

Universitat Autònoma de Barcelona

Facultat de Ciències

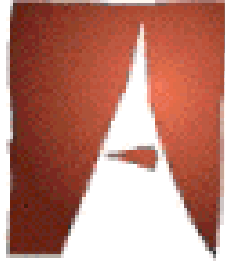
Departament de Física

**Estudio de diferentes métodos de integración
numérica. Aplicación en la caracterización
de superficies mediante deflectometría óptica
y un sensor de Shack-Hartmann.**

Alfonso Moreno Soriano

Memoria presentada para optar al grado de Doctor

Bellaterra, septiembre de 2005



Universitat Autònoma de Barcelona
Departament de Física

Don Juan Campos Coloma, Catedrático de Óptica de la Universitat Autònoma de Barcelona

CERTIFICA

que Don Alfonso Moreno Soriano, Licenciado en Ciencias Físicas, ha realizado bajo su dirección, y en el Departament de Física de la Universitat Autònoma de Barcelona, el trabajo “Estudio de diferentes métodos de integración numérica. Aplicación en la caracterización de superficies mediante deflectometría óptica y un sensor de Sach-Hartmann”, que se recoge en esta memoria para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas.

Y para que conste, de acuerdo con la legislación vigente, firma este certificado en Bellaterra, a de Septiembre de 2005.

Prof. J. Campos

Agradecimientos

Quisiera empezar esta memoria expresando mis agradecimientos a todas las personas que me han ayudado a llevar a cabo este trabajo de investigación.

- *A Dra. María Josefa Yzuel por crear tan buen ambiente de trabajo, por hacerme sentir tan a gusto, por su ímpetu, su capacidad de trabajo, por el interés mostrado, por sus consejos, por su prestigio llevado desde la sencillez. Y al Dr. Juan Campos por el esfuerzo realizado en la dirección y corrección de la presente memoria; por su valiosa intervención en el planteamiento del tema de investigación y en el desarrollo del mismo, así como en las tareas de programación. Sin él, este trabajo no hubiera sido posible. Gracias por su paciencia, perseverancia, constancia, capacidad de trabajo. A ambos agradezco sus continuas muestras de ánimo y dedicación.*
- *A toda mi familia, mis padres y mis hermanos. A mi padre por el interés que mostró y por seguir presente en mi vida. A mi madre por su amor y ayuda. A Carlos por su paciencia, tranquilidad y disponibilidad. A Ignacio por el interés que ha mostrado, por sus correos electrónicos de ayuda, consejo y ánimo.*
- *Al Dr. Josep Nicolàs de la Universidad Autónoma de Barcelona por toda su ayuda, por sus constantes muestras de ánimo y por ser un excelente compañero de despacho.*
- *Al Dr. Juan Carlos Escalera por su constante ánimo y por el intercambio musical.*
- *A todos los miembros del Grupo de Óptica de la Universidad Autónoma de Barcelona, profesores Ramón Corbalán, Gaspar Orriols, Francesc Pi, Jordi Mompert, Verónica Ahufinger, Giovanna Morigi por su cálida acogida y su compañerismo.*
- *A todos los miembros que participan y han participado del Grupo de Óptica de Tratamiento de Imágenes de la Universidad Autónoma de Barcelona, en especial al Dr. Andrés Márquez, Octavio López, Aitor, Manel y Ángel.*
- *A Celia, Mayte, Merçè y Rafa por su inestimable ayuda en tareas administrativas.*
- *Al Dr. L. P. Yaroslavsky por sus sugerencias y colaboración.*
- *A todos los miembros participantes del proyecto: I. Weingaertner, M Wurm y H. Winkler del PTB, E. Dumistrescu, S. Krey y F. Peter de Trioptics Ge, W. Van Amstel, P. Van Egen y K. Szwedowiz de Phillips CFT, S. Menzghani y H.*

Zahouani de ECL, M. Schilling y A. Schilling de PlanOptik y en especial a M. Cherrier de Trioptics France.

- *A los diferentes visitantes que han pasado por el departamento y especialmente a César de la Universidad de la Frontera de Temuco (Chile) por ayudarme tanto en mis inicios en la programación, a Asticio de la Universidad de la Frontera de Temuco (Chile) por sus sentido del buen humor, a Oscar de la Universidad Industrial de Santander (Bucaramanga, Colombia) por sus sabios comentarios, a Quim por su sentido del humor, su visión de la vida y su cálida acogida en Santiago de Chile y a Claudio de la Universidad de Buenos Aires (Argentina) por su sentido del humor y por la ayuda recibida.*
- *A los compañeros de promoción, de doctorado y de fiesta Andreu, Arnau, Manel, Raúl y Germán, por tantos momentos que hemos pasado juntos y los que nos quedan por pasar. Sois grandes amigos y espero mantener vuestra amistad por siempre.*
- *A Jordi Zapatero por enseñarme a jugar a Go y encontrar una nueva amistad que vaya a más.*
- *A todos los alumnos con los que he interactuado consiguiendo una buena relación, en especial, a Sergi, Dani, Sandra y todo el grupo.*
- *A la toda la gente del Canigó y Gràcia, Natx, Oriol, Andreu B., Laia, Hèctor, Ruth, Albert, Arnau, Anna, Xavi Macià, Ruben y Brisa por tan buenos momentos que me habéis hecho pasar, espero que sigamos juntos.*
- *A todas las personas vinculadas al Casal Sant Pau del Camp del barrio del Raval de Barcelona; muy especialmente a todos los niños y madres que participan, a Xavi Bonet, Merche y Alba por darme tantos momentos de risas y de hacer el payaso; toda una válvula de escape.*
- *A los amigos de toda la vida: Sergio y 6q por hacer realidad una amistad duradera.*
- *A los compañeros musicales 6q, Xavi y Lluís por los momentos de “subidón” musical que hemos pasado y espero seguir pasando.*
- *A Laura y Joel y el “petit” Andreu por interesarse por mí y por este trabajo.*
- *A la “tribu aborígen” por nuestras sesiones de magia, brujería y los buenos momentos de risas que hemos pasado juntos.*
- *A Silvia por ayudarme a conocerme mejor y por ser consciente de la realidad de una tesis doctoral.*
- *A Bernat, por el interés mostrado por mi trabajo; por las charlas hasta altas horas de la noche y por nuestras sesiones de cine. Gracias por quererme como a un hermano.*

- *A Miguel por su confianza y libertad, por aceptarme, ayudarme y estar a mi lado siempre que le he necesitado.*
- *A Esther por todo lo que hemos compartido.*

A mi padre

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el proyecto G6RD-CT-2001-00547 de la Unión Europea del Programa “*Competitive and Sustainable Growth (Growth)*” que lleva por título “*A new 3D measurement technique for fast inspection of large, slightly unflat surfaces*”. Dentro de este proyecto he disfrutado de una beca.

Índice General

Capítulo 1. Introducción, propósito y esquema	1
1.1. Introducción.....	1
1.2. Diferentes técnicas de medición de superficies.....	3
1.2.1. Tiempo de vuelo de la luz.....	4
1.2.2. Triangulación.....	4
1.2.3. Microscopía confocal.....	5
1.2.4. Microscopía de sonda de barrido.....	7
1.2.5. Interferometría óptica.....	9
1.2.5.1. Interferometría por desplazamiento.....	15
1.2.5.1.1. Métodos Numéricos.....	17
1.2.6. Deflectometría óptica.....	22
1.2.6.1 Sensor de Shack-Hartmann.....	27
1.3. Propósito.....	28
1.4. Esquema.....	30

Capítulo 2. Diferentes métodos de integración unidimensional	34
2.1. Métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes.....	35
2.2. Método basado en la interpolación por “splines” cúbicas.....	40
2.3. Método basado en el dominio de Fourier.....	42
2.3.1. Extrapolación periódica lineal.....	45
2.3.2. Extrapolación periódica por “splines” cúbicas.....	46
2.3.3. Extrapolación periódica por “reflexión”.....	47
2.4. Comparación de los diferentes métodos de integración.....	49
2.5. Función de transferencia de los diferentes métodos de integración.....	53
2.5.1. Métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes.....	54
2.5.2. Método basado en la interpolación por “splines” cúbicas.....	57
2.5.3. Señales sinusoidales periódicas sin efectos de borde.....	61
2.5.4. Señales sinusoidales no periódicas con efectos de borde.....	62
2.5.5. Poder resolutivo de los métodos de integración.....	65
2.6. Comparación de los diferentes métodos de integración con ruido en la derivada.....	67

Capítulo 3. Diferentes métodos de integración bidimensional en coordenadas cartesianas **71**

3.1. Métodos basados en la integral de línea.....	72
3.2. Método basado en la minimización de la diferencia en la integración en cada dirección.....	76
3.3. Método de Fourier.....	78
3.3.1. Extrapolación periódica lineal.....	82
3.3.2. Extrapolación periódica por “splines” cúbicas.....	83
3.3.3. Extrapolación periódica por “reflexión”.....	83
3.4. Método basado en las diferencias finitas.....	84
3.4.1. Diferencias finitas con una interpolación lineal.....	85
3.4.2. Diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas.....	90
3.5. Función de transferencia de los diferentes métodos de integración.....	92
3.5.1. Método de Fourier.....	92

3.5.2. Método de diferencias finitas con una interpolación lineal.....	93
3.5.3. Método de diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas.....	94
3.6. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal sinusoidal.....	96
3.7. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal arbitraria.....	102
3.8. Comparación de los métodos iterativos de integración en función del número de iteraciones.....	108

Capítulo 4. Diferentes métodos de integración bidimensional

en coordenadas Polares 112

4.1. Métodos basados en la integral de línea.....	113
4.1.1. Integración radial.....	114
4.1.2. Integración angular	115
4.2. Método basado en la minimización de la diferencia en la integración en cada dirección.....	116
4.3. Método basado en las diferencias finitas.....	118
4.3.1. Diferencias finitas con una interpolación lineal.....	118
4.3.2. Diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas.....	123
4.4. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal periódica.....	127
4.5. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal arbitraria.....	132

Capítulo 5. Aplicación de la integración numérica en deflectometría óptica 139

5.1. Fundamento de la deflectometría óptica.....	140
5.1.1. El aparato FOS.....	141

5.1.2. El aparato AMS.....	148
5.2. Preprocesado de las medidas experimentales.....	155
5.2.1. Influencia de los “offsets” en el FOS.....	155
5.2.2. Método para evaluar el mapa de errores en el AMS.....	157
5.2.3. La “Extensión Natural”.....	159
5.2.3.1. Estudio de una función periódica de dominio infinito.....	160
5.2.3.2. Estudio de una función no periódica de dominio finito.....	162
5.2.3.3. Resultados.....	164
5.3. Resultados preliminares.....	169

Capítulo 6. Aplicación de la integración numérica en un sensor

Shack-Hartmann 180

6.1. El sensor de Shack-Hartmann.....	181
6.2. Inicialización del Sensor de Shack-Hartmann.....	183
6.2.1. Rango dinámico y sensibilidad.....	185
6.2.2. Ajuste de un frente de ondas mediante los polinomios de Zernike....	189
6.2.3. Región de interés, ROI.....	193
6.3. Determinación de la fase de un frente de ondas mediante un sensor de Shack- Hartmann.....	195
6.3.1. Montaje experimental.....	195
6.3.2. Determinación de una fase lineal.....	197
6.3.3. Determinación de una fase cuadrática.....	200

Capítulo 7. Conclusiones 202

Referencias 211

Capítulo 1. Introducción, propósito y esquema

1.1. Introducción

Con el cambio del siglo XX al XXI, la importancia de las tecnologías ópticas, como herramientas esenciales para otras ciencias, está llamando la atención en diferentes ámbitos científicos y económicos.

El desarrollo de técnicas relacionadas con la imagen óptica aparece en diferentes puntos de vista como por ejemplo, la tecnología de la información y de las comunicaciones, la salud humana y las ciencias de la vida, los sensores ópticos y nuevas lámparas para una mejora en el consumo de energía, el desarrollo de equipos destinados a procesos de fabricación en la industria, etc.

Las aplicaciones en la industria han tenido un gran impacto económico: por ejemplo, todos los circuitos integrados de semiconductores que se producen en el mundo se fabrican mediante litografía óptica. El desarrollo de la industria de semiconductores ha dado un impulso a la investigación básica y al desarrollo de técnicas ópticas: la disminución de los tamaños en la fabricación implica la exigencia de nuevos materiales, nuevos componentes ópticos, nuevas fuentes de iluminación.

En la actualidad, la mayoría de la población europea es usuaria de la Tecnología de la Información y de la Comunicación (del inglés, “Information Communication

Technology”), por ejemplo a través de ordenadores personales, telefonía móvil, electrónica empleada en medicina, internet, control de robots inteligentes, detección de obstáculos para la guía de un vehículo,... y la calidad de este tipo de productos aumenta considerablemente cada pocos años para un mismo precio (un factor ~ 2 cada 3 años). La base de tal progreso se debe, en gran parte, al rápido progreso en la calidad de los componentes que se emplean en esta ICT, como por ejemplo, los circuitos integrados y su conexión con otros dispositivos. La industria semiconductora se está preparando para promover una reducción del detalle más pequeño en los circuitos integrados, por debajo de los 130 nanómetros. Tal reducción requiere una evaluación de la ausencia de gradientes ondulatorios y abruptos con una precisión de 10 nanómetros para el caso particular de obleas de 300 milímetros de diámetro. El diámetro actual standard de las obleas es de 200 milímetros aunque actualmente ya se están produciendo obleas de 300 milímetros y el objetivo es fabricar obleas todavía más grandes. Además, la velocidad de procesado aumentará hasta 100 obleas por hora. Así, el control en la producción y pulido de obleas requiere una instrumentación para la medición rápida de la topografía tridimensional que en la actualidad, no está disponible técnicamente.

Otro de los problemas que aparece en la industria semiconductora concierne a los substratos que forman las obleas. La tecnología actual permite producir detalles muy pequeños mediante procesos litográficos. Esto exige mayores requerimientos en la planitud de las obleas sobre las que se depositan repetidamente circuitos integrados. El problema consiste en que la inspección de la planitud requiere mucho tiempo, varias horas para una única oblea. Otro de los problemas con los que se encuentra la industria semiconductora es el procesado de las obleas. Después de la deposición de cada substrato, se neutraliza depositando una capa muy delgada de SiO_2 . Antes de la siguiente deposición, la oblea se somete a procesos de pulido químicos y mecánicos para conseguir de nuevo la planitud deseada. Se trata de un proceso lento que aumenta el coste de producción. Sin embargo, en un futuro inmediato se fabricarán obleas de 450 mm de diámetro mientras que las actuales son de 200 mm; de forma que se podrán depositar más circuitos integrados ganando tiempo y reduciendo el coste de producción. La situación es similar en otros campos, como por ejemplo, los dispositivos de cristal líquido: en la línea de producción se requiere un rápido control de la topografía tridimensional de dichos cristales, que tampoco está disponible en la actualidad. En este caso las dimensiones pueden llegar a ser de 1m por 1m.

1.2. Diferentes técnicas de medición de superficies

Hoy en día, existen diferentes técnicas para medir ópticamente la topografía tridimensional de superficies. La figura 1.1 muestra alguno de los métodos ópticos más comunes en función de la resolución deseada que a continuación describiremos brevemente [Ras97], [Che00].

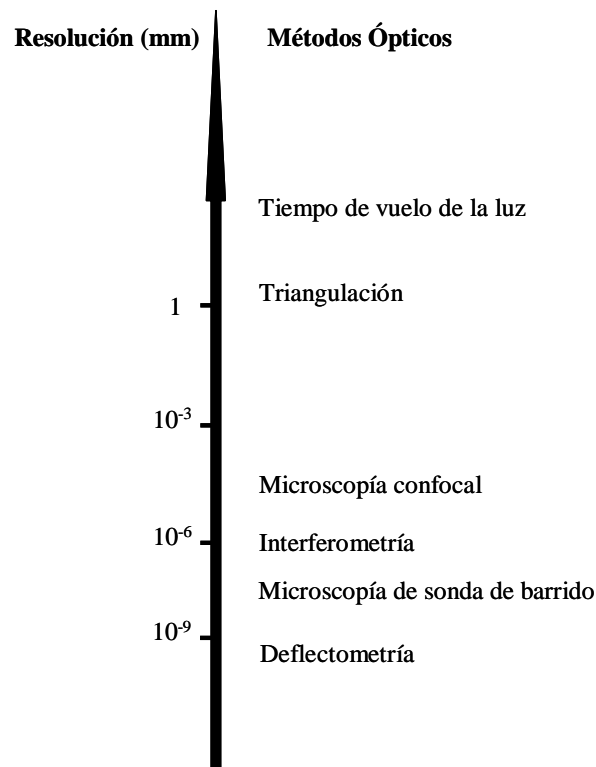


Figura 1.1. Algunos de los métodos ópticos para determinar la topografía tridimensional de superficies en función de la resolución deseada.

La elección del método depende de la resolución que se desea y de lo que se pretende caracterizar. En la figura 1.2 se representa las posibles desviaciones respecto a la forma ideal de la superficie. Así, en negro se ha representado la forma nominal de la superficie a tratar; en rojo se representa irregularidades denominadas ondulación que se asocian a errores de fabricación y son desviaciones de frecuencia baja-media. Finalmente, en azul se representa lo que se denomina la rugosidad correspondiente a deformaciones causadas en los procesos de pulido de la muestra siendo desviaciones de alta frecuencia.

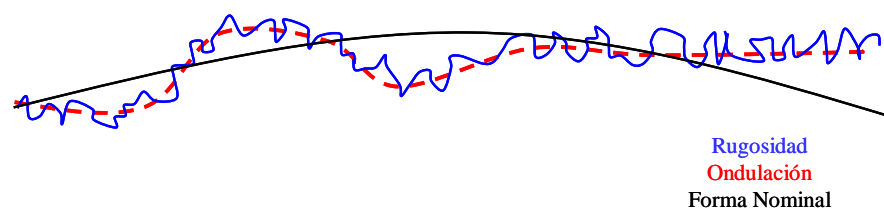


Figura 1.2. Irregularidades de la superficie a caracterizar.

1.2.1. Tiempo de vuelo de la luz

Este método consiste en medir el tiempo de vuelo de la luz procedente de un láser o de otro pulso de luz procedente de una fuente lumínica. El método consiste en medir la diferencia temporal entre dos pulsos de luz: uno procedente de la reflexión sobre la superficie a caracterizar (pulso objeto) y el otro de referencia. La diferencia temporal entre los dos pulsos se relaciona con la distancia recorrida lo que permite caracterizar la superficie. La resolución típica que se consigue con este método es del orden de 1 mm.

1.2.2. Triangulación

El sistema típico de triangulación láser consiste en una fuente de luz láser (habitualmente un diodo), una lente y un detector tal y como se muestra en la figura 1.3. El principio fundamental consiste en la iluminación del objeto de interés mediante el haz láser de manera que parte de la luz que se difunde al incidir sobre la muestra, llega a la lente mediante la que se focaliza en un punto del detector que tanto puede ser un detector de posición PSD (del inglés, “Position Sensor Device”) o una cámara CCD (del inglés, “Charge Couple Camera”). El PSD, también conocido como fotodiodo de efecto lateral, es un detector que convierte la luz incidente en una señal proporcional a la posición. Se trata esencialmente de un dispositivo cuya principal ventaja es la velocidad de lectura y el mayor inconveniente es la no posibilidad de formar una imagen del patrón recibido. Por otro lado, los detectores CCD son en esencia una cámara de televisión y por tanto permiten formar una imagen clara de lo que se recibe y visualizar posibles desviaciones de la luz o eliminar el ruido mediante un filtrado adecuado. El principal inconveniente de las CCD es su velocidad de captación, típicamente menor que las que consiguen los PSD [Sno02].

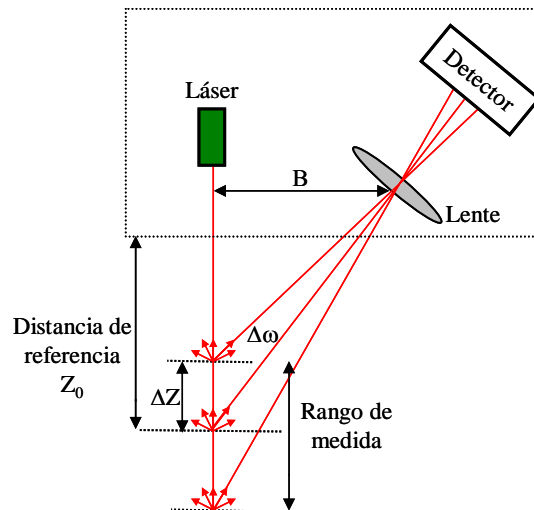


Figura 1.3. Esquema de la triangulación.

El dispositivo formado por el láser, lente y detector se sitúa a una distancia de referencia Z_0 de la muestra a caracterizar. A partir de las medidas captadas con el detector, se determina la precisión mediante la siguiente expresión:

$$\Delta Z = \frac{\Delta\omega Z_0^2}{B} \quad , \quad (1.1)$$

donde B es la distancia entre el láser y la lente tal y como se representa en la figura 1.3 y $\Delta\omega$ es la mínima distancia angular medible. Así pues, se trata de una técnica en la que se miden distancias, con la que se ha llegado a medir una variación en la altura con un rango de medida de ± 2 mm a ± 700 mm respecto a la distancia de referencia [Dum02].

1.2.3. Microscopía confocal

La figura 1.4(a) representa un esquema de un microscopio confocal. La luz de una fuente de iluminación incide en una pantalla con un pequeño orificio para obtener una fuente luminosa lo más puntual posible. La luz incide sobre una lámina separadora de manera que la luz se orienta hacia un objetivo que proyecta la luz sobre uno de los planos de la superficie a determinar. La luz reflejada recorre el mismo camino, incide sobre la lámina separadora y la luz que atraviesa el orificio fino representado en la figura se capta con un detector. De la figura 1.4(b) se puede ver que la luz que viene de otros puntos que no están en el plano de enfoque no penetra en la apertura de detección; por tanto, se trata de un dispositivo con muy poca profundidad de enfoque. En los microscopios confocales se hace un tratamiento digital de las imágenes; se muestrea

planos sucesivos de la superficie a determinar que constituyen secciones ópticas y, mediante un procesamiento de todos estos datos, se reconstruye la imagen en tres dimensiones, es decir, en planos transversales y en profundidad. La resolución típica de esta técnica es de $0.1\mu\text{m}$.

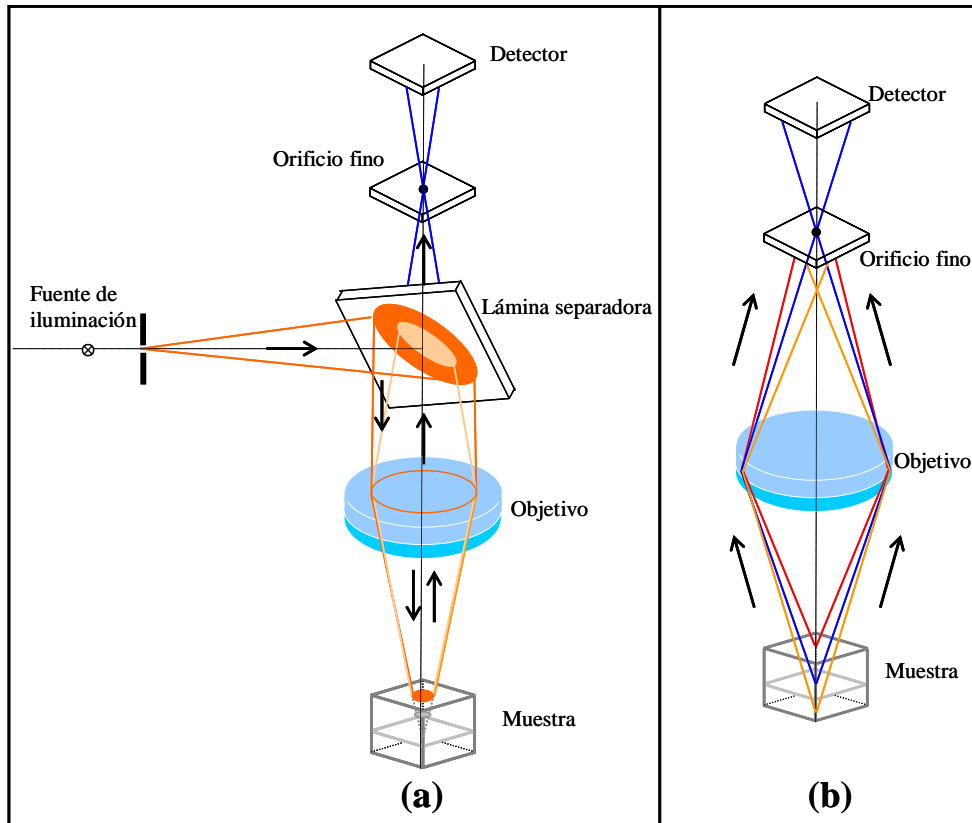


Figura 1.4. (a)Esquema de un microscopio confocal; (b) diferentes planos de enfoque sobre la superficie.

Una variante de esta técnica consiste en la iluminación simultáneamente de diferentes puntos de la muestra; para ello, se coloca un disco lleno de orificios entre la lámina separadora y el objetivo microscopio [Pet68], [Xia88]. Los puntos luminosos estarán limitados por la difracción y la distancia entre los agujeros se debe tomar adecuadamente para eliminar solapamientos entre las imágenes de los puntos luminosos. De este modo, si el disco rota suficientemente rápido, se puede observar una imagen completa de la muestra siendo los puntos brillantes los situados en el foco del objetivo y los oscuros los que están fuera del plano focal. Focalizando a través de la topografía de la superficie, se obtiene una serie de secciones de su altura que permite reconstruir la topografía tridimensional. Tiziani et al. emplean esta variante en [Tiz94] y muestran los resultados para una lámina con 6 ranuras de profundidad entre 0.251 y 9

μm . Obtienen una profundidad de $5.70 \mu\text{m}$ para la segunda ranura de $835 \mu\text{m}$ de largo que entra dentro del valor standard ($5.66 \pm 0.05 \mu\text{m}$) obtenido mediante técnicas interferométricas. También presentan un nuevo sistema de medida basado en el uso de una serie de microlentes para extender el campo del objeto y mejorar la eficiencia de la luz del anterior sistema de microscopía confocal. La figura 1.5 muestra un esquema del montaje que utilizan: la luz procedente de una fuente de iluminación (un láser o una lámpara de xenon) se focaliza mediante una abertura situada en el foco de la lente L1, de modo que la luz que atraviesa la abertura forma un haz colimado al atravesar L1. El haz perfectamente colimado incide sobre la matriz de microlentes (300×300 microlentes) cuya distancia focal es muy corta ($230 \mu\text{m}$). La muestra se sitúa en el plano focal de las microlentes de tal manera que la luz al reflejarse y atravesar las microlentes por segunda vez procede del infinito focalizándose en el plano focal de una segunda lente L2 donde se coloca un filtro espacial para mejorar la imagen y reducir ruido y finalmente se capta la imagen de la muestra mediante una cámara CCD. Dicha imagen se digitaliza y se almacena en memoria teniendo presente que la separación entre los puntos luminosos procedentes de las microlentes, en este caso, es de $125 \mu\text{m}$. La resolución lateral viene dada por el diámetro de los puntos luminosos que generan las microlentes siendo del orden de $3 \mu\text{m}$. De manera similar al montaje del disco giratorio, si se mueve el objeto fuera del plano focal de las microlentes, una pequeña porción de la luz pasará a través del filtro espacial obteniendo la imagen de una nueva sección de la topografía del objeto. Muestran resultados de un espejo de $35 \text{ mm} \times 35 \text{ mm}$ obteniendo una variación de altura de $39.56 \mu\text{m}$.

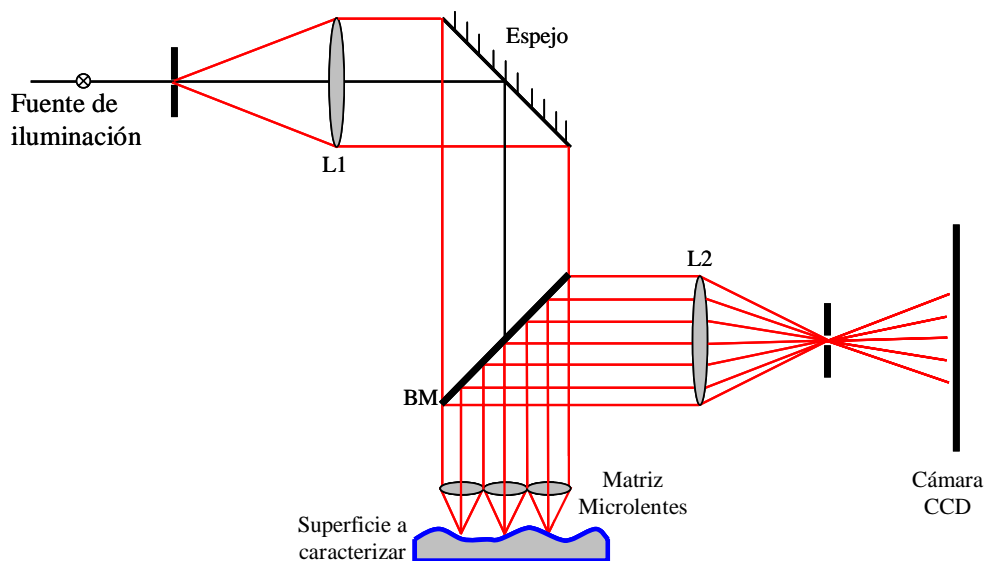


Figura 1.5. Esquema del microscopio confocal con la matriz de microlentes.

1.2.4. Microscopía de sonda de barrido

En los microscopios de sonda de barrido se utiliza una punta cristalina que muestrea la superficie a caracterizar a una distancia muy pequeña (pocos angstroms) proporcionando una imagen tridimensional de la red de átomos o moléculas que componen la superficie. Los dos microscopios más importantes son el microscopio Túnel de Barrido (del inglés “Scanning Tunelling Microscope, STM”) y el microscopio de fuerza atómica (del inglés, “Atomic Foce Microscope, AFM”).

El STM es capaz de registrar imágenes de una superficie conductora utilizando una punta de diámetro 10^{-6} mm también conductora situada a una distancia muy pequeña de la superficie a caracterizar. Se aplica una pequeña diferencia de potencial entre la punta y la superficie de modo que los electrones de los átomos se separan por efecto túnel, a causa de la pequeña distancia entre la punta y la superficie. La magnitud de la corriente del efecto túnel depende de la distancia entre la superficie y la punta: a menor distancia mayor es el flujo de corriente y a mayor distancia disminuye el flujo. El instrumento consta de un mecanismo de muestreo que consiste en mover la punta por encima de la superficie. La altura de la punta se ajusta automáticamente para mantener constante la corriente del efecto túnel, de modo que estos ajustes minúsculos proporcionan información de la distancia entre la superficie y la punta lo que permite caracterizar la superficie.

La figura 1.6 muestra un esquema del Microscopio de Fuerza Atómica (AFM). La punta cristalina va acoplada a un listón microscópico, muy sensible al efecto de las fuerzas atómicas, de sólo unos 200 μm de longitud, denominado “cantilever”. La fuerza atómica se puede detectar cuando la punta está muy próxima a la superficie de la muestra. Es posible entonces registrar la pequeña flexión que sufre el “cantilever” mediante la reflexión de un haz láser que se hace incidir sobre la punta cristalina tal y como se indica en la figura. Un sistema auxiliar piezoeléctrico desplaza la superficie lo que permite muestrearla mediante la reflexión que sufre el haz que incide sobre la punta. Todos los movimientos son controlados por una computadora. Al contrario del STM, el AFM no emplea la corriente de efecto túnel y, por lo tanto, también se utiliza para determinar superficies no conductoras como por ejemplo, muestras biológicas. La

resolución típica del instrumento es de 1 nm y hay microscopios comerciales que ofrecen una resolución vertical de 1.5 angstroms en 10 μm y 15 angstroms en 100 μm .

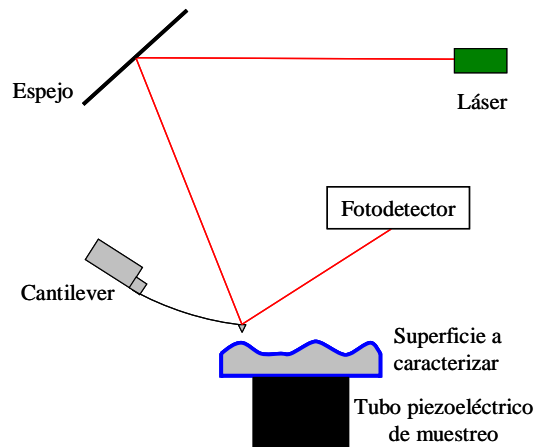


Figura 1.6. Esquema de un microscopio de fuerza atómica AFM.

1.2.5. Interferometría Óptica

La interferometría óptica es probablemente la técnica más común para medidas de alta resolución en la metrología óptica actual. Se trata de una potente técnica para medir la desviación entre dos frentes de onda con una sensibilidad del orden de una fracción de la longitud de onda de la luz con la que se ilumina. Así, para metrología óptica, la interferencia se produce mediante un frente de ondas procedente de la superficie a determinar y otro frente de ondas de referencia. Los principales inconvenientes que presenta son:

- Alta sensibilidad a turbulencias atmosféricas como humedad, temperatura, presión, vibraciones,....
- Presenta el problema de la ambigüedad cuando la diferencia de fase entre los dos frentes que interfieren es superior a 2π .
- Necesidad de una superficie de referencia.

La figura 1.7 representa una modificación del interferómetro de Twyman-Green usando un láser como fuente de iluminación. Mediante una lámina separadora, se divide el frente de onda inicial en dos: uno de ellos incide sobre la superficie a caracterizar representado en rojo y descrito por $a e^{i\varphi_n}$ siendo a la amplitud y φ_n la fase mientras que el segundo incide sobre una superficie de referencia representado en azul y descrito por $b e^{i\omega(x,y)}$. De este modo los frentes de onda reflejados por ambas superficies vuelven a combinarse mediante la lámina separadora y mediante un detector o una

cámara CCD se obtiene el patrón de las franjas de interferencia entre los dos frentes de onda que viene dado por:

$$I_n(x,y) = a^2 + b^2 + 2ab \cos(\omega(x,y) - \varphi_n) , \quad (1.2)$$

donde el primer término corresponde a la intensidad de cada uno de los dos frentes de onda (de referencia y el procedente de la muestra) y el segundo término corresponde al patrón interferencial. Para resolver la ambigüedad en 2π del coseno de la interferencia es necesario realizar más de un interferograma, se requieren un mínimo de tres medidas variando la fase del frente de ondas de referencia φ_n . Por este motivo se coloca un espejo piezoeléctrico en el brazo de referencia del interferómetro que permite desplazar la superficie de referencia y obtener diferentes interferogramas correspondientes a diferentes fases del frente de onda de referencia. Así, desplazando la superficie de referencia, se varía el camino óptico que recorre la luz y por tanto la fase del frente de ondas que incide sobre ella y se miden diferentes patrones de interferencia correspondientes a diferentes fases en los mismos puntos de muestreo.

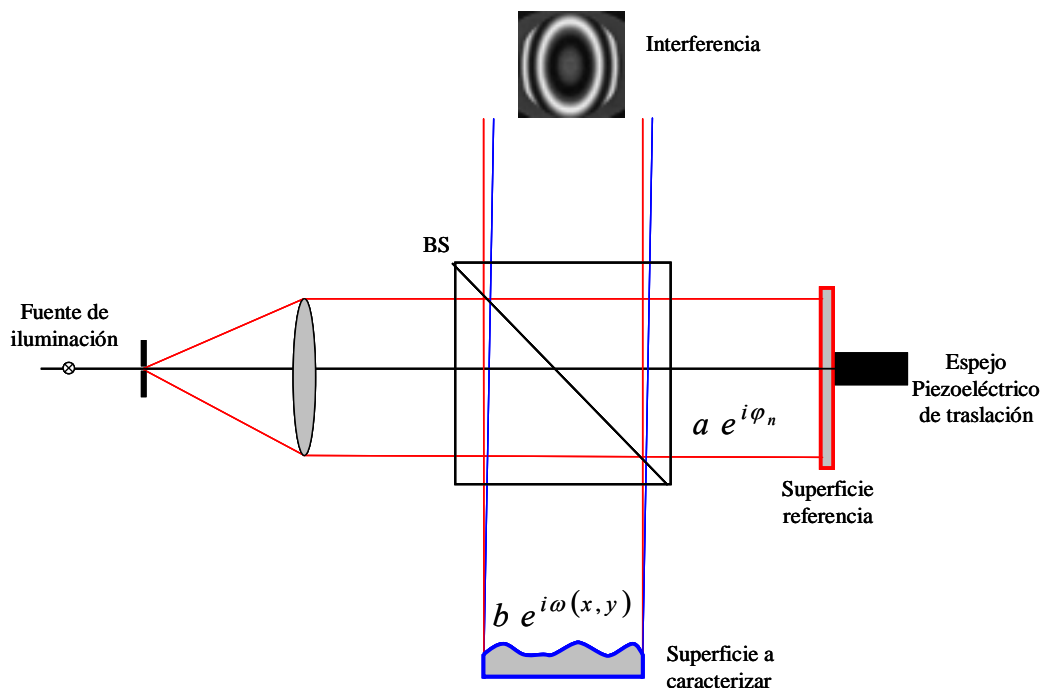


Figura 1.7. Interferómetro Twyman-Green con un espejo piezoeléctrico en el brazo de referencia.

