



INAOE

Métodos numéricos de inversión en el problema de estimación de tamaño de partículas a partir de difracción de luz láser

Por

M.C. Javier Vargas Ubera

Tesis sometida como requisito parcial
para obtener el grado de:

**DOCTOR EN CIENCIAS EN LA
ESPECIALIDAD DE ÓPTICA**

En el

**Instituto Nacional de Astrofísica
Óptica y Electrónica**

Tonantzintla, Puebla, Enero de 2007

Supervisada por:

Dr. J. Félix Aguilar Valdez

y

Dr. David M. Gale Regan

© INAOE 2007.

Derechos Reservados.

El autor otorga al INAOE el permiso de reproducir y distribuir copias de esta tesis en su totalidad o en partes.



Resumen

Mediante simulaciones numéricas del esparcimiento de luz por partículas, se resuelve el problema inverso de recuperar una distribución de tamaño de partículas a partir de dos formalismos que describen este fenómeno físico: Teoría de Mie y aproximación de Fraunhofer. La primera corresponde al tratamiento riguroso del esparcimiento por partículas esféricas de tamaño micrométrico y sub micrométrico, para determinar la distribución angular con respecto a la dirección incidente; mientras que la segunda, representa una aproximación del fenómeno de esparcimiento correspondiente al caso de partículas esféricas opacas, con tamaño mayor que la longitud de onda de la luz que las analiza, la cual es difractada a ángulos pequeños en la dirección de propagación. Se utilizaron tres tipos de distribuciones monomodales, normal, gama y lognormal, frecuentemente usadas para modelar aerosoles. Las cuales, al introducirlas en la teoría de Mie o la aproximación de Fraunhofer, simulan mediciones experimentales de esparcimiento. A partir de estos datos, se recupera la función de distribución de tamaños de partícula mediante cuatro métodos de inversión: Chin-Shifrin, descomposición en valores singulares, el método de Phillips-Twomey y un algoritmo de estrategia evolutiva. Se discuten las ventajas y desventajas de cada método, mediante un análisis del rendimiento de cada algoritmo aunado al formalismo físico utilizado. Como criterio de exactitud en la distribución recuperada se propuso un valor fijo de la desviación estándar entre la distribución propuesta y la distribución recuperada.

Se determinó un valor umbral de tamaños a partir del cual es posible aplicar la aproximación de Fraunhofer con resultados aceptables. El valor umbral de validez en función del tipo de distribución y algoritmo de inversión, no habían sido verificados previamente. Asimismo, la exactitud y estabilidad de los métodos de Chin-Shifrin y descomposición en valores singulares no habían sido comparados en condiciones idénticas para la aproximación de Fraunhofer. En este análisis el método de descomposición en valores singulares reporta resultados superiores al de Chin-Shifrin.

En las recuperaciones con teoría de Mie se comparan el método de descomposición en valores singulares y el método de Phillips-Twomey. El análisis se realiza en rangos de tamaños por arriba y por abajo del valor umbral de validez de la aproximación de Fraunhofer. El método de Phillips-Twomey es bastante superior a la descomposición en valores singulares, siempre y cuando se utilicen valores óptimos del parámetro de regularización y del operador de suavizado en el método de Phillips-Twomey, los cuales son de importancia crucial en esta técnica de inversión y fueron elegidos mediante un procedimiento iterativo.

Bajo estas condiciones, una recuperación con la teoría de Mie y el método de Phillips-Twomey es bastante exacta, pero demanda tiempos de cómputo 4 órdenes de magnitud mayores que los utilizados con la aproximación de Fraunhofer.

El algoritmo basado en una estrategia evolutiva implementado con la aproximación de Fraunhofer, recupera una función de distribución de tamaños de partículas a partir de datos de esparcimiento generados con la teoría de Mie. Resultados numéricos muestran que en el régimen de validez de la aproximación de Fraunhofer, dicha técnica puede aplicarse exitosamente para resolver este tipo de problemas inversos mediante un proceso de optimización. Obtiene resultados más exactos que por ejemplo, el método de Chin-Shifrin y evita el uso de información *a priori* en lo referente al dominio de la distribución buscada. Asimismo, puede identificar la distribución correcta de entre los tres tipos de distribución presentados en este estudio.

Con el propósito de introducir ciertos problemas técnicos involucrados en la construcción y rendimiento de un instrumento de difracción láser, se reportan algunos resultados experimentales obtenidos durante el desarrollo de la presente tesis.

Abstract

By means of numerical simulations of light-scattering data, we solve the inverse problem to retrieve a particle size distribution from two formalisms that describe this physical phenomena: Mie theory and Fraunhofer approximation. The first theory corresponds to the rigorous treatment of the scattering by micro-metrical and sub-micro-metrical spherical particles, in order to determine the angular distribution with concerning to the incident direction; while the second theory, represents an asymptotic approximation to the Mie theory, when the particles are considered opaque with sizes greater than the wavelength of the light that surround it, diffracted to small angles in the propagation direction. It were consider three kinds of monomodal analytical distributions; normal, gamma, and lognormal, used frequently to model particle size distributions in aerosols. These are used in the Mie theory or in the Fraunhofer approximation to simulate experimental scattering measurements. From this synthesized intensity data we retrieve the particle size distributions by means of four inversion methods: Chin Shifrin, singular value decomposition, Phillips Twomey, and an algorithm based in an evolution strategy. The advantages and disadvantages of each method are discussed considering the performance together with the physical formalism used. As an accuracy criterion in the recovery, it was proposed a fixed value of the standard deviation between the proposed and the retrieved distributions.

A threshold size value was determined from which it is possible to apply the Fraunhofer approximation with acceptable results. The threshold value of validity in function of the type of distribution and inversion algorithm, have not been verified previously. Also, the accuracy and stability of the methods of Chin-Shifrin and singular value decomposition they have not previously been compared under identical conditions for the Fraunhofer approximation. In this analysis, the singular value decomposition method gives superior results to that of Chin-Shifrin.

The recoveries with Mie theory are compared to the singular value decomposition and the Phillips-Twomey methods. The analysis is carried out in ranges of sizes above and below the threshold value of validity of the Fraunhofer approximation. The Phillips-Twomey method is quite superior to the singular value decomposition method, but only if it uses optimal values for the regularización parameter and the smoothness operator. These values are of crucial importance in this inversion method and were chosen by means of an iterative procedure. Under these conditions, recovery with the Mie theory and the Phillips-Twomey method is quite exact, but demands computing times four orders of magnitude greater than that used with the Fraunhofer approximation.

The algorithm based on an evolutionary strategy is implemented together with the Fraunhofer approximation. It retrieves a particle size distribution from scattering data

generated with Mie theory. Numerical results show that in the regime of validity of the Fraunhofer approximation, the evolution strategy can be successfully applied to solve this kind of inverse problem by means of a optimization process, obtaining a more accurate solution than for example the Chin-Shifrin inversion method, and avoiding the use of *a priori* information concerning the dominium of the sought distribution, commonly necessary for reconstructing the particle size distribution when this analytical inversion method is used. Also, this method is able to identify the correct distribution from the three distribution types presented in this study.

With the purpose of introducing certain technical problems involved in the construction and performance of a laser diffraction instrument, some experimental results obtained during the development of the present thesis are reported.

Agradecimientos

- A los Drs. J. Félix Aguilar Valdéz y David M. Gale Regan por la supervisión del presente trabajo. Asimismo, la paciencia, confianza y apoyo brindados durante mi estancia en el INAOE.
- Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT), por haberme otorgado una beca para mis estudios doctorales.
- A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), el permiso por superación académica para realizar mis estudios doctorales.
- Al Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) por el préstamo del analizador de partículas Malvern y una beca complementaria para estudios doctorales durante dos años.
- Al Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica (INAOE) el apoyo institucional que recibí durante toda mi estancia en sus instalaciones.
- Al Dr. Sergio Vázquez y Montiel Coordinador de Óptica en el INAOE, por el apoyo institucional que recibí durante la última etapa de mis estudios doctorales. Asimismo, a su personal administrativo por todas sus atenciones.
- Al personal administrativo que labora en la Dirección de Formación Académica, por su amable y desinteresada atención, principalmente a Martha Olmos Flores.
- A Jorge Fernández Covarrubias, Ana María Zárate Rivera, Juan Fajardo González y Edgar Muñoz Palomino de quienes en sus respectivas áreas, siempre me atendieron con amabilidad y profesionalismo.
- A todos mis compañeros y profesores de la Coordinación de Óptica así como los de otras Coordinaciones por su orientación y amistad.
- A mis Padres, Hermanos y familiares políticos por su apoyo moral.
- Finalmente y de manera muy especial, agradezco a mi esposa Adriana, a mis hijos: Leonardo, Kevin, Javier y Mayra por todo el apoyo moral e incondicional que siempre me mostraron. Espero poder recompensarles algún día y con creces el tiempo que les robé a sus vidas.

Índice general

Resumen	I
Agradecimientos	V
1. Introducción	1
1.1. Esparcimiento aplicado a partículas	2
1.2. Técnicas para medir partículas	3
1.3. Principio típico de difracción láser	6
2. Fundamentos del Esparcimiento	9
2.1. Esparcimiento, absorción y extinción de luz	10
2.2. Parámetros importantes en el esparcimiento	11
2.3. Teorías para analizar partículas	14
2.3.1. Teoría de Mie	14
2.3.2. Difracción de Fraunhofer	17
2.4. Analizador típico de difracción láser	23
3. Métodos de Inversión	29
3.1. Funciones de distribución	30
3.2. Método de Chin Shifrin	32
3.2.1. Parámetros angulares de muestreo	33
3.3. Solución por cuadraturas numéricas	35
3.3.1. Método de descomposición en valores singulares	36
3.4. Método de Phillips Twomey	41
3.5. Método basado en una estrategia evolutiva	46
4. Resultados Numéricos	51
4.1. Convergencia numérica en la teoría de Mie	52
4.2. Comparación de patrones de intensidad	56
4.3. Validez de la aproximación de Fraunhofer	62

4.4.	Recuperaciones con teoría de Mie	67
4.4.1.	PT vs. DVS en partículas pequeñas	68
4.4.2.	PT vs. DVS en partículas intermedias	71
4.4.3.	PT vs. DVS en partículas grandes	74
4.4.4.	Rendimiento de γ en distribuciones de partículas pequeñas	75
4.4.5.	Rendimiento de γ en distribuciones de partículas grandes	79
4.5.	Parámetro y operador de regularización óptimos	81
4.6.	Mie y Fraunhofer para partículas grandes	86
4.6.1.	Fraunhofer con CS y DVS en partículas grandes	86
4.6.2.	Comparación entre Mie y Fraunhofer	88
5.	Resultados con un Algoritmo Basado en una Estrategia Evolutiva	91
5.1.	Función objetivo	91
5.2.	Distribuciones normales	93
5.3.	Robustez del algoritmo	95
6.	Algunos Resultados Experimentales	99
6.1.	Método de detección utilizado	99
6.2.	El láser y la lente colectora	102
6.3.	Mascarillas con aberturas circulares	103
6.4.	Repetibilidad	105
6.5.	Detectores de diámetro variable	111
6.6.	Trabajo futuro	114
7.	Conclusiones	115
	Bibliografía	119
	A. Publicaciones	123

Índice de figuras

1.1. Aproximación de esfera equivalente.	3
1.2. Principio de medición en la difracción láser.	7
2.1. Extinción de un haz de luz al atravesar un medio.	11
2.2. Geometría para la luz esparcida por una partícula esférica homogénea.	15
2.3. Intensidad relativa de Mie en una esfera homogénea.	16
2.4. Propagación del campo óptico incidente sobre una abertura circular.	18
2.5. Intensidad de Fraunhofer en una abertura circular.	20
2.6. Efecto de diferente λ en los máximos secundarios del patrón de intensidad.	21
2.7. Comparación entre teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer.	22
2.8. Arreglo óptico típico de difracción láser.	23
2.9. Parámetros que caracterizan el viñeteo en la lente colectora.	24
2.10. Detector utilizado por Malvern.	25
2.11. Configuración óptica inversa de un Mastersizer de Malvern.	26
3.1. Funciones de distribución típicas.	32
3.2. Distribución normal recuperada con CS para θ_{\max} y $\Delta\theta$ distintos.	34
3.3. Valores singulares típicos de una distribución normal.	39
3.4. Distribución normal recuperada erróneamente con el método de inversión DVS, eliminando valores singulares.	40
3.5. Distribución normal recuperada correctamente con el método de inversión DVS, eliminando valores singulares.	41
3.6. Intercambio entre las dos optimizaciones.	43
4.1. Convergencia para partículas pequeñas	53
4.2. Convergencia para partículas grandes	54
4.3. Convergencia inapropiada para el cálculo de intensidad debido a un número de series muy grande.	55
4.4. Distribuciones con partículas pequeñas.	56
4.5. Comparación de patrones de intensidad para partículas pequeñas.	57

4.6. Distribuciones con partículas intermedias.	58
4.7. Comparación de patrones de intensidad para partículas intermedias.	59
4.8. Distribuciones con partículas grandes.	60
4.9. Comparación de patrones de intensidad de partículas grandes.	61
4.10. Comparación entre CS y DVS en el intervalo crítico	64
4.11. Recuperación con DVS en un subintervalo crítico más fino.	66
4.12. PT vs. DVS en distribuciones normales pequeñas.	69
4.13. PT vs. DVS en distribuciones gama pequeñas.	70
4.14. PT vs. DVS en distribuciones lognormal pequeñas.	71
4.15. PT vs. DVS con teoría de Mie y distribuciones con tamaños intermedios.	72
4.16. Mie con PT y DVS vs. Fraunhofer con DVS en partículas intermedias.	73
4.17. DVS(5 v.s.)vs.PT($\gamma = 10^{-18}$) en distribuciones normales grandes.	75
4.18. Dependencia en γ para distribuciones normales de partículas pequeñas.	76
4.19. Dependencia en γ para distribuciones gama de partículas pequeñas.	77
4.20. Dependencia en γ para distribuciones lognormal pequeñas.	79
4.21. Dependencia en θ_{\max} y γ en la FDT de la Fig. 4.17(b).	80
4.22. Evolución de γ para un operador de suavizado de segundas diferencias.	83
4.23. Evolución de γ para tres operadores de suavizado.	84
4.24. Aproximación de Fraunhofer con CS y DVS en partículas grandes.	87
4.25. Comparación entre Mie y Fraunhofer para partículas grandes.	88
5.1. Comportamiento típico en la minimización de la función objetivo.	93
5.2. Comparación EE vs. CS en distribuciones normales con tamaños grandes e intermedios.	95
5.3. Robustez del algoritmo a partir del patrón de intensidad de distribuciones gama y lognormal.	96
6.1. Dimensiones del detector comercial reportadas en[40], comparadas con mediciones realizadas en este trabajo.	100
6.2. Esquema de detección utilizado en las mediciones experimentales del presente trabajo.	101
6.3. Potencia emitida durante 4 horas del haz láser colimado.	103
6.4. Mascarilla con 2000 aberturas circulares.	104
6.5. Simulaciones para la mascarilla con radio medio $a = 30\mu\text{m}$, y desviación estándar $\sigma = 2.5\mu\text{m}$	106
6.6. Resultados experimentales para la mascarilla con radio medio $a = 30\mu\text{m}$, y desviación estándar $\sigma = 2.5\mu\text{m}$	107
6.7. Repetibilidad en las mediciones con una mascarilla	108

6.8. Comparación entre la señal medida y el ruido de fondo para la misma mascarilla medida en diferentes días.	109
6.9. Fluctuaciones en el láser en cuatro mediciones distintas.	110
6.10. Muestreo con detectores de diverso grosor.	111
6.11. Recuperación experimental con detectores de grosor variable.	112
6.12. Mascarilla medida en un analizador Malvern con difracción de Fraunhofer.	113

Índice de tablas

3.1. Parámetros que generan las distribuciones de la Fig. 3.1.	31
4.1. Parámetros de forma de las distribuciones propuestas.	63
4.2. Parámetros de las recuperaciones PT vs. DVS en partículas pequeñas. . . .	69
4.3. Errores en las recuperaciones PT vs. DVS en distribuciones con tamaños intermedios.	73
4.4. Número de condición y el parámetro γ en distribuciones normales.	76
4.5. Número de condición y el parámetro γ en distribuciones gamma.	78
4.6. Número de condición y el parámetro γ en una distribución lognormal pequeña.	78
4.7. Errores con CS y DVS para las distribuciones recuperadas en la Fig. 4.24. . .	87
5.1. Errores de ajuste y recuperación para las distribuciones gama propuestas. . .	97
5.2. Errores de ajuste y recuperación para las distribuciones lognormal propuestas. .	98

Capítulo 1

Introducción

El estudio científico del esparcimiento de una onda electromagnética por un obstáculo inició con los experimentos sobre aerosoles por Tyndall en 1869. Posteriormente, en 1871 Rayleigh realiza un análisis teórico del esparcimiento de ondas electromagnéticas por cuerpos pequeños y Thompson en 1893 fue el primero en entender el papel de la radiación dipolar magnética[1]. Desde entonces, muchos trabajos han sido publicados sobre el tema debido a su importancia y potenciales aplicaciones. El esparcimiento difícilmente se restringe a la parte óptica del espectro, ya que sus leyes se aplican con igual validez a todas las longitudes de onda. Asimismo, su estudio es una actividad multidisciplinaria, debido a que se aplica en diversas áreas de campos y disciplinas científicas, tales como: Física, Meteorología, Astrofísica, Geofísica, Química, Biología, Medicina, etc.

Antes de continuar, mencionaremos las aclaraciones que Cabrera *et al.*[2] hacen en relación con la terminología usada en el idioma español para el esparcimiento, designado en la literatura inglesa como *scattering*, puesto que, desafortunadamente, no es única y resulta confusa. A veces se utiliza el término *dispersion*; esta denominación se usa en física de colisiones, tanto para el caso de partículas como para el caso de ondas, pero no se ha considerado esta palabra como la más adecuada para describir el fenómeno que nos ocupa. Al mismo tiempo, *dispersion* en óptica significa la variación del índice de refracción de la luz en un medio material en función de la longitud de onda. Por otro lado, a veces se usa la palabra *difusión*, pero también corresponde a otro fenómeno físico bien conocido (el humo de un cigarrillo se *difunde* a través del aire que lo rodea). Por lo anterior, se elige la palabra *esparcimiento* que, está de acuerdo con la denominación aceptada por la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales[3], la cual no induce a confusión.

Después de estas aclaraciones pertinentes, dirigimos nuestra atención al tema central de la tesis, el cual consiste en la estimación del tamaño de partículas por esparcimiento de luz láser.

1.1. Esparcimiento Aplicado a Partículas

La estimación del tamaño de partículas es una tarea crítica para el rendimiento de materias primas, productos intermedios y productos finales en una amplia gama de industrias y procesos. Asimismo, el concepto de Distribución de Tamaño de Partículas (DTP), es de gran utilidad en las ciencias básicas y aplicadas. El *esparcimiento de luz láser* como técnica óptica de diagnóstico de DTP's es la técnica más popular, debido a sus bien conocidas ventajas de ser robusta, no intrusiva, y relativamente rápida, respecto a otros métodos ópticos, mecánicos y eléctricos[4]. Desde hace poco más de 25 años existen instrumentos comerciales que funcionan bajo este principio físico[5]-[10]. Sin embargo, a medida que se diversifican las aplicaciones, surgen problemas inherentes y de carácter práctico que propician que el tema siga siendo sujeto de estudio. Algunos de dichos problemas son por ejemplo, el que los algoritmos de inversión para recuperar una DTP sean un problema matemático no terminado. Es decir, dependiendo del método de inversión utilizado, los resultados pueden diferir considerablemente, dejando al usuario final con una idea muy vaga de la confiabilidad con que se puede trabajar[11]-[27].

Es importante discutir el origen del análisis del tamaño de partículas. Primeramente, identificar cual es el problema básico a resolver y a continuación entender por qué diferentes técnicas producen diferentes resultados. Por lo tanto, la pregunta central es: **¿qué se entiende por una partícula?**. Para responder, imagine que se nos da una regla y una caja de cerillos y nos preguntan el tamaño de ésta última, rápidamente contestaríamos 20x10x5mm. No podríamos decir “la caja mide 20mm”; sería incorrecto debido a que sólo se trata de uno de sus lados. Así, no es posible describir una caja de cerillos tridimensional con una sola de sus longitudes. La situación se hace todavía más compleja para un objeto de forma irregular. Por lo tanto, el problema básico en el análisis del tamaño de partículas es: **¿cómo describir un objeto tridimensional con un solo número?**. La respuesta es describir el objeto con una esfera equivalente, debido a que si decimos que tenemos una esfera de $50\mu\text{m}$, este número la describe perfectamente a través de su diámetro. Similarmente para el peso de la caja de cerillos, éste se puede hacer equivalente al peso de una esfera de densidad ρ , dado por

$$\text{peso} = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho \quad (1.1)$$

y calcular un único número ($d = 2a$) para el diámetro de una esfera cuyo peso equivale al de la caja de cerillos. A lo anterior se le conoce como **la aproximación de esfera equivalente**[28], la cual asegura que no es necesario describir la partícula tridimensional que se quiere medir, con tres o más números, lo cual aunque es más exacto, no es conveniente para propósitos prácticos. Dicha aproximación representa el punto de partida de algunos instrumentos comerciales. La Fig. 1.1 intenta aclarar el concepto.

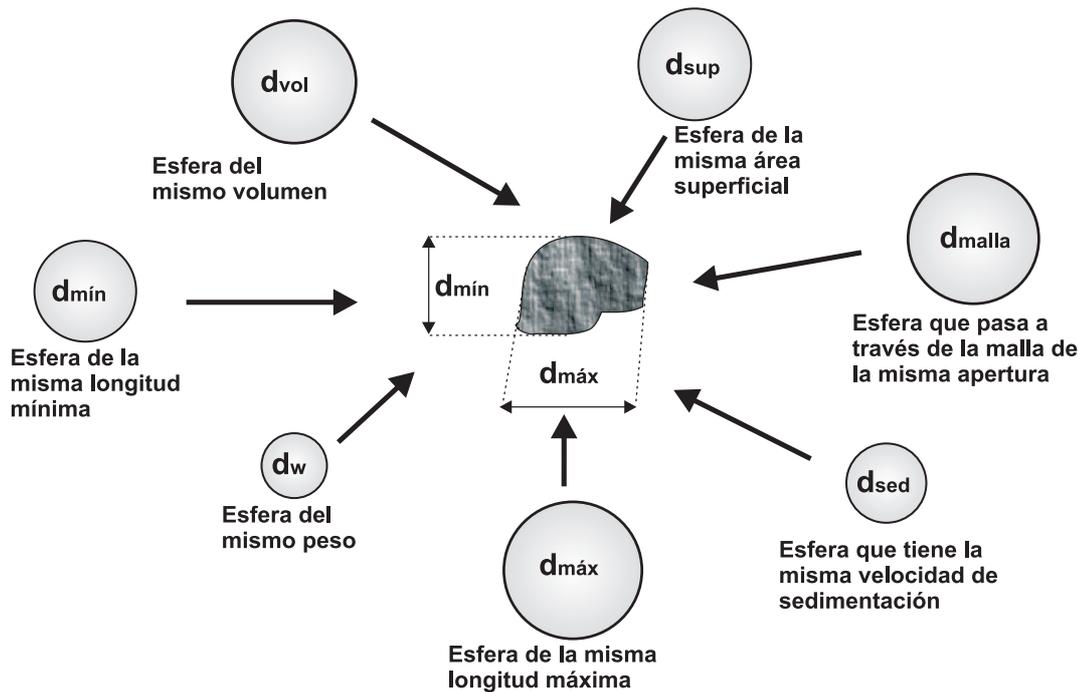


Figura 1.1: Aproximación de esfera equivalente.

Al estudiar una partícula de forma irregular con un microscopio, se observaría una proyección bidimensional de ésta, con cierto número de diámetros que se tendrían que medir para caracterizar dicha partícula (Fig. 1.1). Si se toma la máxima longitud de la partícula y se usa como una estimación del tamaño que se busca, entonces se estaría diciendo que la partícula es una esfera de esta dimensión máxima. Igualmente, si se usa la esfera de diámetro mínimo o alguna otra esfera equivalente, estas darán otra respuesta diferente para el tamaño de partícula que se intenta determinar. De esto se puede ver que cada técnica particular de caracterización de partículas medirá una propiedad diferente de éstas, máxima o mínima longitud, volumen, área superficial, razón de sedimentación, etc. Así, se tendrán resultados diferentes entre una técnica y otra para una misma partícula. Por lo tanto, cada técnica es correcta, sólo que mide una propiedad diferente de la partícula. Esta es la razón por la que los estándares de calibración siempre deben ser esféricos si se pretende comparar dos o más técnicas. A continuación se enuncian algunas de las técnicas más representativas utilizadas en algunos procesos industriales principalmente.

1.2. Técnicas para Medir Partículas

Entre los métodos de medición que no son de naturaleza óptica se tienen:

Mallas. Es un método viejo pero bastante barato[28]. Esta técnica se usa para partículas que van de 125mm a 38 μm , aproximadamente, y se usa comúnmente en la industria del cemento, la minería y algunas aplicaciones para procesar alimentos. Usando esta técnica no es posible medir aerosoles o emulsiones, así como, polvos secos menores a 38 μm . Materiales cohesivos y aglomerados, tales como arcillas, también son muy difíciles de medir. Dicha técnica produce resultados inciertos en materiales de forma alargada como el paracetamol y algunos otros; por lo que, generalmente se considera como una técnica de baja resolución que genera distribuciones de peso.

Sedimentación. Basada en la ley de Stokes[28], relaciona la velocidad de sedimentación de una partícula inmersa en un líquido por lo que genera una medida de tamaño de una esfera con la misma tasa de sedimentación. Es el método tradicional en la industria de pinturas y cerámicas. Usa equipo tan simple como la pipeta Andreasen, la cual recoge muestras de suspensión a diferentes alturas y diferentes tiempos para medir la concentración de partículas que se relaciona con un tamaño característico de partícula. También usa equipo más sofisticado como centrífugas y rayos X, de estos últimos, a través de su emisión se puede determinar la concentración. Por lo tanto, como la densidad del material es un parámetro imprescindible, no es una técnica recomendable para emulsiones, donde el material no se sedimenta o en materiales muy densos que fácilmente se sedimentan. La temperatura también es un factor determinante para controlar la viscosidad, debido a que cambios de 1°C producen un cambio del 2% en la viscosidad. Otra desventaja es la lentitud del análisis, la cual para mediciones repetidas se vuelve demasiado tedioso. Partículas de forma irregular, tales como el caolín, que tiene forma de discos deformados, le toma mucho tiempo sedimentarse debido a su forma plana en comparación con una esfera. Dicha técnica tiene un rango limitado, particularmente hay dificultades con partículas menores a 2 μm y con las que son mayores a 50 μm .

Sensado de electrozonas. Esta técnica originalmente fue desarrollada a mitad de los 1950´s para medir células en la sangre[28] las cuales son suspensiones monomodales diluidas en un electrolito. Para materiales industriales presenta muchos inconvenientes. Es difícil medir emulsiones, imposible medir aerosoles y para polvos secos requieren suspensión. Las mediciones se realizan en un electrolito, el cual crea dificultades para materiales orgánicos y, se requiere de estándares de calibración que son caros y cambian de tamaño al diluirse en agua destilada o un electrolito. Esta técnica es lenta para materiales de tamaño relativamente grande y no es fácil medir partículas menores a 2 μm . Partículas porosas y materiales densos poseen problemas adicionales.

Dentro de los métodos ópticos, existen varias técnicas de análisis de tamaño de partículas. Mencionaremos brevemente sus características, así como las ventajas y desventajas de algunos de ellos:

Método fotográfico. Es una técnica exacta y confiable que consiste en enviar un pulso corto de luz para congelar la imagen de la partícula y medir directamente de ésta su tamaño[29]. La velocidad de la partícula también puede medirse usando fotografías de doble flash. Se cuentan un gran número de partículas para obtener una muestra estadísticamente representativa. Por lo que, esta forma de análisis es tediosa, y está sujeta a la fatiga del operador. Alcanza una resolución hasta de $5\mu\text{m}$ y también puede analizar la forma de la partícula.

Método holográfico. Esta técnica proporciona la ventaja de poder analizar partículas en tres dimensiones[29]. Consiste en un grabado que almacena toda la información óptica coherente que ha pasado a través o ha sido reflejada del volumen de muestra. Posteriormente es proyectada sobre una placa holográfica. Cuando el holograma es procesado e iluminado con el haz de referencia, una imagen tridimensional de la partícula es reconstruida en el espacio, la cual está disponible para su estudio. Adicionalmente tiene la ventaja de que cuando se desea examinar partículas individuales dentro de un sistema, se obtiene una imagen instantánea de todo el volumen. El grabado del holograma es realizado en unos cuantos segundos pero la reducción de los datos es tediosa y lenta.

Contadores de partículas. Esta técnica cuenta partículas individuales que pasan a través de un volumen de pruebas pequeño. Su resolución llega hasta $0.3\mu\text{m}$ y puede medir también su velocidad. Esencialmente consisten de un láser que se enfoca hacia el volumen de pruebas, el cual es una región del espacio en que una sola partícula al pasar, puede generar una señal suficiente para que sea discriminada del ruido de fondo. La interacción de la partícula con el haz incidente es captada por un detector colocado a un cierto ángulo respecto a la dirección de propagación del haz. Algunas de las diversas aproximaciones utilizadas en contadores de partículas son. *Mediciones de la sección transversal de esparcimiento y técnicas Doppler e interferométricas*[29].

Microscopía. Esta es una técnica excelente[28] que permite un examen directo de las partículas a analizar y relativamente barata, normalmente se miden los diámetros con una grátula, se suman y se dividen por el número de partículas para dar un valor medio en número. Sin embargo, no es conveniente como técnica de control de calidad y de la producción, su utilidad no va más allá de un simple juez. También, debido a que sólo unas cuantas partículas son analizadas, existe un peligro real de que el muestreo no sea representativo. Esto en el caso particular de distribuciones de peso, puede generar resultados erróneos, debido a que ignorar una partícula de $10\mu\text{m}$, equivale a ignorar 1000 partículas de $1\mu\text{m}$. El National Bureau of Standards (NBS) recomienda que un mínimo de 10,000 imágenes (no partículas!) deben ser examinadas para validez estadística[30]. La preparación de muestras para microscopía electrónica es laboriosa y lenta, así que, un solo operador puede analizar únicamente unas pocas muestras antes de la fatiga.

Técnicas de ensemble para muchas partículas. Estas técnicas involucran un análisis de la luz esparcida o extinguida por un número grande de partículas[31]. Contiene menos información que las técnicas de imágenes y de conteo de partículas, además de que la velocidad de las partículas no es posible medirla. Sin embargo, cuando lo que nos interesa son los tamaños promedio, estas técnicas son las idóneas. Para partículas esféricas homogéneas se cuenta con tres formalismos[31]:

La aproximación de Rayleigh. Válida para partículas de diámetros mucho menores que la longitud de onda.

La teoría de Mie. Resuelve de manera exacta y rigurosa el caso general para partículas esféricas, depende del índice de refracción de las partículas respecto al medio circundante, y es válida para partículas del orden de la longitud de onda o mayores. Sin embargo, el precio que hay que pagar por su solución rigurosa esta en la dificultad matemática y numérica que representa la solución del problema inverso.

La difracción de Fraunhofer o difracción láser. Únicamente es válida para partículas de diámetro varias veces mayores que la longitud de onda, debido a que es una aproximación asintótica a la teoría exacta de Mie. Su dependencia con el índice de refracción relativo entre las partículas y el medio que las contiene, se reduce a exigir que la razón entre ambos índices sea diferente de la unidad. Dicha aproximación por mucho tiempo ha sido y continúa siendo el fundamento teórico de diversos instrumentos comerciales[5]-[10].

1.3. Principio Típico de Difracción Láser

Cuando un conjunto de partículas pasa a través de un haz de luz, hace que este último sea esparcido en muchas direcciones. En la dirección de propagación del haz, la luz se esparce a un ángulo pequeño inversamente proporcional al tamaño de cada partícula. Por lo que partículas chicas tienen un ángulo grande de esparcimiento, mientras que las partículas grandes esparcen luz a ángulos menores (ver Fig. 1.2). La luz esparcida es colectada por una lente transformadora de Fourier, que la envía a un detector colocado en el plano focal de la lente para ser “interrogada”. Las partículas del mismo tamaño, esparcen luz a una misma región anular, que posee simetría circular alrededor del eje óptico sobre el plano focal de la lente. Por lo tanto, la intensidad total que llega a una región anular particular, mayoritariamente es la contribución de todas las partículas presentes de un mismo tamaño, ya que las de tamaños diferentes, contribuyen poco a esa región en particular.

La luz esparcida por una sola de las partículas continuará cayendo sobre la misma región espacial del detector, tanto tiempo como la partícula permanezca dentro el haz, es decir, el patrón de esparcimiento es estático. Dicho en otros términos, la contribución al

esparcimiento total por una sola partícula es “encendida” tan pronto como entra al haz y es “apagada” tan pronto y sale del haz. Debido a esta transformación óptica instantánea de los datos de luz esparcida, un conjunto de partículas puede moverse a muy altas velocidades por todo el haz y estar correctamente caracterizadas sin importar su velocidad. Esta es la razón por la que en particular, la difracción láser, es muy conveniente en medidas de aerosoles y partículas que se mueven a velocidades altas en procesos de combustión y túneles de viento. Asimismo, podemos decir que la lente de Fourier es el dispositivo que le permite a la difracción láser trabajar como una técnica de análisis de tamaño de partículas[7].

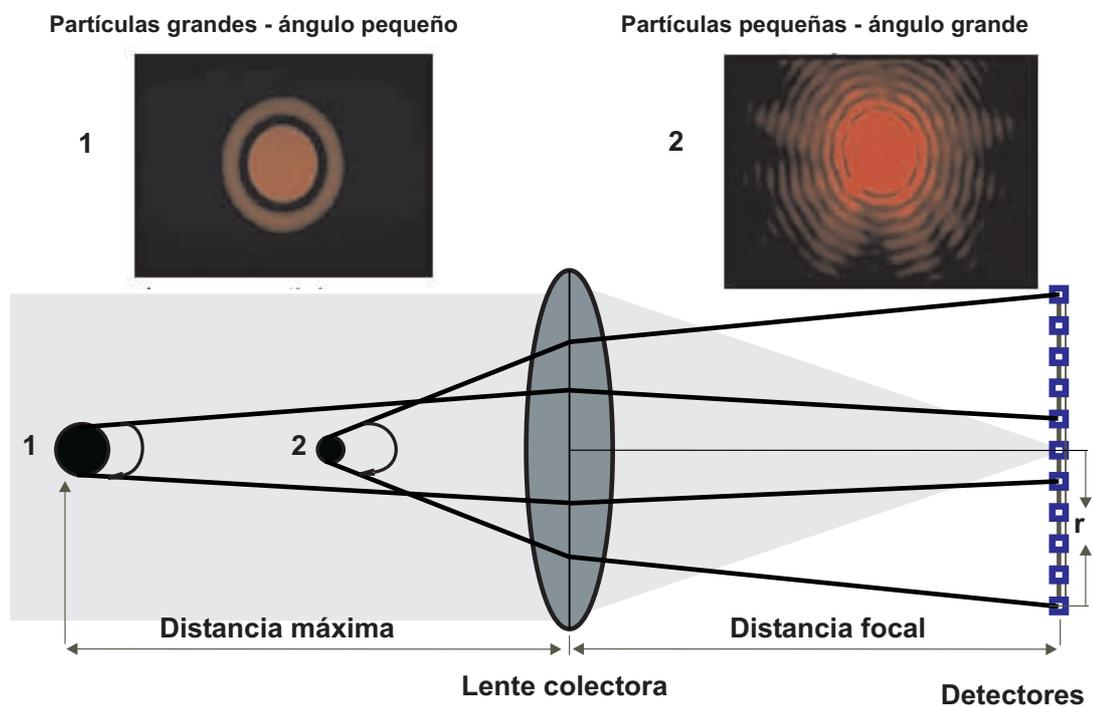


Figura 1.2: Principio de medición en la difracción láser.

Colocando elementos detectores en las posiciones espaciales correspondientes a los ángulos de esparcimiento apropiados, en el plano focal de la lente si se trata de difracción láser, y en cualquier otra posición si se trata del caso más general tratado con teoría de Mie, es posible sumar las contribuciones al esparcimiento por los diferentes tamaños de partículas presentes en el ensemble y deconvolucionar estos datos para recuperar la DTP.

El cálculo de la DTP a partir de medidas de la distribución angular de luz esparcida, pertenece a la clase de problemas conocidos como *problemas inversos*, los cuales pueden resolverse generalmente por soluciones directas de transformadas integrales o usando cuadraturas numéricas de la ecuación integral que los gobierna. Generalmente

un problema inverso es un problema *mal condicionado*, lo cual no significa que existan errores en su deducción matemática, sino que la solución es extremadamente sensible a errores de medición infinitesimales y redondeo computacional. Por lo tanto, su solución exacta es altamente compleja, debido a dicha inestabilidad numérica. Es decir, una pequeña perturbación en los datos del patrón angular de luz esparcida medida, da lugar a una perturbación arbitrariamente grande en la DTP recuperada[23].

El objetivo principal del presente trabajo fue estudiar la metodología involucrada en la estimación de una DTP por esparcimiento de luz láser, realizar comparaciones teóricas de las DTP recuperadas con algoritmos de inversión afines a la teoría de Mie y la teoría escalar de difracción.

En el capítulo 2, se presenta el marco teórico con generalidades importantes para la discusión posterior. En el capítulo 3 se introducen las técnicas numéricas de inversión: el método de Chin Shifrin (CS), el método de Descomposición en Valores Singulares (SVD), el método de Phillips Twomey (PT) y el algoritmo basado en la estrategia evolutiva (EE). En el capítulo 4 se presentan resultados numéricos referentes al intervalo de tamaño crítico que define la aplicabilidad de la aproximación de Fraunhofer, con los métodos de inversión CS y SVD. Asimismo, se discuten resultados numéricos con los métodos SVD y PT con teoría de Mie, para mostrar los parámetros que afectan el rendimiento del método PT. También se realiza una comparación entre la teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer para partículas grandes y con sus respectivos métodos de inversión. En el capítulo 5 se presentan resultados con la estrategia evolutiva únicamente para la aproximación de Fraunhofer. Dichos resultados se comparan con los que se obtienen aplicando el método CS. En el capítulo 6 se presentan las conclusiones generales de esta tesis.

Capítulo 2

Fundamentos del Esparcimiento

Cualquier objeto material está constituido por cargas eléctricas, las cuales se ponen en movimiento al ser excitadas por el campo variable de una onda electromagnética incidente. Obviamente, la energía que transporta dicha onda disminuye en una cantidad igual a la que adquieren las cargas en su movimiento. Desde el punto de vista cuántico, esta disminución de energía significa un menor número de fotones en la onda una vez que ha superado el objeto, exactamente el mismo número que ha sido absorbido[2]. Mucha de la luz que vemos, llega a nuestros ojos en una forma indirecta. Al observar un árbol o un lago, lo que en realidad observamos es la luz del sol que ha sido reflejada difusamente; un semáforo no nos envía luz directamente de su filamento luminoso, sino que, usualmente muestra sólo la luz que ha sido esparcida por un bulbo de vidrio. Igualmente, una hoja de un árbol se ve verde debido a que esparce luz verde más efectivamente que la luz roja, por ejemplo. La luz roja (y alguna otra frecuencia) incidente sobre la hoja es absorbida, lo que significa que dicha radiación se convierte en alguna otra forma de energía.

La energía obtenida por las cargas (refiriéndose al párrafo anterior) que han sido excitadas puede dar origen a dos procesos diferentes. Por el proceso llamado **Esparcimiento**, las cargas reemiten esa energía en forma de radiación electromagnética en direcciones diferentes de la que lleva la onda incidente[2]. Estas son las ondas *esparcidas* por el objeto a partir de la onda incidente. En términos corpusculares, dicho proceso, tal como se ha definido, incluye colisiones tanto elásticas como inelásticas entre los fotones incidentes y el medio, como la aniquilación del fotón y creación subsiguiente de otro (*fluorescencia* y *fosforescencia*). En las colisiones elásticas no cambia la frecuencia de la radiación (*esparcimiento Rayleigh*), mientras que en las inelásticas el cambio de frecuencia se debe a que el estado final del objeto no coincide con el inicial (*esparcimiento Raman* y *Brillouin*). Por el proceso llamado **absorción**, la energía de la onda se transforma en energía potencial dentro del objeto y finalmente se disipa en forma de agitación térmica o calentamiento del mismo. En última instancia, la energía disipada también es reemitida en

forma de radiación térmica durante el proceso de enfriamiento del objeto, pero por el retardo con que aparece y por poseer una frecuencia tan diferente de la onda incidente, es más adecuado el nombre de absorción[2]. En general el esparcimiento y la absorción ocurren simultáneamente, aunque en ciertos casos puede predominar uno sobre otro. A continuación describiremos estas ideas básicas con cierto detalle.

2.1. Esparcimiento, Absorción y Extinción de Luz

Para designar la pérdida global de intensidad de un haz de luz incidente que interacciona con un medio que contiene una colección de partículas materiales, se utiliza el vocablo *extinción*, es decir, el haz incidente es atenuado. Esta atenuación por tanto, engloba las pérdidas energéticas debidas al esparcimiento y la absorción (la cual se manifiesta en una disipación de calor)[2]. Entonces,

$$\text{extinción} = \text{esparcimiento} + \text{absorción}.$$

Tenemos que enunciar las diferentes limitaciones que existen debido a los varios tipos de esparcimiento que pueden presentarse. La clasificación se hace en términos del tipo de interacción que se da entre la radiación incidente y el medio que esparce[31].

- Esparcimiento Inelástico: la frecuencia de la radiación cambia, y dicho cambio se debe a que el estado final de las partículas o todo el medio no coincide con el inicial. Ejemplos de este tipo de esparcimiento son *esparcimiento Raman, de Brillouin, fluorescencia, fosforescencia, o cualquier transición cuántica*.
- Esparcimiento Elástico: la frecuencia de la radiación no cambia, también se le conoce como esparcimiento coherente.
- Esparcimiento Dependiente: esencialmente se presenta cuando las partículas que esparcen están muy cerca unas de otras, de tal forma que las fases de sus ondas individuales esparcidas están correlacionadas. Es decir, la onda esparcida por una partícula depende de las ondas esparcidas por las partículas circundantes. Por lo que en este caso, es imperativo considerar las relaciones de fase entre ondas esparcidas por las partículas vecinas.
- Esparcimiento Independiente: todo lo contrario al anterior. Es decir, las partículas están lo suficientemente lejos entre sí, tal que es posible considerar la onda esparcida por una de las partículas sin hacer referencia a las demás, lo cual implica que no hay una relación sistemática de fase entre ellas. Se ha mostrado que una separación de 3 veces el radio de las partículas es suficiente para la consideración de independencia[31].

- **Esparcimiento Simple:** En un medio que contiene M partículas que esparcen luz, la intensidad esparcida por todo el medio es la suma incoherente de la intensidad esparcida por cada una de ellas y, la energía total removida del haz incidente es la suma de la energía individual que remueve cada una de las partículas. Esta relación de proporcionalidad es válida sólo si la radiación a la que se expone cada partícula es esencialmente la del haz original incidente.
- **Esparcimiento Múltiple:** cuando cada partícula aparte de estar expuesta a la radiación del haz incidente, recibe una contribución fuerte de la radiación esparcida por las otras partículas. En este caso, la proporcionalidad simple entre intensidades no es válida[31].

En la presente tesis únicamente se considera, esparcimiento simple, independiente y elástico.

2.2. Parámetros Importantes en el Esparcimiento

En esta sección se introducen los parámetros macroscópicos y microscópicos involucrados en la extinción de luz por partículas. Se considera un haz colimado de intensidad I_0 que incide sobre un tubo de longitud L , con paredes transparentes y sección perpendicular T , lleno de humo como se muestra en la Fig. 2.1.

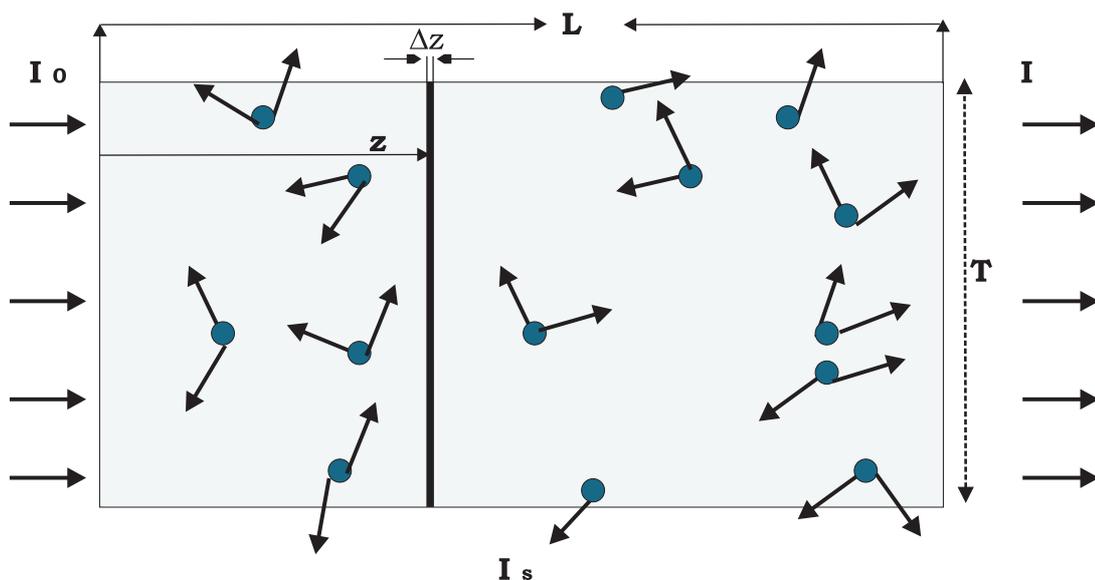


Figura 2.1: Extinción de un haz de luz al atravesar un medio.

Si el tubo estuviera vacío, el haz continuaría hacia adelante sin ser perturbado en la dirección de incidencia, de modo que un detector puesto en su camino mediría dicha intensidad I_0 . Cuando el humo obstaculiza el camino del haz, dicho detector mediría una intensidad $I < I_0$, y la extinción estará definida por la intensidad $I_0 - I$. Así, la intensidad extinguida en una rodaja del tubo de grosor dz situada a la distancia z de la primera cara, será proporcional a dz y a la intensidad $I(z)$ incidente sobre la rodaja considerada. Por lo tanto,

$$dI = -\alpha_e I dz, \quad (2.1)$$

donde la constante de proporcionalidad α_e es un parámetro macroscópico, característico del medio material, llamado *coeficiente de extinción*. Por lo que, α_e se interpreta como una medida de la pérdida relativa de intensidad por unidad de longitud, y sus unidades son m^{-1} . El signo negativo refleja el hecho de que un aumento de z (dz positivo) implica una disminución de I (dI negativo). De acuerdo con los planteamientos de la sección anterior, α_e constará de dos términos

$$\alpha_e = \alpha_a + \alpha_s, \quad (2.2)$$

donde α_a y α_s son los coeficientes de absorción y esparcimiento, respectivamente. Si el medio es homogéneo, estos coeficientes son constantes, por lo que al integrar dI a lo largo de la longitud del tubo, obtenemos una caída exponencial en la intensidad dada por

$$I = I_0 \exp [-(\alpha_a + \alpha_s)L]. \quad (2.3)$$

Desde un punto de vista microscópico, es adecuado hablar de la potencia total P que cada partícula individual extrae del haz incidente, es decir, se tendrá

$$P = \sigma_e I, \quad (2.4)$$

donde la constante σ_e es un parámetro microscópico, característico de la partícula, llamado *sección eficaz de extinción*. Por lo tanto, σ_e , tiene dimensiones de superficie (m^2) y es una medida de la superficie de la partícula, perpendicular al haz incidente, que resulta eficaz para extraer energía del mismo. De nuevo, σ_e , constará de dos términos

$$\sigma_e = \sigma_a + \sigma_s, \quad (2.5)$$

siendo σ_a y σ_s las secciones eficaces de absorción y esparcimiento, respectivamente.

Como el parámetro macroscópico α_e engloba todos los procesos microscópicos representados por σ_e , ambos parámetros guardan una estrecha relación que puede obtenerse de manera sencilla, para el caso de medios diluidos como el mostrado en la Fig. 2.1. Si suponemos que el humo tiene una densidad N de partículas microscópicas por unidad de

volumen, y que esta densidad es lo suficientemente baja como para que se puedan despreciar interacciones mutuas entre las partículas, es decir, cada una de ellas está sometida a la misma potencia incidente. Además, debe suponerse que no hay coherencia entre las ondas esparcidas por los distintos obstáculos (átomos) individuales. Es decir, se satisfacen las condiciones de esparcimiento simple independiente y elástico, discutidas en la sección anterior. En estas condiciones, la intensidad resultante de las ondas esparcidas por ellos se obtiene sumando intensidades en vez de amplitudes, y la potencia total extraída del haz de luz por la rodaja de volumen dV se puede expresar como

$$dP_{\text{rodaja}} = (NdV)P = (NdV)\sigma_e I. \quad (2.6)$$

Sea S la superficie de la rodaja y dz su espesor; si ahora se usa la Ec. (2.1), dP_{rodaja} se puede escribir también como

$$dP_{\text{rodaja}} = -SdI = \alpha_e IdV. \quad (2.7)$$

Por lo tanto, de las últimas dos igualdades se obtiene una sencilla relación entre α_e y σ_e para medios suficientemente diluidos

$$\alpha_e = \sigma_e N. \quad (2.8)$$

Por otra parte, en relación con el fenómeno de esparcimiento es necesario ser más específicos, puesto que la intensidad y la polarización de las ondas esparcidas por el sistema dependen en general de la dirección de observación. Por ello, se define la sección eficaz de esparcimiento o sección eficaz diferencial, $d\sigma_s(\varphi, \theta)$, como la relación entre la potencia re emitida por el sistema en esa dirección dentro del ángulo sólido $d\Omega$ y la intensidad de la radiación incidente I_0 . Es decir,

$$d\sigma_s(\varphi, \theta) = \frac{\langle dP(\varphi, \theta) \rangle}{I_0}, \quad (2.9)$$

donde el símbolo $\langle \rangle$ indica promedio temporal. La sección eficaz total de esparcimiento σ_s se obtendrá con la integral

$$\sigma_s = \int d\sigma_s, \quad (2.10)$$

que debe extenderse a todas las direcciones posibles del espacio.

