muestra; el movimiento de la muestra se efectuó en intervalos de 0,05 mm hasta completar una distancia de 3,05 mm. Cada vez que se movió la muestra 0,05 mm, se hizo una medición de parámetros obteniendo así 61 mediciones. Entre los parámetros medidos estaban el número de fotones registrados en el detector en una región de interés (**Roi0**) arbitraria, circundante al haz directo en un tiempo de exposición determinado. Cuando el movimiento de la muestra completó los 3,05 mm terminó el experimento, la muestra se movió 0,05 mm en el eje z de

manera descendente y se dió inicio a un nuevo experimento. Se obtuvo así 60 experimentos con 61 mediciones diferentes de cada parámetro.



Figura 3.1: Semilla de chía empleada en la primera experiencia.

Para la elaboración del mapa de transmisión se seleccionaron los valores de la columna **Roi0** correspondientes a cada experimento, obteniendo una matriz de dimensiones 60×61 , esta matriz es un mapa bidimensional de intensidades (cada elemento del mapa representa un número de fotones incidentes sobre el detector (Fig. 3.2 (a)), producto de la transmisión de fotones a través de la muestra. La intensidad medida en cada elemento del mapa tiene asociado un tiempo de detección y como este tiempo de detección no es el mismo en cada elemento, hay un error dentro del mapa proporcional a las fluctuaciones del tiempo. Para disminuir este error en los datos, se realizó la división de cada elemento del mapa por su tiempo de detección (valores en la columna **Seconds**) logrando obtener un mapa de intensidades con menor error (Fig. 3.2 (b)).



(a) Intensidad por transmisión de fotones en cada pixel.

(b) Intensidad dada la razón de transmisión de fotones de cada pixel.

Figura 3.2: Mapa de transmisión.

En la Fig. 4.2 los pixeles con valores más altos corresponden a las zonas donde hay mayor incidencia de fotones (zona amarilla), mientras que los pixeles con valores mas bajos corresponde a las zonas donde hay menor incidencia (zona azul degradada), es decir, donde se ubica la muestra. Aunque los diferentes tipos de interacción de los fotones con la materia son de naturaleza estadística, la intensidad macroscópica del haz cumple con la siguiente ley exponencial determinista.

$$I_f = I_0 \exp(-\mu_{ij}x) \quad (3.1)$$

Donde la intensidad del haz saliente I_f esta relacionada con la intensidad del haz incidente I_0 por un coeficiente de atenuación o absorción lineal μ_{ij} y el ancho u espesor x de la muestra. En el caso de que la muestra se la considere con una densidad electrónica constante, el factor μ_{ij} es proporcional al espesor x . Así, reescribiendo la Ec.(3.1) se tiene que

$$\mu x = \ln \left(\frac{I_0}{I_f} \right) \quad (3.2)$$

La Ec.(3.2) indica que conocido I_0 se puede obtener un mapa asociado a la absorción y espesor de la muestra a partir del mapa de intensidad I_f medido. El valor de I_0 se tomó de un promedio de 100 valores extraídos del mapa de transmisión, en una matriz 10×10 tomada de la parte superior izquierda del mapa (zona amarilla). Al tomar el valor de I_0 como un promedio y no como un valor único, se evitaron las fluctuaciones del haz que contribuyen al error. Por lo que, aplicando la Ec. (3.2) al mapa de transmisión de la Fig. 3.2 (b), se obtuvo

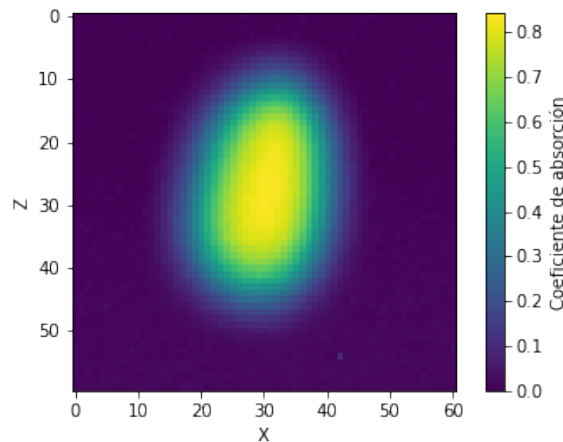


Figura 3.3: Mapa de absorción.

Cabe destacar que en el mapa de la Fig. 3.3 se igualó a cero aquellos valores negativos presentes una vez realizada la transformación. Además, se observa que los valores más altos del mapa corresponden a la zona donde hay mayor absorción de fotones (zona amarilla).

3.1.1. Deconvolución

Como se describió en la sección 1.5, para poder realizar la restauración de una imagen con los métodos descritos, se necesitó conocer el núcleo o función de dispersión de punto del sistema, en este caso corresponde con el patrón bidimensional de transmisión del haz de fotones incidente sobre la muestra. Del segundo archivo se extrajo este patrón correspondiente al perfil de transmisión del equipo, tomando aquellos valores mayores al 1% del valor máximo de la intensidad detectada (Fig. 3.4).

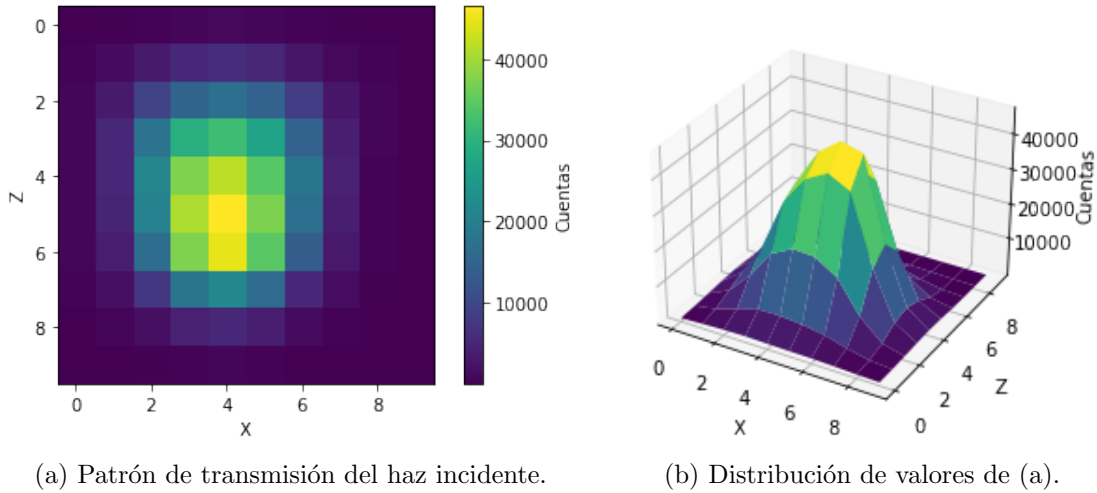


Figura 3.4: Patrón de transmisión del haz de fotones incidente y su distribución asociada.