Por tanto, se registran N patrones interferenciales para emplear la técnica interferométrica de cambio de fase (del inglés, “Phase Shifting Interferometry”) con el objetivo de encontrar la fase incógnita del frente de onda procedente de la muestra a

caracterizar. Teniendo en cuenta las propiedades de ortogonalidad de las funciones seno y coseno se encuentran las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} C &= \sum_{n=0}^N I_n(x, y) \cos(\varphi_n) \\ S &= \sum_{n=0}^N I_n(x, y) \text{sen}(\varphi_n) \end{aligned} \quad (1.3)$$

de manera que la fase incógnita $\omega(x, y)$ se determina mediante:

$$\omega(x, y) = \arctan\left(\frac{S}{C}\right) \quad (1.4)$$

Muchas de las técnicas interferométricas se emplean en la medición de superficies destinadas a un laboratorio de sincrotrón, en el que hay tres aparatos de medición: un microscopio interferencial, un interferómetro de Fizeau y un perfilómetro LTP.

El microscopio interferencial funciona por las técnicas de cambio de fase explicadas anteriormente y se utiliza para medir la micro-rugosidad de los espejos, rugosidad de periodo muy pequeño y amplitud del orden del ángstrom y obtiene una resolución vertical de hasta 0.1 nm con una resolución lateral de 0.45 a 11.8 μm .

El interferómetro de Fizeau se emplea para medir la desviación de la superficie real respecto a una superficie de referencia y se destina a medir superficies grandes. En la figura 1.8 se ha representado el esquema de un interferómetro de Fizeau. La luz procedente de un láser llega a un filtro espacial situado en el plano focal de una lente para obtener un haz más uniforme y menos ruidoso; entre dicho orificio y la lente se coloca un divisor de frente de onda, un “beam splitter”. Una vez la luz atraviesa la lente, se dispone de un haz perfectamente colimado que incide sobre una superficie reflectante de referencia dibujada en rojo; la luz transmitida por la superficie de referencia, incide sobre la superficie muestra a caracterizar dibujada en azul. De esto modo, la luz reflejada por cada una de las superficies recorren los rayos dibujados en rojo (referencia) y en azul (muestra) y mediante el “beam splitter” se capta la interferencia entre los dos haces mediante una cámara CCD. Se coloca un piezoeléctrico en la superficie de referencia que permite su traslación y por tanto, permite obtener diferentes interferogramas a partir de los cuales, mediante técnicas de cambio de fase, se obtiene la

fase del frente de ondas procedente de la superficie muestra que permitirá caracterizarla. La precisión de este interferómetro es de pocos nanómetros a lo largo de 150 mm.

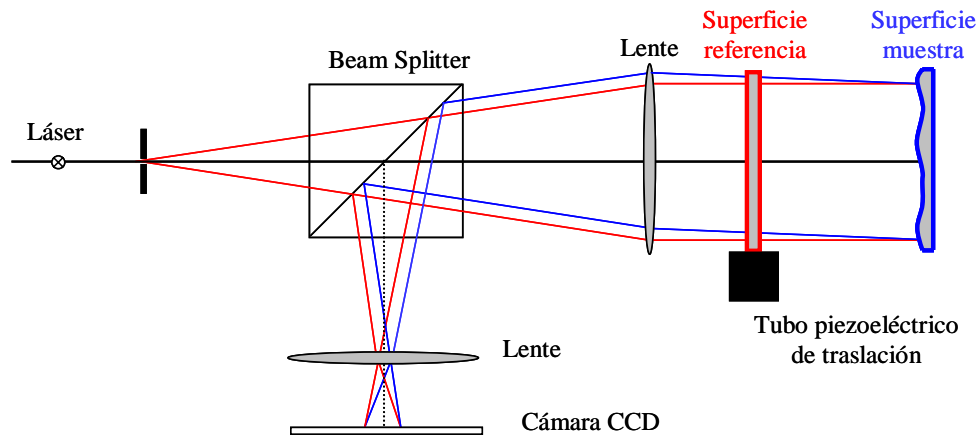


Figura 1.8. Interferómetro de Fizeau.

El interferómetro convencional de la mayoría de los laboratorios de sincrotrón de rayos X es el LTP, del inglés, “Long Trace Profiler” [Tak89]. El LTP se ha desarrollado para la medición de superficies de espejos y se basa en la configuración del interferómetro de “lápiz” de luz (del inglés, “pencil-beam interferometer”) desarrollado por von Bieren con el que consiguió medir una altura menor de 70 nm en un perfil de 50 mm de una superficie cónica con una precisión de ± 6 nm [Bie83]. La figura 1.9(a) muestra un esquema del sistema óptico del LTP originario. La luz procedente de un diodo láser llega a un “beamsplitter” BS1 y mediante los dos reflectores CR1 y CR2 se obtienen dos haces paralelos coherentes, separados una pequeña distancia (del orden de 1 mm) y perfectamente colimados hacia la superficie a caracterizar. Los haces reflejados por dicha superficie retornan por el sistema óptico y mediante un segundo “beamsplitter” BS2 inciden sobre una lente con la que se obtiene la interferencia entre los dos haces captada en su plano focal donde se coloca un detector. El patrón de interferencia depende del ángulo del par de haces respecto al eje óptico o bien de la diferencia de fase que hay entre los dos haces; de todas maneras, la porción de las interferencias contiene información de la pendiente de la superficie a caracterizar. Así, para obtener la superficie deseada, el sistema óptico del cuadro punteado de la figura 1.9(a) se desliza consiguiendo el muestreo de toda la superficie. En [Iri92a] se proponen dos métodos para determinar la pendiente de la superficie a partir de una secuencia de los patrones interferenciales obtenidos mediante el LTP.

Las contribuciones más importantes en los errores de medición que presenta este sistema son:

1. posibles cambios en la dirección de propagación de los haces que provocan cambios en los ángulos que forman con el eje óptico,
2. el movimiento del sistema óptico puede producir cambios en la incidencia sobre la superficie,
3. cambios de índice de reflexión y
4. cambios térmicos y mecánicos.

Las contribuciones 3 y 4 son despreciables. Para mejorar la precisión en la medición y reducir los errores debido a las contribuciones 1 y 2, Irick et al. proponen en [Iri92b] utilizar un par de haces extra como referencia obtenidos mediante el BS2 tal y como se muestra en el LTP II representado en la figura 1.7(b). Los resultados que obtuvieron para una superficie plana presentan una variación angular de $3 \mu\text{rad}$ en 100 mm en su pendiente y la variación en la altura del perfil final fue de unos 15 nm. Se ha llegado a obtener una precisión de $1 \mu\text{rad}$ a lo largo de un perfil de 1500 mm.

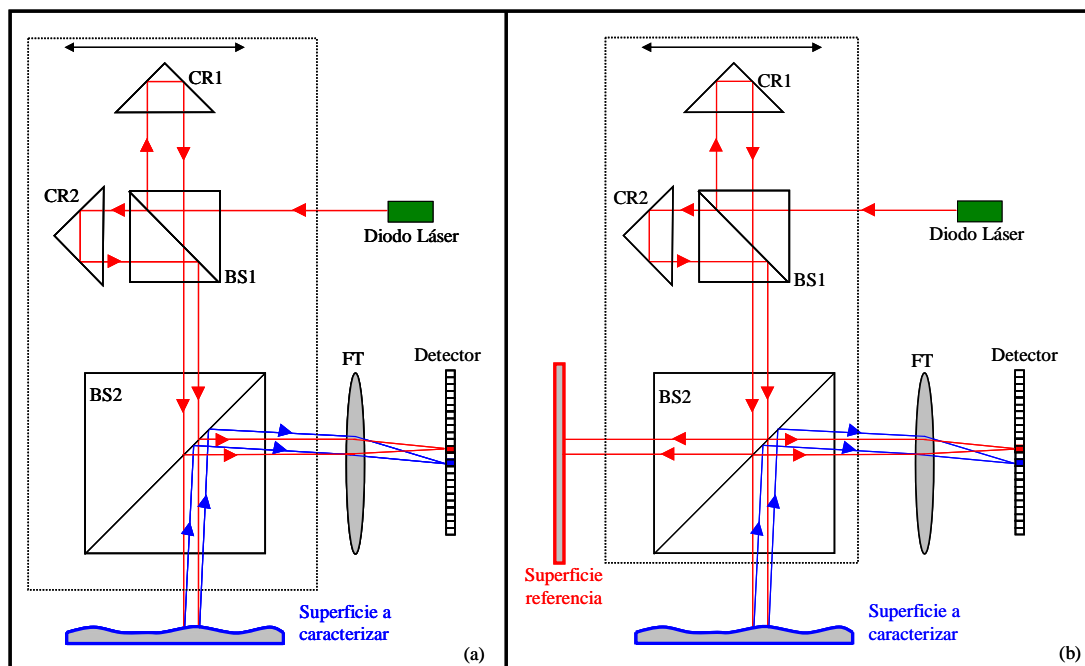


Figura 1.9. (a) Perfilómetro Standard LTP (Long Trace Profiler), (b) LTP en el que se emplea una superficie de referencia (LTP II).

Irick et. al presentan en [Iri94] un método destinado a obtener el perfil tridimensional a partir de sus derivadas extraídas a partir de las medidas del LTP. El método presentado consiste en integrar unidimensionalmente las derivadas y mediante un método iterativo,

determinan las constantes de integración para cada medida. El criterio de convergencia del método iterativo es la diferencia entre los valores obtenidos en las dos integraciones. Tanto el instrumento de medición como el algoritmo desarrollado se han utilizado en la caracterización de un espejo toroidal.

En [Qia95a] se estudian las diferentes fuentes de error del LTP y proponen una nueva variante: el ppLTP, que se basa en el movimiento de un pentaprismo externo para reducir las fuentes de error. La propuesta consiste en el movimiento de traslación de un pequeño pentaprismo a lo largo de la longitud de la superficie a caracterizar, manteniendo el resto del sistema estable tal y como se indica en la figura 1.10. Las principales ventajas que aporta este sistema son:

- El pentaprismo es el único elemento en movimiento de modo que el instrumento es insensible a errores introducidos por el movimiento del sistema interferométrico.
- El sistema interferométrico se mantiene estacionario de manera que se evita la necesidad de medir inicialmente una superficie de referencia para determinar la inclinación del sistema.
- El perfilómetro se puede ajustar rápidamente para acomodar las medidas según la orientación deseada. La orientación vertical es la más favorable para reducir efectos de gravedad.
- El sistema puede trabajar en unas adecuadas condiciones de temperatura estable de láser de Helio-Neón, aumentando la estabilidad del sistema

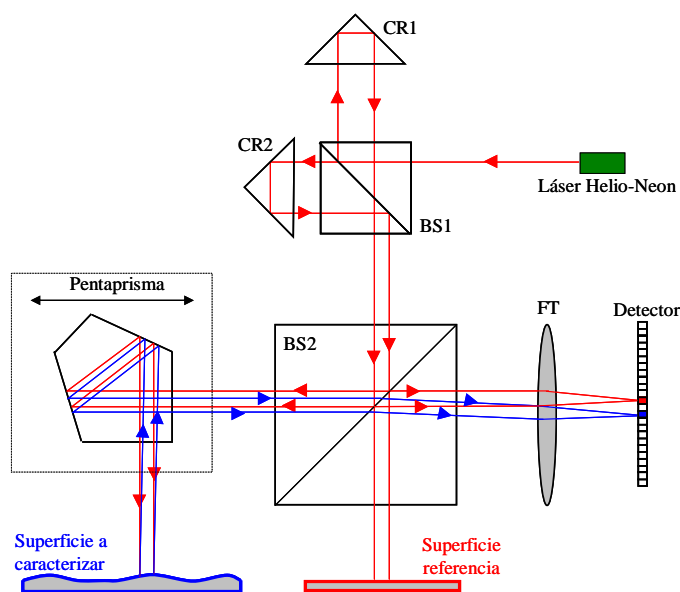


Figura 1.10. Esquema de un pentaprismo LTP.

Los resultados obtenidos con el ppLTP para un espejo plano mejoraron los obtenidos con el LTP. Concretamente, con el ppLTP se obtuvo una desviación angular de 0.86 μrad a lo largo de 500mm y comparan la misma medida con un interferómetro de Fizeau y un LTP; con el interferómetro obtienen una desviación angular de 0.838 μrad y con el LTP una desviación de 1.2 μrad debido a la no compensación de los errores sistemáticos [Qia95]; de esta manera, mejoran las prestaciones del LTP mediante el uso del pentaprismo externo. En [Li96] emplearon el ppLTP para medir espejos de un telescopio de rayos X consiguiendo una variación máxima de 0.6mrad en la medida de su pendiente a lo largo de 35 mm y de $2 \cdot 10^{-3}$ mm en la altura de la superficie.

En [Tak99] se estudia detalladamente la influencia de un prisma Dove en el brazo de referencia del interferómetro del LTP II de la figura 1.7(b) con la finalidad de reducir los errores mecánicos y térmicos. También se propone el uso de un sistema de aire acondicionado preciso para mantener la temperatura constante, eliminando así errores originados por un posible cambio térmico. Presentan una serie de medidas de un espejo a lo largo de 500 mm de perfil, obteniendo una desviación standard en la media de 10 medidas de la pendiente de 0.3 μrad y de 4.6 nm en el error en la altura final.

1.2.5.1. Interferometría por desplazamiento

Otro tipo de interferómetros son los basados en la interferometría por desplazamiento (del inglés, “Shearing interferometry”). Esta técnica interferométrica consiste en hacer interferir un frente de ondas como el representado en rojo en la figura 1.11 con una copia de sí mismo (representada en azul) desplazada una distancia s (conocida en la literatura inglesa como “shear”). Mediante el interferograma obtenido, en la región compartida por los dos haces se obtiene la diferencia de fases entre los dos frentes de onda. A partir de esta información, el objetivo es encontrar el frente de onda. Si las diferencias son muy pequeñas se pueden ajustar a la derivada; de esta forma, tras una integración numérica, se obtendría una buena aproximación del frente de ondas únicamente en la región de solapamiento.

La interferometría por desplazamiento presenta muchas ventajas respecto a otras técnicas interferométricas:

- no necesidad de un frente de onda de referencia ya que el frente de ondas interfiere consigo mismo.
- reducción de los errores debidos a vibraciones y turbulencias gracias al hecho de que los dos frentes de ondas recorren el mismo camino óptico.
- permite fabricar los interferómetros con pocos componentes ópticos.
- posibilidad de variar el número de franjas en el interferograma mediante el desplazamiento s .
- existen muchas configuraciones experimentales para la obtención de este tipo de interferogramas basadas en el uso de divisores de haz que dividen la amplitud del frente de onda incidente sin variar la forma de éste [Mal78], aunque no es la única posibilidad.

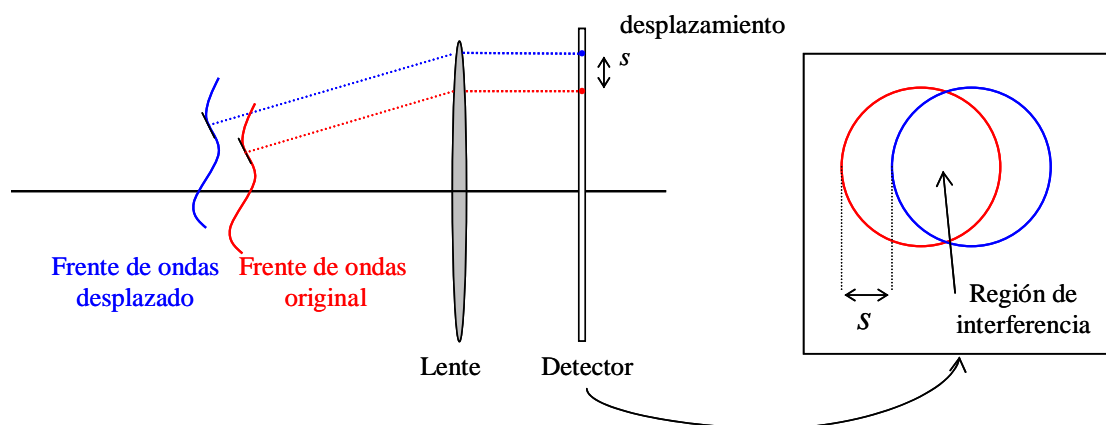


Figura 1.11. Principio fundamental de la interferometría por desplazamiento.

El primer interferómetro destinado a medir espejos pensados para la radiación de sincrotrón fue diseñado por Qian et al. en 1987 [Qia87] y consistía en un interferómetro por desplazamiento insensible a vibraciones y turbulencias de aire, sin embargo, no era práctico para medir espejos grandes.

En [Lei96] se presenta un sistema formado por dos redes rectangulares de fase de igual periodo paralelas entre sí y separadas cierta distancia. Para cada red, los órdenes de difracción pares desaparecen y si la profundidad de las redes se adapta a la longitud de onda de la luz incidente, el orden cero también desaparece. Si un haz láser casi paralelo pasa a través de las dos redes, éste se divide en dos haces desplazados lateralmente una distancia s . Los cambios de fase se consiguen desplazando una de las redes en la dirección perpendicular a la de sus líneas de fase; y rotando 90° el sistema de las dos redes se genera la distancia “shear” en la dirección perpendicular. También se presenta

una comparación experimental entre el interferómetro propuesto y un interferómetro Twyman-Green; ambos ofrecen una precisión del mismo orden de magnitud e incluso mejor para el interferómetro por desplazamiento que además, presenta las ventajas de la interferometría por desplazamiento como la estabilidad ante posibles vibraciones, la no necesidad de un frente de ondas de referencia, compacto y de fácil transporte.

En [Sch96] se presenta otro interferómetro por desplazamiento que consiste en dos redes Ronchi de fase. El desplazamiento entre los dos frentes de ondas que interfieren entre sí se consigue variando la distancia de separación entre las redes. La fase puede ajustarse mediante el movimiento lateral de una de ellas respecto a la otra. Al igual que en [Lei96] los órdenes de difracción pares e incluso el orden cero pueden desaparecer variando la profundidad de grabado de las redes; concretamente, se trabaja con los órdenes ± 1 que son los más intensos. El interferómetro propuesto consta principalmente de un láser Nd:YAG a 1318 nm, un buen objetivo microscopio y del sistema de las dos redes de Ronchi. El interferómetro se diseña especialmente para la medición de las aberraciones que introduce una microlente de silicio.

El principal inconveniente de esta técnica interferométrica es que a partir del patrón interferencial no se obtiene directamente información del frente de ondas deseado pues no se dispone de un frente de ondas de referencia. En aquellas técnicas interferométricas en que se utiliza una superficie de referencia, el frente de ondas de referencia es conocido y se puede resolver el patrón interferencial mediante las técnicas de cambio de fase como se ha descrito anteriormente. Sin embargo, en la interferometría por desplazamiento, al no utilizar una superficie de referencia y los dos frentes de ondas son el mismo pero desplazados entre sí, implica la necesidad de medir dos interferogramas en direcciones ortogonales ya que un único interferograma de este tipo no es suficiente a menos que tenga simetría. Así pues, el problema fundamental de esta técnica es la obtención del frente de ondas asociado a la superficie a conocer. A continuación se describen diferentes métodos numéricos propuestos para resolver dicho problema de la interferometría por desplazamiento.

1.2.5.1.1. Métodos Numéricos

Los métodos que a continuación se describen se centran en la obtención del frente de ondas únicamente en la región interferencial donde se obtiene su diferencia y por tanto,

no recuperan el frente de ondas en todo su dominio. Cada uno de los métodos propuestos a lo largo de la literatura se puede categorizar como zonal o modal [Sou80]: los zonales se basan en el valor local del frente de ondas a determinar mientras que los modales se basan en un ajuste del frente de ondas a una combinación lineal de un conjunto de funciones base.

En [Rim74] se presenta un método basado en criterios de mínimos cuadrados para describir un frente de onda de forma arbitraria a partir de dos interferogramas medidos en direcciones ortogonales. Demuestra que el problema consiste en resolver la ecuación $M\mathcal{W} = \mathcal{d}$ donde \mathcal{W} es un vector que representa el frente de ondas a obtener en los puntos de medición, M es una matriz cuadrada y simétrica que depende de la geometría de los puntos de medición y \mathcal{d} es otro vector, función de los valores medidos de los dos interferogramas. En [Rim75] se aplica este método para evaluar un frente de ondas mediante un interferómetro por desplazamiento. Se compara el resultado obtenido con el que se obtiene mediante un interferómetro Twyman-Green. Se aprecia que pequeñas aberraciones en el frente de ondas se pueden medir con la misma precisión mediante las dos configuraciones mientras que el interferómetro por desplazamiento consigue medir mejor grandes aberraciones.

En [Fri76] y [Hud76] estudian la obtención de un frente de ondas a partir de las medidas ruidosas de sus diferencias en términos de minimizar el error cuadrático medio producido. Ambos calculan el parámetro de propagación del ruido experimental presente en las medidas; encuentran que depende del número total de puntos de medición N de manera logarítmica ($\sim \ln(N)$). La diferencia entre los dos trabajos recae en las medidas experimentales: Hudgin resuelve el problema para la configuración en que los puntos de medición en la dirección x no coinciden con los de la dirección y ; mientras que Fried resuelve el problema cuando las medidas se han obtenido en los mismos puntos tanto en una dirección como en su perpendicular. Noll demuestra analíticamente la dependencia logarítmica $\ln(N)$ del error cuadrático medio producido [Nol78], en términos de ecuaciones en derivadas parciales, deduciendo las ecuaciones $M\mathcal{W} = \mathcal{d}$ ya planteadas por Rimmer.

En [Ser96] se aborda el problema de la interferometría por desplazamiento desde el dominio de frecuencias. Inicialmente calculan la respuesta frecuencial de la

interferometría por desplazamiento mediante el cociente entre las transformadas de Fourier del frente de ondas y de sus diferencias contenidas en el intrferograma. Obtienen que dicha respuesta en frecuencias se anula para determinadas frecuencias y proponen resolver el problema mediante un segundo interferograma. Desarrollan un nuevo método para calcular el frente de ondas teórico a partir de las diferencias contenidas en el interferograma basado en la minimización del error cuadrático utilizando potenciales reguladores. De este modo, calculan la respuesta en frecuencias del frente de ondas teórico que la multiplican por la respuesta en frecuencias del interferómetro por desplazamiento obteniendo la relación entre las transformadas de Fourier del frente de ondas real y teórico. Comparan este resultado con el mismo para los métodos lineales de Fried y Hudgin obteniendo mejores resultados ya que la respuesta frecuencial de Fried y Hudgin tiende a cero más rápido en la región de altas frecuencias.

En [**Hun79**] se formula la obtención del frente de ondas a partir de sus diferencias en términos matriciales. Se muestra que los resultados obtenidos en los trabajos anteriores son equivalentes a los obtenidos mediante la descripción matricial propuesta.

Frost et al. presentan en [**Fro79**] un novedoso algoritmo basado en la transformada de Fourier rápida (en inglés “Fast Fourier Transform”) para diagonalizar y desacoplar el sistema de ecuaciones en el que se relacionan los valores del frente de ondas a obtener con los valores de sus diferencias obtenidas experimentalmente. Se trata de un algoritmo preciso, estable y más rápido que el mejor método iterativo que resuelva el sistema de ecuaciones. El algoritmo fue incorporado en el proceso Knox-Thompson para el procesado de imágenes speckle y para la restauración de imágenes degradadas por turbulencias atmosféricas.

En [**Ghi89**] se demuestra que el problema de la interferometría por desplazamiento es análogo a resolver la ecuación de Poisson para una red rectangular imponiendo las condiciones de Neumann en los puntos extremos. Así, Ghiglia et al. proponen la velocidad y la potencia de las soluciones de esta ecuación para resolver el problema de la obtención del frente de ondas a partir de sus diferencias.

Otro de los métodos basados en el dominio de Fourier es el que obtuvieron Roddier et al. [Rod91] basado en calcular el operador laplaciano en el dominio de Fourier a partir de las medidas experimentales que las relacionan con las derivadas del frente de ondas a determinar (aproximación en el caso de utilizar desplazamientos pequeños). El algoritmo trabaja de manera iterativa con el propósito de reducir los efectos de borde producidos por la transformada de Fourier.

Los métodos mencionados hasta el momento son métodos zonales pero también existe otro tipo de métodos para resolver el problema planteado: los métodos modales que se basan en la expansión de la función a obtener y de sus diferencias en una serie de funciones.

En [Fre86] se presenta un método modal que emplea funciones exponenciales complejas como funciones base de la expansión. Tanto las exponenciales complejas como sus derivadas son funciones ortogonales, característica muy útil para el cálculo de la propagación del ruido. Además, estas funciones se implementaron usando los algoritmos de la transformada de Fourier rápida FFT, del inglés, “Fast Fourier Transform”, de forma que se redujo el tiempo computacional. Al emplear los algoritmos de la transformada de Fourier, los resultados se obtuvieron para una distribución cuadrada de la información experimental. Menikoff también propone la transformada de Fourier discreta para describir el frente de ondas y sus diferencias en [Men89]. Encuentra el parámetro de ruido minimizando el error producido entre los valores experimentales y los valores analíticos de la transformada de Fourier discreta. Finalmente, encuentra una fórmula asintótica del parámetro de ruido describiendo así, el caso de una larga abertura. Así, Menikoff obtiene una expresión exacta para la propagación del ruido mediante el análisis de Fourier, válida para aberturas cuadradas.

En [Lan92] se presenta un ajuste modal de un frente de ondas desconocido mediante una combinación lineal de un conjunto de funciones base. Para determinar los coeficientes de la combinación lineal, miden el frente de ondas al pasar por una turbulencia atmosférica conocida, la turbulencia Kolmogorov, que describen mediante los polinomios de Zernike.

En [Sic94] se propone otro método modal que consiste en ajustar el frente de ondas a determinar a una serie de funciones, en este caso, monomios en x e y ; de forma que minimizando la función de mérito que relaciona los valores experimentales con los valores analíticos de la combinación lineal de los monomios, se encuentran los coeficientes de ésta. El método fue aplicado al interferómetro por desplazamiento destinado a la caracterización de microlentes [Sch96].

En [Har96] se presenta un nuevo método modal basado en los polinomios de Zernike. Describen el frente de ondas original mediante una expansión de estos polinomios y calculan las diferencias contenidas en los interferogramas por desplazamiento mediante las diferencias de los polinomios. Relacionan los coeficientes de la expansión de los polinomios que describe el frente de ondas con los coeficientes de la expansión que describe las diferencias contenidas en los interferogramas mediante una matriz invertible. Este método se usa en el interferómetro por desplazamiento presentado en [Lei96].

Okuda et al. integran las diferencias obtenidas en la región de solapamiento obteniendo el frente de ondas únicamente en esa región [Oku00]. Sin embargo, encuentran una relación entre los polinomios de Zernike que mejor ajustan el frente de ondas en la región de solapamiento y los que lo describen en todo su dominio. De esta manera, a diferencia de los anteriores métodos con los que se encuentra el frente de ondas únicamente en la región interferencial, Okuda encuentra el frente de ondas en todo su dominio.

En [Els99a] y [Els99b] se presenta un método completamente diferente a los descritos anteriormente independientemente de conocer a priori la función a reconstruir o del tamaño de los desplazamientos. Se presenta la reconstrucción de una función unidimensional no periódica de dominio infinito. También se estudia la reconstrucción de una función unidimensional periódica de dominio finito mediante un análisis en el dominio de Fourier. Se concluye la necesidad de utilizar dos diferencias asociadas a las distancias s ya que con una sola se tiene una indeterminación. La idea consiste en reducir el caso real de una función de dominio finito no periódica al caso anterior de una función periódica. Al tratarse de una función no periódica, sus diferencias no se

obtienen en todo el dominio, únicamente en la región de solapamiento. Así, se propone extender las diferencias a todo el dominio mediante lo que denominan la “Extensión Natural”. De esta manera, se reduce el problema general una función no periódica a la recuperación de una función periódica mediante técnicas basadas en el dominio de Fourier. Se aplica el método a dos diferencias simuladas mediante dos distancias adecuadamente escogidas y la reconstrucción obtenida es exacta. En [Els00a] demuestran que, basándose en la “Extensión Natural”, cualquier frente de ondas unidimensional se puede reconstruir salvo una constante arbitraria a partir de dos interferogramas en el caso discreto; y en el caso de un frente de ondas bidimensional son necesarios cuatro interferogramas. En ambos casos, los parámetros “shears” deben ser primos entre sí para eliminar los polos de la función de transferencia de la interferometría por desplazamiento. En [Els00b] aplican los métodos propuestos considerando grandes distancias entre los dos frentes de ondas que interfieren a través de una pupila circular.

1.2.6. Deflectometría Óptica

La deflectometría óptica es la técnica en la que se centra esta tesis; se trata de una técnica basada en la medida de las pendientes de la superficie a caracterizar; de modo que el desarrollo de métodos numéricos de integración realizado en esta memoria es muy útil en esta técnica. Se basa exclusivamente en las leyes de reflexión y refracción de la luz y consiste en la observación y análisis de la imagen reflejada por una superficie pulida. El principio fundamental se muestra en la figura 1.12 donde se representa en rojo, el haz que incide sobre la superficie que se desea caracterizar y el rayo reflejado (representado en azul) que se capta mediante una cámara CCD o un detector de posición. A partir de las medidas se obtiene la desviación 2α que sufre el haz de luz cuando interacciona con la superficie, teniendo información de la pendiente de la superficie mediante la función tangente. Si se desea obtener información en diferentes zonas de la superficie es necesario que haya muchos puntos de muestreo. Para ello es importante el tamaño de haz láser que incide sobre la superficie: si se emplea un láser de diámetro grande, se hace un promedio de la intensidad de luz de todos los puntos que caen dentro del diámetro; por tanto, el uso de un láser de diámetro grande es indicado para medir la topografía general de la superficie, por ejemplo, de grandes superficies. También se puede utilizar un haz de diámetro más pequeño de modo que se obtendrá mucha más información de la topografía, es decir, es apropiado

para caracterizar la nanotopografía de la superficie; aunque si se toma un haz láser demasiado pequeño pueden presentarse fenómenos difractivos que introducirán errores en las medidas.

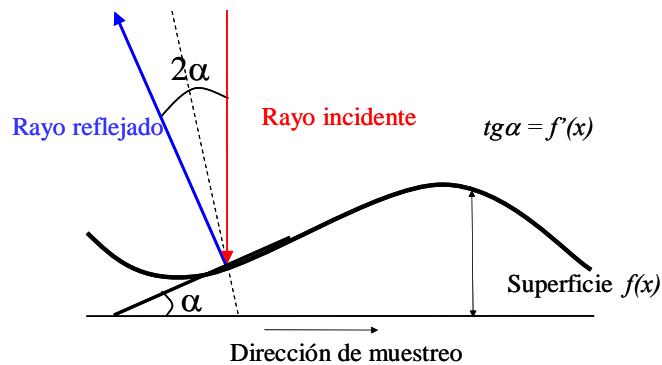


Figura 1.12. Principio fundamental de la deflectometría óptica.

Por otro lado, la deflectometría presenta una alta resolución en la medida de las pendientes de la superficie a caracterizar. Para ello ha sido fundamental el desarrollo de detectores de posición que permiten medir los desplazamientos en la incidencia sobre el detector, que se relacionan con la variación angular que sufre la luz al incidir sobre la superficie cuya tangente equivale a la pendiente de la muestra a determinar. Y por tanto la integración numérica es necesaria para la obtención de la topografía final de la superficie. Miembros del **PTB** presentan en [Els02] cómo reconstruir una función unidimensional cuando únicamente se conoce su primera y segunda derivada en una serie discreta de puntos de medición. Presentan brevemente los métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes y proponen la interpolación de los datos por “splines” cúbicas para su posterior integración analítica. Mediante resultados numéricos demuestran que el método basado en las “splines” cúbicas es mejor que los de Newton-Cotes.

Grédiac propone un método modal para la reconstrucción de una superficie a partir de sus derivadas en [Gre97]. Se basa en la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Legendre, válida para un área rectangular. Desarrolla una relación entre la integral de las derivadas y los coeficientes del ajuste por polinomios de Legendre de la superficie.

La idea de medir la pendiente de la superficie es equivalente a lo propuesto en 1971 por Evans para medir el radio de curvatura de pequeños espejos cóncavos midiendo la dirección del haz láser reflejado por la superficie; de forma que se obtiene información

del ángulo formado por los haces incidente y reflejado [Eva71]. En [Smo78] se presenta una variante del método propuesto por Evans, que consiste en captar directamente el haz reflejado mediante un fotodetector que genera una señal que se compara con otra señal producida por un haz de referencia. De esta forma, comparando las dos señales se obtiene información de la desviación y por tanto de la pendiente de la superficie con una precisión razonablemente buena en un rango entre 1 y 10 μm .

En [Cor80] se propone otro método para medir el radio de curvatura de superficies esféricas tanto cóncavas como convexas. El método se basa en el reconocimiento del punto nodal (punto de la superficie para el que la luz incidente no se desvía) como el centro de curvatura de este tipo de superficies. De esta manera, el centro de curvatura se localiza cuando el haz reflejado por la superficie no se desvía respecto la trayectoria original al rotar la superficie. Si la superficie presenta pequeños defectos de fabricación, se aprecia que el haz reflejado se desvía y midiendo dicha desviación, se determinan los defectos de la superficie. En [Día85] se presenta un método basado en el anterior para encontrar el centro de curvatura y miden experimentalmente el ángulo formado por el eje de revolución del sistema y las normales de la superficie, de modo que utilizando expresiones matemáticas de las secciones cónicas obtienen el diámetro de la superficie que utilizaron para la media del radio de curvatura de lentes cilíndricas [Día86]. La precisión obtenida fue de 0.05 mm. En [Ros93] aplican dicho método obteniendo diferentes resultados experimentales de una superficie esférica con una precisión de 10 μm .

En [Ams99a] se presenta un primer prototipo de un aparato denominado **FOS**, del inglés “Fast Optical Scanning” (rápido muestreo óptico) construido por Philips Center for Manufacturing Technology destinado a la medición de espejos flexibles para metrología óptica. El detector que se utiliza es un PSD que permite evaluar la posición d en la que cae la luz tanto en la dirección de muestreo como en su perpendicular. De esta manera, se obtiene información de los ángulos α entre los haces incidente y reflejado en las dos direcciones; la tangente de dichos ángulos se asocia con las pendientes de la topografía del objeto estudiado. De esta manera, el **FOS** proporciona una correlación directa entre todos los valores de las pendientes en las dos direcciones. Como consecuencia, el **FOS** solamente necesita la traslación de la superficie y tras obtener las

pendientes en las dos direcciones simultáneamente, se obtiene la topografía tridimensional mediante un algoritmo de integración numérica. Aún así, la integración también se ve afectada por el ruido experimental y por la discretización de la señal de entrada a causa del muestreo. Muestran los resultados obtenidos para un espejo de 140 x 100 mm y un grosor de 0.85 mm depositado en un sustrato de aluminio de 12 mm de grosor. Después de integrar los datos experimentales asociados a la pendiente del espejo, concluyen que la no planitud de dicha superficie es de 1 μm en los 100 mm de longitud. Para comprobar la precisión del aparato, comparan el perfil de un espejo no plano obtenido con un interferómetro comercial: en 30 mm de anchura del espejo, el interferómetro mide una altura de 245 nm mientras que el **FOS** mide una altura de 230 nm y en 45 mm de largo el interferómetro mide alrededor de 580 nm de altura y el defleómetro 520 nm. Los resultados son muy parecidos ya que miden la misma muestra aunque son ligeramente diferentes ya que los instrumentos de medida se basan en principios ópticos totalmente diferentes: el defleómetro mide las pendientes de la superficie y el interferómetro mide desviaciones en el frente de ondas aberrado por la superficie a partir de la interferencia producida con un frente de ondas de referencia. En [Ams99b] presentan otro defleómetro de diferentes características técnicas destinado a la medición de superficies más pequeñas al que llaman mini-defleómetro. Estudian el perfil de un cabezal magnético obteniendo una desviación angular de 130 μrad en la parte central de la línea de muestreo de tal modo que el perfil obtenido presenta una altura de 400 nm en los 5 mm centrales.

En [Shi04] se propone un dispositivo de muestreo rápido, para determinar el perfil unidimensional de una superficie basado en el principio fundamental de la defleómetría, similar al **FOS**, aunque no miden las pendientes en las dos direcciones, de manera que miden sólo perfiles unidimensionales. Comparan los resultados obtenidos con los encontrados mediante un interferómetro a lo largo de un perfil de 5 mm de un espejo poligonal con un error cuadrático medio de 0.98 nm y obtienen una variación de 20 nm en la altura del perfil obtenido con el sistema propuesto.

Un mecanismo ligeramente diferente es el que emplea otro defleómetro, el **AMS**, del inglés “Accurate Mechanical Scanning” (preciso muestreo mecánico), para medir superficies reflectantes de mayores dimensiones, como por ejemplo, espejos destinados a un laboratorio de sincrotrón. De hecho, en [Lam04] se presenta otro defleómetro al

que llaman **NOM**, del inglés “Nano Optic Measuring” (nano medida óptica) desarrollado en el laboratorio de sincrotrón BESSY, como alternativa para la medida de alta precisión de la superficie de componentes ópticos usados en el rango de rayos X y EUV de la radiación de sincrotrón. La máquina es capaz de muestrear 1200 mm de longitud y 300 de anchura y han medido superficies esféricas y asféricas de hasta 700 cm² de área con una precisión del orden del subnanómetro. El principio básico del **AMS** es el mismo que el del **FOS** aunque el mecanismo es diferente: el **FOS** realiza un muestreo en un sistema de coordenadas polares y a partir de las medidas se obtienen las pendientes de la superficie mientras que con el **AMS**, la información que se obtiene es la diferencia de pendientes y el muestreo es válido para un sistema de coordenadas cartesianas. Por tanto, en el **AMS**, antes de la integración numérica, se debe obtener la pendiente de la superficie a partir de sus diferencias en la dirección de muestreo, problema similar al de la interferometría por desplazamiento. El **AMS** se basa en el movimiento de un pentaprisma externo situado encima de la superficie usando un dispositivo de traslación. La precisión de este método se ve limitada por posibles errores mecánicos del movimiento del pentaprisma. En [Sch99] se realiza un estudio detallado de la influencia de estos errores y se propone mantener la posición angular del pentaprisma constante mediante un proceso de estabilización activa. Por otro lado, para evitar los errores de fabricación del pentaprisma, en [Wei99] se propone el uso de dos pentaprismas separados una distancia conocida sobre los que inciden dos haces de luz; de este modo se puede calcular las diferencias de la pendiente en la dirección de muestreo eliminando los posibles errores introducidos por la óptica de los prismas. Basándose en estos estudios, un nuevo modelo **AMS** en fase preliminar muestrea la superficie mediante tres haces de luz separados una distancia conocida. De este modo, se miden las diferencias de pendiente, pues se obtienen la diferencia de los ángulos de desviación entre los haces incidente y reflejado para los tres haces en la dirección de muestro mientras que en su perpendicular se obtiene la pendiente directamente. Una vez muestreada una línea, se mueve la muestra y se repite el proceso para muestrear toda la superficie. Así pues, tanto en la configuración de dos pentaprismas como en el nuevo aparato **AMS** aparece el problema de determinar la pendiente de la superficie a partir de sus diferencias obtenidas experimentalmente resuelto mediante el algoritmo de la “Extensión Natural” en [Els99a] y [Els99b]. Finalmente, aplicando un proceso de integración numérica se obtiene la topografía final.