Para medios ópticamente “densos” no son válidas las hipótesis de esparcimiento simple, independiente y elástico, por lo tanto, el problema es mucho más complicado y, al no ser aditivas las intensidades elementales esparcidas, pierde utilidad el concepto de sección eficaz.

El esparcimiento de luz y sus aplicaciones es un campo bastante amplio, por lo que en la presente tesis nos limitaremos a la discusión únicamente del esparcimiento causado por partículas[1], [15], [31].

2.3. Teorías Para Analizar Partículas

La intensidad total esparcida $I(\theta)$, por un conjunto de partículas bajo el principio de esparcimiento simple, independiente y elástico puede modelarse como una transformada integral de la distribución de tamaños de partícula $f(\alpha)$ [31]

$$I(\theta) = \int_0^{\infty} I(\theta, \alpha, m) f(\alpha) d\alpha. \quad (2.11)$$

Esta es una ecuación integral de Fredholm del primer tipo, donde $\alpha = ka$ es el parámetro de tamaño adimensional, con a el radio de la partícula, $k = 2\pi/\lambda$, es el vector de onda, donde λ es la longitud de onda de la luz en el medio en el cual están inmersas las partículas y θ el ángulo de esparcimiento. El kernel $I(\theta, \alpha, m)$ representa el esparcimiento por una sola partícula, que como veremos en las siguientes secciones, puede calcularse de manera exacta mediante la teoría de Mie o de forma aproximada mediante la aproximación de Fraunhofer, donde m es el índice de refracción relativo $m = n_p/n_m$, con n_p y n_m , los índices de refracción de las partículas y el medio que las contiene, respectivamente. $f(\alpha)$ es la densidad de número, es decir, $f(\alpha)d\alpha$ es el número de partículas dentro del haz láser con tamaños entre α y $\alpha + d\alpha$.

La solución consiste en buscar una transformada inversa de la Ec. (2.11) tal que se obtenga $f(\alpha)$ a partir de medidas experimentales de $I(\theta)$, lo que se conoce como el problema inverso. Para partículas esféricas, el kernel se representa mediante la teoría de Mie, que es una solución exacta al problema electromagnético. Sin embargo, dicha solución puede aproximarse mediante la difracción de Fraunhofer, cuando se trabaja con partículas mayores a la longitud de onda del haz.

2.3.1. Teoría de Mie

La intensidad de la luz esparcida en el campo lejano (a la distancia R) por una partícula esférica que interacciona con una onda plana de intensidad $I_0(\text{W/m}^2)$ polarizada, está dada por[31]

$$I(\theta, \alpha) = \frac{I_0(i_1 + i_2)}{k^2 R^2} \quad (2.12)$$

donde, $i_1 = |S_1(\theta)|^2 \cos^2(\phi)$ e $i_2 = |S_2(\theta)|^2 \sin^2(\phi)$, se deducen a partir de las amplitudes de los dos tipos de polarización que componen la luz incidente dadas por:

$$S_1(\theta, \alpha, m) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{2n+1}{n(n+1)} \right] \{a_n(\alpha, m)\pi_n(\cos\theta) + b_n(\alpha, m)\tau_n(\cos\theta)\} \quad (2.13)$$

y

$$S_2(\theta, \alpha, m) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{2n+1}{n(n+1)} \right] \{b_n(\alpha, m)\pi_n(\cos\theta) + a_n(\alpha, m)\tau_n(\cos\theta)\}, \quad (2.14)$$

donde, a_n y b_n son los coeficientes de esparcimiento en los cuales está inmersa la información del tamaño de partícula α y el índice de refracción m . Dichos coeficientes son

$$a_n(\alpha, m) = \frac{\psi'_n(m\alpha)\psi_n(\alpha) - m\psi_n(m\alpha)\psi'_n(\alpha)}{\psi'_n(m\alpha)\zeta_n(\alpha) - m\psi_n(m\alpha)\zeta'_n(\alpha)} \quad (2.15)$$

y

$$b_n(\alpha, m) = \frac{m\psi'_n(m\alpha)\psi_n(\alpha) - \psi_n(m\alpha)\psi'_n(\alpha)}{m\psi'_n(m\alpha)\zeta_n(\alpha) - \psi_n(m\alpha)\zeta'_n(\alpha)}. \quad (2.16)$$

Donde las funciones ψ_n y ζ_n se les conoce como las funciones de Ricatti-Bessel que obedecen las relaciones $\psi_n(\alpha) = \alpha J_n(\alpha)$ y $\zeta_n(\alpha) = \alpha[J_n(\alpha) - iY_n(\alpha)]$, donde J_n es la función esférica de Bessel de n -ésimo orden y primer tipo y Y_n es la función esférica de Bessel de n -ésimo orden y segundo tipo. Además, $\psi'_n(\alpha)$ y $\zeta'_n(\alpha)$, representan la primera derivada respecto a su argumento α .

Asimismo, las funciones angulares de fase $\pi_n(\cos \theta)$ y $\tau_n(\cos \theta)$ se expresan en términos de las primeras y segundas derivadas angulares de los polinomios de Legendre

$$\pi_n(\cos \theta) = \frac{d[P_n(\cos \theta)]}{d[\cos \theta]} \quad (2.17)$$

y

$$\tau_n(\cos \theta) = [\cos \theta]\pi_n(\cos \theta) - \sin^2(\theta) \frac{d[\pi_n(\cos \theta)]}{d[\cos \theta]} \quad (2.18)$$

donde $P_n(\cos \theta)$ es el polinomio de Legendre de orden n y argumento $x = \cos \theta$.

La geometría del esparcimiento se ilustra en la Fig. 2.2.

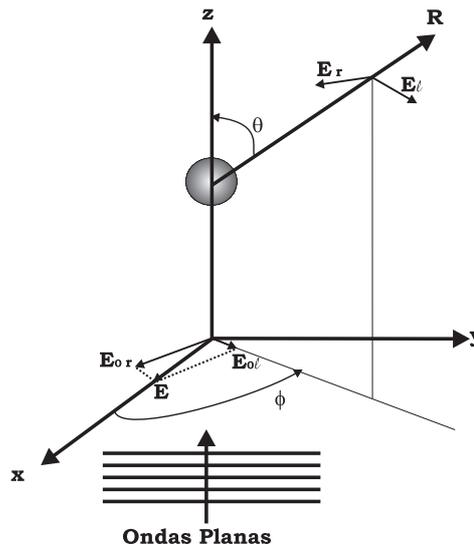


Figura 2.2: Geometría para la luz esparcida por una partícula esférica homogénea.

En la Fig. 2.2 el plano de referencia, o también llamado plano de esparcimiento, se define como el plano que contiene al haz incidente (dirección de propagación de las ondas incidentes) y el haz esparcido. Sus correspondientes componentes están dadas por: E_{0r} y $E_{0\ell}$ para las componentes perpendicular y paralela de la onda incidente, respectivamente; y E_r y E_ℓ para las componentes perpendicular y paralela de la onda esparcida, respectivamente.

Calculando el conjunto de ecuaciones anteriores y sumando las series respectivas, se obtiene la intensidad esparcida por una partícula. Desafortunadamente el número de términos de las series requeridos para la convergencia es grande, ya que es del orden del parámetro de tamaño α [15]. Lo que se traduce, por ejemplo, para una partícula con un radio de $10\mu\text{m}$ y $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ en sumar aproximadamente 100 términos; además, si se toma en cuenta que no se trata de una sola partícula, sino de una cantidad grande, el tiempo de cómputo requerido para realizar el análisis aumenta considerablemente. Una discusión amplia referente al número de términos en las series cuando se trabaja con distribuciones, se presenta en el Capítulo 4 donde se analizan resultados numéricos para la teoría de Mie. En la Fig. 2.3 se muestran los patrones de intensidad de Mie típicos que genera una partícula esférica.

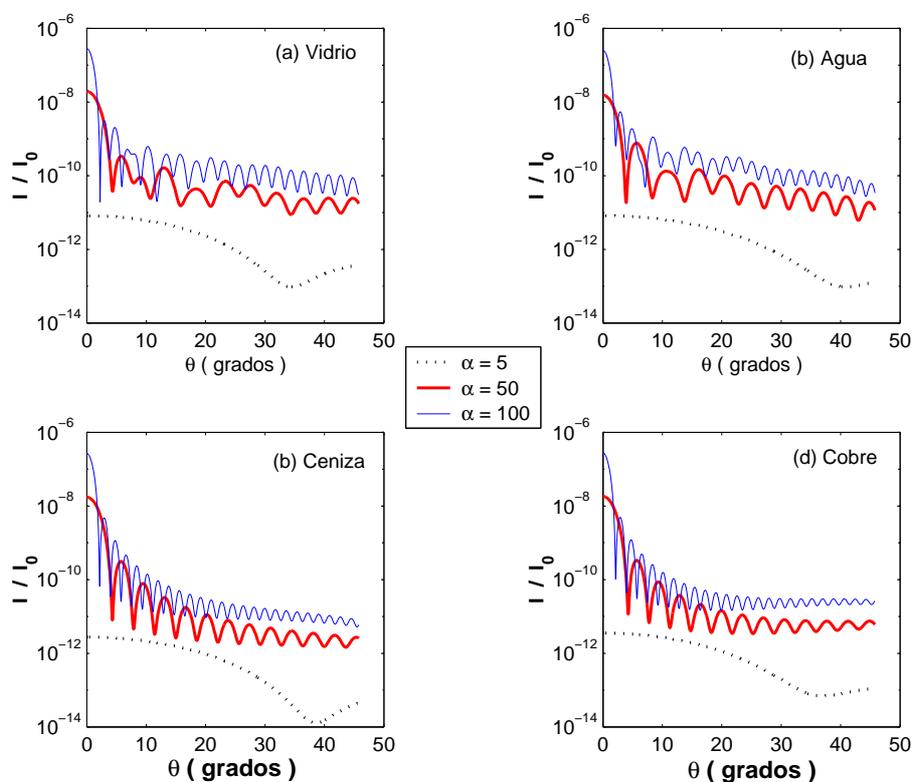


Figura 2.3: Intensidad relativa de Mie en una esfera homogénea.

En la Fig. 2.3 se utilizan 3 tamaños característicos de partícula en cada gráfica, $\alpha = 5, 50, 100$, para cuatro tipos de materiales inmersos en aire: vidrio (Fig. 2.3(a)), agua (Fig. 2.3(b)), ceniza (Fig. 2.3(c)), y cobre (Fig. 2.3(d)), cuyos índices de refracción son 1.5, 1.33, $1.57-i0.56$, y $0.62-i2.57$, respectivamente, para una $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$. Podemos darnos cuenta que a medida que el tamaño de la partícula disminuye, la intensidad es cada vez más pequeña, por lo que el rango dinámico del dispositivo que va a registrar dichas intensidades, es necesario que sea grande. Además podemos darnos cuenta del comportamiento oscilatorio de la intensidad, el cual es el que mayor problemas genera a los métodos de inversión con los que se recupera la distribución de tamaño de partículas. Respecto al índice de refracción, lo que podemos observar es que cuando se trata de partículas absorbentes con un índice complejo, el número de oscilaciones crece lo cual hace más difícil la recuperación ya que el problema es más inestable.

2.3.2. Difracción de Fraunhofer

Al igual que la teoría de Mie, la teoría escalar de difracción es una parte medular del presente trabajo, por lo que se considera conveniente plantearla en el contexto de su aplicación al análisis de tamaño de partículas, con las deducciones respectivas en forma detallada.

El punto de partida es analizar una abertura circular de radio a , centrada en el origen del plano de incidencia (x_0, y_0) como se muestra en la Fig. 2.4, donde incide una onda plana de intensidad $I_0(\text{W}/\text{m}^2)$ sobre dicha abertura. La propagación óptica de campo lejano situado a la distancia z está dado por[32]

$$U(x, y) = \frac{\exp^{ikz} \exp^{\frac{ik}{2z}(x^2+y^2)}}{i\lambda z} \mathcal{F}\{U(x_0, y_0)\}|_{\substack{u=x/\lambda z \\ v=y/\lambda z}}, \quad (2.19)$$

donde $\mathcal{F}\{U(x_0, y_0)\}$, denota la transformada de Fourier de $U(x_0, y_0)$, que es el campo óptico que emerge al incidir la onda plana monocromática sobre la abertura circular.

Si r_0 es la coordenada radial en el plano de incidencia, la transformada que hay que calcular es la de una función $\text{circ}(r_0/a)$, la cual se define como

$$\text{circ}\left(\frac{r_0}{a}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } r_0 < a \\ 0 & \text{para otro caso.} \end{cases} \quad (2.20)$$

En este caso particular, la función $\text{circ}(r_0/a)$ hace las veces del campo emergente del plano (x_0, y_0) , de donde se tiene

$$\mathcal{F}\left\{\text{circ}\left(\frac{r_0}{a}\right)\right\} = \pi a^2 \left[\frac{J_1(2\pi a \rho)}{2\pi a \rho} \right], \quad (2.21)$$

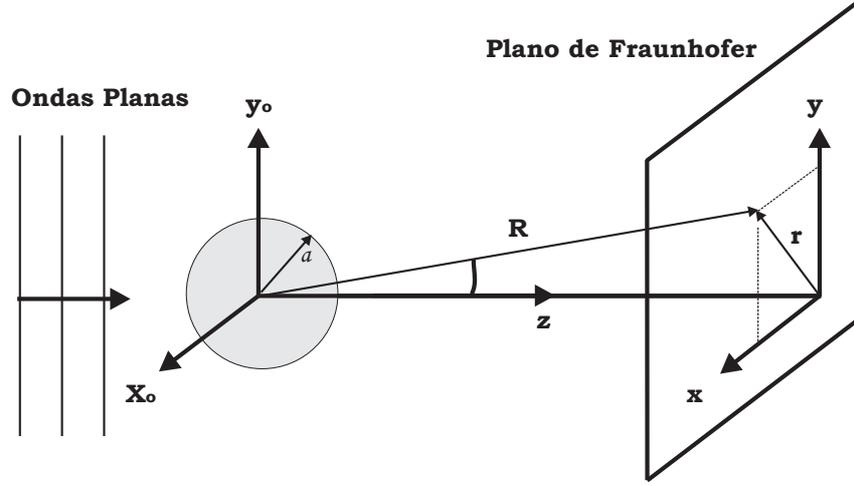


Figura 2.4: Propagación del campo óptico incidente sobre una abertura circular.

donde $\rho = \sqrt{u^2 + v^2}$ con $u = x/\lambda z$ y $v = y/\lambda z$, denotando las frecuencias espaciales y J_1 es la función de Bessel de primer orden y de primer tipo.

Sustituimos la Ec. (2.21) en la Ec. (2.19), se evalúa en las frecuencias espaciales, y dado que de la Fig. 2.4, $r^2 = x^2 + y^2$, obtenemos

$$U(x, y) = \frac{\exp^{ikz} \exp^{\frac{ik}{2z}(r^2)}}{i\lambda z} \left[\pi a^2 \left(\frac{2J_1\left(\frac{2\pi ar}{\lambda z}\right)}{\frac{2\pi ar}{\lambda z}} \right) \right]. \quad (2.22)$$

Considerando válida la aproximación paraxial $\tan(\theta) \approx \theta = r/z$, y sustituyendo $k = 2\pi/\lambda$ en la Ec. anterior se obtiene

$$U(\theta, a) = \frac{\exp^{ikz} \exp^{\frac{ikr^2}{2z}}}{i\lambda z} \left[\pi a^2 \left(\frac{2J_1(ka\theta)}{ka\theta} \right) \right]. \quad (2.23)$$

Tomando el módulo al cuadrado del campo, se tiene la intensidad

$$I(\theta, a) = I_0 \frac{\pi^2 a^4}{\lambda^2 z^2} \left[\frac{2J_1(ka\theta)}{ka\theta} \right]^2. \quad (2.24)$$

Ahora, como el problema que se va a estudiar involucra a un disco opaco y no a una abertura circular, es necesario resolver el problema “complementario”. Es decir, hallar el campo, $U'(x, y)$, debido a un disco opaco. Por lo tanto,

$$U'(x, y) = \frac{\exp^{ikz} \exp^{\frac{ik}{2z}(x^2+y^2)}}{i\lambda z} \mathcal{F} \left[1 - \text{circ} \left(\frac{r_0}{a} \right) \right]_{\substack{u=x/\lambda z \\ v=y/\lambda z}}, \quad (2.25)$$

donde el valor de la transformada de Fourier está dado por

$$\mathcal{F} \left[1 - \text{circ} \left(\frac{r_0}{a} \right) \right] = \delta(u, v) - \pi a^2 \left[\frac{J_1(2\pi a \rho)}{2\pi a \rho} \right]. \quad (2.26)$$

Sustituyendo en la expresión para el campo y evaluando en las frecuencias espaciales se tiene

$$U'(x, y) = \frac{\exp^{ikz} \exp^{\frac{ik}{2z}(x^2+y^2)}}{i\lambda z} \left[\lambda^2 z^2 \delta(x, y) - \pi a^2 \left(\frac{2J_1\left(\frac{2\pi ar}{\lambda z}\right)}{\frac{2\pi ar}{\lambda z}} \right) \right], \quad (2.27)$$

de donde se obtiene la intensidad

$$I'(x, y) = \frac{I_0}{\lambda^2 z^2} \left[\lambda^2 z^2 \delta(x, y) - \pi a^2 \left(\frac{2J_1\left(\frac{2\pi ar}{\lambda z}\right)}{\frac{2\pi ar}{\lambda z}} \right) \right]^2. \quad (2.28)$$

Como la delta de Dirac en la expresión anterior representa una mancha brillante en el origen (el orden cero de difracción), fuera de éste, es un término que no contribuye. Por lo tanto, si se observa en puntos diferentes al origen, podemos ignorar dicho término, de tal manera que al tomar nuevamente $\theta \approx r/z$, se demuestra que se tiene la misma intensidad que en el caso de una abertura circular

$$I(\theta, a) = I'(\theta, a) = I_0 \frac{\pi^2 a^4}{\lambda^2 z^2} \left[\frac{2J_1(ka\theta)}{ka\theta} \right]^2. \quad (2.29)$$

Por último, se generaliza el problema al considerar que el disco opaco se encuentra fuera del origen del plano de incidencia (x_0, y_0) . Entonces, para calcular el campo óptico producido en el plano de Fraunhofer, es necesario calcular la transformada de Fourier de

$$\mathcal{F} \left[1 - \text{circ} \left(\frac{r_1 \pm r_0}{a} \right) \right] = \delta(u, v) - \exp^{\pm 2\pi i r_0 \rho} \left[\pi a^2 \frac{J_1(2\pi a \rho)}{2\pi a \rho} \right]. \quad (2.30)$$

Por el resultado de la transformada anterior y los argumentos discutidos arriba, es fácil afirmar que el patrón de intensidad, para una abertura circular fuera del centro del plano de incidencia (x_0, y_0) , se comporta como el dado por la Ec. (2.29). Por lo tanto, concluimos que el patrón de intensidad de un disco opaco, situado en alguna parte sobre el plano de incidencia, es idéntico al patrón que genera una abertura circular en el origen de coordenadas del plano, aunque la fase difiera en cada caso.

En la Fig. 2.5 se muestra el comportamiento del patrón de intensidad normalizado a la unidad (la intensidad sobre el eje $I(\theta = 0)$), para una $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ y aberturas de diferentes radios. Se muestra sólo la región donde aparecen los máximos secundarios de intensidad con el propósito de facilitar su observación. Para aberturas con radios grandes (Fig. 2.5(a)), los máximos secundarios se encuentran relativamente cerca del eje óptico, es decir, a ángulos muy pequeños. Mientras que para aberturas cuyo radio es más pequeño, los máximos secundarios están muy alejados del eje a ángulos de 30 y 60 grados, para $1\mu\text{m}$ y $0.5\mu\text{m}$, respectivamente (Fig. 2.5(b)).

En la Fig. 2.6 se considera el efecto que tiene la longitud de onda en el patrón de intensidad para cuatro de los tamaños analizados en la Fig. 2.5. Las longitudes de onda

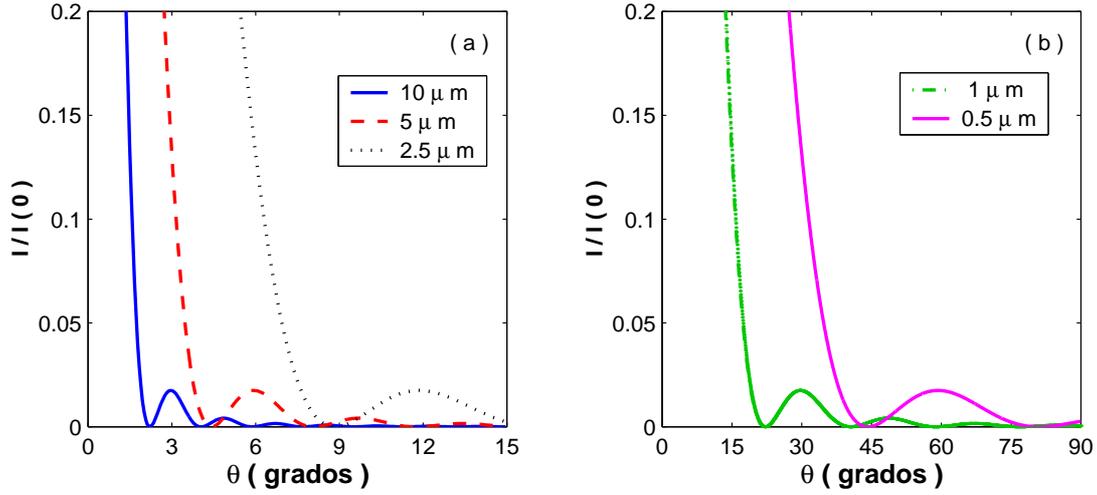


Figura 2.5: Intensidad de Fraunhofer en una abertura circular.

más pequeñas desplazan los máximos secundarios a ángulos menores. Las Figs. 2.6(a) - 2.6(d) son para aberturas de $5 \mu\text{m}$, $2.5 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$, y $0.5 \mu\text{m}$, respectivamente, cada una con $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$, y $\lambda = 0.459 \mu\text{m}$. Los máximos se corren de 6° a 4° para la abertura de $5 \mu\text{m}$, de 12° a 9° para la abertura de $2.5 \mu\text{m}$, de 30° a 20° para la abertura de $1 \mu\text{m}$, y de 60° a 40° para la abertura de $0.5 \mu\text{m}$, aproximadamente. Sin embargo, a pesar de una reducción considerable en el ángulo de esparcimiento, para el caso de $1 \mu\text{m}$, dichos ángulos siguen siendo demasiado grandes.

La posición angular de los máximos secundarios de intensidad se obtienen resolviendo la ecuación trascendental

$$2J_1(ka\theta) = (ka\theta)J_0(ka\theta), \quad (2.31)$$

la cual surge de derivar respecto al ángulo a la Ec. (2.29) e igualar a cero. Realizando operaciones elementales Hirleman *et al.*[7] obtienen una expresión simple para dicho ángulo

$$\beta = \frac{0.8175\lambda}{a}. \quad (2.32)$$

Aplicando el formalismo anterior a partículas esféricas opacas mayores que la longitud de onda ($a > \lambda$), podemos describir el esparcimiento de luz por partículas de una manera extremadamente simple, debido a que la teoría escalar de Fraunhofer predice que un patrón de difracción de campo lejano puede ser observable, si se encuentra a una distancia tal que se cumpla la condición[32]

$$z \gg \frac{ka^2}{2}. \quad (2.33)$$

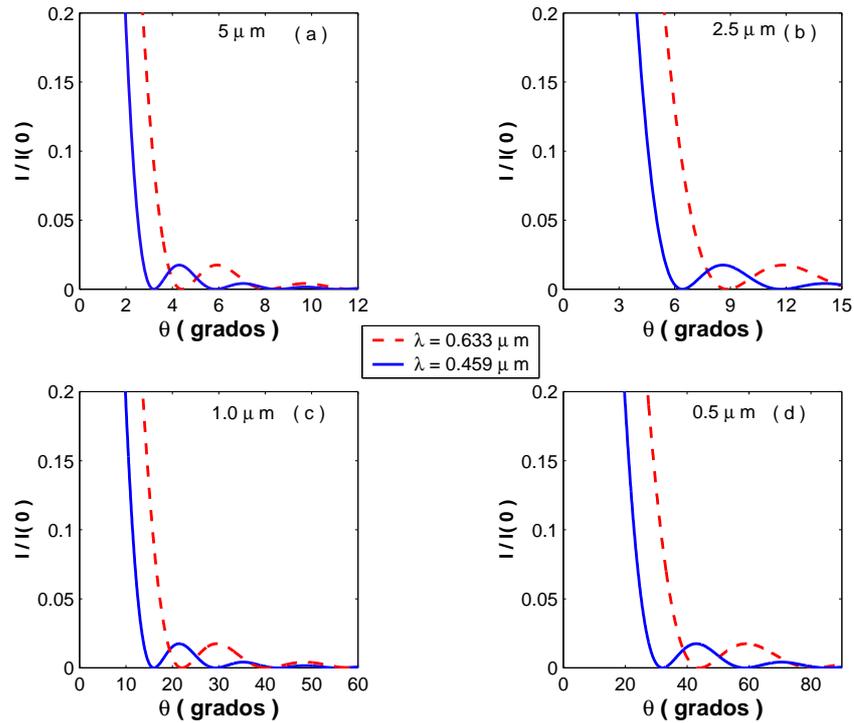


Figura 2.6: Efecto de diferente λ en los máximos secundarios del patrón de intensidad.

Por ejemplo, para poder observar el patrón de difracción de una gota de agua de 2.5cm de radio con luz roja de $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$, la distancia de observación debe ser $z \gg 3102.9\text{m}$.

La restricción anterior se resuelve colocando una lente convergente entre el observador y la abertura, de tal forma que ahora el patrón de difracción es traído al plano focal de la lente. Por lo tanto, a partir de este momento para referirnos a la distancia de observación z , estaremos hablando del foco de una lente convergente (F) que se utilizara para acercar el patrón de difracción a una distancia finita. También nos referiremos en el siguiente capítulo al parámetro de tamaño adimensional α , en vez del radio de una partícula. Así que, el patrón de esparcimiento de una partícula se puede modelar como el patrón de difracción de campo lejano de una abertura circular de parámetro de tamaño α dado por[31]

$$I(\theta, \alpha) = I_0 \frac{\alpha^2}{k^2 F^2 \theta^2} J_1^2(\alpha\theta). \quad (2.34)$$

La ecuación anterior tiene una forma extremadamente simple si se compara con el kernel de Mie (Ec. (3.19)) para una partícula del mismo parámetro de tamaño, con la ventaja adicional de que no depende del índice de refracción relativo.

En la Fig. 2.7 se comparan las intensidades calculadas con Mie y Fraunhofer, mediante las Ecs. (3.19) y (2.34) para dos partículas esféricas de parámetro de tamaño 10 y

100 con una lente de 300mm de distancia focal. Dichas partículas son de tres materiales distintos; de agua con un índice de refracción $m = 1.33$, partículas de vidrio con $m = 1.5$, y partículas de ceniza con $m = 1.57 + i0.56$. Note que para la partícula pequeña ambas teorías no coinciden, mientras que para las partículas grandes, ambas teorías coinciden a ángulos pequeños. Esto nos indica que efectivamente la aproximación de Fraunhofer reproduce adecuadamente el resultado de la teoría de Mie, únicamente a ángulos pequeños y para partículas grandes.

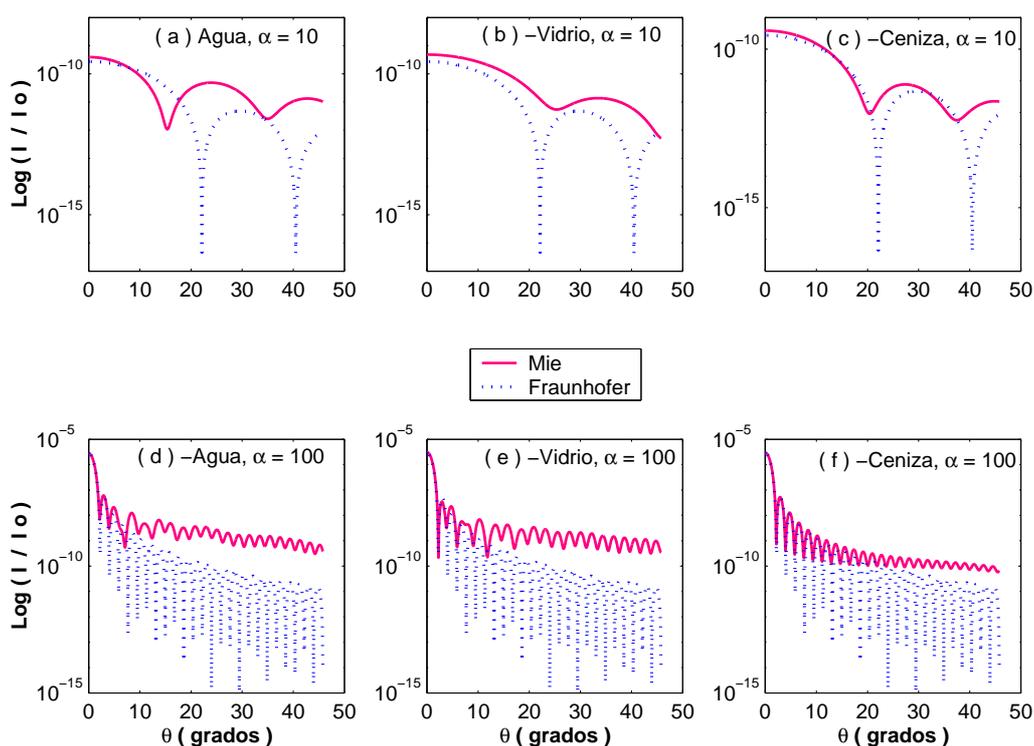


Figura 2.7: Comparación entre teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer.

Con base en la discusión anterior se tiene que la intensidad total, aplicando difracción de Fraunhofer a un conjunto de partículas con distribución de tamaños $f(\alpha)$ localizadas en posiciones aleatorias, está dada por la suma incoherente de los patrones individuales pesados por la densidad de probabilidad de los tamaños[31]

$$I(\theta) = \frac{I_0}{k^2 F^2 \theta^2} \int_0^\infty \alpha^2 f(\alpha) J_1^2(\alpha\theta) d\alpha. \quad (2.35)$$

Nuevamente se trata de una ecuación integral de Fredholm del primer tipo, donde $f(\alpha)$ integrada sobre todos los tamaños, es igual al número total de partículas presentes en la muestra.

La intensidad total $I(\theta)$, es una función continua de la variable θ en el intervalo $(0, \infty)$, pero experimentalmente sólo se tienen datos en un intervalo finito desde un θ_{\min} hasta un θ_{\max} . Dentro de este intervalo dicha función se tiene que medir en un número también finito de puntos, es decir, se debe discretizar. Por otro lado, normalmente se conoce un “soporte” para la distribución de tamaños de las partículas, es decir, el integrando de la Ec. (2.35) es distinto de cero únicamente en un intervalo $(\alpha_{\min}, \alpha_{\max})$. Esto genera problemas serios en la recuperación de la distribución de tamaños de partículas a partir del conocimiento del patrón de intensidad que generan[33].

2.4. Analizador Típico de Difracción Láser

La Fig. 2.8 esquematiza el arreglo óptico típico utilizado por algunos instrumentos comerciales para medir tamaños de partículas por la técnica denominada *Difracción Láser*. Esencialmente usa un láser de He-Ne a $0.6328\mu\text{m}$, componentes ópticas para expandir y colimar el haz, una celda porta-muestras, una lente transformadora de Fourier, un arreglo de detectores, dispositivos de control para realizar la conversión analógico-digital de los datos y una computadora para dirigir las mediciones y procesar la información[34].

La luz esparcida por las partículas es colectada y enviada al plano focal de la lente en posiciones radiales que obedecen a la aproximación “paraxial” $\theta = r/F$. Generalmente se utiliza un arreglo de detectores anulares concéntricos en el que para el j -ésimo detector, r_{i_j} y r_{e_j} son los radios interno y externo, respectivamente, que reciben un cono hueco de luz difractada definido por los ángulos de difracción interno y externo, θ_{i_j} y θ_{e_j} . La cantidad total de energía que recibe cada detector se obtiene integrando $I(\theta)$ en todo el anillo que delimita al detector.

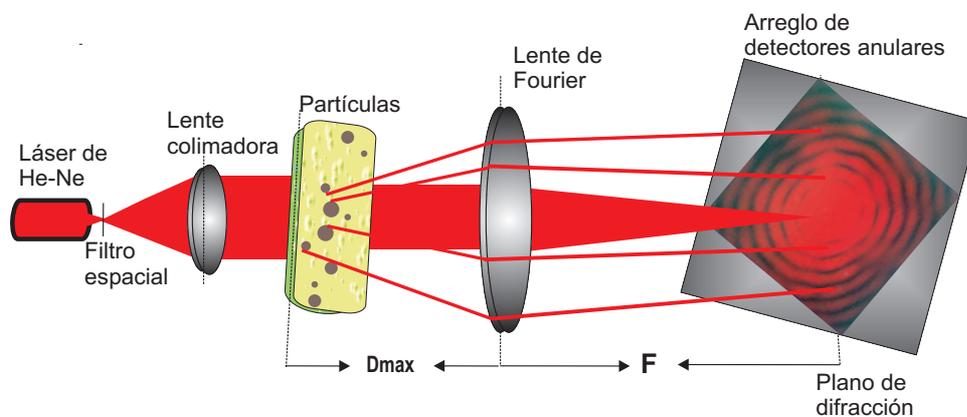


Figura 2.8: Arreglo óptico típico de difracción láser.

La existencia de viñeteo en la lente colectora genera ciertos límites permisibles sobre la distancia máxima D_{\max} entre las partículas y la lente colectora afectando el rango dinámico del instrumento. El cálculo de dicha distancia máxima se basa en consideraciones geométricas simples[8] como se ilustra en la Fig. 2.9. Si el haz de luz intercepta partículas a distancias mayores que D_{\max} , la luz que llega a los detectores más externos se reduce, en comparación con la que llega a otros detectores, debido a que la abertura de la lente aparece demasiado pequeña para la luz que es desviada a ángulos muy grandes, generando un error en el cálculo de la distribución de tamaños. Así, la distancia máxima D_{\max} , es fácilmente calculada igualando la razón de lados de dos triángulos opuestos por el vértice en la Fig. 2.9

$$\frac{D_{\max}}{r_L - r_h} = \frac{F}{r_d} \quad \implies \quad D_{\max} = F \frac{r_L - r_h}{r_d}. \quad (2.36)$$

De donde, por ejemplo para una lente de $r_L = 30\text{mm}$ y $F = 300\text{mm}$, con un haz de radio $r_h = 6\text{mm}$, y un detector con $r_d = 67\text{mm}$, obtenemos que $D_{\max} = 107.5\text{mm}$.

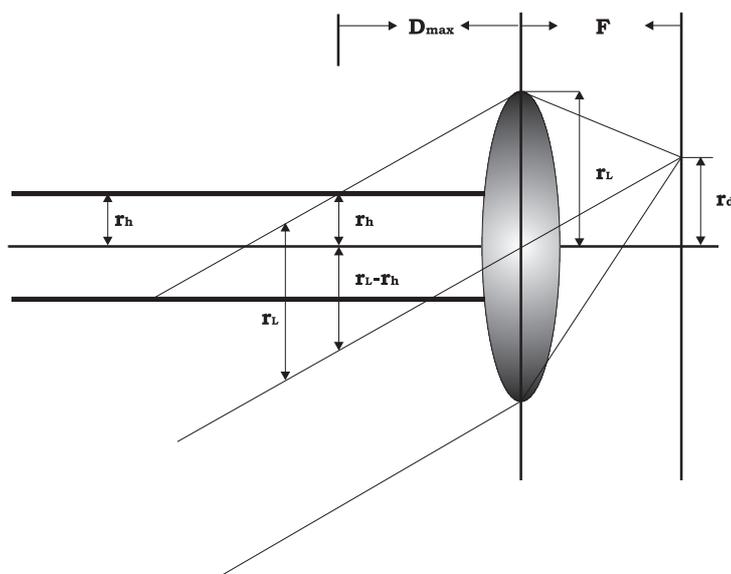


Figura 2.9: Parámetros que caracterizan el viñeteo en la lente colectora.

Debido a que el patrón de luz difractada por las partículas tiene simetría circular en el plano focal de la lente colectora (ver la Fig. 2.8), los instrumentos comerciales como el Mastersizer de Malvern[34] utiliza un fotodiodo detector basado en anillos con geometría fija[40]. La Fig. 2.10 muestra una fotografía del detector de dicho analizador comercial, el cual como puede verse no está completamente formado por círculos concéntricos. Únicamente se observan sectores en forma de cuñas cuyos grosores no coincide con los reportados por Hirleman[7] y Dodge[8]. La forma de este nuevo detector, corresponde a un modelo de analizador más reciente de Malvern. Ya que el detector referido en la literatura citada

arriba, correspondía a los modelos 2200 de Malvern que se utilizaron durante los años 80's. Este nuevo detector, al tener anillos más gruesos, que abarcan una región angular mayor, tienen una resolución más alta, y el rango dinámico en la señal que miden alcanza hasta tres órdenes de magnitud. Recientemente, se han desarrollado arreglos de pixeles activos CMOS (complementary metal-oxide semiconductor), que se están usando en difracción láser y alcanzan un rango dinámico hasta de 6 órdenes de magnitud[4], por lo que prometen mucho en el campo del análisis de partículas.

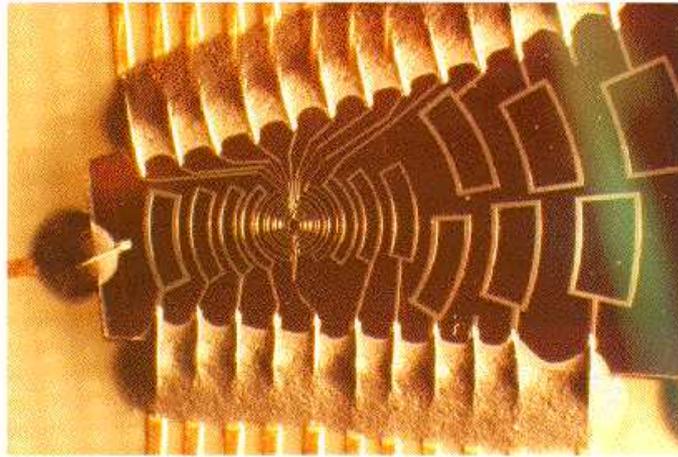


Figura 2.10: Detector utilizado por Malvern.

Mediante dos configuraciones ópticas, actualmente un analizador de partículas comercial puede alcanzar una resolución en los radios de las partículas de $0.02\mu\text{m}$ hasta $2000\mu\text{m}$ en polvo seco, suspensiones y en forma de aerosol. La primera se conoce como *óptica de Fourier convencional* y se sustenta teóricamente en la discusión anterior esquematizada en la Fig. 2.8. La otra configuración se le llama *óptica de Fourier inversa* y es la que permite llegar hasta $0.02\mu\text{m}$, considerando combinaciones adecuadas de: lente colectora, láser, detectores y diámetro de haz. Se invierte la posición de la muestra respecto a la lente colectora, considerando la detección de la luz a ángulos grandes y también en la dirección de retro esparcimiento, además de cambiar a un láser de longitud de onda más pequeña, como es el caso de un láser de Argón a $\lambda = 0.458\mu\text{m}$. La Fig. 2.11 muestra dicha configuración.

En principio las mediciones se realizan de manera similar a la configuración anterior. El haz de láser se expande como en el caso convencional pero, en vez de formar un haz colimado, el haz de salida es enfocado a un punto en el plano del detector central haciéndolo pasar sobre la muestra que ahora se encuentra atrás de la lente, a una distancia

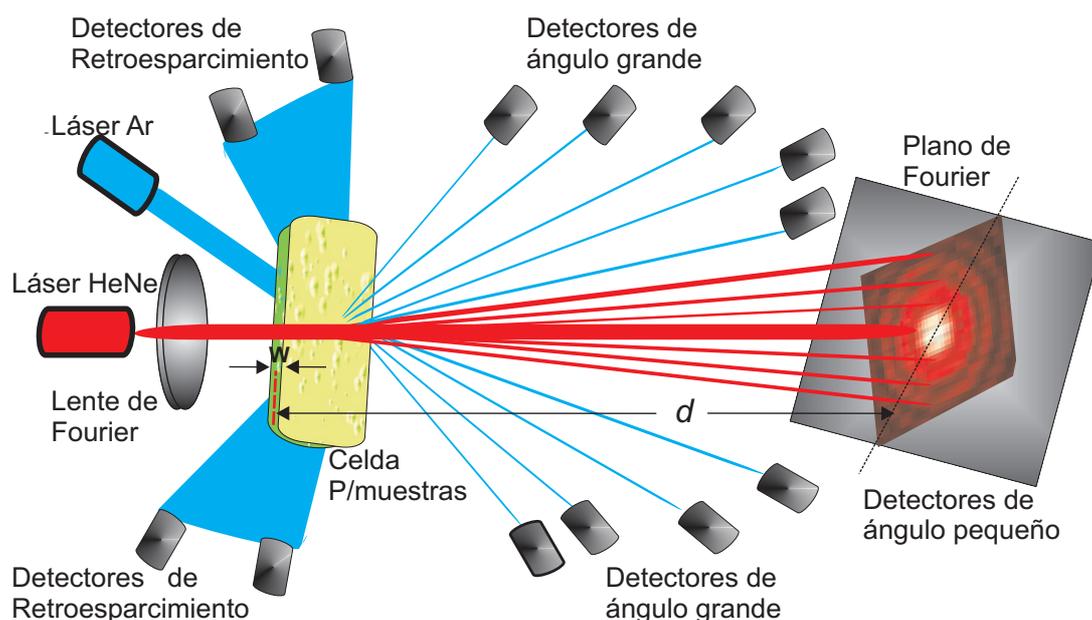


Figura 2.11: Configuración óptica inversa de un Mastersizer de Malvern.

d del detector. Esto hace que el haz enfocado se difracte y sea captado por el mismo arreglo de detectores del caso convencional y los que se encuentran en la dirección de retro esparcimiento. La lente ahora tiene un foco de 45mm. En esta configuración el detector mide el patrón de difracción de campo lejano efectivo, por lo tanto, la constante de escalamiento, la cual es la longitud focal de la lente para la óptica convencional, llega a ser la distancia del detector a la celda en la configuración nueva. Ahora, si la celda se acerca al detector, el patrón de difracción se hace más pequeño sobre el detector, mientras que si la celda se aleja el patrón de difracción crece. A cualquier distancia entre la celda y el detector, éste recibe el patrón de difracción de campo lejano y no requiere que se enfoque.

A pesar de esta modificación en la configuración, el patrón de difracción recibido por el detector retiene la propiedad útil de que permanece estacionario y coaxial con el eje óptico, sin importar el movimiento de las partículas en el plano de medición. La ventaja de tal configuración es en las medidas de partículas pequeñas las cuales esparcen luz a ángulos muy grandes, típicamente mayores a 10° . En la configuración convencional la habilidad para coleccionar y transformar la luz esparcida está limitada por las aberraciones y la abertura de la lente. Mientras que en la configuración inversa no requiere de la abertura de la lente a ángulos más grandes, por lo que no introduce aberraciones a dichos ángulos grandes. Sin embargo, la configuración inversa tiene un inconveniente con las partículas más grandes presentes en la muestra, las cuales siguen esparciendo luz hacia los detectores

principales del plano focal. La escala del patrón de esparcimiento formado sobre este arreglo de detectores depende de la distancia del detector a la celda porta-muestras. Así, si a las partículas se les permite que se desparramen sobre una distancia significativa “ w ” a lo largo del eje óptico un aparente ensanchamiento en el tamaño ocurrirá proporcional a la razón $(d + w)/d$. Esto significa que la celda porta muestras debe transformar el ensanchamiento de un fluido en suspensión, si este es el caso, en un flujo laminar para evitar un error considerable.

Después de conocer las dos configuraciones alternativas que poseen en general los instrumentos comerciales de difracción láser, mencionaremos que la elección de la correcta configuración óptica depende de las necesidades y experiencia del usuario. Por lo general, un analizador de difracción láser está provisto de módulos de presentación de muestra desmontables, los cuales tienen celdas pre determinadas para un tipo de aplicación específica. Estos módulos transportan y presentan el material en la zona de medida prácticamente sin contaminación, además de que se ajustan perfectamente en el riel óptico del instrumento mediante monturas isocinéticas de precisión, para no afectar la alineación óptica entre un período de uso y el siguiente. Por lo tanto, esta etapa es crítica para el rendimiento del instrumento y también para la obtención de resultados correctos.

Finalmente, lo único que resta por comentar es que la constante implementación y mejora tecnológica de nuevos módulos portamuestras, así como la creciente cantidad de accesorios periféricos, conjuntamente con el software de control y análisis en dichos analizadores comerciales, encarecen de manera importante el costo del instrumento. La cual se convierte en una actividad bastante rentable para las compañías que los producen, haciéndolos prácticamente inaccesibles para usuarios que pretenden utilizarlos con fines didáctico-educativos o de investigación básica.

Capítulo 3

Métodos de Inversión

El problema directo en ciencias ópticas consiste en predecir la emisión o propagación de radiación electromagnética por un conjunto de fuentes conocidas o centros de esparcimiento. El problema inverso es deducir las características de las fuentes a partir de la radiación esparcida o emitida que se ha propagado hasta un detector. Los problemas inversos son examinados con algún detalle por Press *et al.*[35]. La inestabilidad numérica derivada del ruido en datos colectados experimental o numéricamente, así como el redondeo computacional, producen errores arbitrariamente grandes en la solución. En la literatura se refieren a este tipo de problemas como *mal condicionados*, lo cual no significa que existan errores en su deducción matemática, sino que la solución es extremadamente sensible a errores de medición infinitesimales y redondeo computacional.

Para calcular el esparcimiento a partir de primeros principios, la teoría de Mie es usada. Aunque dicha teoría es una solución exacta, usualmente la solución analítica no es simple y es extremadamente lenta a medida que el parámetro de tamaño crece, ya que el número de términos en las series que hay que sumar es proporcional al parámetro de tamaño. Por lo tanto, hay casos límite tales como la teoría de esparcimiento de Rayleigh y la teoría de difracción, por lo que los tres regímenes pueden plantearse en términos del parámetro de tamaño como sigue

$$\begin{aligned} \alpha &\ll 1 && \text{Rayleigh,} \\ \alpha &\approx 1 && \text{Mie,} \\ \alpha &\gg 1 && \text{Fraunhofer} \end{aligned} \tag{3.1}$$

Un parámetro más apropiado para dividir estos tres regímenes es el que toma en cuenta tanto el parámetro de tamaño como el índice de refracción relativo. Tal parámetro, δ , es sugerido por van de Hulst[31]

$$\delta = 2\alpha |m - 1|, \tag{3.2}$$

donde

$$\begin{aligned}
 \delta < 0.3 & \quad \text{Rayleigh,} \\
 \delta \approx 1 & \quad \text{Mie,} \\
 \delta \gg 30 & \quad \text{Fraunhofer.}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Sin embargo, este criterio no representa un valor umbral exacto si se trata de recuperar una DTP con la aproximación de Fraunhofer. Hodgkinson[36] calcula que dicha aproximación es válida para una partícula cuyo radio es $\geq 2.5\mu\text{m}$ cuando se analiza con luz visible de $0.5\mu\text{m}$. Asimismo, Jones[37] plantea que para partículas no absorbentes y para errores menores al 20 %, Fraunhofer es adecuada para parámetros de tamaño ≥ 20 si el índice de refracción es ≥ 1.3 , lo cual para longitudes de onda en el visible, corresponde aproximadamente a partículas con radios $\geq 2\mu\text{m}$. Ambos autores en ningún momento hacen referencia a la situación real de recuperar una distribución con muchas partículas.

Parte del presente trabajo consiste en identificar con certeza una vecindad en los tamaños, la cual delimite la validez de la aproximación de Fraunhofer aplicada en la recuperación de DTP's . Por lo tanto, primero se trabaja con dos métodos de inversión, mediante transformadas integrales directas y por cuadraturas numéricas. Así, una vez delimitado el umbral de validez para la recuperación de una DTP por la aproximación de Fraunhofer, se incorpora a dicho análisis una tercera técnica de inversión mediante un algoritmo basado en una estrategia evolutiva. Además, para la región donde se demuestra que es inadecuado trabajar con la aproximación de Fraunhofer, se utiliza la teoría de Mie con un algoritmo basado en técnicas de regularización. Antes de presentar los diferentes métodos de inversión, se introducen tres distribuciones analíticas típicas que se utilizan en los cálculos numéricos y simulaciones de la presente tesis.