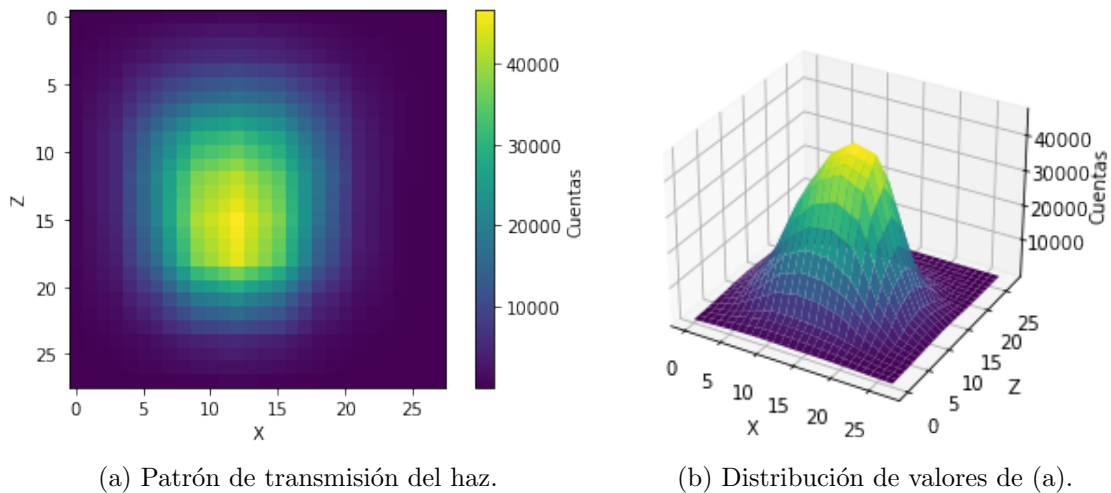


Figura 3.5: Patrón de transmisión del haz de fotones incidente interpolado y su distribución asociada.

Cada píxel del patrón del haz corresponde a un cuadrado de dimensiones $(0,172 \times 0,172)mm$, mientras que cada píxel del mapa de intensidad y absorción de la muestra a $(0,05 \times 0,05)mm$. Para poder realizar la operación de deconvolución los píxeles del patrón y el mapa deben representar las mismas dimensiones, por lo que se redimensionó el patrón del haz en un factor de $0,172/0,05 \approx 3$. Esto se logró mediante un proceso de interpolación lineal (Fig. 3.5).

Una vez redimensionado el patrón de transmisión del haz incidente, se normalizó y se extrajo del mismo un nuevo patrón con dimensiones de $(0,5 \times 0,5)mm$, ya que esta es la apertura física mínima del equipo. Suponiendo que cada grupo de 3 píxeles, corresponde con la dimensión de $0,172mm$ entonces las dimensiones a tomar del patrón fueron $(0,5mm/0,172mm) \approx 3$. Por lo que, el nuevo patrón está constituido por una matriz de 9×9 píxeles.

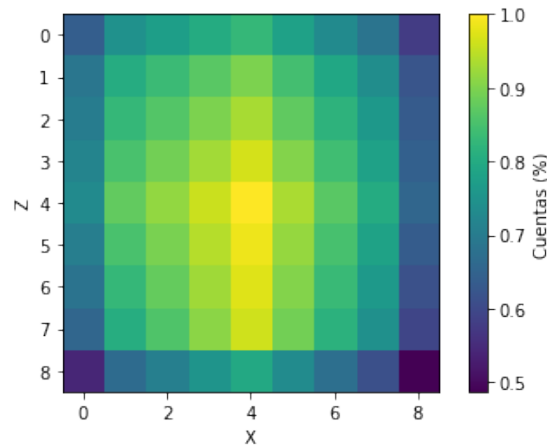


Figura 3.6: Núcleo empleado para el proceso de deconvolución.

Obtenido el mapa de absorción y seleccionado el núcleo a partir del patrón del haz interpolado, se efectuó el proceso de deconvolución.

3.1.1.1. Filtro Wiener

Se puede apreciar en la Fig. 3.7 que el resultado de la restauración de la imagen no es buena. Una de las razones a considerar, es que este método modela el ruido en la imagen a través de una función de distribución Gaussiana, y en imágenes o mapas cuyos procesos de adquisición involucran una fuente de ondas electromagnéticas (como rayos X o rayos gamma), el ruido presente (debido a las fluctuaciones aleatorias de los fotones emitidos) se ajusta a una función de distribución de Poisson[15]; siendo ésta, una de las principales razones por la que la restauración obtenida con este método no fue buena.

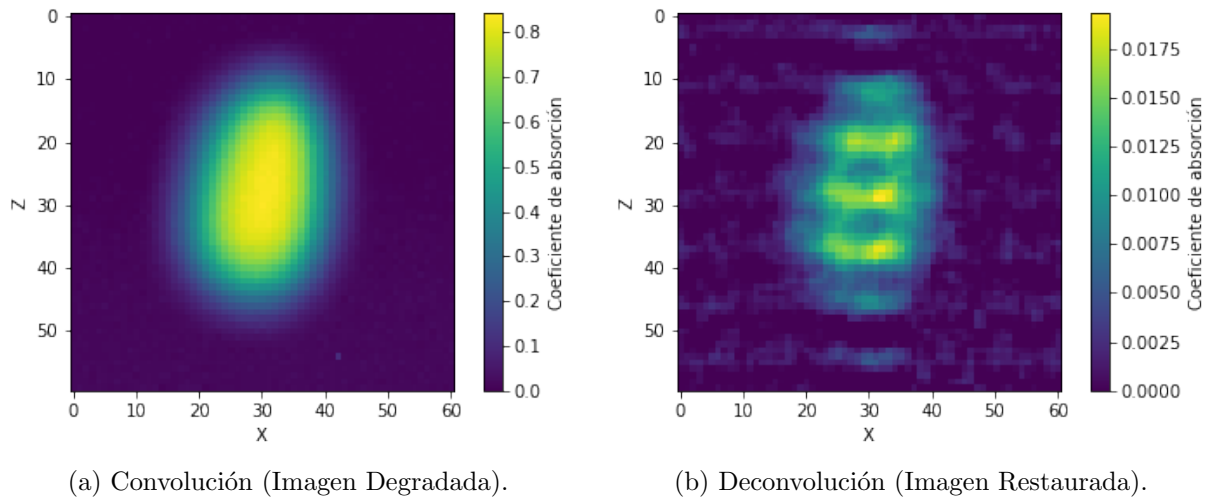
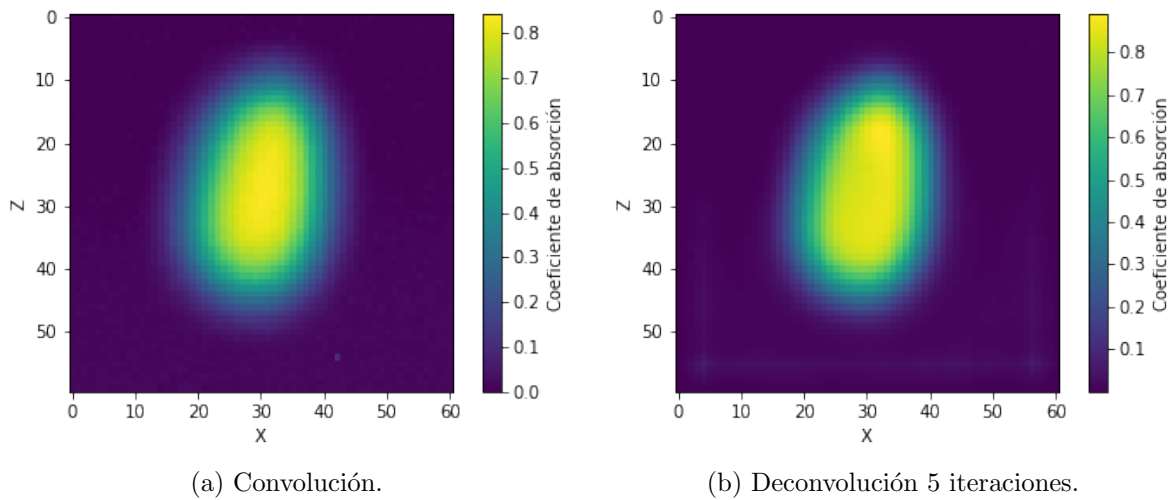


Figura 3.7: Deconvolución obtenida implementando el filtro Wiener.