1.2.6.1. Sensor de Shack-Hartmann

Otro de los sensores más importantes para evaluar superficies ópticas es el de Hartmann. Originalmente consistía en una pantalla, situada lo más cerca posible de la superficie, con aberturas distribuidas uniformemente mediante las que se hacía la selección de los haces de luz que inciden sobre la superficie a determinar [Goz92]. Las dimensiones de las aberturas debían ser suficientemente grandes para que el haz de luz pasara tanto cuando se dirigía hacia la superficie como cuando se reflejaba. La posición de las aberturas y de la fuente luminosa son conocidas, lo que permitía determinar la dirección de los haces incidentes y conociendo la dirección del haz reflejado, se encuentra la desviación entre los dos haces mediante la ley de Snell. Si la desviación es muy pequeña se aproxima a la pendiente de la superficie. Repitiendo el proceso para todas las aberturas de la pantalla se obtiene la pendiente de la superficie en una serie de posiciones. Finalmente, aplicando un proceso de integración numérica, se obtenía la topografía.

La modificación de Shack fue la colocación de una lente detrás de cada una de las aberturas del diafragma. Con los años, el sistema de Shack-Hartmann se ha conseguido miniaturizar mediante microlentes integradas sobre un único substrato. Tal sistema se conoce como el sensor de Shack-Hartmann, de amplio uso en multitud de aplicaciones como por ejemplo en óptica adaptativa o en óptica fisiológica. El sensor de Shack-Hartmann también puede aplicarse en la caracterización de superficies refractantes midiendo la deformación de un frente de ondas incidente tal y como se muestra en la figura 1.13. Se ilumina la superficie en cuestión con un frente de ondas plano (rojo) de manera que el frente transmitido (azul) se ve afectado por su paso por la superficie. Se focaliza la imagen de dicho frente aberrado mediante la matriz de microlentes del sensor en el plano focal de las lentes donde se coloca una cámara CCD. Y de la imagen captada se miden los desplazamientos d_y entre el frente de ondas aberrado por la superficie y el de referencia lo que permite obtener los ángulos de desviación α_y cuya tangente se relaciona con la pendiente de la superficie.

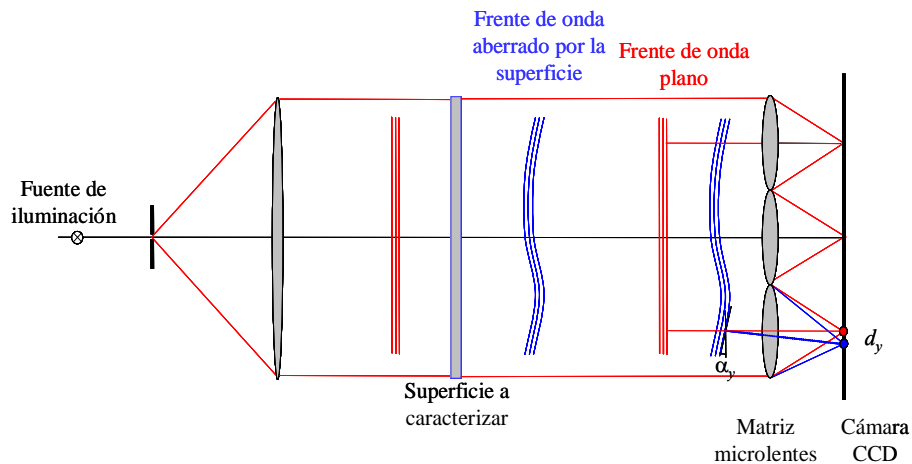


Figura 1.13. Caracterización de una superficie mediante un sensor de Shack-Hartmann.

1.3. Propósito

Como ya se ha mencionado anteriormente, el progreso en los productos y servicios de la ICT, destinada a la sociedad de la información, requiere una mayor innovación en la instrumentación de la línea de control de la topografía de superficies. Así es como dentro del Programa Europeo de Crecimiento Competitivo y Sostenible (del inglés “Competitive and Sustainable Growth”) nace un proyecto basado en la deflectometría tridimensional que se denomina “3D-Deflectometry: A new 3D measurement technique for fast inspection of large, slightly unflat surfaces” (3D-Deflectometry: Una nueva técnica de medición 3D para la rápida inspección de superficies largas casi planas”).

Los principales objetivos del proyecto son:

- Desarrollar un nuevo aparato **FOS**, que muestrea óptica y rápidamente la superficie a caracterizar; concretamente el objetivo es conseguir una precisión mejor que 10 nanómetros y tardar menos de 1 minuto en medir una oblea de 300 mm de diámetro. Este aparato está limitado por el área a muestrear, es decir, las obleas tratadas con este aparato pueden llegar a tener un diámetro de entre 300 y 500 milímetros.
- Desarrollar un segundo aparato, el **AMS**, destinado a muestrear grandes superficies, como por ejemplo, láminas de vidrio de una área de 600 x 1000 milímetros cuadrados, con una precisión del nm; sin embargo, este aparato es más lento debido al movimiento mecánico que realiza, tal y como se presentará.

- Desarrollar los algoritmos apropiados para obtener la topografía a partir de la información de las pendientes de la superficie. Tales algoritmos han de ser útiles para los dos aparatos pues el principio fundamental es el mismo.
- Describir la topografía tridimensional y crear una interficie gráfica eficiente para el usuario de tales aparatos y de su software.

Los laboratorios que componen el consorcio para desarrollar dicho proyecto son los siguientes:

- **Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB)**, Braunschweig und Berlin, Alemania
- **Philips Electronics Nederland B. V.**, Holanda
- **Trioptics GmbH**, Optische Instrumente, Alemania
- **Plan-Optik**, GmbH, Alemania,
- **Trioptics France Sarl**, Francia
- **Ecole Centrale de Lyon**, Francia
- **Universitat Autònoma de Barcelona**, España

El trabajo asignado al Laboratorio de Procesado de Imágenes del Grupo de Óptica de la Universidad Autònoma de Barcelona consiste en el desarrollo de métodos numéricos de integración para la obtención de la topografía de las superficies a partir de sus pendientes.

En la primera parte de la tesis se estudiará propiamente la operación de integración numérica. Se estudiará el caso más sencillo de integrar en una dimensión. Para ello, se considera que la señal derivada se muestrea en una serie de puntos teniendo una señal discretizada. Por tanto, será necesaria una interpolación lo más precisa posible de la derivada discretizada con el fin de obtener una señal continua para aplicar la integración. Los diferentes métodos desarrollados se comparan en diferentes casos en función de la señal derivada de entrada. Una vez analizada la integración unidimensional, se estudiará la integración bidimensional en un sistema de coordenadas cartesianas. Y debido a las características del **FOS**, estos métodos se adaptarán al caso en que las derivadas se hayan obtenido en un sistema coordenadas polares. Se compararán los métodos desarrollados en diferentes casos simulando las medidas reales.

También se estudiará la precisión y rapidez de los diferentes métodos desarrollados a causa de las exigencias de la industria semiconductora de reducir el tiempo de medición de las superficies y así los costes de la línea de producción.

En la segunda parte de la tesis se describirán los aparatos en cuyo software se han implementado los métodos desarrollados. Se estudiará el funcionamiento de los deflectómetros **FOS** y **AMS** y se desarrollarán diferentes algoritmos de preprocesado de los datos experimentales con el objetivo de mejorar las prestaciones de los deflectómetros; y se mostrarán los primeros resultados obtenidos con el **FOS**. Finalmente, también se describirá un sensor de Shack-Hartmann en el que se han incorporado los métodos de integración y se describirá un experimento para determinar una fase conocida introducida electrónicamente con una pantalla de cristal líquido.

1.4. Esquema

El Capítulo 2 de la presente memoria comienza con el caso más sencillo posible: la integración numérica en una dimensión. Así, se supone que la función derivada se evalúa en una serie de puntos. A partir de esta información, el primer objetivo es encontrar la función en todos los puntos. Para ello, se estudian los métodos basados en las fórmulas de Newton-Cotes como por ejemplo la regla del Trapecio, la de Simpson o la de 3/8 de Simpson. Son métodos que se basan en una interpolación de la información de la función derivada. Cada método emplea una interpolación diferente. Así, se inicia la búsqueda de la interpolación más precisa posible con el objetivo final de encontrar el método de integración más preciso. Se desarrolla la interpolación por “splines” cúbicas con la que la derivada evaluada en cada pareja de puntos adyacentes se ajusta a un polinomio de tercer grado. Mediante este método la derivada se ajusta a una suma de polinomios de tercer grado que se integra analíticamente obteniendo la función deseada.

Al implementar todos estos métodos numéricos se requiere de la teoría de la representación discreta de una señal continua. Esta teoría afirma que la interpolación más precisa posible es la interpolación “sinc” discreta, fácilmente implementada en el dominio de la transformada de Fourier discreta. Por tanto, trabajando con la transformada de Fourier se consigue la máxima precisión posible, en el caso

estacionario, es decir, sin tener en cuenta los efectos de borde. La integración se realiza al multiplicar la transformada de Fourier de la derivada discreta por un filtro adecuadamente diseñado. La función evaluada en N puntos se obtiene mediante la transformada de Fourier inversa del producto entre la transformada de Fourier de la derivada y el filtro diseñado. Este método calcula la transformada de Fourier discreta de la derivada, con lo que se supone una función periódica. Dicha suposición no se cumple con los datos reales produciéndose efectos de borde que aumentarán el error producido en la integración. Para evitar tales efectos, el método ha sido perfeccionado mediante una extrapolación de los datos a analizar. Así, se estudian tres variantes del método de Fourier: haciendo una extrapolación lineal, una basada en las “splines” cúbicas y una por “reflexión”. De esta manera, se integra en el intervalo $2N$ obteniendo la función en los primeros N puntos donde se ha evaluado la función derivada.

Otro aspecto importante que se presenta en el Capítulo 2 es la propagación del ruido en la operación de integrar. La motivación de dicho estudio es la influencia del ruido que presentarán las medidas experimentales obtenidas mediante los dos aparatos **FOS** y **AMS**. Así, el siguiente paso en la investigación es el estudio de los diferentes métodos de integración presentados, bajo condiciones de ruido en la función derivada. Basándonos en el método de Fourier, se demuestra que los diferentes métodos integradores actúan como filtros de frecuencia y se estudia su función de transferencia (MTF) ya que permitirá conocer cómo se propaga el ruido en la integración. La MTF se calcula fácilmente mediante la relación entre la transformada de Fourier de la derivada y de la función integrada. La comparación de los diferentes métodos de integración resulta más fácil analizando la función de transferencia de cada filtro asociado a cada método.

Una vez realizado el estudio de la integración unidimensional, la investigación se dirige hacia el desarrollo de los dos aparatos **FOS** y **AMS**. Así, el Capítulo 3 se centra en el desarrollo de métodos de integración bidimensional en un sistema de coordenadas cartesianas. Se propone un nuevo método de integración bidimensional basándose en las propiedades de un campo vectorial conservativo. Es conocido que la integral de línea para un campo vectorial conservativo es nula, lo que permite aplicar los métodos unidimensionales en las dos direcciones. Para mejorar tal método, se propone otro

basado en la minimización de la diferencia entre los valores obtenidos tras integrar en una dirección y en la otra determinando las constantes de integración.

Se implementa y se mejora el método de Roddier basado en la transformada de Fourier bidimensional en el que tratan las derivadas como dos matrices de dimensiones más grandes para rodearlas de ceros. Este método también presenta oscilaciones en los bordes al suponer los datos analizados como una función periódica y para reducir estos efectos, el método se aplica de manera iterativa. Basándonos en el estudio del Capítulo 2, se mejora el método con diferentes extrapolaciones: una lineal, una basada en las “splines” cúbicas y la extensión por “reflexión”.

Otro método que se presenta en el Capítulo 3 es el basado en las diferencias finitas. Se describe el método tras interpolar linealmente la función derivada evaluada en puntos adyacentes como hizo Zou en la determinación de un frente de ondas mediante un sensor de Shack-Hartmann (motivo central del Capítulo 6 de esta memoria). Se mejora dicho método interpolando la función derivada mediante las “splines” cúbicas y se comparan ambos métodos. Al igual que en el Capítulo 2, también se estudia la propagación del ruido para los métodos de las diferencias finitas y el método basado en el dominio de Fourier mediante el cálculo de la función de transferencia.

El estudio realizado en el Capítulo 3 es válido para un sistema de coordenadas cartesianas. Debido al muestreo realizado por el **FOS**, se lleva a cabo el estudio de diferentes métodos de integración para un sistema de coordenadas polares. Así, en el Capítulo 4 se adaptan los métodos presentados en el Capítulo 3; concretamente se estudian los métodos basados en las propiedades de un campo vectorial conservativo; los que determinan las constantes de integración minimizando la diferencia entre los valores obtenidos tras integrar en las direcciones radial y angular; y también se adaptan los dos métodos basados en las diferencias finitas presentados en el Capítulo 3. Finalmente, se comparan los diferentes métodos presentados.

Una vez estudiada la integración en una y dos dimensiones, el Capítulo 5 se centra en la descripción de los deflectómetros **FOS** y **AMS** y se muestran los primeros resultados experimentales obtenidos. También se desarrollan algoritmos de preprocesado de los datos experimentales para eliminar errores sistemáticos que se producen en el **FOS**.

Respecto al **AMS**, se desarrolla un método para evaluar la precisión de las medidas realizadas, como criterio de calidad. Tal y como se mencionó anteriormente, el **AMS** mide las diferencias de las pendientes en la dirección x mientras que en la otra dirección mide directamente la pendiente. Así, surge el problema de la obtención de las dos pendientes para su posterior integración, resuelto mediante el algoritmo de la “Extensión Natural” que se describe brevemente y se muestran resultados numéricos en el caso más sencillo de la reconstrucción de una función unidimensional.

En el Capítulo 6 se describe el funcionamiento del sensor de Shack-Hartmann y se muestran los resultados obtenidos en la determinación de un frente de ondas al que se le introduce una aberración mediante una pantalla de cristal líquido aplicando los métodos de integración presentados en esta memoria.

Finalmente en el Capítulo 7 se muestran las conclusiones de esta Tesis.

Capítulo 2. Diferentes métodos de integración unidimensional

En este capítulo se estudian diferentes métodos de integración unidimensional. Para todos ellos se supone que la función derivada $f'(x)$ se muestrea en una serie de N puntos. A partir de esta información, se estudian diferentes métodos de integración para obtener la función $f(x)$ en los puntos muestreados con la máxima precisión posible. En el primer apartado se presentan los métodos de integración más conocidos, los basados en las reglas cerradas de Newton-Cotes, como por ejemplo, la regla del Trapecio, de Simpson o la de 3/8 de Simpson. En todos ellos se realiza una interpolación que ajusta la derivada a un polinomio de cierto grado en función del método escogido[Pre87]. En el segundo apartado se estudia la interpolación de la derivada a integrar mediante “splines” cúbicas; consiste en ajustar la señal evaluada en un par de puntos adyacentes mediante un polinomio de tercer grado; imponiendo condiciones de continuidad en la función y en sus derivadas primera y segunda. Mediante la integración analítica de estos polinomios se obtiene la señal deseada. Con el propósito de utilizar la interpolación más precisa posible, en la tercera sección del capítulo, se estudia la integración en el dominio de Fourier. En el siguiente apartado se comparan los diferentes métodos presentando los resultados obtenidos para una señal generada analíticamente evaluada en una serie de puntos equidistantes.

Gracias al estudio en el dominio de Fourier, se estudia la integración numérica como una operación de filtrado lineal y recursivo. Así, los diferentes métodos se estudian como filtros de frecuencia y se calcula la función de transferencia para cada uno de ellos. De esta manera, se destaca el dominio de Fourier como una herramienta útil para la comparación de los diferentes métodos de integración. También se analizan los métodos más precisos en la zona no estacionaria de la función a determinar; para ello, se presentan una serie de experimentos numéricos que permiten caracterizar los efectos de borde que aparecen al aplicar la transformada de Fourier discretizada. Finalmente se analiza cómo el ruido presente en la derivada afecta en la integración numérica. Mediante la función de transferencia se calcula la relación entre la varianza de la función integrada y la varianza del ruido de tipo blanco sumado a la derivada, supuestamente gaussiano, aditivo y de media nula. De esta manera, la función de transferencia de los diferentes filtros integradores ofrece información de cómo se propaga el ruido en cada uno de los métodos estudiados.

2.1. Métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes

Sean $f(x)$ la función a determinar y $f'(x)$ su derivada muestreada en una serie de puntos x_n que vamos a suponer equidistantes por simplicidad: $x_n = x_0 + nh$ donde x_0 es el primer punto donde se evalúa la derivada, $n = 0, \dots, N-1$ siendo N el número total de puntos donde la derivada es evaluada y h es la distancia entre los puntos de muestreo. Para simplificar la notación escribiremos $f'_n = f'(x_n)$ y $f_n = f(x_n)$ para la función derivada y la función a determinar respectivamente. Los diferentes métodos de integración permiten obtener los valores de $f(x)$ en los mismos puntos x_n en los que se evalúa su función derivada $f'(x)$. A continuación se analizan las tres primeras fórmulas cerradas de Newton-Cotes:

- Regla del Trapecio
- Regla de Simpson
- Regla de 3/8 de Simpson

y se muestra que estos métodos se pueden usar como filtros recursivos y que realizan una determinada interpolación de los datos originales. Para los tres métodos se ha supuesto que el valor de la función a determinar en el primer punto x_0 es nulo, es decir,

$f_0 = f(x_0) = 0$, es decir, el valor de la constante de integración se ha tomado de tal manera que se cumple $f_0 = 0$

Regla del Trapecio

En la figura 2.1 se ha representado la función derivada $f'(x)$ muestreada en una serie de puntos x_n . Tan sólo se indica la derivada en dos puntos de la serie (x_0 y x_1); calculando el área sombreada de la figura se obtiene el valor de la función integrada $f(x)$ en x_1 . Esta regla une los valores de la función derivada mediante una interpolación de primer grado. De esta manera, la función $f(x)$ se obtiene mediante un polinomio de grado 1.

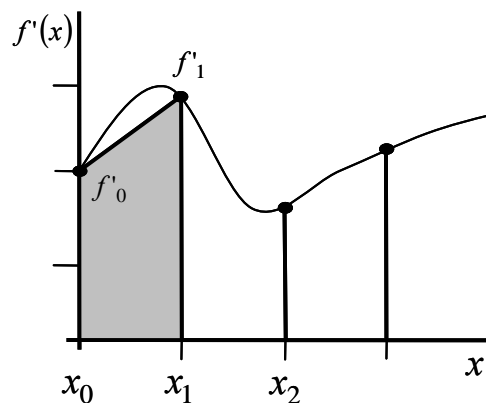


Figura 2.1. La regla del Trapecio interpola la derivada en dos puntos $[x_0, x_1]$ mediante un polinomio de grado 1. El área sombreada es el valor de la integral entre x_0 y x_1 .

La regla del Trapecio viene dada por:

$$f(x_1) - f(x_0) = f_1 - f_0 = \int_{x_0}^{x_1} f'(x) dx \approx \frac{h}{2} (f'_0 + f'_1) \quad , \quad (2.1)$$

donde se calcula la función $f(x)$ en x_1 siendo f' la función derivada y h la distancia entre dos puntos adyacentes donde se ha evaluado la derivada.

La expresión (2.1) es válida para determinar f_1 y se emplea de manera recursiva para determinar f en toda la serie de puntos $[x_n]$. En la figura 2.2 se representa la derivada f' muestreada en N puntos. Aplicando la regla del Trapecio de manera recursiva se determina el área de las zonas sombreadas indicadas en la figura 2.2. De esta manera, se obtiene el valor de f en todos los puntos x_n con $n = 0, \dots, N-1$.

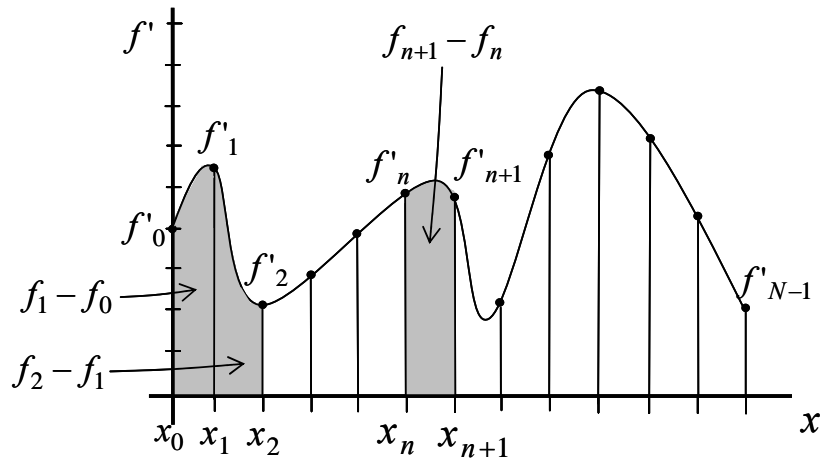


Figura 2.2. Función derivada muestreada en N puntos. Aplicando la regla del Trapecio de manera recursiva se determina la función f en cada punto.

A partir de la expresión (2.1), la regla del Trapecio recursiva se escribe:

$$f_0 = 0$$

$$f_n = f_{n-1} + \frac{h}{2}(f'_n + f'_{n-1}), \quad (2.2)$$

donde $n = 1, \dots, N-1$ y h es el paso de integración que suponemos constante.

Regla de Simpson

En la figura 2.3 se representa la función derivada $f'(x)$. Se indica la derivada muestreada en los tres primeros puntos (x_0 , x_1 y x_2) ya que este método determina el valor de la función interpolando la derivada en tres puntos a un polinomio de segundo grado. De esta manera, la función $f(x)$ se calcula a partir del área sombreada de la figura 2.3.

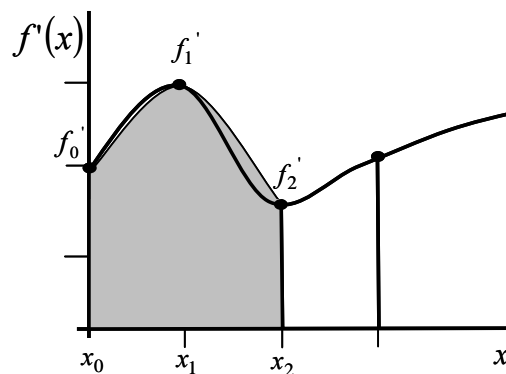


Figura 2.3. La regla de Simpson interpola la derivada en tres puntos $[x_0, x_1, x_2]$ mediante un polinomio de grado 2. El área sombreada es la integral entre los puntos x_0 y x_2 .

Se calcula la función $f(x)$ en x_2 mediante la regla de Simpson a partir del valor de la función en x_0 y de los valores de la derivada en los tres puntos x_0 , x_1 y x_2 , como se indica en la siguiente expresión:

$$f(x_2) - f(x_0) = f_2 - f_0 = \int_{x_0}^{x_2} f'(x) dx \approx \frac{h}{3} (f'_0 + 4f'_1 + f'_2) . \quad (2.3)$$

Al igual que la regla del Trapecio, el método de Simpson se emplea de manera recursiva para determinar f en todos los puntos x_n . Mediante la expresión (2.3) se determina la función en todos los puntos excepto en los dos primeros; en x_0 se ha supuesto que f es nula ($f_0 = 0$) y para determinar f en x_1 se emplea la regla del Trapecio. Así pues, la regla de Simpson recursiva se escribe mediante la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} f_0 &= 0 \\ f_1 &= f_0 + \frac{h}{2} (f'_0 + f'_1) \\ f_n &= f_{n-2} + \frac{h}{3} (f'_{n-2} + 4f'_{n-1} + f'_n) \quad n = 2, \dots, N-1 . \end{aligned} \quad (2.4)$$

Regla de 3/8 de Simpson

En la figura 2.4 se representa $f'(x)$ muestreada en los cuatro primeros puntos ya que este método ajusta la derivada mediante un polinomio de grado 3, es decir, se emplea una interpolación de tercer orden. Así, la función f en el punto x_3 se determina mediante el área sombreada indicada en la figura 2.4.

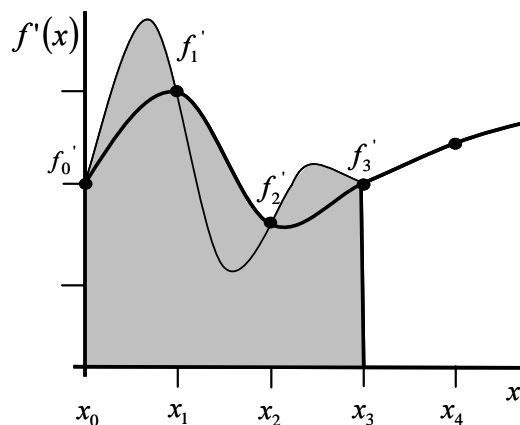


Figura 2.4. La regla de 3/8 de Simpson interpola la derivada en 4 puntos $[x_0, x_1, x_2, x_3]$ mediante un polinomio de grado 3. El área sombreada es la integral entre los puntos x_0 y x_3 .

Siguiendo el mecanismo de los anteriores métodos, la regla de 3/8 de Simpson determina f en x_3 mediante los valores de la derivada en los puntos x_0, x_1, x_2 , y x_3 y del valor de la función en x_0 tal y como se muestra en la siguiente expresión:

$$f(x_3) - f(x_0) = f_3 - f_0 = \int_{x_0}^{x_3} f'(x) dx \approx \frac{3h}{8} (f'_0 + 3f'_1 + 3f'_2 + f'_3) . \quad (2.5)$$

Este método también se emplea recursivamente para determinar f en todos los puntos x_n . Al igual que en el método de Simpson, hay puntos para los que f no se determina aplicando directamente la regla de 3/8 de Simpson. A partir de la expresión (2.5) se observa que la función en los tres primeros puntos (f_0, f_1 y f_2) no se obtiene directamente con la regla de 3/8 de Simpson. Así se emplean los anteriores métodos presentados: los dos primeros puntos se unen mediante un polinomio de primer grado (regla del Trapecio) para obtener f_1 . Seguidamente se unen los tres primeros puntos mediante un polinomio de segundo grado (regla de Simpson) obteniendo f_2 . Así, la regla de 3/8 de Simpson recursiva se escribe mediante la expresión:

$$\begin{aligned} f_0 &= 0 \\ f_1 &= f_0 + \frac{h}{2} (f'_0 + f'_1) \\ f_2 &= f_1 + \frac{h}{3} (f'_0 + 4f'_1 + f'_2) \\ f_n &= f_{n-3} + \frac{3h}{8} (f'_{n-3} + 3f'_{n-2} + 3f'_{n-1} + f'_n) . \end{aligned} \quad (2.6)$$

Tal y como se ha presentado, los anteriores métodos de integración se basan en una interpolación de la función derivada; ésta se ajusta a un polinomio de cierto grado que posteriormente se integra. Es importante hacer notar que todos los métodos de integración explicados se pueden considerar como filtros recursivos. El valor de la función en un cierto punto se obtiene a partir del valor de la función en un punto anterior más una cierta interpolación de los valores de la derivada en los puntos cercanos. Así pues, la operación de interpolar la derivada es importante para obtener una integración precisa. A continuación, se estudia otro método de integración basado en una interpolación más precisa.

2.2. Método basado en la interpolación por “splines” cúbicas

Este método de integración se basa en el ajuste de la derivada mediante unos polinomios de grado 3, las “splines” cúbicas [Math99]. En cada pareja de puntos adyacentes se calcula un polinomio de grado 3. Así pues, si se tienen N puntos, se calculan $N-1$ polinomios. Los coeficientes de los polinomios se obtienen al imponer la continuidad de la función a interpolar y de su primera y segunda derivadas. A continuación se expone el método, para demostrar que también se puede considerar como un filtro recursivo.

Sean $\{(x_n, f'(x_n) \ n = 0, \dots, N-1)\}$ los N puntos y los valores de la derivada. Entre los puntos x_n y x_{n+1} se ajusta un polinomio de grado 3 $S_n(x)$ cuyos coeficientes vienen dados por $s_{n,0}, s_{n,1}, s_{n,2}, s_{n,3}$. Cada uno de los polinomios es sólo válido en el intervalo en el que se ha definido. El conjunto de los $N-1$ polinomios se escribe como:

$$S(x) = \sum_{n=0}^{N-2} S_n(x) = \sum_{n=0}^{N-2} \{s_{n,0} + s_{n,1}(x-x_n) + s_{n,2}(x-x_n)^2 + s_{n,3}(x-x_n)^3\}, \quad (2.7)$$

donde $x \in [x_n, x_{n+1}]$ y $n = 0, \dots, N-2$.

Para calcular los coeficientes $s_{n,m}$ se imponen las siguientes condiciones:

$$S(x_n) = f'(x_n) \quad \text{para } n = 0, \dots, N-1, \quad (2.8)$$

$$S_n(x_{n+1}) = S_{n+1}(x_{n+1}) \quad \text{para } n = 0, \dots, N-3, \quad (2.9)$$

$$S'_n(x_{n+1}) = S'_{n+1}(x_{n+1}) \quad \text{para } n = 0, \dots, N-3, \quad (2.10)$$

$$S''_n(x_{n+1}) = S''_{n+1}(x_{n+1}) \quad \text{para } n = 0, \dots, N-3. \quad (2.11)$$

La expresión (2.8) indica que la suma de las “splines” cúbicas ha de pasar por los puntos x_n . El resto de las expresiones anteriores hacen referencia a la continuidad de los polinomios cúbicos (2.9), de sus primeras (2.10) y segundas derivadas (2.11). De esta manera se pretende que el conjunto de polinomios cúbicos $S(x)$ sea una función lo más suave posible. De las ecuaciones (2.8)-(2.11) se obtiene un sistema de $N+3(N-2) = 4N-6$ ecuaciones en las que aparecen $4N-4$ incógnitas correspondientes a los coeficientes $s_{n,m}$.

Así, se tienen que imponer dos condiciones más en los puntos extremos x_0 y x_{N-1} para obtener los coeficientes. Si suponemos que la distancia entre los puntos $h = x_{n+1} - x_n$ es constante los coeficientes de cada uno de los polinomios vienen dados por:

$$\begin{aligned} s_{n,0} &= f'_n \\ s_{n,1} &= d_n - \frac{h}{6}(2m_n + m_{n+1}) \\ s_{n,2} &= \frac{m_n}{2} \\ s_{n,3} &= \frac{1}{6h}(m_{n+1} - m_n) , \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde

$$d_n = \frac{1}{h}(f'_{n+1} - f'_n) , \quad (2.13)$$

y los coeficientes m_n se obtienen resolviendo el sistema lineal de ecuaciones de las condiciones de continuidad (2.8)-(2.11):

$$u_n = hm_{n-1} + 4hm_n + hm_{n+1} , \quad (2.14)$$

siendo u_n :

$$u_n = 6(d_n - d_{n-1}) = \frac{6}{h}(f'_{n+1} - 2f'_n + f'_{n-1}) . \quad (2.15)$$

Sustituyendo la ecuación (2.15) en (2.14) se obtiene:

$$h(m_{n-1} + 4m_n + m_{n+1}) = \frac{6}{h}(f'_{n+1} - 2f'_n + f'_{n-1}) , \quad (2.16)$$

donde $n = 1, \dots, N-2$. La estrategia implementada para las condiciones restrictivas en los puntos extremos se denomina “spline” cúbica sujeta; consiste en imponer las derivadas en los dos puntos extremos $S'(x_0)$ y $S'(x_{N-1})$ y viene dada por la expresión:

$$\begin{aligned} m_0 &= \frac{3}{h}(d_0 - S'(x_0)) - \frac{m_1}{2} \\ m_{N-1} &= \frac{3}{h}(S'(x_{N-1}) - d_{N-2}) - \frac{m_{N-2}}{2} . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Una vez realizado el ajuste de la derivada, la función $f(x)$ se obtiene mediante la integración de la suma total de las “splines” cúbicas según:

$$f(x_{n+1}) - f(x_n) = f_{n+1} - f_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} S(x) dx = s_{n,0}h + s_{n,1} \frac{h^2}{2} + s_{n,2} \frac{h^3}{3} + s_{n,3} \frac{h^4}{4} . \quad (2.18)$$

Resumiendo, al igual que los métodos de Newton-Cotes, el método basado en las “splines” cúbicas presenta dos importantes características:

- Puede considerarse como un método recursivo, es decir, la función a obtener se evalúa a partir de la función en puntos anteriores y de la derivada conocida en todo su dominio como se indica en (2.18) mediante los coeficientes $s_{n,m}$.
- Emplea una interpolación de la derivada a integrar.

2.3. Método de Fourier

De la teoría de la representación discreta de una señal continua se conoce que la interpolación más precisa es la interpolación “sinc” discreta [Yar96]. La interpolación “sinc” es fácilmente implementada en el dominio de la transformada discreta de Fourier [Yar02]. Esta idea nos lleva a pensar la operación de integrar en el dominio de Fourier.

Supongamos $f'(x)$ y $F'(\omega)$ la derivada continua y su transformada de Fourier respectivamente; x representa la coordenada continua del dominio espacial y ω la coordenada continua del dominio de Fourier. Ambas funciones se relacionan mediante la transformada de Fourier inversa:

$$f'(x) = \int F'(\omega) \exp(-i2\pi\omega x) d\omega . \quad (2.19)$$

La integración $f(x) = \int f'(x) dx$, se obtiene sustituyendo la derivada (2.19), de manera que se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} f(x) &= \int \left(\int F'(\omega) \exp(-i2\pi\omega x) d\omega \right) dx \\ &= \int F'(\omega) \left(\int \exp(-i2\pi\omega x) dx \right) d\omega = \int \frac{1}{-i2\pi\omega} F'(\omega) \exp(-i2\pi\omega x) d\omega . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Así, la expresión (2.20) indica que multiplicando la transformada de Fourier de la función derivada por el término $\frac{1}{-i2\pi\omega}$ y haciendo la transformada de Fourier inversa del producto se obtiene directamente la función integrada en el dominio espacial. De esta manera, la integración en el dominio de Fourier se puede pensar como el producto entre la transformada de Fourier inversa de la derivada y un filtro integrador.

A continuación se presenta la integración de una función discretizada. Para ello, se supone que la función derivada $f'(x)$ se evalúa en N puntos $x_n = nh$ donde $0 \leq n < N$ y h es la distancia de muestreo. Recordar la notación de $f'(x_n) = f'_n$ que hemos escogido para simplificar la nomenclatura. Su transformada de Fourier discreta viene dada por:

$$f'_\omega = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} f'_n \exp\left(\frac{i2\pi n\omega}{N}\right), \quad (2.21)$$

donde ω representa la coordenada en el dominio de Fourier; n la coordenada en el dominio espacial. Así, la serie $\{f'_\omega\}$ representa la transformada de Fourier discreta de la derivada discretizada $\{f'_n\}$. Una vez calculada, se procede a la integración propiamente. Para ello, en el caso en que N sea par, el filtro de integración $\{\eta_\omega\}$ viene dado por la siguiente expresión:

$$\eta_\omega = \begin{cases} 0 & \omega = 0 \\ -\frac{Nh}{i2\pi\omega} & \omega = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \\ 0 & \omega = \frac{N}{2} \\ \eta_{N-\omega}^* & \omega = \frac{N}{2} + 1, \dots, N - 1 \end{cases}, \quad (2.22)$$

donde * representa el complejo conjugado. En caso en que N sea impar, la expresión viene dada por:

$$\eta_{\omega} = \begin{cases} 0 & \omega = 0 \\ -\frac{Nh}{i2\pi\omega} & \omega = 1, \dots, \frac{N-1}{2} \\ \eta_{N-\omega}^* & \omega = \frac{N+1}{2}, \dots, N-1 \end{cases} \quad (2.23)$$

La integración en el dominio de Fourier se realiza multiplicando la transformada de Fourier de la derivada discreta $\{f'_{\omega}\}$ por el filtro $\{\eta_{\omega}\}$. Finalmente, la función integrada $\{f_n\}$ evaluada en los N puntos se obtiene mediante la transformada de Fourier inversa del producto entre $\{f'_{\omega}\}$ y $\{\eta_{\omega}\}$:

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\omega=0}^{N-1} \eta_{\omega} f'_{\omega} \exp\left(-\frac{i2\pi n\omega}{N}\right) . \quad (2.24)$$

En este método se usa la transformada de Fourier discreta con lo que se supone que la función sobre la que se aplica es periódica. Los datos reales o las funciones simuladas no cumplen la condición de periodicidad de manera que se producen efectos de borde aumentando así, el error de integración. Para evitarlo, se ha optimizado el método de integración mediante una extrapolación de la derivada. Así, se ha ampliado el intervalo de integración a $2N$ puntos a partir de la derivada evaluada en N puntos. Para ello se han implementado tres extrapolaciones: una lineal, una basada en las “splines” cúbicas explicadas anteriormente y una extrapolación por “reflexión”. De esta manera, se integra a lo largo de los $2N$ puntos extrayendo la función integrada en los N primeros puntos. La extensión ha de ser suave, con el fin de evitar saltos abruptos, y por otro lado la extensión ha de ser periódica ya que los algoritmos de transformada de Fourier digital contienen esta suposición.