3.1. Funciones de Distribución

Se consideran distribuciones que comúnmente se usan para modelar distribuciones de tamaños de partículas en aerosoles[22], tales como la distribución gamma y la distribución lognormal. La distribución gamma es definida como

$$f_G(\alpha) = \begin{cases} N \frac{(\alpha - \alpha_0)^{[(\frac{1}{b}) - 3]}}{(bt)^{[(\frac{1}{b}) - 2]}} \exp\left[-\frac{\alpha_0 - \alpha}{bt}\right] & \text{para } \alpha > \alpha_0 \\ 0 & \text{para } \alpha \leq \alpha_0 . \end{cases} \tag{3.4}$$

Los parámetros t y b son el tamaño efectivo y la desviación estándar efectiva, respectivamente, y controlan la forma de la distribución. α_0 determina el tamaño de partícula más

pequeño presente en la distribución, N es el número total de partículas y Γ representa la función gamma, definida como

$$\Gamma(\eta) = \int_0^{\infty} \psi^{\eta-1} \exp[-\psi] d\psi, \quad \text{para } \eta > 0. \quad (3.5)$$

La distribución lognormal es definida como[1]

$$f_L(\alpha) = \frac{N}{\sigma(\alpha - \alpha_0)\sqrt{2\pi}} \exp \left[- \left(\frac{\ln(\frac{\alpha - \alpha_0}{A_0})}{\sigma\sqrt{2}} \right)^2 \right], \quad (3.6)$$

donde N and α_0 son definidos de manera similar a la distribución gamma, σ es la desviación estándar geométrica que representa el ancho de la distribución y, A_0 es una cantidad que define el parámetro de tamaño modal (μ_L) de la distribución, a través de la relación

$$\mu_L = \exp \left[\ln(A_0) + \frac{\sigma^2}{2} \right]. \quad (3.7)$$

Otra distribución utilizada en el presente trabajo es la distribución normal, la cual sirve como punto de referencia de las distribuciones gamma y lognormal, que en general son asimétricas. Dicha distribución se define como

$$f_N(\alpha) = \frac{N}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha - \mu}{\sigma} \right)^2 \right], \quad (3.8)$$

donde μ es la media y σ la desviación estándar y N otra vez, el número total de partículas.

La Fig. 3.1 muestra la forma de estas tres distribuciones típicas para los parámetros de forma que se reportan en la Tabla 3.1 con $N = 100$ partículas.

Distribución	Parámetros de forma	
Normal	$\mu = 100$	$\sigma = 15$
Gama	$t = 90.0$	$b = 0.3$
Lognormal	$A_0 = 72.0$	$\sigma = 2.2$

Tabla 3.1: Parámetros que generan las distribuciones de la Fig. 3.1.

Proponiendo un índice de refracción relativo $m = n_p/n_m = 1.5$ para una longitud de onda de $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ en la Ec. (2.11), con el kernel de la teoría de Mie en la Ec. (3.19) y las distribuciones propuestas, se simula numéricamente el patrón de esparcimiento que produciría dicha distribución de partículas.

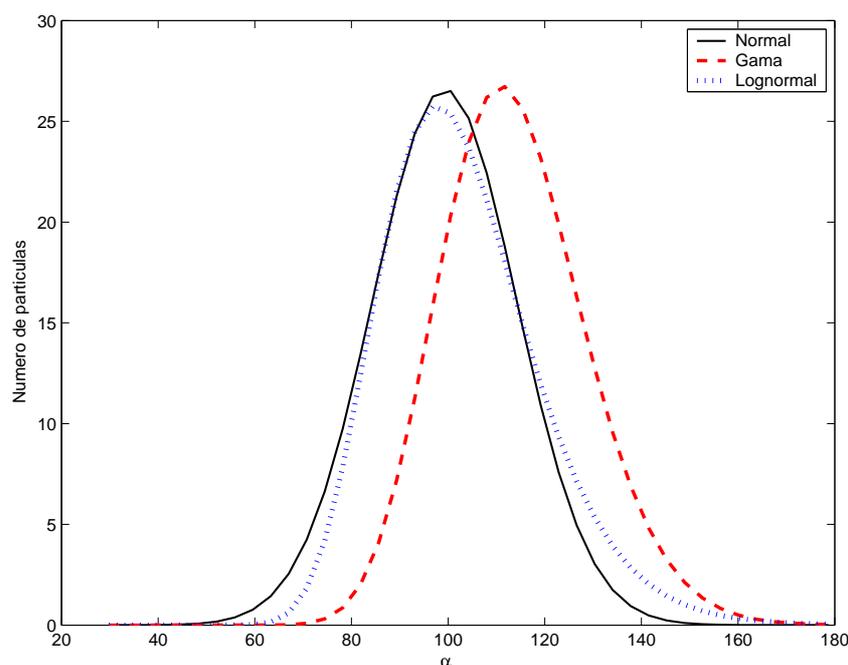


Figura 3.1: Funciones de distribución típicas.

En el contexto de la aproximación de Fraunhofer existen dos aproximaciones básicas para resolver la Ec. (2.35) para $f(\alpha)$. 1) por transformadas integrales directas en el que se considera a la Ec. (2.35) como una transformada integral que posee inversa conocida como el método de Chin Shifrin (CS) y, 2) por cuadraturas numéricas donde la Ec. (2.35) puede ser discretizada, así, el problema planteado es resuelto como el de un sistema lineal de ecuaciones en el que se busca el mejor método de solución de una ecuación matricial. Para este caso en particular, se trabaja con el método de descomposición en valores singulares (DVS).

3.2. Método de Chin Shifrin

El patrón de difracción es la suma de funciones de Bessel al cuadrado, cada uno con diferente coeficiente de peso dado por la distribución de partículas como se muestra en la Ec. (2.35). El método de inversión de Chin Shifrin es una solución analítica asintótica a la Ec. (2.35), la cual hace potencialmente mucho más rápida la inversión para recuperar la distribución de tamaños. Dicha solución está dada por [20], [23]

$$f(\alpha) = \frac{-2\pi k^3 F^2}{\alpha^2} \int_0^\infty (\alpha\theta) J_1(\alpha\theta) Y_1(\alpha\theta) \frac{d}{d\theta} \left[\theta^3 \frac{I(\theta)}{I_0} \right] d\theta, \quad (3.9)$$

donde, Y_1 es la función de Bessel de primer orden y de segundo tipo, y todas las demás variables han sido introducidas en el capítulo 2.

Esta solución presenta el inconveniente de tener diferencias en los dominios de muestreo y de tamaños, lo cual, produce problemas serios en las recuperaciones. Es decir, el ángulo θ sólo puede adquirir valores en un intervalo pequeño, limitado por la validez de la aproximación paraxial hasta un ángulo máximo $\theta_{\text{máx}}$, lo cual tiene implicaciones importantes en la discretización de la integral. Además, se presentan problemas con el muestreo angular $\Delta\theta$ y el ángulo mínimo de muestreo $\theta_{\text{mín}}$.

3.2.1. Parámetros Angulares de Muestreo

Para ilustrar los problemas que el método CS presenta con los parámetros angulares de muestreo, se considera únicamente una distribución normal. Debido a que resultados similares se obtienen para distribuciones gamma y lognormal. La Fig. 3.2 muestra la recuperación de una distribución normal con parámetro de tamaño modal $\mu = 100$ y desviación $\sigma = 20$.

En cada una de las cuatro gráficas de la Fig. 3.2 se está representando lo siguiente: la curva gruesa es la distribución propuesta; la línea punteada es la recuperación a un ángulo $\theta_{\text{máx}} = 1.6^\circ$; la línea delgada es la recuperación a un ángulo $\theta_{\text{máx}} = 3.2^\circ$; y la curva con círculos vacíos es la recuperación a un ángulo $\theta_{\text{máx}} = 4.8^\circ$. Con un ángulo mínimo $\theta_{\text{mín}} = 0.15^\circ$ para todas. En la Fig. 3.2(a), en las tres gráficas recuperadas se considera una razón de muestreo angular de $\Delta\theta = 0.15^\circ$. Es decir, se simula un detector cada $800\mu\text{m}$ de grosor, y se colocan uno a continuación de otro sobre el plano de detección. Por lo tanto, para la línea punteada se tienen 10 detectores, 20 para la línea delgada; y 30 para los círculos. Para la Fig. 3.2(b), la razón de muestreo fue más fina, $\Delta\theta = 0.075^\circ$, por lo que ahora los detectores son de $400\mu\text{m}$ de grosor. Por lo tanto, para la línea punteada tenemos 20; 40 para la línea delgada y, 80 detectores para la curva con círculos.

De manera similar, en las Figs. 3.2(c)-(d), el muestreo angular se duplica respecto al anterior, por lo que se tiene el doble de detectores de la mitad de grueso; es decir; para (c) se tienen 40, 80 y 160 detectores de $200\mu\text{m}$, para las líneas punteada, delgada y círculos, respectivamente; mientras que para la Fig. 3.2(d) tenemos 80, 160 y 320 detectores de $100\mu\text{m}$, respectivamente.

Se muestra cómo a medida que el ángulo máximo de muestreo toma valores mayores, la recuperación mejora, y lo hace especialmente para los tamaños pequeños de partícula, lo cual es de esperarse. Es decir, al imponer un límite superior en el dominio del patrón de esparcimiento, es equivalente a “filtrar” la distribución $f(\alpha)$ con un filtro pasa-baja[29]. Son precisamente las “frecuencias” altas eliminadas las que contribuyen a la definición “fina” de

la distribución. Por otra parte, es consecuente que siendo las partículas pequeñas las que esparcen luz a ángulos grandes, la pérdida de la información a estos ángulos represente un deterioro en la distribución recuperada más considerable hacia tales tamaños de partículas.

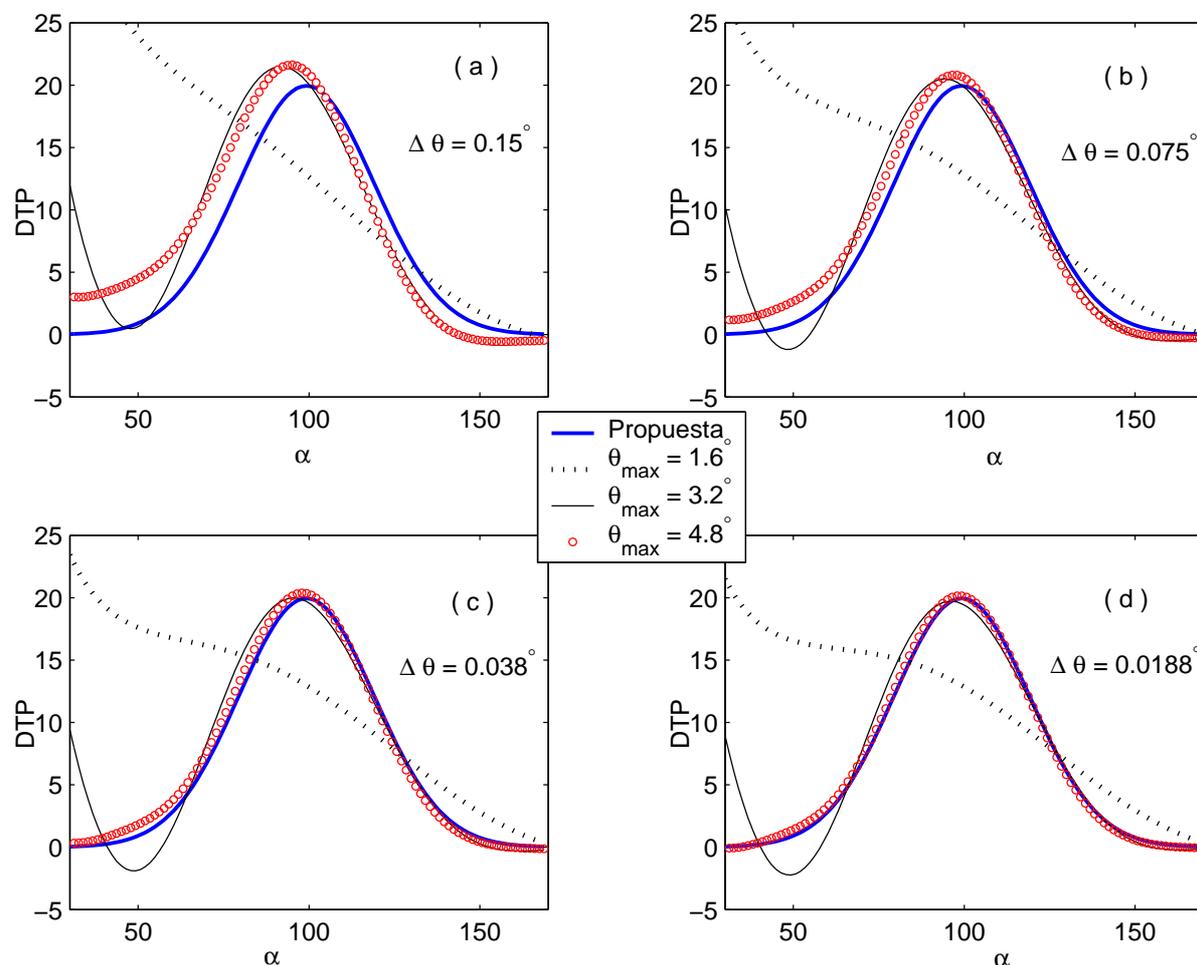


Figura 3.2: Distribución normal recuperada con el método de Chin Shifrin. Cada curva de cada gráfica en [(a)-(d)] utiliza el mismo $\theta_{\text{mín}} = 0.15^\circ$ y un muestreo angular $\Delta\theta$ distinto, con tres valores de θ_{max} en cada curva.

También en las Figs. 3.2(a)-(d) se ilustra el efecto que tiene la selección del intervalo de muestreo $\Delta\theta$ sobre la reconstrucción de la distribución. Es notoria la variación que produce el incrementar el número de muestras (disminuir el intervalo $\Delta\theta$, lo cual disminuye el grosor de los detectores). Considerar un muestreo demasiado pobre genera que la información significativa de la distribución de tamaños no se ajuste a la distribución esperada, y se aleje principalmente en la región de tamaños pequeños. En particular para esta distribución, se encuentra que un $\Delta\theta = 3.3 \times 10^{-4}$ rad (equivalente a tener detectores

de $100\mu\text{m}$ de grosor igualmente espaciados, para una longitud focal de $F = 300\text{mm}$) era suficiente para una buena recuperación.

Al igual que la selección de $\theta_{\text{máx}}$ representa un filtrado de pasa-baja para la recuperación, el truncamiento del patrón por un límite inferior $\theta_{\text{mín}}$ es equivalente a un filtrado pasa-altas de la distribución[29]. Normalmente $\theta_{\text{mín}}$ se escoge lo más cercano al cero, evitando que la componente directa del haz incida sobre el detector. Por lo tanto, la eliminación de las frecuencias más bajas hace que la recuperación pierda detalles de las partículas más grandes, las cuales son las que esparcen luz a estos ángulos pequeños. Para esta distribución de tamaños considerada en particular, se encontró que con un $\theta_{\text{mín}} = 0.0026\text{rad} \approx 0.15^\circ$ es suficiente para tener una recuperación aceptable.

De lo anterior, se puede afirmar que modelar el uso de detectores concéntricos e igualmente espaciados nos permiten obtener mediciones del patrón de esparcimiento y por lo tanto, recuperar las DTP con el método CS de manera aceptable. Siempre y cuando consideremos las limitaciones inherentes del método referentes al muestreo angular discreto y finito. Es decir, dicho método es muy sensible a la información presente en los extremos del patrón de esparcimiento. Lo cual repercute en una cierta inestabilidad en las recuperaciones para partículas pequeñas. Como consecuencia de esto, las recuperaciones obtenidas mejoran sustancialmente al considerar tamaños mayores de partículas.

3.3. Solución por Cuadraturas Numéricas

De la discusión en la sección (2.3), podemos plantear una versión simple del problema inverso del esparcimiento por partículas

$$I(\theta) = \int_{\alpha_i}^{\alpha_f} I(\theta, \alpha, m) f(\alpha) d\alpha. \quad (3.10)$$

Donde $I(\theta)$, es la función de respuesta conocida; α_i y α_f representan el intervalo finito donde se supone *a priori* que está definida la incógnita $f(\alpha)$ a resolver, y el kernel del sistema $I(\theta, \alpha, m)$, puede construirse empleando ambas teorías, Fraunhofer o Mie. Las ecuaciones de esta forma se les conoce como la ecuación inhomogénea de Fredholm del primer tipo.

Por lo tanto, si directamente se usa una cuadratura en la Ec. (3.10) la correspondiente ecuación matricial es

$$\vec{I} = \hat{M} \cdot \vec{f}, \quad (3.11)$$

donde, \vec{I} es un vector de datos de entrada conocidos, \hat{M} es la matriz de esparcimiento, y \vec{f} es el vector solución. Por lo tanto, el problema inverso consiste en hallar el mejor método de solución para invertir la Ec. (3.11).

En principio podemos hallar la inversa de \hat{M} y obtener una solución única

$$\vec{f} = \hat{M}^{-1} \cdot \vec{I} \quad (3.12)$$

cuando \vec{I} es diferente de cero y \hat{M} es invertible. Pero dado que la matriz \hat{M} es casi singular o mal condicionada, el cálculo de su inversa por un método tradicional como eliminación gaussiana o descomposición LU (descomposición por triangulación hacia arriba y triangulación hacia abajo) entre otros, no es el más adecuado. Conduce a soluciones no físicas bastante inestables que generalmente son erróneas y no son únicas. En tales situaciones se buscan soluciones aproximadas.

Las causas principales de que el sistema sea mal condicionado se deben a la discretización de funciones continuas y al diseño de la matriz \hat{M} , que en general permiten pérdidas de información. Para manipular estas pérdidas e inestabilidades inherentes, un número de técnicas han sido desarrolladas, implementando procesos de amortiguamiento para reducir las inestabilidades y proporcionando información a priori de la solución esperada. A estos métodos se les conoce genéricamente como *métodos de regularización lineal restringida*[35], los cuales son simples extensiones del método de mínimos cuadrados para resolver sistemas lineales de ecuaciones. En particular, dos de estos métodos se utilizan en el presente trabajo: el método de descomposición en valores singulares que es una regularización de primer orden y, el método de Phillips Twomey que es una regularización de segundo y tercer orden, los cuales son ampliamente usados para resolver problemas mal condicionados.

3.3.1. Método de Descomposición en Valores Singulares

Como hemos mencionado, el método de descomposición en valores singulares (DVS) puede igualmente usarse con teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer. Por simplicidad introducimos dicho método en el contexto de la aproximación de Fraunhofer.

Se parte de la idea básica de resolver la ecuación integral

$$I(\theta) = \frac{I_0}{k^2 F^2 \theta^2} \int_{\alpha_i}^{\alpha_f} \alpha^2 f(\alpha) J_1^2(\alpha\theta) d\alpha \quad (3.13)$$

mediante una discretización. Por lo que se tiene

$$I(\theta_i) = \sum_{j=1}^{N_t} M(\theta_i, \alpha_j) f(\alpha_j), \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, N_a. \quad (3.14)$$

Donde N_a es el número total de ángulos en que se particiona el intervalo angular donde se mide o simula el patrón de intensidad y N_t es el número de clases de tamaños de partícula

en que se discretiza el continuo de tamaños $[\alpha_i, \alpha_f]$, es decir, tenemos una densidad de tamaños $f(\alpha_j)$ asignada a la clase de tamaño j .

Hemos definido $M(\theta_i, \alpha_j)$ como la matriz de esparcimiento dada por

$$M(\theta_i, \alpha_j) = M_{ij} = \frac{I_0}{F^2 k^2 \theta^2} \alpha_j^2 J_1^2(\alpha_j \theta_i) \Delta \alpha. \quad (3.15)$$

De esta forma, la Ec. (3.13) pasa a ser un sistema lineal de N_a ecuaciones con N_t incógnitas, planteado de manera general por la Ec. (3.11).

Esencialmente, el método DVS es un tratamiento de eigenvectores con eigenvalores pequeños. Modifica el mal condicionamiento de la matriz casi singular manipulando dichos eigenvalores extremadamente pequeños. Resuelve el problema inverso planteado por la Ec. (3.11) mediante la factorización de rango p de la matriz $\hat{M}(i \times j)$, en dos matrices ortonormales, $\hat{U}(i \times p)$ y $\hat{V}(j \times p)$ y, una matriz diagonal $\hat{P}(p \times p)$, tal que

$$\begin{aligned} \hat{M} &= \hat{U} \hat{P} \hat{V}^t \\ \hat{Q} &= \hat{M}^{-1} = \hat{V} \hat{P}^{-1} \hat{U}^t. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Todos los elementos diagonales de la matriz \hat{P} son positivos y están ordenados de mayor a menor. Se les conoce como los valores singulares y los representaremos por σ_i . El grado de singularidad en \hat{M} es determinado por el número de condición, la razón entre el mayor y menor de los valores singulares. Dicho número de condición da una indicación de la precisión de los resultados de la inversión matricial y de la solución de un sistema lineal de ecuaciones. El exponente de este número de condición $[\log_{10}(\text{cond}(\hat{M}))]$ indica el número de cifras significativas que pueden perderse en la solución con eliminación gaussiana (por ejemplo) por errores de redondeo computacional.

La factorización de la Ec. (3.16) siempre puede realizarse sin importar qué tan singular sea la matriz \hat{M} . Si esta matriz es cuadrada, entonces \hat{U} , \hat{V} y \hat{P} son matrices cuadradas del mismo tamaño cuyas inversas se pueden calcular fácilmente: \hat{U} y \hat{V} son ortogonales así que sus inversas están dadas por sus traspuestas, y como \hat{P} es diagonal, su inversa es asimismo una diagonal cuyos elementos son los recíprocos de los valores singulares $1/\sigma_i$, (ver Ec. (3.16)). Es decir, la matriz pseudoinversa de \hat{M} construida explícitamente por el método DVS, es \hat{Q} . Por lo que la solución al problema inverso planteado por la Ec. (3.11) se reduce al producto matricial

$$\vec{f} = \hat{Q} \cdot \vec{I}. \quad (3.17)$$

El único problema para la construcción de esta inversa es que alguno de los elementos σ_i puede ser cero, o numéricamente estar muy cerca de serlo. En este caso, su valor real se puede perder por errores de redondeo. Si más de uno de estos valores singulares tiene este

problema, entonces la matriz es cada vez más singular. Apoyado en esto, el método DVS diagnostica el condicionamiento de la matriz y formalmente se reporta como el mencionado número de condición, dado por la relación $N_{\text{cond}} = \sigma_f/\sigma_0$, donde σ_f y σ_0 representan los valores singulares más grande y más pequeño, respectivamente. En este contexto, una matriz será singular cuando su número de condición sea infinito y será mal condicionada si este número es tan grande que su inverso se aproxime a la precisión manejada por la computadora[35].

Si la inversión se lleva a cabo [Ec. (3.16)], entonces la solución expresada por la Ec. (3.17) se reduce a

$$\vec{f} = \hat{Q} \cdot \vec{I} = (\hat{V}\hat{P}^{-1}\hat{U}^t) \cdot \vec{I} = \sum_{i=1}^{N_t} \frac{\vec{u}_i^t \vec{I}}{\sigma_i} \vec{v}_i. \quad (3.18)$$

Esta expresión muestra como pequeños cambios en \vec{I} pueden provocar cambios muy grandes en la solución \vec{f} si el valor de σ_i es extremadamente pequeño. Esta inestabilidad puede ser evitada si se trunca la Ec. (3.18) y se eliminan los últimos términos, que han sido afectados por errores numéricos en el cálculo, debidos a los valores singulares más pequeños. Matricialmente esto equivale a reemplazar por cero los valores de $1/\sigma_i$ en la matriz \hat{Q} para los casos en que dichos σ_i sean considerablemente más pequeños que σ_1 [35]. Igualar a cero a algunos de los recíprocos de los valores singulares equivale a deshacerse de algunas de las ecuaciones del sistema que se quiere resolver, ya que son precisamente estas ecuaciones las que “contaminan” por errores de redondeo la solución deseada, así que la eliminación de estas ecuaciones permite obtener la solución más cercana a la real[35].

No existe una receta para el número de valores singulares que deben de eliminarse, depende del problema particular de que se trate y de la habilidad y paciencia del usuario. Para ilustrar lo anterior, se utiliza una función de distribución normal, con tamaño modal $\alpha = 200$ y desviación estándar $\sigma = 20$, definida en el intervalo de tamaños [50, 300] y cuya matriz de esparcimiento tiene un número de condición dado por 1.4×10^8 . En la Fig. 3.3 se muestran la totalidad de sus valores singulares.

Por otro lado, la Fig. 3.4 muestra la recuperación de la función de distribución normal propuesta arriba mencionada. Se representa con una línea continua en todas las gráficas de la Fig. 3.4. En (a) tenemos la recuperación con el total de valores singulares sin eliminar de la matriz de esparcimiento, dicha recuperación está representada con la línea punteada. En la Fig. 3.4(b) podemos ver la recuperación (marcada con cruces) cuando se eliminan los primeros 5 valores singulares más pequeños. Es decir, se eliminan 5 ecuaciones del sistema que en total tiene 20 ecuaciones. En la Fig. 3.4(c) se eliminaron 10 valores singulares, mientras que en la Fig. 3.4(d) se eliminaron 17, dejando únicamente 3 ecuaciones, estas últimas dos recuperaciones, también dibujadas con cruces. Como puede verse de

la Fig. 3.4, para esta distribución en particular no existe un número óptimo de valores singulares que recupere aceptablemente la distribución propuesta. La Fig. 3.3 muestra los valores singulares de la distribución recuperada en la Fig. 3.4, para la cual, su matriz de esparcimiento tiene un número de condición dado por 1.4×10^8 .

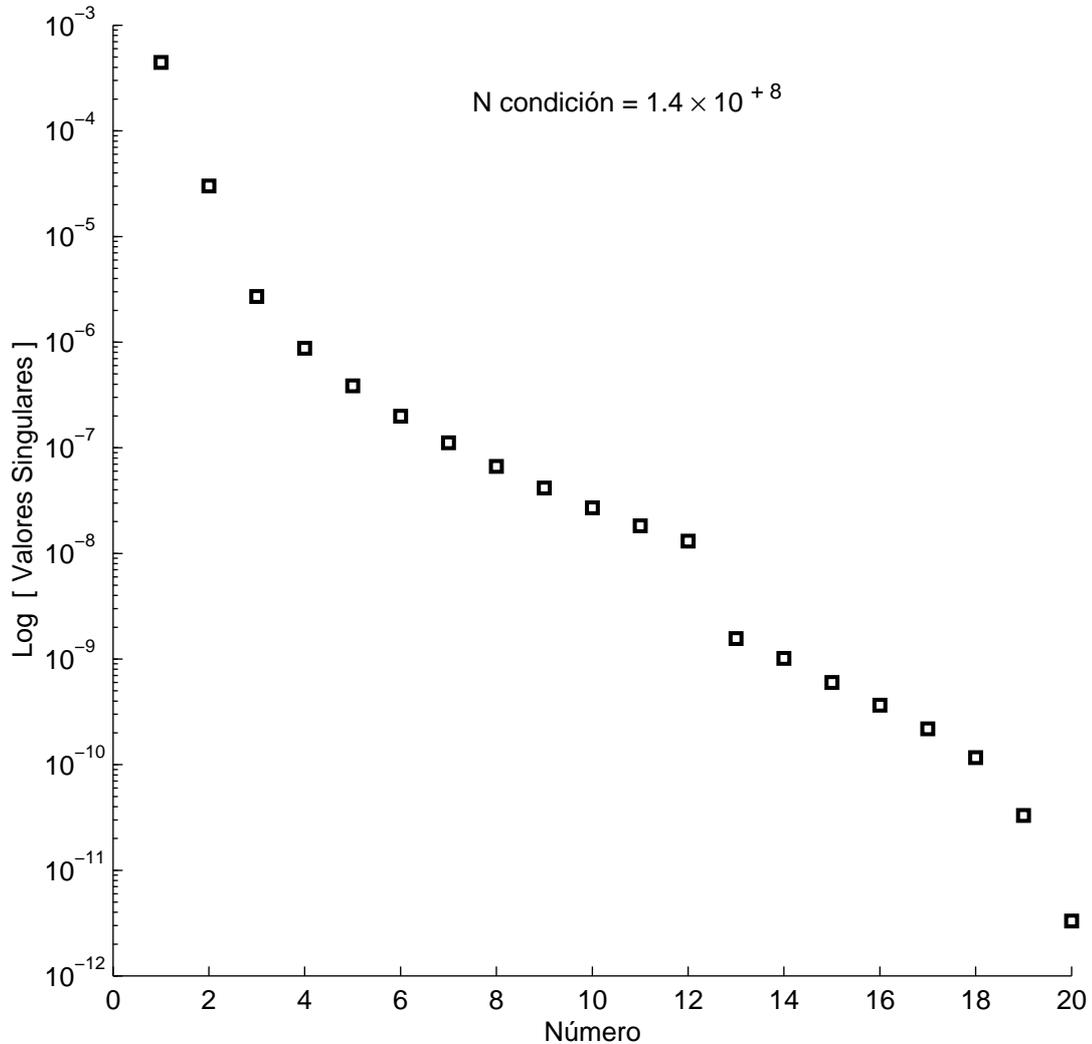


Figura 3.3: Valores singulares típicos de una distribución normal.

Sin embargo, en la Fig. 3.5 se recupera una distribución normal con tamaño modal $\alpha = 100$ y desviación estándar $\sigma = 20$ representada con la línea continua, definida en el intervalo de tamaños $[10, 200]$, la cual muestra claramente una mejoría notable al cambiar el número de ecuaciones suprimidas a través de la eliminación de los valores singulares. Se observa como en la Fig. 3.5(a) la recuperación es bastante burda para el caso en que no se elimina ninguno de los valores singulares más pequeños. Sin embargo a medida que se van eliminando más valores singulares (ver la Fig. 3.5(b) para 5 valores singulares eliminados),

la distribución recuperada empieza a ajustarse a la distribución propuesta, hasta obtener una recuperación aceptable para el caso en que se suprimen 13 valores singulares (Fig. 3.5(c)). La Fig. 3.5(d) muestra los 20 valores singulares para esta distribución con su número de condición que es igual a 2.7×10^8 .

Podemos observar claramente que a pesar de que ambas matrices de esparcimiento, para cada una de las dos distribuciones, discutidas en la Fig. 3.4 y la Fig. 3.5, tienen casi el mismo número de condición. El hecho de que la distribución de la Fig. 3.4 presente una asimetría en la región de tamaños pequeños hace que el método no recupere aceptablemente la distribución. Una interpretación completa de los problemas asociados con este método y su comportamiento en las recuperaciones se discutirá en el siguiente capítulo.

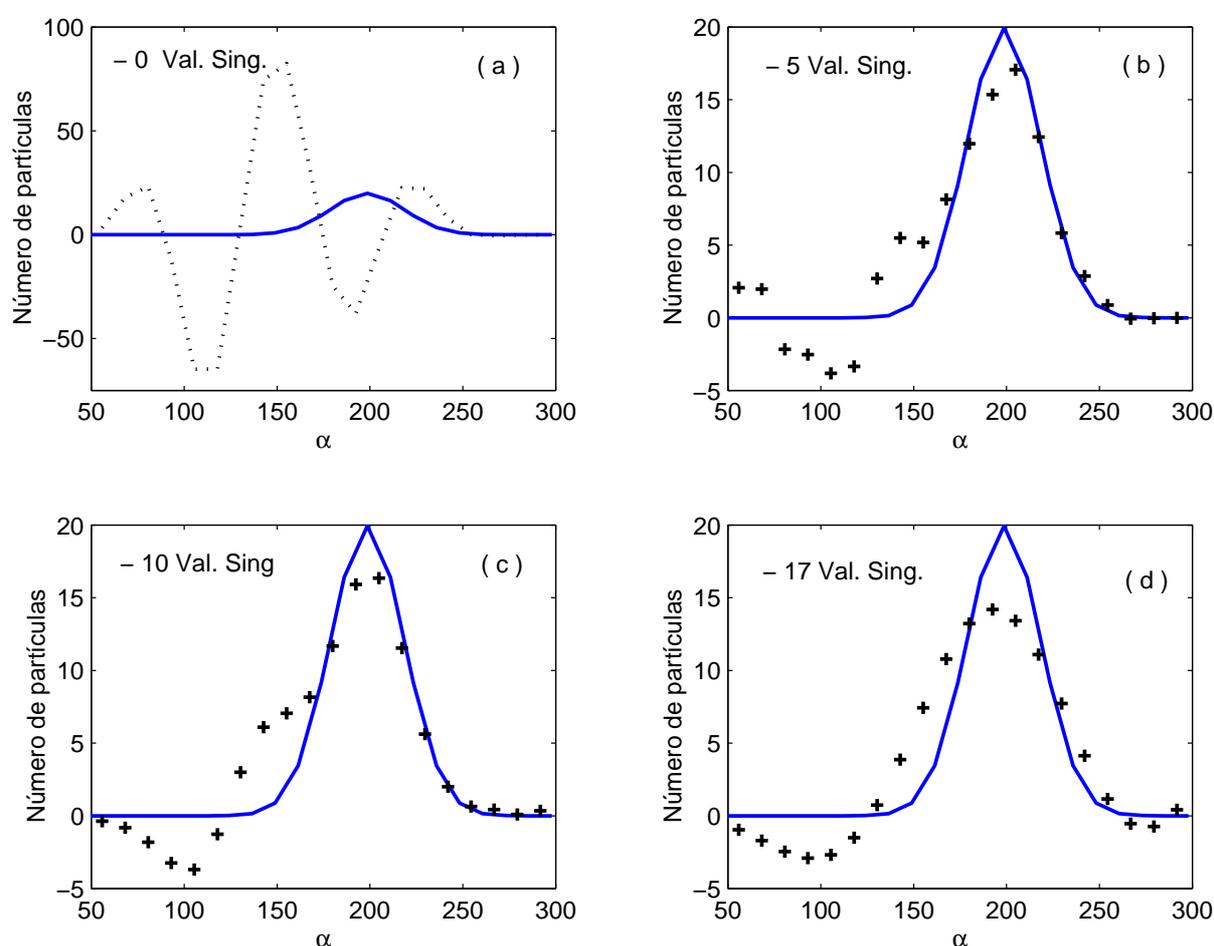


Figura 3.4: Distribución normal recuperada erróneamente con el método de inversión DVS eliminando valores singulares. En (a) no se elimina ningún valor singular (línea punteada), mientras que en las gráficas (b) a la (d) [curvas con cruces], se eliminan 5, 10, y 17 valores singulares, respectivamente.

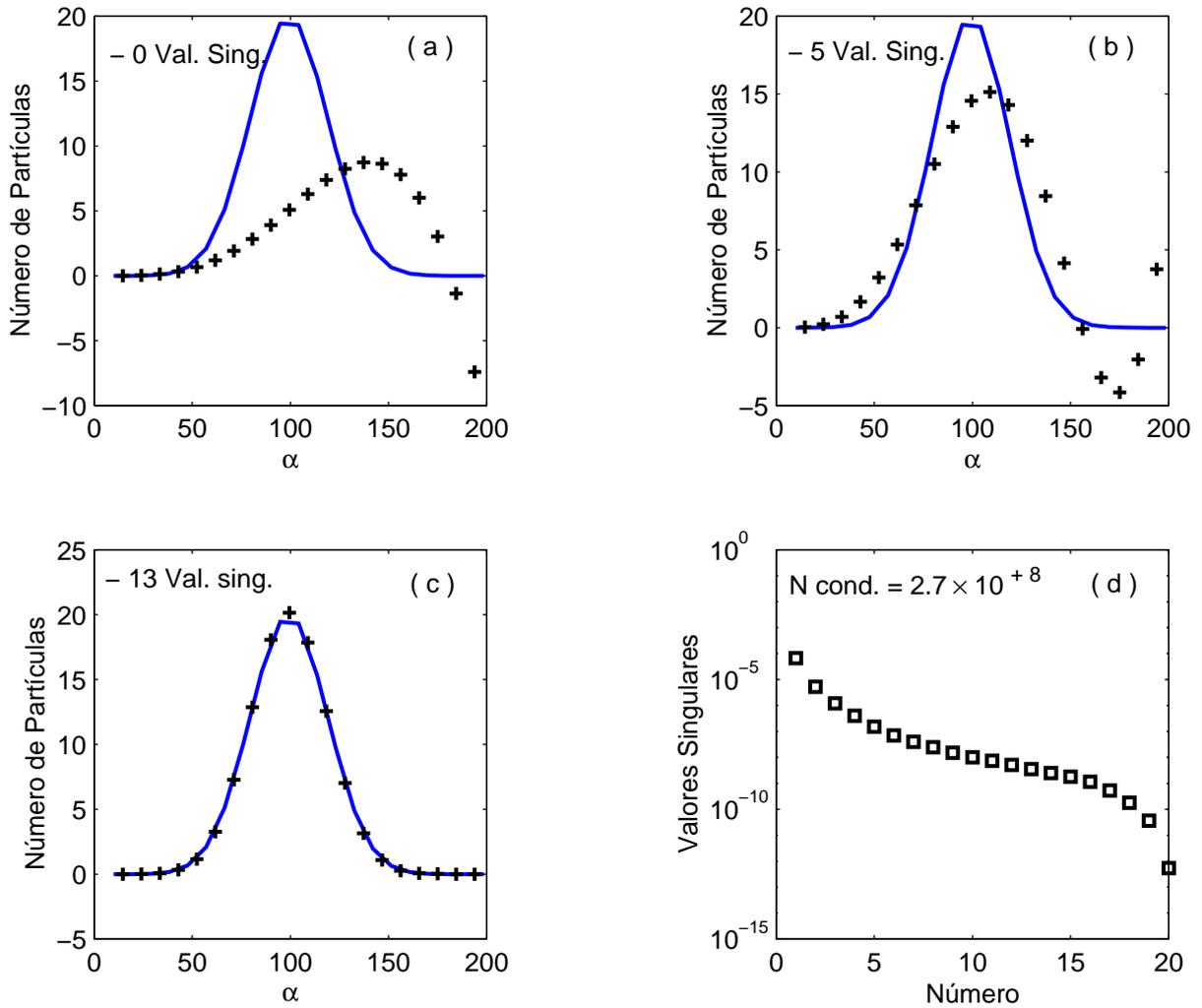


Figura 3.5: Distribución normal recuperada correctamente con el método de inversión DVS, eliminando valores singulares. En (a) no se elimina ningún valor singular (curva marcada con cruces), mientras que en (b) y (c) [curvas también marcadas con cruces], se eliminan 5, y 17 valores singulares, respectivamente. (d) muestra todos los valores singulares de la distribución utilizada.

3.4. Método de Phillips Twomey

Ahora para introducir el método de Phillips-Twomey (PT)[38] también conocido como Regularización de Tikhonov[35], se considera el kernel de partículas esféricas en el contexto de la teoría de Mie. Se trata de otra de las aplicaciones directas de la conversión de la ecuación integral de esparcimiento [Ec. (3.10)] a su forma en cuadraturas [Ec. (3.11)], de

donde la intensidad total está dada por[31]

$$I(\theta) = \int_0^\infty \frac{I_0(i_1 + i_2)}{2k^2 R^2} f(\alpha) d\alpha. \quad (3.19)$$

donde i_1 and i_2 se refieren a la intensidad de la luz vibrando perpendicular y paralelamente al plano de referencia, respectivamente. Información sobre el tamaño de partículas y el índice de refracción relativo m , está contenida en el kernel que contribuye a la intensidad total y R es la distancia de la partícula al plano de observación.

El método PT usa la incorporación de información *a priori* de la solución esperada, como estrategia para obtener una solución estable en un problema mal condicionado. Establece un compromiso entre el modelo de ajuste y la unicidad de la solución, con la estabilidad o suavidad de la solución, donde el modelo de ajuste es el acuerdo entre los datos de entrada y la solución a la Ec. (3.11).

El método PT postula un problema de minimización, lo cual inevitablemente nos lleva a un intercambio entre dos funcionales de optimización para calcular una matriz inversa que resuelva el problema planteado en la Ec. (3.11). Una funcional $\mathcal{A}(\vec{f})$, optimiza el modelo de ajuste entre los datos y la solución, mientras que la otra funcional $\mathcal{B}(\vec{f})$, optimiza la estabilidad o suavidad de la solución. Por lo tanto, la solución consiste en minimizar

$$\mathcal{A}(\vec{f}) + \gamma \mathcal{B}(\vec{f}) = \frac{1}{\gamma} \mathcal{A}(\vec{f}) + \mathcal{B}(\vec{f}), \quad \text{para } 0 \leq \gamma < \infty, \quad (3.20)$$

donde, γ es un multiplicador Lagrangiano que representa un parámetro de regularización ajustable. Es un número real y positivo que “pesa” la información *a priori* incluida en la funcional de la optimización y que también se le conoce como parámetro de suavizado[38]. La Ec. (3.20) puede interpretarse como la minimización de $\mathcal{A}(\vec{f})$ bajo la restricción de $\mathcal{B}(\vec{f})$ o viceversa[35].

Como γ varía de 0 a ∞ , la solución \vec{f} varía a lo largo de la curva de intercambio que minimiza a \mathcal{A} y a \mathcal{B} , como se muestra en la Fig. 3.6. Si únicamente se minimiza \mathcal{A} , el acuerdo o definición entre los datos y la solución esperada es muy bueno, pero la solución es inestable u oscilante, reflejando que \mathcal{A} sola, típicamente define un problema de minimización altamente degenerado. Aquí es donde entra \mathcal{B} , la cual incorpora un juicio *a priori* de las propiedades de la solución como la suavidad de la curva y parametriza la estabilidad de la solución con respecto a las variaciones en los datos. Si la funcional \mathcal{B} es minimizada sin tomar en cuenta \mathcal{A} , produce una solución bastante suave o estable que no tiene ninguna relación con los datos medidos.

El considerar la funcional de estabilidad \mathcal{B} tiene el beneficio adicional de generar soluciones únicas a partir de matrices degeneradas, es decir, problemas de inversión indeterminados o con matrices singulares. Por ejemplo, la solución de mínimos cuadrados

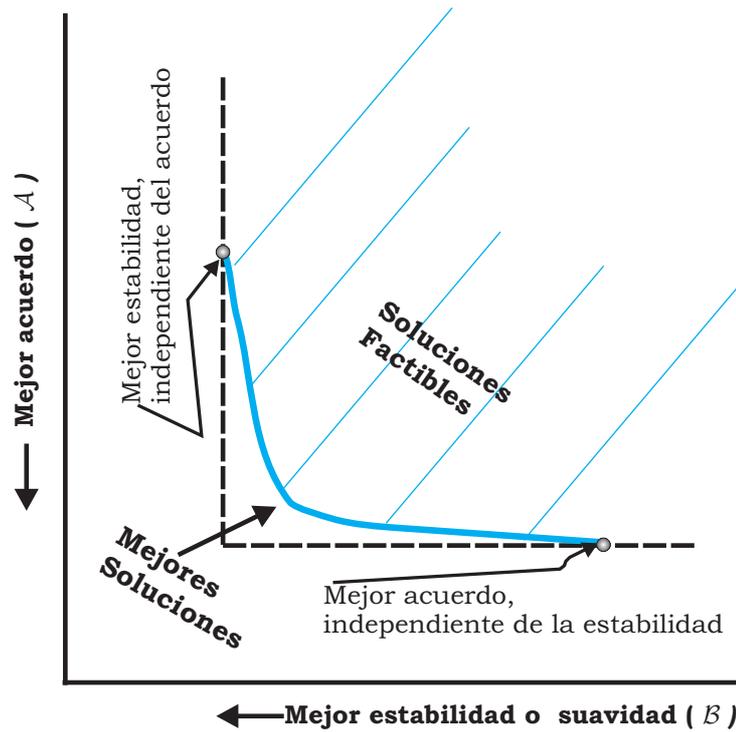


Figura 3.6: Intercambio entre las dos optimizaciones.

de un sistema indeterminado no tiene una solución única. Sin embargo, si una función cuadrática no degenerada se agrega al criterio de mínimos cuadrados, entonces el resultado será una restricción cuadrática no degenerada que está bien condicionada, así que puede invertirse[35].

En su forma más simple, el método PT postula la minimización del problema en el sentido de mínimos cuadrados. La funcional $\mathcal{A}(\vec{f})$ se toma como el vector residual de la ecuación matricial de cuadraturas

$$A(\vec{f}) = \hat{M} \cdot \vec{f} - \vec{I}; \quad (3.21)$$

mientras que la funcional $\mathcal{B}(\vec{f})$, puede considerarse por mediciones de la suavidad en términos de primeras derivadas o derivadas de orden superior de la \vec{f} . Por lo que para tener claridad en cuanto a la forma como se deduce el método PT, se considera oportuno presentar aquí la discusión que realiza Press *et al.*[35].

Si se supone *a priori* que la función incógnita $f(\alpha)$ no difiere mucho de una constante, entonces una funcional razonable para minimizar debe ser proporcional a su primera derivada

$$\mathcal{B}(\vec{f}) \propto \int [\vec{f}'(\alpha)]^2 d\alpha \propto \sum_{\nu=1}^{N_t-1} [\vec{f}_\nu - \vec{f}_{\nu+1}]^2, \quad (3.22)$$

debido a que es no negativa e igual a cero sólo cuando $\vec{f}(\alpha)$ es constante. En la segunda relación (proporcionalidad) se define $\vec{f}_\nu \equiv \vec{f}(\alpha_\nu)$, con ν el índice que corre sobre todos los tamaños en que se discretiza la función incógnita y se asume que las α_ν 's están uniformemente espaciadas.

Por lo tanto, la segunda forma de \mathcal{B} se puede escribir matricialmente como

$$\mathcal{B} = \|\hat{G} \cdot \vec{f}\|^2 = \vec{f} \cdot (\hat{G}^t \cdot \hat{G}) \cdot \vec{f} \equiv \vec{f} \cdot \hat{H} \cdot \vec{f}, \quad (3.23)$$

donde, $\|\cdot\|$ denota la norma euclidiana, \vec{f} es el vector con componentes f_ν , con $\nu = 1, \dots, N_t$, \hat{G} es la matriz de primeras diferencias con $N_t - 1$ filas por N_t columnas dada por

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

y \hat{H} es una matriz cuadrada de dimensiones $N_t \times N_t$

$$\hat{H} = \hat{G}^t \cdot \hat{G} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

En general, como puede verse de (3.24), la matriz \hat{G} tiene unas cuantas filas menos que columnas. Lo que se traduce como una ventaja del método PT, debido a que nos permite hallar soluciones en el caso general en que la matriz de cuadraturas no es cuadrada. Asimismo, la matriz \hat{H} por su construcción siempre es simétrica. Entonces, finalmente tenemos que el problema de minimización se reduce a

$$\mathcal{A} + \gamma \mathcal{B} = \|\hat{M} \cdot \vec{f} - \vec{I}\|^2 + \gamma (\vec{f} \cdot \hat{H} \cdot \vec{f}) \longrightarrow \min. \quad (3.26)$$

La ecuación anterior [Ec. 3.26] puede reducirse a un conjunto lineal de *ecuaciones normales*[35], donde las componentes f_ν de la solución satisfacen el conjunto de N_t ecuaciones con N_t incógnitas,

$$\sum_{\rho} \left[\left(\sum_i M_{i\nu} M_{i\rho} \right) + \gamma H_{\nu\rho} \right] f_{\rho} = \sum_i M_{i\nu} I_i \quad \nu = 1, 2, \dots, N_t \quad (3.27)$$

o en notación vectorial,

$$(\hat{M}^t \cdot \hat{M} + \gamma \hat{H}) \cdot \vec{f} = \hat{M}^t \cdot \vec{I}. \quad (3.28)$$

Para un valor dado de γ se llega a una solución única dada por [38],

$$\vec{f} = [\hat{M}^t \cdot \hat{M} + \gamma \hat{H}]^{-1} \cdot (\hat{M}^t \cdot \vec{I}). \quad (3.29)$$

donde $\hat{H} = \hat{G}^t \cdot \hat{G}$ sirve como la matriz de regularización para suprimir las oscilaciones espurias que aparecen en la solución del sistema lineal básico de la Ec. (3.11), el cual era mal condicionado. Sin embargo, debido a que ahora la Ec. (3.28) es un sistema lineal de ecuaciones bien condicionado la matriz inversa $[\hat{M}^t \cdot \hat{M} + \gamma \hat{H}]^{-1}$ puede calcularse usando técnicas estándar del álgebra lineal. En este trabajo se utilizó descomposición triangular hacia abajo y hacia arriba (descomposición LU)[41].

Aunque γ debe determinarse al resolver el problema inverso, una propuesta inicial para dicho parámetro es sugerida[35] dado que γ permanece constante en la minimización del problema. El valor inicial se elige como

$$\gamma_0 = \frac{\text{Tr}(\hat{M}^t \cdot \hat{M})}{\text{Tr}(\hat{H})}, \quad (3.30)$$

para que tienda a hacer que las dos partes de la minimización tengan pesos comparables, y a partir de éste, se pueda alcanzar un buen ajuste entre la distribución propuesta y la distribución recuperada. Detalles de la selección óptima del parámetro γ serán discutidos en el siguiente capítulo, donde se presentan los resultados numéricos.