3.1.1.2. Método Iterativo de Richardson-Lucy

En la Fig. 3.8 se puede ver que el método iterativo de R-L da una mejor calidad en la restauración con respecto al filtro Wiener, esto se debe a que este método emplea modelos de estadística de Poisson que se adaptan mejor a la naturaleza del ruido presente en los datos. Además, a medida que se obtiene una nueva restauración con un mayor número de iteraciones, la calidad en esta disminuye. La imagen restaurada seleccionada para ser analizada y comparada con la imagen degradada fue la obtenida luego de 5 iteraciones (mejor aproximación).



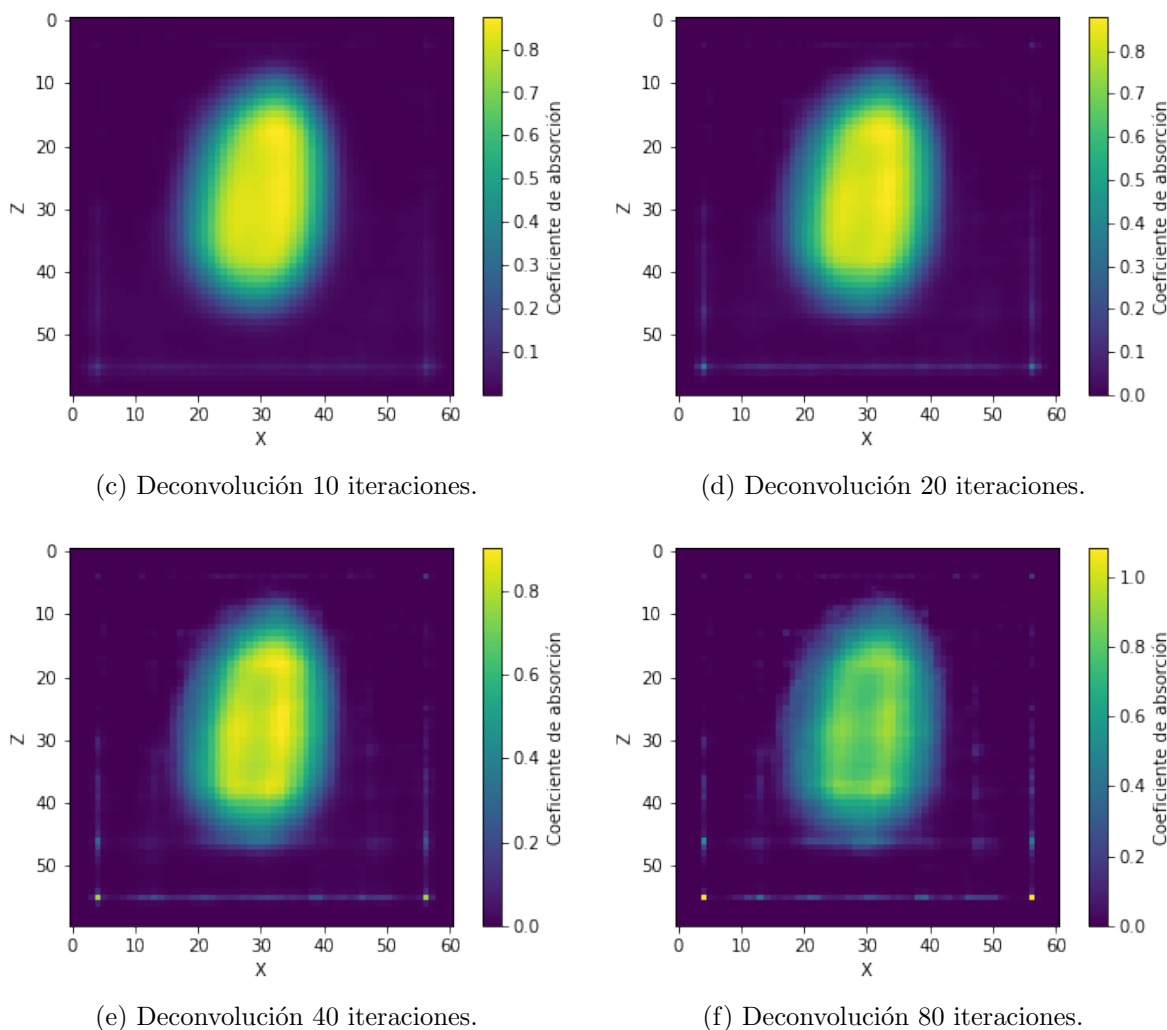


Figura 3.8: Deconvolución obtenida con el método iterativo de Richardson-Lucy.

3.1.2. Resultados de la restauración.

Una vez seleccionada la imagen restaurada, se obtuvo el mapa de transmisión de la semilla haciendo uso de la Ec. (3.2) (Fig. 3.9). Se observó una disminución en el nivel de desenfoque en el mapa restaurado con respecto al degradado, esto se traduce en una reducción significativa y mejor definición de los bordes de la semilla. Otra característica importante a resaltar es el fondo del mapa (zona amarilla), ya que presenta una distribución de valores más homogénea, lo que da la percepción de un fondo más “limpio” o con menor nivel de ruido. Además, hay que tener en cuenta la aparición de un “marco” en la parte inferior del mapa, el cual se observó con mayor o menor contraste según el número de iteración correspondiente a la restauración, a mayor iteración mayor visibilidad del “marco” o contraste más definido.

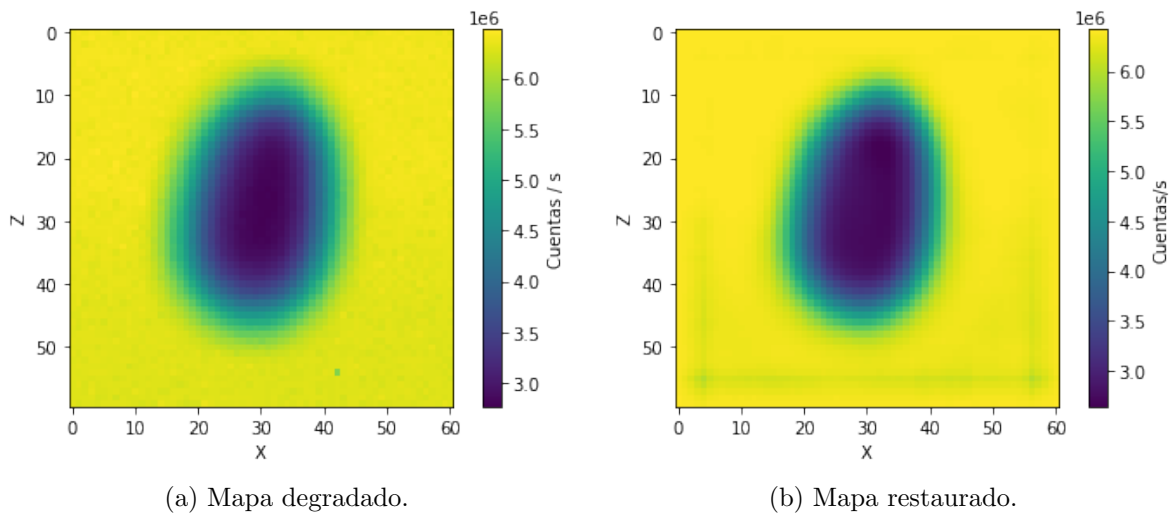


Figura 3.9: Mapa de transmisión restaurado.