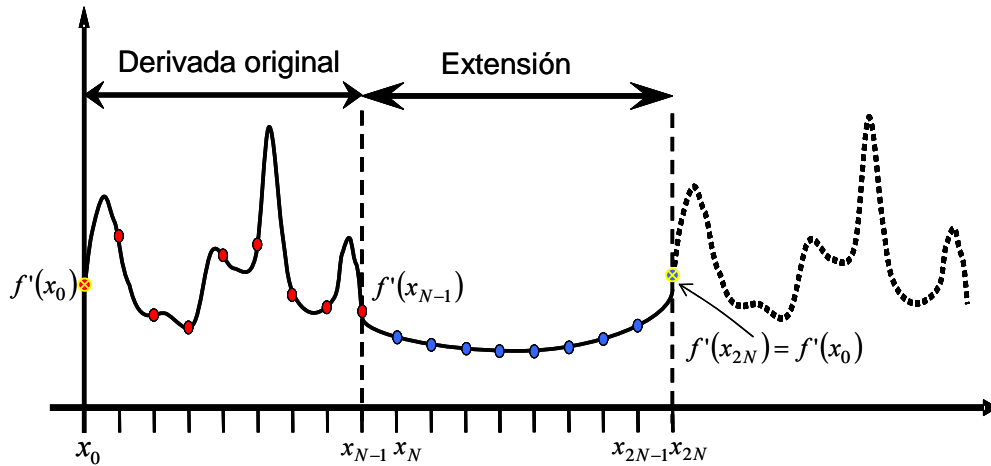


Figura 2.5. En rojo, los valores muestreados de la derivada. Tal derivada se extrapola linealmente, mediante “splines” cúbicas o por “reflexión” obteniendo los valores representados en azul. Se impone que la función sea periódica.

A continuación, se explican las tres extrapolaciones implementadas para reducir los efectos de borde y así el error producido en la integración en el dominio de Fourier.

2.3.1. Extrapolación periódica lineal.

El primer método se basa en una extrapolación lineal, por tanto, se extiende la derivada mediante una función lineal. Para ello, es necesario calcular la pendiente de dicha recta a partir de los valores de la derivada muestreada en el primer y último punto:

$$p = \frac{f'(x_0) - f'(x_{N-1})}{(N+1)h}, \quad (2.25)$$

donde se ha denotado la pendiente de la recta mediante p , $f'(x_0)$ y $f'(x_{N-1})$ son los valores que toma la derivada en el primer y último punto del intervalo original de N puntos y h es la distancia de muestreo.

Una vez calculada la pendiente, se calcula la función lineal que permite la extensión de la derivada hasta los $2N$ puntos mediante la siguiente expresión:

$$f'(x_m) = px_n + f'(x_{N-1}) \quad \text{con} \quad \begin{cases} m = N, \dots, 2N-1 \\ n = m - N + 1 \end{cases}, \quad (2.26)$$

donde $x_n=nh$ son las coordenadas del intervalo original (de 0 a $N-1$) y x_m son las coordenadas de la extensión del nuevo intervalo (de N a $2N-1$). Así, se evalúa la derivada en $2N$ puntos. Se integra en el dominio de Fourier y finalmente se extrae la función deseada en el intervalo original $[0, N-1]$.

2.3.2. Extrapolación periódica por “splines” cúbicas.

Uno de los métodos para ajustar datos de forma suave y con pocas oscilaciones son las “splines” cúbicas explicadas anteriormente. Supongamos que tenemos la función derivada $f'(x_n)$ muestreada en N puntos x_n , representados en rojo en la figura 2.5, teniendo $N-1$ polinomios cúbicos. Extrapolando la derivada al doble de su intervalo original, tal y como se indica en la figura 2.5, se obtiene un polinomio más; así, al tener N polinomios de grado 3, y se tienen $4N$ incógnitas correspondientes a sus coeficientes s_{nm} de dichos polinomios. De las condiciones de continuidad (2-8)-(2.11) impuestas en los primeros N puntos se obtienen $4N-6$ ecuaciones; por tanto, faltan 6 ecuaciones para obtener todos los polinomios interpoladores. Tres de las condiciones que faltan se obtienen al imponer la continuidad del último polinomio S_N , que une el último punto de muestreo x_{N-1} con el último punto de la derivada extrapolada al doble x_{2N} , y de sus derivadas tal y como se muestra en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} S_{N-1}(x_{N-1}) &= S_N(x_{N-1}) , \\ S'_{N-1}(x_{N-1}) &= S'_N(x_{N-1}) , \\ S''_{N-1}(x_{N-1}) &= S''_N(x_{N-1}) . \end{aligned} \quad (2.27)$$

Y las últimas 3 condiciones que faltan para poder obtener todos los coeficientes s_{nm} se obtienen imponiendo la condición de periodicidad como aparece en la figura 2.5, con el fin de reducir los efectos de borde. Tal periodicidad implica que tanto el polinomio S_N como sus derivadas han de ser continuas respecto al primer polinomio S_0 que une los puntos x_0 y x_1 . Por tanto, las 3 ecuaciones que faltan vienen dadas según:

$$\begin{aligned} S_N(x_{2N}) &= S_0(x_0) , \\ S'_N(x_{2N}) &= S'_0(x_0) , \\ S''_N(x_{2N}) &= S''_0(x_0) , \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.3.3. Extrapolación periódica por “reflexión”

El tercer método consiste en una extrapolación de la derivada por “reflexión” dada por la expresión:

$$\tilde{f}'_n = \begin{cases} f'_n, & n = 0, 1, \dots, N-1 \\ f'_{2N-1-n}, & n = N, \dots, 2N-1 \end{cases} \quad (2.29)$$

La señal extendida $\{\tilde{f}'_n\}$, por definición, no presenta discontinuidades en el final de su dominio ni en la mitad. En este caso, la respuesta frecuencial del filtro integrador viene definida por la ecuación (2.22), en la que el número de píxeles N debe ser substituido por $2N$, como se indica en la siguiente expresión:

$$\eta_\omega = \begin{cases} 0 & \omega = 0 \\ -\frac{Nh}{i\pi\omega} & \omega = 1, \dots, N-1 \\ 0 & \omega = N \\ \eta_{2N-\omega}^* & \omega = N+1, \dots, 2N-1. \end{cases} \quad (2.30)$$

El aumentar el número de píxeles de la señal a integrar al doble no necesariamente implica un aumento de la complejidad computacional. A continuación se deduce que las señales de dominio $2N$ obtenidas mediante la “reflexión” se pueden calcular mediante los algoritmos de la transformada discreta del coseno y seno aplicados a señales de longitud N píxeles.

La transformada de Fourier discreta de la derivada extendida (2.29) viene dada por:

$$\begin{aligned} F'_\omega &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{n=0}^{2N-1} \tilde{f}'_n \exp\left(i2\pi \frac{n\omega}{2N}\right) = \left\{ \frac{2}{\sqrt{2N}} \sum_{n=0}^{N-1} f'_n \cos\left[\pi \frac{(n+1/2)\omega}{N}\right] \right\} \exp\left(-i\pi \frac{\omega}{2N}\right) = \\ &= F'_\omega^{(DCT)} \exp\left(-i\pi \frac{\omega}{2N}\right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

donde

$$F_{\omega}^{(DCT)} = DCT\{f_n\} = \frac{2}{\sqrt{2N}} \sum_{n=0}^{N-1} f_n \cos\left(\pi \frac{n+1/2}{N} \omega\right), \quad (2.32)$$

es la transformada de Fourier discreta en coseno (en inglés, “Discrete Cosine Transform”, (DCT)) aplicada a la derivada original. Además, la transformada de Fourier de la señal extendida por “reflexión” puede implementarse vía DCT mediante algoritmos de DCT rápida teniendo presente la propiedad de simetría de la DCT:

$$F_N^{(DCT)} = 0; F_{\omega}^{(DCT)} = F_{2N-\omega}^{(DCT)}. \quad (2.33)$$

La operación de integración se realiza con la transformada de Fourier inversa del producto entre la expresión (2.31) y el filtro integrador para señales de $2N$ píxeles (2.30):

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\omega=0}^{2N-1} F'_{\omega} \eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n\omega}{2N}\right) = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\omega=0}^{2N-1} F_{\omega}^{(DCT)} \exp\left(-i\pi \frac{\omega}{2N}\right) \eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n\omega}{2N}\right), \quad (2.34)$$

donde $\{\eta_{\omega}\}$ corresponde a los coeficientes del filtro integrador que cumplen la siguiente propiedad de simetría:

$$\eta_{\omega} = \eta_{2N-\omega}^*, \quad (2.35)$$

donde el asterisco simboliza el complejo conjugado. Usando las expresiones (2.33) y (2.35), se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} f_n &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ F_0^{(DCT)} \eta_0 + \sum_{\omega=1}^{N-1} F_{\omega}^{(DCT)} \eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\omega=1}^{N-1} F_{2N-\omega}^{(DCT)} \eta_{2N-\omega} \exp\left[-i2\pi \frac{n+1/2}{2N} (2N-\omega)\right] \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ F_0^{(DCT)} \eta_0 + \sum_{\omega=1}^{N-1} F_{\omega}^{(DCT)} \left[\eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) + \eta_{\omega}^* \exp\left(i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Como

$$\begin{aligned} &\eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) + \eta_{\omega}^* \exp\left(i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) = \\ &= 2 \operatorname{Re} \left[\eta_{\omega} \exp\left(-i2\pi \frac{n+1/2}{2N} \omega\right) \right] = \eta_{\omega}^{re} \cos\left(\pi \frac{n+1/2}{N} \omega\right) - \eta_{\omega}^{im} \sin\left(\pi \frac{n+1/2}{N} \omega\right), \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde $\{\eta_\omega^{re}\}$ y $\{\eta_\omega^{im}\}$ son las partes real e imaginaria de $\{\eta_\omega\}$, finalmente se obtiene:

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ F_0^{(DCT)} \eta_0 + \sum_{\omega=1}^{N-1} F_\omega^{(DCT)} \eta_\omega^{re} \cos\left(\pi \frac{n+1/2}{N} \omega\right) - \sum_{\omega=1}^{N-1} F_\omega^{(DCT)} \eta_\omega^{im} \sin\left(\pi \frac{n+1/2}{N} \omega\right) \right\}. \quad (2.38)$$

Los dos primeros términos de la expresión (2.38) constituyen la transformada inversa de Fourier en coseno del producto $\{F_\omega^{(DCT)} \eta_\omega^{re}\}$ mientras que el tercer término es la transformada discreta de Fourier en coseno y seno (DcST) del producto $\{F_\omega^{(DCT)} \eta_\omega^{im}\}$. Ambas transformaciones pueden implementarse mediante algoritmo rápidos [Yar04].

2.4. Comparación de los diferentes métodos de integración.

Una vez estudiados los diferentes métodos de integración, realizaremos una primera comparación mostrando los resultados obtenidos al aplicarlos sobre una derivada generada analíticamente y sin ruido adicional. Para dicha comparación de los diferentes métodos se ha calculado el error producido mediante la diferencia entre $f(x)$ generada analíticamente y la función obtenida tras la integración numérica.

La función $f(x)$ generada analíticamente consiste en una función lineal sumada a una función periódica, diferente según el intervalo ($x \in [0, 0.5]$ o $x \in [0.5, 1]$), más dos gaussianas centradas en las coordenadas $x = 0.65$ y $x = 0.85$. Además, en el primer intervalo se suman 20 gaussianas de signo y centro determinados:

$$f(x) = \begin{cases} x + \sin[1.8\pi(x-0.5)] & \text{si } 0 < x < 0.5 \\ x + \sin[1.6\pi] & \text{si } 0.5 \leq x < 1 \end{cases} - 0.17 \exp\left[-\frac{(x-0.65)^2}{10^{-4}}\right] + 0.17 \exp\left[-\frac{(x-0.85)^2}{10^{-4}}\right] + \quad (2.39)$$

$$+ \sum_{j=0}^{20} \text{sign}_j \exp\left[-\frac{(x-x_j)^2}{10^{-4}}\right],$$

y la derivada viene dada por la expresión:

$$f'(x) = \begin{cases} 1 + 1.8 \cos[1.8\pi(x - 0.5)] & \text{si } 0 < x < 0.5 \\ 1 + 1.6 \sin[1.6\pi] & \text{si } 0.5 \leq x < 1 \end{cases} - \frac{0.34(x - 0.65)}{10^{-4}} \exp\left[-\frac{(x - 0.65)^2}{10^{-4}}\right] + \quad (2.40)$$

$$+ \frac{0.34(x - 0.85)}{10^{-4}} \exp\left[-\frac{(x - 0.85)^2}{10^{-4}}\right] - 2 \sum_{j=0}^{20} \text{sign}_j \frac{(x - x_j)}{10^{-4}} \exp\left[-\frac{(x - x_j)^2}{10^{-4}}\right],$$

donde x se define en el intervalo $[0, 1]$. El signo y el centro de las 20 gaussianas se han calculado inicialmente mediante:

$$\text{sign}_j = 0.3 \left[\left(\frac{\text{número aleatorio entre } 0 \text{ y } N+1}{N} \right) - 0.5 \right] \quad (2.41)$$

$$x_j = 0.5 \left(\frac{\text{número aleatorio entre } 0 \text{ y } N+1}{N} \right),$$

siendo N el número total de puntos donde se ha evaluado $f(x)$ y su derivada.

En la figura 2.6 se muestra la función (2.39) y su derivada (2.40) evaluadas en $N = 200$ puntos. En ambas figuras se observan las altas frecuencias que presentan las dos funciones en el primer intervalo $[0, 0.5]$ debido a las 20 gaussianas sumadas. En la figura 2.6(a) se observan las dos gaussianas situadas en los píxeles $n = 130$ y $n = 170$ correspondientes a las coordenadas normalizadas $x = 0.65$ y $x = 0.85$ respectivamente.

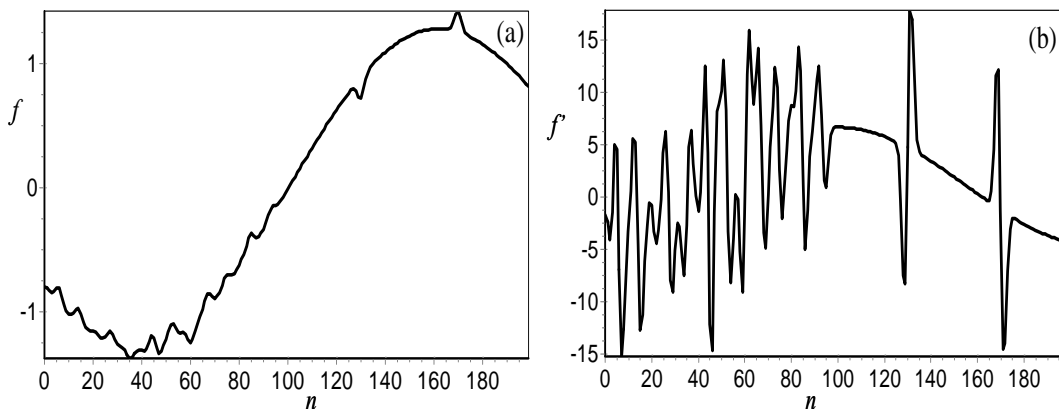


Figura 2.6. (a) Función f y (b) su derivada f' generadas analíticamente y evaluadas en $N = 200$ puntos.

Para comparar los métodos presentados se calcula el error cuadrático medio (*rms*) entre la función generada analíticamente f^o , y la obtenida mediante integración f^i :

$$rms = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (f_i^o - (f_i^i + cte))^2}, \quad (2.42)$$

donde *cte* es la constante de integración. En los métodos de integración se calcula la función primitiva salvo una constante de integración *cte* que es indeterminada; se busca aquélla que minimiza el error (2.42). Así, se calcula la derivada del error respecto al término *cte* y anulándola se obtiene:

$$\frac{\partial rms}{\partial cte} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (f_i^o - (f_i^i - cte)) = 0. \quad (2.43)$$

A partir de la expresión (2.43) se aísla el término *cte*:

$$cte = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (f_i^o - f_i^i), \quad (2.44)$$

obteniendo la constante de integración que minimiza el error producido en la operación.

En la figura 2.7 se representa la diferencia entre la función original y la función integrada en cada uno de los píxeles ($N = 200$). También se representa el error cuadrático medio.

De la figura 2.7 se observa que en el primer intervalo de la función en la que se suman las veinte gaussianas la diferencia entre la función original y la integrada es mucho más importante que en el segundo intervalo. Aunque en este último se nota la presencia de las dos gaussianas centradas en $n = 130$ y $n = 170$ (se aprecia mejor en la figura 2.7(a) y (d) correspondientes a la regla del Trapecio y a la interpolación por “splines” cúbicas). Debido a las 20 gaussianas del primer intervalo, se puede pensar como un intervalo en que la derivada presenta una frecuencia alta.

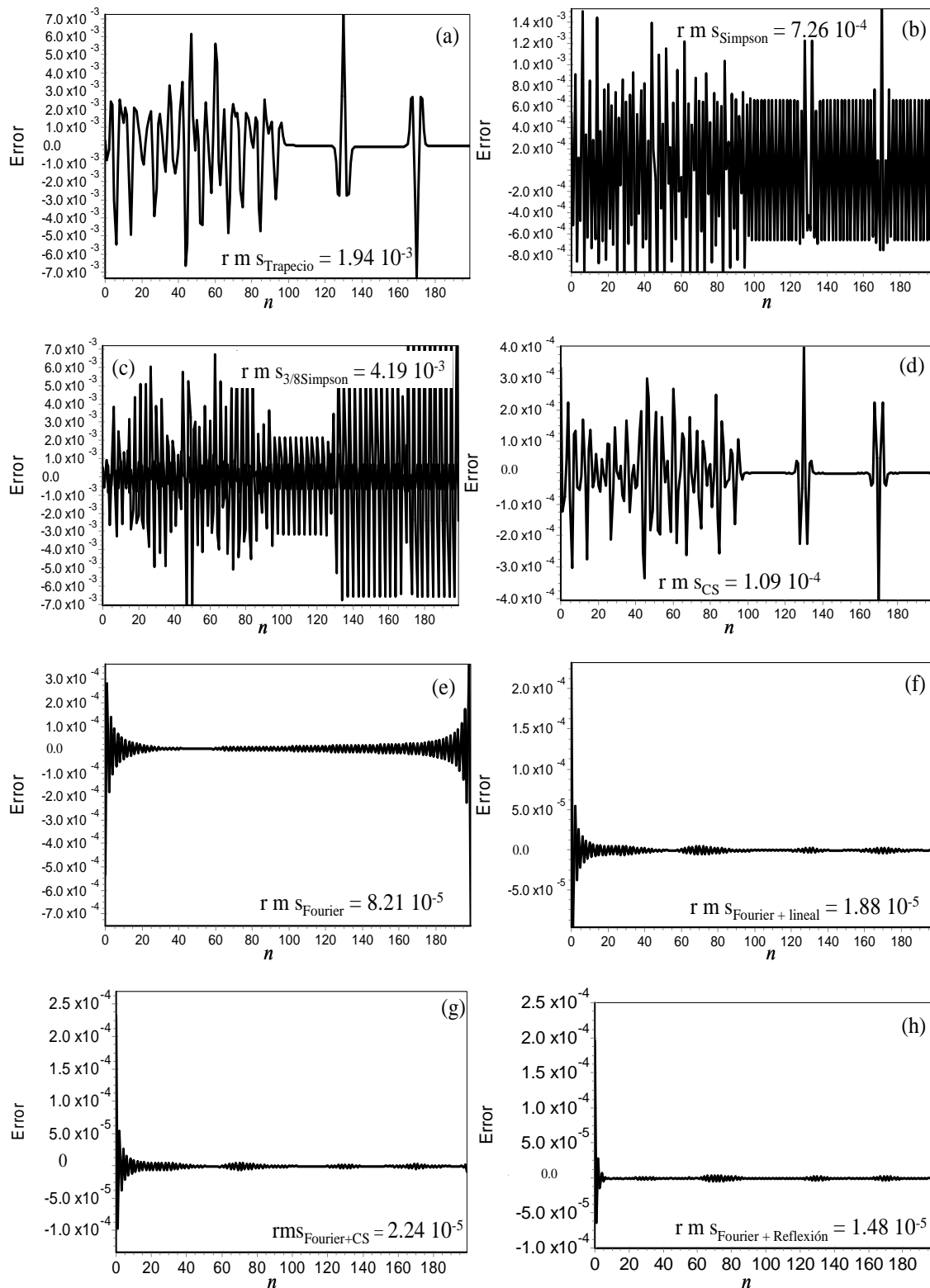


Figura 2.7. Error obtenido mediante (a) Regla del Trapecio, (b) Regla de Simpson, (c) Regla de 3/8 de Simpson, (d) la interpolación por “splines” cúbicas, (e)-(h) el dominio de Fourier, (f) con una extrapolación lineal, (g) con una extrapolación por “splines” cúbicas y (h) con una extrapolación por “reflexión”.

Así, el error obtenido en dicho intervalo es mayor tal y como se observa en las figuras 2.7(a)-(d). La regla del Trapecio y el método basado en las “splines” cúbicas ofrecen una diferencia menor entre la función integrada y la original en el segundo intervalo, intervalo en que se considera que la función es de baja frecuencia; aunque cabe destacar la diferencia obtenida justo en la zona donde se generan las dos gaussianas demostrando nuevamente que tales métodos no son los más precisos para funciones de alta frecuencia. Sin embargo, métodos como la regla de Simpson y de 3/8 de Simpson ofrecen una elevada diferencia entre la función integrada y la original debido a la propagación del error del primer intervalo y a la presencia de las dos gaussianas. De esta manera, los métodos de Newton-Cotes no son muy precisos a la hora de determinar una función de alta frecuencia. Por lo que respecta a los métodos de Fourier, tal y como se anunció, son los métodos más precisos posibles aunque se deben tener presente los efectos de borde que aparecen al emplear la transformada de Fourier.

Comparando las figuras 2.7(e), (f), (g) y (h), se observa la necesidad de realizar una extrapolación de la derivada previa a la integración para reducir los efectos de borde. Se observa en las figuras 2.7(f), (g) y (h) que al emplear una extrapolación, los efectos de borde se reducen.

Los resultados de la figura 2.7 indican que el método más preciso de los presentados es el basado en el dominio de Fourier. Este resultado concuerda con la teoría presentada anteriormente ya que el método se basa en la interpolación más precisa posible: la interpolación “sinc”, fácilmente implementada en el dominio de Fourier. El segundo método más preciso es el que utiliza la interpolación por “splines” cúbicas y finalmente, los métodos de Newton-Cotes ofrecen resultados similares entre sí (error del orden de 10^{-3}). Hay que hacer notar que los métodos basados en la transformada de Fourier necesitan un muestreo equiespaciado, mientras que el resto de métodos se pueden aplicar a datos no equiespaciados.

2.5. Función de Transferencia de los diferentes métodos de integración

La integración numérica se puede estudiar como una operación de filtrado lineal y recursivo. En general, los métodos de integración estudiados interpolan la derivada y se utilizan de manera recursiva para obtener la función primitiva. Los filtrados lineales se

pueden llevar a cabo como una multiplicación en el dominio de Fourier. Esto nos permitirá comparar los diferentes métodos desde otro punto de vista; la transmisión de las diferentes frecuencias desde la derivada a la primitiva. Así, el dominio de Fourier puede considerarse una potente herramienta para comparar los diferentes métodos de integración estudiados calculando su función de transferencia. A continuación se calcula la función de transferencia de los métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes y el método basado en la interpolación de la derivada mediante “splines” cúbicas.

2.5.1. Métodos basados en las fórmulas cerradas de Newton-Cotes

Para calcular la función de transferencia de estos métodos se parte de su expresión recursiva en el dominio espacial.

Regla del Trapecio

La forma recursiva (2.2) de este método se puede reescribir como:

$$f_n - f_{n-1} = \frac{h}{2}(f'_n + f'_{n-1}) , \quad (2.45)$$

siendo $f'_n = f'(x_n)$ y $f_n = f(x_n)$ las funciones derivada y a determinar respectivamente evaluadas en $x_n = x_0 + nh$ donde x_0 es el primer punto donde se evalúa la derivada, $n = 1, \dots, N$ con N el número total de puntos donde la derivada es evaluada y h la distancia de muestreo constante.

Denominando f_ω a la transformada de Fourier discreta de f_n , la transformada de Fourier discreta de la parte de la izquierda de la igualdad (2.45) se escribe:

$$TF[f_n - f_{n-1}] = f_\omega(1 - \exp(i2\pi\omega/N)) , \quad (2.46)$$

donde el término correspondiente a la transformada de Fourier discreta de f_{n-1} se encuentra mediante la propiedad de traslación de la transformada de Fourier:

$$TF[f_{n-1}] = f_\omega \exp(i2\pi\omega/N). \quad (2.47)$$

De manera análoga, se calcula la transformada de Fourier discreta de la parte de la derecha de la igualdad (2.45):

$$TF\left[\frac{h}{2}(f'_n + f'_{n+1})\right] = \frac{h}{2} f'_\omega (1 + \exp(i2\pi\omega/N)) , \quad (2.48)$$

donde nuevamente se ha aplicado la propiedad de traslación de la transformada de Fourier (2.47). Igualando las expresiones (2.46) y (2.48) se obtiene la siguiente relación entre la transformada de Fourier discreta de la derivada y de la función integrada mediante la regla del Trapecio:

$$f_\omega (1 - \exp(i2\pi\omega/N)) = \frac{h}{2} f'_\omega (1 + \exp(i2\pi\omega/N)) . \quad (2.49)$$

De esta manera, la función de transferencia para la regla del Trapecio $\{\eta_\omega^T\}$ se escribe:

$$\eta_\omega^T = \frac{f_\omega}{f'_\omega} = \frac{h (1 + \exp(i2\pi\omega/N))}{2 (1 - \exp(i2\pi\omega/N))} . \quad (2.50)$$

Teniendo en cuenta la expresión de una exponencial imaginaria y de las razones trigonométricas del ángulo doble:

$$\exp(i\alpha) = \cos(\alpha) + i \sin(\alpha) , \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \cos(2\alpha) &= \cos^2(\alpha) - \sin^2(\alpha) \\ \sin(2\alpha) &= 2 \cos(\alpha) \sin(\alpha) , \end{aligned} \quad (2.52)$$

la función de transferencia de la regla del Trapecio se escribe:

$$\eta_\omega^T = \frac{f_\omega}{f'_\omega} = \begin{cases} 0, & \omega = 0, \\ -h \frac{\cos(\pi\omega/N)}{2i \sin(\pi\omega/N)}, & \omega = 1, \dots, N-1 , \end{cases} \quad (2.53)$$

donde para la frecuencia cero se ha impuesto que la función de transferencia sea nula ya que ésta tiende a infinito para $\omega = 0$. La transformada de Fourier de una función en el

origen de frecuencias está relacionada con el valor medio de dicha función. En este caso, anulando la función de transferencia en el origen de frecuencias, el valor medio de la función obtenida mediante el método de integración en cuestión se impone que sea igual a cero. Hay que hacer notar que en el cálculo de una primitiva mediante integración siempre hay una constante indeterminada. Haciendo nula la función de transferencia en el origen, se ha seleccionado la constante que anula el valor medio de la función.

Regla de Simpson

De manera análoga al caso anterior, la forma recursiva de la regla de Simpson (2.4) se puede escribir como:

$$f_n - f_{n-2} = \frac{h}{3}(f'_{n-2} + 4f'_{n-1} + f'_n) , \quad (2.54)$$

con $n = 2, \dots, N$, siendo N el número total de puntos donde la derivada es evaluada y h la distancia de muestreo constante.

La transformada de Fourier de la parte izquierda de (2.54) viene dada por:

$$TF[f_n - f_{n-2}] = f'_\omega (1 - \exp(i4\pi\omega / N)) . \quad (2.55)$$

De manera similar, se encuentra la siguiente expresión para la parte de la derecha de la igualdad (2.54) en el dominio de Fourier:

$$TF\left[\frac{h}{3}(f'_{n-2} + 4f'_{n-1} + f'_n)\right] = \frac{h}{3} f'_\omega (\exp(i4\pi\omega / N) + 4\exp(i2\pi\omega / N) + 1) . \quad (2.56)$$

Igualando las expresiones (2.55) y (2.56) y considerando la exponencial imaginaria y las razones trigonométricas del ángulo doble, la función de transferencia para la regla de Simpson se escribe:

$$\eta_\omega^S = \frac{f_\omega}{f'_\omega} = \begin{cases} 0, & \omega = 0 \\ -h \frac{\cos(2\pi\omega / N) + 2}{3i \sin(2\pi\omega / N)}, & \omega = 1, \dots, N-1 . \end{cases} \quad (2.57)$$

Al igual que en la regla del Trapecio, para la frecuencia cero se ha impuesto que la función de transferencia se anule ya que ésta tiende a infinito para $\omega = 0$.

Regla de 3/8 de Simpson

La forma recursiva de este método (2.6) se puede reescribir mediante la expresión:

$$f_n - f_{n-3} = \frac{3h}{8} (f'_{n-3} + 3f'_{n-2} + 3f'_{n-1} + f'_n) . \quad (2.58)$$

De manera análoga a los otros métodos, la expresión (2.58) se escribe en el dominio de Fourier como:

$$f_\omega (1 - \exp(i6\pi\omega/N)) = \frac{3h}{8} f'_\omega (\exp(i6\pi\omega/N) + 3\exp(i4\pi\omega/N) + 3\exp(i2\pi\omega/N) + 1) . \quad (2.59)$$

De manera que la función de transferencia para la regla de 3/8 de Simpson, $\{\eta_\omega^{3S}\}$ viene dada por:

$$\eta_\omega^{3S} = \frac{f_\omega}{f'_\omega} = \begin{cases} 0, & \omega = 0 \\ -h \frac{\cos(3\pi\omega/N) + 3\cos(\pi\omega/N)}{i \sin(3\pi\omega/N)}, & \omega = 1, \dots, N-1 . \end{cases} \quad (2.60)$$

Al igual que los anteriores métodos, para la frecuencia cero se impone $\eta_0^{3S} = 0$.

2.5.2. Método basado en la interpolación por “splines” cúbicas

Mediante el método basado en la interpolación por polinomios cúbicos de la derivada, se encuentra la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} f_{n+1} - f_n &= h \left[f'_n + \frac{h}{2} \left(d_n - \frac{h}{6} (2m_n + m_{n+1}) \right) + \frac{h^2}{6} m_n + \frac{h^2}{24} (m_{n+1} - m_n) \right] \\ &= h \left[\frac{1}{2} (f'_n + f'_{n+1}) - \frac{h^2}{24} (m_n + m_{n+1}) \right] , \end{aligned} \quad (2.61)$$

donde se calcula f en función de su derivada; del término d_n calculado a partir de f' mediante (2.13) y de los coeficientes m_n calculados resolviendo el sistema lineal de ecuaciones (2.16).

De manera que este método de integración también se puede escribir como un filtro recursivo y así, se puede calcular su función de transferencia de manera similar al resto de los métodos presentados. Para obtener la relación entre la transformada de Fourier de la función f_n y la transformada de su derivada f'_n , se procede al estudio en el dominio de Fourier de la ecuación (2.61). Para ello es necesario conocer la transformada de Fourier discreta de m_n . La siguiente ecuación es la transformada de Fourier de la ecuación (2.16) en la que se relacionan los términos m_n con la derivada:

$$h m_\omega \left(e^{i\frac{2\pi\omega}{N}} + 4 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right) = \frac{6}{h} f'_\omega \left(e^{i\frac{2\pi\omega}{N}} - 2 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right), \quad (2.62)$$

donde m_ω es la transformada de Fourier discreta de m_n ; f'_ω la transformada de f'_n ; ω la coordenada de frecuencia en el dominio de Fourier; N el número total de puntos a evaluar y h la distancia constante entre los puntos. De (2.62) se encuentra una expresión para m_ω en función de f'_ω :

$$m_\omega = \frac{6}{h^2} \frac{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) - 1}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} f'_\omega = \frac{6}{h^2} \left(1 - \frac{3}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} \right) f'_\omega. \quad (2.63)$$

Una vez encontrada la expresión de la transformada de Fourier discreta de m_n ya se puede calcular la transformada de Fourier del filtro recursivo (2.61) como sigue:

$$\begin{aligned} f_\omega \left(e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} - 1 \right) &= \frac{h}{2} \left(1 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right) f'_\omega - \frac{h^3}{24} \left(1 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right) m_\omega \\ &= \frac{h}{2} \left(1 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right) \left[f'_\omega - \frac{h^2}{12} m_\omega \right] \\ &= \frac{h}{2} \left(1 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} \right) \left[f'_\omega - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} \right) f'_\omega \right], \end{aligned} \quad (2.64)$$

que se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}
 f_{\omega} &= \frac{h}{2} \frac{1 + e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}}}{e^{-i\frac{2\pi\omega}{N}} - 1} \left[1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} \right) \right] f'_{\omega} \\
 &= \frac{h}{4} \frac{\cos\left(\frac{\pi\omega}{N}\right)}{-i \sin\left(\frac{\pi\omega}{N}\right)} \left[1 + \frac{3}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} \right] f'_{\omega} .
 \end{aligned} \tag{2.65}$$

Así, la función de transferencia $\{\eta_{\omega}^{CS}\}$ para este método de integración basado en la interpolación por “splines” cúbicas de la información de la derivada viene dada por:

$$\eta_{\omega}^{CS} = \frac{f_{\omega}}{f'_{\omega}} = \begin{cases} 0, & \omega = 0 \\ -\frac{h}{4} \frac{\cos\left(\frac{\pi\omega}{N}\right)}{i \sin\left(\frac{\pi\omega}{N}\right)} \left[1 + \frac{3}{\cos\left(\frac{2\pi\omega}{N}\right) + 2} \right], & \omega = 1, \dots, N-1 . \end{cases} \tag{2.66}$$

Al igual que en los métodos anteriores, para la frecuencia cero se impone que la función de transferencia se anule pues tiende a infinito para $\omega = 0$.

La función de transferencia deducida para los métodos de integración estudiados constituye una potente herramienta para compararlos. Para ello, en la figura 2.8 se representa el valor absoluto de la función de transferencia de los métodos basados en Newton-Cotes, del método basado en la interpolación por “splines” cúbicas y el basado en el dominio de Fourier en función de la frecuencia relativa, es decir, del cociente entre la frecuencia de la función a obtener y la frecuencia de muestreo. Como el valor absoluto de la función de transferencia es simétrico se ha representado la mitad de la curva.

De la figura 2.8 se observa que los métodos de integración estudiados actúan como un filtro pasa-baja, es decir, la señal obtenida al integrar se atenúa respecto a la señal de entrada sobre la que se aplica los filtros de integración. También se aprecia que todos los métodos son iguales en la zona de bajas frecuencias. A medida que aumenta la frecuencia, el comportamiento de los métodos empieza a diferir; así, se aprecian

irregularidades para el método de Simpson y de 3/8 de Simpson. La función de transferencia $\{\eta_{\omega}^S\}$ tiende a infinito cuando la frecuencia coincide con la frecuencia máxima. Tendencia similar presenta el método de 3/8 de Simpson para una frecuencia equivalente a 2/3 partes de la frecuencia máxima. Las funciones de transferencia de la regla del Trapecio y del método basado en las “splines” cúbicas son las más cercanas a la función de transferencia analítica aunque en la zona de altas frecuencias los dos métodos se separan de la integración ideal. El método del Trapecio se separa más que el método de las “splines” cúbicas tal y como se aprecia en la figura 2.8.

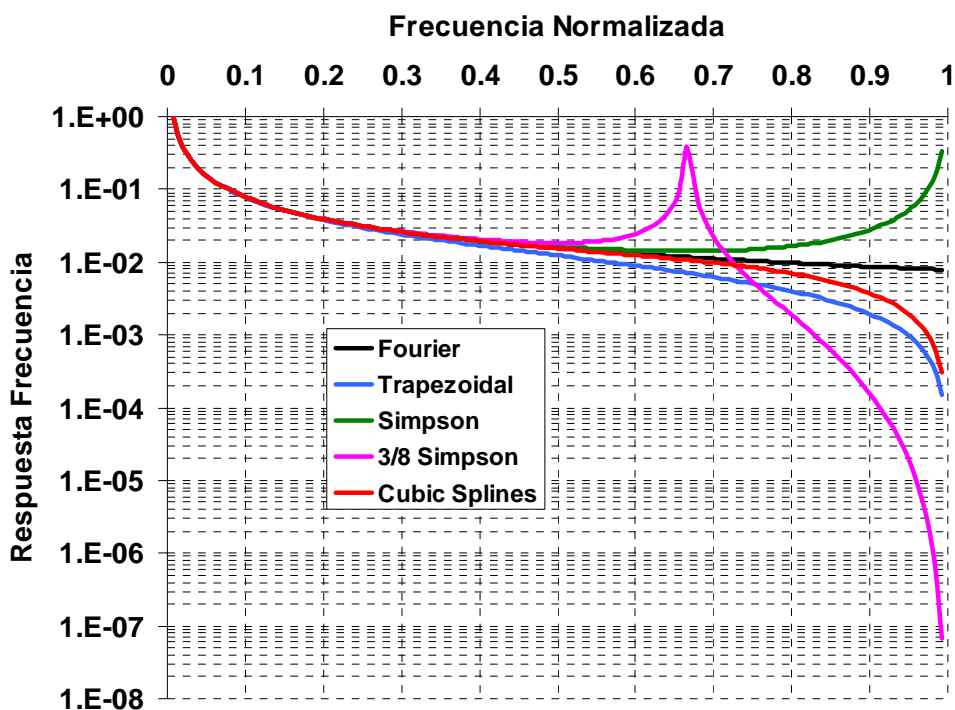


Figura 2.8. Comparación de la función de transferencia para cada uno de los métodos de integración.