La elección de \hat{G} , y \hat{H} , en términos de la primera derivada de \vec{f} , como funcional para estabilizar la solución, representa la forma más simple y didáctica de introducir el método PT. En general, es una secuencia obvia de derivadas de orden superior. Por lo tanto, si ahora *a priori* creemos que el vector de solución varía linealmente, entonces una posible funcional de suavizado \mathcal{B} puede ser la segunda derivada de \vec{f} dada por

$$\mathcal{B}(\vec{f}) \propto \sum_{\nu=1}^{N_t-2} [-\vec{f}_\nu + 2\vec{f}_{\nu+1} - \vec{f}_{\nu+2}]^2, \quad (3.31)$$

y así mismo, para cuando se suponen funcionales de orden superior para la solución o, cuando no se obtienen resultados óptimos como se discutirá en el capítulo siguiente.

Regresando al operador de segundas derivadas, de manera análoga a la Ec. (3.22), la Ec. (3.31) puede expresarse en forma matricial como en la Ec. (3.23), sólo que la matriz

\hat{G} ahora es la matriz de segundas diferencias dada por

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

y \hat{H} , es el operador diferencial de segundo orden que impone una condición de suavizado sobre \vec{f}

$$\hat{H} = \hat{G}^t \cdot \hat{G} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & -4 & 5 & -2 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Al igual que antes, se llega a una solución única dada por la Ec. (3.29), donde la matriz inversa $[\hat{M}^t \cdot \hat{M} + \gamma \hat{H}]^{-1}$, nuevamente se calcula por descomposición LU.

El problema principal del método PT es hallar un valor óptimo para γ que regularize lo suficiente para hallar una solución estable, conjuntamente con un operador de suavizado con el orden diferencial correcto. Dicho inconveniente en el presente trabajo, fue superado utilizando un método iterativo, lo cual inevitablemente conduce a problemas computacionalmente más demandantes. En el siguiente capítulo abundaremos sobre esto último.

3.5. Método Basado en una Estrategia Evolutiva

Las estrategias evolutivas son una familia de métodos de optimización y aprendizaje, inspirados en la noción de la evolución biológica. Son relativamente inmunes a mínimos locales lo cual las convierte en herramientas muy convenientes para resolver problemas de optimización no convencionales. El presente método de inversión evolutivo se fundamenta en el algoritmo descrito por Vázquez *et al.*[42]. Fue implementado para usarlo con la aproximación de Fraunhofer, con el objetivo principal de recuperar una DTP a partir de un

patrón de intensidad simulado numéricamente, resolviendo un problema de optimización donde una función objetivo es minimizada[43]. Trabaja con un conjunto de soluciones potenciales al problema de interés llamadas individuos, de las cuales la mejor se reduce a un vector de números reales que se aproxima a la distribución buscada, evaluada mediante una función de aptitud que depende estrictamente del problema a resolver. La población inicial evoluciona sucesivamente hacia mejores regiones del espacio de búsqueda, mediante operadores evolutivos de recombinación, mutación y selección. La recombinación favorece la mezcla de información de los padres hacia sus descendientes, la mutación introduce innovación en las poblaciones, mientras que el ambiente libera una métrica de calidad llamada aptitud, la cual es favorecida por el proceso de selección en los individuos más aptos[43].

Una estrategia evolutiva puede implementarse como sigue[43], [44]:

- El problema es definido como la búsqueda de un vector real n -dimensional \vec{x} que está asociado con el extremo de una funcional $\mathcal{F}(\vec{x}) : R^n \rightarrow R$. El cual sin pérdida de generalidad, se implementa como un proceso de minimización.
- Una población de vectores padres, \vec{x}_ℓ , $\ell = 1, \dots, M$, es seleccionada al azar. La distribución de prueba inicial es uniforme y se repiten los siguientes dos pasos hasta que un criterio de paro es alcanzado.
- Un vector hijo, \vec{o}_ℓ es creado de cada padre \vec{x}_ℓ , $\ell = 1, \dots, M$, genera ℓ hijos (donde $\ell < M$) aplicando recombinación a una fracción de los padres (cruza), crea $M - \ell$ hijos aplicando cambios al azar al resto de los padres (mutación).
- De los resultantes $2M$ individuos, elige los mejores M como padres para la próxima iteración (selección) ordenándolos de mayor a menor, quedándose con los M vectores que poseen el error más pequeño.
- El proceso de generar nuevas pruebas y seleccionar las de menor error continua hasta que una solución suficiente es alcanzada o un valor objetivo en la función objetivo es obtenido. En este trabajo la función objetivo es basada en el espacio Euclidiano y el valor objetivo se halla cuando se obtiene la mínima distancias entre el patrón de intensidad analizado y el patrón de intensidad hallado por el algoritmo.

El algoritmo toma como datos de entrada un patrón de intensidad simulado y nos da como salida la DTP que mejor se ajusta a este. Esta operación es explicada por medio del siguiente pseudocódigo:

$$t = 0 \quad ;$$

Población inicial $\mathbf{P}(0)$ = $[\vec{x}_1(0), \dots, \vec{x}_M(0)]$
 where \vec{x}_ℓ = $[x_{\ell,1}, \dots, x_{\ell,5}, \sigma_{\ell,1}, \dots, \sigma_{\ell,5}]$,
 $\ell \in \{1, \dots, M\}$.
 Evalúa la aptitud de $\mathbf{P}(0)$: $\{\text{fitness}(\vec{x}_1(0)), \dots, \text{fitness}(\vec{x}_M(0))\}$.
While (Condition de paro \neq true) **do** $\vec{o}(t)$:
 genera ($M * rx$) hijo
 usa recombinación,
 $[\vec{y}_1(t), \dots, \vec{y}_{M*rx}(t)]$;
 genera ($M * (1 - rx)$) hijos
 usa mutación,
 $[\vec{y}_{M*rx+1}(t), \dots, \vec{y}_M(t)]$,
 donde (rx) = constante $\in [0, 1]$ rango.
 Evalúa la aptitud de $\mathbf{P}(t)$: $\{\text{fitness}(\vec{y}_1(t)), \dots, \text{fitness}(\vec{y}_M(t))\}$.
 Dado $\mathbf{P}(t+1)$ los M individuos de $\mathbf{O} \cup \mathbf{P}(t)$ con la aptitud más alta.
 t = $t + 1$;
End. (3.34)

Cada padre \vec{x}_ℓ representa un vector real con un candidato a solución para el problema. Está formado por el vector de elementos llamados variables objeto $x_{\ell,p}$ con un parámetro estrategia respectivo $\xi_{\ell,p}$

$$\vec{x}_\ell = [x_{\ell,p}, \xi_{\ell,p}], \quad \text{donde, } p = 1, \dots, 5, \quad (3.35)$$

así, cada padre representa el conjunto de parámetros necesarios para describir una DTP, dada por medio de la siguiente asignación.

$$\begin{aligned}
 x_{\ell,1} &\equiv \text{parámetro de tamaño medio,} \\
 x_{\ell,2} &\equiv \text{desviación estándar,} \\
 x_{\ell,3} &\equiv \text{extremo inferior del dominio,} \\
 x_{\ell,4} &\equiv \text{extremo superior del dominio,} \\
 x_{\ell,5} &\equiv \text{parámetro de tamaño más pequeño.}
 \end{aligned} \quad (3.36)$$

El proceso que evalúa la aptitud en cada padre \vec{x}_ℓ consiste en los siguientes dos pasos:

- Un patrón de intensidad I_ℓ es construido de \vec{x}_ℓ sustituyendo sólo los primeros cinco elementos de \vec{x}_ℓ de la Ec. (3.35) para generar la distribución $f(\alpha)$. Entonces es calculado el patrón de intensidad total.

- Considerando cada elemento en la matriz I_ℓ como una dimensión en un espacio de distancias Euclidiano, se asigna como la aptitud la distancia Euclidiana entre I_ℓ y el patrón de intensidad de referencia I_{ref} . Así que la aptitud está dada por,

$$\text{fitness} = \sqrt{\sum_{i=1}^j [I_{\ell_i} - I_{ref_i}]^2}, \quad (3.37)$$

donde j es la longitud del patrón de intensidad.

Los operadores de mutación y recombinación trabajan con todo el vector extendido \vec{x}_ℓ from Ec. (3.35). Este contiene la desviación estándar que realiza las mutaciones. El operador de recombinación produce un hijo \vec{y} seleccionando al azar con probabilidad uniforme de la población corriente \mathbf{P} , los padres para cada componente del vector $x_{\rho,1}$ and $x_{\rho,2}$ calculan una suma pesada de las correspondientes componentes de los padres

$$\vec{y}_{rec,\ell} = r_\ell \vec{x}_{\rho 1,\ell} + (1 - r_\ell) \vec{x}_{\rho 2,\ell}, \quad (3.38)$$

donde $r_\ell \sim \mathcal{U}([0, 1])$ or $r_\ell = 1/2$ and $(\rho 1, \rho 2) \sim \mathcal{U}(1, \dots, M)$ para cada hijo.

El operador de mutación cambia al azar el vector $\vec{y}_{mut,\ell}$ como ocurre en la naturaleza, agregando a cada variable objeto $x_{\ell,p}$ una variable al azar tomada de una distribución normal con media igual a cero y una desviación estándar igual a $\xi_{\ell,p}$, esto es

$$\vec{y}_{mut,\ell} = [x_{\ell,1} + mut(0, \xi_{\ell,1}), x_{\ell,2} + mut(0, \xi_{\ell,2}), \dots, mut(0, \xi_{\ell,p})]. \quad (3.39)$$

Rechenberg[45] propuso un ajuste determinístico del parámetro estrategia durante la evolución llamado *the 1/5–success rule*, la cual refleja que en promedio una salida de cada cinco mutaciones debe causar una mejora en la función objetivo para alcanzar mejores razones de convergencia. Si más de 1/5 de las mutaciones son exitosas, el parámetro estrategia ξ es incrementado, de lo contrario es disminuido. El operador de selección evalúa la aptitud en la población total y elige los mejores M individuos que formarán la nueva generación de soluciones.

Las estrategias evolutivas son una clase de algoritmos de optimización, que encuentran una solución cercana al óptimo global aplicando operadores inspirados en los mecanismos de la evolución biológica. El resultado que se tiene de haber simulado la evolución natural, es que una población inicial de individuos no extraordinarios mejora cuando los padres son reemplazados por mejores descendientes. Así, el mejor individuo en la población final, puede ser una solución altamente evolucionada para el problema.

Por otro lado, la función objetivo es la conexión entre la estrategia evolutiva y el problema que se va a resolver. Una función objetivo tiene como entrada las variables

objetivo de un individuo y como salida un número que es una medida del funcionamiento de dicho individuo en el problema a resolver. Por lo tanto, el papel que juega la función objetivo en la estrategia evolutiva es el mismo que el medio ambiente en la evolución natural. La interacción de un individuo con su medio ambiente proporciona una medida de su aptitud para sobrevivir, y la interacción de las variables objetivo con la función objetivo proporciona una medida de aptitud que la estrategia evolutiva usa cuando lleva a cabo la etapa de selección.

De lo expuesto en esta Sección, es importante recordar que las estrategias evolutivas se enfocan a resolver problemas de optimización de funciones reales, por lo tanto, las reglas de recombinación, mutación y selección se encuentran altamente estructuradas. Esto hace que el espacio de búsqueda esté determinado por valores continuos que permiten hacer una mejor exploración en menos tiempo. No obstante, resulta un algoritmo lento debido a que el programa fue implementado en lenguaje de programación Matlab[46], donde el algoritmo se escribe en una forma muy simple ya que Matlab es un interprete en el que las operaciones primero se interpretan y después se ejecutan. Un compilador como Fortran, daría una serie de optimizaciones que podrían mejorar la velocidad del programa, sin embargo, no forma parte del presente estudio. Finalmente, para mostrar el funcionamiento de la estrategia evolutiva como un procedimiento de optimización global aplicado en el análisis de tamaño de partículas, en el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos.

Capítulo 4

Resultados Numéricos

En el capítulo anterior se discutieron los métodos de inversión utilizados en la presente tesis. A continuación se presentan los resultados numéricos que se obtienen mediante simulaciones del fenómeno de esparcimiento por DTP's representadas por funciones analíticas monomodales. Para esto, se propone una distribución con parámetros conocidos, como las que se discutieron en la Sec. (3.35), definidas en un intervalo de parámetros de tamaño bastante amplio $\alpha = [1, 250]$, de las cuales, mediante la teoría de Mie [ver la Ec. (3.10)] se calcula numéricamente un patrón de esparcimiento, a partir del cual se recupera la distribución propuesta mediante uno de los cuatro métodos de inversión. Lo anterior es con la finalidad de tener claras las limitaciones de la aproximación de Fraunhofer y dar elementos de juicio para usar óptimamente, tanto la teoría de Mie como la aproximación de Fraunhofer.

Se Abordan estos problemas en el análisis de DTP's considerando los siguientes puntos:

- Comparación de los patrones de intensidad generados por la teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer.
- Análisis de los parámetros relevantes que intervienen tanto en la aproximación de Fraunhofer, como en la teoría de Mie.
- Discusión de los problemas de convergencia inherentes que se presentan en el cálculo numérico de un patrón de intensidad con la teoría de Mie.
- Identificar con mucha certeza una vecindad en los parámetros de tamaños que delimite la validez de la aproximación de Fraunhofer en la recuperación de una DTP.
- Comparación del rendimiento de los métodos CS y DVS cuando se recupera una DTP con la aproximación de Fraunhofer.

- Comparación del rendimiento de los métodos CS y un algoritmo evolutivo cuando se recupera una DTP con la aproximación de Fraunhofer.
- Comparación del rendimiento de los métodos de inversión PT y DVS cuando se aplican en la recuperación de una DTP con teoría de Mie.

4.1. Convergencia Numérica en la Teoría de Mie

En lo que respecta a la teoría de Mie que calcula un patrón de esparcimiento, se presenta el problema de saber cual es el número de términos óptimo que se tienen que considerar en las series infinitas involucradas para lograr una buena convergencia. Para cuantificar lo anterior, es necesario regresar a la Sec. 2.3.1 y calcular las funciones de amplitud de las Ecs. (2.13) y (2.14), con un número suficientemente grande de términos en las series para asegurar una buena convergencia. Estrictamente se trata de un número infinito de términos, lo cual hace inviable las soluciones con teoría de Mie. Sin embargo, como se hace frecuentemente en Física, se recurre a consideraciones que hacen válida la solución en ciertas circunstancias especiales.

Es conocido que el número de términos necesarios para lograr una buena convergencia en los cálculos, es proporcional al parámetro de tamaño α [15], por lo que resulta tardado realizar los cálculos cuando las partículas son muy grandes. Además, si ahora se trata de distribuciones con partículas de diferente tamaño, es imperativo observar el comportamiento del patrón de intensidad. Por lo tanto, analizaremos diferentes distribuciones con diferente número de términos en las series.

En la Fig. 4.1(a) se muestran los patrones de intensidad de Mie y Fraunhofer generados por una distribución que contiene partículas pequeñas en el intervalo de tamaños $[1, 10]$. Cuando únicamente se consideran 5 términos en las series de las funciones de amplitud para la teoría de Mie la convergencia es muy pobre, sin embargo, para 10 y 15 términos, la intensidad mejora respecto al primer cálculo; además de que con 10 y 15 términos el resultado es el mismo. Esto ilustra en particular para esta distribución, que para tener una convergencia adecuada con la teoría de Mie es necesario considerar por lo menos 10 términos, lo cual coincide con la aseveración de que el número de términos en las series debe ser proporcional al parámetro de tamaño. Lo anterior se interpreta como: El número de términos en las series debe ser proporcional al parámetro de tamaño de la partícula más grande que se encuentra presente en la distribución. Asimismo se observa que es inútil considerar más de 10 términos en las series de las funciones de amplitud, para esta distribución particular, debido a que no mejora nada y lo único que hace es aumentar el tiempo de cómputo.

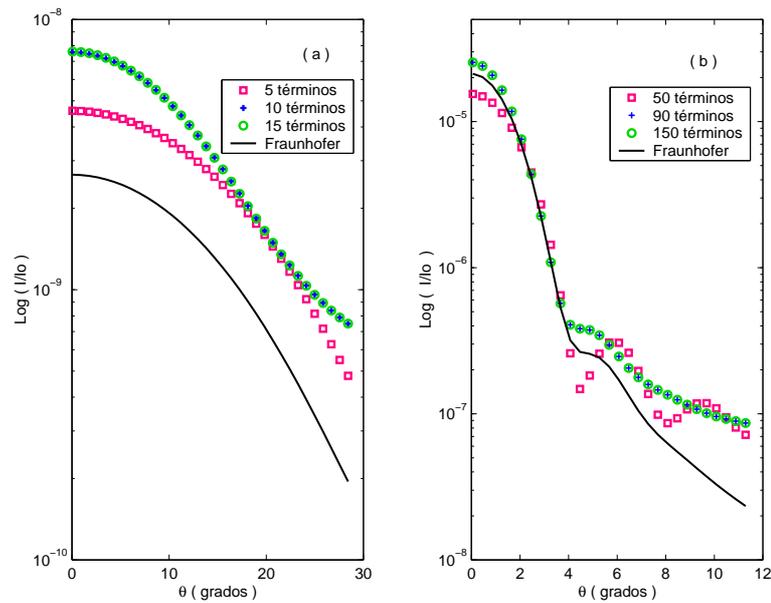


Figura 4.1: Convergencia para partículas pequeñas. (a) muestra los patrones de intensidad de Fraunhofer y Mie para una distribución con partículas en el dominio de tamaños [1,10] y diferente número de términos en las series de Mie; mientras que en (b) se muestra lo mismo que (a) para una distribución en el dominio de tamaños [10,90].

Lo anterior por supuesto, es factible preverse cuando se está trabajando con distribuciones analíticas conocidas, sin embargo, en el caso más general no se conoce el dominio de la distribución que se está buscando, por lo tanto, es necesario considerar tantos términos como el algoritmo sea capaz de calcular. En estas gráficas, el cálculo de la intensidad mediante la aproximación de Fraunhofer, nos sirve como punto de referencia para discernir cuando es buena o mala la convergencia en los cálculos con la teoría de Mie. De antemano sabemos que en este intervalo de tamaños, la aproximación de Fraunhofer es una estimación extremadamente burda al cálculo exacto que representa la teoría de Mie.

En la Fig. 4.1(b) se muestra una distribución que contiene partículas en el intervalo de tamaños [10, 90]. Si se consideran 50 términos en las series de las funciones de amplitud, la convergencia es muy pobre respecto al cálculo con Fraunhofer, pero con 90 y 150 términos, la intensidad que se obtiene mejora y el resultado es el mismo para ambos números de términos. Por lo tanto, para tener una convergencia adecuada con la teoría de Mie en este intervalo de tamaños, es necesario por lo menos, 90 términos en las series. También se observa de la Fig. 4.1(b), que en la región angular entre 0° y 4° , el patrón de intensidad que genera la aproximación de Fraunhofer es muy similar al obtenido con la teoría de Mie, con el número correcto de términos en las series. Esto, pone de manifiesto que para

partículas muy grandes, la mayoría de la luz se esparce hacia adelante en la dirección de propagación a ángulos pequeños, por lo que podemos anticipar que efectivamente la teoría escalar de difracción describe adecuadamente el fenómeno de esparcimiento para este caso.

Se considera otro par de distribuciones ahora con partículas grandes. La Fig. 4.2(a) muestra los patrones de intensidad para una distribución con partículas en el intervalo de tamaños $[80, 220]$. Para 150 términos podemos observar una discrepancia mínima, comparando con el caso de 220 y 255 términos. Es evidente que a partir de 220 términos la convergencia del cálculo de Mie es satisfactoria.

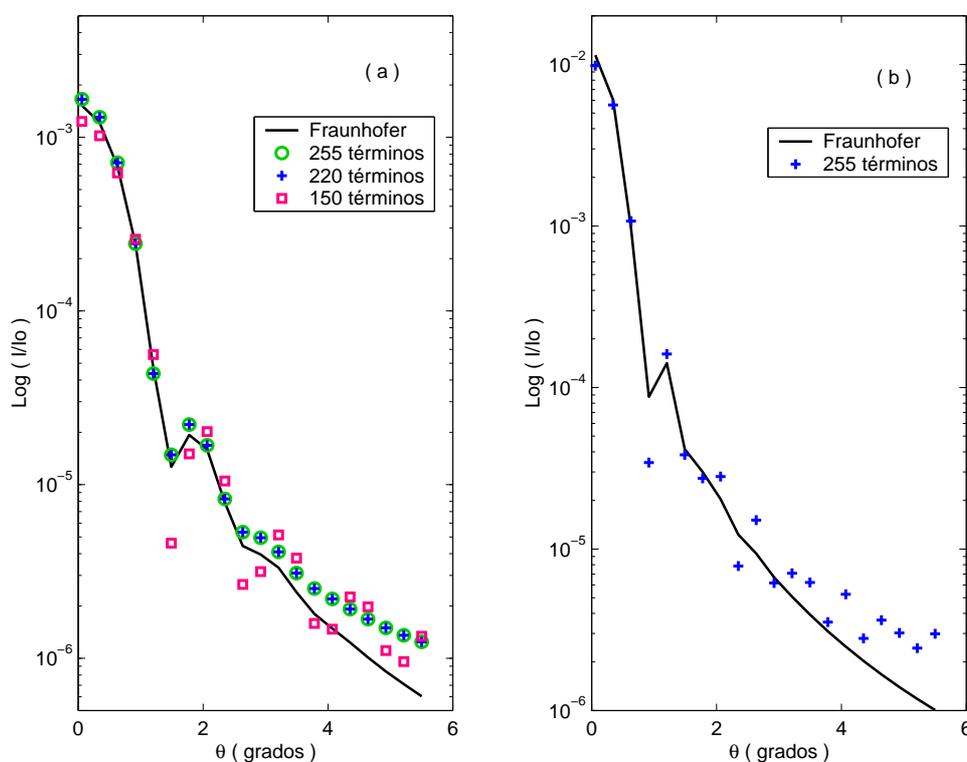


Figura 4.2: Convergencia para partículas grandes. (a) muestra los patrones de intensidad de Fraunhofer y Mie para una distribución con partículas en el dominio de tamaños $[80, 220]$ y diferente número de términos en las series de Mie; mientras que (b), muestra lo mismo que (a) para una distribución en el dominio de tamaños $[150, 350]$, únicamente con 255 términos en las series de Mie.

Asimismo, en la Fig. 4.2(b) se muestran los cálculos para una distribución definida en el intervalo de tamaños $[150, 350]$. Para este caso, sólo hicimos el cálculo con 255 términos en las series, debido a que es el orden máximo de polinomio de Legendre que la versión de MatLab[46] utilizada en el presente trabajo puede calcular en una PC. Es decir, el uso

de la teoría de Mie en el presente trabajo, se encuentra limitada al cálculo de polinomios de Legendre de orden 255 como máximo.

De lo anterior podemos concluir que para distribuciones de partículas monomodales, el número mínimo de términos en las series infinitas que involucra el cálculo de las funciones de amplitud de Mie, debe ser del orden del parámetro de tamaño de la partícula más grande presente en la distribución. Así que para la Fig. 4.2(b), no podemos afirmar con certeza si el cálculo de Mie converge adecuadamente, y por lo tanto, si es correcto. El único punto de referencia que nos queda, es la comparación con el cálculo de Fraunhofer, el cual para este caso particular, coincide en un intervalo angular pequeño con el cálculo de Mie, a pesar de no cubrir el criterio de convergencia, pero esto, generalmente no es del todo confiable. Por ejemplo, para una distribución con partículas en el intervalo de tamaños [200, 370], los cálculos con Mie y Fraunhofer no coinciden como podemos ver en la Fig. 4.3. Es aquí donde muestra su importancia la aproximación de Fraunhofer en la descripción del esparramiento de luz por partículas esféricas grandes.

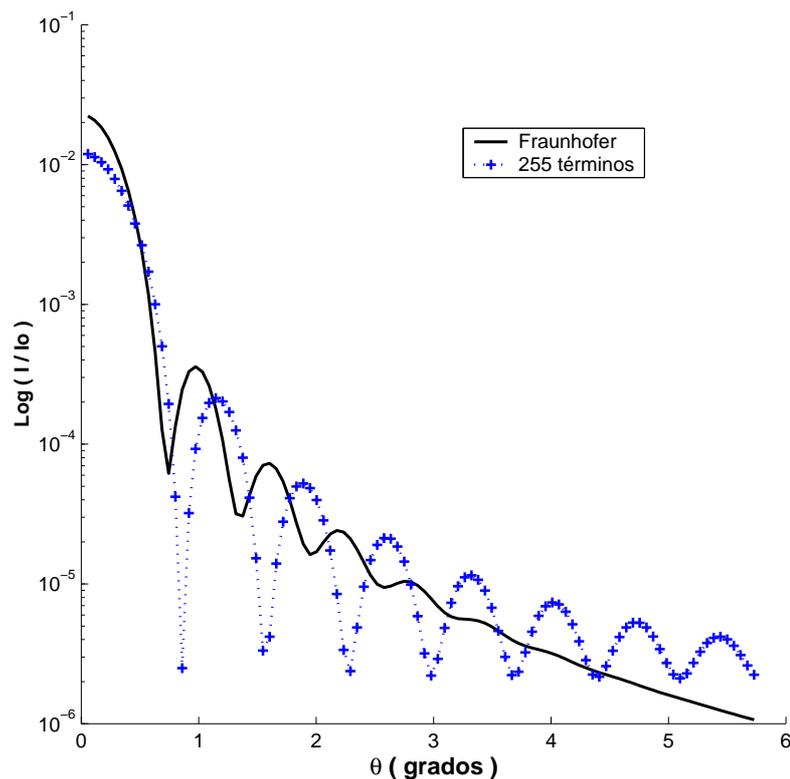


Figura 4.3: Convergencia inapropiada para el cálculo del patrón de intensidad con la teoría de Mie, por no utilizar un número apropiado de términos en las series de las funciones angulares del kernel, ya que se trata de tamaños muy grandes.

4.2. Comparación de Patrones de Intensidad

Se utilizaron dos conjuntos distintos con tres tipos de distribuciones cada uno. Dos distribuciones normales que están centradas en los parámetros de tamaños, $\bar{\alpha} = 10$ y $\bar{\alpha} = 20$, con desviación estándar $\sigma = 3$ y $\sigma = 5$, respectivamente. Dos distribuciones gamma y dos distribuciones lognormal que tienen sus picos modales en la misma vecindad donde se encuentran los de las distribuciones normales. Las seis distribuciones se generaron con el mismo intervalo de muestreo en los tamaños ($\Delta\alpha = 2$). La Fig. 4.4(a) muestra las tres distribuciones definidas en la vecindad del parámetro de tamaño $\bar{\alpha} = 10$, definidas en el intervalo $[1, 30]$, y en la Fig. 4.4(b) las otras tres funciones en la vecindad del parámetro de tamaño $\bar{\alpha} = 20$ definidas en el intervalo de tamaños $[1, 40]$.

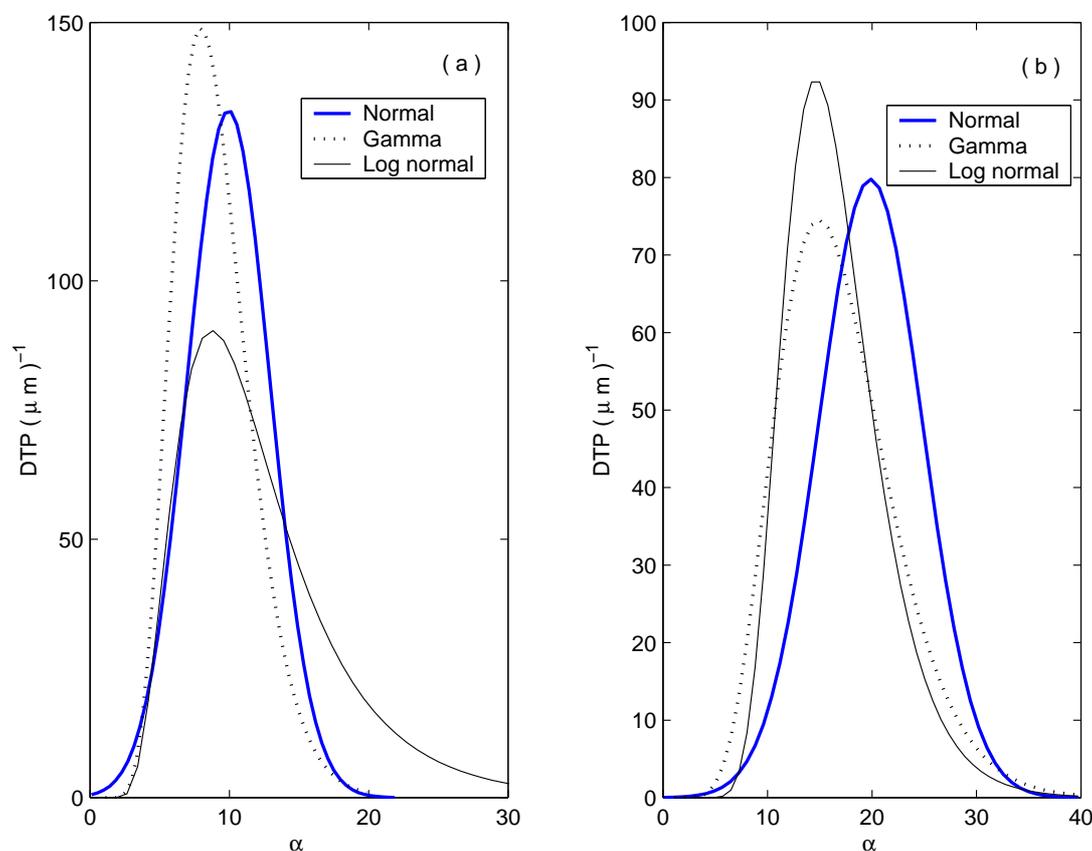


Figura 4.4: Distribuciones con partículas pequeñas. (a) muestra las distribuciones con pico modal alrededor de $\bar{\alpha} = 10$, definidas en el dominio de tamaños $[1, 30]$, y (b) las distribuciones alrededor de $\bar{\alpha} = 20$, definidas en el dominio de tamaños $[1, 40]$.

La Fig. 4.5 ilustra el comportamiento de los patrones de intensidad que generan la teoría de Mie (cuadros) y la aproximación de Fraunhofer (cruces) en un intervalo angular

$[0^\circ, 10^\circ]$. Las Figs. 4.5(a), (b) y (c), corresponden a los patrones de intensidad calculados con las distribuciones de partículas con $\alpha \leq 30$ de la Fig. 4.4(a) centradas en la vecindad de $\bar{\alpha} \sim 10$. Mientras que las Figs. 4.5(d), (e) y (f), corresponden a las distribuciones de partículas con $\alpha \leq 40$ de la Fig. 4.4(b), centradas en la vecindad de $\bar{\alpha} \sim 20$. Se observa que en una región angular pequeña ($0^\circ < \theta \leq 6^\circ$) las intensidades tienden a coincidir, independientemente del tipo de distribución del que se trate, debido a que la tendencia es similar en las tres distribuciones definidas en la misma vecindad. Esto, como veremos a continuación, es más evidente a medida que consideremos distribuciones desplazadas hacia tamaños mayores. Por lo que, a pesar de que en la región de ángulos pequeños las curvas se acercan un poco, podemos afirmar que la aproximación de Fraunhofer difiere de la teoría de Mie si las partículas que forman la distribución son menores a $\alpha = 40$, como en este caso.

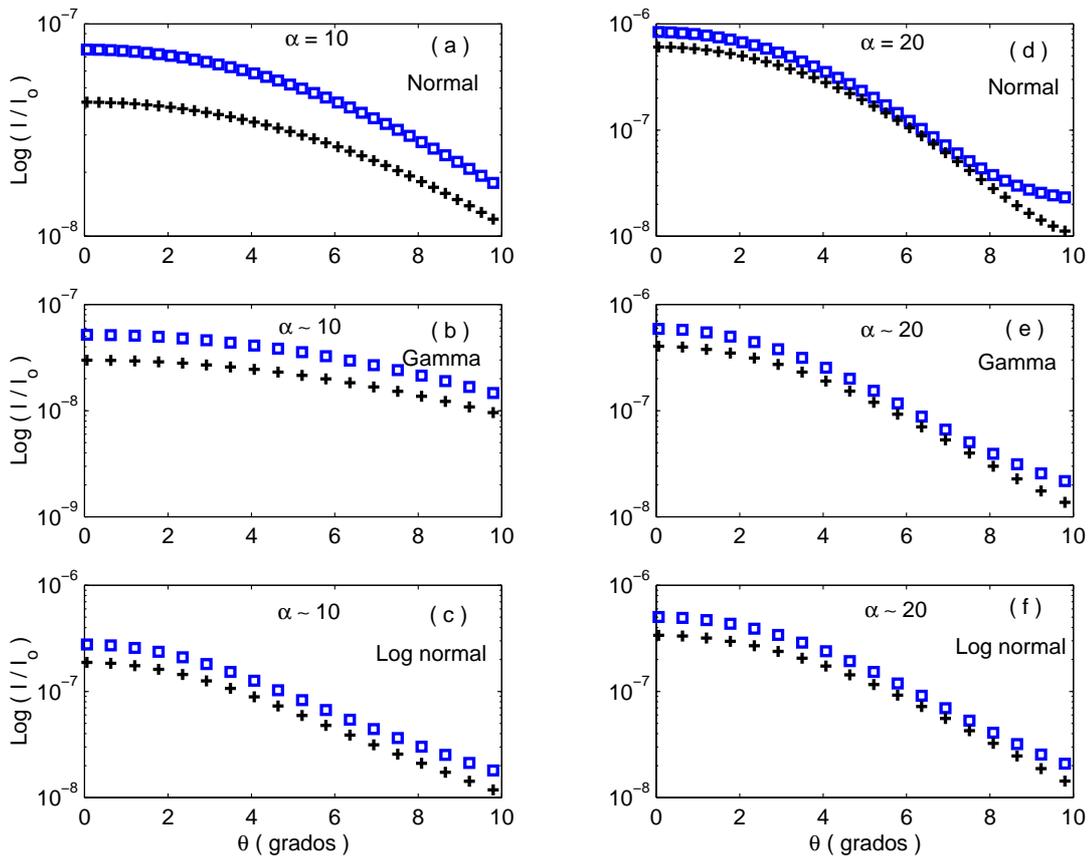


Figura 4.5: Comparación de patrones de intensidad para partículas pequeñas. En todas las curvas, los cuadros corresponden a la teoría de Mie y las cruces a la aproximación de Fraunhofer. El parámetro α en la parte superior de cada gráfica, representa el tamaño modal correspondiente a cada distribución de la Fig. 4.4.

A continuación se considera otro conjunto de seis distribuciones definidas ahora en el intervalo de tamaños $[1, 100]$: Dos distribuciones normales con la misma desviación $\sigma = 15$, centradas en $\bar{\alpha} = 30$ y $\bar{\alpha} = 50$, respectivamente; dos distribuciones gamma y dos distribuciones lognormal, definidas respectivamente en la misma vecindad que las normales. La Fig. 4.6 muestra dichas distribuciones las cuales para diferenciarlas de las discutidas en Fig. 4.4 llamadas pequeñas y dado que ahora las distribuciones contienen partículas tanto grandes como pequeñas, por lo que son más anchas, les llamaremos distribuciones con partículas intermedias. Mostraremos más adelante que dichas distribuciones de partículas intermedias definen un intervalo que hemos denominado *intervalo crítico de validez*, debido a que nos servirá en la siguiente sección para delimitar la validez de la aproximación de Fraunhofer, mediante un valor umbral para el pico modal de las distribuciones a recuperar que nos define un criterio de validez para la aproximación de Fraunhofer.

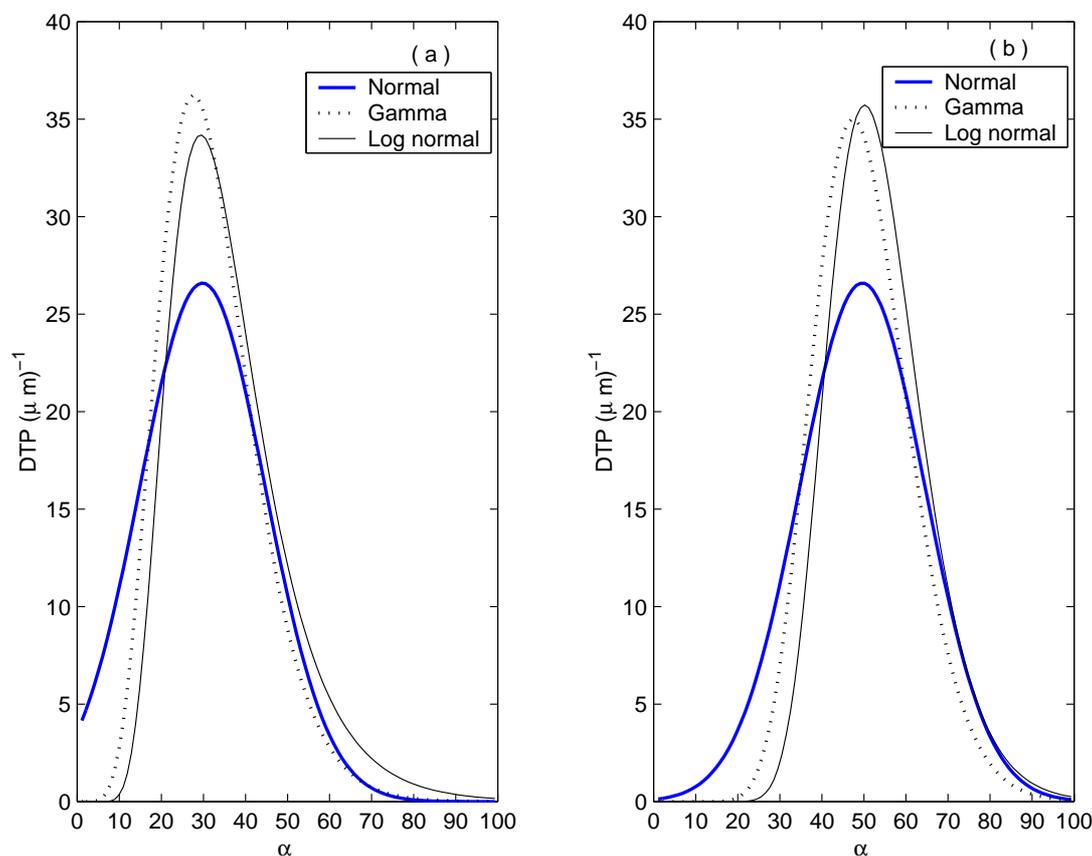


Figura 4.6: Distribuciones con partículas intermedias. En (a) se muestran las distribuciones centradas alrededor de $\bar{\alpha} = 30$ y, en (b) las centradas alrededor de $\bar{\alpha} = 50$.

La Fig. 4.7 muestra los patrones de intensidad calculados con Mie (cuadros) y Fraunhofer (cruces) para cada una de las distribuciones de partículas intermedias de la Fig.

4.6. El acuerdo entre ambas intensidades se hace más fuerte en la misma región angular observada para partículas pequeñas ($0^\circ < \theta \leq 6^\circ$). El acuerdo entre dichas teorías es ligeramente diferente dependiendo de donde está el pico modal de la distribución, y debido a que las distribuciones consideradas aquí contienen una cantidad importante de partículas pequeñas (más del 50%). Por lo tanto, es difícil anticipar si todo el intervalo angular $0^\circ < \theta \leq 6^\circ$, es el intervalo angular de validez de Fraunhofer. Además, si se regresa a los patrones de intensidad de las distribuciones de partículas pequeñas de la Fig. 4.5, se nota como a medida que la cantidad de partículas pequeñas es mayor, el acuerdo entre ambas teorías se ve afectado, aún hablando únicamente de la región angular $0^\circ < \theta \leq 6^\circ$ [compare las Figs. 4.5(a) y 4.5(d)]. Es por eso que a continuación consideraremos un conjunto de distribuciones que no contengan partículas pequeñas con $\alpha < 30$.

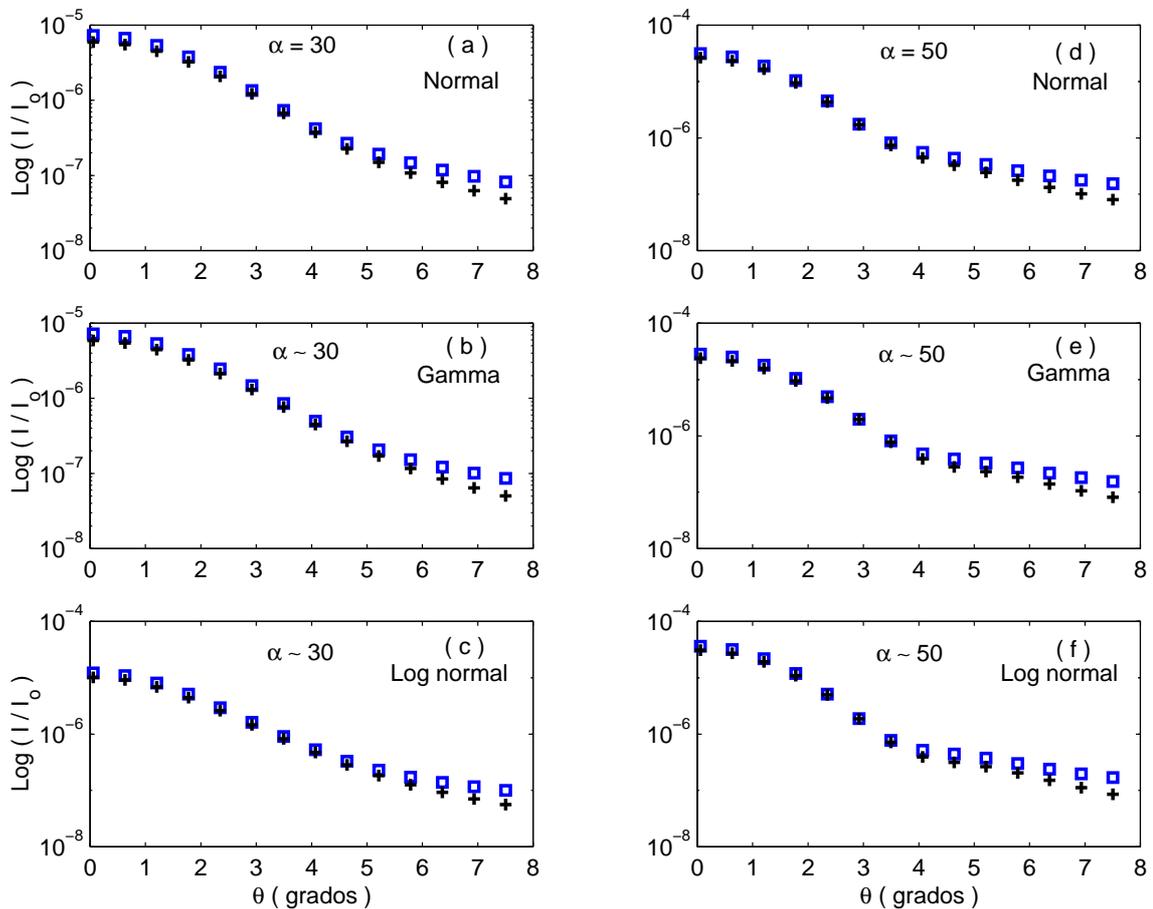


Figura 4.7: Comparación de patrones de intensidad para partículas intermedias. En todas las curvas, los cuadros corresponden a la teoría de Mie y las cruces a la aproximación de Fraunhofer. El parámetro α en la parte superior de cada gráfica, representa el tamaño modal correspondiente a cada distribución de la Fig. 4.6.

Corremos el pico modal de las distribuciones propuestas hacia tamaños mayores. Una distribución normal se define en el intervalo $[30, 170]$, centrada en $\bar{\alpha} = 100$ con desviación $\sigma = 20$. Mientras que otra se define en el intervalo $[50, 250]$, con su pico modal en $\bar{\alpha} = 150$ y desviación $\sigma = 30$. También se definen parejas de distribuciones gamma y lognormal en estas vecindades. La Fig. 4.8 muestra dichas distribuciones de partículas grandes.

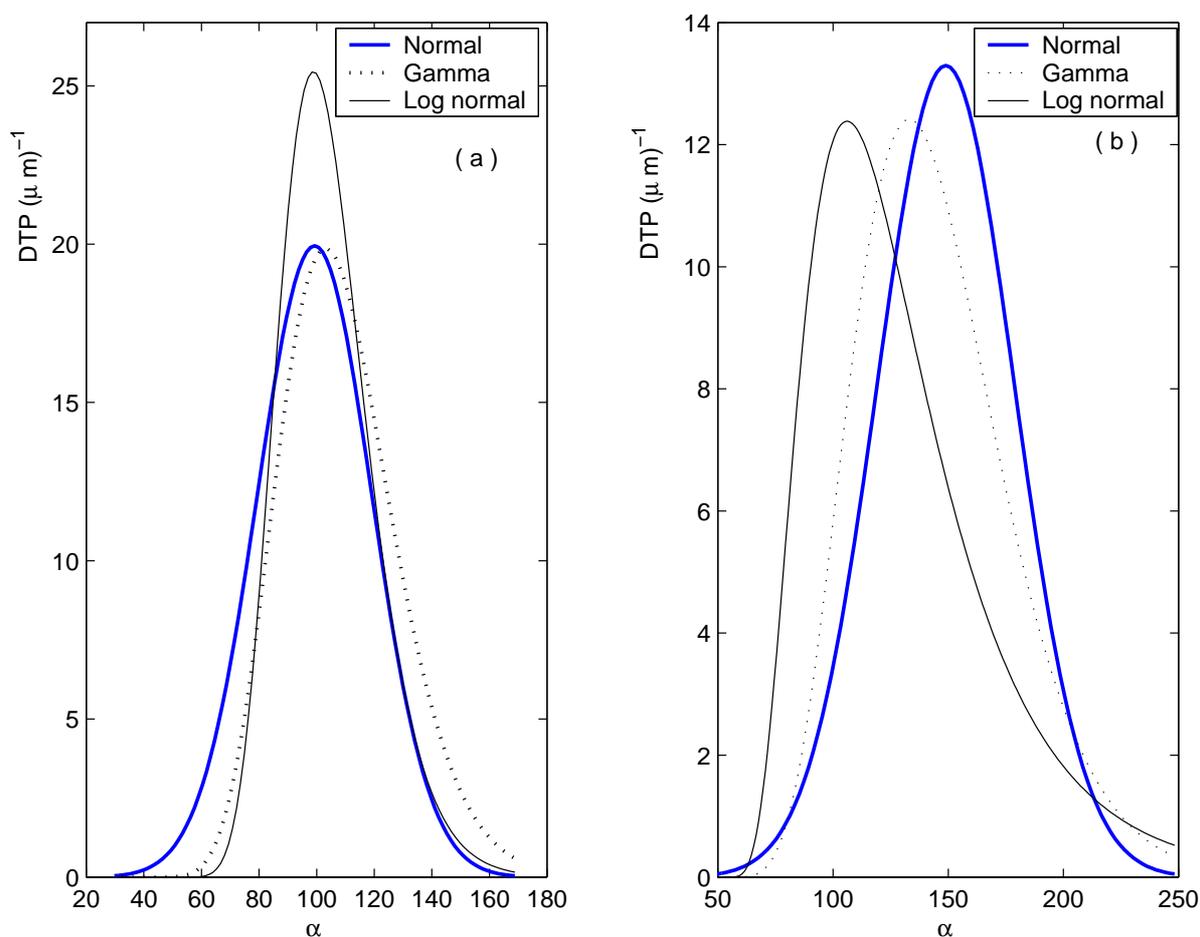


Figura 4.8: Distribuciones con partículas grandes. En (a) se muestran las distribuciones centradas alrededor de $\bar{\alpha} = 100$ y, en (b) las distribuciones centradas cerca de $\bar{\alpha} = 150$.

Los patrones de intensidad para las denominadas partículas grandes se muestran en la Fig. 4.9. En el intervalo angular $(0^\circ, 4^\circ)$, las intensidades coinciden para las distribuciones definidas en el intervalo de tamaños $[30, 170]$; mientras que para las distribuciones definidas en el intervalo de tamaños $[50, 250]$ coinciden ambos patrones de intensidad hasta antes de $\theta = 3^\circ$, aproximadamente. Dicho comportamiento, pone de manifiesto la dependencia inversa proporcional entre los tamaños de las partículas y los ángulos de esparcimiento, los cuales a su vez, están acotados por la aproximación paraxial $\sin \theta \approx \theta$, implícita en un

patrón de Airy característico.