La restauración no afectó únicamente en el nivel de desenfoque y ruido del mapa, sino también en los valores de los píxeles. Para observar este cambio se graficó el perfil de intensidad transmitida del mapa degradado y restaurado en la zona que corresponde al centro de la semilla, obteniendo.

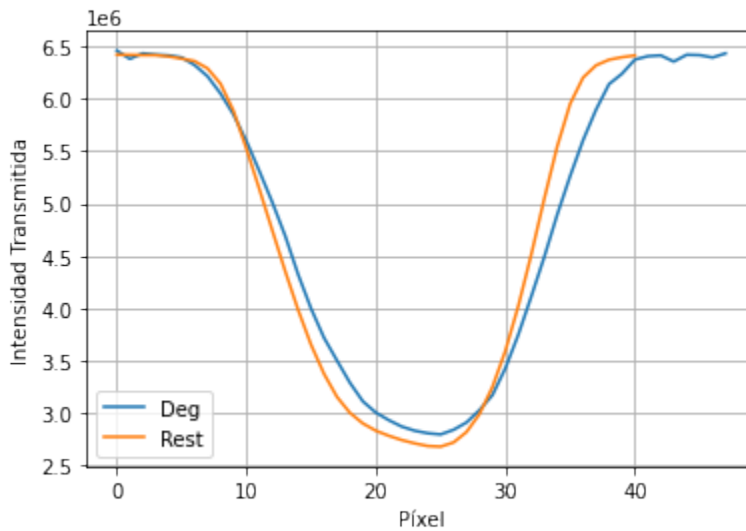


Figura 3.10: Intensidad transmitida en función de los píxeles que componen el eje central de la semilla para el mapa degradado y restaurado.

En el gráfico de la Fig. 3.10 se observa que la intensidad transmitida alcanza valores más bajos y cae de manera más pronunciada en el mapa restaurado, asimismo una mejor

definición de los bordes de la semilla se traduce en una disminución en sus dimensiones. Si se considera que la densidad electrónica y másica de la semilla es similar en todo su volumen, el perfil obtenido se puede asociar a la geometría de un elipsoide oblató. Para poder cuantificar cuanto cambian las dimensiones de la semilla antes y después de la deconvolución, se realizó un procesamiento en ambos mapas. El error en estas mediciones corresponde a la dimensión equivalente de un píxel (en este caso es la precisión con la que el motor del portamuestra mueve la muestra). Con el fin de poder discernir cuál de estas mediciones es más precisa, se hizo la medición de la semilla con la imagen de la Fig. 3.1 empleando el software ImageJ; lo que permitió comparar cuál de las dos dimensiones de los mapas, tiene un menor error porcentual con respecto a este último resultado.

Tabla 3.2: Dimensiones de la semilla.

| Imagen | Largo | Ancho |
|-----------------|-----------------------|-----------------------|
| Mapa Degradado | $(2,40 \pm 0,05)mm$ | $(1,45 \pm 0,05)mm$ |
| Mapa Restaurado | $(2,05 \pm 0,05)mm$ | $(1,35 \pm 0,05)mm$ |
| Fotografía | $(1,863 \pm 0,014)mm$ | $(1,225 \pm 0,028)mm$ |

La Tabla 3.2 indica que en la restauración las dimensiones de la semilla disminuyen (como se observó en la Fig. 3.9 y 3.10) en un 14,58 % en largo y un 6,90 % en ancho. Además, el menor error porcentual entre los resultados de la Tabla 3.2 corresponde con las mediciones del mapa restaurado, lo cual corrobora que la restauración del mapa mejora la resolución espacial y la calidad de los datos contenido en éste.

Tabla 3.3: Errores porcentuales con respecto a la medición de la semilla obtenida con ImageJ.

| Mapa | Largo | Ancho |
|------------|---------|---------|
| Degradado | 28,82 % | 18,37 % |
| Restaurado | 10,04 % | 10,20 % |

Los resultados de la Tabla 3.3 indican que tomar pasos de 0,05 mm con el portamuestras motorizado, no permite mejorar la resolución espacial del mapa con el proceso de deconvolución; ya que el error obtenido en la longitud del mapa restaurado es de 0,2 mm. Esto se debe probablemente a que el tamaño del píxel del detector es de 0,172 mm y el tamaño del haz incidente es de 0.5 mm. Por lo que, para mejorar la resolución espacial con la deconvolución, convino tomar los datos de un nuevo mapa con un paso más próximo a las dimensiones del píxel del detector.

Para la elaboración de un mapa de dispersión de dimensiones $M \times N$, se debe tener en cuenta que cada píxel esta asociado a un valor obtenido de un patrón de dispersión, el cual tiene un tiempo de adquisición de 1 minuto, esto implica que a menor paso del portamuestra

mayor orden $M \times N$ del mapa, mayor tiempo adquisición y menor probabilidad de mejorar la resolución espacial del mapa, cuando se deconvolucione. Así, en la segunda experiencia se cambió el paso del portamuestras motorizado a 0,167 mm.

Los resultados en esta primera experiencia fueron obtenidos con una muestra de dimensiones milimétricas; con lo cual se pudo considerar una densidad electrónica similar en todo su volumen.

3.2. Problema con dos densidades electrónicas diferentes.

En la segunda experiencia, se hidrató la semilla con la finalidad de producir un hinchamiento de los polisacáridos o mucílago (carbohidrato complejo de alto peso molecular y componente importante de la semilla en el área fisiológica [16]) en su superficie y propiciar la formación de una capa de hidrogel alrededor de la semilla.