Hasta el momento, todos los resultados presentados han sido analizados en la zona estacionaria de la función a obtener. Pero, tal y como se mencionó al estudiar el método basado en el dominio de Fourier, se usa la transformada de Fourier discreta suponiendo que la función es periódica. Tal suposición no se puede considerar con datos reales o funciones simuladas produciéndose así efectos de borde. A continuación, se presentan una serie de experimentos numéricos mediante los que se estudian los efectos de borde producidos con los métodos de integración más precisos, es decir, el método basado en el dominio de Fourier y el que interpola la derivada mediante “splines” cúbicas.

2.5.3. Señales sinusoidales periódicas sin efectos de borde

En primer lugar se ha estudiado el error obtenido en la integración numérica de una función sinusoidal en función de su frecuencia. Así, se ha generado una función sinusoidal y su derivada mediante la expresión:

$$\begin{aligned} f_n &= \cos\left(2\pi\frac{pn}{N} + random\right) \\ f'_n &= -2\pi\frac{p}{N}\sin\left(2\pi\frac{pn}{N} + random\right), \end{aligned} \quad (2.67)$$

donde N es el número de puntos donde se evalúan dichas funciones, p es el parámetro frecuencia de la senoide, la frecuencia normalizada viene dada por $v = 2p / N$ y $random$ corresponde a una fase inicial aleatoria. Las frecuencias se seleccionan de manera que se tenga un número entero de periodos en el dominio de la señal, de esta manera, la función extendida periódicamente no presente saltos en los bordes.

Después de aplicar los métodos de integración, se han comparado las funciones obtenidas con la función generada analíticamente calculando el error producido mediante la expresión:

$$error = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (f_n^i - f_n^o)^2}, \quad (2.68)$$

con f^i la función obtenida mediante la integración numérica y f^o la función teórica.

En la figura 2.9(a) se representa el error producido en cada uno de los métodos de integración en función de la frecuencia normalizada de la función sinusoidal a obtener. La figura 2.9(b) representa el error obtenido para los métodos más precisos. Las funciones han sido evaluadas en $N = 256$ píxeles. De la figura se observa que para bajas frecuencias, todos los métodos dan un error similar. A medida que aumenta la frecuencia de la senoide, los diferentes métodos de integración tienen un comportamiento diferente; por ejemplo, la regla de 3/8 de Simpson a una frecuencia equivalente a 2/3 de la frecuencia máxima produce un error muy elevado que tiende a infinito. Lo mismo ocurre con la regla de Simpson: a medida que la frecuencia aumenta

y se acerca a la frecuencia máxima, el error aumenta; lo cual está en perfecto acuerdo con la transmisión de frecuencias mostrada en la figura 2.8. La regla del Trapecio y el método basado en las “splines” cúbicas producen un error similar en todo el espectro de frecuencias, siendo menor para el método basado en las “splines” cúbicas. El error producido mediante la integración en el dominio de Fourier es prácticamente nulo debido a que se ha considerado una función periódica. Así pues, el error se relaciona directamente con la función de transferencia de cada uno de los métodos y depende de la diferencia con la del método de Fourier.

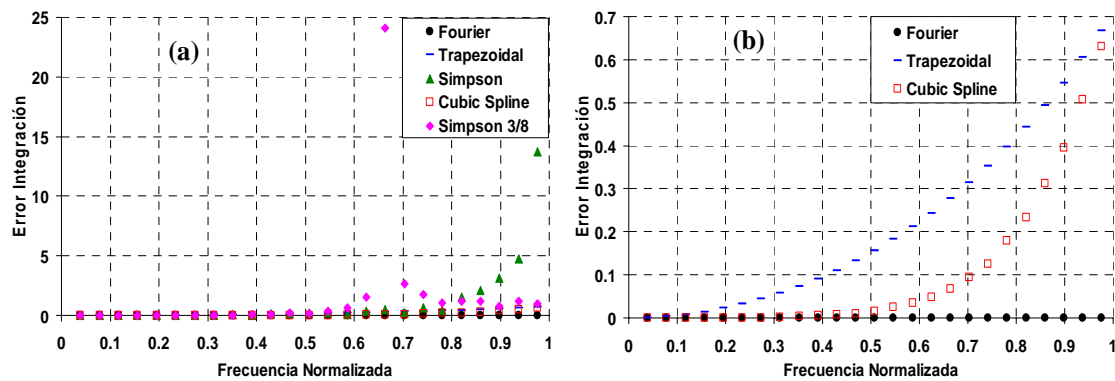


Figura 2.9. Error producido en la integración en función de la frecuencia normalizada ν de la función sinusoidal a obtener (a) mediante todos los métodos estudiados; (b) mediante los métodos de Fourier, Trapecio y el basado en las “splines” cúbicas.

2.5.4. Señales sinusoidales no periódicas con efectos de borde

Se ha realizado otro experimento numérico para estudiar los efectos de borde obtenidos con los métodos más precisos: integración en el dominio de Fourier, su variante en que se realiza una extrapolación por “reflexión” y el método de la interpolación de la derivada por “splines” cúbicas. El experimento consiste en generar señales sinusoidales con un número no entero de periodos, de esta manera, al repetir la función de forma periódica se producen discontinuidades que pueden generar efectos de borde. El número de periodos viene dado por el parámetro p de la ecuación (2.67). Para evaluar el error se generan n_f funciones con n_f valores del parámetro p equiespaciados en el intervalo $[n, n+1]$, siendo n un número entero. Para cada píxel k , el error se evalúa mediante la expresión siguiente:

$$error(k) = \sqrt{\frac{1}{n_f} \sum_{f=0}^{n_f} (f_i^f(k) - f_0^f(k))^2} \quad , \quad (2.69)$$

donde f_i^f y f_0^f son las funciones integrada y analítica para cada frecuencia.

Se han considerado tres zonas del espectro de frecuencias: bajas, medias y altas frecuencias. La figura 2.10 muestra el error medio (2.69) obtenido con los tres métodos considerados: el que se basa en el dominio de Fourier (línea negra), el basado en las “splines” cúbicas (línea roja) y la variante del método de Fourier con la extrapolación por “reflexión” (línea azul). Se ha escogido una frecuencia inicial normalizada $p = 0.273$ (correspondiente a bajas frecuencias), $N = 256$ puntos y $n_f = 20$. De la figura se observa cómo los efectos de borde son más importantes en la integración en el dominio de Fourier que en el método basado en las “splines” cúbicas. El método basado en la extensión por “reflexión” produce errores bajos aunque ligeramente superiores a los obtenidos mediante el método basado en las “splines” cúbicas. En la ampliación de la figura 2.10, se puede apreciar que los efectos de borde desaparecen alrededor del décimo píxel.

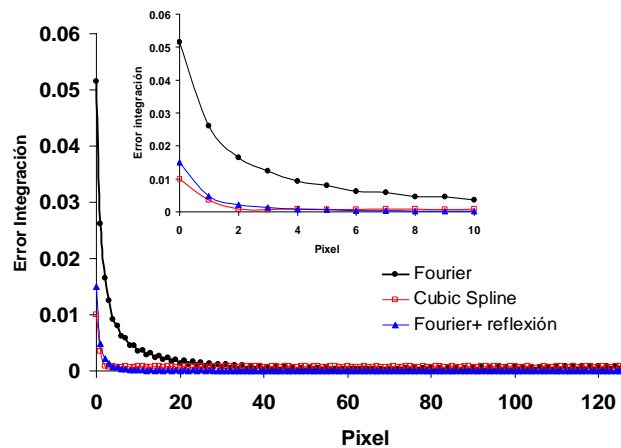


Figura 2.10. Error de integración en función del píxel k mediante el método de Fourier (línea negra), el método basado en las “splines” cúbicas (línea roja) y la variante de la extensión por “reflexión” (línea azul). $\nu = 0.273$. La figura interna corresponde a la ampliación de los 10 primeros píxeles.

La siguiente frecuencia inicial se ha aumentado a $\nu = 0.547$, correspondiente a frecuencias intermedias. El error obtenido en función del píxel k se representa en la figura 2.11. En este caso, los efectos de borde para los métodos de Fourier y de “splines” cúbicas son similares mientras que para la extensión por “reflexión” son substancialmente inferiores. Comparando estos errores con los obtenidos en el caso de bajas frecuencias, se observa que han aumentado (10 primeros píxeles) el triple para el método de Fourier. En la región estacionaria (alrededor de los 10 píxeles), el error para el método basado en las “splines” cúbicas es más alto que el que ofrece el método de Fourier y su variante por “reflexión” de acuerdo con la figura 2.8.

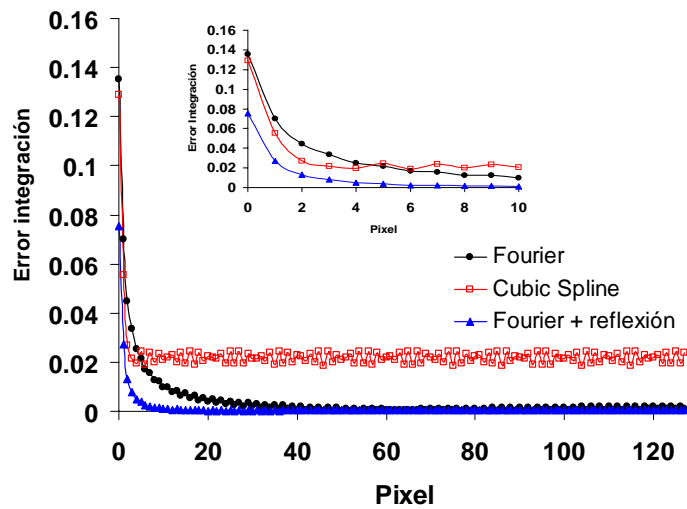


Figura 2.11. Error de integración en función del píxel k mediante el método basado en el dominio de Fourier (línea negra), el método basado en las “splines” cúbicas (línea roja) y la variante de la extensión por “reflexión” (línea azul). $\nu = 0.547$. La figura interna corresponde a la ampliación de los 10 primeros píxeles.

Finalmente se ha repetido el experimento numérico para una frecuencia inicial $\nu = 0.820$, correspondiente a la región de altas frecuencias. El error producido con los tres métodos estudiados se representa en la figura 2.12. Se observa que el error producido por el método de las “splines” cúbicas es mucho más alto que el obtenido mediante el método de Fourier y su variante por “reflexión”. En el método de las “splines” cúbicas, los errores estacionarios predominan mucho más que los efectos de borde. También se puede apreciar que para el método de Fourier y su variante por “reflexión” los efectos de borde de los 10 primeros píxeles son más altos en valor absoluto que en las regiones de bajas y medias frecuencias.

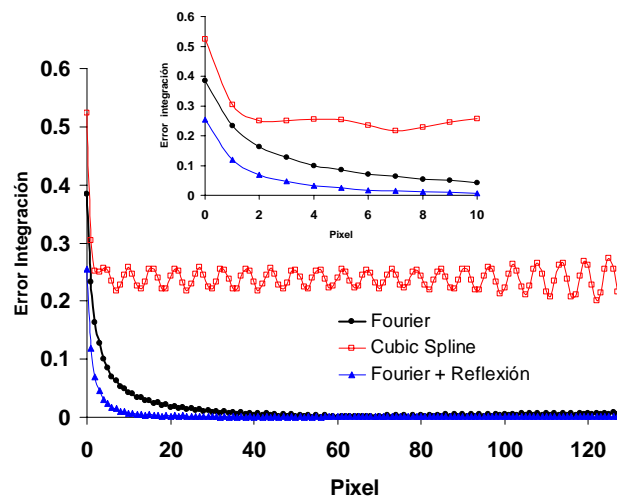


Figura 2.12. Error de integración en función del píxel k mediante el método de Fourier (línea negra), el método de las “splines” cúbicas (línea roja) y la variante de la extensión por “reflexión” (línea azul). $\nu = 0.820$. La figura interna corresponde a la ampliación de los 10 primeros píxeles.

De las figuras 2.10, 2.11 y 2.12 se concluye que para todas las frecuencias los efectos de borde afectan principalmente a los primeros píxeles, alrededor de los 10 primeros. La magnitud de dichos errores aumenta con la frecuencia. En la región de bajas frecuencias los efectos de borde obtenidos mediante la integración en el dominio de Fourier son más altos que los obtenidos mediante el método de las “splines” cúbicas mientras que los obtenidos mediante el método de “reflexión” son menores. Tal comportamiento cambia conforme aumenta la frecuencia.

Finalmente, se ha repetido el experimento numérico anterior para diferentes números N de píxeles donde la función y su derivada son evaluadas. La figura 2.13 muestra el error obtenido en los 10 primeros píxeles para $N = 256$, $N = 512$ y $N = 1024$ píxeles. La frecuencia inicial normalizada es $\nu = 0.547$. De la figura 2.13 se concluye que los errores de borde son similares en todos los casos y que no dependen de la variable N . Los efectos de borde afectan principalmente a los 10 primeros píxeles, independientemente del dominio de la función N .

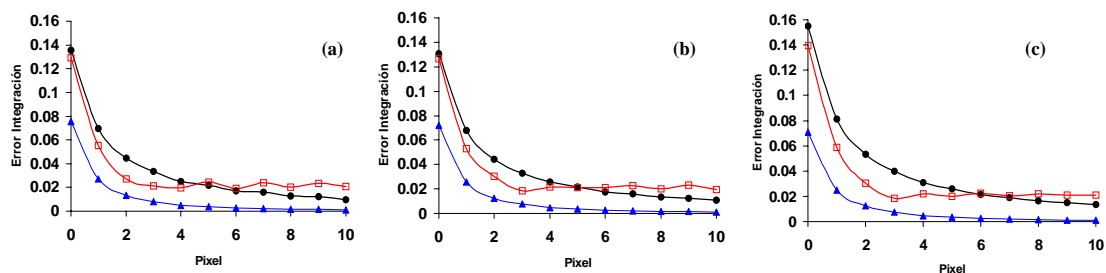


Figura 2.13. Error medio evaluado en los 10 primeros píxeles para la misma frecuencia normalizada inicial ($\nu = 0.547$) pero diferente N : (a) $N = 256$, (b) $N = 512$, (c) $N = 1024$. La línea negra hace referencia al método de Fourier; la línea azul a la variante de la expansión por “reflexión” y la línea roja al método basado en “splines” cúbicas.

2.5.5. Poder resolutivo de los métodos de integración

El poder resolutivo de los métodos de integración caracteriza su capacidad de resolver entre dos impulsos muy agudos (deltas de Dirac) en los datos a integrar. Dicha propiedad se define completamente en el dominio espacial a diferencia de la función de transferencia definida en el dominio de Fourier pero también resulta una herramienta muy útil y sencilla para comparar los diferentes filtros. La figura 2.14 ilustra los resultados obtenidos en la evaluación numérica de la capacidad de los tres filtros integradores más precisos de reproducir dos impulsos agudos separados un píxel. La

columna izquierda de la figura 2.14 muestra el caso de dos impulsos de la misma amplitud. La columna derecha de la figura corresponde al caso en que el segundo impulso tiene la mitad de la amplitud del primer impulso. Las señales obtenidas tras la integración han sido 8 veces submuestreadas con el propósito de imitar las correspondientes señales continuas. La figura 2.14 muestra claramente que los filtros integradores difieren en su poder resolutivo.

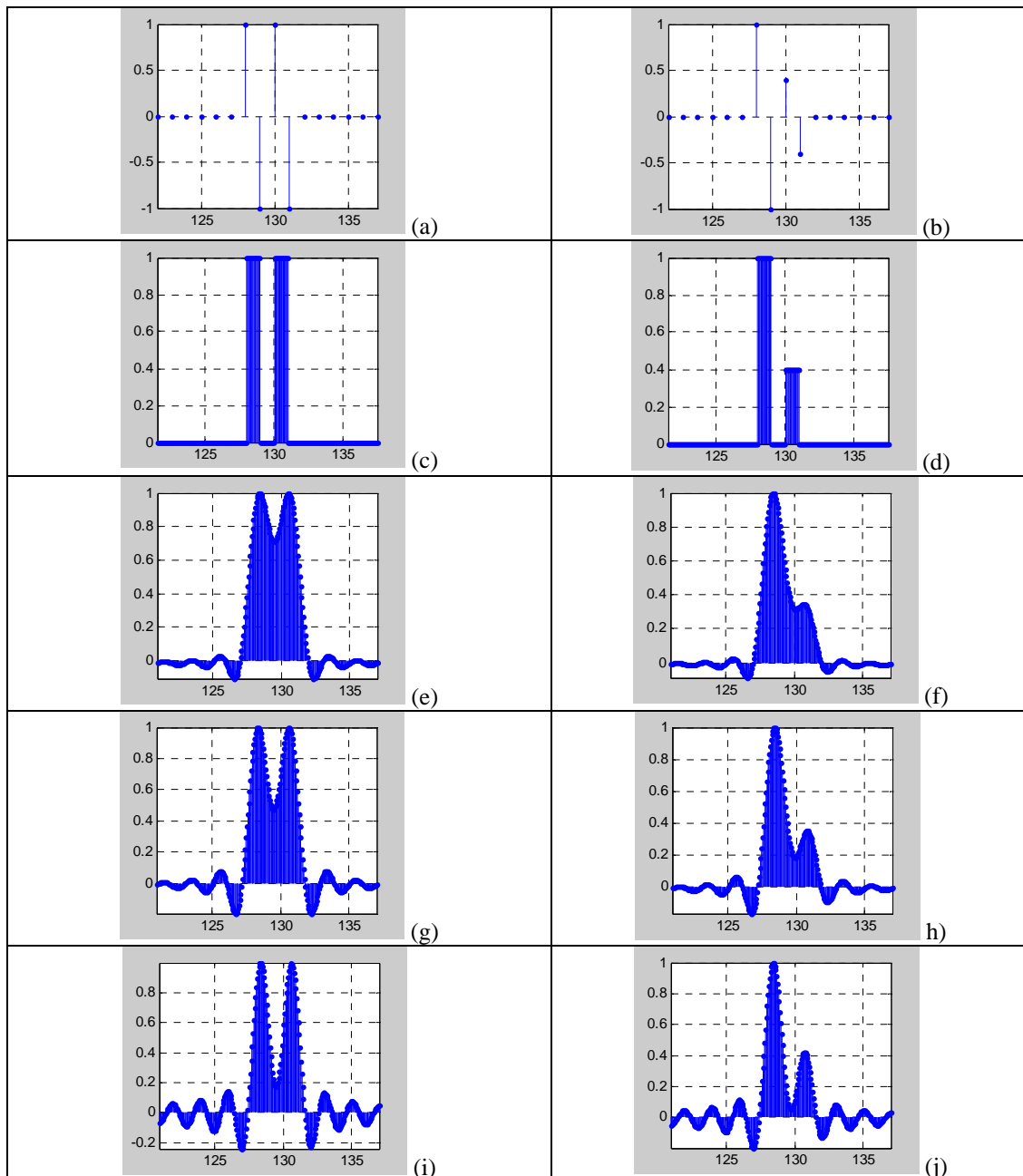


Figura 2.14. (a,b) Derivada teórica, (c,d) Perfiles teóricos submuestreados; perfiles integrados obtenidos (e, f) con la regla del Trapecio, (g, h) con el método basado en las “splines” cúbicas, y (i, j) el basado en el dominio de Fourier.

El filtro basado en el dominio de Fourier produce picos muy agudos y la diferencia entre ellos es muy alta mientras que el filtro basado en las “splines” cúbicas y el filtro trapezoidal ofrecen un peor comportamiento. Las regla de Simpson y de 3/8 de Simpson no son capaces de reproducir los impulsos y tienden a producir fuertes oscilaciones en los extremos de los impulsos debido a la alta frecuencia de los mismos. Este fenómeno se ilustra en la figura 2.15 (a) y (b).

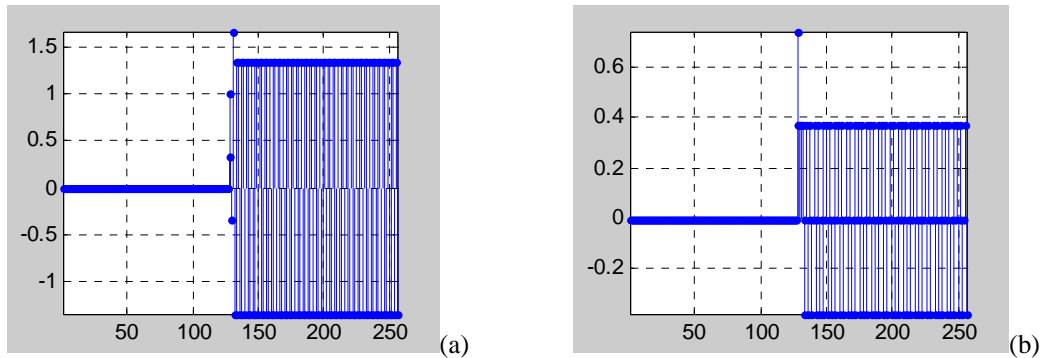


Figura 2.15. Señales obtenidas con (a) la regla de Simpson y (b) la de 3/8 de Simpson a partir de la señal de la figura 2.14(a) (en este caso no submuestreada). Se aprecian las fuertes oscilaciones a la derecha del impulso.

2.6. Comparación de los diferentes métodos de integración con ruido en la derivada

En el apartado anterior se ha deducido la función de transferencia de cada uno de los métodos de integración presentados. Mediante la función de transferencia se puede estudiar cómo afecta la presencia de ruido. Se considera ruido blanco gaussiano, de media nula y de varianza dada σ_f^2 , sumado a la derivada. Si el ruido de la derivada no es correlacionado, su densidad espectral es proporcional a la varianza; en este caso, la varianza de la función integrada final σ_f^2 viene dada por la siguiente expresión:

$$\sigma_f^2 = \left(\frac{1}{N} \sum_{\omega=0}^{N-1} |\eta_{\omega}|^2 \right) \sigma_f^2, \quad (2.70)$$

donde $\eta(\omega)$ es la función de transferencia del filtro integrador y σ_f^2 la varianza del ruido presente en la derivada. Así pues, la función de transferencia es una manera de estudiar la propagación del ruido en la integración. En la figura 2.16(a) se representa el

término entre paréntesis de la expresión (2.70) para cada uno de los métodos de integración en función del número de píxeles N . Se aprecia cómo la regla de 3/8 Simpson da un resultado que tiende a infinito para ciertos valores de N ; esto es debido a la irregularidad que presenta su función de transferencia para una frecuencia equivalente a $2/3$ partes de la frecuencia máxima que recae sobre un determinado píxel para ciertos valores de N y de este modo, el sumatorio de la función de transferencia tiende a infinito amplificando así, el ruido de la señal derivada.

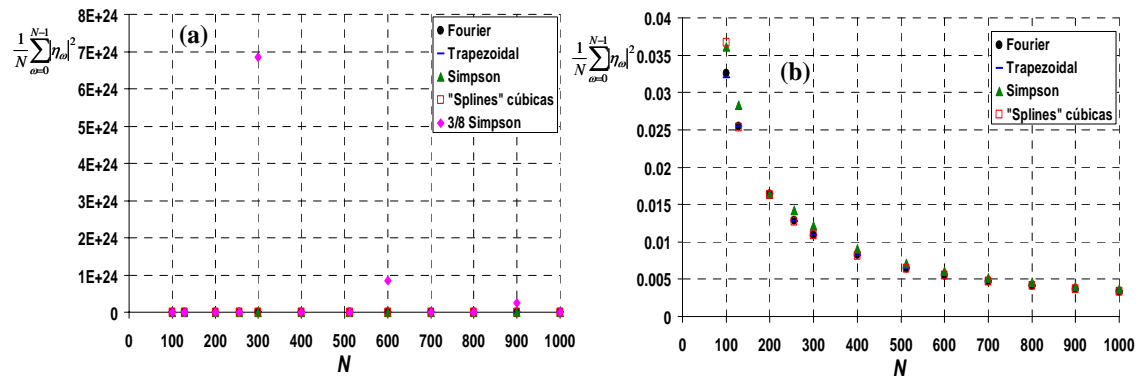


Figura 2.16. Sumatorio de la función de transferencia en función del número de píxeles N (a) mediante todos los métodos estudiados; (b) mediante los métodos de Fourier, Trapecio, Simpson y el basado en las "splines" cúbicas.

En la figura 2.16(b) se representa la misma relación únicamente para los métodos más precisos. Se aprecia que los valores obtenidos son menores que la unidad de manera que los métodos de integración estudiados atenúan el ruido inicial siendo filtros pasa-baja. A medida que aumenta el valor de N , la distancia de muestreo $h = 1/N$ disminuye lo que explica la tendencia decreciente de la figura 2.16(b) ya que la función de transferencia de los diferentes filtros integradores es proporcional a h .

En la figura 2.17(a) se muestra la función derivada original (2.40) en línea continua y la derivada con un ruido blanco gaussiano de media nula y varianza 1 en línea discontinua evaluadas en $N = 600$ puntos. En la figura 2.17(b) se muestra la función original y las obtenidas mediante los diferentes métodos de integración descritos anteriormente. Las figuras 2.17(c)-(g) representan una zona ampliada de 2.17(b) donde aparecen la función original y la obtenida mediante el método basado en el dominio de Fourier, las "splines" cúbicas, la regla del Trapecio, la regla de Simpson y la regla de 3/8 de Simpson respectivamente.

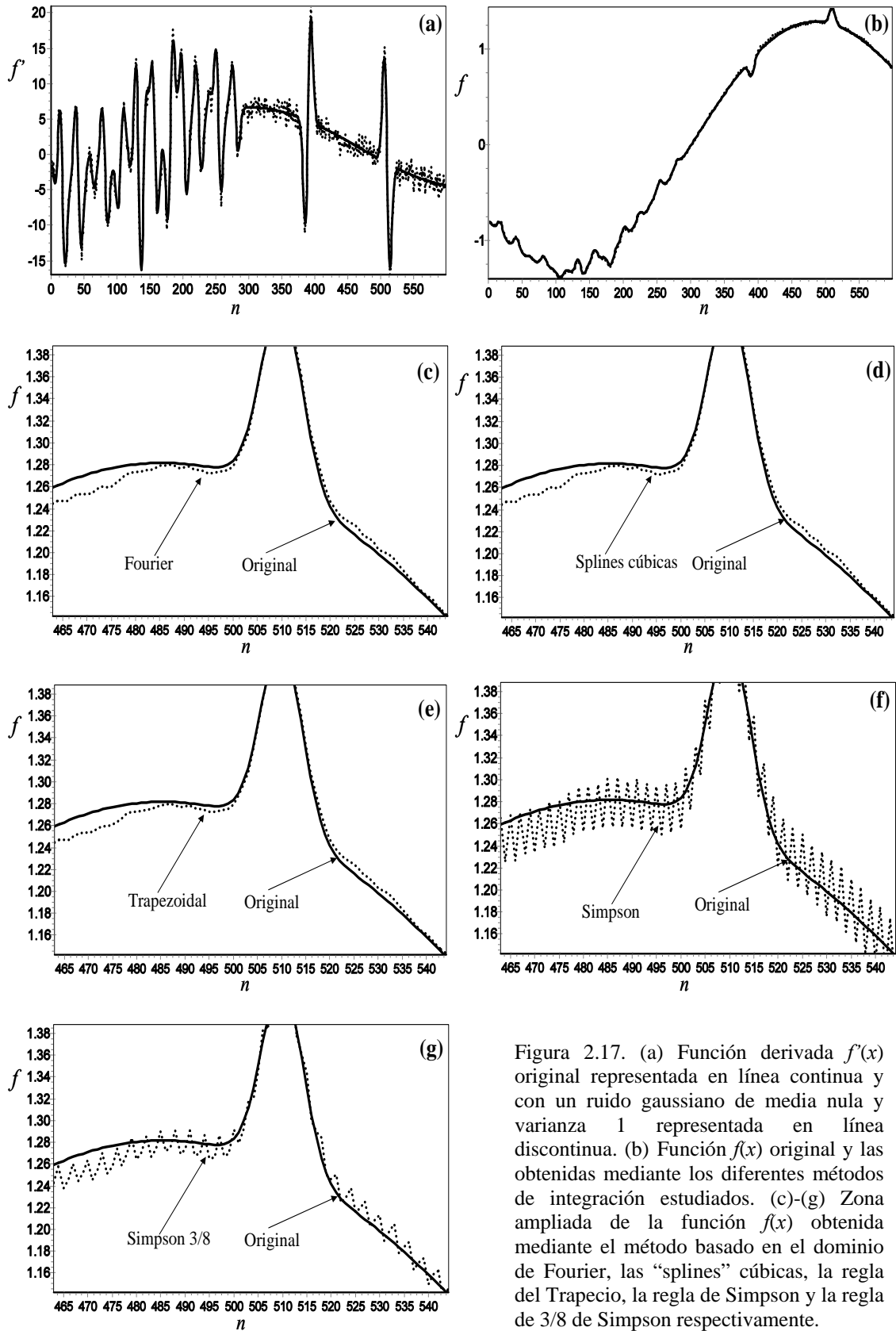


Figura 2.17. (a) Función derivada $f'(x)$ original representada en línea continua y con un ruido gaussiano de media nula y varianza 1 representada en línea discontinua. (b) Función $f(x)$ original y las obtenidas mediante los diferentes métodos de integración estudiados. (c)-(g) Zona ampliada de la función $f(x)$ obtenida mediante el método basado en el dominio de Fourier, las “splines” cúbicas, la regla del Trapecio, la regla de Simpson y la regla de 3/8 de Simpson respectivamente.

En esta figura se observa que los métodos de Fourier, “splines” cúbicas y la regla del Trapecio dan resultados muy parecidos. Sin embargo, la función obtenida mediante los métodos de Simpson y de 3/8 de Simpson presenta oscilaciones con un periodo de 2 y 3 píxeles respectivamente. Esto se puede explicar a partir de la función de transferencia de dichos métodos. En la figura 2.8 se vio cómo la función de transferencia del método de Simpson tiende a infinito para la máxima frecuencia, mientras que la de 3/8 de Simpson tiende a infinito para la frecuencia $2/3$ de la máxima. Esto significa que estas frecuencias se ven anómalamente amplificadas. Con el ruido blanco añadido, la señal original contiene todas las frecuencias, de manera que las correspondientes a los polos de la función de transferencia se amplifican dando lugar a las oscilaciones de las figuras 2.17(f) y (g).

Capítulo 3. Diferentes métodos de integración bidimensional en coordenadas cartesianas

En este capítulo se presenta el estudio de diferentes métodos de integración en dos dimensiones. Se trata de obtener una función bidimensional a partir de sus derivadas obtenidas experimentalmente en un sistema de coordenadas cartesianas.

En el primer apartado de este capítulo se desarrolla un método basado en las propiedades que cumple un campo vectorial conservativo. Es conocido que un campo vectorial conservativo se puede expresar como el gradiente de una función. Además, la integral de línea sobre una curva simple cerrada es nula para un campo vectorial conservativo. Esto permite integrar las derivadas en cada dirección mediante los métodos unidimensionales. También se presenta otro novedoso método que se basa en otra manera de combinar las integrales unidimensionales; consiste en encontrar las constantes de integración que minimicen la diferencia entre los valores de la función obtenidos integrando en las dos direcciones.

En [Rod91] se presenta un algoritmo basado en la transformada de Fourier rápida; se basa en estudiar el operador Laplaciano en el dominio de Fourier. En la tercera sección se describe el algoritmo de Roddier y nuevos métodos para mejorar su rapidez.

Zou et al. [Zou00] resuelven el problema de la obtención de la fase de un frente de ondas a partir de sus derivadas experimentales ajustándolas linealmente para aplicar el método de las diferencias finitas. En el cuarto apartado se describe el algoritmo y un método para mejorarlo basado en el ajuste de las derivadas por “splines” cúbicas. Se comparan ambos métodos.

Al igual que en el caso de una dimensión, en el siguiente apartado se calcula la función de transferencia de los diferentes métodos estudiados para compararlos. Se presenta el estudio de la integración de funciones sinusoidales partiendo de derivadas sin ruido, con ruido y con un defecto simulado. Se ha repetido el estudio para una función arbitraria simulando todo el espectro de frecuencias. Finalmente, se realiza un estudio de los diferentes métodos de integración en función del número de iteraciones empleado para determinar cuál de ellos requiere menos tiempo computacional.

3.1. Métodos basados en la integral de línea

Se define una función de clase C^1 como aquella cuyas derivadas parciales existen y son continuas. La imagen C de una función C^1 , tal que $C:[a,b] \rightarrow \mathbb{R}^3$, uno a uno en $[a,b]$ y satisfaga $C(a)=C(b)$ se define como una curva cerrada simple. La figura 3.1 muestra un ejemplo de curva cerrada simple:

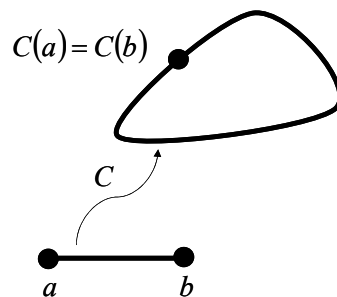


Figura 3.1. Curva cerrada simple.

Se demuestra [Mar91] que un campo vectorial F es conservativo si cumple una (y por tanto, todas) de las siguientes condiciones:

- para cualquier curva cerrada simple orientada C , la integral de línea se anula: $\int_C^P F ds = 0$

- para dos curvas cualquiera cerradas simples C_1 y C_2 que tengan los mismos extremos se cumple: $\int_{C_1}^{\rho} \vec{F} ds = \int_{C_2}^{\rho} \vec{F} ds$
- \vec{F} es el gradiente de alguna función f : $\vec{F} = \nabla f$
- El rotacional del campo \vec{F} es nulo: $\nabla \times \vec{F} = 0$

Por tanto para cualquier campo vectorial conservativo se cumple:

$$\int_C^{\rho} \vec{F} ds = \int_C^{\rho} \nabla f ds = 0, \quad (3.1)$$

siendo C una curva cerrada simple. Si C es una curva formada por varias curvas componentes, C_1, C_2, \dots, C_k , se obtiene:

$$\int_C^{\rho} \vec{F} ds = \int_{C_1}^{\rho} \vec{F} ds + \int_{C_2}^{\rho} \vec{F} ds + \dots + \int_{C_k}^{\rho} \vec{F} ds = 0, \quad (3.2)$$

de donde se deduce la segunda condición que cumple un campo vectorial conservativo.

Existen varias interpretaciones físicas muy útiles de la definición de un campo vectorial conservativo. Usualmente \vec{F} representa una fuerza y $V = -f$ representa un potencial de energía.

A continuación se presenta un método basado en la definición de un campo vectorial conservativo para obtener la función f a partir de sus derivadas f^x, f^y . Se desea obtener el valor de la función f en un punto (a, b) . Para ello se define la función como:

$$f = \int_C^{\rho} \nabla f ds \quad (3.3)$$

Debido a la segunda condición que cumple un campo vectorial conservativo, la función f es independiente de la curva cerrada simple C . Suponiendo que las derivadas se miden experimentalmente y por tanto existen, son continuas y no presentan saltos abruptos, se

conoce el gradiente de la función f a obtener, $\nabla^p f = (f^{x^p}_i + f^{y^p}_j)$ que se puede asociar a un campo vectorial conservativo. Así, se cumplirá:

$$\int_C \nabla^p f ds^p = \int_C (f^{x^p}_i + f^{y^p}_j)(dx^p_i + dy^p_j) = \int_C f^x dx + f^y dy = \int_C f^x dx + \int_C f^y dy = 0 \quad . \quad (3.4)$$

En la figura 3.2, se indica el punto (a, b) donde se desea determinar la función f . Como el valor de la función es independiente del camino de integración se han representado dos posibles caminos (C_1 en línea continua y C_2 en discontinua) cuyo origen es el origen de coordenadas y el punto final el punto (a, b) .

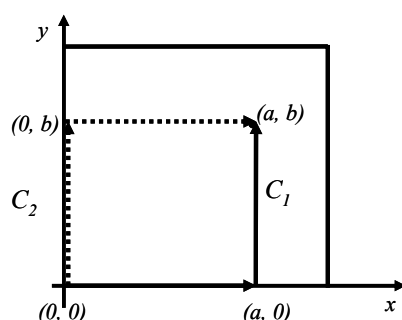


Figura 3.2. Dos posibles caminos de integración desde el origen $(0,0)$ al punto (a,b) donde se desea determinar f .

Teniendo presente la segunda condición para un campo vectorial conservativo, la función f en el punto (a, b) se puede calcular como:

$$f(a, b) = \int_{C_1} \left(\nabla^p f \right) ds^p = \int_0^a f^x(x, 0) dx + \int_0^b f^y(a, y) dy, \quad (3.5.a)$$

$$f(a, b) = \int_{C_2} \left(\nabla^p f \right) ds^p = \int_0^b f^y(0, y) dy + \int_0^a f^x(x, b) dx \quad . \quad (3.5.b)$$

Como la integral es independiente del camino de integración escogido, se obtiene el mismo resultado mediante los dos caminos de integración de la figura 3.2. Así, se considera el valor de la función en (a, b) como el valor medio de los dos resultados obtenidos. Cada integral de la expresión (3.5) es una integral que puede ser evaluada mediante los métodos de integración unidimensional estudiados en el capítulo anterior.