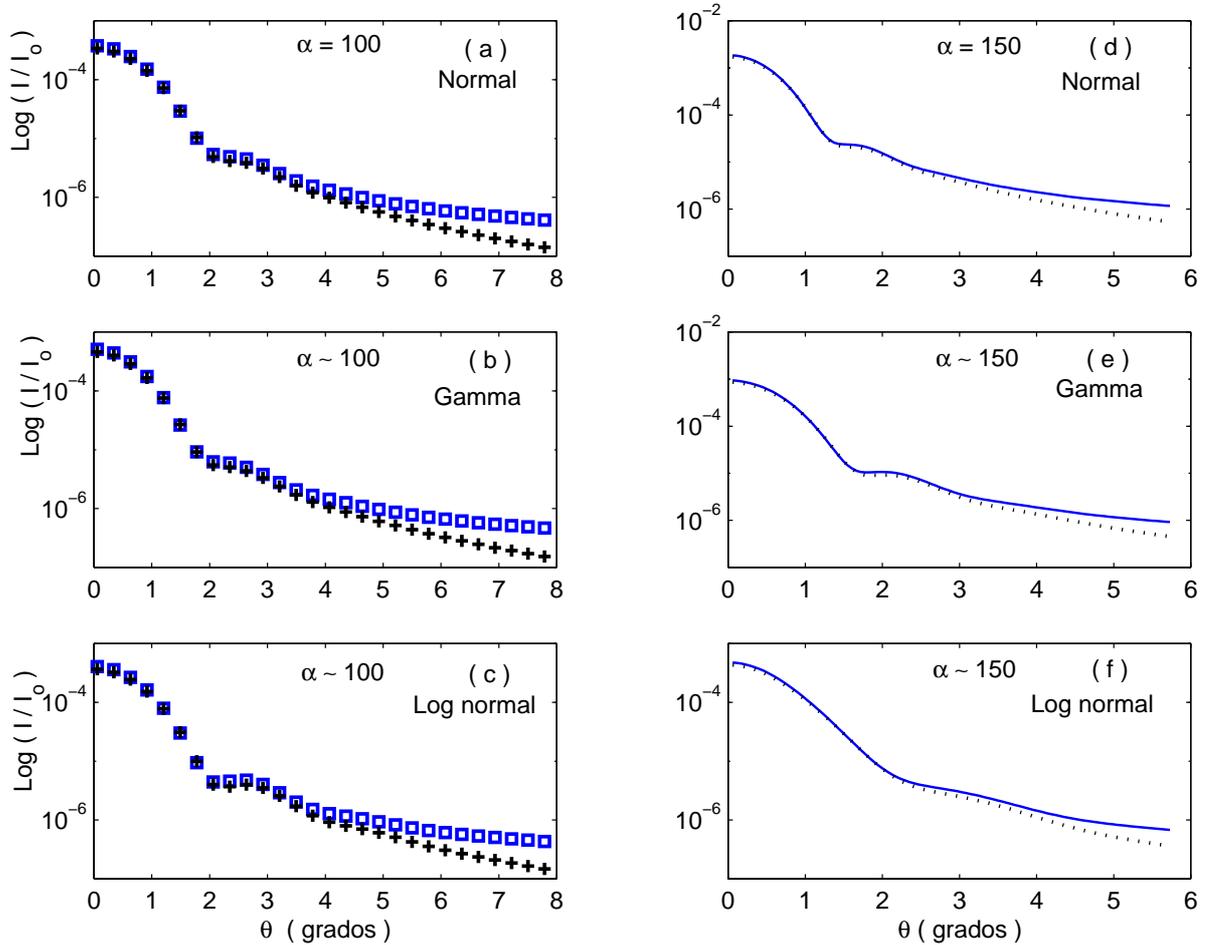


Figura 4.9: Comparación de patrones de intensidad de partículas grandes. En cada gráfica, el parámetro α en la parte superior, representa el tamaño modal correspondiente a cada distribución de la Fig. 4.8. En (a)-(c) los cuadros representan la teoría de Mie y las cruces la aproximación de Fraunhofer, mientras que de (d)-(f) la línea continua representa la teoría de Mie y la línea punteada la aproximación de Fraunhofer.

De la similitud entre los patrones de intensidad, producidos para los tres tipos de distribución definidas en una misma región de tamaños, es factible que la región crítica de validez (en los tamaños) de la aproximación de Fraunhofer, no presentará una dependencia fuerte debida al tipo de distribución del que se trate. Además, no es posible definir un intervalo angular donde la aproximación de Fraunhofer sea válida estrictamente. Lo más que podemos hacer es, concluir de manera diferenciada que existe una región angular crítica cuya cota superior pertenece al intervalo $[3^\circ, 5^\circ]$. Ángulos que a su vez, dependen de los porcentajes de partículas pequeñas, intermedias y grandes, presentes en la distribución

como a continuación se argumenta:

- Para distribuciones que contienen únicamente partículas de tamaños entre $[50, 250]$ como las de la Fig. 4.8(b), se puede usar la aproximación de Fraunhofer en un intervalo angular entre $(0^\circ, 3^\circ]$.
- Para distribuciones que contienen únicamente partículas de tamaños entre $[30, 170]$ como las de la Fig. 4.8(a), se puede usar la aproximación de Fraunhofer en un intervalo angular entre $(0^\circ, 4^\circ]$.
- Para distribuciones de partículas intermedias en las que alrededor del 50 % de estas poseen un tamaño entre $[30, 100]$, como las de la Fig. 4.6, se puede usar la aproximación de Fraunhofer en un intervalo angular entre $(0^\circ, 5^\circ]$.
- Para distribuciones cuyas partículas son pequeñas (más del 50 % ≤ 30), como las de la Fig. 4.4, se descarta definitivamente el uso de la aproximación de Fraunhofer. Incluso en un intervalo angular grande como el de la Fig. 4.5 dado por $(0^\circ, 10^\circ]$.

4.3. Criterio de Validez de la Aproximación de Fraunhofer

En general, la teoría de Mie es válida en la región de tamaños y longitud de onda donde la aproximación de Fraunhofer puede utilizarse, sin embargo, es importante comparar ambas técnicas para obtener un criterio que nos permita decidir con certeza cuando es apropiado recuperar una DTP con la aproximación de Fraunhofer, en función del tipo de distribución, el método de inversión y la dependencia angular. Un límite inferior en el parámetro de tamaño para partículas esféricas individuales ha sido determinado por algunos autores[36], [37], sin embargo, cuando se trata de un conjunto de partículas que obedecen a una distribución de tamaños, la literatura no es tan clara. Por lo que algunos autores se limitan a mencionar que la aproximación es válida si: El tamaño de las partículas es varias veces mayor que la longitud de onda de la luz que las analiza, y si la contribución dominante de las partículas, refiriéndose al patrón de esparcimiento que generan, se encuentra en la dirección de propagación en una región angular muy pequeña. Dejando al lector con una idea bastante vaga de la validez y factibilidad de dicha aproximación.

Para este estudio se consideran cinco valores de la moda característicos para cada uno de los tres tipos de distribución. Cinco distribuciones normales centradas en $\bar{\alpha} = 50, 45, 40, 35,$ and 30 , con una desviación estándar de $\sigma = 15$ en todas fueron consideradas. Las correspondientes distribuciones gama y lognormal tienen picos modales en la misma

vecindad. Los parámetros de forma de todas las distribuciones utilizadas se muestran en la Tabla 4.1. El dominio de dichas distribuciones corresponde al de las distribuciones de partículas intermedias de la Fig. 4.6 discutidas en la Sec. 4.2, debido a que representan muy bien los extremos $1 \leq \alpha \leq 100$ del que hemos llamado *intervalo crítico de validez* en los tamaños para la aproximación de Fraunhofer. En todas se ha utilizado un muestreo en los tamaños de $\Delta\alpha = 1$, para $N=100$ partículas y también, se usan los mismos valores de $\theta_{\min} = 0.057^\circ$, $\theta_{\max} = 10^\circ$ y $\Delta\theta = 0.057^\circ$ en todas.

Normal		Gama		Lognormal	
μ	σ	t	b	A_0	σ
50	15	55	0.5	52	2.2
45	15	55	0.7	45	2.8
40	15	50	0.8	42	3.0
35	15	45	0.8	37	3.0
30	15	40	1.1	33	3.8

Tabla 4.1: Parámetros de forma de las distribuciones propuestas.

Dada la recurrente repetibilidad en los resultados obtenidos con los tres tipos de distribución, se considera suficiente con presentar únicamente las distribuciones centradas en los extremos del intervalo de tamaño crítico, debido a que ilustran adecuadamente el comportamiento de la tendencia en las recuperaciones. Por lo tanto, en la Fig. 4.10 se comparan las recuperaciones obtenidas mediante los métodos de inversión CS y DVS implementados con la aproximación de Fraunhofer. Las Figs. 4.10(a) y (d) corresponden a las distribuciones normales; las Figs. 4.10(b) y (e) son para las distribuciones gama, y las Figs. 4.10(c) y (f) para las lognormal. Se observa que para todos los tipos de distribución, el método DVS genera los mejores resultados comparado con el método CS.

En la Sec. 4.2 se muestra que cuando se trabaja con la aproximación de Fraunhofer, las distribuciones recuperadas dependen fuertemente de la composición angular del patrón de intensidad. El intervalo de muestreo angular debe ser finito $\theta_{\min} \leq \theta \leq \theta_{\max}$, por lo que el valor de θ_{\max} es crítico para una adecuada recuperación de la distribución, ya que debe coincidir con la región angular en la cual los patrones de intensidad simulados por la teoría de Mie y la aproximación de Fraunhofer empiezan a diferir como se muestra en la Fig. 4.7. Si éste no es el caso, entonces la función recuperada no guarda ningún parecido con la distribución que se espera. No obstante, se observa que a pesar de considerar un valor adecuado para θ_{\max} y que además no viola la condición paraxial que da lugar a la aproximación de Fraunhofer, la función recuperada con el método CS presenta ruido

considerable en la región correspondiente a partículas pequeñas, para cada uno de los tres tipos de distribución. Este ruido puede atribuirse a la incompatibilidad entre los intervalos de las Ecs. (2.35) y (3.9), ya que $I(\theta)$ es una función continua de la variable θ en el intervalo $(0, \infty)$, mientras que numéricamente sólo se considera el intervalo finito $[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$. Además de que dentro de este intervalo, dicha función se tiene que discretizar en un número también finito de puntos. Por esta razón no se utilizará más el método de inversión CS en el análisis subsecuente del intervalo crítico de validez de la aproximación de Fraunhofer.

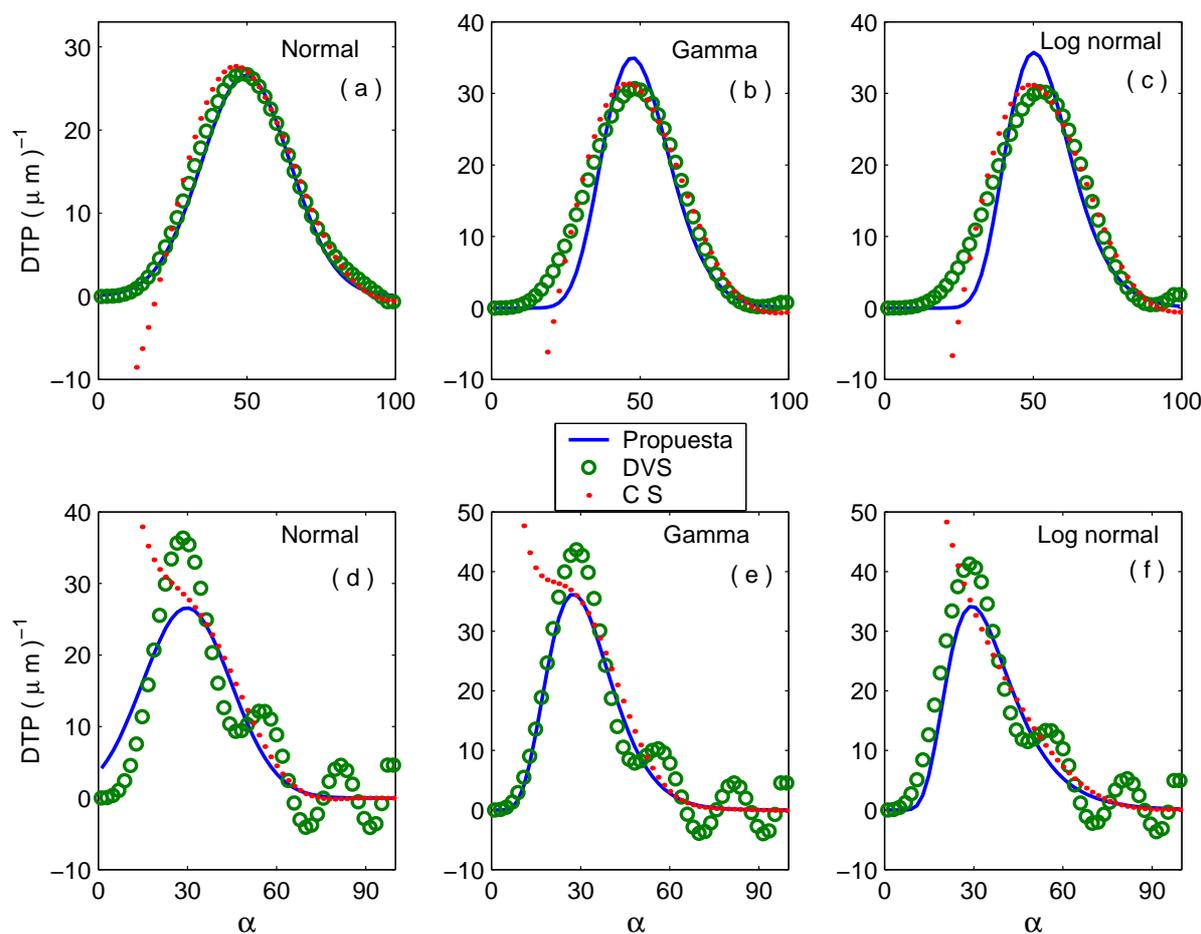


Figura 4.10: Comparación entre CS y DVS en el intervalo crítico. Las gráficas (a)-(c) son para las distribuciones centradas alrededor de $\bar{\alpha} = 50$, mientras que de (d)-(f) representan las distribuciones centradas alrededor de $\bar{\alpha} = 30$

La recuperación mediante el método DVS también depende de la correcta selección del θ_{\max} , aunque en este caso la dependencia no resulta tan evidente. Si la recuperación

es llevada a cabo considerando la totalidad de valores singulares, obtenemos un resultado similar al obtenido cuando se utiliza el método de inversión CS con un valor inadecuado de θ_{\max} . Las funciones recuperadas mejoran dramáticamente cuando se empiezan a eliminar (reemplazar con ceros) los valores singulares más pequeños en el sistema lineal de ecuaciones. Esto, lo podemos interpretar como una disminución en θ_{\max} y un mejoramiento simultáneo en el condicionamiento de la matriz a invertir, debido a que si para la misma distribución, se calcula la intensidad usando un valor adecuado de θ_{\max} , entonces el número de valores singulares que debemos eliminar es menor que en el caso previo, y el número de condición de la matriz se reduce. El mismo comportamiento de mejorar el condicionamiento de la matriz se observa cuando el muestreo angular $\Delta\theta$ disminuye, sólo que para los fines presentes no es imperativo su análisis.

Aunque no existe una receta para determinar cuántos valores singulares es necesario eliminar, las recuperaciones que se obtienen probando un número diferente de valores singulares hasta obtener la más cercana a la esperada, muestran que el método DVS es adecuado para el análisis que pretendemos. Para los tres tipos de distribuciones, con picos modales en la vecindad de $\alpha \sim 50$ [ver Figs. 4.10(a) - 4.10(c)] son aceptablemente recuperadas con el método DVS y quedándonos únicamente con 5 ecuaciones; mientras que, las que tienen su pico modal en la vecindad de $\alpha \sim 30$ [ver Figs. 4.10(d) - 4.10(f)], sus recuperaciones son ruidosas y lo más que se pudo mejorar la recuperación fue quedándonos con 7 ecuaciones. Dicho ruido se manifiesta con oscilaciones que envuelven y se amortiguan sobre la distribución propuesta. Este comportamiento se debe en mayor medida, a lo inadecuado que resulta utilizar Fraunhofer en la inversión para dicho intervalo de tamaños, y en menor medida a la asimetría que presentan las distribuciones propuestas. El número de condición para la matriz de esparcimiento en las seis distribuciones fue 5.85×10^{19} para todas, dado que se utilizó el mismo muestreo.

Debido a que el comportamiento para los tres tipos de distribución es semejante, tanto en los patrones de intensidad como en las recuperaciones, se considera adecuado continuar el análisis en esta Sección únicamente con distribuciones normales. Así que, nos limitamos a un intervalo más fino para los tamaños modales en las distribuciones para tener un valor indicativo a partir del cual es conveniente utilizar Fraunhofer. Se usa una serie de seis distribuciones normales centradas en $\bar{\alpha} = 48, 47, 46, 44, 43, 42$, con la misma desviación $\sigma = 15$, definidas en el mismo intervalo de tamaños $[1, 100]$ y con el mismo intervalo de muestreo, $\Delta\alpha = 1$. Los parámetros angulares de muestreo son los mismos que se utilizaron antes y el método de inversión es el de DVS. Las recuperaciones para este conjunto de distribuciones se muestran en la Fig. 4.11.

Para evaluar el rendimiento del método de inversión considerado, se usa el criterio de comparación que da la desviación cuadrática media (r.m.s.), entre los datos de la

distribución propuesta, f_i , y los de la distribución recuperada, g_i . Definida como

$$s = \frac{1}{N_s} \sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} \frac{(f_i - g_i)^2}{f_i^2}}, \quad (4.1)$$

con N_s es el número de puntos calculados. De donde, para este primer caso tenemos un r.m.s dado por: 0.86, 0.92, 1.06, 1.59, 1.94, y 2.32 para las Figs. 4.11(a) - 4.11(f), respectivamente. Estos resultados de error nos permiten confirmar la existencia del intervalo crítico de validez para el pico modal de una distribución recuperada con la aproximación de Fraunhofer, por lo que dicho valor umbral se encuentra en el intervalo $42 \leq \bar{\alpha} \leq 48$, considerando a la distribución centrada en $\bar{\alpha} = 46$, como la que mejor representa el valor umbral de validez de la aproximación de Fraunhofer cuando se recuperan distribuciones normales, distribuciones gama y distribuciones lognormal, con errores menores que la unidad, y el empleo del método de inversión DVS como el mejor método para recuperarlas. Recíprocamente para distribuciones monomodales con parámetro de tamaño modal por abajo de dicho valor umbral, proponemos usar la teoría de Mie.

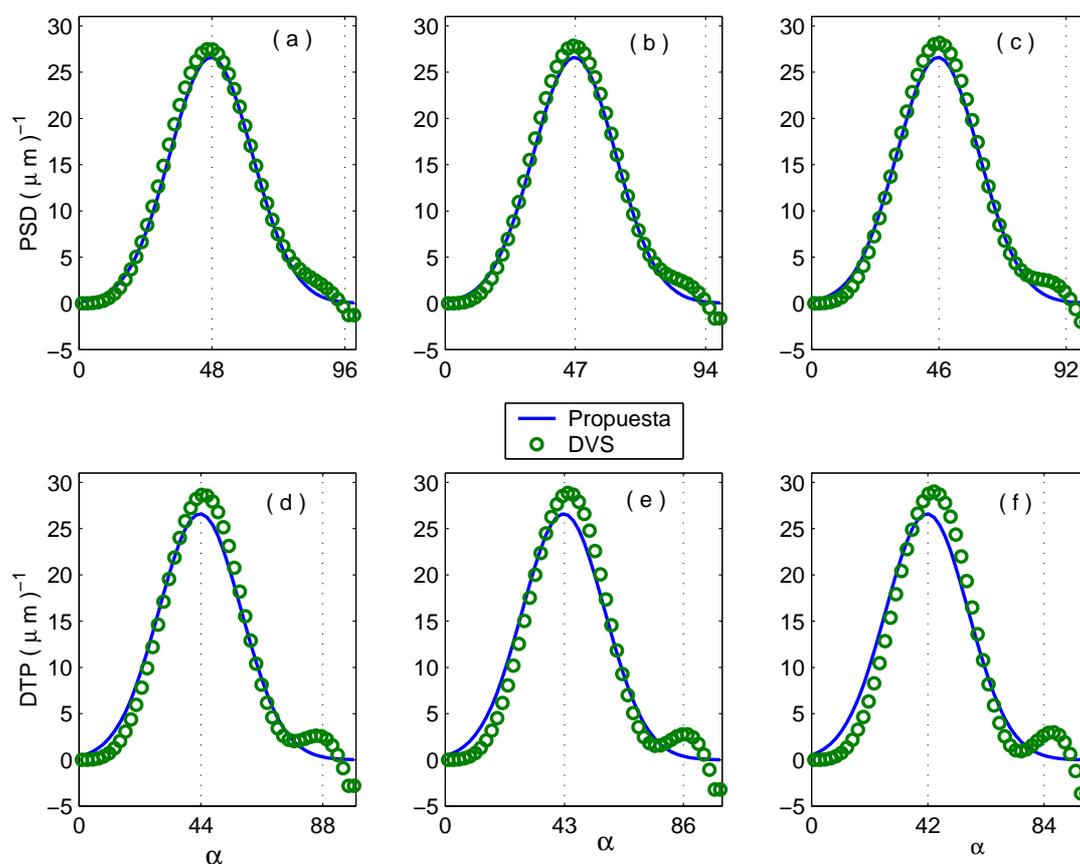


Figura 4.11: Recuperación con DVS en un subintervalo crítico más fino.

De todo lo anterior concluimos que para distribuciones monomodales suaves como la normal, gamma o lognormal:

- La aproximación de Fraunhofer tiene un intervalo crítico de validez para distribuciones cuyos picos modales están centrados entre los parámetros de tamaño 42 y 48. Es decir, si por lo menos el 50 % del total de la distribución tiene parámetro de tamaño ≥ 46 , se hace muy evidente la conveniencia de usar dicho formalismo para recuperar distribuciones suaves, con un r.m.s. del orden de la unidad.
- El método de inversión que recupera mejor la distribución esperada es el DVS comparado con el CS.
- El intervalo angular óptimo de muestreo depende de los parámetros de tamaño en la distribución. Es decir:
 1. Si las distribuciones contienen únicamente partículas con tamaños en $[50, 250]$, se puede usar un intervalo angular entre $(0^\circ, 3^\circ)$.
 2. Si las distribuciones contienen únicamente partículas de tamaños entre $[30, 170]$, se puede usar un intervalo angular entre $\theta = (0^\circ, 4^\circ)$.
 3. Si el 50 % de las partículas en la distribución tienen un tamaño entre $[42, 100]$, se usa un intervalo angular $\theta = (0^\circ, 6^\circ)$.
- Para distribuciones cuyas partículas son pequeñas (más del 50 % ≤ 46), se descarta definitivamente el uso de la aproximación de Fraunhofer.

A partir de esto, se plantea la útil posibilidad de realizar recuperaciones con la teoría de Mie, únicamente con distribuciones cuyas partículas son pequeñas, en las que más del 50 % tienen tamaños $\alpha \leq 46$. Evitando así, realizar cálculos extremadamente pesados para recuperar una DTP si sus tamaños van más allá de $\alpha = 100$. Además, se evitan problemas de convergencia como los discutidos en la Sec. 4.1, originados en distribuciones con tamaños $\alpha \geq 255$. Solamente como comentario diremos que algunos instrumentos comerciales usan la aproximación de Fraunhofer en esa región de tamaños sin especificar las imprecisiones que introduce y tampoco el tipo de algoritmo de inversión utilizado.

4.4. Recuperaciones con Teoría de Mie

A pesar de que se ha establecido un criterio que permite utilizar la teoría de Mie únicamente en distribuciones con partículas con $\bar{\alpha} \leq 46$, es necesario averiguar los pormenores de su comportamiento al recuperar distribuciones con partículas mas grandes y

mas pequeñas que dicho valor umbral. Y de esta manera discernir cual de los métodos de inversión (PT y DVS) considerados con la teoría de Mie tiene el mejor desempeño. Por lo tanto, a partir de aquí y con el propósito de facilitar la discusión, se divide el intervalo de parámetro de tamaños de interés $[1, 255]$, en tres subintervalos de acuerdo al criterio siguiente:

- **Partículas pequeñas.** Aquellas distribuciones con más del 50% de sus partículas en el intervalo de tamaños donde no es válida la aproximación de Fraunhofer, con su pico modal en el intervalo $(1, 30)$.
- **Partículas intermedias.** Aquellas distribuciones utilizadas para estudiar el intervalo crítico de Fraunhofer en la Sec. 4.2, definidas en el intervalo de tamaños $[1, 100]$, con su pico modal en el intervalo $[30, 50]$.
- **Partículas grandes.** Todas aquellas distribuciones cuyo tamaño de partícula está entre $[30, 255]$, con su pico modal en el intervalo $[50, 150]$.

4.4.1. PT vs. DVS en Partículas Pequeñas

Se consideran cuatro distribuciones normales con la misma desviación estándar y diferente tamaño modal. La Fig. 4.12 muestra dichas distribuciones y sus respectivas recuperaciones con PT y DVS. En las distribuciones obtenidas con el método PT se usó el mismo valor de $\gamma = 10^{-18}$. Es evidente la notoria superioridad de los resultados obtenidos con el método PT respecto a las recuperaciones con el método DVS, sin embargo, es oportuno mencionar que el parámetro de regularización que se utilizó ($\gamma = 10^{-18}$), el cual en un principio se encontró comparando las recuperaciones para diferentes valores de γ por prueba y error, no es el óptimo. Sobre todo en las distribuciones más asimétricas y que están más corridas hacia los tamaños pequeños, no obstante, para efectos de ilustrar el rendimiento del método PT respecto al DVS, resulta conveniente trabajar con este valor y, más adelante dedicaremos una sección especial para discutir la elección del valor óptimo de dicho parámetro de regularización en el rendimiento del método PT.

Las recuperaciones del método DVS [ver Figs. 4.12(a)-(d)] con 5 valores singulares removidos, son la opción que generó los errores más pequeños de todas las posibilidades que se consideraron. De acuerdo a los números de condición para cada matriz de esparcimiento, tenemos matrices muy inestables que justifican que el método DVS genere resultados bastante pobres. Dichos valores, así como los errores en las recuperaciones, se reportan en la Tabla 4.2.

En la Fig. 4.13 se muestra el comportamiento de partículas pequeñas para distribuciones gama. Note que las distribuciones recuperadas con PT en las Figs. 4.13(a)-(b) mues-

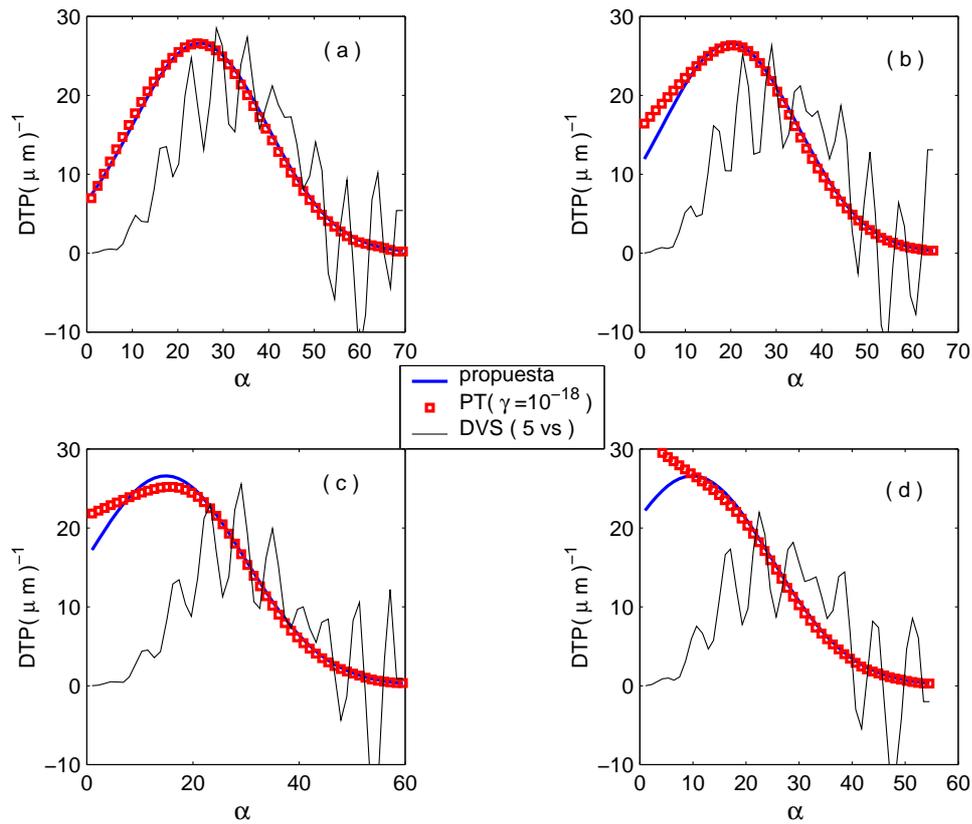


Figura 4.12: PT vs. DVS en distribuciones normales pequeñas. De (a) a (d) corresponden a las distribuciones con picos modales en: 25, 20, 15 y 10.

Distribuciones de partículas pequeñas	PT ($\gamma = 10^{-18}$)		DVS (5 vs)
Normal	Error	Error	No. de Condición
Fig. 4.12(a)	0.51	4.54	4.69×10^{20}
Fig. 4.12(b)	1.25	10.64	5.45×10^{21}
Fig. 4.12(c)	1.15	12.54	1.97×10^{20}
Fig. 4.12(d)	2.13	12.98	4.73×10^{20}
Gama			
Fig. 4.13(a)	3.71	12.99	1.49×10^{20}
Fig. 4.13(b)	4.51	21.99	1.03×10^{20}
Fig. 4.13(c)	15.9	47.05	1.25×10^{20}
Fig. 4.13(d)	17.7	43.53	5.75×10^{20}
Lognormal			
Fig. 4.14(a)	3.24	9.08	4.69×10^{20}
Fig. 4.14(b)	4.17	12.51	1.49×10^{20}
Fig. 4.14(c)	6.35	26.71	7.11×10^{20}
Fig. 4.14(d)	14.6	32.79	1.03×10^{20}

Tabla 4.2: Parámetros de las recuperaciones PT vs. DVS en partículas pequeñas.

tran un comportamiento aceptable, mientras que las más asimétricas y al mismo tiempo con partículas más pequeñas en las Figs. 4.13(c)-(d) son las peormente recuperadas por PT con $\gamma = 10^{-18}$. Por otro lado, las recuperaciones con DVS con un número óptimo de valores singulares removidos reportan resultados pésimos. El valor de los errores confirman una discrepancia bastante alta en este caso, además de que los números de condición de sus cuatro matrices son grandes, del orden de 10^{20} (ver Tabla 4.2).

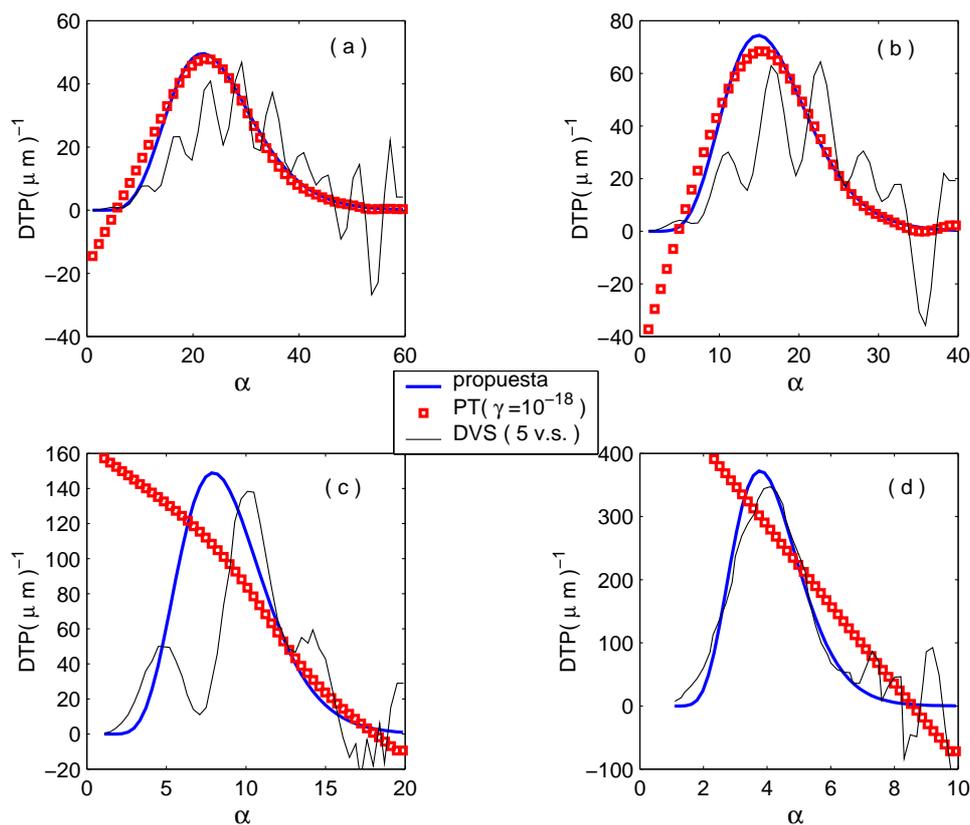


Figura 4.13: PT vs. DVS en distribuciones gama pequeñas. De (a) a (d) corresponden a las distribuciones con picos modales alrededor de: 20, 15, 8 y 4.

A continuación se presentan en la Fig. 4.14 las recuperaciones para distribuciones log-normal de partículas pequeñas. Al igual que antes, la atención se centra en torno a la estabilidad de la matriz de esparcimiento, la asimetría de las distribuciones propuestas y, el rendimiento del método PT. Nuevamente de la Fig. 4.14 y los valores reportados en la Tabla 4.2, es claro que el método DVS con teoría de Mie es pésimo para recuperar distribuciones de partículas pequeñas. Mientras que el método PT muestra un comportamiento aceptable similar a los dos casos previos discutidos en esta sección. Por lo tanto, en términos generales podemos concluir que: El método PT es capaz de recuperar distribuciones

de partículas pequeñas, a pesar de la asimetría presente en cada distribución y por ende la inestabilidad en las matrices de esparcimiento, además de que depende extremadamente del parámetro de regularización γ . Es decir, debido a que para $\gamma = 10^{-18}$ generó resultados aceptables respecto al método DVS en los tres tipos de distribuciones consideradas, esto no quiere decir que sea el valor óptimo, y sobre todo, en las distribuciones más asimétricas. Por lo tanto, debido a que el parámetro de regularización hasta este momento se ha obtenido por prueba y error, es posible que la tendencia y comportamiento observados no prevalezcan en general, por lo que es necesario buscar el rendimiento óptimo del método.

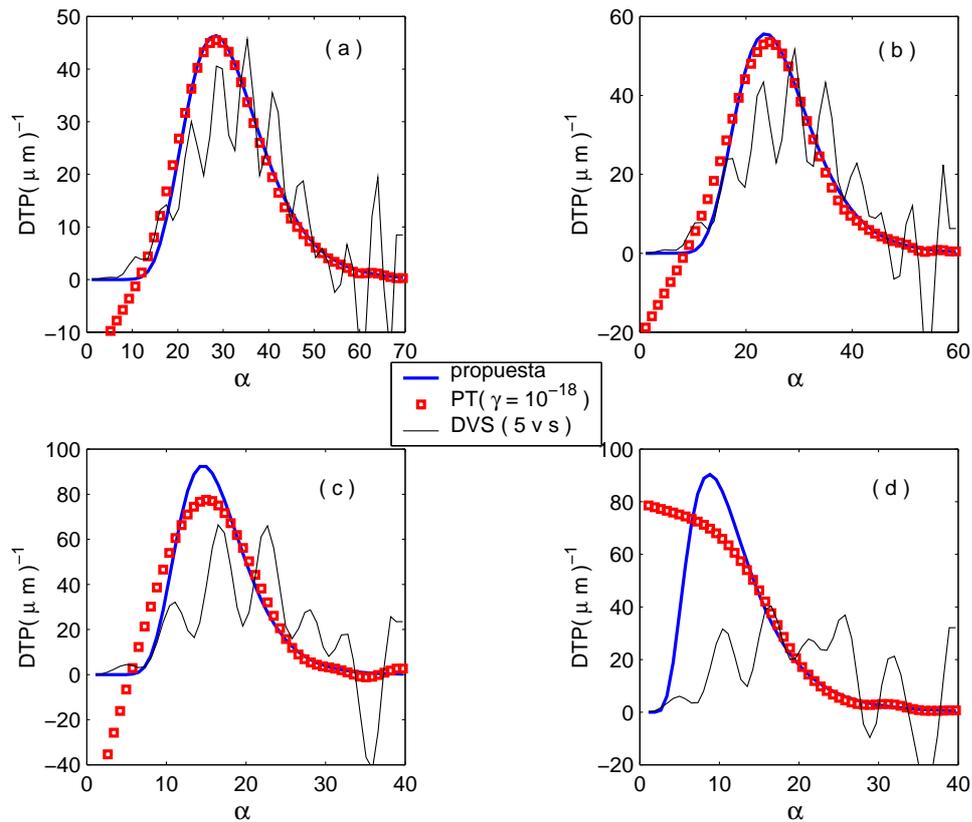


Figura 4.14: PT vs. DVS en distribuciones lognormal pequeñas. De (a) a (d) corresponden a las distribuciones con picos modales en: 28, 23, 14 y 9.

4.4.2. PT vs. DVS en Partículas Intermedias

Para estos tamaños, se consideran los tres pares de distribuciones en los extremos del intervalo crítico de validez de la aproximación de Fraunhofer de la Sec. 4.3. Nuevamente resulta evidente de la Fig. 4.15 la superioridad del método PT sobre el DVS, debido a que las seis distribuciones recuperadas por PT están bastante cerca de las distribuciones

propuestas, además de que presentan los valores de error más pequeños (reportados en la Tabla 4.3). El método DVS obtiene recuperaciones muy pobres, ya que los picos modales de las distribuciones recuperadas están muy alejados de las posiciones en que se esperan y además son muy ruidosas.

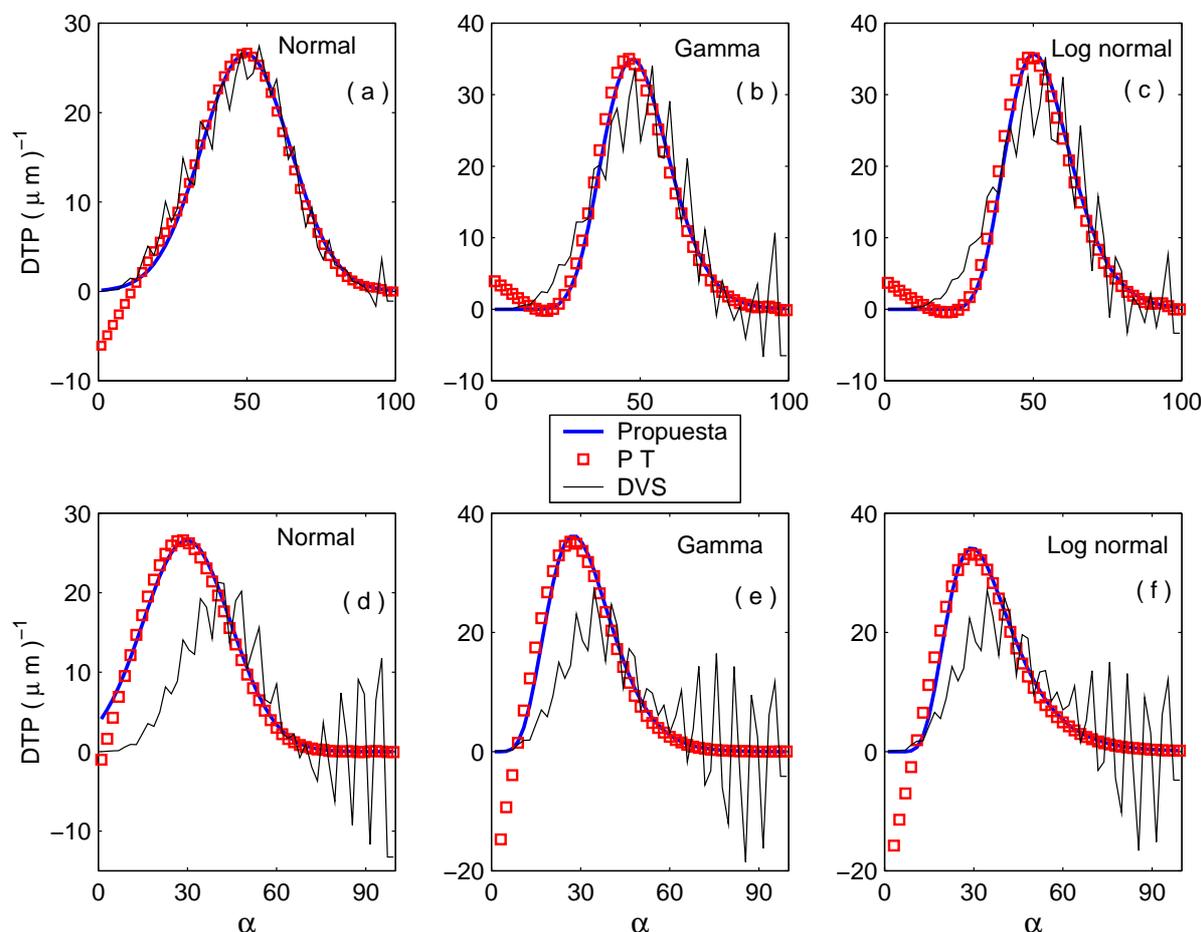


Figura 4.15: PT vs. DVS con teoría de Mie y distribuciones con tamaños intermedios. Las gráficas de la (a) a la (f), corresponden a las seis distribuciones de los extremos del intervalo crítico de validez de la aproximación de Fraunhofer, discutidas en la Sec. 4.3.

La poca exactitud del método DVS con la teoría de Mie, la podemos atribuir como causa principal, a la gran inestabilidad de la matriz de esparcimiento, reflejada en un mismo número de condición grande, dado por 1.56×10^{21} . Lo cual, aunado a la asimetría de las distribuciones propuestas, hace necesaria una normalización de segundo orden como lo es el método PT. Es decir, los métodos de normalización de primer orden como el DVS[35] dejan de ser adecuados en problemas de inversión altamente inestables. Esta es la razón por la que en la Sec. 4.3, el método DVS no presentaba problemas para recuperar

Figura	Distribución	Pico modal	Error (PT)	Error (DVS)
4.15(a)	Normal	50	1.54	2.0
4.15(b)	Gama	~ 50	1.42	4.72
4.15(c)	Lognormal	~ 50	1.21	4.75
4.15(d)	Normal	30	1.17	9.25
4.15(e)	Gama	~ 30	4.08	10.05
4.15(f)	Lognormal	~ 30	4.37	8.57

Tabla 4.3: Errores en las recuperaciones PT vs. DVS en distribuciones con tamaños intermedios.

distribuciones cuya matriz de esparcimiento se construía usando Fraunhofer, debido a que dichas matrices tenían un número de condición dos órdenes de magnitud menor dado por 5.85×10^{19} . Lo cual incluso, hace que la recuperación con la aproximación de Fraunhofer con DVS, resulte mejor que la recuperación de Mie con DVS, como muestra la Fig. 4.16 para la distribución normal de la Fig. 4.15(a). Sus correspondientes errores son: 1.54 para Mie con PT; 2.0 para Mie con DVS; y 0.98 para Fraunhofer con DVS.

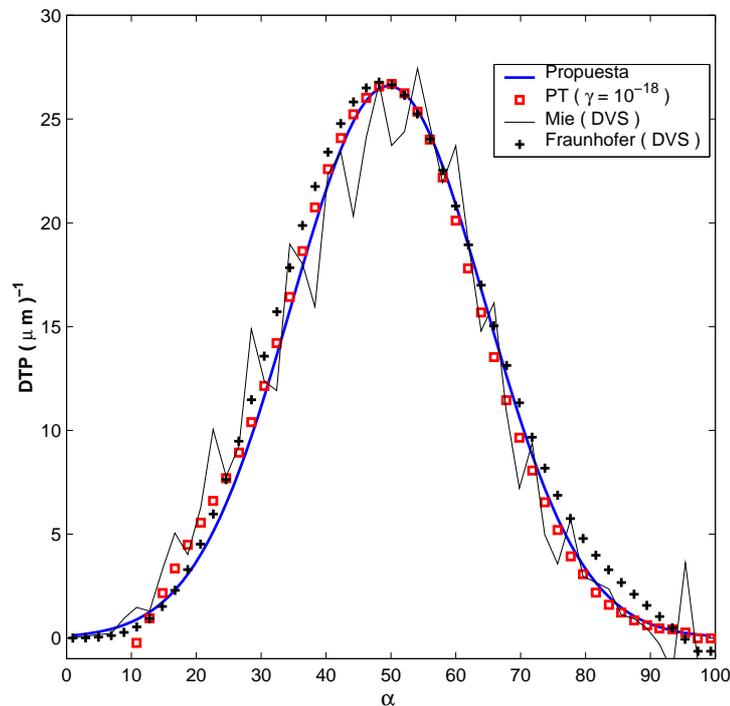


Figura 4.16: Mie con PT y DVS vs. Fraunhofer con DVS en partículas intermedias.

Como segunda causa de ineficiencia en las recuperaciones con DVS y la teoría de

Mie, está la asimetría de las distribuciones propuestas. De todas las recuperaciones de la Fig. 4.15, la de la Fig. 4.15(a) mostrada también en la Fig. 4.16, se acerca más a la distribución propuesta a pesar de que todas poseen el mismo número de condición. Esto por supuesto, se debe a la alta simetría de la distribución normal propuesta ahí. A partir de la Fig. 4.15(b) hasta la Fig. 4.15(f), las recuperaciones se van deteriorando gradualmente, a medida que aumenta la asimetría en la distribución. Las recuperaciones en las Figs. 4.15(b) y (c) son ruidosas pero centradas muy cerca del pico modal esperado, debido a que la asimetría ahí no es tan pronunciada como en las distribuciones de las Figs. 4.15(d)-(f). En estas últimas, además de que el ruido crece, el pico modal se desplaza hacia tamaños mayores. Esto hace evidente una dependencia muy fuerte del método DVS con la asimetría de la distribución a recuperar.

Por otro lado, para recuperar distribuciones con teoría de Mie y el método PT la asimetría en la distribución propuesta influye poco. Se observa dicho comportamiento en las distribuciones gamma y lognormal más asimétricas con pico modal cercano a $\alpha = 30$. En estas recuperaciones el error casi se triplica [Figs. 4.15(e) - (f)] respecto a las mismas distribuciones con mayor simetría [Figs. 4.15(b) - (c)]. Sin embargo, si únicamente se consideran los valores positivos de la distribución recuperada, que son los que tienen significado físico, el error se reduce considerablemente, del orden de la unidad, debido a que la recuperación con el método PT se ajusta bastante bien a la mayoría de la distribución propuesta.

4.4.3. PT vs. DVS en Partículas Grandes

De la discusión de las secciones previas hemos observado que si las distribuciones que se recuperan poseen un grado alto de simetría, entonces la tendencia entre los métodos de inversión con la teoría de Mie no dependen del tipo de distribución. Lo anterior también es evidente a medida que las distribuciones se componen de partículas cada vez mayores en tamaños. Por lo tanto, para comparar el rendimiento de los métodos de inversión PT y DVS en la región de partículas grandes, nos limitaremos a mostrar únicamente los resultados para dos distribuciones normales en el dominio [30,250] con picos modales en $\bar{\alpha} = 150$ y $\bar{\alpha} = 100$, y desviaciones $\sigma = 30$ y $\sigma = 20$, respectivamente. En la Fig. 4.17 se muestra el comportamiento de las distribuciones recuperadas con el método PT con $\gamma = 10^{-18}$ y el método DVS para 5 valores singulares suprimidos.

La distribución con partículas más grandes tiene un número de condición de 2.76×10^{20} , mientras que en la distribución con partículas más pequeñas su número de condición es 1.03×10^{21} . Las recuperaciones con el método PT son extremadamente buenas ya que reportan los errores 0.92 y 0.26, para las Fig. 4.17(a) y (b), respectivamente. Asimismo,

el método DVS genera recuperaciones cercanas a la esperada con un poco de ruido, pero aceptablemente buenas, ya que los valores de error fueron 0.92 y 1.03, para las Fig. 4.17(a) y (b), respectivamente.

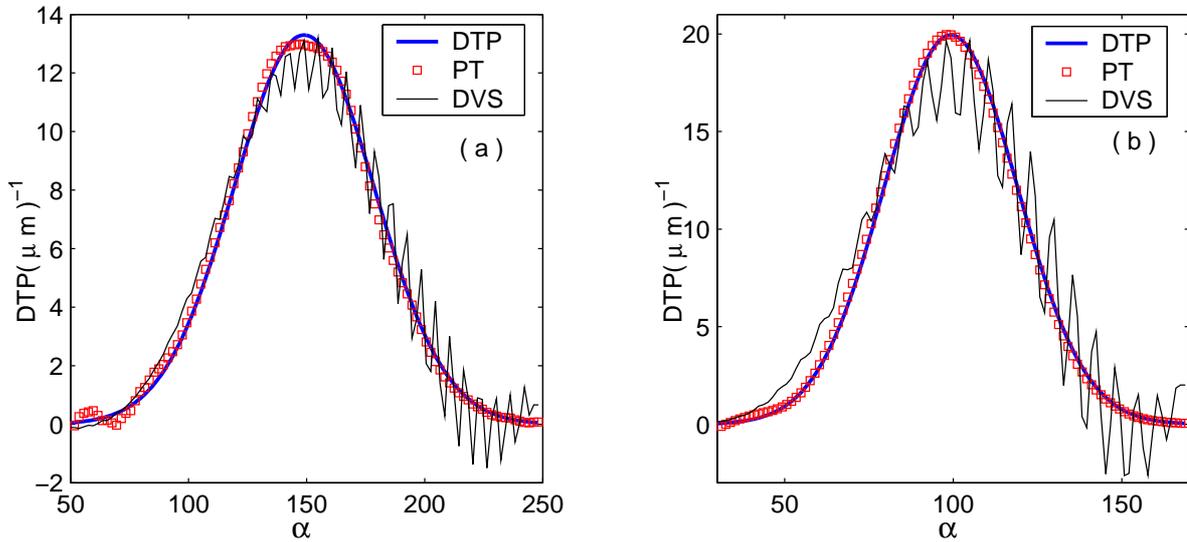


Figura 4.17: DVS(5 v.s.)vs.PT($\gamma = 10^{-18}$) en distribuciones normales grandes. (a) representa la distribución centrada en $\bar{\alpha} = 150$ y (b) a la distribución centrada en $\bar{\alpha} = 100$.