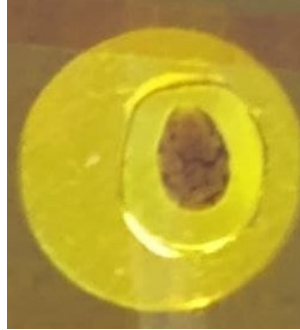
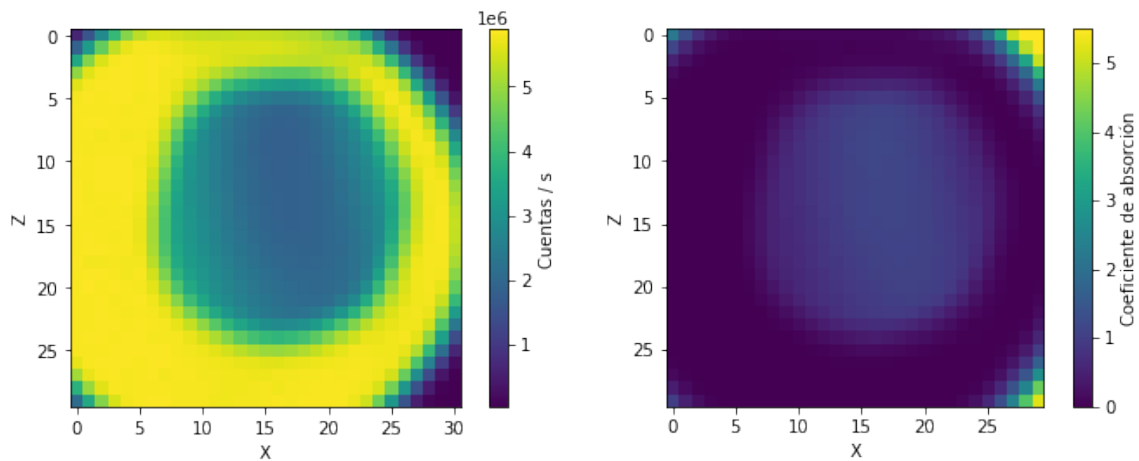


Figura 3.11: Semilla hidratada con la capa de hidrogel formada.

Una vez formado el hidrogel se procedió a realizar las mediciones. Los resultados se proporcionaron en dos archivos distintos, el primero contenía la información del mapa de transmisión y en el segundo la información del mapa de dispersión. Aplicando al primer archivo el mismo procedimiento que en la experiencia anterior, se obtuvieron los siguientes mapas de transmisión y absorción de la muestra.



(a) Mapa de transmisión.

(b) Mapa de absorción.

Figura 3.12: Mapas de transmisión y absorción de la semilla hidratada.

Se puede apreciar en ambos mapas de la Fig. 4.12 que la diferencia perceptible es poca o casi nula entre la capa de hidrogel y la semilla, es decir, ambas zonas son indistinguibles. Esto se debe a que el coeficiente de absorción μ no depende únicamente del espesor de la muestra, sino también de su composición (el número atómico Z). La capa de hidrogel que rodea a la semilla es un polímero hidratado mientras que, la semilla está constituida principalmente por compuestos orgánicos (carbono). Como la diferencia entre el número atómico Z del carbono y el oxígeno no es distinguible por rayos X, los mapas de transmisión y absorción no sirven para distinguir ambas zonas.

Ahora como, la dispersión es un fenómeno asociado a las inhomogeneidades a nivel nanométrico de la muestra, en un mapa de dispersión se pudo apreciar una mejor diferencia perceptible entre ambas zonas (hidrogel y semilla). Para elaborar el mapa de dispersión se analizaron 900 archivos, donde cada archivo es un punto, que contiene un patrón de dispersión asociado a un píxel del mapa de transmisión (Fig. 4.13). En cada punto se enmascararon las zonas muertas, es decir, aquellas zonas que no corresponden al patrón de dispersión (espaciado entre los detectores, y el beam stopper del instrumento).

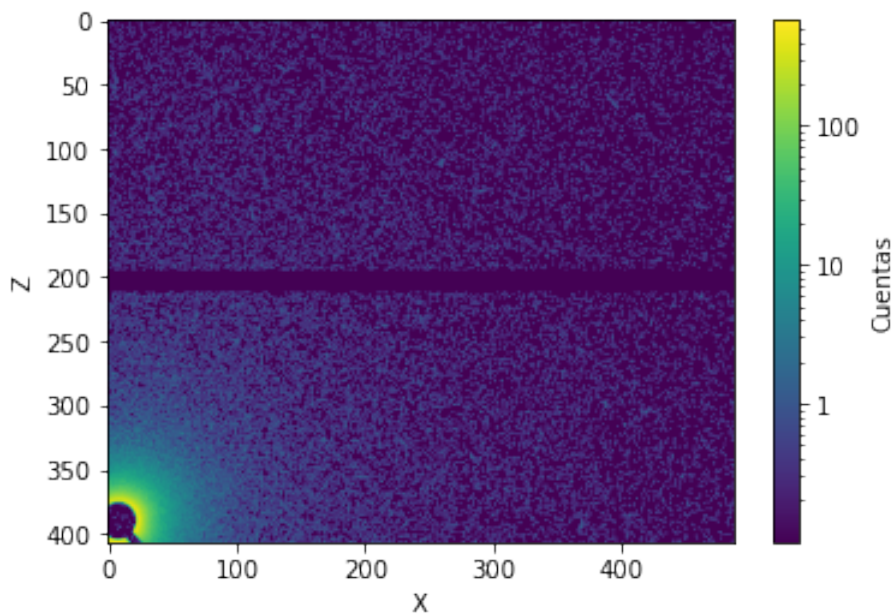


Figura 3.13: Patrón de dispersión asociado al píxel (18,20) del mapa de transmisión.

Una vez identificadas las zonas muertas (ver metodología), se hizo la suma de todos los píxeles en cada patrón de dispersión, obteniendo así el valor de la intensidad dispersada por cada píxel del mapa de transmisión. Luego, con estos valores se elaboró el mapa de dispersión. Donde se pudo diferenciar parte de la semilla, sin embargo sigue siendo indistinguible la capa del hidrogel (Fig. 4.14 (a)). Para mejorar la calidad del mapa se tomó un valor promedio a partir de un conjunto de valores, correspondientes a una matriz dentro del mapa, asociada a los píxeles de la fila 5 hasta la 20 y desde la columna 0 hasta la 5. Este valor es la intensidad

dispersada asociada al portamuestra (dispersión de fondo), posteriormente se restó este valor a cada píxel del mapa obteniendo la imagen de la Fig. 4.14 (b).

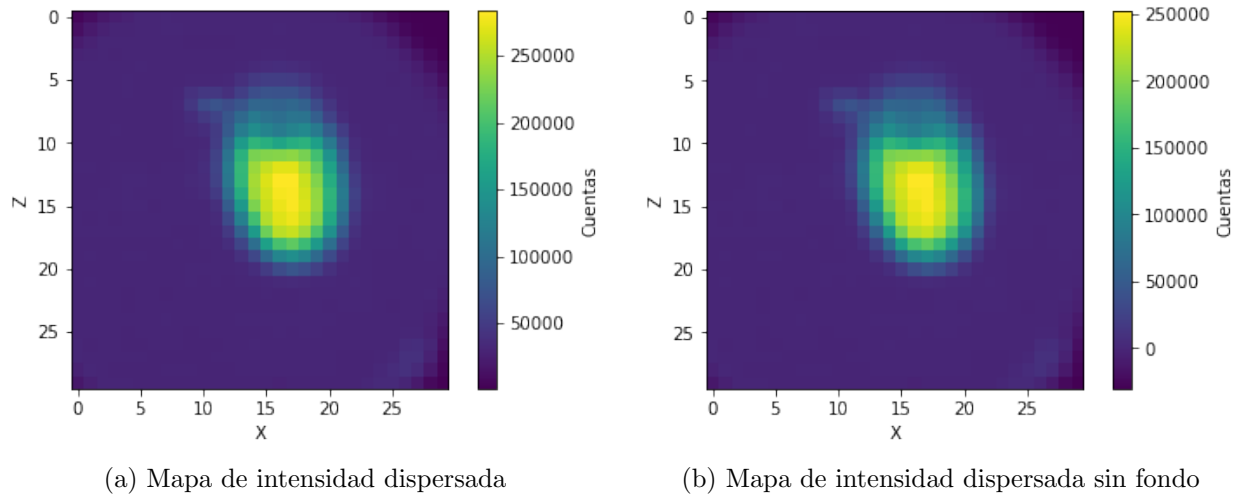


Figura 3.14: Mapa de intensidad dispersada.