En el caso real las derivadas se obtienen experimentalmente de manera que se ven afectadas por ruido, debido a posibles inconsistencias a la hora de medir (originadas por posibles vibraciones mecánicas por ejemplo). Estos efectos se propagarán a lo largo del camino escogido a la hora de integrar. Por esta razón se han propuesto diferentes caminos de integración con diferentes orígenes representados en la figura 3.3. De esta manera, se tienen diferentes puntos origen de manera que para cada camino se obtiene una constante de integración diferente. Éstas se obtienen debido a que la integral es independiente del camino escogido y por tanto, se obtendrá el mismo resultado. El propósito de utilizar diferentes caminos es obtener el valor de la función de la manera más precisa posible; es decir, se pretende que la propagación de ruido afecte lo menos posible en el resultado final. La función se evalúa mediante el valor medio de los valores obtenidos para cada uno de los caminos representados en la figura 3.3.

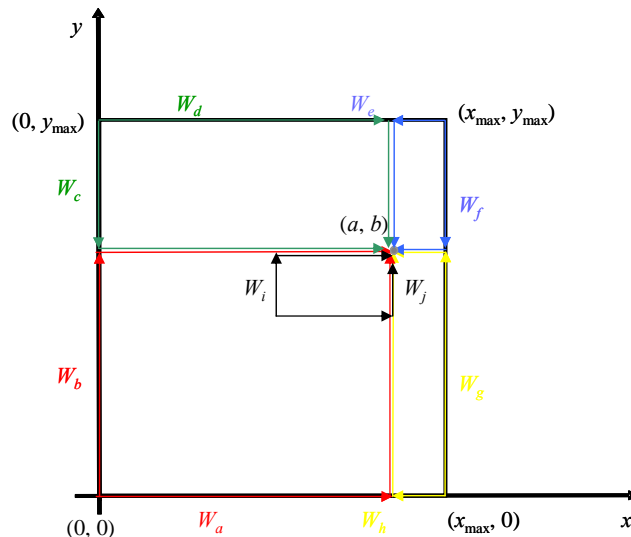


Figura 3.3. Caminos de integración considerados para el cálculo de la función f .

A la hora de calcular las integrales unidimensionales, se ha tener presente el sentido del camino de integración escogido ya que hay un cambio de sentido debido al diferencial de integración. De esta manera, los límites de integración cambian tal y como se observa en la siguiente expresión:

$$\int_0^a f(x)dx = -\int_a^0 f(x)dx \quad . \quad (3.6)$$

A partir de los caminos de integración de la figura 3.3 se han estudiado las siguientes combinaciones para el cálculo de la función:

- M0: se parte del centro del dominio. La función integrada se obtiene mediante la combinación lineal $f^{\text{int}}(x) = \frac{f^{w_i}(x) + f^{w_j}(x)}{2}$ donde $f^{w_i}(x)$ y $f^{w_j}(x)$ son las funciones obtenidas a través de los caminos W_i y W_j representados en la figura 3.3.
- M1: la función integrada se obtiene mediante la combinación lineal $f^{\text{int}}(x) = \frac{f^{w_a}(x) + f^{w_b}(x)}{2}$ donde $f^{w_a}(x)$ y $f^{w_b}(x)$ son las funciones obtenidas a través de los caminos W_a y W_b de la figura 3.3.
- M2: esta combinación emplea cuatro posibles caminos y viene dada por $f^{\text{int}}(x) = \frac{f^{w_a}(x) + f^{w_b}(x) + f^{w_e}(x) + f^{w_f}(x)}{4}$, siendo W_a, W_b, W_e y W_f los caminos de integración de la figura 3.3.
- M3: en esta combinación se emplean 6 caminos: $f^{\text{int}}(x) = \frac{f^{w_i}(x) + f^{w_j}(x) + f^{w_a}(x) + f^{w_b}(x) + f^{w_e}(x) + f^{w_f}(x)}{6}$.
- M4: esta combinación emplea ocho posibles caminos: $f^{\text{int}}(x) = \frac{f^{w_a}(x) + f^{w_b}(x) + f^{w_c}(x) + f^{w_d}(x) + f^{w_e}(x) + f^{w_f}(x) + f^{w_g}(x) + f^{w_h}(x)}{8}$, siendo $W_a, W_b, W_c, W_d, W_e, W_f, W_g$ y W_h los caminos de integración de la figura 3.3.

3.2. Método basado en la minimización de la diferencia de la integración unidimensional en cada dirección

Siguiendo con el marco teórico del método anterior, se ha desarrollado un nuevo método de integración. Se trata de buscar otra manera de combinar las integrales unidimensionales en cada dirección. Se integra por filas y por columnas las dos matrices en las que se almacenan las derivadas mediante los métodos unidimensionales estudiados en el capítulo 2. La figura 3.4 muestra un esquema de la función obtenida tras la integración. De la integración en la dirección x , para cada coordenada y , se obtiene $f^y(x) + c_y$, siendo c_y la constante de integración para cada y ; de manera similar, en la dirección y se obtiene para cada coordenada x , $g^x(y) + b_x$, siendo b_x la constante de integración para cada x . Las constantes de integración c_y y b_x no son conocidas pero las

dos funciones obtenidas deben coincidir salvo una constante. Con el objetivo de conseguir una integración lo más precisa posible, se minimiza la diferencia entre la integración realizada en ambas direcciones.

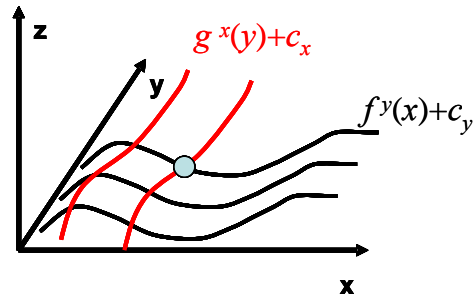


Figura 3.4: Integrales de línea unidimensionales en las direcciones x e y .

La diferencia entre los valores obtenidos integrando para cada coordenada en ambas direcciones viene dada por la siguiente expresión:

$$diferencia = \sum_{x,y} |f^y(x) + c_y - g^x(y) - b_x|^2 \quad (3.7)$$

Para encontrar los valores de c_y y b_x que minimizan la diferencia, se calculan los valores para los que se anulan las derivadas respecto a c_y y b_x :

$$\frac{\partial diferencia}{\partial c_y} = 2 \sum_x (f^y(x) + c_y - g^x(y) - b_x) = 0 \quad \text{para } y = 1, \dots, N_y \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial diferencia}{\partial b_x} = -2 \sum_y (f^y(x) + c_y - g^x(y) - b_x) = 0 \quad \text{para } x = 1, \dots, N_x,$$

donde N_x e N_y son las dimensiones del dominio de las derivadas y de su función original. La expresión (3.8) representa un sistema de ecuaciones lineales cuya solución son las constantes c_y y b_x . El sistema de ecuaciones lineales viene dado por:

$$N_x c_y - \sum_x b_x = \sum_x g^x(y) - f^y(x) \quad \text{para } y = 1, \dots, N_y \quad (3.9)$$

$$N_y b_x - \sum_y c_y = \sum_y f^y(x) - g^x(y) \quad \text{para } x = 1, \dots, N_x,$$

que se escribe en forma matricial como sigue:

$$\begin{pmatrix}
-1 \dots -1 & N_x 0 \dots 0 \\
-1 \dots -1 & 0 N_x \dots 0 \\
\cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot \\
-1 \dots -1 & 0 \dots N_x \\
N_y \dots 0 & -1 \dots -1 \\
0 N_y \dots 0 & -1 \dots -1 \\
\cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot \\
0 \dots N_y & -1 \dots -1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
b_1 \\
\cdot \\
\cdot \\
\cdot \\
b_{N_x} \\
c_1 \\
\cdot \\
\cdot \\
\cdot \\
c_{N_y}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\sum_x g^x(1) - f^1(x) \\
\cdot \\
\cdot \\
\cdot \\
\sum_x g^x(N_y) - f^{N_y}(x) \\
\sum_y f^y(1) - g^1(y) \\
\cdot \\
\cdot \\
\cdot \\
\cdot \\
\sum_y f^y(N_x) - g^{N_x}(y)
\end{pmatrix}
\tag{3.10}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones lineales (3.10) se ha impuesto que la constante c_l sea igual a cero. La resolución de dicho sistema de ecuaciones implica la inversión de la matriz que sólo depende de N_x y N_y , con lo que se puede invertir previamente. El número de elementos de un lado de la matriz es de $N_x + N_y$ y así, el método requiere determinado tiempo computacional en función de las dimensiones de la matriz. Una vez determinadas las constantes de integración, la función final se calcula mediante la media de los valores obtenidos en la integración unidimensional en ambas direcciones tal y como se muestra en la siguiente expresión:

$$f(x, y) = \frac{1}{2} (g^x(y) + b_x + f^y(x) + c_x) \tag{3.11}$$

Los dos métodos presentados se basan en la integración unidimensional estudiada en el capítulo 2. A continuación se presentan dos métodos propiamente bidimensionales. El primer de ellos se basa en el dominio de Fourier [Rod91]. El otro consiste en un método basado en las diferencias finitas aplicado a un sensor de Hartmann Sach [Zou00]. También se presentan las novedosas mejoras realizadas en estos métodos para la obtención de mejores resultados.

3.3. Método de Fourier

Consideremos $F(u, v)$, $F^u(u, v)$ y $F^v(u, v)$ las transformadas de Fourier de la función f y de sus derivadas f^x y f^y respectivamente. (u, v) son las coordenadas en el dominio de

Fourier. Para abreviar la notación se considera $F = F(u, v)$, $F^u = F^u(u, v)$, $F^v = F^v(u, v)$, $f = f(x, y)$, $f^x = f^x(x, y)$ y $f^y = f^y(x, y)$.

La operación de derivación se puede realizar en el dominio de Fourier. La relación entre las transformadas de Fourier de una función y de sus derivadas parciales viene dada por:

$$\begin{aligned} F^u &= -iuF \\ F^v &= -ivF \end{aligned} \quad (3.12)$$

Llamando F^{uu} y F^{vv} a las transformadas de Fourier de las derivadas parciales segundas de f respecto a x e y se tienen las siguientes relaciones en el dominio de Fourier:

$$\begin{aligned} F^{uu} &= -iuF^u = -u^2F, \\ F^{vv} &= -ivF^v = -v^2F, \end{aligned} \quad (3.13)$$

Así pues, la transformada de Fourier del Laplaciano de una función se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \Im(\nabla^2 f) &= F^{uu} + F^{vv} = -iuF^u - ivF^v \\ &= -u^2F - v^2F = -(u^2 + v^2)F \end{aligned} \quad (3.14)$$

A partir de estas expresiones se puede obtener una relación entre la transformada de Fourier de la función a obtener y las transformadas de sus derivadas:

$$F = \frac{F^{uu} + F^{vv}}{-(u^2 + v^2)} = \frac{-iuF^u - ivF^v}{-(u^2 + v^2)} = \frac{i(uF^u + vF^v)}{(u^2 + v^2)} \quad (3.15)$$

De esta manera se relaciona la función a obtener con las funciones medidas experimentalmente (las derivadas en ambas direcciones). En la figura 3.5 se recoge de manera esquemática la descripción del método de integración basado en estas expresiones. Se parte de las derivadas f^x, f^y , medidas experimentalmente; se obtiene su transformada de Fourier F^u y F^v . Mediante la expresión (3.15) se obtiene la función deseada F en el dominio de Fourier. Aplicando la transformada de Fourier inversa se obtiene la función final en el dominio espacial.

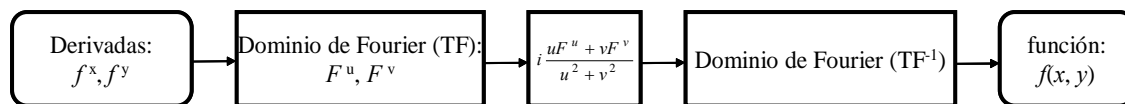


Figura 3.5: Diagrama del método de integración bidimensional basado en el dominio de Fourier.

Al igual que en la integración unidimensional, se generan efectos de borde al aplicar la transformada de Fourier discreta sobre datos reales o funciones simuladas que no mantienen periodicidad. Así Roddier et al. proponen en [Rod91] una extensión de las derivadas experimentales, es decir, las almacenan en dos matrices de doble dimensión y rodeadas de ceros. Además, si a partir de la función f obtenida mediante este método se calculan sus derivadas, éstas no son iguales a las obtenidas experimentalmente a causa del ruido experimental o de posibles inconsistencias en la medición. Así, proponen aplicar el método de manera iterativa con el propósito de obtener más precisión. De esta manera, el número de iteraciones es un criterio de convergencia: cuantas más iteraciones se realicen más preciso será el método. La figura 3.6 recoge esquemáticamente el método iterativo implementado. Las derivadas medidas se almacenan en dos matrices de dimensiones más grandes (el doble para cada dirección) y se rodean de ceros (1) con el objetivo de reducir los efectos de borde que produce la transformada de Fourier discreta. A continuación, se calcula la transformada de Fourier de dichas matrices para obtener F^u y F^v (2). Se calcula la ecuación (3.14) para obtener la función original en el dominio de Fourier (3). Si el número de iteraciones supera un número dado se hace el paso (5) que consiste en calcular la transformada de Fourier inversa de F obteniendo la función final; si por el contrario, el número de iteraciones no supera el número dado, se aplica la derivación en el dominio de Fourier (3.12) para obtener unas nuevas derivadas F^u y F^v . El siguiente paso (7) consiste en calcular la transformada de Fourier inversa de F^u y F^v para obtener las nuevas derivadas en el dominio espacial, f^{x^x} y f^{y^y} . Cuantas más iteraciones se realicen, las nuevas derivadas f^{x^x} y f^{y^y} serán más iguales a las derivadas iniciales, a las medidas experimentalmente. Otro posible criterio de convergencia podría haber sido la diferencia entre las nuevas derivadas obtenidas mediante el método y las derivadas experimentales. El paso (8) consiste en introducir nuevamente las derivadas iniciales (las medidas) en las nuevas derivadas obtenidas mediante el proceso volviendo así al paso (2), manteniendo los valores obtenidos en la extensión de las matrices (la parte sombreada de f^{x^x} y f^{y^y} de la figura 3.6).

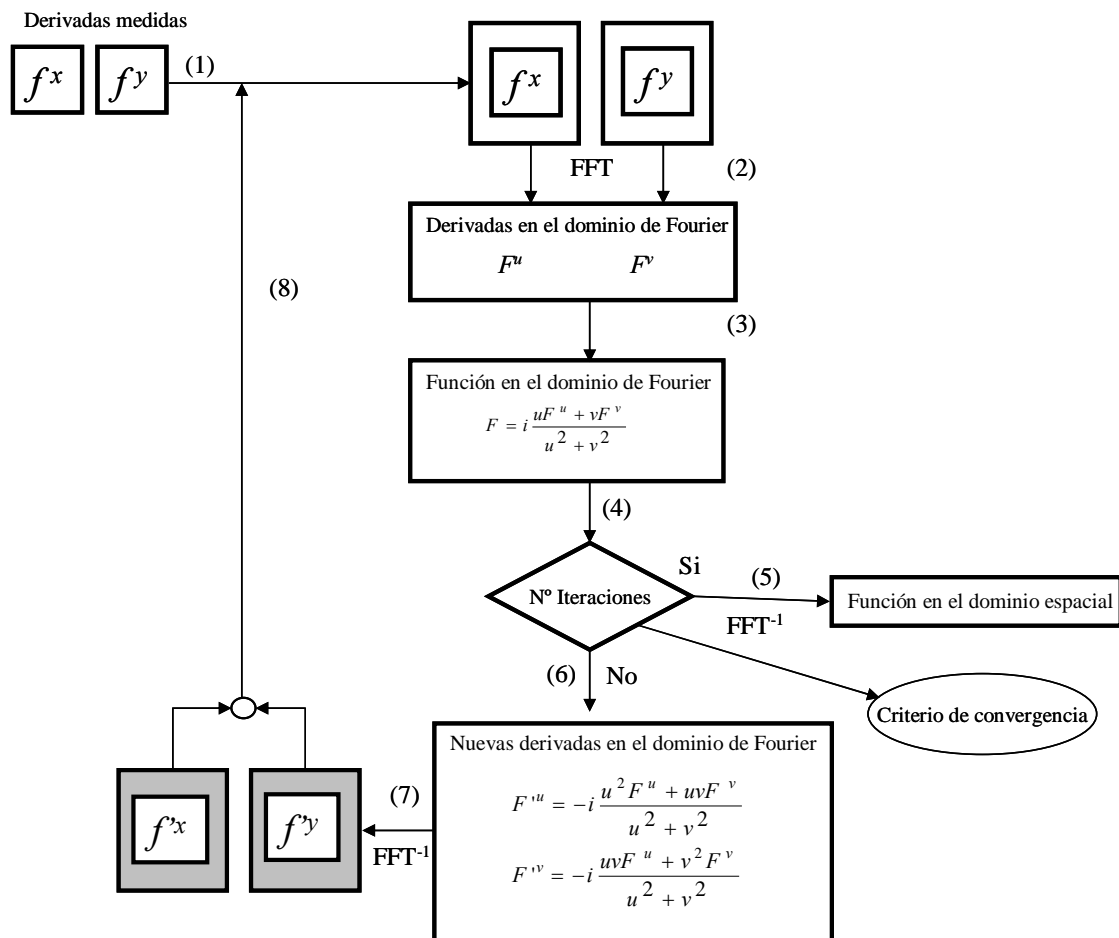


Figura 3.6: Método de integración bidimensional iterativo basado en el dominio de Fourier.

Basándonos en el estudio del método de Fourier en una dimensión, el paso (1) de la figura 3.6 propuesto en [Rod91] es mejorado mediante una extrapolación lineal; una por “splines” cúbicas y una por “reflexión”. Tal y como se demostró en el capítulo anterior, la extensión es suave, con el fin de evitar los saltos abruptos, y por otro lado, la extensión es periódica para evitar los efectos de borde que aparecen con motivo de los algoritmos de transformada de Fourier digital. Así, en lugar de rodear las matrices iniciales de las derivadas con ceros se impone que las derivadas sean funciones periódicas mediante una extrapolación lineal, por “splines” cúbicas o por “reflexión”.

De esta manera se mejora el criterio de convergencia del método, es decir, se necesitan menos iteraciones y por tanto se requiere menos tiempo computacional. En la figura 3.7 se representa esquemáticamente la extrapolación realizada; la figura 3.7(a) es una extrapolación por filas mientras que la figura 3.7(b) es por columnas. La zona sombreada representa la derivada medida experimentalmente (la matriz envuelta por los extremos A, B, C, y D) rodeada de ceros. Al realizar la extrapolación, se impone que la

derivada sea una función periódica; así se construyen las “copias” A'-D' y A''-D''. La figura 3.7(a) muestra la extrapolación por filas, es decir, la condición de periodicidad se impone fila a fila. De esta manera, se rellena la matriz fila a fila tal y como muestran las zonas dibujadas en rojo de la figura 3.7(a). Una vez realizada la extrapolación por filas se hace por columnas teniendo presente los valores obtenidos en las zonas dibujadas en rojo. De manera idéntica se realiza columna por columna como se muestra en la figura 3.7(b) y así se rellena la matriz en las zonas azules de la figura 3.7(b), obteniendo finalmente toda la matriz rellena a partir de la información obtenida experimentalmente.

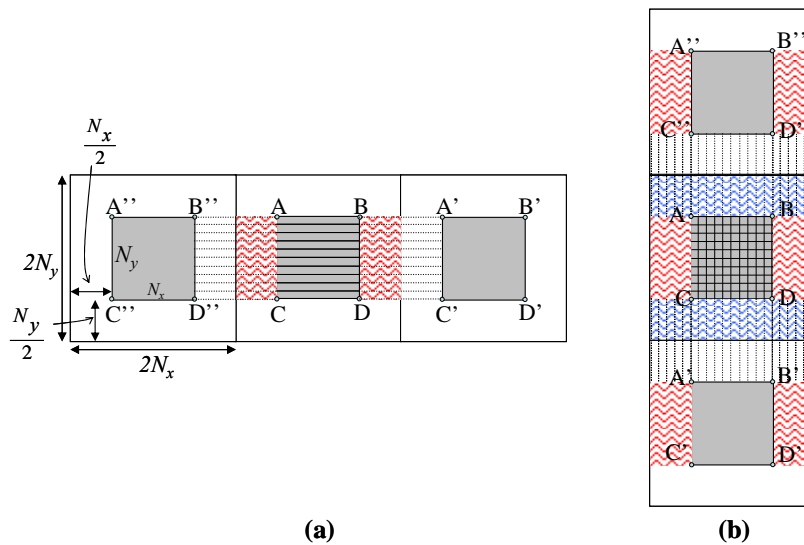


Figura 3.7. Extrapolación (a) por filas; (b) por columnas.

A continuación se explican brevemente las tres extrapolaciones realizadas. Se aplican los métodos del capítulo anterior en dos direcciones, correspondientes a las filas y a las columnas de las matrices donde se almacena la información de las derivadas a integrar posteriormente.

3.3.1. Extrapolación periódica lineal.

El primer método se basa en una extrapolación lineal extendiendo las derivadas mediante una función lineal. Se emplea el método descrito en el apartado 2.3.1 basado en las condiciones de continuidad y periodicidad de la derivada para el cálculo de la pendiente del ajuste lineal de la derivada extendida. Se aplica primero para cada fila de la matriz (obteniendo las zonas dibujadas en rojo de la figura 3.7(a)) y después para las columnas (zonas dibujadas en azul de la figura 3.7(b)).

3.3.2. Extrapolación periódica por “splines” cúbicas.

El segundo método para extrapolar la derivada de forma suave y con pocas oscilaciones consiste en las “splines” cúbicas estudiado en el apartado 2.3.2. El método se realiza primero en todas las filas, extendiendo la imagen en la dirección horizontal (figura 3.7(a)), y por columnas extendiendo la imagen en la dirección vertical (figura 3.7(b)). En la figura 3.8 se muestra un ejemplo de la extrapolación por “splines” cúbicas de una función. La figura 3.8(a) muestra la función centrada dentro de una matriz y rodeada de ceros. La figura 3.8(b) muestra el resultado tras aplicar la extrapolación por “splines” cúbicas.

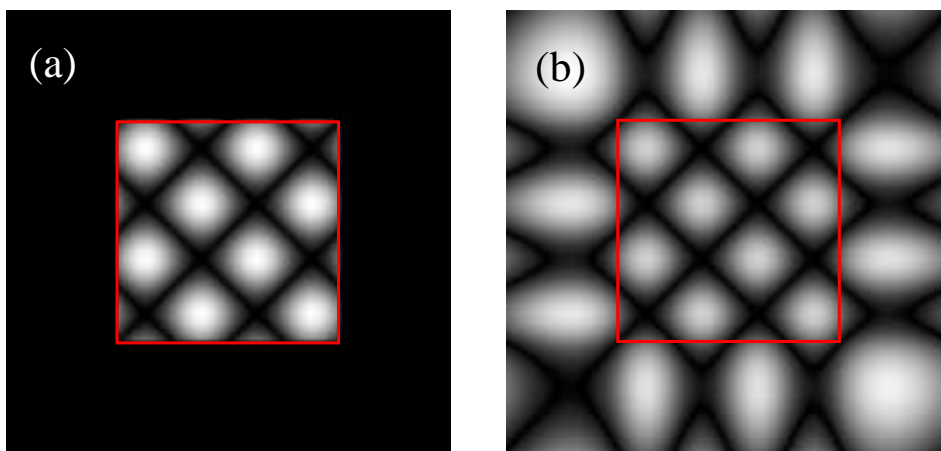


Figura 3.8. En rojo se muestra la imagen original (a) función muestreada. (b) función extendida mediante “splines” cúbicas.

3.3.3. Extrapolación periódica por “reflexión”.

El tercer método consiste en extrapolar las derivadas por “reflexión” de manera análoga a cómo se hizo en el apartado 2.3.3. En la figura 3.9 se muestra un esquema del método. Inicialmente se tiene la matriz derivada delimitada por los píxeles indicados por A, B, C y D en la figura 3.9. Se extiende la matriz añadiendo ceros. El paso (1) consiste en extrapolar por filas mediante “reflexión” tal y como se hizo en el capítulo anterior. De esta manera, se rellena el cuadrante superior derecho de la matriz extendida (zona coloreada en rojo). En el paso (2) se extrapola de igual modo columna por columna rellenando la zona coloreada en azul de la figura 3.9. Finalmente la matriz original A-D se centra en la matriz extendida mediante un adecuado desplazamiento de los píxeles.

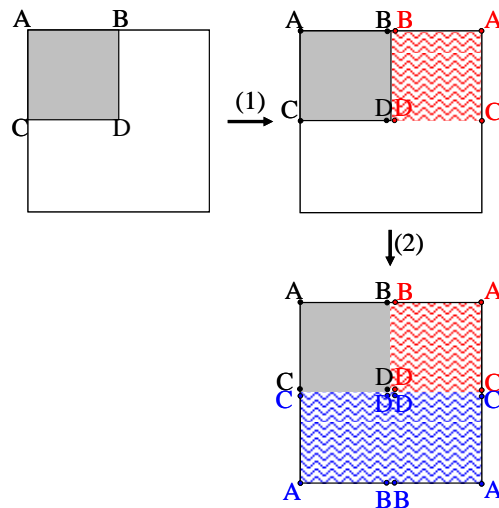


Figura 3.9. Extrapolación por “reflexión”.

3.4. Método basado en las diferencias finitas

El método de diferencias finitas es un método de carácter general que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales definidas en áreas finitas. La aplicación de dicho método permite solucionar una amplia y variada gama de problemas.

El método de diferencias finitas obtiene una solución aproximada de las ecuaciones diferenciales definidas en una región de trabajo. Sobre dicho recinto habrá definidas unas condiciones de contorno o frontera y unas condiciones iniciales que marcarán el punto de partida en la solución de problemas concretos.

El primer paso para la aplicación del método es definir el recinto donde ha de calcularse el valor de la función incógnita a resolver. Dicho recinto, que en este caso particular será de dos dimensiones, se discretiza en el número de puntos de medición formando una matriz rectangular. La aplicación del método de diferencias finitas sobre el recinto dará como resultado el valor de la función incógnita en cada uno de esos puntos. El número y disposición de los mismos depende de la exactitud que se desea.

El método aproxima la función incógnita en cada punto por su desarrollo en serie de Taylor. El número de términos del desarrollo, que se tendrán en cuenta, será el suficiente para que junto con las condiciones de contorno y las condiciones iniciales, sea posible eliminar los términos superiores y obtener, de este modo, una ecuación que nos permita conocer el valor de la función en cada punto. Dicha ecuación, como se verá

más adelante, relaciona el valor de la función en un punto con el valor de la función y de sus derivadas en los puntos adyacentes.

El proceso anterior se repite para cada uno de los puntos, obteniéndose un sistema de ecuaciones, cuya resolución conduce a la obtención de la solución aproximada que se busca. La solución del sistema de ecuaciones se obtiene mediante un proceso iterativo que puede resolverse utilizando diferentes métodos.

En nuestro caso, la función incógnita a determinar es la función de la que se tienen sus derivadas en los puntos del área de trabajo.

En [Zou00] se desarrolla un algoritmo de reconstrucción de la fase de un frente de ondas a partir de sus derivadas obtenidas mediante el sensor de Hartmann Sack, basado en este método de las diferencias finitas. Consiste en interpolar linealmente las derivadas evaluadas en puntos adyacentes. Aplicando el método de diferencias finitas, se encuentra un sistema de ecuaciones en las que se relaciona los valores de la fase incógnita con los valores de sus derivadas conocidas experimentalmente. Expondremos en primer lugar este método para pasar a continuación al método que proponemos basado en una interpolación por “splines” cúbicas.

3.4.1. Diferencias finitas con una interpolación lineal.

Consideremos que las derivadas de la función $f(x, y)$ respecto a las coordenadas cartesianas (x, y) se evalúan en una red de puntos (n, m) equidistantes tal y como se muestra en la figura 3.10. (a, b) son las distancias de muestreo. Para abreviar la notación, se escribe $f(x, y)|_{n,m} = f_{nm}$ y $\left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right|_{n,m} = f_{nm}^x$ y de manera similar para la otra dirección $\left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right|_{n,m} = f_{nm}^y$. A partir de las derivadas f_{nm}^x, f_{nm}^y se busca la función original f_{nm} en dichos puntos. Para realizar la integración a partir de los datos muestreados de las derivadas, obtendremos las derivadas continuas utilizando una interpolación. En este apartado se realiza una interpolación lineal. De esta manera, la derivada respecto a x entre los píxeles (n, m) y $(n+1, m)$ se escribe como:

$$\left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right|_{n,m} = f_{nm}^x \left(1 - \frac{x}{a} \right) + f_{n+1m}^x \frac{x}{a}, \quad (3.16)$$

donde a es la distancia entre los dos puntos adyacentes en la dirección x de la red y la variable x está en el intervalo $(0, a)$.

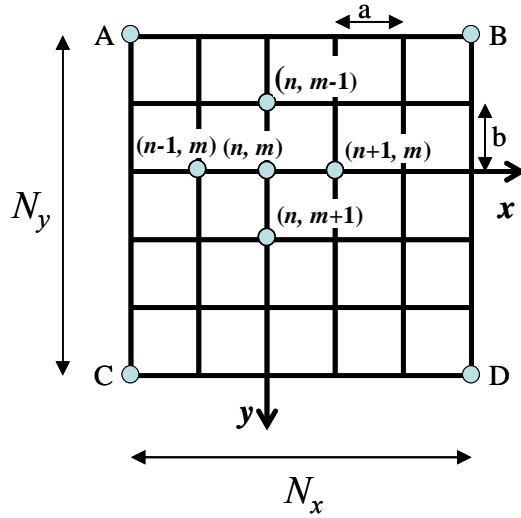


Figura 3.10: Red de puntos donde se han medido las derivadas.

Integrando la ecuación (3.16) se obtiene:

$$\int_0^a \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} dx = \int_0^a \left\{ f_{nm}^x \left(1 - \frac{x}{a}\right) + f_{n+1m}^x \frac{x}{a} \right\} dx, \quad (3.17)$$

$$f_{n+1m} - f_{nm} = \frac{1}{2} (f_{nm}^x + f_{n+1m}^x) a ,$$

y según la dirección y se obtiene un resultado similar:

$$f_{nm+1} - f_{nm} = \frac{1}{2} (f_{nm}^y + f_{nm+1}^y) b , \quad (3.18)$$

siendo b la distancia entre los dos puntos adyacentes de la red según la dirección y . Ecuaciones similares se escriben para los otros dos puntos vecinos $(n, m-1)$ y $(n-1, m)$ representados en la figura 3.10. Así, para cada punto interior del dominio se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} f_{n+1m} - f_{nm} &= \frac{a}{2} (f_{n+1m}^x + f_{nm}^x) \\ f_{nm} - f_{n-1m} &= \frac{a}{2} (f_{nm}^x + f_{n-1m}^x) \\ f_{nm+1} - f_{nm} &= \frac{b}{2} (f_{nm+1}^y + f_{nm}^y) \\ f_{nm} - f_{nm-1} &= \frac{b}{2} (f_{nm}^y + f_{nm-1}^y) . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Estas ecuaciones relacionan los valores de la función en el punto (n, m) con los valores de la función y de las derivadas en los puntos vecinos. Sumando correctamente las ecuaciones (3.19), para los puntos interiores de la red se encuentra:

$$-f_{nm+1} - f_{n-1m} + 4f_{nm} - f_{n+1m} - f_{nm-1} = \frac{a}{2}(f_{n-1m}^x - f_{n+1m}^x) + \frac{b}{2}(f_{nm-1}^y - f_{nm+1}^y) . \quad (3.20)$$

Para cada uno de los puntos interiores del dominio de la función se obtiene una ecuación similar a (3.20).

Las esquinas y los puntos de los bordes del dominio de las derivadas no tienen cuatro puntos adyacentes de manera que alguna de las ecuaciones (3.19) no tiene sentido. Así, en las esquinas se dispone de dos ecuaciones mientras que en los bordes de tres. A continuación se desarrollan expresiones similares a (3.20) para las esquinas y los puntos que forman los bordes de la red de puntos donde se han medido las derivadas (figura 3.10).

La esquina A representada en la figura 3.10 tiene únicamente dos puntos adyacentes: a su derecha y debajo. Por tanto, para el extremo A sólo hay dos contribuciones de las ecuaciones (3.19):

$$\begin{aligned} f_{10} - f_{00} &= \frac{a}{2}(f_{10}^x + f_{00}^x) \\ f_{01} - f_{00} &= \frac{b}{2}(f_{01}^y + f_{00}^y) , \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde f_{00} es el valor de la función en el extremo A, f_{10} el valor de la función en su vecino derecho y f_{01} el valor correspondiente al vecino de debajo. Las derivadas en el extremo A vienen dadas por f_{00}^x, f_{00}^y ; f_{10}^x es la derivada en la dirección x del vecino de la derecha y f_{01}^y la derivada en la dirección y del vecino de debajo. De esta manera, para el extremo A, la ecuación general (3.20) viene dada por:

$$A: \quad -f_{01} + 2f_{00} - f_{10} = -\frac{a}{2}(f_{10}^x + f_{00}^x) - \frac{b}{2}(f_{01}^y + f_{00}^y) . \quad (3.22)$$

De manera similar, se obtienen las siguientes ecuaciones para las esquinas B, C y D de la figura 3.10:

$$\begin{aligned}
B: & -f_{N_x-2,0} + 2f_{N_x-1,0} - f_{N_x-1,1} = \frac{a}{2}(f_{N_x-1,0}^x + f_{N_x-2,0}^x) - \frac{b}{2}(f_{N_x-1,1}^y + f_{N_x-1,0}^y) \\
C: & -f_{0,N_y-2} + 2f_{0,N_y-1} - f_{1,N_y-1} = -\frac{a}{2}(f_{1,N_y-1}^x + f_{0,N_y-1}^x) + \frac{b}{2}(f_{0,N_y-1}^y + f_{0,N_y-2}^y) \\
D: & -f_{N_x-1,N_y-2} + 2f_{N_x-1,N_y-1} - f_{N_x-2,N_y-1} = \frac{a}{2}(f_{N_x-1,N_y-1}^x + f_{N_x-2,N_y-1}^x) + \frac{b}{2}(f_{N_x-1,N_y-1}^y + f_{N_x-1,N_y-2}^y).
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Los puntos de los bordes que unen los extremos A y B tienen tres puntos adyacentes: a su izquierda, a su derecha y debajo. Las ecuaciones (3.19) vienen dadas por:

$$\begin{aligned}
f_{n+10} - f_{n0} &= \frac{a}{2}(f_{n+10}^x + f_{n0}^x) \\
f_{n0} - f_{n-10} &= \frac{a}{2}(f_{n0}^x + f_{n-10}^x) \\
f_{n1} - f_{n0} &= \frac{b}{2}(f_{n1}^y + f_{n0}^y).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

De esta manera, la ecuación general (3.20) para los puntos que unen los extremos A y B se escribe como sigue:

$$\begin{aligned}
AB: & -f_{n-1,0} + 3f_{n,0} - f_{n,1} - f_{n+1,0} = \frac{a}{2}(f_{n,0}^x + f_{n-1,0}^x) - \frac{a}{2}(f_{n+1,0}^x + f_{n,0}^x) - \frac{b}{2}(f_{n,1}^y + f_{n,0}^y) = \\
& = \frac{a}{2}(f_{n-1,0}^x - f_{n+1,0}^x) - \frac{b}{2}(f_{n,1}^y + f_{n,0}^y),
\end{aligned} \tag{3.25}$$

con $n = 1, \dots, N_x-1$. De manera similar, para los otros puntos de borde se obtienen las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned}
AC: & 3f_{0m} - f_{1,m} - f_{0,m+1} - f_{0,m-1} = -\frac{a}{2}(f_{1,m}^x + f_{0,m}^x) - \frac{b}{2}(f_{0,m+1}^y + f_{0,m}^y) + \frac{b}{2}(f_{0,m}^y + f_{0,m-1}^y) \\
& = -\frac{a}{2}(f_{1,m}^x + f_{0,m}^x) + \frac{b}{2}(f_{0,m-1}^y - f_{0,m+1}^y) \quad m=1, \dots, N_y-1 \\
BD: & 3f_{N_x-1,m} - f_{N_x-2,m} - f_{N_x-1,m+1} - f_{N_x-1,m-1} = \frac{a}{2}(f_{N_x-1,m}^x + f_{N_x-2,m}^x) - \frac{b}{2}(f_{N_x-1,m+1}^y + f_{N_x-1,m}^y) + \frac{b}{2}(f_{N_x-1,m}^y + f_{N_x-1,m-1}^y) = \\
& = \frac{a}{2}(f_{N_x-1,m}^x + f_{N_x-2,m}^x) + \frac{b}{2}(f_{N_x-1,m-1}^y - f_{N_x-1,m+1}^y) \quad m=1, \dots, N_y-1 \\
CD: & 3f_{n,N_y-1} - f_{n-1,N_y-1} + f_{n+1,N_y-1} - f_{n,N_y-2} = \frac{a}{2}(f_{n,N_y-1}^x + f_{n-1,N_y-1}^x) - \frac{a}{2}(f_{n+1,N_y-1}^x + f_{n,N_y-1}^x) + \frac{b}{2}(f_{n,N_y-1}^y + f_{n,N_y-2}^y) = \\
& = \frac{a}{2}(f_{n-1,N_y-1}^x - f_{n+1,N_y-1}^x) + \frac{b}{2}(f_{n,N_y-1}^y + f_{n,N_y-2}^y) \quad n=1, \dots, N_x-1
\end{aligned} \tag{3.26}$$

donde AC corresponde a los puntos que unen los extremos A y C. La misma notación se considera con BD y CD.