De los resultados con distribuciones de partículas pequeñas, intermedias y grandes, podemos anticipar que:

- En recuperaciones con el método DVS y teoría de Mie para regiones de partículas donde la matriz de esparcimiento es altamente inestable, reflejado en un número de condición mayor o igual a 10^{21} , dicho método no es adecuado; mientras que si el número de condición es del orden de 10^{19} , el método es utilizable.
- Las recuperaciones con el método PT y teoría de Mie no dependen del tipo de distribución propuesta, aún si son asimétricas. El resultado mejora, si en la distribución recuperada se consideran únicamente valores positivos y los negativos se desechan por carecer de significado físico.

4.4.4. Rendimiento de γ en Distribuciones de Partículas Pequeñas

Para analizar el rendimiento del parámetro γ , se consideran primero dos distribuciones normales de partículas pequeñas, las cuales en principio son simétricas, más sin embargo por su construcción, están incompletas y además son demasiado estrechas. La Fig. 4.18 muestra sus recuperaciones para diferentes valores de γ .

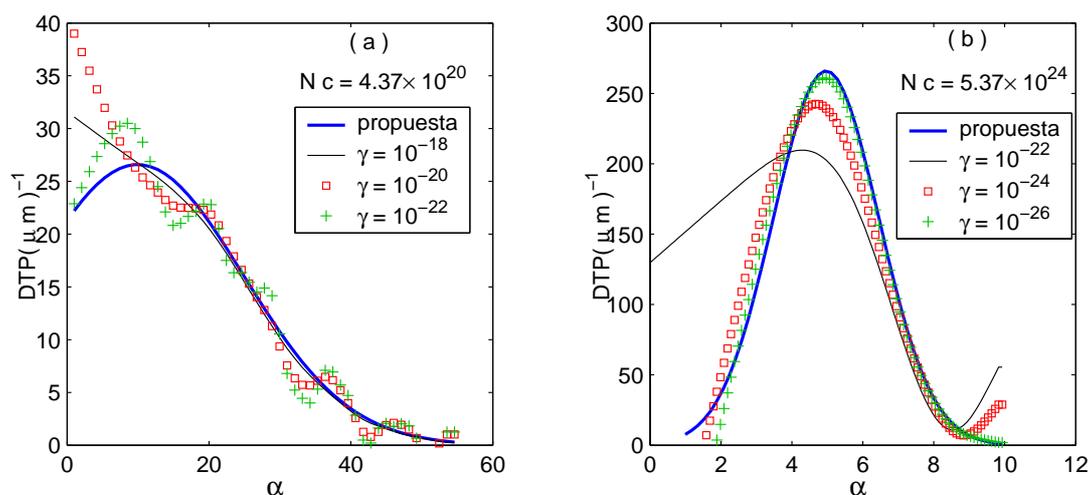


Figura 4.18: Rendimiento en γ para distribuciones normales, incompletas y estrechas de partículas pequeñas. (a) corresponde a la distribución centrada en $\bar{\alpha} = 10$, mientras que (b) es una distribución muy estrecha centrada en $\bar{\alpha} = 5$.

Es notoria una relación estrecha entre el valor más adecuado de γ y el número de condición de la matriz. Entre más grande sea el número de condición, la matriz es más inestable, y por lo tanto se necesita un parámetro de regularización más pequeño para acercarnos a resultados aceptables. Por lo tanto, podemos especular que el orden del parámetro de suavizado “óptimo” es \pm uno o dos órdenes de magnitud que el inverso del número de condición. En la Tabla 4.4 se resumen los valores de γ utilizados, junto con su correspondiente error de recuperación como función del número de condición para las distribuciones normales analizadas aquí.

Distribuciones normales de partículas pequeñas	$N c = 4.37 \times 10^{20}$ $(N c)^{-1} = 2.29 \times 10^{-21}$	$N c = 5.37 \times 10^{24}$ $(N c)^{-1} = 1.86 \times 10^{-25}$
Fig. 4.18(a)	Error	Error
P T ($\gamma = 10^{-18}$)	2.13	
P T ($\gamma = 10^{-20}$)	4.07	
P T ($\gamma = 10^{-22}$)	2.01	
Fig. 4.18(b)		
P T ($\gamma = 10^{-22}$)		80.7
P T ($\gamma = 10^{-24}$)		3.9
P T ($\gamma = 10^{-26}$)		1.12

Tabla 4.4: Número de condición y el parámetro γ en distribuciones normales.

Cabe aclarar que en la Fig. 4.18(b), en las recuperaciones que obtiene valores negativos, únicamente se consideran valores estrictamente positivos. Lo cual, pone de manifiesto que el uso de la desviación cuadrática media es una buena estimación de la eficiencia de las recuperaciones, si sólo se consideran valores positivos de la DTP recuperada que son los que tienen significado físico. Además, si regresamos a observar la forma de la Ec. (4.1), es claro que cada vez que se tiene un valor de g_i negativo en la recuperación, el error aumenta como $2|g_i|$ en vez de restarse $2|g_i|$, como sucede para valores positivos.

Para las distribuciones gama se consideran las dos distribuciones de partículas más pequeñas discutidas en la Sec. 4.4.1. Su comportamiento es ligeramente distinto al observado en la misma región con distribuciones normales. En la Fig. 4.19 se muestran sus recuperaciones como función del parámetro de regularización γ y de la Tabla 4.5 podemos ver cómo ahora en la Fig. 4.19(a) las recuperaciones que más se acercan a la distribución esperada tienen un error grande y al mismo tiempo el mejor valor de γ , es cinco órdenes de magnitud menor que el inverso del número de condición. Mientras que para la Fig. 4.19(b), el mejor error que se obtuvo fue de 14.62 el cual corresponde a un γ que sólo es un orden menor que el inverso del número de condición. Esta inconsistencia pone en evidencia que la determinación del γ óptimo, no sólo es del orden del inverso del número de condición como sucede para distribuciones simétricas, sino que depende precisamente de qué tan asimétrica sea la distribución al mismo tiempo que de su estrechez.

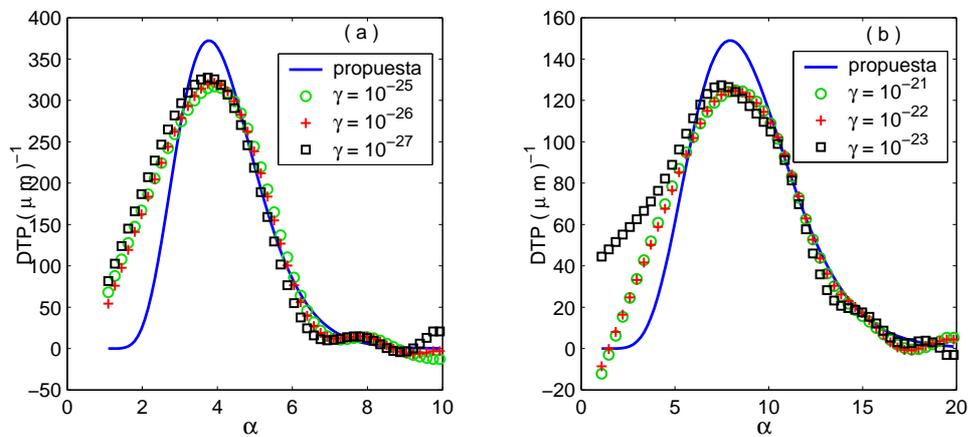


Figura 4.19: Dependencia en γ para distribuciones gama de partículas pequeñas. (a) representa una distribución centrada cerca de $\bar{\alpha} \sim 4$ y (b) representa una distribución centrada cerca de $\bar{\alpha} \sim 8$.

Finalmente, para las distribuciones lognormal se considera la distribución con partículas más pequeñas de las discutidas en la Sec. 4.4.1 y se muestran sus recuperaciones para

Distribuciones gama en partículas pequeñas	$N c = 5.75 \times 10^{20}$ $(N c)^{-1} = 1.74 \times 10^{-21}$	$N c = 1.25 \times 10^{20}$ $(N c)^{-1} = 8 \times 10^{-21}$
Fig. 4.19(a)	Error	Error
P T ($\gamma = 10^{-25}$)	54.19	
P T ($\gamma = 10^{-26}$)	52.16	
P T ($\gamma = 10^{-27}$)	61.58	
Fig. 4.19(b)		
P T ($\gamma = 10^{-21}$)		15.05
P T ($\gamma = 10^{-22}$)		14.62
P T ($\gamma = 10^{-23}$)		26.05

Tabla 4.5: Número de condición y el parámetro γ en distribuciones gamma.

tres valores de γ en la Fig. 4.20. Se observa nuevamente que para esta distribución, debido a que es moderadamente ancha, se tiene que el orden de magnitud del mejor valor de γ , es dos órdenes de magnitud menor que el inverso del número de condición como se muestra en la Tabla 4.6. Por lo tanto, para partículas pequeñas se puede concluir que es factible tener una estimación del valor óptimo del parámetro γ para la recuperación con el método PT, si nos apoyamos en el número de condición de la matriz de esparcimiento que reporta el método DVS. Concretamente, el orden del parámetro de regularización “óptimo” es \pm uno o dos órdenes de magnitud que el inverso del número de condición. Siempre y cuando la distribución no sea muy asimétrica y estrecha, ya que en este caso el problema es muy inestable y son necesarios hasta 5 órdenes de magnitud menor que el inverso del número de condición para recuperar una distribución con un error relativamente pequeño. Esto sugiere, una interpolación o extrapolación de γ para valores intermedios, menores o mayores del número de condición, respectivamente, o un procedimiento iterativo como se mostrará en breve.

Distribución lognormal de partículas pequeñas	$N c = 1.03 \times 10^{20}$ $(N c)^{-1} = 9.7 \times 10^{-21}$
Fig. 4.20	Error
P T ($\gamma = 10^{-20}$)	8.95
P T ($\gamma = 10^{-22}$)	8.21
P T ($\gamma = 10^{-24}$)	9.06

Tabla 4.6: Número de condición y el parámetro γ en una distribución lognormal pequeña.

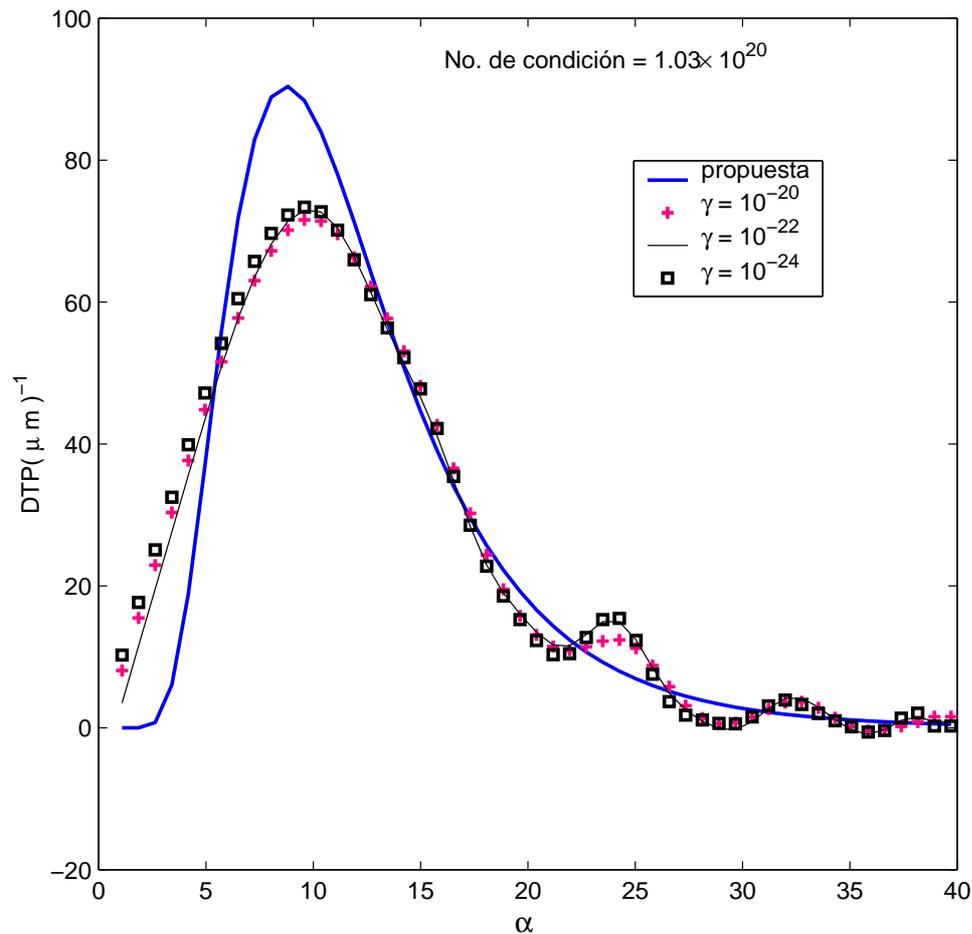


Figura 4.20: Dependencia en γ para distribuciones lognormal pequeñas.

4.4.5. Rendimiento de γ en Distribuciones de Partículas Grandes

Para finalizar este apartado es necesario realizar una comparación entre distribuciones de partículas grandes, tanto como nos permitan numéricamente los algoritmos utilizados en esta tesis. Mostraremos el comportamiento de los métodos de inversión PT y DVS para la teoría de Mie. Al igual que en la sección anterior para partículas pequeñas, las recuperaciones con el método de PT en distribuciones grandes dependen de la elección del parámetro de suavizado y del ángulo máximo de muestreo. En la Fig. 4.17 elegimos un valor en particular, sin embargo dependiendo de éste y del ángulo máximo, es la calidad de la recuperación. La Fig. 4.21, muestra lo anterior para la distribución de la Fig. 4.17(b). Para $\gamma = 10^{-16}$, $\gamma = 10^{-18}$, y $\gamma = 10^{-20}$ y el mismo ángulo $\theta_{\max} = 25^\circ$, se tienen los valores de error 0.29, 1.55, y 5.35, respectivamente [vea la Fig. 4.21(a)]. Asimismo, considerando tres valores del ángulo máximo de muestreo, θ_{\max} : 6° , 25° y 50° con el

mismo valor $\gamma = 10^{-18}$ [vea la Fig. 4.21(b)], a medida que el ángulo crece, la recuperación es cada vez más ruidosa. La razón principal es que por tratarse de partículas grandes estas esparcen la luz a ángulos pequeños como se vio al principio del capítulo, por lo que, al hacer un barrido hasta dichos ángulos, como ahí ya no existe señal, lo único que se está haciendo es introducir ruido a la señal, el cual se traduce en ruido numérico en el algoritmo. Se obtienen los valores: 0.26, 1.55, y 3.75, para el error de las recuperaciones con 6° , 25° , y 50° , respectivamente.

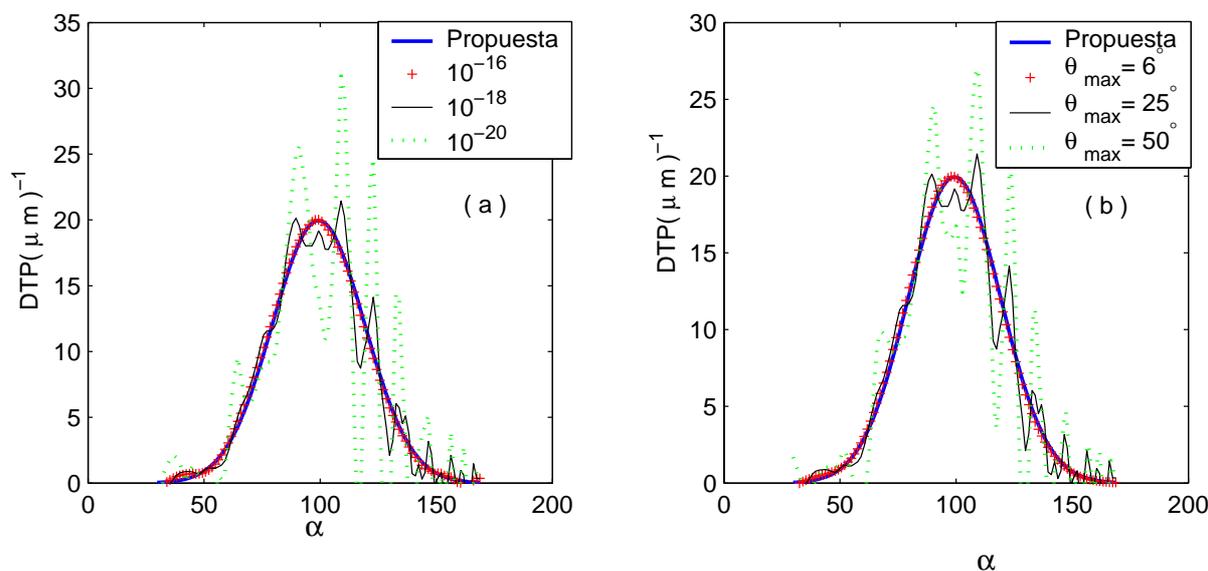


Figura 4.21: Dependencia en θ_{\max} y γ en la FDT de la Fig. 4.17(b).

De la discusión anterior se puede ver que con el método de PT y la teoría de Mie no es necesario preocuparse del ángulo máximo de muestreo, debido a que el método es capaz de regularizar el problema mediante la elección del parámetro de suavizado. Esto por supuesto, es factible hacerse mediante un proceso iterativo que vaya optimizando las soluciones encontradas, hasta encontrar aquella que presente el menor residuo entre la distribución propuesta y la recuperada. El único inconveniente es el tiempo de cómputo, el cual para una sola recuperación en la distribución de la Fig. 4.21 tarda 18 horas en una PC con procesador Pentium III, y para una recuperación en la distribución más grande de la Fig. 4.17(a) tarda 37 horas. Por lo tanto, en distribuciones como estas es estrictamente necesario utilizar la aproximación de Fraunhofer, la cual además produce recuperaciones muy similares a las que aquí hemos obtenido con el método de PT.

4.5. Elección del Parámetro de Regularización y Operador de Suavizado Óptimos

De toda la discusión anterior, vimos que una elección propia del parámetro de regularización, genera resultados óptimos en la distribución recuperada con el método PT. Sin embargo, como veremos a continuación, no es el único factor que optimiza los resultados, también depende del orden de diferenciabilidad en el operador de suavizado, operador de diferencias finitas que suaviza el comportamiento mal condicionado y que corresponde a información física que espera que la solución tenga algunas propiedades de regularidad tales como, continuidad y diferenciabilidad y que sea suave y acotada. La incorporación de esta información cualitativa adicional de la solución esperada, involucra un intercambio entre una medida de la calidad de la solución y, la calidad del ajuste que esta tiene con los datos de entrada. Así que, el óptimo intercambio entre esas dos cantidades (balance correcto entre la exactitud y la estabilidad de la solución numérica) se obtiene eligiendo el parámetro de regularización óptimo, acompañado por un adecuado operador de suavizado. Generalmente éste último, se considera como una matriz de segundas diferencias, ya que la matriz de primeras diferencias únicamente tiene interés de tipo didáctico, y la matriz de terceras diferencias y secuencias de orden superior, son útiles para problemas altamente inestables como se mostrará en breve.

La elección del parámetro óptimo de regularización y el operador de diferencias finitas es un problema crucial que a pesar de haber sido ampliamente discutido en la literatura matemática, hoy en día no se tiene ninguna receta precisa que se pueda usar para cualquier problema que requiera de su aplicación, permaneciendo en la frontera de la investigación. Es decir, los resultados y metodología aceptables que se tienen en un problema en particular, no necesariamente resuelven los problemas en otro campo. No obstante, el método PT hoy en día, es una de las herramientas más poderosas para la solución de problemas inversos mal condicionados, no solo en el campo de tamaño de partículas, si no en general en otras áreas de la ciencia. Con el propósito de exhibir dichas ventajas, se presentan resultados numéricos de la recuperación con distribuciones gama, limitándonos a valores óptimos del parámetro de regularización y diferencias finitas hasta de tercer orden en el operador de suavizado.

Existen comúnmente dos aproximaciones para llevar a cabo esta selección. La primera se basa en un procedimiento iterativo que puede aplicarse en cualquier situación, debido a que ninguna consideración sobre el nivel de ruido en los datos de entrada es necesaria, por ejemplo, la composición angular deficiente (θ_{\max} inadecuado) en las simulaciones que generan los patrones de intensidad discutidos en la Sección anterior. Este procedimiento iterativo es robusto y produce estimaciones de la distribución buscada exactas.

En la segunda aproximación no se requiere de un procedimiento iterativo, sin embargo, es necesario asumir algunas restricciones sobre la solución esperada y el ruido en las mediciones, ya que dicha información afecta la calidad de la solución. Así que la aplicación de esta última aproximación en general es más incierta y complicada de llevar a cabo.

Como se mencionó en la Section 3.4, γ es una constante durante la minimización involucrada en el método PT, así, el procedimiento iterativo inicia tomando el valor γ_0 dado por la Ec. (3.30). La selección de este valor inicial garantiza que se está sobre la trayectoria hacia una solución viable, el cual acelera la convergencia del procedimiento iterativo y reduce el número de pasos para alcanzar un valor óptimo γ_{opt} . Al igual que antes, proponemos que el valor óptimo es alcanzado cuando el error entre las distribuciones recuperada y propuesta es mínimo. La Fig. 4.22 muestra la evolución del parámetro γ para dos distribuciones gama en dos rangos de tamaños de partículas y un operador de suavizado de segundas diferencias, los cuales ilustran perfectamente los retos numéricos involucrados en el procedimiento de selección del mejor valor para γ_{opt} . El primer rango de tamaños representa distribuciones de tamaños donde puede aplicarse la aproximación de Fraunhofer. El segundo rango representa las partículas pequeñas donde la teoría de Mie es adecuada.

Se exploraron diferentes soluciones obtenidas para diferentes valores de γ , pero sólo se reportan aquí las distribuciones que corresponden a los valores inicial y óptimo del parámetro de regularización. Para las partículas grandes de la Figura 4.22(a) el parámetro de regularización tiene un valor inicial dado por $\gamma_0 = 5.9938 \times 10^{-11}$, representado por el símbolo \emptyset en la Fig. 4.22(b). Este genera una distribución recuperada con un error de 1.6057 mostrada en la Fig. 4.22(a) con la línea cortada. Después de varios pasos un valor óptimo $\gamma_{\text{opt}} = 5.9938 \times 10^{-15}$ es obtenido como se indica por el símbolo \oplus en la Fig. 4.22(b). Este recupera una distribución con un error de 0.2797, correspondiente a la línea sólida delgada en la Fig. 4.22(a). Sin embargo, esta última curva no se distingue bien debido a que coincide prácticamente con la distribución propuesta.

Para las partículas pequeñas [Fig. 4.22(c)] el valor inicial es $\gamma_0 = 9.0564 \times 10^{-21}$, también representado por \emptyset en la Fig. 4.22(d), y la correspondiente distribución recuperada tiene un error de 17.9142. El valor óptimo del parámetro de regularización es $\gamma_{\text{opt}} = 2.0 \times 10^{-22}$ representado por el símbolo \oplus en la Fig. 4.22(d), con un error entre la distribución propuesta y la recuperada dado por 14.3582. En este caso también, las distribuciones recuperada y propuesta [Fig. 4.22(c)] son representadas por una línea cortada para el valor inicial de γ , y una línea continua delgada para el valor óptimo de γ .

Podemos ver que γ_{opt} obtiene resultados adecuados para partículas grandes, con un buen acuerdo entre las distribuciones propuesta y recuperada debido a que el error es

menor que la unidad. Sin embargo, para la región de partículas pequeñas la distribución recuperada es degradada a pesar de seleccionar el valor óptimo de γ . Esto es típico en una distribución muy estrecha donde, a medida que la distribución se hace más ancha, la recuperación mejora. Resultados similares se observan en distribuciones estrechas normal y lognormal. Por lo tanto, es claro que la recuperación mediante un operador de suavizado de segundas diferencias, que fue el caso con el que hemos estado trabajando, no es suficiente para recuperar con exactitud una distribución estrecha, a pesar de utilizar un valor óptimo del parámetro de regularización, lo cual obliga a utilizar un operador de suavizado de terceras diferencias.

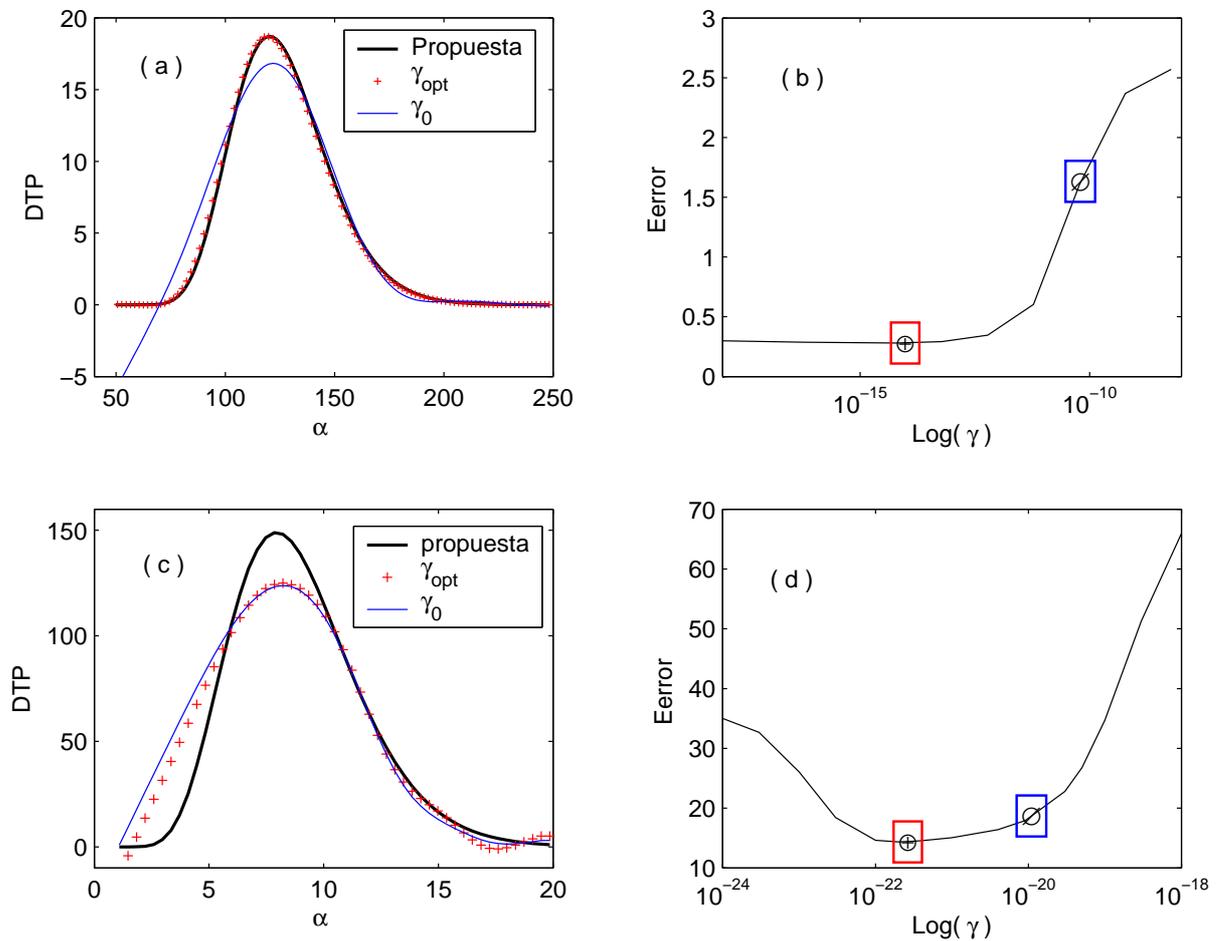


Figura 4.22: Evolución del parámetro de regularización para un operador de suavizado de segundas diferencias. En (a) y (c) se muestran las recuperaciones óptima e inicial para cada rango de tamaños, respectivamente. En (b) y (d) la evolución de γ en la región de tamaños grandes y pequeños, respectivamente. Los valores γ_0 y γ_{opt} se representan por los símbolos \emptyset y \oplus , respectivamente.

Con el mismo patrón de intensidad para la distribución gama de partículas pequeñas como dato de entrada, se realizaron tres bloques de recuperaciones. Cada bloque considera un operador de suavizado distinto, es decir, una matriz de primeras, segundas y terceras diferencias, respectivamente. Entonces, en cada bloque se inicia el procedimiento iterativo de acuerdo al valor inicial γ_0 de la Section 3.4, dado por la Ec. (3.30). A partir del valor inicial para cada bloque, se realizaron aproximadamente 30 iteraciones, obteniendo para cada una de ellas su correspondiente DTP recuperada. A su vez, cada distribución recuperada es comparada con la distribución propuesta teóricamente a través del error de ajuste entre ambas, lo cual nos permite discernir el momento en el que hemos alcanzado el valor óptimo de cada uno de los bloques. En la Fig. 4.23(a) se presentan las recuperaciones óptimas para cada bloque y en la Fig. 4.23(b) el mapeo que arroja el proceso iterativo al optimizar la elección del parámetro de suavizado, en función del error entre la distribución recuperada y la propuesta.

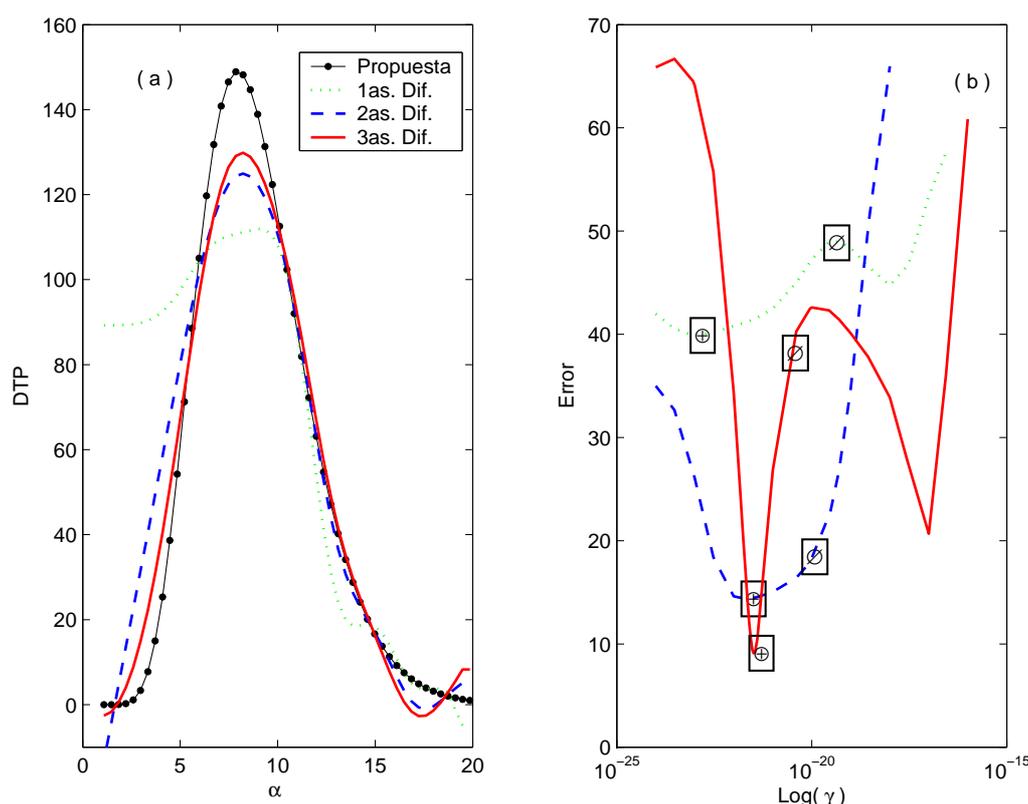


Figura 4.23: Evolución de γ para tres operadores de suavizado en una distribución gama de partículas pequeñas. En (a) se muestran las recuperaciones óptimas para cada operador de suavizado. En (b) se muestra la evolución de γ para cada operador de suavizado, mientras que los valores de γ_0 y γ_{opt} , se representan por los símbolos \emptyset y \oplus , respectivamente.

Podemos observar que la recuperación óptima para el caso del operador de primeras diferencias no es muy buena [ver línea punteada en la Fig. 4.23(a)]; los valores inicial y óptimo del parámetro de regularización [ver línea punteada en la Fig. 4.23(b)] son 2.7×10^{-20} y 1.0×10^{-23} , respectivamente; la recuperación óptima arroja un error de 39.881, mientras que la recuperación para el valor inicial, que no se muestra en la Fig. 4.23(a) y que es aún peor que la óptima tiene un error de 48.868. La recuperación óptima para el caso del operador de segundas diferencias es mucho mejor que la anterior [ver línea quebrada en la Fig. 4.23(a)]; los valores inicial y óptimo del parámetro de regularización [ver línea quebrada en la Fig. 4.23(b)] son 9.0×10^{-21} y 2.0×10^{-22} , respectivamente; la recuperación óptima arroja un error de 14.358, mientras que la recuperación para el valor inicial, que no se muestra en la Fig. 4.23(a) y que también es peor que la óptima tiene un error de 17.914. Las cosas mejoran un poco cuando se utiliza el operador de terceras diferencias. Aquí los valores inicial y óptimo del parámetro de regularización [ver línea continua gruesa en la Fig. 4.23(b)] son 2.8×10^{-21} y 3.2×10^{-22} , respectivamente; la recuperación óptima arroja un error de 9.1, mientras que la recuperación para el valor inicial, que no se muestra en la Fig. 4.23(a) tiene un error de 38.174.

Respecto a los cálculos y resultados mostrados en la Fig. 4.23 debemos destacar que el valor inicial del parámetro de regularización es un valor que está muy cerca del valor óptimo, cualitativamente podemos decir que es un orden de magnitud mayor que el valor óptimo. Se observa siempre que dado el valor inicial de γ , su correspondiente valor óptimo γ_{opt} es menor. Es decir, el proceso iterativo tiene que barrer un intervalo bastante amplio de valores del parámetro de regularización, para evitar la posibilidad de que el algoritmo quede atrapado en un mínimo local de la evolución del parámetro, ya que como puede verse en la Fig. 4.23(b), al menos para los operadores de suavizado de primeras y terceras diferencias se presentan inflexiones considerables en el mapa de evolución del parámetro de regularización.

Para el caso del operador de suavizado de segundas diferencias, su comportamiento es muy regular ya que únicamente presenta un mínimo global correspondiente a una concavidad hacia arriba bastante suave. La cual como primera instancia, genera una primera aproximación útil al procedimiento iterativo de recuperar una DTP óptima. Al respecto, adicionalmente se trabajó con otras distribuciones distintas a la gama y más anchas, principalmente en regiones de tamaños grandes donde incluso la aproximación de Fraunhofer es válida. Los resultados obtenidos son bastante aceptables por lo que el operador de suavizado de segundas diferencias es el que se recomienda generalmente en la literatura como un buen modelo de suavizado para regularizar un problema mal condicionado. Sin embargo, para el caso de distribuciones muy estrechas y en una región sub micrométrica, como es el caso particular que acabamos de analizar, el problema inverso

se vuelve muy inestable por lo que es necesario utilizar un operador de suavizado de terceras diferencia o incluso de orden mayor para aliviar en lo posible la inestabilidad del problema. También es oportuno mencionar que el operador de segundas diferencias es inmune al ruido en las mediciones, ya que al considerar la recuperación de una DTP, sensada en regiones angulares muy diferentes, sigue recuperando las DTP con bastante exactitud, ya que los errores que reporta en las recuperaciones son muy pequeños, menores que la unidad.

En resumen, se demostró que la aplicación de este procedimiento iterativo para seleccionar los parámetros óptimos de regularización, en función del operador de suavizado genera resultados aceptables con distribuciones anchas de partículas grandes y un operador de suavizado de segundas diferencias, pero baja su rendimiento para distribuciones estrechas de partículas pequeñas, por lo que implementar un operador de terceras diferencias o más, mejora un tanto las recuperaciones, pero no llega a ser un resultado óptimo. El rendimiento de este método demanda un considerable tiempo de cómputo.

4.6. Mie y Fraunhofer para Partículas Grandes

Es necesario realizar una comparación entre distribuciones de partículas grandes, tanto como nos permitan numéricamente los algoritmos utilizados en esta tesis. Mostraremos el comportamiento de la aproximación de Fraunhofer con sus dos métodos de inversión, el de CS y el de DVS, para finalmente comparar ambos formalismos con el método de inversión PT para la teoría de Mie.

4.6.1. Fraunhofer con CS y DVS en Partículas Grandes

Para analizar la región de partículas grandes, se consideran pares de distribuciones de los tres tipos que se han manejado hasta ahora y se comparan las recuperaciones con ambos métodos de inversión para la aproximación de Fraunhofer. La Fig. 4.24, muestra el resultado con cada método. Cualitativamente podemos argumentar que el método CS se ajusta mejor a la curva propuesta, sin embargo, en la Tabla 4.7 podemos ver que este método es el que presenta los valores más grandes de error, comparados con los valores del método DVS, cuyo error es ligeramente menor. Dichas recuperaciones presentan desacuerdos adicionales. El método CS presenta ruido en la región de tamaños pequeños, característico del truncamiento de la integral numérica a un ángulo finito θ_{\max} ; mientras que el método DVS se aleja ligeramente de la curva esperada en sus extremos y en el centro, a consecuencia posiblemente de que el conjunto de parámetros angulares de muestreo no son los más adecuados.

Distribución (Figura)	CS	DVS (No. de condición)
Normal (a)	2.74	1.93 (2.35×10^{21})
Normal (b)	1.37	0.72 (5.13×10^{22})
Gamma (c)	2.83	3.12 (2.35×10^{21})
Gamma (d)	1.36	1.12 (1.33×10^{21})
Log-normal (e)	1.13	1.96 (1.43×10^{21})
Log-normal (f)	3.17	2.55 (5.1×10^{21})

Tabla 4.7: Errores con CS y DVS para las distribuciones recuperadas en la Fig. 4.24.

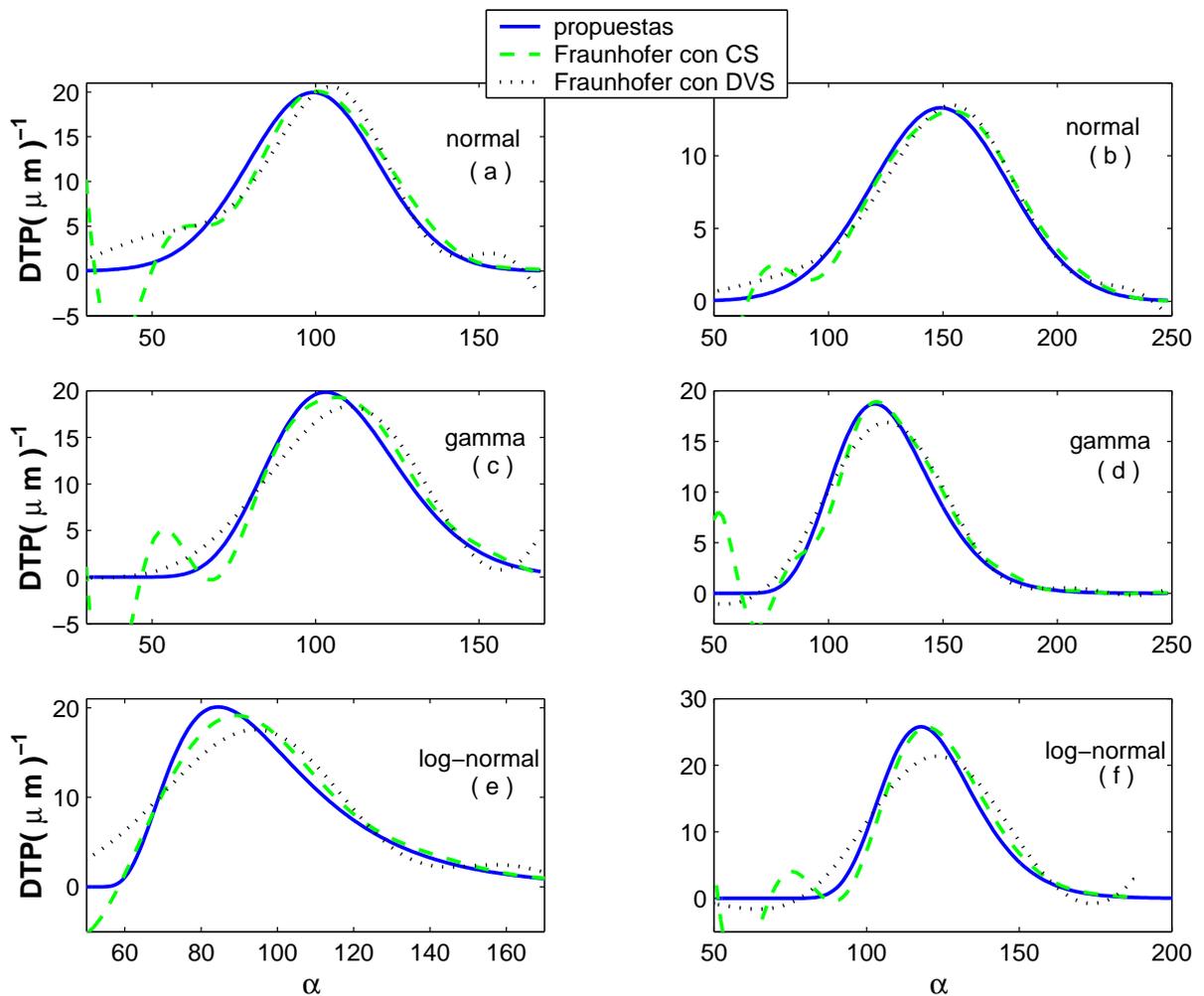


Figura 4.24: Aproximación de Fraunhofer con CS y DVS en partículas grandes. (a) y (b) son distribuciones normales centradas en 100 y 150, respectivamente; (c) y (d), distribuciones gama centradas cerca de 100 y 150, respectivamente; las distribuciones lognormal centradas cerca de 100 y 150 se muestran en (e) y (f), respectivamente.

La Fig. 4.24, también muestra que la aproximación de Fraunhofer presenta ciertas dificultades cuando las distribuciones son asimétricas, sin embargo, ya que se trata de distribuciones muy anchas, las recuperaciones no son malas como sucedía para distribuciones pequeñas y estrechas.

4.6.2. Comparación entre Mie y Fraunhofer

La aproximación de Fraunhofer resuelve el problema para partículas grandes, con un tiempo de CPU 4500 veces menor que el necesario para los cálculos con la teoría de Mie. Por lo tanto, es necesario comparar los resultados de la Fig. 4.24 con su correspondiente cálculo con la teoría de Mie. Sin embargo, dado que las tendencias son muy similares, en la Fig. 4.25 únicamente se presentan las comparaciones para las distribuciones normales discutidas en las gráficas de la Fig. 4.24 (a) y (b).

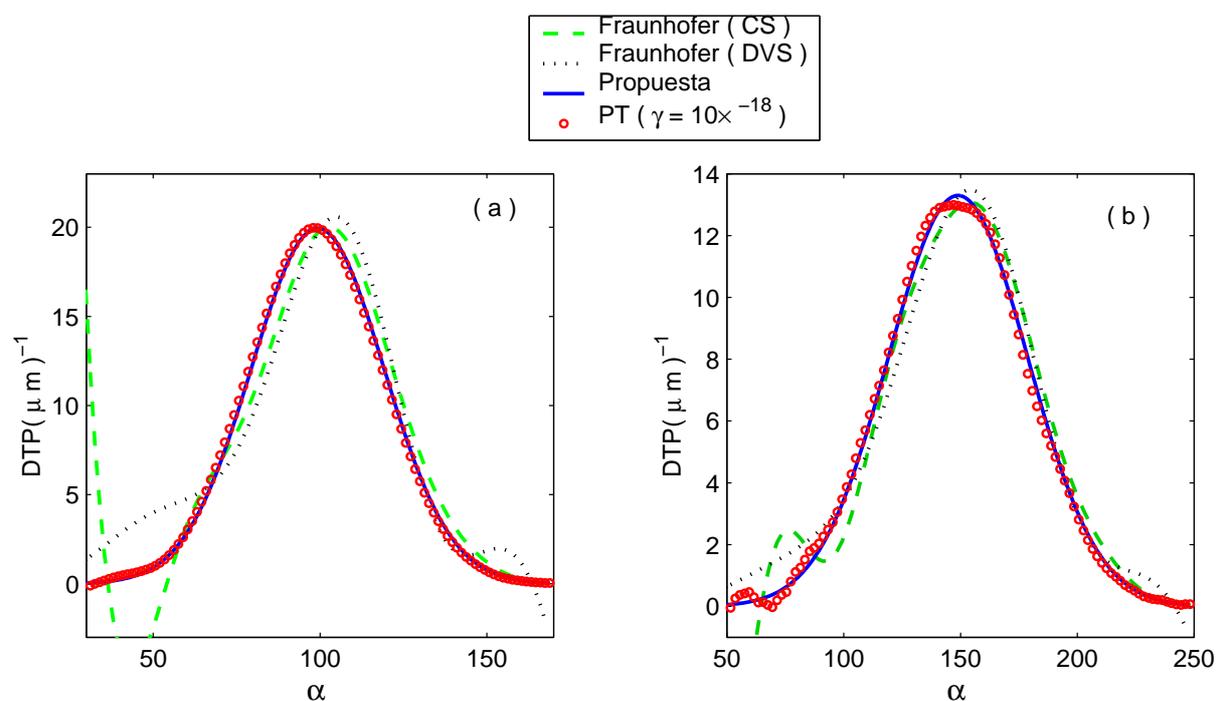


Figura 4.25: Comparación entre Mie y Fraunhofer para dos distribuciones normales de partículas grandes. (a) y (b) corresponden a las distribuciones normales centradas en 100 y 150, respectivamente, discutidas en la Fig. 4.24 (a) y (b).

La recuperación mostrada con círculos corresponde a la teoría de Mie con el método PT y un valor de $\gamma = 10^{-18}$, las cuales siguen bastante bien la forma de la distribución propuesta. Como podemos ver, las dos recuperaciones son muy aceptables, ya que reportan

los errores más bajos, 0.2 y 0.6 en las curvas con círculos de las Figs. 4.25 (a) y (b) respectivamente, comparados con los errores respectivos para cada distribución y método de inversión para la aproximación de Fraunhofer, reportados en las primeras dos filas de la Tabla 4.7. A su vez, para la aproximación de Fraunhofer con los dos métodos de inversión, SVD (línea punteada), y CS (línea a trazos), cualitativamente podemos argumentar que el método CS se ajusta mejor a la curva propuesta, sin embargo presenta un error mayor, a diferencia del método SVD que presenta un error más pequeño, pero la posición del pico se encuentra ligeramente desplazado de la posición esperada. Dichas recuperaciones presentan desacuerdos adicionales. El método CS presenta ruido en la región de tamaños pequeños, característico del truncamiento de la integral numérica a un ángulo finito θ_{\max} ; mientras que el método SVD se aleja ligeramente de la curva esperada en sus extremos y en el centro, debido posiblemente a que el conjunto de parámetros angulares de muestreo no son los más adecuados.

Para todos los fines prácticos, la aproximación de Fraunhofer es altamente recomendable en distribuciones con partículas grandes como las mostradas anteriormente; principalmente por la facilidad numérica que implica y porque los resultados que obtiene no difieren mucho de los que se obtienen con la teoría exacta de Mie en un tiempo de CPU 4500 veces mayor.

Capítulo 5

Resultados con un Algoritmo Basado en una Estrategia Evolutiva

A continuación se presentan los resultados numéricos que se obtienen mediante la utilización de un algoritmo basado en una estrategia evolutiva (EE). Este método se basa en un proceso de optimización, el cual termina cuando un número especificado de iteraciones o generaciones son ejecutadas, o un valor requerido por la función objetivo es cumplido. El resultado que se tiene de simular la evolución, es que una población inicial de individuos no extraordinarios mejora cuando los padres son reemplazados por mejores descendientes. El mejor individuo en la población final puede ser una solución altamente evolucionada para el problema.

Nuevamente para este estudio, se consideran únicamente los tres tipos de distribuciones de la Sec. (3.1), definidas en un intervalo de parámetros de tamaño $[30, 250]$, las cuales mediante la teoría de Mie [ver la Ec. (3.10)] generan numéricamente un patrón de esparcimiento, a partir del cual, se recupera la distribución propuesta mediante la aproximación de Fraunhofer.

5.1. Función Objetivo

La EE usa los operadores de mutación y recombinación para producir los hijos de la siguiente población. Estos dos operadores, conjuntamente con el operador de selección, a través de la función objetivo representan la conexión entre la EE y el problema que se quiere resolver. Una función objetivo tiene como entrada las variables objetivo de un individuo y como salida un número que es una medida del funcionamiento del individuo en el problema a resolver. La función objetivo juega el mismo papel en la EE, que el medio ambiente en la evolución natural. Ya que la interacción de un individuo con su

medio ambiente proporciona una medida de su aptitud para sobrevivir, mientras que la interacción de la variables objetivo con la función objetivo, proporciona una medida de aptitud que la EE usa cuando lleva a cabo la etapa de selección.