Por último, se hace la división elemento a elemento del mapa de dispersión sin fondo con el mapa de transmisión (eliminando previamente la última columna del mapa de transmisión, para que ambos mapas sean del mismo orden), logrando quitar las inhomogeneidades asociadas al espesor de la muestra, obteniendo el mapa de dispersión normalizado (Fig. 4.15 (a)).

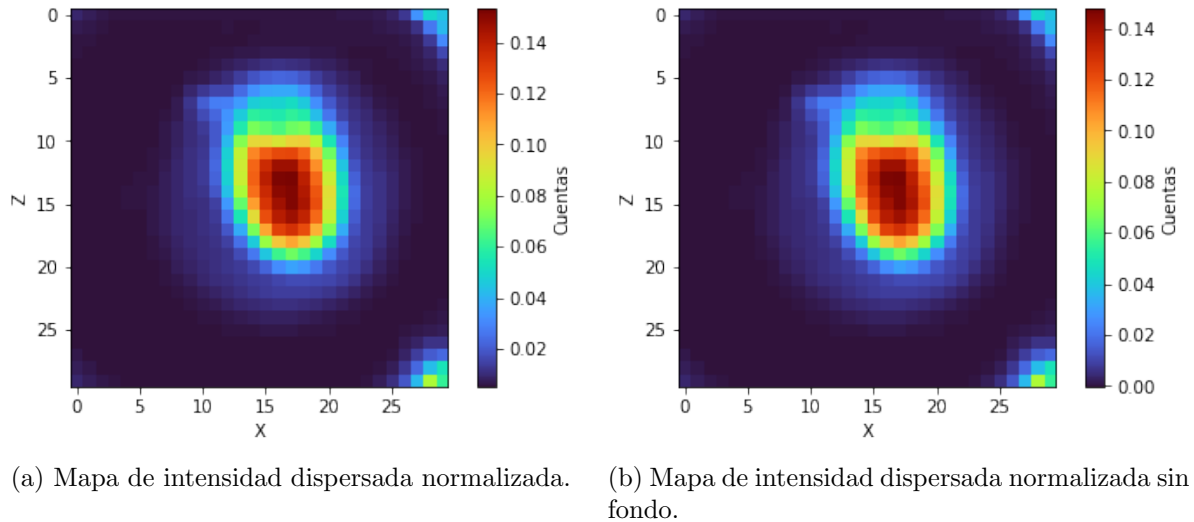


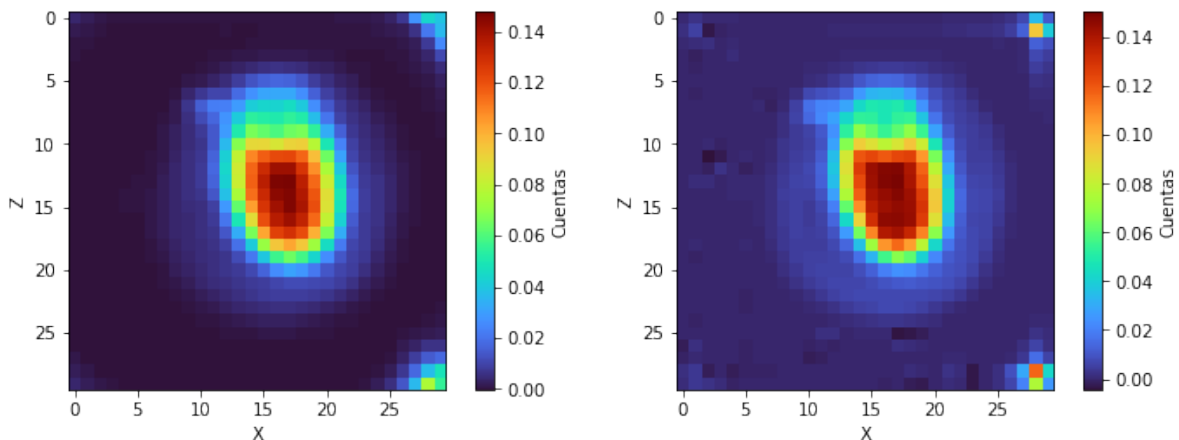
Figura 3.15: Mapa de intensidad dispersada normalizada.

Haciendo un procedimiento completamente análogo al empleado en la elaboración del mapa de dispersión sin fondo (Fig. 4.14 (b)) se mejoró la calidad del mapa de dispersión normalizada (Fig. 4.15 (b)), logrando distinguir en él, la capa del hidrogel con respecto a la semilla.

Cabe destacar que cada pixel de los mapas obtenidos en esta segunda experiencia representan dimensiones de $(0, 167 \times 0, 167)mm$ y para poder realizar el proceso de deconvolución los pixeles del núcleo y la imagen degradada (patrón de intensidad del haz y mapa de dispersión normalizada) deben representar las mismas dimensiones, por lo que, nuevamente se realizó una interpolación del mapa de la Fig. 4.4 (a) y posteriormente se redimensionó para representar la apertura física mínima del haz.

3.2.1. Deconvolución

Basados en los resultados de la deconvolución de la primera experiencia, se aplicó el método de R-L a el mapa de dispersión normalizada. Una vez realizada la restauración, se seleccionó el mapa restaurado correspondiente a la iteración 5.



(a) Mapa de intensidad dispersada normalizada. (b) Mapa de intensidad dispersada normalizada restaurado.

Figura 3.16: Restauración obtenida del mapa de dispersión normalizada.

En la restauración obtenida para el mapa de dispersión normalizada (Fig. 4.16 (b)), se puede notar un cambio en el rango de los valores que toman los pixeles con respecto al mapa degradado, desde el punto de vista del nivel desenfoque, hay un cambio ligeramente perceptible entre los bordes de la semilla, la capa del hidrogel y el fondo. Además, se puede apreciar la aparición de pixeles con valores negativos en la zona correspondiente al fondo de la muestra, posiblemente asociados a la magnificación del ruido dado por el método de restauración de R-L.

Cabe destacar que cada píxel del mapa de dispersión normalizada tiene asociado un patrón de dispersión y un patrón de difracción, de donde se puede extraer información estructural de la muestra en estudio. Esto implica que al restaurar el mapa de dispersión normalizada, se esta mejorando de manera subyacente la resolución espacial de los patrones asociados a él, lo que permite obtener información estructural de la muestra en ese píxel o punto con una mejor precisión y mayor peso estadístico.