De esta manera el problema de la integración bidimensional se transforma en la resolución de un sistema de ecuaciones lineales (3.20) para los puntos interiores del dominio de la función deseada. Las ecuaciones (3.22) y (3.23) son las que hay que resolver para las esquinas mientras que para los puntos que configuran los bordes las ecuaciones a resolver son la (3.25) y (3.26). La matriz de los coeficientes asociada al sistema de ecuaciones lineales depende de las dimensiones del dominio de las funciones, N_x y N_y . La matriz se puede resolver fácilmente mediante el teorema de triangulación de Gauss pero si N_x y N_y son valores muy grandes implica mucha memoria y tiempo computacional. Así, se ha implementado un método iterativo para resolver el sistema de ecuaciones lineales. Indicando el número de la iteración mediante el superíndice j , la ecuación (3.20) se escribe según:

$$4f_{nm}^{j+1} = f_{nm+1}^j + f_{n-1m}^j + f_{n+1m}^j + f_{nm-1}^j + \frac{a}{2}(f_{n-1m}^x - f_{n+1m}^x) + \frac{b}{2}(f_{nm-1}^y - f_{nm+1}^y), \quad (3.27)$$

en la que se calcula el valor de la función en el píxel (n, m) en la iteración $j+1$ a partir de los valores de la función en los píxeles vecinos de la iteración anterior j y de los valores de las derivadas medidas.

Para mejorar la convergencia del método, se ha definido un término v a partir de la expresión (3.27):

$$4v = f_{nm+1}^j + f_{n-1m}^j + f_{n+1m}^j + f_{nm-1}^j + \frac{a}{2}(f_{n-1m}^x - f_{n+1m}^x) + \frac{b}{2}(f_{nm-1}^y - f_{nm+1}^y), \quad (3.28)$$

que permite calcular f_{nm} mediante:

$$f_{nm}^{j+1} = f_{nm}^j + factor(v - f_{nm}^j). \quad (3.29)$$

siendo *factor* un factor de convergencia.

Las iteraciones tienen un significado diferente que en el método de Fourier; en éste, las iteraciones se emplean como criterio de convergencia para obtener la máxima precisión posible mientras que en el método de las diferencias finitas, las iteraciones se emplean para resolver el sistema de ecuaciones lineales.

3.4.2. Diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas.

En el capítulo anterior se demostró que todos los métodos de integración unidimensionales presentados se basan en una interpolación de los valores muestreados de la derivada para obtener la derivada continua a integrar. Se vio que uno de los mejores métodos de integración es el que se basa en las “splines” cúbicas ya que resulta la interpolación más próxima al método ideal de Fourier. A continuación se desarrolla el método de las diferencias finitas interpolando las derivadas por “splines” cúbicas en lugar de utilizar la interpolación lineal del apartado anterior.

La derivada en la dirección x , para cada valor de y , se ajusta mediante una “spline” cúbica $S_{n,m}^x(x)$ entre cada pareja de los datos medidos f_{nm}^x, f_{n+1m}^x tal y como indica la siguiente expresión (de manera similar se hace con la derivada en la dirección y):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right|_{y=m} &= S_m^x(x) = \sum_n S_{n,m}^x(x) = \sum_n r_{n,m}^0 + r_{n,m}^1(x - x_n) + r_{n,m}^2(x - x_n)^2 + r_{n,m}^3(x - x_n)^3 \\ \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right|_{x=n} &= S_n^y(y) = \sum_m S_{n,m}^y(y) = \sum_m c_{n,m}^0 + c_{n,m}^1(y - y_m) + c_{n,m}^2(y - y_m)^2 + c_{n,m}^3(y - y_m)^3 \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde $x \in [x_n, x_{n+1}]$ e $y \in [y_m, y_{m+1}]$ con $n = 0, \dots, N_x - 1$ y $m = 0, \dots, N_y - 1$, $r_{n,m}^0, r_{n,m}^1, r_{n,m}^2, r_{n,m}^3$ son los coeficientes de cada polinomio cúbico $S_{n,m}^x(x)$ y $c_{n,m}^0, c_{n,m}^1, c_{n,m}^2, c_{n,m}^3$ de $S_{n,m}^y(y)$. De esta manera, integrando las ecuaciones (3.30) se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{x_n}^{x_{n+1}} S_m^x(x) dx &= \int_{x_n}^{x_{n+1}} S_{n,m}^x(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} r_{n,m}^0 + r_{n,m}^1(x - x_n) + r_{n,m}^2(x - x_n)^2 + r_{n,m}^3(x - x_n)^3 dx, \\ f_{n+1,m} - f_{n,m} &= r_{n,m}^0 a + r_{n,m}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n,m}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n,m}^3 \frac{a^4}{4} \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$f_{n,m+1} - f_{n,m} = c_{n,m}^0 b + c_{n,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m}^3 \frac{b^4}{4} \quad ,$$

con a y b las distancias entre dos puntos adyacentes en las direcciones x e y respectivamente. Similarmente al método basado en la interpolación lineal, se ha obtenido el siguiente sistema de ecuaciones lineales para los puntos interiores de la red:

$$\begin{aligned}
f_{n+1,m} - f_{n,m} &= r_{n,m}^0 a + r_{n,m}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n,m}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n,m}^3 \frac{a^4}{4} \\
f_{n,m} - f_{n-1,m} &= r_{n-1,m}^0 a + r_{n-1,m}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n-1,m}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n-1,m}^3 \frac{a^4}{4} \\
f_{n,m+1} - f_{n,m} &= c_{n,m}^0 b + c_{n,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m}^3 \frac{b^4}{4} \\
f_{n,m} - f_{n,m-1} &= c_{n,m-1}^0 b + c_{n,m-1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m-1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m-1}^3 \frac{b^4}{4} .
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Sumando las ecuaciones (3.32) se obtiene:

$$\begin{aligned}
& -f_{n-1,m} - f_{n+1,m} + 4f_{n,m} - f_{n,m-1} - f_{n,m+1} = \\
& = (r_{n-1,m}^0 - r_{n,m}^0) a + (r_{n-1,m}^1 - r_{n,m}^1) \frac{a^2}{2} + (r_{n-1,m}^2 - r_{n,m}^2) \frac{a^3}{3} + (r_{n-1,m}^3 - r_{n,m}^3) \frac{a^4}{4} + \\
& (c_{n,m-1}^0 - c_{n,m}^0) b + (c_{n,m-1}^1 - c_{n,m}^1) \frac{b^2}{2} + (c_{n,m-1}^2 - c_{n,m}^2) \frac{b^3}{3} + (c_{n,m-1}^3 - c_{n,m}^3) \frac{b^4}{4} .
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Para los puntos extremos, se obtienen ecuaciones similares a (3.22)-(3.23):

$$\begin{aligned}
A: -f_{01} + 2f_{00} - f_{10} &= -\left\{ r_{00}^0 a + r_{00}^1 \frac{a^2}{2} + r_{00}^2 \frac{a^3}{3} + r_{00}^3 \frac{a^4}{4} \right\} - \left\{ c_{00}^0 b + c_{00}^1 \frac{b^2}{2} + c_{00}^2 \frac{b^3}{3} + c_{00}^3 \frac{b^4}{4} \right\} \\
B: -f_{N_x-2,0} + 2f_{N_x-1,0} - f_{N_x-1,1} &= \left\{ r_{N_x-2,0}^0 a + r_{N_x-2,0}^1 \frac{a^2}{2} + r_{N_x-2,0}^2 \frac{a^3}{3} + r_{N_x-2,0}^3 \frac{a^4}{4} \right\} - \\
& - \left\{ c_{N_x-1,0}^0 b + c_{N_x-1,0}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_x-1,0}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_x-1,0}^3 \frac{b^4}{4} \right\} \\
C: -f_{0,N_y-2} + 2f_{0,N_y-1} - f_{1,N_y-1} &= -\left\{ r_{0,N_y-1}^0 a + r_{0,N_y-1}^1 \frac{a^2}{2} + r_{0,N_y-1}^2 \frac{a^3}{3} + r_{0,N_y-1}^3 \frac{a^4}{4} \right\} + \\
& + \left\{ c_{0,N_y-2}^0 b + c_{0,N_y-2}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0,N_y-2}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0,N_y-2}^3 \frac{b^4}{4} \right\} \\
D: -f_{N_x-1,N_y-2} + 2f_{N_x-1,N_y-1} - f_{N_x-2,N_y-1} &= \left\{ r_{N_x-1,N_y-1}^0 a + r_{N_x-1,N_y-1}^1 \frac{a^2}{2} + r_{N_x-1,N_y-1}^2 \frac{a^3}{3} + r_{N_x-1,N_y-1}^3 \frac{a^4}{4} \right\} + \\
& + \left\{ c_{N_x-1,N_y-2}^0 b + c_{N_x-1,N_y-2}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_x-1,N_y-2}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_x-1,N_y-2}^3 \frac{b^4}{4} \right\}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Para los puntos de los bordes que unen los respectivos extremos, se obtienen ecuaciones similares a (3.25)-(3.26):

$$\begin{aligned}
AB: \quad -f_{n-1,0} + 3f_{n,0} - f_{n,1} - f_{n+1,0} &= -\left\{r_{n,0}^0 a + r_{n,0}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n,0}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n,0}^3 \frac{a^4}{4}\right\} + \left\{r_{n-1,0}^0 a + r_{n-1,0}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n-1,0}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n-1,0}^3 \frac{a^4}{4}\right\} - \\
&\quad -\left\{c_{n,0}^0 b + c_{n,0}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,0}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,0}^3 \frac{b^4}{4}\right\}, \quad n=1, \dots, N_x - 1 \\
AC: \quad 3f_{0m} - f_{1,m} - f_{0,m+1} - f_{0,m-1} &= -\left\{r_{0,m}^0 a + r_{0,m}^1 \frac{a^2}{2} + r_{0,m}^2 \frac{a^3}{3} + r_{0,m}^3 \frac{a^4}{4}\right\} + \left\{c_{0,m-1}^0 b + c_{0,m-1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0,m-1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0,m-1}^3 \frac{b^4}{4}\right\} - \\
&\quad -\left\{c_{0,m}^0 b + c_{0,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0,m}^3 \frac{b^4}{4}\right\}, \quad m=1, \dots, N_y - 1 \\
BD: \quad 3f_{N_x-1,m} - f_{N_x-2,m} - f_{N_x-1,m+1} - f_{N_x-1,m-1} &= \left\{r_{N_x-2,m}^0 a + r_{N_x-2,m}^1 \frac{a^2}{2} + r_{N_x-2,m}^2 \frac{a^3}{3} + r_{N_x-2,m}^3 \frac{a^4}{4}\right\} + \\
&\quad + \left\{c_{N_x-1,m-1}^0 b + c_{N_x-1,m-1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_x-1,m-1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_x-1,m-1}^3 \frac{b^4}{4}\right\} - \left\{c_{N_x-1,m}^0 b + c_{N_x-1,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_x-1,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_x-1,m}^3 \frac{b^4}{4}\right\}, \quad m=1, \dots, N_y - 1 \\
CD: \quad 3f_{n,N_y-1} - f_{n-1,N_y-1} + f_{n+1,N_y-1} - f_{n,N_y-2} &= -\left\{r_{n,N_y-1}^0 a + r_{n,N_y-1}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n,N_y-1}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n,N_y-1}^3 \frac{a^4}{4}\right\} + \\
&\quad + \left\{r_{n-1,N_y-1}^0 a + r_{n-1,N_y-1}^1 \frac{a^2}{2} + r_{n-1,N_y-1}^2 \frac{a^3}{3} + r_{n-1,N_y-1}^3 \frac{a^4}{4}\right\} + \left\{c_{n,N_y-2}^0 b + c_{n,N_y-2}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,N_y-2}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,N_y-2}^3 \frac{b^4}{4}\right\}. \quad n=1, \dots, N_x - 1
\end{aligned} \tag{3.35}$$

De esta manera se obtienen un sistema de ecuaciones lineales para todos los puntos del dominio de la función deseada que se resuelve con el método iterativo descrito en el apartado anterior.

3.5. Función de transferencia de los diferentes métodos de integración

En el apartado 2.5 del capítulo anterior se ha deducido la función de transferencia de los diferentes métodos de integración unidimensional estudiados. La función de transferencia relaciona las transformadas de Fourier de la derivada y de su función original. En este apartado se presenta el mismo estudio para el método iterativo de Fourier y los métodos basados en las diferencias finitas bidimensionales. Al tratarse de una integración bidimensional, se buscan aquellas funciones cuya combinación relaciona las transformadas de Fourier de las derivadas con la de la función a obtener.

3.5.1. Método de Fourier

A partir de la ecuación (3.15), las funciones η_u^{IF}, η_v^{IF} que relacionan la transformada de la función con las de sus derivadas vienen dadas por:

$$\begin{aligned}
F &= \eta_u^{IF} F^u + \eta_v^{IF} F^v \\
\eta_u^{IF} &= i \frac{u}{u^2 + v^2} \\
\eta_v^{IF} &= i \frac{v}{u^2 + v^2} ,
\end{aligned} \tag{3.36}$$

donde IF hace referencia al método de integración; (u,v) son las coordenadas en el dominio de Fourier; F es la transformada de Fourier de la función f y F^u , F^v las transformadas de las derivadas.

3.5.2. Método de diferencias finitas con una interpolación lineal

Describiendo F como la transformada de Fourier de f_{nm} , la transformada de Fourier de $f_{n\pm 1,m}$ viene dada por $F \exp\left(\mu \frac{i2\pi u}{N_x}\right)$ siendo u la coordenada en el dominio de Fourier.

Así, para obtener las funciones que relacionan las derivadas con su función original en el dominio de Fourier, se calcula la transformada de Fourier de la ecuación (3.20). La transformada de Fourier de la parte izquierda de (3.20) viene dada por:

$$\begin{aligned}
&TF[-f_{nm+1} - f_{n-1m} + 4f_{nm} - f_{n+1m} - f_{nm-1}] = \\
&= -F \exp\left(-\frac{i2\pi v}{N_y}\right) - F \exp\left(\frac{i2\pi u}{N_x}\right) + 4F - F \exp\left(-\frac{i2\pi u}{N_x}\right) - F \exp\left(\frac{i2\pi v}{N_y}\right) = \\
&F \left[4 - \left(\exp\left(-\frac{i2\pi v}{N_y}\right) + \exp\left(\frac{i2\pi v}{N_y}\right) \right) - \left(\exp\left(\frac{i2\pi u}{N_x}\right) + \exp\left(-\frac{i2\pi u}{N_x}\right) \right) \right] ,
\end{aligned} \tag{3.37}$$

donde TF es la transformada de Fourier. Aplicando las relaciones de la exponencial imaginaria y de las funciones sinusoidales del ángulo doble, la expresión (3.37) se escribe:

$$\begin{aligned}
TF[-f_{nm+1} - f_{n-1m} + 4f_{nm} - f_{n+1m} - f_{nm-1}] &= F \left[4 - 2 \cos\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right) - 2 \cos\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) \right] = \\
&= 2F \left[2 - \cos\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right) - \cos\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) \right] .
\end{aligned} \tag{3.38}$$

La transformada de Fourier de la parte derecha de la ecuación (3.20) viene dada por:

$$TF \left[\frac{a}{2} (f_{n-1,m}^x - f_{n+1,m}^x) + \frac{b}{2} (f_{n,m-1}^y - f_{n,m+1}^y) \right] = \frac{a}{2} \left[F^u \exp\left(\frac{i2\pi u}{N_x}\right) - F^u \exp\left(-\frac{i2\pi u}{N_x}\right) \right] + \frac{b}{2} \left[F^v \exp\left(\frac{i2\pi v}{N_y}\right) - F^v \exp\left(-\frac{i2\pi v}{N_y}\right) \right], \quad (3.39)$$

que se escribe como:

$$TF \left[\frac{a}{2} (f_{n-1,m}^x - f_{n+1,m}^x) + \frac{b}{2} (f_{n,m-1}^y - f_{n,m+1}^y) \right] = \frac{a}{2} F^u 2i \sin\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) + \frac{b}{2} F^v 2i \sin\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right) = aF^u i \sin\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) + bF^v i \sin\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right). \quad (3.40)$$

Igualando (3.38) y (3.40), se obtienen las siguientes funciones de transferencia:

$$\eta_u^{DFL} = i \frac{a \sin\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right)}{2 \left[2 - \cos\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) - \cos\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right) \right]} \quad (3.41)$$

$$\eta_v^{DFL} = i \frac{b \sin\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right)}{2 \left[2 - \cos\left(\frac{2\pi u}{N_x}\right) - \cos\left(\frac{2\pi v}{N_y}\right) \right]}$$

donde *DFL* denota el método de integración de diferencias finitas con una interpolación lineal.

3.5.3. Método de diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas

De manera similar al apartado anterior, se calcula la transformada de Fourier de la ecuación (3.33). Teniendo en cuenta la expresión equivalente de (2.61) en dos dimensiones, la ecuación (3.33) se escribe como sigue:

$$-f_{n-1,m} - f_{n+1,m} + 4f_{n,m} - f_{n,m-1} - f_{n,m+1} = a \left(\frac{1}{2} (f_{n-1,m}^x - f_{n+1,m}^x) - \frac{a^2}{24} (m_{n-1,m} - m_{n+1,m}) \right) + b \left(\frac{1}{2} (f_{n,m-1}^y - f_{n,m+1}^y) - \frac{b^2}{24} (m_{n,m-1} - m_{n,m+1}) \right). \quad (3.42)$$

La transformada de Fourier de la parte izquierda es la misma expresión obtenida en (3.38); y teniendo presente la expresión equivalente a (2.63) en dos dimensiones para la

transformada de Fourier del término m_{nm} , la transformada de Fourier de la parte de la derecha de (3.42) se escribe como:

$$\begin{aligned}
 TF & \left[a \left(\frac{1}{2} (f_{n-1,m}^x - f_{n+1,m}^x) - \frac{a^2}{24} (m_{n-1,m} - m_{n+1,m}) \right) + b \left(\frac{1}{2} (f_{n,m-1}^y - f_{n,m+1}^y) - \frac{b^2}{24} (m_{n,m-1} - m_{n,m+1}) \right) \right] = \\
 & = \frac{a}{2} F_u i \sin \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) \left[1 + \frac{3}{\cos \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) + 2} \right] + \frac{b}{2} F_v i \sin \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) \left[1 + \frac{3}{\cos \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) + 2} \right]. \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

Igualando (3.38) y (3.43), se obtiene la función de transferencia:

$$\begin{aligned}
 \eta_u^{DFCS} & = i \frac{a \sin \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) \left[1 + \frac{3}{\cos \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) + 2} \right]}{2 \left[2 - \cos \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) - \cos \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) \right]} \\
 \eta_v^{DFCS} & = i \frac{b \sin \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) \left[1 + \frac{3}{\cos \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) + 2} \right]}{2 \left[2 - \cos \left(\frac{2\pi u}{N_x} \right) - \cos \left(\frac{2\pi v}{N_y} \right) \right]} \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

donde *DFCS* denota el método de integración de diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas.

En la figura 3.11 se representa la respuesta en frecuencias de cada uno de los métodos de integración estudiados: el método iterativo de Fourier (*IF*) (ec. (3.36)); el método de las diferencias finitas de Zou et. al (*DFL*) (ec. (3.41)) y la variante de dicho método en la que se emplean las “splines” cúbicas (*DFCS*) (ec. (3.44)). Debido a que el valor absoluto de la respuesta en frecuencias es simétrico se ha representado solamente la mitad de la curva. La figura 3.11(a) corresponde a la respuesta en frecuencia en v cuando $u = 0$ y la figura 3.11(b) cuando la frecuencia normalizada es $u = 0.195$. La respuesta frecuencial u manteniendo un valor fijo de v es completamente igual a la

representada en la figura 3.11 ya que las funciones (3.36), (3.41) y (3.44) son simétricas respecto las dos frecuencias u y v . A partir de las figuras se concluye que los tres métodos de integración actúan como filtros pasa-baja, al igual que en la integración unidimensional; por tanto la señal obtenida se atenúa respecto a la señal de entrada en las frecuencias altas. Se aprecia que los tres métodos de integración se comportan de manera idéntica para bajas frecuencias. A medida que aumenta la frecuencia v los métodos basados en las diferencias finitas tienden hacia cero para la frecuencia máxima; por tanto, se separan del método ideal de Fourier de manera que introducen errores en la integración. El método *DFCS* se separa menos que el método *DFL* y por tanto es más preciso.

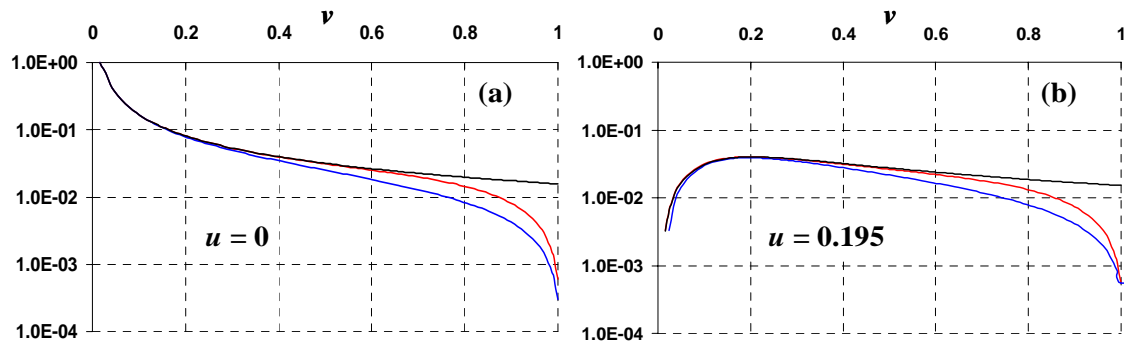


Figura 3.11. Comparación de la respuesta frecuencial del método iterativo de Fourier (línea negra), del método *DFL* (línea azul) y del método *DFCS* (línea roja) en función de la frecuencia v cuando (a) $u = 0$ y (b) $u = 0.195$.

3.6. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal sinusoidal

A continuación se presentan resultados numéricos obtenidos con los métodos explicados en los apartados anteriores. Para comparar la precisión de los diferentes métodos de integración se ha implementado una señal sinusoidal con un número entero de periodos [Yar05]. Así, la señal sinusoidal y sus derivadas se han generado mediante:

$$\begin{aligned}
 f_{nm} &= \cos\left(2\pi p\left(\frac{n}{N_x} + \frac{m}{N_y}\right)\right) \\
 f_{nm}^x &= -\frac{2\pi p}{N_x} \sin\left(2\pi p\left(\frac{n}{N_x} + \frac{m}{N_y}\right)\right) \\
 f_{nm}^y &= -\frac{2\pi p}{N_y} \sin\left(2\pi p\left(\frac{n}{N_x} + \frac{m}{N_y}\right)\right),
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

donde N_x y N_y corresponden al número de píxeles en cada dirección donde las señales han sido evaluadas, p es el parámetro de frecuencia de la señal sinusoidal. La frecuencia normalizada viene dada por $2p/N_x$ o $2p/N_y$, de acuerdo a la dirección. Las frecuencias son seleccionadas para tener un número entero de periodos en el dominio de la señal. De esta manera se evitan los efectos de borde en el método basado en el dominio de Fourier. Las funciones obtenidas mediante los métodos estudiados se han comparado con la señal generada analíticamente calculando el error de integración mediante:

$$rms = \sqrt{\frac{1}{N_x N_y} \sum_{n,m}^{N_x, N_y} |f_{nm}^i - f_{nm}^0|^2} \quad (3.46)$$

donde f^i es la función integrada y f^0 es la función original.

Derivadas no ruidosas

La figura 3.12 muestra el error de integración en función de la frecuencia normalizada. Los métodos se han aplicado en el caso ideal en que las derivadas analíticas no presentan ruido. Los métodos que se han aplicado son: a) los basados en la integral de línea aplicando la regla de Trapecio (*Trap*) o la interpolación por “splines” cúbicas (*CS*) en ambas direcciones empleando la configuración M0 para la que el origen de los dos caminos es el centro del dominio de las funciones (figura 3.3); b) la minimización de la diferencia entre las funciones obtenidas mediante la integración unidimensional con la regla del Trapecio (*MDTrap*) y con el ajuste por “splines” cúbicas (*MDCS*); c) los métodos basados en el dominio de Fourier considerando una extrapolación lineal (*IFL*) y una extrapolación por “reflexión” (*IFR*) y d) los métodos basados en las diferencias finitas *DFL* y *DFCS* según el ajuste de las derivadas. En este experimento las señales han sido evaluadas en $N_x = N_y = 256$ píxeles y los métodos de Fourier se han utilizado considerando 20 iteraciones mientras que en los métodos de las diferencias finitas se han utilizado 100. De la figura 3.12, se observa que todos los métodos ofrecen errores bajos para bajas frecuencias. Cuando la frecuencia de la senoide aumenta, los diferentes métodos de integración tienen diferente comportamiento; así, los métodos que emplean una interpolación lineal (*Trap*, *MDTrap* y *DFL*) ofrecen errores más altos que los obtenidos mediante los métodos que emplean una interpolación por “splines”

cúbicas (*CS*, *MDCS* y *DFCS*). Los resultados de la figura 3.12 están de acuerdo con la función de transferencia presentada en el capítulo anterior (ver figura 2.8) y la interpolación mediante “splines” cúbicas es más precisa que la interpolación lineal. Así se concluye la importancia de conseguir la interpolación de la derivada más precisa posible. De la figura 3.12 se observa que en el caso ideal de la integración de una función sinusoidal a partir de derivadas no ruidosas, no hay diferencias entre los métodos unidimensionales basados en la integral de línea y los métodos basados en las diferencias finitas. De la figura 3.12 se aprecia cómo los métodos basados en el dominio de Fourier son los más precisos y el error obtenido prácticamente no varía respecto a la frecuencia de la función sinusoidal deseada.

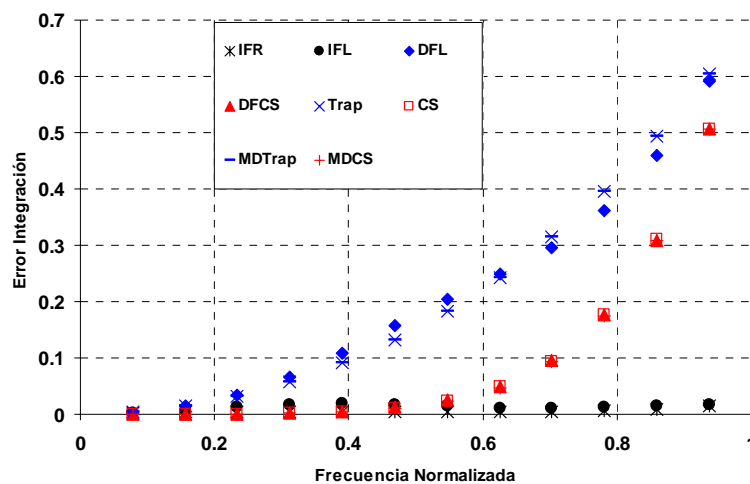


Figura 3.12. Error de integración en función de la frecuencia normalizada de la función sinusoidal a obtener mediante los diferentes métodos: *Trap*, *CS*, *MDTrap*, *MDCS*, *IFL*, *IFR*, *DFL* y *DFCS*.

La figura 3.13 muestra el mapa de la diferencia entre la función integrada y la generada analíticamente para diferentes métodos. Se ha escogido un valor de p asociado a bajas frecuencias ($p = 10$, $2p/N_x = 0.078$); región en la que los diferentes métodos ofrecen un error similar tal y como se aprecia en la figura 3.12. De la figura 3.13, se aprecia que apenas hay diferencias entre los métodos empleados; la principal diferencia se encuentra en el tipo de interpolación de las derivadas independientemente del método utilizado. El error producido es una función sinusoidal cuya amplitud es inferior para aquellos métodos que emplean la interpolación por “splines” cúbicas.

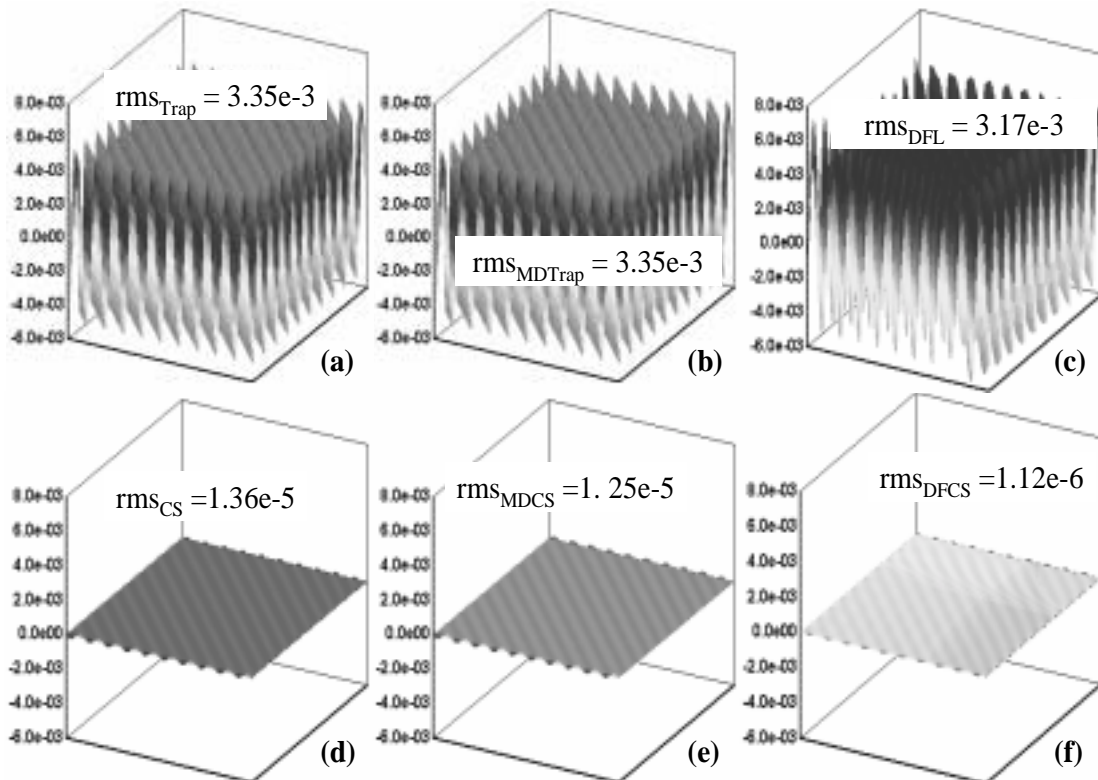


Figura 3.13. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del *rms* al integrar mediante (a) los métodos basados en la integral de línea empleando la regla del Trapecio, y (d) la interpolación por “splines” cúbicas; la minimización de la diferencia entre la integración en las dos direcciones con (b) la regla del Trapecio y (e) con el ajuste por “splines” cúbicas; (c) el método *DFL* y (f) el método *DFCS*.

Derivadas ruidosas

Para apreciar la diferencia entre los diferentes métodos de integración, el experimento se ha repetido añadiendo a las derivadas analíticas un ruido gaussiano de varianza 0.25 y valor medio nulo. La figura 3.14 muestra la comparación del error de integración en función de la frecuencia normalizada de la señal sinusoidal a reconstruir a partir de sus derivadas ruidosas. En la figura 3.14(a) se comparan los métodos basados en la regla del Trapecio con los métodos de Fourier mientras que en la figura 3.14(b) se comparan los métodos basados en las “splines” cúbicas. En ambos casos, en la región de bajas frecuencias se observa una diferencia entre los métodos basados en la integral de línea (*Trap* y *CS*) y los que minimizan la diferencia entre las integrales según la dirección (*MDTrap* y *MDCS*); se aprecia que éstos últimos ofrecen mejores resultados que los primeros siendo más precisa la minimización de la diferencia entre los valores obtenidos en cada dirección ya que permiten encontrar las constantes de integración para cada fila y columna. A medida que aumenta la frecuencia de la señal sinusoidal la diferencia entre los métodos va disminuyendo. De todas maneras, los métodos basados

en las diferencias finitas superan en precisión a los anteriores, siendo mejor el que emplea el ajuste por “splines” cúbicas, *DFCS*. Se aprecia que a medida que aumenta la frecuencia, el error obtenido mediante el método *DFL* aumenta hasta tal punto que resulta incluso más conveniente emplear el método *CS*. De todas maneras, el método *DFCS* es el que ofrece mejores resultados después de los métodos de Fourier, en todo el espectro de frecuencias tal y como se muestra en la figura 3.14.

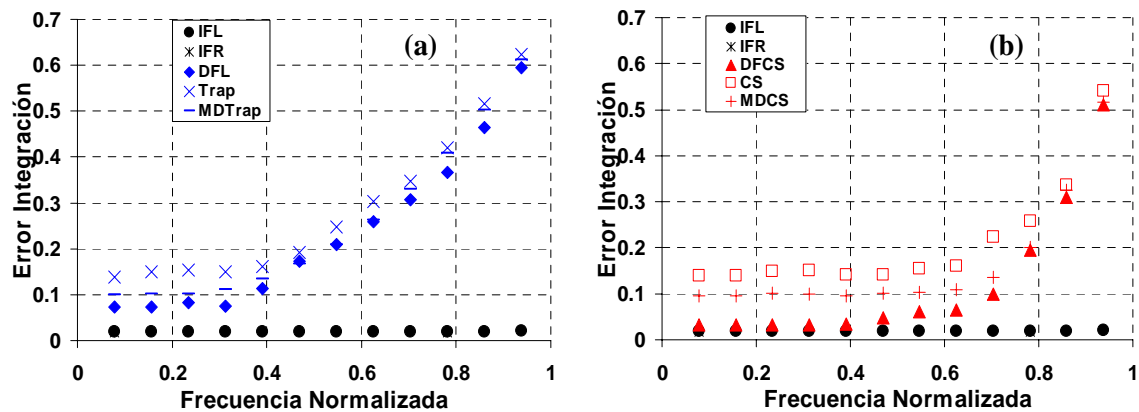


Figura 3.14. Error de integración en función de la frecuencia normalizada de la función sinusoidal a obtener a partir de las derivadas con ruido gaussiano, varianza 0.25 y valor medio nulo mediante los métodos de integración: (a) *Trap*, *MDTrap*, *IFL*, *IFR*, *DFL* y (b) *CS*, *MDCS*, *IFL*, *IFR*, *DFCS*.

Derivadas no ruidosas con un defecto tipo delta

Se ha realizado un último experimento numérico para determinar qué método atenúa mejor los defectos locales que puedan encontrarse en las derivadas como por ejemplo, pequeñas motas de polvo, rayaduras, defectos de fabricación,... se pretende estudiar la propagación del ruido en los diferentes métodos descritos. Para ello, se ha realizado otra simulación numérica sumando un defecto en las derivadas sin ruido, situado a $3/4$ partes del dominio en ambas direcciones. En este experimento las señales han sido implementadas mediante la ecuación (3.45) en $N_x = N_y = 128$ píxeles y con un parámetro de frecuencia $p = 20$, de modo que la frecuencia normalizada es 0.3125, correspondiendo a baja frecuencia. La figura 3.15 muestra un ejemplo de la propagación del error de estos métodos. La figura 3.15(a) corresponde a la diferencia entre la función generada analíticamente y la obtenida mediante el método basado en la regla del Trapecio unidimensional. La figura 3.15(b) es la diferencia obtenida al utilizar la minimización de la diferencia entre las integraciones en cada dirección mediante la regla del Trapecio. Se observa que el error se propaga a lo largo del camino de integración, tal y como se espera ya que son métodos que se basan en la integral de línea y la realizan para cada fila y columna de las derivadas. Lo mismo ocurre al

emplear el ajuste por “splines” cúbicas en lugar de la regla del Trapecio como se puede apreciar en las figuras 3.15(d) y (e). La figura 3.15(d) muestra la diferencia entre la función obtenida mediante el método *CS* y la función original y la figura 3.15(e) corresponde a la diferencia obtenida con el método *MDCS*. La propagación del defecto es la misma independientemente del método que se emplee para integrar ya que son métodos basados en la integral de línea. De todas maneras, los métodos que emplean las “splines” cúbicas consiguen reducir la variación sinusoidal global que aparece en las figuras 3.15(a) y (b). Los errores obtenidos mediante la interpolación por “splines” cúbicas son inferiores a los obtenidos mediante una interpolación lineal ya que la función de transferencia de dichos métodos se aproxima mejor a la función de transferencia analítica de la integración. Además, los métodos basados en “splines” cúbicas responden mejor que los métodos lineales para todo el espectro de frecuencias (figura 3.12).

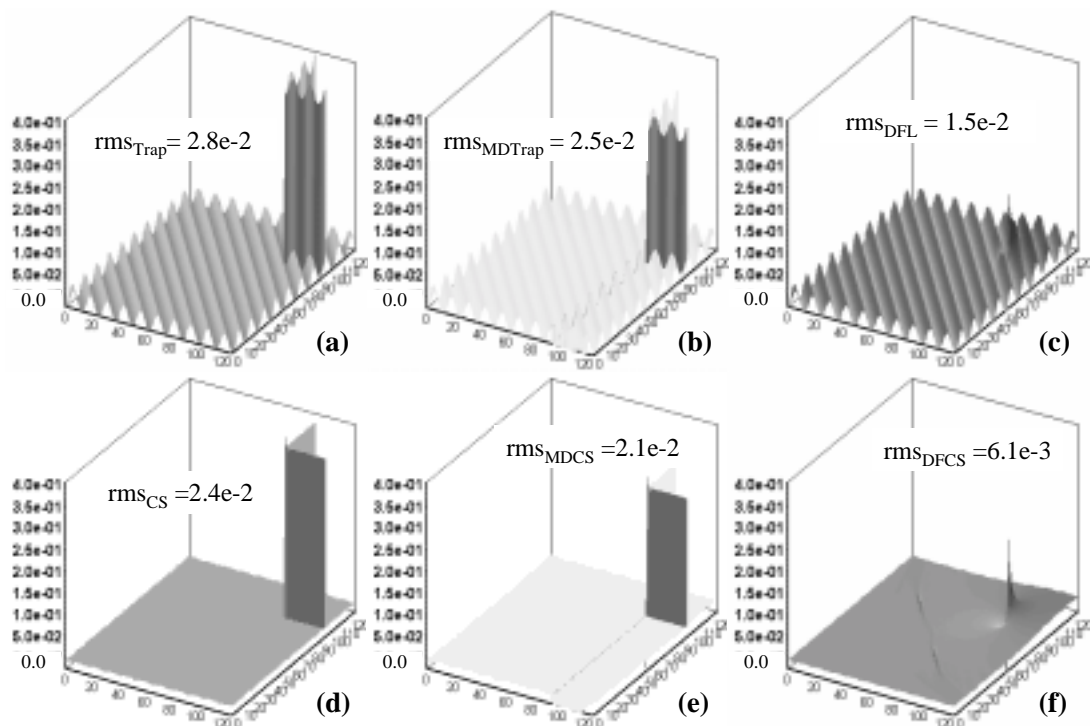


Figura 3.15. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del *rms* cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas a las que se le ha sumado un defecto (función delta) mediante: (a) los métodos basados en la integral de línea empleando la regla del Trapecio, y (d) la interpolación por “splines” cúbicas; la minimización de la diferencia entre la integración en las dos direcciones con (b) la regla del Trapecio y (e) el ajuste por “splines” cúbicas; (c) el método *DFL* y (f) el método *DFCS*.