El operador de selección utiliza el modelo $(P + M)$ por ser el que mejor precisión arroja[43]. Considera los mejores individuos del conjunto padres+hijos lo cual permite hacer una mayor exploración del espacio de búsqueda. En esta notación, P representa el conjunto de padres y M el conjunto de hijos, así que los mejores individuos que se escogen para la próxima generación son sacados de un muestreo expandido tanto a los padres como a los hijos. Ambos tienen la misma oportunidad de competir para sobrevivir a la próxima generación.

La desventaja más significativa cuando se usa la aproximación de Fraunhofer con los métodos convencionales CS y DVS, reside en que el usuario debe de suponer *a priori* el dominio de la distribución que se busca, mientras que la EE por ser una técnica de optimización, ignora dicha información encontrando la distribución propuesta con bastante precisión. Éste método estocástico recupera una DTP cuando una función objetivo que depende del problema a resolver es minimizada. El tiempo de cómputo es 30 veces mayor que el que utilizan los métodos CS y DVS, el cual aunque es grande, sigue siendo bastante pequeño si se compara con el tiempo que requiere el uso de una recuperación con la teoría de Mie. El procedimiento de optimización comienza con un conjunto de padres, donde cada padre representa un vector de valores reales que codifica una solución posible al problema. Puesto que las representaciones son en números reales, el espacio de búsqueda está determinado por valores continuos, lo cual permite hacer una mejor exploración en menos tiempo.

Cada corrida tarda 30 minutos en una PC con procesador Pentium IV bajo las siguientes condiciones: Una población inicial igual a $P = 50$ se usa en todas las distribuciones; el operador de recombinación es aplicado al conjunto de padres para obtener el 30 % de los hijos, mientras que el operador de mutación proporciona el restante 70 %. Así, el conjunto de padres e hijos tienen un número similar de P individuos. La aptitud relacionada a cada individuo fue determinada usando la Ec. (3.37). El operador de selección elige los mejores P individuos del conjunto de $2P$ padres e hijos para la próxima iteración $t = t + 1$, por medio de un ordenamiento en los valores de aptitud de mayor a menor. En cada iteración se usa la salida del mejor individuo para poder graficar el comportamiento de la función objetivo. Este ciclo es repetido hasta que se obtiene un valor final (meta) tal que la función objetivo sea mínima o cuando un número fijo de iteraciones es alcanzado. Este criterio de paro fue fijado después de probar con diferentes distribuciones.

La Fig. 5.1 ilustra el comportamiento típico de la función objetivo para los tres tipos de distribución analizadas en el presente estudio. Como es evidente, la función objetivo

nunca alcanza el valor meta propuesto 10^{-9} . Por lo tanto, se fija el máximo número de iteraciones en 500 como valor límite conjuntamente con el valor meta 10^{-9} , como **criterio de paro** en el algoritmo. Debido a que principalmente se observa una buena convergencia de las tres distribuciones para 100 iteraciones. Cuando el criterio de paro es alcanzado, el algoritmo proporciona como resultado el mejor individuo de la última generación, representado por un vector que corresponde a una DTP que mejor se acopla al patrón de intensidad analizado.

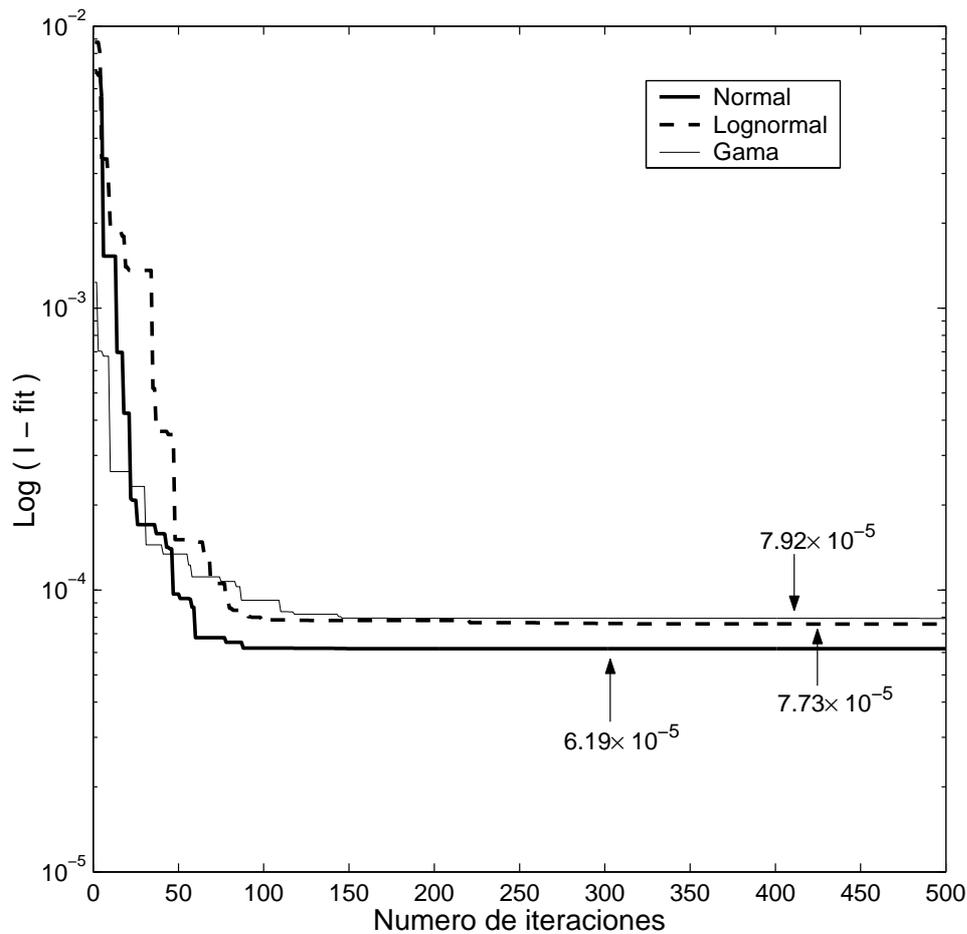


Figura 5.1: Comportamiento típico en la minimización de la función objetivo para distribuciones recuperadas normal, gama y lognormal.

5.2. Recuperación con Distribuciones Normales

El objetivo de esta parte del presente estudio es analizar el comportamiento de la EE con respecto al método de inversión CS, cuando el patrón de intensidad es calculado con

la teoría de Mie y la recuperación se obtiene con la aproximación de Fraunhofer. Igual que antes, se han analizado tres tipos de distribuciones en los dos rangos de tamaños característicos, donde es perfectamente válido aplicar la aproximación de Fraunhofer para recuperar una distribución. Sin embargo, es suficiente con considerar sólo los resultados obtenidos para distribuciones normales, debido a que éstas ilustran adecuadamente las ventajas del algoritmo en cuestión.

Las dos distribuciones analizadas están definidas de la siguiente manera: $30 \leq \alpha \leq 200$ centrada en $\bar{\alpha} = 100$ y desviación estándar $\sigma = 20$, para la primera; $50 \leq \alpha \leq 250$ centrada en $\bar{\alpha} = 150$ y con desviación estándar $\sigma = 30$ para la segunda. Igual que antes, se hace referencia a estos dominios que definen las distribuciones, como partículas intermedias y partículas grandes, respectivamente. Los patrones de intensidad se generaron en una región angular común $0.0573^\circ \leq \theta \leq 10.886^\circ$, con muestreo angular $\Delta\theta = 0.0458^\circ$ y 40 subdivisiones en los tamaños $\Delta\alpha$.

La Fig. 5.2 muestra el comportamiento de la EE respecto al método CS. El error entre ambas recuperaciones con respecto a la distribución propuesta, es medido nuevamente con el error cuadrático medio definido en el capítulo anterior, los cuales son mostrados para las curvas correspondientes con flechas en la Fig. 5.2. La Fig. 5.2(a) reporta las recuperaciones para tamaños intermedios y la Fig. 5.2(b) muestra las recuperaciones para tamaños grandes. Los errores de ajuste entre los patrones de intensidad simulada y los reportados al final del proceso de optimización de la EE, fueron 6.1934×10^{-5} y 1.4415×10^{-5} para tamaños intermedios y tamaños grandes, respectivamente.

Para ambas regiones de tamaños elegidas como dominio de las distribuciones propuestas, la EE genera resultados superiores. Note también de la Fig. 5.1, que el error de ajuste entre los patrones de intensidad calculados y el que genera el EE permanece prácticamente constante a partir de la iteración número 100. Esto confirma que el EE halla la solución más cercana al óptimo global. Recordemos nuevamente que el EE es capaz de obtener el resultado correcto sin información *a priori* del intervalo donde existe la distribución buscada y que las posibles discrepancias en la composición angular del patrón de intensidad esparcida no afectan el rendimiento del algoritmo, como sucede en general cuando la aproximación de Fraunhofer es aplicada para resolver el problema inverso por cuadraturas o con el método CS. Este último punto es claramente observado con la recuperación del método CS en la Fig. 5.2. Así que podemos concluir que en el caso particular de partículas intermedias y grandes, la aproximación de Fraunhofer implementada con el EE obtiene resultados exactos. Finalmente se debe mencionar que los pobres resultados obtenidos con el método CS de la Fig. 5.2, obedecen a una deficiente composición angular en los datos de entrada, lo cual ya se había observado en la discusión del capítulo anterior. Esta es la razón principal por lo que generalmente las recuperaciones

con el método CS no son recomendables cuando se usa la aproximación de Fraunhofer.

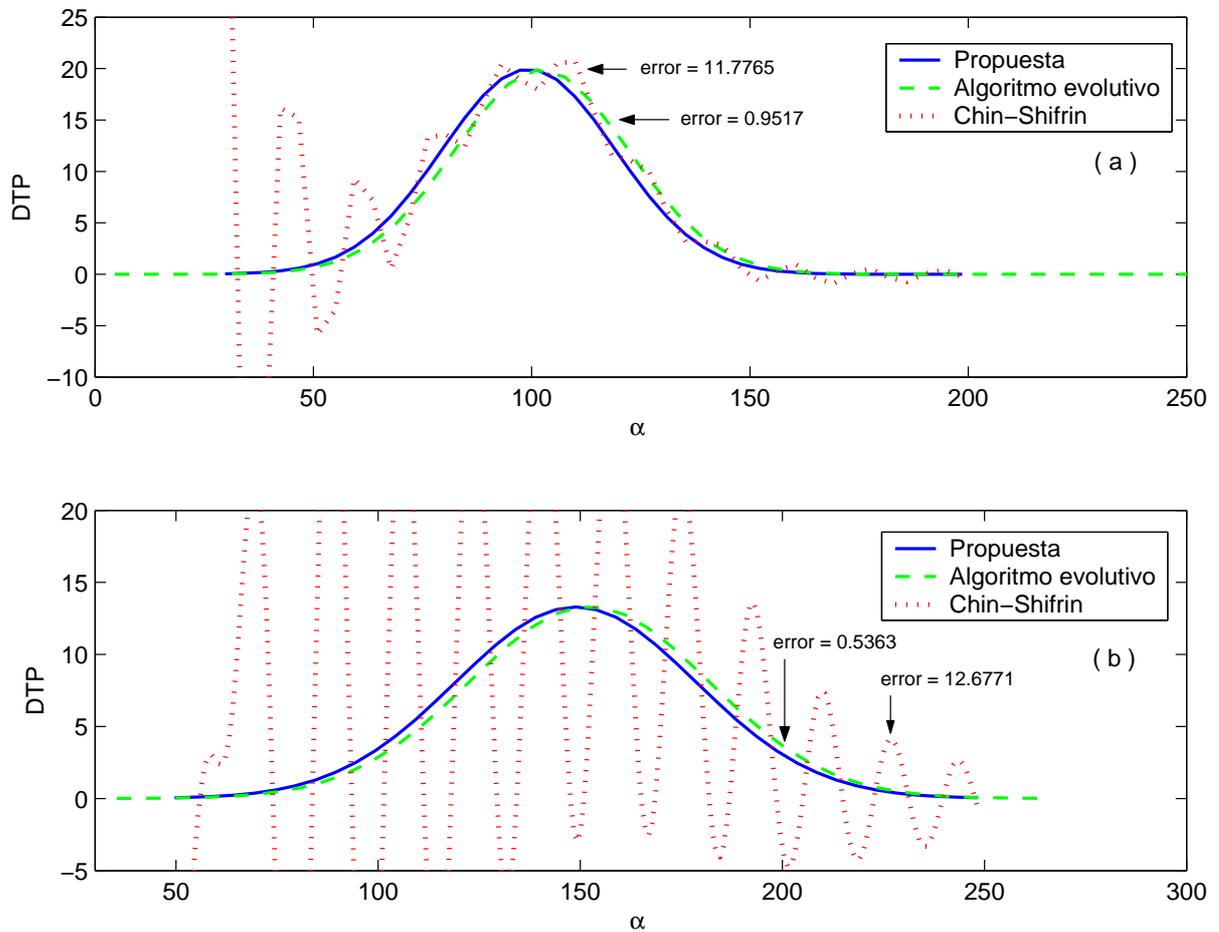


Figura 5.2: Comparación entre la EE y CS en ambos rangos de tamaños. (a) muestra las recuperaciones para tamaños intermedios; (b) las recuperaciones para tamaños grandes; mientras que los errores de recuperación se muestran con flechas en cada curva.

5.3. Robustez del Algoritmo Basado en una Estrategia Evolutiva

Para mostrar la robustez del algoritmo basado en la EE, a partir de un patrón de intensidad correspondiente a una distribución conocida, que pertenece al grupo de distribuciones analizadas en el presente estudio, el método debe ser capaz de seleccionar la solución correcta de entre las tres posibilidades. Ahora en este caso, únicamente se consideran dos distribuciones para llevar a cabo el estudio, la distribución gama y la distribución lognormal, debido a que el rendimiento de la EE con distribuciones normales ya

fue discutido, además de que los resultados que se obtienen para las tres distribuciones son bastante similares y presentan la misma tendencia en la recuperación. Se consideran los mismos dominios y muestreo de la Sec. 5.2.

La Fig. 5.3 muestra el comportamiento de la EE para ambas distribuciones. El rendimiento de la EE es similar con respecto a las simulaciones numéricas previas. Las Figs. 5.3(a) and 5.3(b) corresponden a los patrones de intensidad generados por distribuciones gama en ambos rangos de tamaños, intermedios y grandes. Mientras que las Figs. 5.3(c) y 5.3(d) corresponden a los patrones de intensidad generados por distribuciones lognormal.

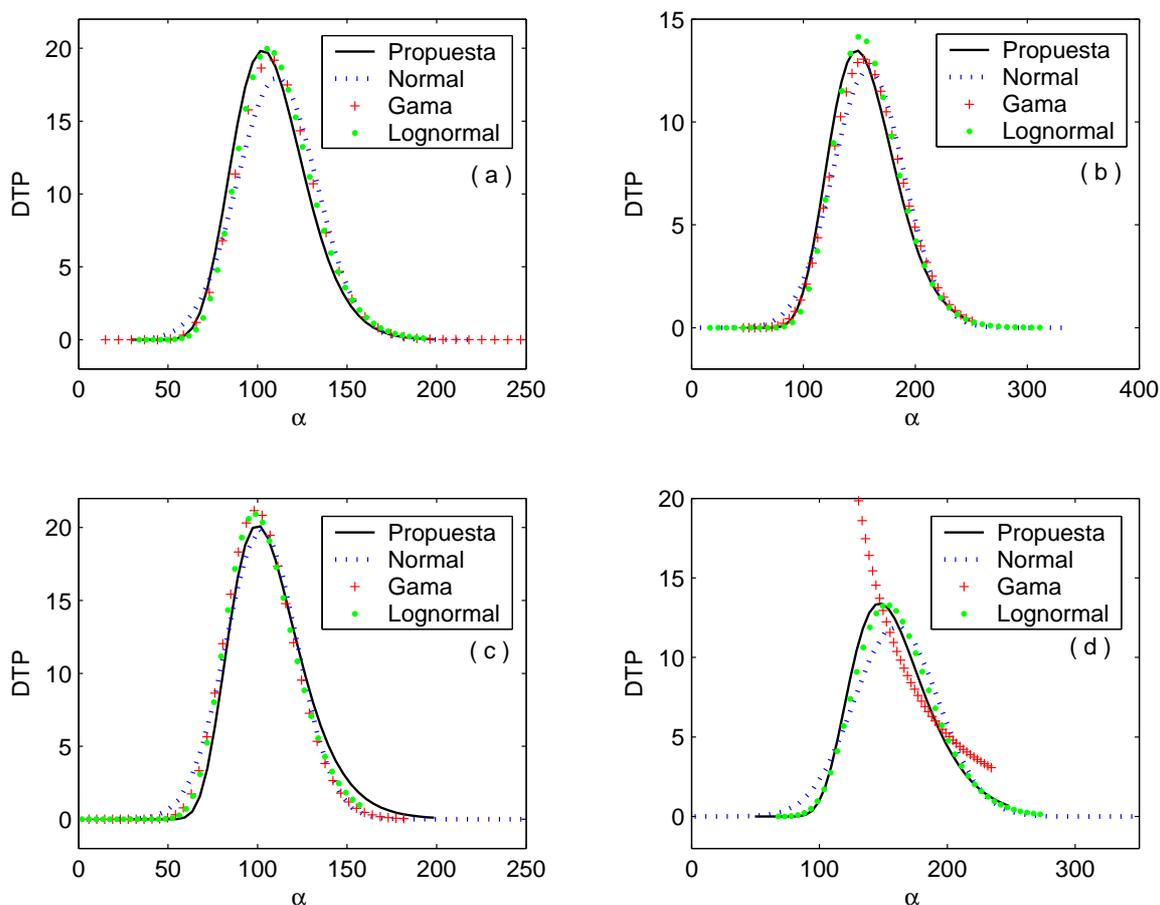


Figura 5.3: Robustez del algoritmo a partir del patrón de distribuciones gama y lognormal. Las tres distribuciones tanto en (a) como en (b), se recuperaron a partir de un patrón generado por una distribución gama en ambos rangos de tamaños, respectivamente. Las tres distribuciones tanto en (c) como en (d), se recuperaron a partir de un patrón generado por una distribución lognormal en ambos rangos de tamaños, respectivamente.

Las curvas muestran una DTP recuperada prácticamente idéntica, y se puede ver en

la Tabla 5.1 (marcados con negrita) que el error de ajuste y el error de recuperación son mínimos cuando la EE selecciona la distribución gama. En las Figs. 5.3(a) and 5.3(b) las distribuciones normales marcadas con las curvas punteadas y las lognormal marcadas con círculos, son recuperadas a partir del patrón de intensidad generado por la distribución gama arriba mencionada. En el primer caso, el error de ajuste y el error de recuperación crecen debido a que cuando la EE transforma el problema ajuste en un problema de optimización, la solución encontrada no es la cercana al óptimo. Por otro lado, cuando la intensidad de la distribución propuesta es analizada con una distribución lognormal el algoritmo mejora su resultado. Aquí la distribución lognormal recuperada es más cercana a la distribución propuesta en ambos rangos de tamaño; sin embargo como ya se ha mencionado arriba, el error de recuperación mínimo es obtenido cuando la EE analiza la distribución propuesta con una distribución gama. Por lo tanto se concluye que, la EE puede reconocer la distribución correcta de entre las tres posibilidades de distribución normal, gama y lognormal.

Distribución	Gama intermedias		Gama grandes	
	E – ajuste	E - recuperación	E – ajuste	E - recuperación
Normal	9.97×10^{-5}	1.84	2.05×10^{-4}	1.14
Gama	7.92×10^{-5}	1.02	1.73×10^{-4}	0.67
Lognormal	8.28×10^{-5}	1.14	1.91×10^{-4}	0.72

Tabla 5.1: Errores de ajuste y recuperación para las distribuciones gama propuestas.

Ahora se observan los resultados obtenidos para las dos distribuciones lognormal propuestas, mostrados en las Figs. 5.3(c) y 5.3(d). Las curvas punteadas que corresponden a las recuperaciones con una distribución normal, muestran resultados muy parecidos a los casos anteriores, es decir, las distribuciones normales en este caso son las que peormente se ajustan a los datos de entrada para ambas regiones de tamaños. Asimismo, las recuperaciones con una distribución gama es aceptable en la región de tamaños intermedios, sin embargo, para la región de partículas grandes la distribución recuperada en la Fig. 5.3(d) es muy pobre. La Tabla 5.2 muestra los correspondientes errores de ajuste y recuperación para todas las curvas de las Figs. 5.3(c) y 5.3(d).

Respecto al ajuste con una distribución lognormal, podemos ver de las Figs. 5.3(c) y 5.3(d) y la Tabla 5.2 que esta distribución, marcada con círculos, genera resultados superiores, ya que obtiene una distribución prácticamente idéntica a la distribución propuesta. Otra vez, en el caso particular de una distribución lognormal usada para generar un patrón de intensidad, el EE genera los mejores resultados, mencionado además que la asimetría

Distribución	Lognormal intermedias		Lognormal grandes	
	E – ajuste	E - recuperación	E – ajuste	E - recuperación
Normal	1.21×10^{-4}	1.18	2.15×10^{-4}	1.35
Gama	1.46×10^{-4}	1.24	1.85×10^{-4}	9.59
Lognormal	7.73×10^{-5}	1.12	1.71×10^{-4}	0.66

Tabla 5.2: Errores de ajuste y recuperación para las distribuciones lognormal propuestas.

de la distribución propuesta en ambos rangos de tamaños no afectan el rendimiento de dicho método evolutivo.

De los resultados obtenidos mediante simulaciones numéricas para los tres tipos de distribuciones, normal, gama y lognormal, se puede concluir que la EE utilizada en este trabajo, es independiente del tipo de distribución monomodal que se utilice. Dicho algoritmo puede ajustar los datos que se le dan como entrada con un tipo de distribución no relacionada a la distribución propuesta, por supuesto con un poco de menos exactitud en los resultados. Sin embargo, este método puede ser de mucho valor cuando la información relacionada con la distribución que se está buscando no se conoce, o cuando la única tarea importante es dar un diagnóstico del tamaño de las partículas y no del tipo de distribución que se encuentra presente en una muestra real.

Finalmente, es importante señalar que este algoritmo basado en una EE sólo puede analizar patrones de intensidad que corresponden a funciones de distribución de tamaños monomodales, debido a que únicamente puede realizar la búsqueda hasta con un máximo de seis variables de optimización. Por lo que para el caso de una distribución monomodal, las variables que se buscan por optimización son cinco. De este modo el algoritmo converge rápidamente a una solución exacta a partir de la población número 100 si las distribuciones son suaves y anchas, ya que si las distribuciones son estrechas y bastante asimétricas, es hasta la iteración 420 cuando empieza a converger a una solución cercana al óptimo global. Durante cada experimento el algoritmo utilizó alrededor de 30 minutos para realizar una corrida, mientras que el tiempo utilizado por el método CS únicamente es de 57 segundos. Por lo tanto, cuando se desconoce totalmente la información de la distribución que se busca es preferible consumir más tiempo de cómputo para hallar una solución, lo cual hace que el algoritmo basado en una EE presentado en este trabajo cobre importancia.

Capítulo 6

Algunos Resultados Experimentales

El punto de partida para la discusión de resultados experimentales es la descripción de las partes que forman el arreglo experimental utilizado. Cualquier analizador de partículas por difracción de luz láser, comprende dos partes fundamentales: Un módulo de medición que contiene toda la parte óptica del instrumento, donde se encuentran principalmente el láser, el detector, y diversas componentes ópticas; y una unidad de control formada por una interface y una computadora que dirige las mediciones y realiza el análisis y presentación de los datos. En el Cap. 2 se discutió ampliamente todo lo referente a un analizador de difracción láser y la teoría que lo fundamenta, por lo que a continuación, respecto a dicho arreglo experimental utilizado en el presente trabajo, únicamente se mencionarán detalles de las componentes que afectan su desempeño y rango dinámico, tales como el detector, el láser, y la lente colectora.

6.1. Método de Detección Utilizado

Debido a que el patrón de luz difractado por las partículas tiene simetría circular en el plano focal de la lente colectora (ver la Fig. 2.8), los instrumentos comerciales utilizan un fotodiodo detector basado en anillos concéntricos con geometría fija, especialmente construido para dicha aplicación[40], el cual no existe comercialmente en el mercado [ver la Fig. 2.10]. Una comparación entre los radios de los elementos que forman el detector, con los valores que reporta la literatura se muestran en la Fig. 6.1. Las mediciones que se realizaron de dichos radios (marcadas con cuadros y cruces en la Fig. 6.1), tienen una incertidumbre de $\pm 5\mu\text{m}$.

La detección en el presente trabajo se realizó con un medidor de potencia Melles Griot, el cual consiste en un detector de Silicio con un área circular activa de 10mm de diámetro. Para realizar mediciones, se cubre el área activa del medidor de potencia con una placa opaca, dejando únicamente en el centro un microagujero de diámetro predeterminado, el

cual deja pasar luz únicamente en su abertura circular y simula una parte de un elemento detector del fotodiodo comercial. Inicialmente se hace coincidir el centro de la abertura con la intersección entre el eje óptico y el plano focal de la lente colectora; dicho punto corresponde al centro del patrón de difracción que se va a medir. El movimiento del detector se realiza mecánicamente sobre los dos ejes del plano de detección y la dirección de propagación, mediante un arreglo de tres platinas sobre las que se encuentra montado, las cuales le permiten desplazamientos tridimensionales con una precisión de $5\mu\text{m}$. Por lo tanto, una vez que se encuentra el centro, el detector es desplazado mecánicamente sobre el eje horizontal del plano de detección, como se muestra en la Fig. 6.2.

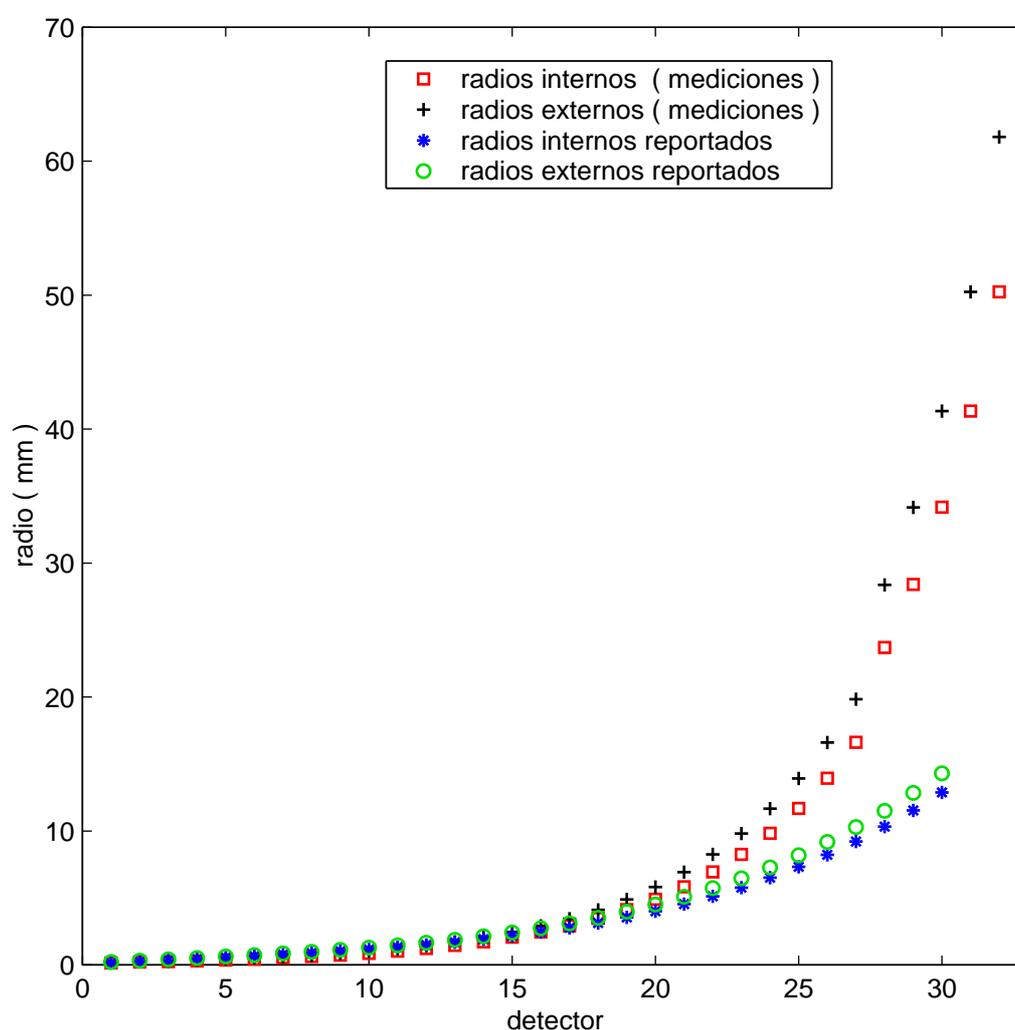


Figura 6.1: Dimensiones del detector comercial reportadas en[40], comparadas con mediciones realizadas en este trabajo.

Cada región anular (1, 2, 3, ..., j), se asocia a un detector del mismo grosor y área

diferente $(A_1, A_1, A_1, \dots, A_j)$, debido al incremento en sus respectivos radios interno y externo. Dichas regiones anulares están igualmente espaciadas y no se traslapan entre ellas, de tal forma que, la energía luminosa que se asocia a cada anillo detector es proporcional a la energía que recibe el microagujero, multiplicada por la razón entre áreas. Es decir, para el j -ésimo detector, si a_0 es el área del microagujero y e_j la energía que registra; mientras que por otro lado, A_j es el área total del j -ésimo anillo detector y E_j la energía que registra, entonces, por una simple regla de tres se tiene que

$$E_j = e_j \left(\frac{A_j}{a_0} \right). \quad (6.1)$$

De donde la intensidad, definida como energía por unidad de área, en el j -ésimo anillo detector sería

$$I_j = \frac{E_j}{A_j} = \frac{e_j}{a_0} = i_j, \quad (6.2)$$

donde i_j , es la intensidad sobre el j -ésimo microagujero.

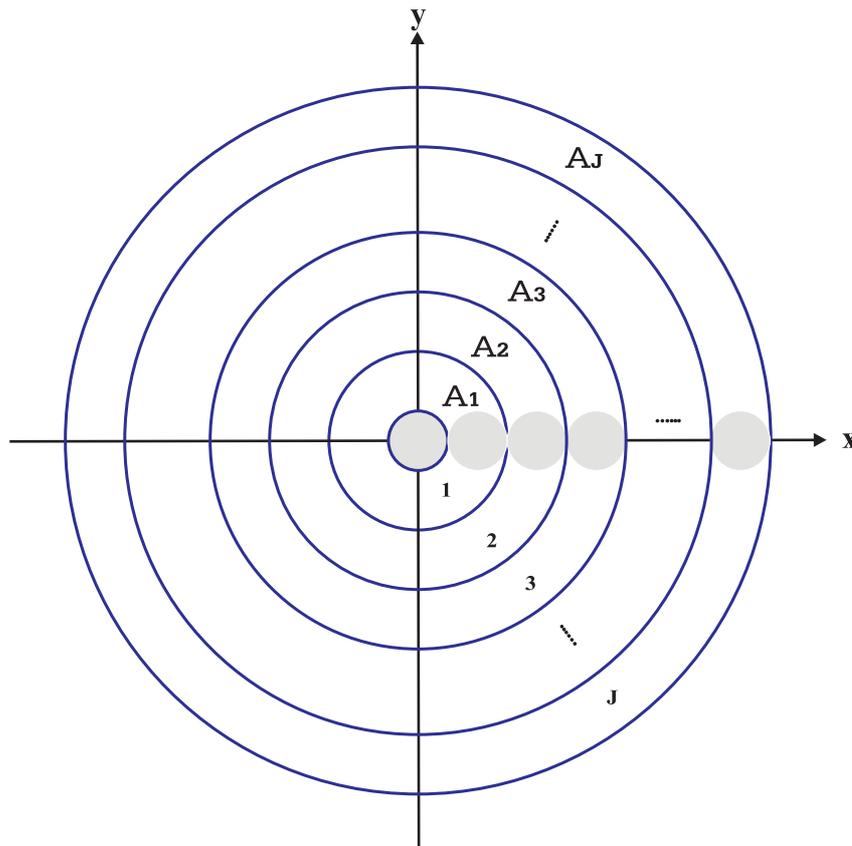


Figura 6.2: Esquema de detección utilizado en las mediciones experimentales del presente trabajo.

El rango dinámico del medidor de potencia utilizado alcanza 5 órdenes de magnitud, desde varios mW hasta fracciones de μW . Sin embargo, debido a que para tener una buena resolución en los tamaños, es necesario considerar grosores pequeños en los anillos detectores, el diámetro del microagujero es pequeño por lo que la señal que se mide es muy ruidosa. Esto introduce problemas serios que más adelante se mencionarán. La señal es digitalizada mediante una tarjeta conectada a una computadora, de donde los archivos de datos sirven como entrada a programas escritos en MatLab[46] con dos de los algoritmos mencionados en el capítulo 3.

6.2. El Láser y la Lente Colectora

La fuente de iluminación que se utilizó fue un láser de He-Ne, cuya potencia emitida es de 10mW a $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$. Para filtrar el haz, a continuación del tubo del láser se coloca un objetivo de microscopio ajustado a un filtro espacial. El filtro espacial es un microagujero de $20\mu\text{m}$ de diámetro y el objetivo de microscopio tiene una amplificación de 25. Entonces, mediante una lente simple de 110mm de distancia focal y diámetro de 20mm, colocada a 110mm del objetivo de microscopio, se obtiene un haz colimado de 20mm de diámetro. Dicho diámetro puede ser modificado para ganar una distancia mayor entre la muestra y la lente colectora antes de que se presente viñeteo, utilizando otra combinación distinta de microagujero, expansor y lente colimadora. Sin embargo, mediante un diafragma, se puede disminuir el ancho del haz a un diámetro conveniente a la muestra que se analiza, desde 2mm hasta 18mm de diámetro.

Después de filtrar, colimar y disminuir el diámetro del haz, la potencia emitida del haz que incide sobre una muestra se reduce drásticamente. Pasa de 10mW a 5.6mW, para un diámetro de haz de $D_h = 12\text{mm}$. En la Fig. 6.3 se muestra el promedio de la potencia emitida durante 4 horas. Ya que se utiliza un láser no estabilizado, la potencia tiene fluctuaciones como puede notarse. Sin embargo, dichas fluctuaciones no representan un problema serio si el tiempo en que se realizan las mediciones es pequeño, de tal forma que en ese tiempo el láser sufre fluctuaciones muy pequeñas.

La lente colectora que se utilizó fue la del analizador Malvern, de la cual se dice que está bien corregida para aberración esférica y coma, y que prácticamente no tiene curvatura de campo. Su distancia focal es $F = 300\text{mm}$, con diámetro $D_L = 60\text{mm}$. Entonces, idealmente se considera que la respuesta del sistema de difracción láser no depende de la posición de las partículas respecto a la lente colectora, lo cual es cierto, sólo cuando no se presenta viñeteo en dicha lente. Es decir, cuando toda la luz difractada por las partículas, inciden dentro de la abertura clara de la lente colectora. La existencia de viñeteo genera ciertos límites permisibles sobre la distancia máxima D_{max} entre las partículas y la lente

colectora. El cálculo de dicha distancia máxima ya fue discutido en la Sec. 2.4, de donde para el caso particular de la lente utilizada, con un haz de radio $r_h = 6\text{mm}$, y un detector con $r_d = 67\text{mm}$, se obtiene que $D_{\text{max}} = 107.5\text{mm}$.

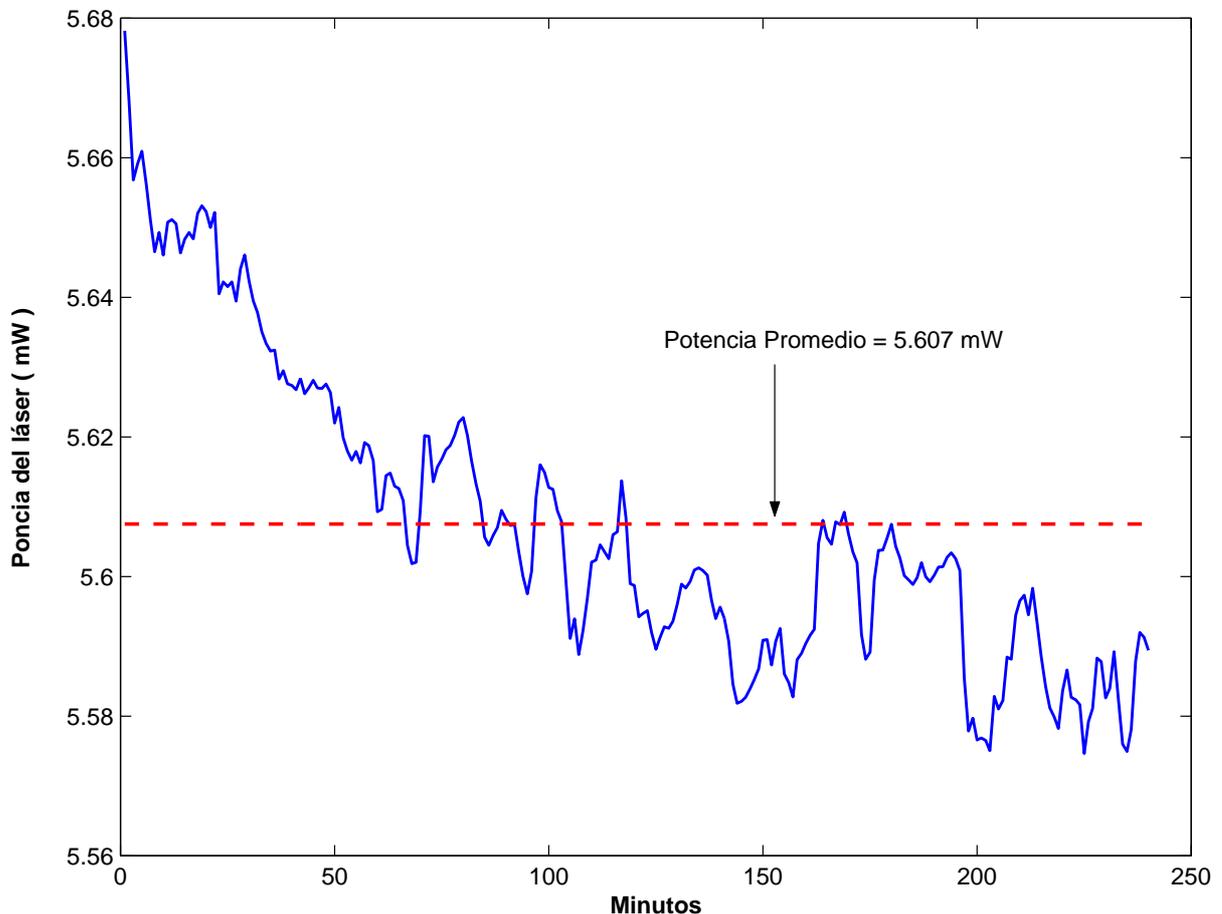


Figura 6.3: Potencia emitida durante 4 horas del haz láser colimado.

6.3. Mascarillas con Aberturas Circulares

La medición experimental con un aerosol o muestra de partículas con un alto grado de repetibilidad y estabilidad resultan excesivamente caros (estándares de calibración), por lo tanto, mediciones con el arreglo experimental se realizaron con cuatro mascarillas claras con aberturas circulares opacas, las cuales fueron fabricadas por el departamento de microelectrónica del INAOE mediante un proceso litográfico de fotoreducción, de tal forma que 2000 aberturas que obedecen a una distribución normal con media y desviación estándar conocidas, son aglutinadas en un círculo de 5mm de diámetro. La Fig. 6.4 muestra

la ampliación de una de estas mascarilla generada con un radio medio de, $a = 30\mu\text{m}$, y una desviación estándar de $\sigma = 2.5\mu\text{m}$. Para la descripción de tamaños en este capítulo, se utilizan los radios y diámetros de las partículas, en vez del parámetro de tamaño como antes. Lo anterior obedece a que más adelante se realizan comparaciones con mediciones en un analizador comercial el cual maneja este formato.

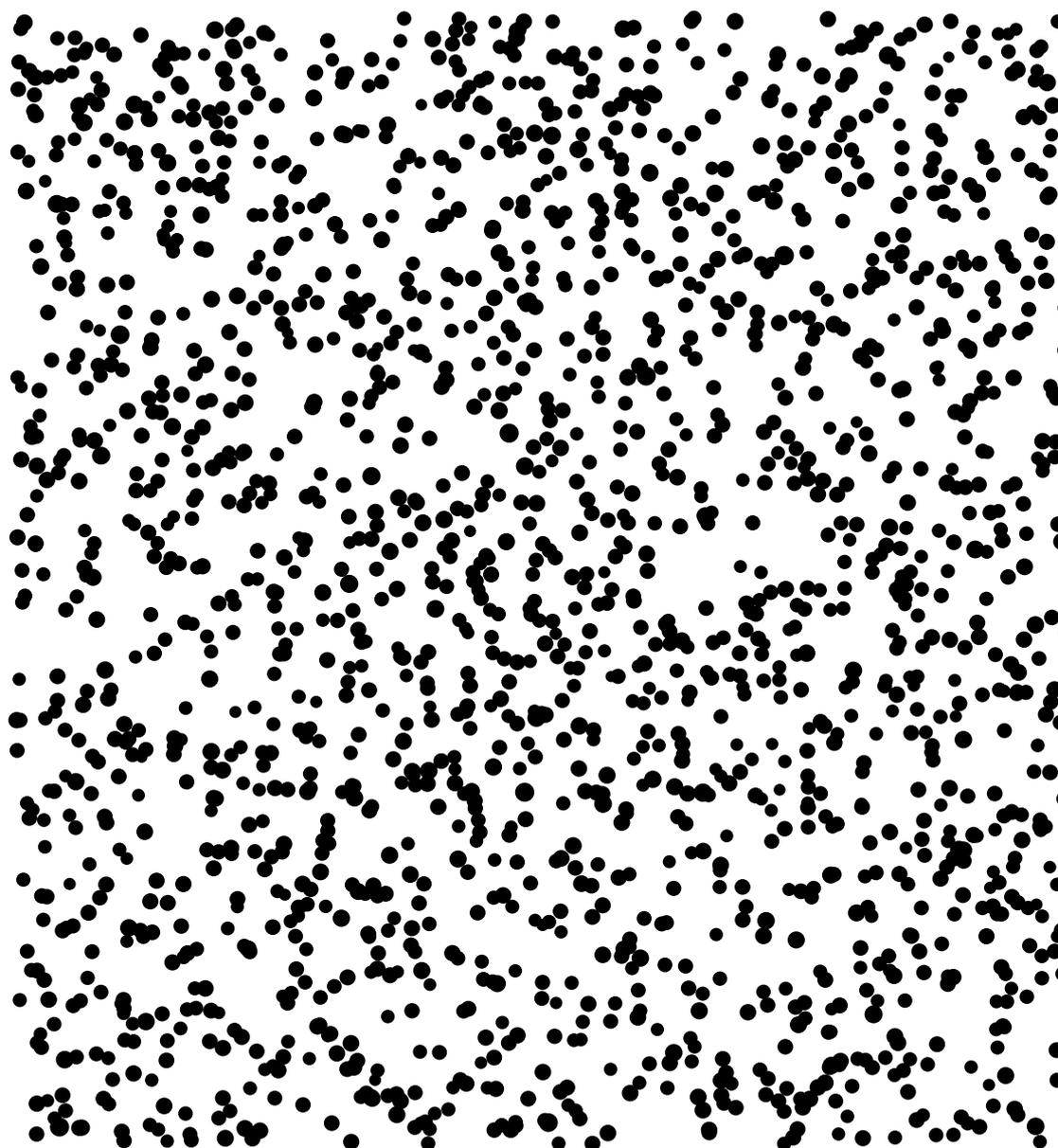


Figura 6.4: Mascarilla con 2000 aberturas circulares.

Originalmente se pidió que el factor de reducción en la fabricación de las mascarillas fuera de 200 veces, sin embargo, al comparar mediciones individuales del diámetro de una

misma abertura elegida al azar, tanto en una impresión en papel antes de la reducción, como en la mascarilla misma, se encuentra que el factor de reducción fue de 198, con un error relativo dado por $\pm 0.33\%$. Dicho valor genera un error del 1% en los tamaños de las aberturas que están presentes en las mascarillas. Por lo tanto, en los resultados experimentales esperados para cada una de dichas mascarillas, un 1% de error se puede atribuir al factor de reducción. Cabe mencionar que el factor de reducción se obtuvo realizando 10 mediciones del diámetro de la misma abertura, tanto en la mascarilla como en la impresión en papel. Para las mediciones en la mascarilla, se utilizó un microscopio convencional calibrado con una retícula de 1mm de largo con subdivisiones de $10\mu\text{m}$, obteniéndose un diámetro de $88.040 \pm 0.004\mu\text{m}$. Mientras que para la impresión en papel se utilizó un “microscopio viajero”, obteniendo un diámetro de $17434.1 \pm 55.4\mu\text{m}$. En ambas estimaciones del diámetro, la incertidumbre es la desviación estándar de las 10 mediciones. Así que finalmente, el factor de reducción es la razón entre los diámetros, la cual da un valor de 198, y el error relativo $\pm 0.33\%$, se calcula como la suma de los errores relativos de cada medición[47].

6.4. Repetibilidad en las Mediciones Experimentales

Antes de realizar el experimento y debido a que se trata de una mascarilla con distribución conocida, se pueden simular numéricamente tanto el patrón de difracción a medir, como la función a recuperar. De esta forma se pueden conocer anticipadamente los parámetros idóneos de muestreo para obtener una recuperación aceptable. En la Fig. 6.5 se muestran las distintas recuperaciones teóricas mediante el algoritmo CS, para diferentes razones de muestreo (grosor en los detectores), y distinto ángulo máximo de muestreo, correspondientes a la mascarilla anterior de la Fig. 6.4. La recuperación más cercana a la distribución propuesta [ver Fig. 6.5(d)], se obtiene para un ángulo $\theta_{\text{max}} = 3.1^\circ$, para detectores igualmente espaciados de $100\mu\text{m}$ de grosor (incrementos en el muestreo $\Delta r = 100$). Por lo tanto, a partir de dicha información, se puede analizar la repetibilidad en mediciones experimentales y al mismo tiempo, tener elementos de juicio para la correcta interpretación de las limitaciones que presenta el arreglo experimental.

Las mediciones experimentales se llevaron a cabo de la siguiente manera: Primero se midió el ruido de fondo en las diferentes posiciones angulares a considerar, ocasionado por reflexión y refracción, así como las impurezas del vidrio que sirve como substrato a la mascarilla. Con dicha medición también se pretende anular la poca luz ambiente dentro del laboratorio y el ruido electrónico que producen el detector (conocido como offset) y la tarjeta con que se leen los datos. A continuación se coloca la mascarilla en el haz, se mide el patrón difractado nuevamente en las posiciones angulares consideradas y se le resta el

ruido de fondo. El grosor de cada detector es de $800\mu\text{m}$, entonces, como es necesaria una resolución de $100\mu\text{m}$ en los anillos detectores, los datos experimentales fueron interpolados para alcanzar la resolución requerida. Se utilizó una rutina de spline cúbico implementada en MatLab[46], entre cada par consecutivo de mediciones experimentales.