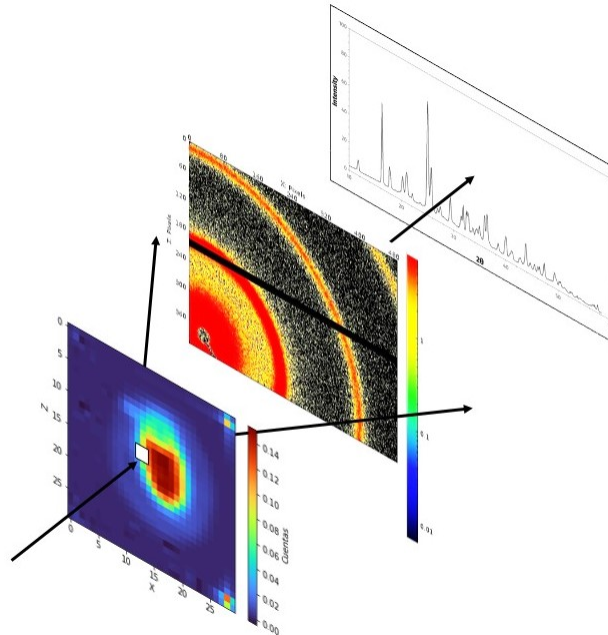


Figura 3.17: Información contenida en un mapa de dispersión normalizada.

Los patrones de dispersión/difracción de la Fig. 3.17 son a modo ilustrativo. Porque no corresponden a la muestra en sí.

Capítulo 4

Conclusiones y perspectivas

Al aplicar los métodos de restauración del filtro de Wiener y el método iterativo de Richardson-Lucy a los mapas de transmisión, absorción y dispersión de una semilla de chía obtenidos con el instrumento Xeuss 2.0 SAXS/WAXS de Xenocs del LCA de la UNSAM-Argentina, en dos experiencias distintas, haciendo uso de Python, se obtuvo información de cuyo análisis se dan las siguientes conclusiones.

- El método iterativo de Richardson-Lucy da una mejor restauración respecto al del filtro de Wiener, en los mapas bidimensionales obtenidos.
- Al restaurar el mapa de transmisión de la semilla de chía con el método de R-L se obtiene información de mejor calidad desde el punto de vista cualitativo (menor desenfoque y ruido en el mapa) y cuantitativo (menor error en la información que se puede extraer).
- Al lograr deconvolucionar la contribución del haz en los mapas, se está mejorando de manera subyacente la resolución espacial de los patrones asociados a él (dispersión y difracción), lo que permitirá obtener información estructural de la muestra con una mejor precisión y un mayor peso estadístico.
- Estos métodos de restauración fueron empleados sobre los mapas más sencillos (transmisión y dispersión total), y se propone ser aplicados a información contenida en cada píxel (análisis de características estructurales obtenidas de SAXS y WAXS).

Debido al corto tiempo en el desarrollo de este estudio, se propone como perspectiva para un trabajo futuro:

- Incluir en el análisis la información estructural obtenida en cada uno de los píxeles o puntos individuales del mapa de transmisión/dispersión restaurado (de la muestra en estudio), ya que contienen información estructural, permitiendo obtener nuevos mapas que ilustren la distribución de alguna característica específica (composición cristalina,

estructura, distribución de tamaños, orientación preferencial, etc). La principal aplicación es poder obtener datos estadísticos de la muestra en estudio y poder entender su propiedades estructurales de manera global. Por ejemplo, encontrar puntos de ruptura de un material polimérico analizando variaciones en la orientación preferencial de las cristalitas del material por inhomogeneidades en el proceso de cristalización.

Apéndice

Comparación entre el filtro Wiener y el método iterativo de Richardson-Lucy.

El siguiente ejemplo comparativo entre ambos métodos de restauración consiste en restaurar una imagen degradada (de un organismo biológico), adquirida mediante microscopía, conocida la función de dispersión de punto del sistema y la imagen original con rango de $[0,255]$. Para poder evaluar la calidad de la restauración se utilizó el error cuadrático medio (ECM), una métrica estadística que involucra dos propiedades importantes de un estimador, la varianza y el sesgo, cuyos valores deben ser lo mas pequeños posibles para que la imagen restaurada sea una buena aproximación a la imagen original. Como el método de R-L es iterativo, se elaboro una gráfica del ECM en función del número de iteraciones, considerando 3 casos de restauración diferentes, en todos los casos se comparo el valor del ECM de la imagen degrada con respecto a los métodos de restauración.

1^{er} Caso, restauración de la imagen degradada sin ruido (Fig.(2.19)(a)).

En este caso, el filtro Wiener da el menor valor del ECM, mientras que en el método iterativo de R-L el ECM va disminuyendo para restauraciones con mayor cantidad de iteraciones, tendiendo al valor obtenido por el filtro Wiener. Esto indica que para una imagen sin ruido y tomando como parámetro el ECM, el filtro Wiener proporciona una mejor restauración.

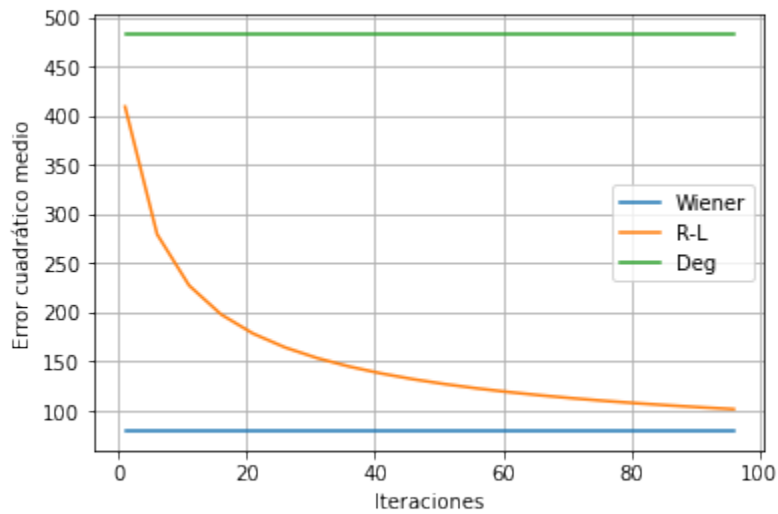
2^{do} Caso, restauración de la imagen degradada con presencia de ruido asociado a una distribución gaussiana con $\sigma = 10$ (Fig.(2.19)(b)).

Para el segundo caso, el comportamiento del ECM en la curva de R-L es similar al primer caso (disminuyendo a medida que aumentan las iteraciones) hasta llegar a un valor mínimo y luego mostrar una tendencia hacia su aumento. De la iteración 0 hasta aproximadamente la 25, el menor valor del ECM se obtiene del filtro Wiener, pero para restauraciones con mayores iteraciones, se obtiene un menor ECM con el método de R-L. Además, en el intervalo correspondiente a las iteraciones $[60,80]$ se alcanza un valor mínimo del ECM y luego tiende a aumentar. Esto indica que en presencia de ruido el método de R-L proporciona una mejor restauración a partir de un

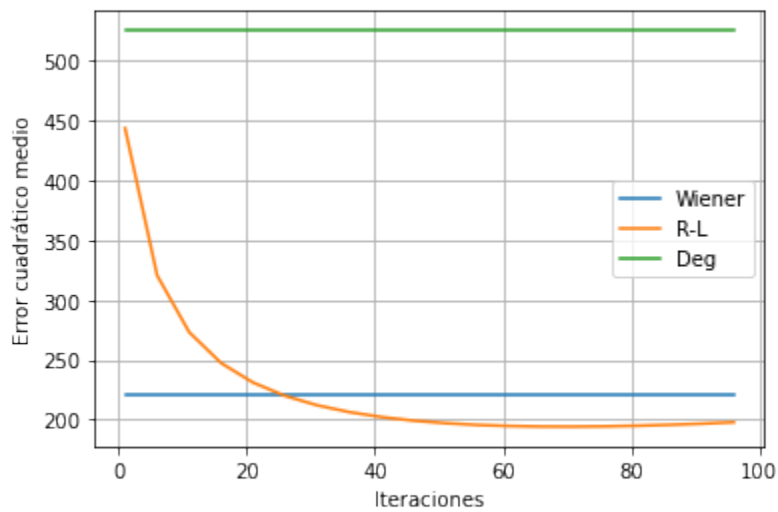
determinado intervalo de iteraciones hasta alcanzar una iteración “óptima” (asociada al valor mínimo del ECM).

3^{er} Caso, restauración de la imagen degradada con presencia de ruido asociado a una distribución gaussiana con $\sigma = 30$ (Fig.(2.19)(c)).

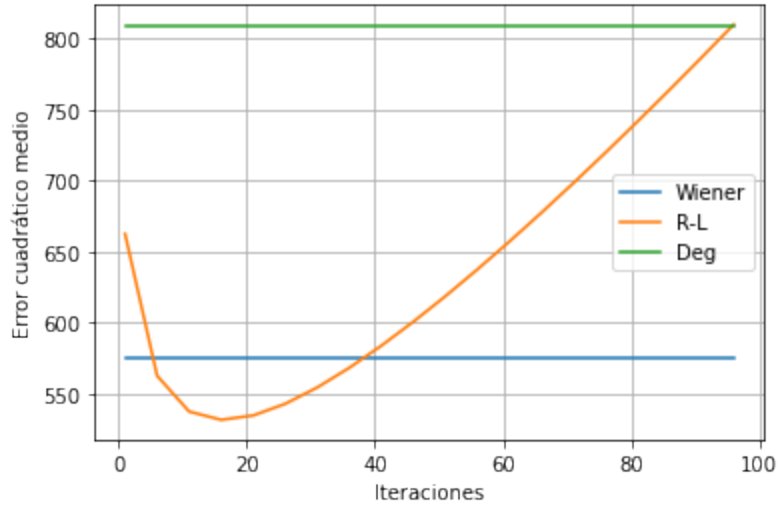
En este último caso, donde la magnitud del ruido en la imagen es mayor (valor de sigma), el método de R-L proporciona la mejor restauración asociada a una iteración “óptima” en el intervalo de [0,20]. Pero restauraciones mayores a este intervalo, aumentan significativamente el valor del ECM (magnificando el ruido en la imagen restaurada) mostrando una tendencia exponencial.



(a) 1^{er} Caso, ECM en función del número de iteraciones.



(b) 2^{do} Caso, ECM en función del número de iteraciones.



(c) 3^{er} Caso. ECM en función del número de iteraciones.

Figura 1: Gráficos correspondientes a los casos estudiados para la comparación del filtro Wiener y el Método de R-L.

Del análisis gráfico para los casos descritos anteriormente se puede concluir que:

- Del método iterativo de R-L se obtiene una mejor calidad en la restauración en función del ECM, cuando la imagen presenta diferentes niveles de ruido. La restauración óptima según este criterio está comprendida dentro de un intervalo de iteraciones, cuyo rango cambia según el proceso de degradación que haya sufrido la imagen a restaurar. Por otro lado, a mayor cantidad de iteraciones se corre el riesgo de que la imagen restaurada magnifique el ruido presente en ella, tornándose indistinguible y con un ECM mayor a la imagen degradada, como ocurrió en el tercer caso estudiado.
- El filtro de Wiener es una buena opción de restauración cuando el ruido presente en la imagen es bajo (gráfica del primer caso), además las restauraciones obtenidas con este método tienden a presentar distorsiones que dependen del tipo y nivel de ruido presentes en la imagen a restaurar, por lo que da menor confiabilidad en la restauración obtenida.
- Ambos métodos proveen una imagen de mejor calidad según el criterio del ECM que la imagen degradada a restaurar.

Bibliografía

- [1] H. Schnablegger and Y. Singh, “The saxs guide: Getting acquainted with the principles,” *Austria: Anton Paar GmbH*, pp. 1–124, 2011.
- [2] J. S. Pedersen, “Analysis of small-angle scattering data from colloids and polymer solutions: modeling and least-squares fitting,” *Advances in colloid and interface science*, vol. 70, pp. 171–210, 1997.
- [3] D. da Silva Costa, C. Huck-Iriart, G. Kellermann, L. J. Giovanetti, A. F. Craievich, and F. G. Requejo, “In situ study of the endotaxial growth of hexagonal TiO_2 nanoplatelets in $\text{Si}(001)$,” *Applied Physics Letters*, vol. 107, no. 22, p. 223101, 2015.
- [4] J. M. Montes-de Oca-Ávalos, D. Altamura, R. J. Candal, F. Scattarella, D. Siliqi, C. Giannini, and M. L. Herrera, “Relationship between nano/micro structure and physical properties of TiO_2 -sodium caseinate composite films,” *Food Research International*, vol. 105, pp. 129–139, 2018.
- [5] W. Alexander and C. M. Williams, *Digital Signal Processing: Principles, Algorithms and System Design*. Academic Press, 2016.
- [6] S. I. Kabanikhin, “Definitions and examples of inverse and ill-posed problems,” *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, vol. 16, no. 4, pp. 317–357, 2008.
- [7] R. Robles Arias, *Deconvolución de Imágenes Bajo Multirresolución*. PhD thesis, Departamento de Matemática Aplicada I, Universidad de Sevilla, 2003.
- [8] R. C. Gonzalez, R. E. Woods, *et al.*, “Digital image processing,” 2018.
- [9] F. Orieux, J.-F. Giovannelli, and T. Rodet, “Bayesian estimation of regularization and point spread function parameters for wiener–hunt deconvolution,” *JOSA A*, vol. 27, no. 7, pp. 1593–1607, 2010.
- [10] W. H. Richardson, “Bayesian-based iterative method of image restoration,” *JoSA*, vol. 62, no. 1, pp. 55–59, 1972.
- [11] L. B. Lucy, “An iterative technique for the rectification of observed distributions,” *The astronomical journal*, vol. 79, p. 745, 1974.

- [12] G. Van Rossum and F. L. Drake Jr, *Python tutorial*, vol. 620. Centrum voor Wiskunde en Informatica Amsterdam, 1995.
- [13] S. van der Walt, J. L. Schönberger, J. Nunez-Iglesias, F. Boulogne, J. D. Warner, N. Yager, E. Gouillart, T. Yu, and the scikit-image contributors, “scikit-image: image processing in Python,” *PeerJ*, vol. 2, p. e453, 6 2014.
- [14] N. Otsu, “A threshold selection method from gray-level histograms,” *IEEE transactions on systems, man, and cybernetics*, vol. 9, no. 1, pp. 62–66, 1979.
- [15] A. K. Boyat and B. K. Joshi, “A review paper: noise models in digital image processing,” *arXiv preprint arXiv:1505.03489*, 2015.
- [16] V. Ixtaina, M. Capitani, S. Nolasco, and M. Tomás, “Caracterización microestructural de la semilla y el mucílago de chia (salvia hispanica l.),” in *Proc. XXVIII Congreso Argentino de Química. Buenos Aires, Argentina: Asociación Química Argentina*, 2010.