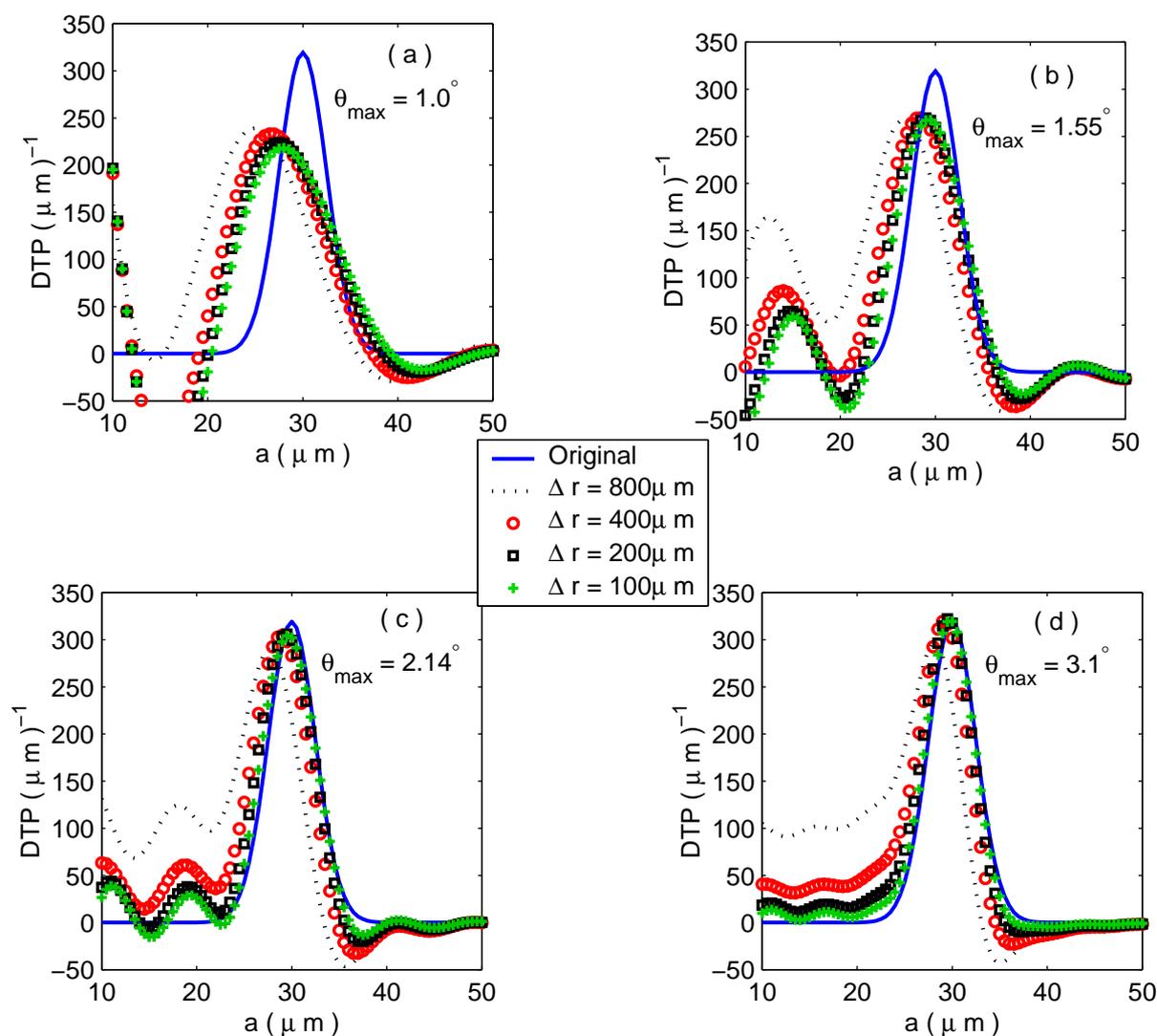


Figura 6.5: Simulaciones para la mascarilla con radio medio $a = 30\mu\text{m}$, y desviación estándar $\sigma = 2.5\mu\text{m}$. Las recuperaciones para: $\theta_{\text{max}} = 1.0^\circ$ se muestran en (a), para $\theta_{\text{max}} = 1.55^\circ$ en (b), para $\theta_{\text{max}} = 2.14^\circ$ en (c), y para $\theta_{\text{max}} = 3.1^\circ$ se muestran en (d),

La Fig. 6.6 muestra las mediciones experimentales y su correspondiente recuperación mediante el algoritmo CS. Tanto la distribución recuperada [marcada con línea quebrada en la Fig. 6.6(a)], como el patrón de intensidad generado por la mascarilla [también marcado con línea quebrada en la Fig. 6.6(b)], no coinciden totalmente con las simulaciones

previas, a pesar de que las mediciones se realizaron con los parámetros que diagnostica la simulación. La distribución recuperada tiene una tendencia cercana a la distribución teórica propuesta. Así que se puede concluir que los resultados obtenidos para dicha mascarilla son aceptables, ya que reproducen una distribución centrada en alrededor de $29\mu\text{m}$. El pico adicional que aparece en aproximadamente $15\mu\text{m}$, se atribuye a las imperfecciones en el vidrio que sirve como sustrato a la mascarilla y a un muestreo angular inadecuado como lo predicen las simulaciones de la Fig. 6.5.

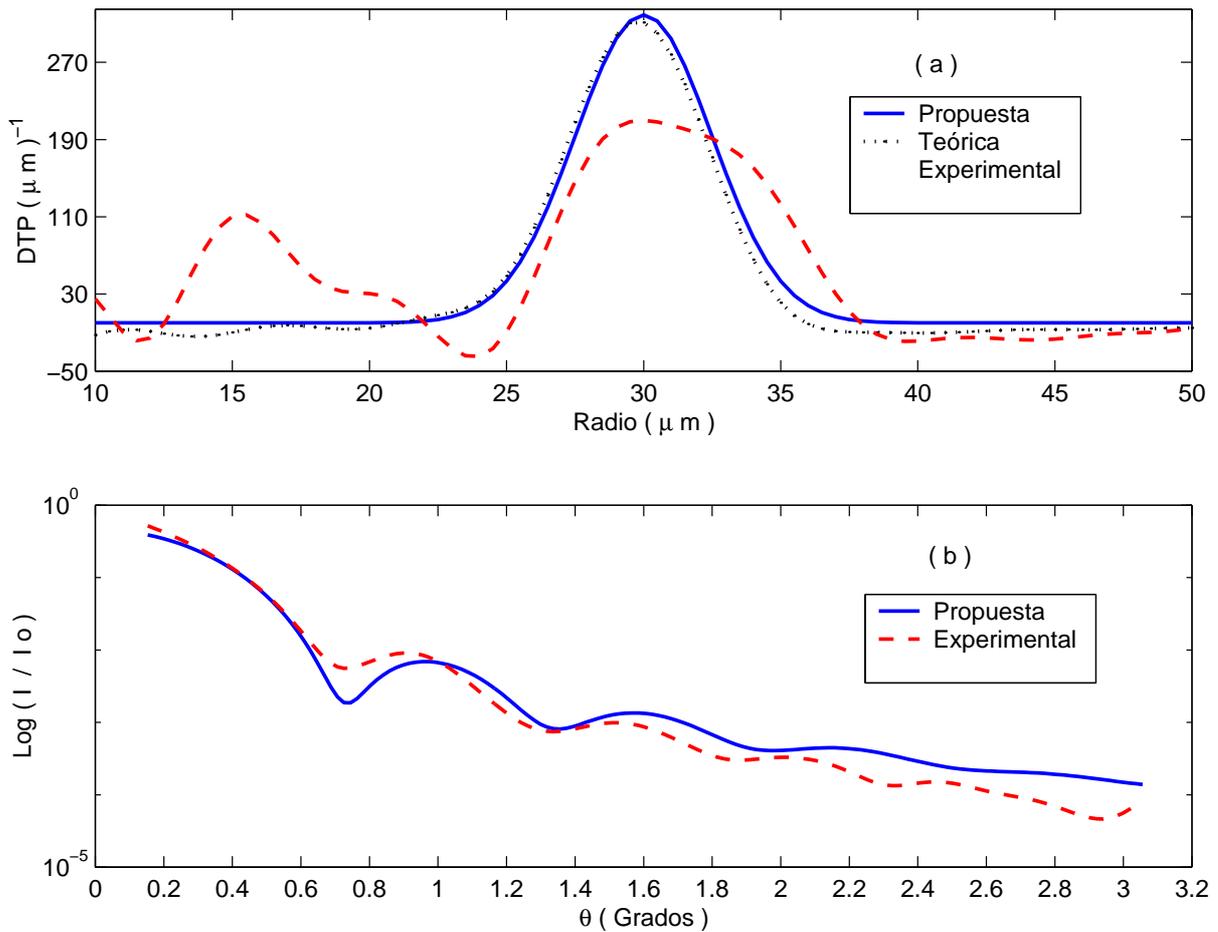


Figura 6.6: Resultados experimentales para la mascarilla con radio medio $a = 30\mu\text{m}$, y desviación estándar $\sigma = 2.5\mu\text{m}$. En (a) se muestran las funciones de distribución y en (b) los patrones de intensidad respectivos.

Los resultados experimentales para esta mascarilla en particular, presentan una repetibilidad muy alta como se muestra a continuación. En la Fig. 6.7 se incluyen tres mediciones adicionales a la mostrada en la Fig. 6.6 para la misma mascarilla en diferentes días y horario. La distribución recuperada fue prácticamente la misma en los cuatro

eventos, con la particularidad de que en las últimas tres, sólo fue posible muestrear hasta la mitad del ángulo óptimo que predice la simulación presentada en la Fig. 6.5, debido a que el ruido de fondo a partir de $\theta_{\max} = 1.6^\circ$ era mayor que la señal que se medía.

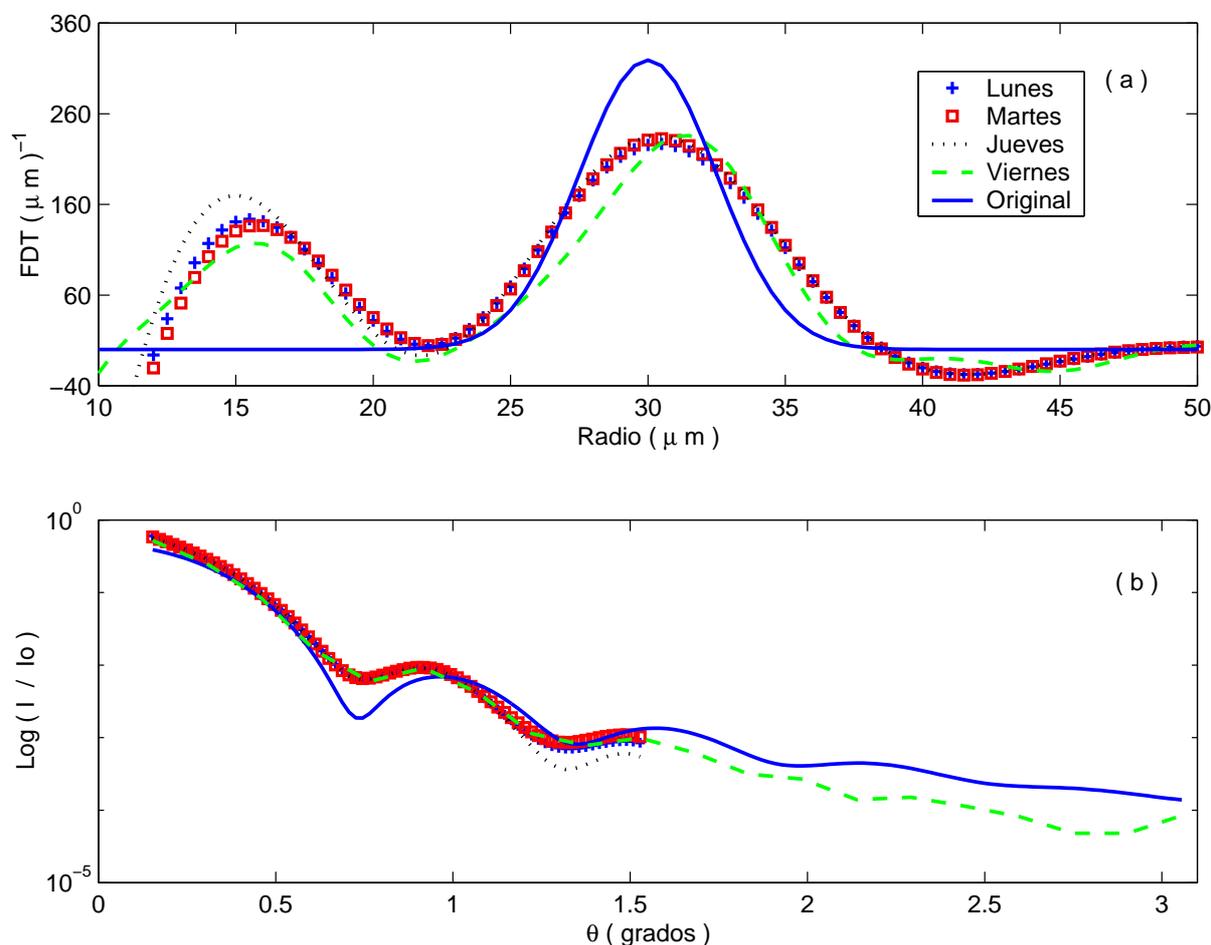


Figura 6.7: Repetibilidad en las mediciones con una mascarilla. (a) muestra las recuperaciones y en (b) las intensidades medidas durante los cuatro eventos. Dada la similitud entre mediciones, no se distinguen bien por estar sobrepuestas.

La distribución recuperada marcada con la línea quebrada en la Fig. 6.7(a) corresponde a la primera medición mostrada antes en la Fig. 6.6. Dicha recuperación mejora al medir hasta un θ_{\max} menor, ya que aquí se considera únicamente el mismo número de datos que en las tres mediciones que se hicieron posteriormente, notándose una mejora respecto a la recuperación que se presentó en la Fig. 6.6(a), a pesar de que el pico modal se desplazó a $31\mu\text{m}$. Por lo tanto, se puede inferir claramente que el problema principal en el arreglo experimental se debe al sistema de detección utilizado, el cual depende principalmente de dos factores íntimamente relacionados, señales muy pequeñas que deben medirse y las

fluctuaciones en el láser, ya que las mediciones se realizaron en tiempos relativamente grandes, 240 minutos para las medición de la Fig. 6.6(b) y 96 minutos para la medición de la Fig. 6.7(b).

La cantidad de luz esparcida por la mascarilla es extremadamente pequeña, casi igual al ruido de fondo. Esta situación se presenta ya que se está usando el mismo microagujero detector, con un diámetro muy pequeño ($800\mu\text{m}$). La Fig. 6.8 muestra las comparaciones entre la señal y el ruido de fondo en las cuatro mediciones realizadas para observar la repetibilidad.

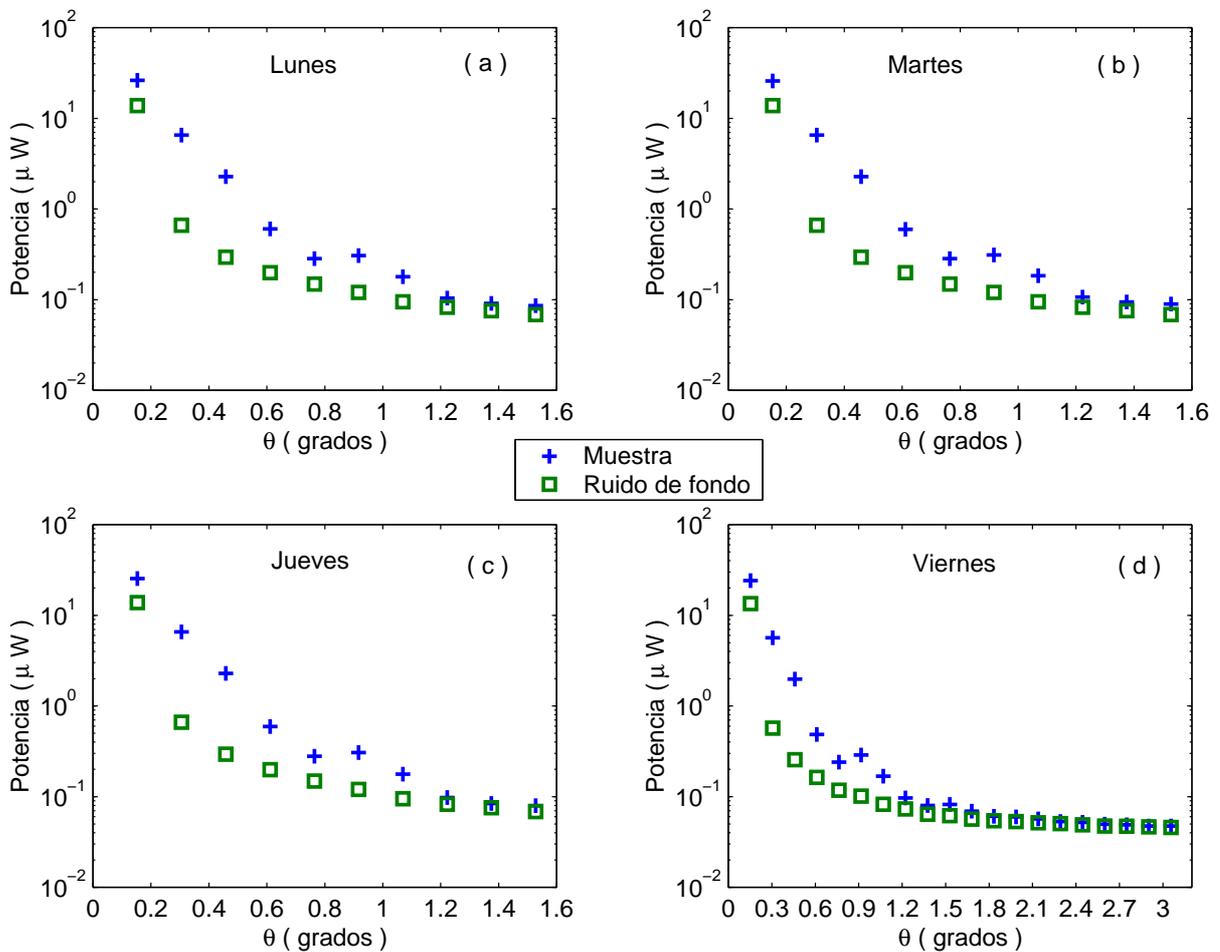


Figura 6.8: Comparación entre la señal medida y el ruido de fondo para la misma mascarilla medida en días diferentes. (a) muestra los resultados del lunes, (b) del martes, (c) del jueves y (d) del viernes.

Como se ha mencionado, la Fig. 6.8(d) muestra un sensado en una región angular mayor, debido a que aquí, la señal era ligeramente mayor que el ruido de fondo. Mientras

que en las tres mediciones posteriores, representadas en las Figs. 6.8(a)-(c), a partir de $\theta = 1.6^\circ$ el ruido era definitivamente mayor que la señal misma.

La situación anterior se le atribuye a las fluctuaciones en la potencia emitida por el láser. Es por eso que se mencionó que tanto la señal pequeña como las fluctuaciones están íntimamente correlacionadas. Dado que la señal es muy débil, entonces una fluctuación pequeña en la potencia emitida por el láser es determinante en la señal medida. Lo anterior puede verse en la Fig. 6.9 que muestra las fluctuaciones del láser durante las cuatro mediciones. Note como en la Fig. 6.9(a), la correspondiente al día viernes, en que fue posible sensar una región angular mayor, las fluctuaciones en la potencia del láser fueron menores que los otros tres días, a pesar de que el tiempo que tomó realizar las mediciones fue mayor. Esto sugiere que el problema puede evitarse realizando las mediciones en tiempo real, es decir, mediante un arreglo de detectores.

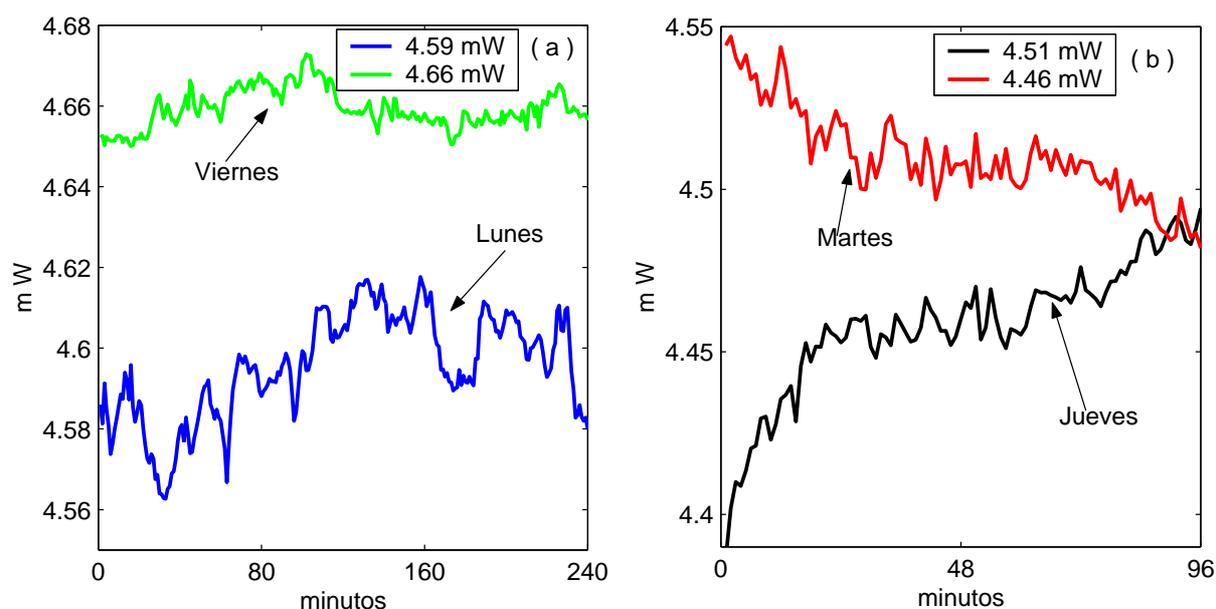


Figura 6.9: Fluctuaciones en el láser en cuatro mediciones distintas. La leyenda en cada gráfica representa un promedio de las fluctuaciones de la potencia medida. (a) muestra los resultados del lunes y viernes y (b) los del martes y jueves.

Ya que no se pudo implementar un arreglo de detectores para el sensado, se propuso trabajar con un microagujero de diámetro variable, para que a medida que la señal va decreciendo, se aumenta el diámetro del detector para compensar dicha disminución. Los resultados se discuten en la siguiente Sección.

6.5. Mediciones con Detectores de Diámetro Variable

Para esta parte, los diámetros de microagujero que se utilizaron como detector fueron: $200\mu\text{m}$, $400\mu\text{m}$, $800\mu\text{m}$, $1500\mu\text{m}$, y $3000\mu\text{m}$. El muestreo se realizó de acuerdo a como se muestra en la Fig. 6.10. Con esta configuración se pudo alcanzar una posición radial de 17.2mm en el plano de detección, acorde a la posición radial sugerida por la simulación mostrada en la Fig. 6.5(d) como la más adecuada. Sin embargo, los resultados no son buenos, como puede verse de la Fig. 6.11.

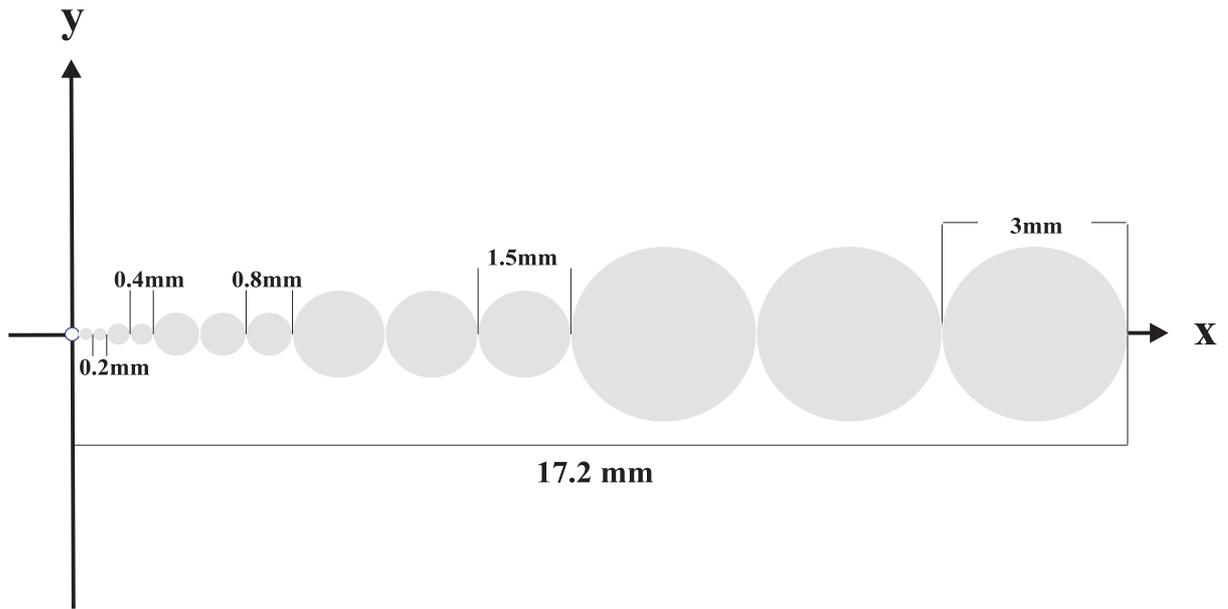


Figura 6.10: Muestreo con detectores de diverso grosor.

La Fig. 6.11(a) muestra la distribución que se recupera con 10 interpolaciones (curva continua) entre cada pareja de datos experimentales, mientras que la recuperación con los datos experimentales tal y como fueron medidos están representados por la línea quebrada. La Fig. 6.11(b) muestra un acercamiento de estas mismas dos recuperaciones de la misma distribución. Puede verse inmediatamente que ambas recuperaciones son erróneas, haciéndose más crítico el desacuerdo cuando se interpolan los datos experimentales. La explicación a dicho comportamiento errático puede verse en las gráficas de las Figs. 6.11(c) y Fig. 6.11(d). La Fig. 6.11(c) muestra la gráfica de la potencia que el detector mide directamente del experimento y su correspondiente interpolación, mientras que en la Fig. 6.11(d) se muestra la intensidad experimental y su correspondiente interpolación. Note cómo la intensidad al ser interpolada genera un comportamiento oscilatorio (intensidades negativas), generado por los saltos que las mediciones experimentales de la potencia sufre. Es decir, el patrón de intensidad no decae uniformemente cuando se consideran detectores

distintos, lo cual hace que el proceso numérico de interpolar datos para obtener una resolución angular más alta sea erróneo.

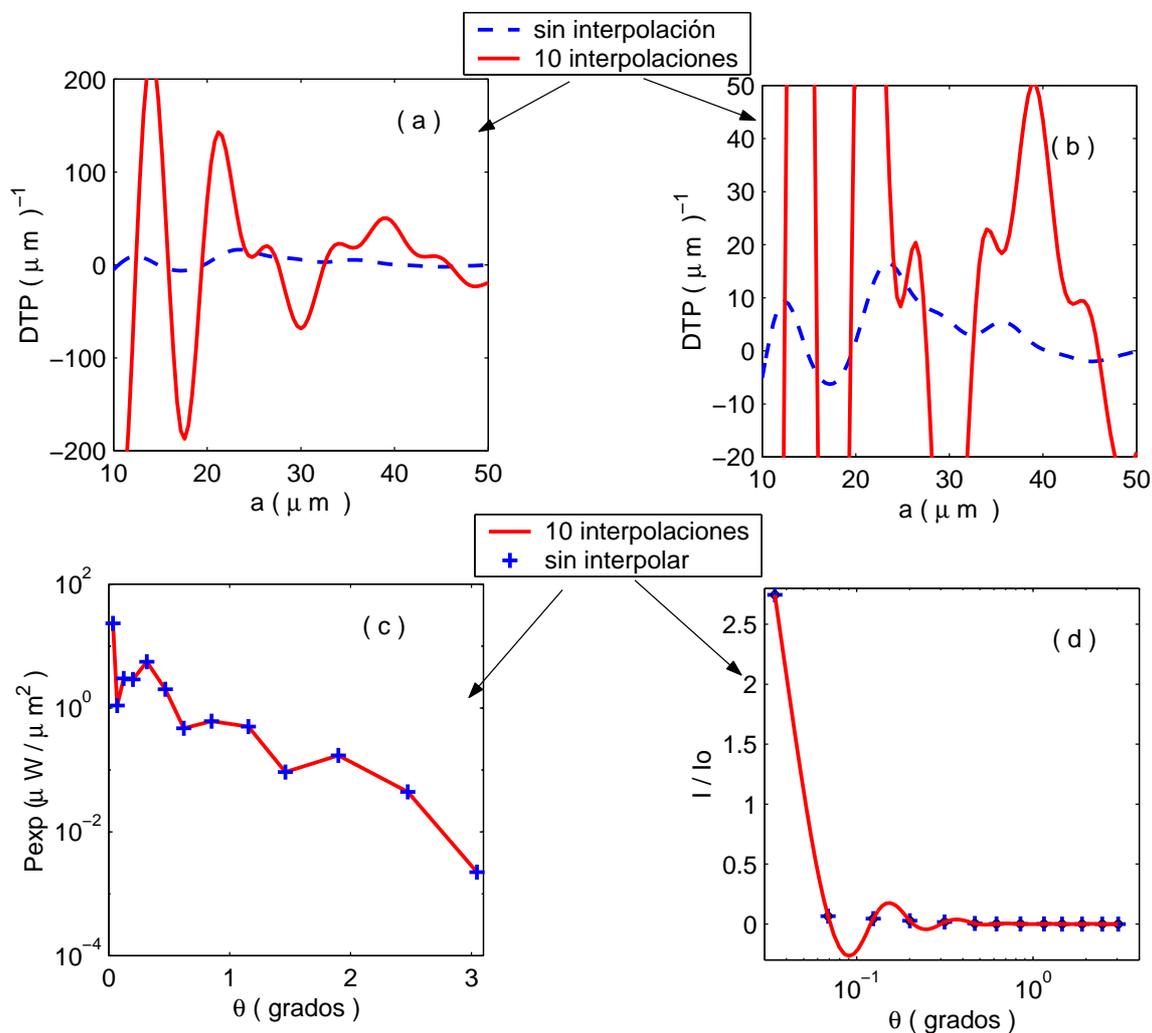


Figura 6.11: Recuperación experimental con detectores de grosor variable. (a) muestra las distribuciones en todo su codominio, (b) realiza un acercamiento de las distribuciones mostradas en (a). En (c) y (d) se muestran la potencia e intensidad experimental con y sin interpolar, respectivamente.

Ya que los resultados cuando se usa un solo tipo de microagujero son aceptables como se mostró al principio de la sección anterior, se consideró conveniente usar únicamente dos tamaños de microagujero en vez de cinco, sin embargo, los resultados que se obtuvieron nuevamente fueron muy parecidos a los de la Fig. 6.11, por lo que no se presentan.

Finalmente la Fig. 6.12 muestra la medición de la mascarilla citada en un analizador Malvern con el modelo de Fraunhofer. Aclarando que en el eje horizontal se grafican

diámetros en escala logarítmica. Como puede verse, el instrumento reporta una distribución con pico modal bien definido centrado en $63\mu\text{m}$ y no en $60\mu\text{m}$ como se esperaba, además de otro pico que no está bien definido pero, que puede notarse en la región de tamaños de $100\mu\text{m}$. Esto indica que aparte de las aberturas de $31.5\mu\text{m}$ de radio están presentes aberturas más grandes, predominantemente de $100\mu\text{m}$. Lo anterior se debe a que la mascarilla tiene cierto grado de imperfección, tales como el factor de reducción ya mencionado y el traslape entre aberturas, las cuales forman cúmulos de forma irregular que representan partículas de radio grande. El hecho de que el pico en $100\mu\text{m}$ tenga menor altura que el pico en $31.5\mu\text{m}$, indica que la cantidad de aberturas con ese tamaño es menor.

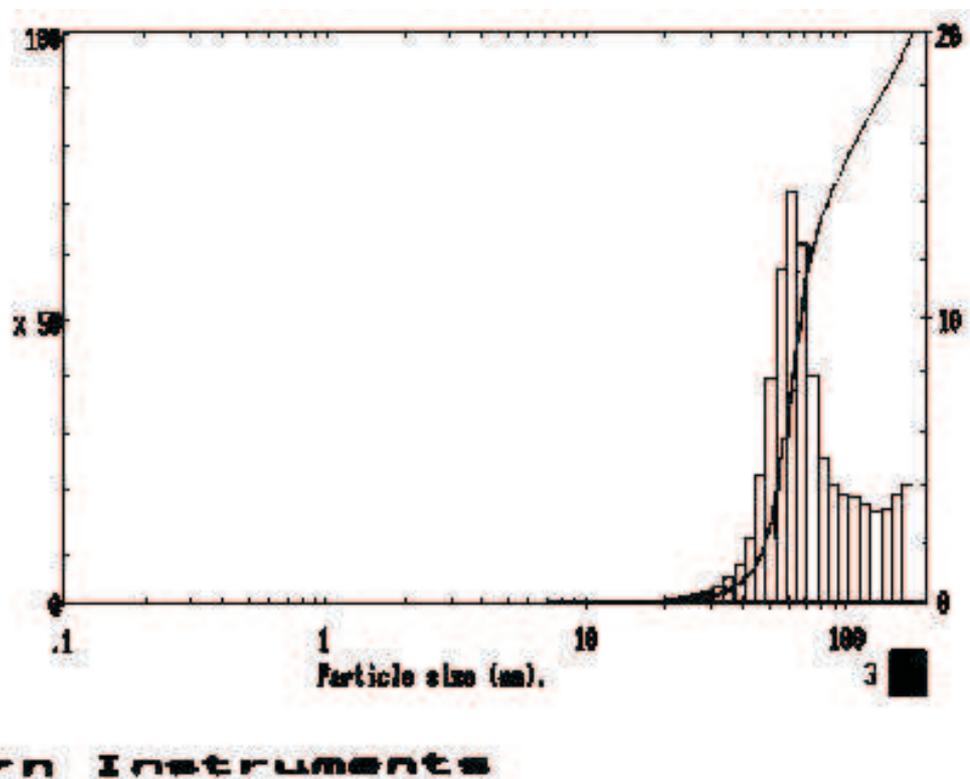


Figura 6.12: Mascarilla medida en un analizador Malvern con difracción de Fraunhofer.

Es oportuno mencionar que se trabajó con otras tres mascarillas de aberturas con tamaños más pequeños, sin embargo, los resultados obtenidos no fueron satisfactorios ya que las recuperaciones fueron bastante incorrectas. Lo anterior se atribuye a la poca resolución angular y el pequeño rango dinámico del arreglo experimental. Es decir, por tratarse de aberturas más pequeñas que la discutida en las Secciones previas, la cantidad de luz que difractan es de menor intensidad y se presenta a ángulos más grandes de los

que es capaz de sensar el arreglo experimental, por lo tanto, entre más crezca el ángulo el ruido de fondo empieza a ser mayor que la señal misma, como se mostró anteriormente.

Una sola conclusión cabe al respecto. Es necesaria una resolución angular alta para no perder información a ángulos grandes, así como, un rango dinámico más alto en la detección del patrón de difracción, esto se puede alcanzar con un arreglo de detectores tipo CCD, diseñados, construidos y calibrados únicamente para tal fin.

6.6. Trabajo Futuro

Los resultados experimentales preliminares, conjuntamente con la implementación de los cuatro algoritmos de inversión discutidos en el presente trabajo de tesis, sugieren una línea de investigación a seguir, relacionada con el análisis de tamaño de partículas y sus potenciales aplicaciones. Es decir, el presente trabajo de tesis, a nivel local representa la etapa inicial de un trabajo más amplio y sistemático para introducir la metrología de partículas, cuyo objetivo final, es la construcción de un analizador de tamaño de partículas que sea accesible en costo y tecnológicamente competitivo, que pueda cubrir las expectativas y necesidades de investigación básica y aplicada mencionadas en la introducción del presente trabajo.

Capítulo 7

Conclusiones

Se han presentado cuatro métodos de inversión basados en distintas técnicas numéricas, para recuperar distribuciones de tamaño de partícula, a partir de patrones de intensidad simulados por la teoría de Mie y recuperados con la aproximación de Fraunhofer y la teoría de Mie. Modelos físicos que describen el fenómeno de esparcimiento de luz por partículas. Para distribuciones monomodales normal, gama y lognormal de partículas esféricas, con índice de refracción relativo $m = 1.5$, es apropiado usar la aproximación de Fraunhofer más allá de cierto intervalo de tamaño crítico. El cual corresponde al pico modal de una distribución centrada en $42 \leq \bar{\alpha} \leq 48$. Se considera a la distribución centrada en $\bar{\alpha} = 46$, como la mejor representante del valor umbral para la validez de la aproximación de Fraunhofer. El método de descomposición en valores singulares genera mejores resultados que el método de Chin Shifrin, cuando se resuelve el problema inverso con la aproximación de Fraunhofer. En esta parte del trabajo todas las distribuciones fueron consideradas en el dominio $1 \leq \alpha \leq 100$.

El método de descomposición en valores singulares produce resultados erróneos cuando se usa con la teoría de Mie, mientras que el método de Phillips-Twomey da los mejores resultados para los tres tipos de distribuciones consideradas. La forma asimétrica de las distribuciones y las inconsistencias en la composición angular de los patrones de intensidad no afectan la eficiencia del método de Phillips-Twomey. Los que sí afectan son: la elección de un parámetro de regularización óptimo y el correcto operador de suavizado. Se demuestra que la aplicación de un procedimiento iterativo para seleccionar los parámetros óptimos de regularización y el operador de suavizado genera resultados exactos, para el caso de distribuciones anchas de partículas grandes y un operador de suavizado de segundas diferencias; pero baja su rendimiento con resultados aceptables para distribuciones estrechas de partículas pequeñas. Por lo tanto se considera necesario utilizar un operador de terceras diferencias o más, para mejorar las recuperaciones, pero no llega a ser un resultado óptimo. Además, este método demanda un considerable tiempo de cómputo.

7.- Conclusiones

Respecto a la comparación entre la aproximación de Fraunhofer y la teoría de Mie en la región de tamaños de partícula grandes, donde el uso de la aproximación de Fraunhofer es perfectamente válida, se puede concluir que la combinación de la teoría de Mie con el método de Phillips-Twomey genera los mejores resultados, comparado con los que reportan los métodos de descomposición en valores singulares y el de Chin-Shifrin. El único inconveniente es que la teoría de Mie incrementa drásticamente el tiempo de cómputo en cuatro órdenes de magnitud. De aquí es que cuando la situación lo amerite, se recomienda utilizar la aproximación de Fraunhofer con el método de descomposición en valores singulares.

El algoritmo basado en una estrategia evolutiva, implementado con la aproximación de Fraunhofer introduce dos características importantes cuando es comparado con el método tradicional de Chin-Shifrin: Se han obtenido resultados sólidos que muestran que dicho método, genera las mejores soluciones cuando se compara con el método de Chin Shifrin, y no requiere de información *a priori* acerca del dominio de la distribución de tamaños de partícula que se busca. Sólo requiere que al principio de cada proceso de optimización se le dé un patrón de intensidad y un grupo de distribuciones candidatos a solución, a partir de los cuales lleva a cabo un ajuste para obtener la correcta función de distribución de tamaños.

Para el caso particular de los tres tipos de distribución consideradas, el rendimiento del algoritmo basado en la estrategia evolutiva, no depende del tipo de distribución del que se trate. Resultados exactos se obtienen para ambos tipos de distribuciones, simétricas y asimétricas y el método es capaz de identificar la función correcta a partir de los tres tipos de distribución sugeridas. Resultados menos precisos pero que siguen siendo satisfactorios se obtienen cuando dicho método se aplica para un tipo de distribución que no está relacionada a la distribución propuesta. Esto resulta de importancia cuando la información de la distribución original no está disponible o cuando sólo un diagnóstico de los tamaños presentes en una muestra son requeridos. Se ha hecho notar también, que las posibles discrepancias en la composición angular de los datos de entrada no afectan el rendimiento del algoritmo, a diferencia del caso cuando la aproximación de Fraunhofer se usa para resolver el problema inverso por cuadraturas o por el método de Chin-Shifrin.

Se proponen 500 iteraciones y el valor meta 10^{-9} , como un criterio general de paro cuando el algoritmo basado en una estrategia evolutiva es usado. Estos valores garantizan la correcta convergencia en la función objetivo, tal que el algoritmo pueda hallar una solución cercana al óptimo global. Dicho método posee una alta precisión y tiempo de cómputo aceptable, sin embargo, sólo se pueden analizar funciones de distribución con un máximo hasta de 6 variables de optimización. Por el momento esto no permite trabajar con distribuciones más complejas como las multimodales, limitándose a distribuciones

7.- Conclusiones

monomodales.

A partir del trabajo experimental realizado, se propone utilizar un arreglo de detectores tipo CCD, diseñados, construidos y calibrados únicamente para un analizador de partículas. Con esto se puede alcanzar una resolución angular alta a ángulos grandes y no perder información a ángulos pequeños cerca del eje de propagación. Lo cual a su vez, permitiría alcanzar un rango dinámico mayor en los tamaños de partícula que analizaría.

Bibliografía

- [1] M Kerker, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, First ed. (Academic Press, New York, 1969).
- [2] J.M. Cabrera, F.J. López y F. Agulló-López, *Optica Electromagnética* (Fundamentos), 1a. ed. (Adison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, Delaware, 1993).
- [3] *Vocabulario Científico y Técnico*, Espasa Calpe, Madrid, (1990).
- [4] M. Zhenhua, H.G. Merkus, and B. Scarlett, "Particle-size analysis by laser diffraction with a complementary metal-oxide semiconductor pixel array," *Appl. Opt.* **39**(25), 4547-4556 (2000).
- [5] J. Cornillault, "Particle size analyzer," *Appl. Opt.* **11**(2), 265-268(1972).
- [6] J. Swithenbank, J.M. Beer, D.S. Taylor, D. Abbot, and G.C. McCreath, "A laser diagnostic technique for the measurement of droplet and particle size distribution," *Prog. Astronaut. Aeronaut.* **53**, 421-447 (1977).
- [7] E.D. Hirleman, V. Oechsle, and N.A. Chigier, "Response characteristics of laser diffraction particle size analyzers: optical sample volume extent and lens effects," *Opt. Eng.* **23**(5), 610-619 (1984).
- [8] L. G. Dodge, "Calibration of the Malvern particle sizer," *Appl. Opt.* **23**(14), 2415-2419 (1984).
- [9] G. B. J. de Boer, C. de Weerd, D. Thoenes, and H.W.J. Goossens, "Laser diffraction spectrometry: Fraunhofer diffraction versus Mie scattering," *Part. Charact.* **4**, 14-19 (1987).
- [10] J. Cornillault, *Appl. Opt.* **36**(4), 885-891(1997).
- [11] L.C. Chow and C.L. Tien, "Inversion techniques for determining the droplet size distribution in clouds: Numerical examination," *Appl. Opt.* **15**(2), 378-383 (1976).

- [12] A.L. Fymat, "Analytical inversions in remote sensing of particle size distributions. 2: Angular and spectral scattering in diffraction approximations," *Appl. Opt.* **17**(11), 1677-1678 (1978).
- [13] A.L. Fymay and K.D. Mease, "Mie forward scattering: improved semiempirical approximation with application to particle size distribution inversion," *Appl. Opt.* **20**(2), 194-198, (1981).
- [14] M. Bertero and E.R. Pike, "Particle size distributions from Fraunhofer diffraction I. An analytic eigenfunction approach," *Optica Acta* **30**(8), 1043-1049 (1983).
- [15] C.F. Bohren and D.R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, First ed. (John Wiley, New York, 1983).
- [16] E.D. Hirleman, "Optimal scaling of the inverse Fraunhofer diffraction particle sizing problem: The linear system produced by quadrature," *Part. Charact.* **4**, 128-133 (1987).
- [17] A. Ishimaru, R. J. Marks II, L. Tsang, C.M. Lam, and D.C. Park, *Opt. Lett.* **15**(21), 1221-1223 (1990).
- [18] S.D. Coston and N. George, "Particle sizing by inversion of the optical transform pattern," *Appl. Opt.* **30**(33), 4785-4794 (1991).
- [19] J.C. Knight, D. Ball, and G.N. Robertson, "Analytical inversion for laser diffraction spectrometry giving improved resolution and accuracy in size distribution," *Appl. Opt.* **30**(33), 4795-4799 (1991).
- [20] J.B. Riley and Y.C. Agrawal, "Sampling and inversion of data in diffraction particle sizing," *Appl. Opt.* **30**(33), 4800-4817 (1991).
- [21] A. Boxman, H.G. Merkus, P.J.T. Verherijen, and B. Scarlett, "Deconvolution of light-scattering patterns by observing intensity fluctuations," *Appl. Opt.* **30**(33), 4818-4823 (1991).
- [22] S.D. Coston and N. George, "Recovery of particle size distributions by inversion of the optical transform intensity," *Opt. Lett.* **16**(24), 1918-1920 (1991).
- [23] J.H. Koo and E.D. Hirleman, "Synthesis of integral transform solutions for the reconstruction of particle-size distributions from forward-scattered light," *Appl. Opt.* **31**(12), 2130-2140 (1992).

- [24] O.V. Dubovik, T.V. Lapyonok, and S.L. Oshchepkov, "Improved technique for data inversion: Optical sizing of multicomponent aerosols," *Appl. Opt.* **34**(36), 8422-8436 (1995).
- [25] J. Liu, "Essential parameters in particle sizing by integral transform inversions," *Appl. Opt.* **36**(22), 5535-5545 (1997).
- [26] A.K. Roy and S.K. Sharma, "Inverse scattering problem involving soft Mie particles," *Appl. Opt.* **36**(36), 9487-9495 (1997).
- [27] M. Ye, S. Wang, Y. Lu, T. Hu, Z. Zhu, and Y. Xu, "Inversion of particle-size distribution from angular light-scattering data with genetic algorithms," *Appl. Opt.* **38**(12), 2677-2685 (1999).
- [28] A. Rawle, "The Basic Principles of Particle Size Analysis," Malvern Instruments, Ltd. (United Kingdom, 1986).
- [29] P. Negrete-Regagnon, "Estimación de Tamaños de Partícula por Mediciones de Luz Esparcida," Tesis de Maestría (Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Ensenada, B.C., 1992).
- [30] A.L. Dragoo *et al.*, "A critical assessment of requirements for ceramic powder characterization," *Advances in Ceramics*, **21**, Ceramic Powder Science, (The American Ceramic Society Inc. 1997).
- [31] H.C. van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*, 2nd. ed. (Dover Publications, New York, 1981).
- [32] J. W. Goodman, *Introduction to Fourier Optics*, First ed. (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [33] J.H. Koo, "Particle size analysis using integral transform techniques on Fraunhofer diffraction patterns," Ph.D. dissertation (Arizona State University, Tempe, Ariz.; George Washington University, Washington, D.C., 1987).
- [34] Master-Sizer (MS-1005), Instruction Manual Malvern Instruments Ltd., (Worcs., England 1990).
- [35] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran: The art of scientific computing*, 2nd. ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).

- [36] J.R. Hodkinson, "Particle sizing by means of the forward scattering lobe," *Appl. Opt.* **5**(5), 839-844 (1966).
- [37] A.R. Jones, "Error contour charts relevant to particle sizing by forward-scattered lobe methods," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10**, L163-L165 (1977).
- [38] S. Twomey, "On the numerical solution of Fredholm integral equations of the first kind by inversion of the linear system produced by quadrature," *J. Assoc. Comput. Mach.* **10**, 97-101 (1963).
- [39] D.A. Ligon, T.W. Chen, and J.B. Gillespie, "Determination of aerosol parameters from light-scattering data using an inverse Monte Carlo technique," *Appl. Opt.* **35**(21), 4297-4303 (1996).
- [40] G.H. George, J.T. Thomasson, and A. Spindel, *Photodetector light pattern detector*, U.S. Patent 3, 689, 772 (September 5th, 1972).
- [41] G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, 2nd. ed. (Johns Hopkins University Press, London, 1989).
- [42] S. Vázquez-Montiel, J.J. Sánchez-Escobar, and O. Fuentes, "Obtaining the phase of an interferogram by use of an evolution strategy: Part I," *Appl. Opt.* **41**, 3448-3452 (2002).
- [43] T. Back, *Evolutionary algorithms in theory and practice*, First ed. (Oxford University Press, New York, 1996).
- [44] D.B. Fogel, *Evolutionary Computation*, 2nd. ed. (IEEE Press, Inc., New York, 2000).
- [45] I. Rechenberg, *Cybernetic Solution Path of an Experimental Problem*, Royal Aircraft Establishment, Library Translation No. 1122 (August 1965).
- [46] MatLab, The Math Works Inc., Version 6.5.0.180913a Release 13, (June 18, 2002).
- [47] V.P. Spiridinov y A.A. Lopatkin, *Tratamiento matemático de datos físico-químicos*, 1a. ed. (Editorial MIR, Moscú, 1976).

Apéndice A

Publicaciones

- **1.- J. Vargas-Ubera, J.F. Aguilar, and D M. Gale,** “Reconstruction of particle-size distributions from light-scattering patterns using three inversion methods,” *Appl. Opt.* **46**, 124-132 (2007).
- **2.- J. Vargas-Ubera, J.J. Sánchez-Escobar, J.F. Aguilar, and D.M. Gale,** “Numerical study of particle-size distributions retrieved from angular light-scattering data using an evolution strategy with the Fraunhofer approximation,” *Appl. Opt.* (*Aceptado para publicarse en 2007*).
- **3.- Javier Vargas-Ubera, J. Félix Aguilar y David M. Gale,** “El método de Phillips Twomey en la recuperación de una distribución de tamaño de partículas: Ventajas y desventajas,” *Memorias del XLIX Congreso Nacional de Física, San Luis Potosí, México, (Octubre de 2006)*.
- **4.- Javier Vargas-Ubera, David M. Gale and J. Félix Aguilar,** in “The range of validity of the Fraunhofer approximation in the estimation of particle size distributions from light diffraction”. Edited by: V.L. Brudny, S.A. Ledesma, and M.C. Marconi, *Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng.* **4419** (2001) 435. [Proc. SPIE, 2001].
- **5.- Javier Vargas-Ubera,** “Difracción Láser: la técnica del diagnóstico del tamaño de partículas,” *Avance Tecnológico y Sociedad No. 20 (Enero - Abril del 2001)* pág. 56-62, *Revista de la Universidad Tecnológica de Puebla*.
- **6.- Javier Vargas-Ubera, David M. Gale, J. Félix Aguilar y R. Villaseñor,** “Difracción Óptica: técnica de diagnóstico de tamaño de partículas,” *De la Metrología* 5(3), SPA/11/01-SPA/11/09 (2000), en: *IV Congreso Internacional y XVI Nacional de Metrología y Normalización, Guadalajara, México, Octubre 17-20 (2000)*.

- **7.- Javier Vargas-Ubera**, David M. Gale, J. Félix Aguilar y R. Villaseñor, “Comparación teórico-experimental de dos algoritmos de inversión aplicados a un prototipo de analizador de tamaño de partículas por difracción de luz láser,” Memorias del XV Congreso de Instrumentación, Guadalajara, México, Octubre (2000).
- **8.- Javier Vargas-Ubera**, David M. Gale y J. Félix Aguilar, “Analizador de Tamaño de Partículas,” Memorias del Primer Encuentro de Investigación INAOE, Puebla, México, 15 - 16 de noviembre (2000).
- **9.- Javier Vargas-Ubera**, David M. Gale, J. Félix Aguilar y R. Villaseñor, “Arreglo experimental para medir distribuciones de tamaño de partículas,” Memorias del XIV Congreso de Instrumentación, Puebla, México, Octubre (1999).