Las figuras 3.15(c) y (f) corresponden a la diferencia entre las funciones obtenidas mediante los métodos *DFL* y *DFCS* y la función generada analíticamente. Se observa que el error debido a la función delta (defecto añadido a las derivadas) permanece local,

alrededor de la posición original del defecto. Así, los métodos basados en las diferencias finitas ofrecen mejor resultado para el error de integración; y si es posible, el método mejora si previamente se interpolan las derivadas por “splines” cúbicas.

Los errores obtenidos al emplear los métodos de Fourier aparecen en la figura 3.16. La figura 3.16(a) corresponde al caso de emplear el método de Fourier con una extrapolación lineal mientras que la figura 3.16(b) se asocia a la extrapolación por “reflexión”. Se aprecia que para ambos métodos, la propagación del defecto delta sumado a las derivadas se mantiene local. La variación sinusoidal que se aprecia no es debida a la diferencia entre la función integrada y la generada analíticamente sino a los efectos de borde obtenidos tras hacer 20 iteraciones en el método de Fourier.

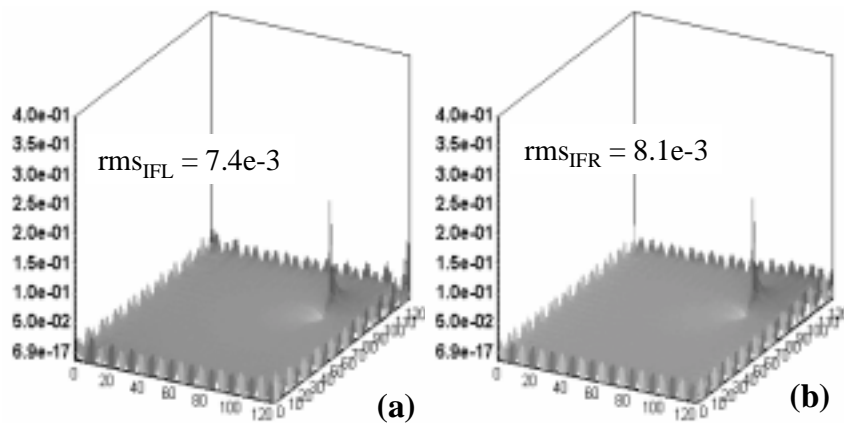


Figura 3.16. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del *rms* cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas a las que se ha sumado un defecto (función delta) mediante (a) el método *IFL*, y (b) el método *IFR*.

3.7. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal arbitraria

Una vez estudiados los diferentes métodos de integración mediante el caso más sencillo de una señal sinusoidal, en este apartado se estudia el caso más real de una señal arbitraria, que siempre se puede considerar como una combinación de diferentes señales sinusoidales de diferente frecuencia. La señal arbitraria estudiada viene descrita analíticamente por la siguiente expresión:

$$f(x, y) = x + \sin(1.8\pi(x - 0.5)) + y + \sin(1.8\pi(y - 0.5)) + \sin^2(0.8\pi) + \sum_{j=0}^{20} a_j \exp\left[-\left(\frac{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2}{2 \cdot 10^{-4}}\right)\right] \quad \text{con } 0 \leq x, y \leq 1 \quad (3.47)$$

La figura 3.17 muestra la función original $f(x, y)$ y sus derivadas en las direcciones de integración x - y evaluadas en $N_x = 128$ y $N_y = 128$ píxeles. La función ha sido generada con el propósito de simular un espectro amplio de frecuencias; así, la función contiene una función lineal y una sinusoidal de baja frecuencia (el parámetro de frecuencia es de 1.8) a la que se suman 20 gaussianas de diferente amplitud y centro que corresponden a la región de alta frecuencia tal y como se puede apreciar en la figura 3.17.

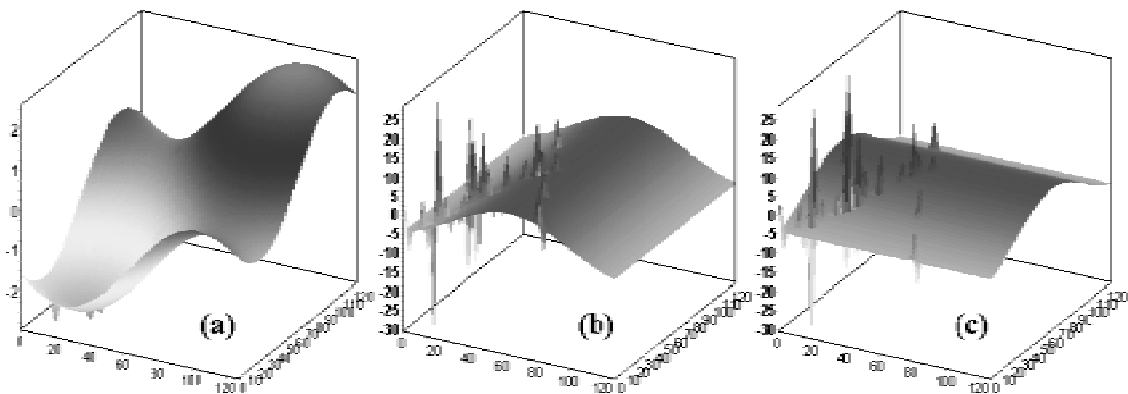


Figura 3.17: (a) Función original $f(x, y)$; (b) Derivada analítica $f^x(x, y)$ respecto la coordenada x sin ruido añadido y (c) Derivada analítica $f^y(x, y)$ respecto la coordenada y sin ruido añadido.

De manera similar al apartado 3.6, la comparativa de los métodos de integración mencionados se hace en tres casos:

- Caso en que las derivadas no presentan ruido.
- Caso en que las derivadas no presentan ruido pero tienen un punto defectuoso (delta de Dirac).
- Caso en que las derivadas presentan un ruido blanco de tipo gaussiano, aditivo, de media nula y varianza dada.

Derivadas no ruidosas

La figura 3.18 muestra el mapa del error producido y el valor del *rms* dado por (3.46) obtenido en la integración mediante los diferentes métodos estudiados anteriormente. La figura 3.18(a) corresponde al método basado en la integral curvilínea aplicando la regla del Trapecio para calcular la integral de línea para todas las filas y columnas de las matrices derivada. La figura 3.18(b) corresponden al método basado en la minimización

de la diferencia entre los valores obtenidos aplicando la regla del Trapecio en las dos direcciones. Comparando ambas figuras, se observa que ambos métodos ofrecen un *rms* muy similar tal y como se espera ya que ambos métodos se comportan igual en el caso ideal de ausencia de ruido. Se aprecia que en la zona donde están las gaussianas, los métodos ofrecen picos en el mapa de la diferencia; esto es debido a que la regla del Trapecio no es un método preciso para reconstruir señales de alta frecuencia como se demostró en el capítulo anterior. Las figuras 3.18(c) y (d) corresponden a los mismos métodos pero utilizando el ajuste de las derivadas por “splines” cúbicas. Se aprecia que ambos métodos se comportan igual y ofrecen mejores resultados que los obtenidos mediante la regla del Trapecio. Esto se debe a que el método basado en las “splines” cúbicas es el que más se acerca al método ideal de Fourier. De las figuras 3.18(c) y (d) se aprecia cómo los picos de error obtenidos con la regla del Trapecio desaparecen ya que se trata de métodos que reconstruyen con más precisión señales de alta frecuencia. Las figuras 3.18(e) y (f) corresponden al error obtenido con los métodos basados en las diferencias finitas, *DFL* y *DFCS* respectivamente. El método *DFCS* es más preciso y ofrece un *rms* un orden de magnitud inferior que el obtenido mediante *DFL*. De la figura 3.18(e) se aprecia cómo el método *DFL* introduce errores en la zona de las 20 gaussianas de la función original (3.47) correspondiente a la zona de altas frecuencias, aumentando así el *rms*. Dicho fenómeno no ocurre mediante el método *DFCS* (figura 3.18(f)); nuevamente se constata que la interpolación por “splines” cúbicas es mucho más precisa que la interpolación lineal en la zona de altas frecuencias (la que correspondería a las 20 gaussianas). Dicha idea está de acuerdo con el estudio de la función de transferencia presentado en la figura 3.11 en la que se aprecia cómo los métodos estudiados (*DFL*, *DFCS* e *IF*) se comportan de manera idéntica a bajas frecuencias; pero a medida que aumenta la frecuencia, los métodos *DFL* y *DFCS* se separan del método ideal de Fourier. En particular, el método *DFL* diverge más rápido que el método *DFCS* lo cual confirma los resultados de las figuras 3.18(e) y (f). Las figuras 3.18(g) y (h) corresponden al error obtenido mediante los métodos iterativos basados en el dominio de Fourier, *IFL* y *IFR* respectivamente. Ambos métodos reconstruyen con mucha precisión la región de alta frecuencia generada mediante las 20 gaussianas, aunque también aparecen los efectos de borde asociados a la transformada de Fourier discreta de una señal no periódica. El valor del *rms* de ambos métodos es del mismo orden de magnitud, ligeramente inferior para la extrapolación lineal.

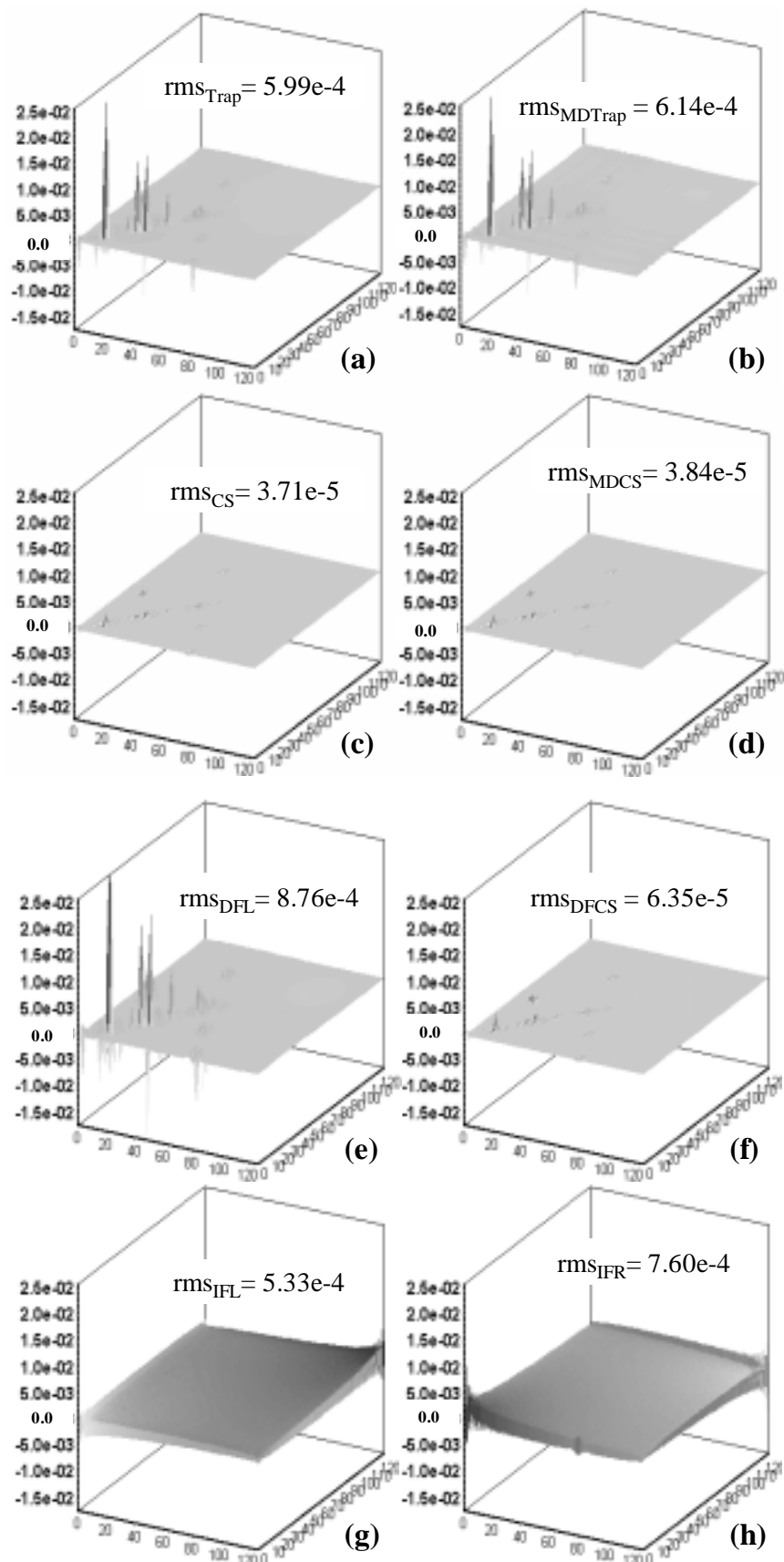


Figura 3.18: Mapa del error producido y valor del rms en la integración mediante (a) el método *Trap*, (b) el método *MDTrap*, (c) el método *CS*, (d) el método *MDCS*, (e) el método *DFL*, (f) el método *DFCS*, (g) el método *IFL* y (h) el método *IFR*

Derivadas no ruidosas con un defecto tipo delta

Al igual que en el apartado 3.6, se ha estudiado el caso en que las derivadas a integrar presentan un defecto simulado mediante la función delta de Dirac (situada a $3/4$ partes de N_x y N_y en las direcciones x e y , respectivamente). De esta manera, se estudiará la propagación del error para los diferentes métodos estudiados. Así, la figura 3.19 corresponde al mapa del error producido en la integración y el valor del *rms* obtenido. Las figuras 3.19(a) y (b) corresponden a los métodos *Trap* y *MDTrap* respectivamente. Comparando ambas figuras, se observa que ambos métodos ofrecen un *rms* muy similar; nuevamente, en la zona de alta frecuencia, los métodos ofrecen picos en el mapa de la diferencia. En la figura 3.19(b) se aprecia cómo la propagación del defecto tipo delta afecta a toda la fila y columna donde se ha simulado la delta mientras que en la figura 3.19(a) afecta solamente a la parte posterior a la delta de la fila y columna. Esto se debe a que con el método de la minimización de la diferencia se encuentran las constantes de integración para cada fila y columna y se tienen en cuenta en el resultado final. Así, la constante de integración de la fila y columna donde se ha situado la delta se ve alterada por tal efecto; y afectará al resultado final teniendo la propagación que se observa en la figura 3.19(b). Las figuras 3.19(c) y (d) corresponden al mapa de errores usando el método basado en las “splines” cúbicas. Las figuras 3.19(e) y (f) corresponden al error obtenido mediante los métodos basados en las diferencias finitas. Se aprecia que ambos métodos se comportan igual y ofrecen mejores resultados que los obtenidos mediante los métodos anteriores. Se aprecia que para dichos métodos la propagación del error producido por el defecto impuesto en las derivadas se mantiene local, es decir, dicha propagación es mínima. El mismo efecto se obtiene mediante los métodos basados en el dominio de Fourier tal y como se observa en las figuras 3.19(g) y (h). Respecto al valor del *rms* obtenido, es del mismo orden de magnitud para los diferentes métodos, siendo el menor el obtenido mediante el método *DFCS*.

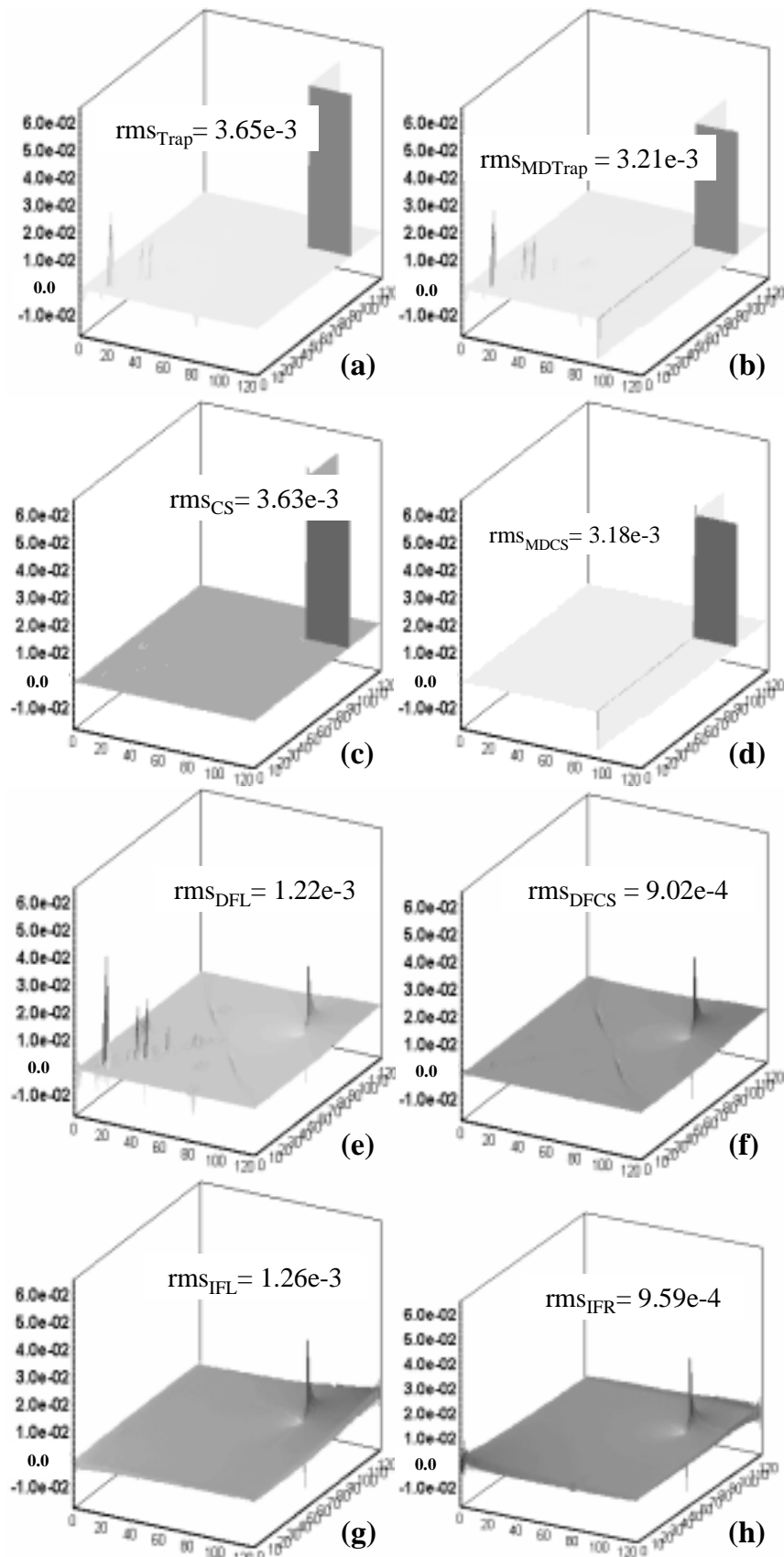


Figura 3.19: Mapa del error producido y valor del rms en la integración de las derivadas con un defecto tipo delta mediante (a) el método *Trap*, (b) el método *MDTrap*, (c) el método *CS*, (d) el método *MDCS*, (e) el método *DFL*, (f) el método *DFCS*, (g) el método *IFL* y (h) el método *IFR*

Derivadas ruidosas

En este apartado se estudia el caso en que las derivadas presentan un ruido blanco gaussiano, de valor medio nulo y varianza 10^{-3} simulando así, el caso más cercano a la realidad. La figura 3.20 muestra el mapa del error producido en todo el dominio de la función a obtener y el valor del *rms* (3.46). Los resultados son similares a los de los casos anteriores. Los métodos que emplean las “splines” cúbicas (*CS* y *MDCS*) son más precisos que los que utilizan la regla del Trapecio (*Trap*, *MDTrap*). Por otra parte, los métodos de las diferencias finitas mejoran los anteriores métodos; además, se tratan de métodos más precisos en todo el espectro de frecuencias y la propagación de un posible defecto se mantiene local como se ha visto en los apartados anteriores. Es más, la función de transferencia de *DFL* y *DFCS* se aproximan a la del método basado en el dominio de Fourier y por tanto, son una buena aproximación de la integración bidimensional ideal tal y como se aprecia de las figuras 3.20(e), (f), (g) y (h).

3.8. Comparación de los métodos iterativos en función del número de iteraciones

El presente apartado se centra en determinar el número de iteraciones necesario para obtener un óptimo resultado. Para ello, se han estudiado los diferentes métodos iterativos estudiados, es decir, los métodos *DFL*, *DFCS*, *IFL* y *IFR*. Es importante incidir en que las iteraciones tienen un papel diferente en los métodos estudiados: en los basados en las diferencias finitas, las iteraciones se emplean para resolver el sistema lineal de ecuaciones que permite obtener la función deseada; mientras que en los métodos de Fourier, las iteraciones son un criterio de convergencia para reducir los errores producidos por los efectos de borde originados por aplicar la transformada de Fourier sobre datos no periódicos. Concretamente se ha estudiado el error producido (3.46) y el tiempo computacional empleado en función del número de iteraciones. La función que se ha empleado en la integración es descrita por (3.47) evaluada en $N_x = N_y = 128$ píxeles. La figura 3.21 corresponde al *rms* en función del número de iteraciones empleadas, representado en escala logarítmica. Se aprecia cómo el *rms* obtenido con los métodos de diferencias finitas prácticamente no varía con el número de iteraciones; por tanto, no es necesario un gran número de iteraciones para resolver el sistema lineal de ecuaciones en el que se relacionan los valores de la función deseada con los de sus derivadas.

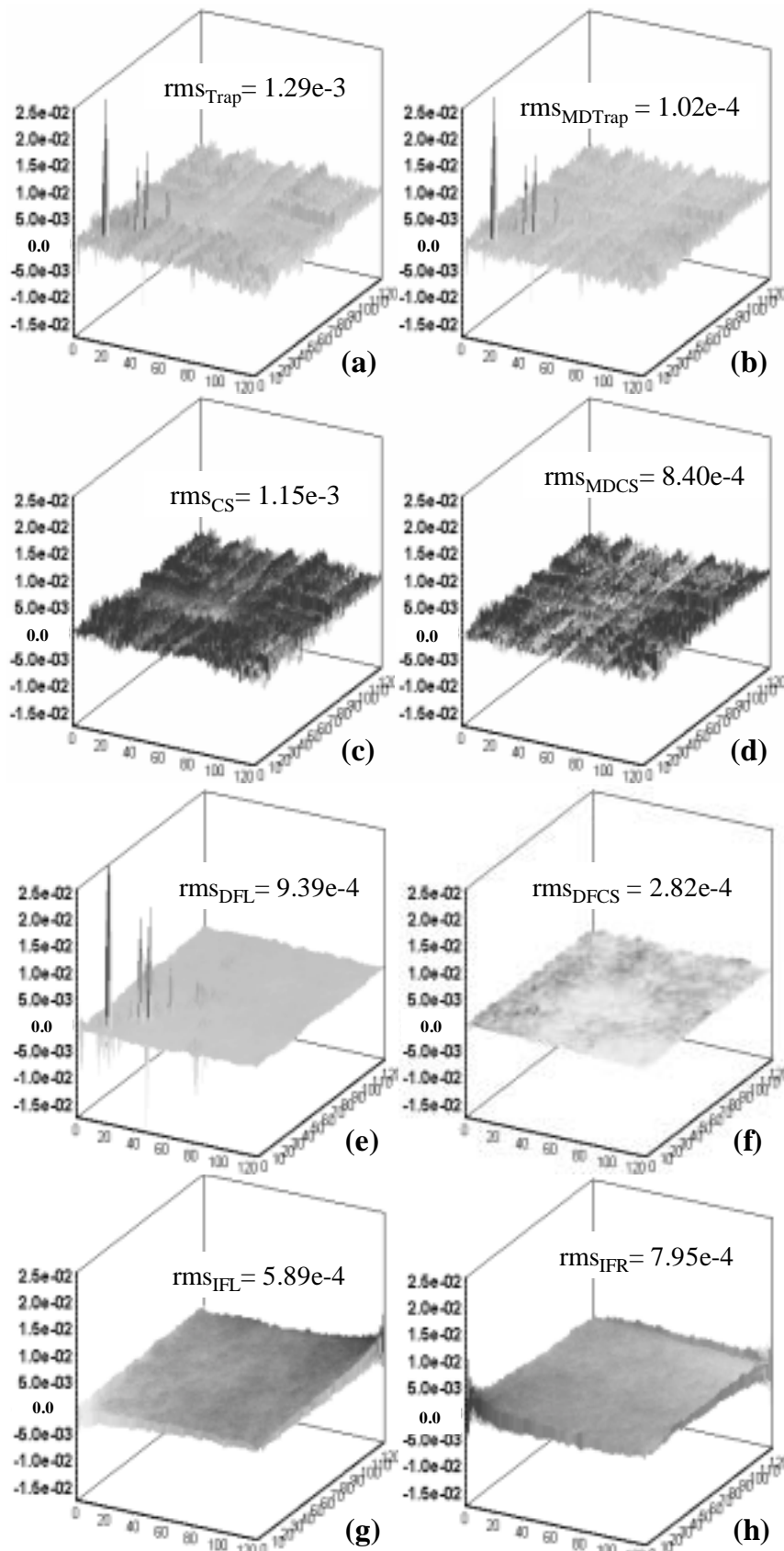


Figura 3.20: Mapa del error producido y valor del rms en la integración de las derivadas ruidosas mediante (a) el método *Trap*, (b) el método *MDTrap*, (c) el método *CS*, (d) el método *MDCS*, (e) el método *DFL*, (f) el método *DFCS*, (g) el método *IFL* y (h) el método *IFR*

Sin embargo, el comportamiento es diferente para los métodos basados en el dominio de Fourier. Se aprecia una tendencia decreciente del *rms* para pocas iteraciones; de hecho, a partir de 30 iteraciones, los métodos de Fourier ofrecen un *rms* prácticamente constante aunque su tendencia sigue siendo decreciente (a partir de la cuarta cifra significativa). Se aprecia, cómo a partir de 30 iteraciones, los métodos de Fourier funcionan mejor que el método *DFL*. Para mejorar el resultado que ofrece el método *DFCS* haría falta un gran número de iteraciones y aún así, los efectos de borde generados en los métodos de Fourier seguirían presentes.

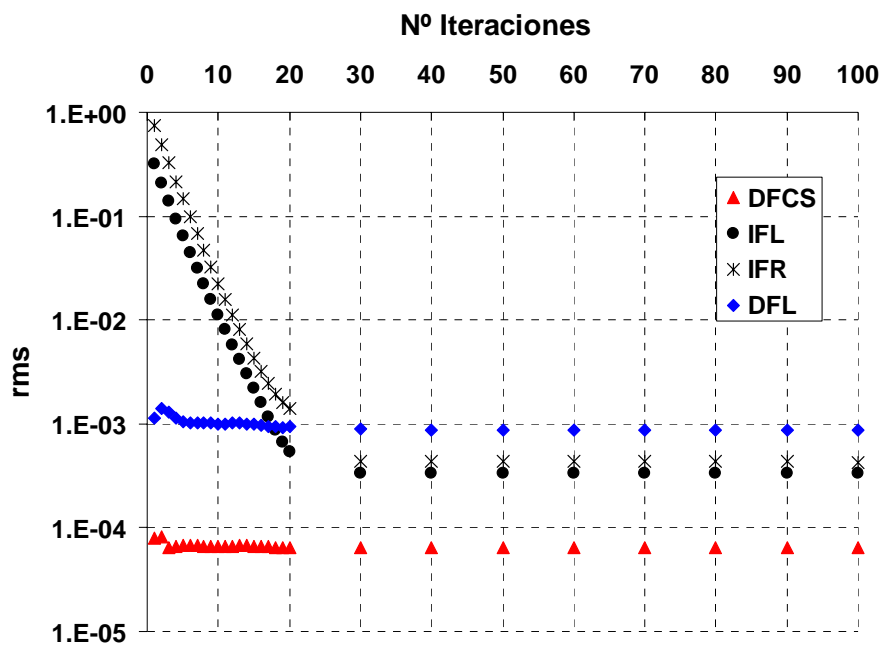


Figura 3.21. *rms* producido en la integración en función del número de iteraciones para los métodos basados en las diferencias finitas, *DFL* y *DFCS* y los métodos de Fourier, *IFL* y *IFR*.

La figura 3.22 muestra el tiempo computacional de la integración en función del número de iteraciones para los diferentes métodos iterativos de integración estudiados. La figura 3.22(a) corresponde a los métodos basados en el dominio de Fourier (*IFL* y *IFR*) mientras que la figura 3.22(b) hace referencia al tiempo computacional empleado en los métodos de las diferencias finitas (*DFL* y *DFCS*). De ambas figuras se observa que éstos últimos son extremadamente más rápidos que los de Fourier. De la figura 3.22(a) se observa que ambos métodos *IFL* y *IFR* emplean el mismo tiempo computacional, así, la mayoría del tiempo empleado lo invierten en los cálculos de las transformadas de Fourier independientemente de la extrapolación inicial de las derivadas. De la figura 3.22(b) se observa que los métodos *DFL* y *DFCS* emplean el

mismo tiempo computacional siendo ligeramente más rápido el que emplea una interpolación lineal de las derivadas. El resultado está de acuerdo con lo estudiado en el capítulo anterior ya que el cálculo de las “splines” cúbicas es más complejo que el ajuste mediante una función lineal.

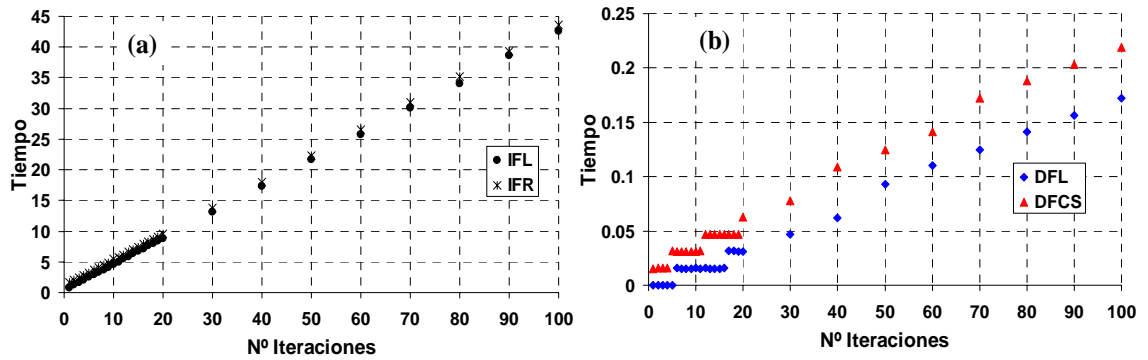


Figura 3.22. Tiempo computacional de la integración en función del número de iteraciones para (a) los métodos de Fourier, *IFL* y *IFCS* y (b) los métodos basados en las diferencias finitas, *DFL* y *DFCS*.

Capítulo 4. Diferentes métodos de integración bidimensional en coordenadas polares

Otra posibilidad de obtener información sobre las derivadas de la función deseada es mediante un muestreo polar. Realizando un cambio de coordenadas polares a cartesianas, los métodos estudiados en el capítulo anterior podrían servir para determinar la función. El problema del cambio de coordenadas es que puede introducir errores y aumenta el tiempo computacional del procesamiento de los datos experimentales. Así, es necesario el estudio de la integración numérica en un sistema de coordenadas polares.

Basándonos en el capítulo 3, se han extendido los métodos de integración al caso de coordenadas polares. El primer apartado estudia el método basado en las propiedades de un campo vectorial conservativo para el que la integral de línea a lo largo de un camino cerrado es cero. En el segundo apartado se presenta un método que minimiza la diferencia entre los valores obtenidos integrando radial y angularmente, obteniendo las constantes de integración. En el siguiente apartado se adaptan los métodos basados en las diferencias finitas estudiados en el capítulo 3. La particularidad del punto origen se ha tenido en cuenta en todos los métodos estudiados. Dicho punto se mide para todos los ángulos, y el valor de la función a obtener debe ser único. Esta consideración se ha tenido en cuenta en el diseño de los métodos de integración bidimensional en un sistema de coordenadas polares. Una vez descritos los métodos de integración, se comparan estudiando el caso de una señal periódica y una señal arbitraria.

4.1. Métodos basados en la integral de línea

Estos nuevos métodos se basan en las propiedades de un campo vectorial conservativo, tal y como se vio en el apartado 3.1 del anterior capítulo. La definición de campo vectorial es independiente del sistema de coordenadas; por tanto, en un sistema polar, la integral de línea de un campo vectorial conservativo, a lo largo de un camino cerrado, es nula. Interpretando las medidas experimentales como un campo vectorial bidimensional cuyas componentes son las derivadas parciales de la función a determinar, la propiedad de la integral de línea permite integrar las derivadas mediante los métodos unidimensionales del capítulo 2.

La integración se hace de manera unidimensional en las direcciones radial y angular. En la figura 4.1 se representa un punto P donde se desea determinar la función cuyas derivadas f^r y f^N se han obtenido en la dirección radial y su normal respectivamente.

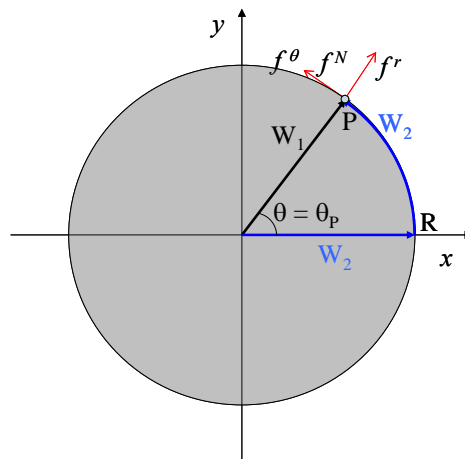


Figura 4.1. Dos caminos de integración diferentes para la evaluación de la integral de línea.

También se han representado dos posibles caminos de integración desde el origen de coordenadas hasta el punto P. El camino W1 recorre el eje radial de manera que sólo se realiza la integración en la dirección radial y el camino de integración W2 va a lo largo de la dirección angular y del eje radial necesitando así una única integración en la dirección radial como referencia. Así pues, es necesario conocer la derivada f^θ en la dirección angular que se obtiene a partir de la derivada normal f^N mediante el radio R como sigue:

$$f^\theta = Rf^N \quad (4.1)$$

Matemáticamente, la integración a lo largo del camino W1 viene dada por:

$$f(r, \theta) = \int_{r=0}^R f^r(r, \theta) dr, \quad (4.2)$$

donde r representa la coordenada radial, θ la coordenada angular, R el radio total y f^r es la derivada radial. La integración a lo largo del camino W2 viene dada por:

$$f(r, \theta) = \int_{r=0}^R f^r(r, 0) dr + \int_{\theta=0}^{\theta_p} f^N(r, \theta) R d\theta = \int_{r=0}^R f^r(r, 0) dr + \int_{\theta=0}^{\theta_p} f^\theta(r, \theta) d\theta, \quad (4.3)$$

donde f^r y f^N son las derivadas a lo largo de las direcciones radial y normal respectivamente y f^θ es la derivada respecto a la coordenada angular. En ambos casos, las integrales pueden realizarse mediante uno de los métodos de integración unidimensional explicados en el capítulo 2.

4.1.1. Integración radial

En la figura 4.2 se muestra un esquema en el que se aprecia la singularidad del origen. Inicialmente, para un ángulo $\theta = 0$ se integra radialmente obteniendo la función deseada en los puntos dibujados en azul de la figura 4.2. Se repite el procedimiento para diferentes ángulos θ y así se obtiene la función en los puntos de muestreo, como por ejemplo, los correspondientes a $\theta = \theta_p$ de la figura 4.2. Se aprecia como en el punto origen se mide tantas veces como el número de ángulos en el que se divide el muestreo, teniendo un punto especial de gran utilidad. Por tanto, este punto marca una diferencia entre el muestreo en coordenadas polares y cartesianas.

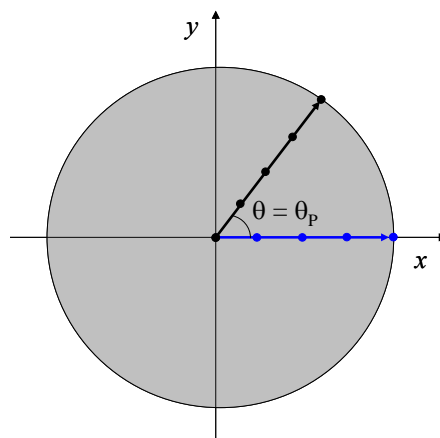


Figura 4.2. Singularidad del origen en la integración radial.

A continuación, se desarrolla un algoritmo en que se aprovecha la redundancia de muestreo en el punto origen para calcular las constantes de integración de cada uno de los perfiles obtenidos tras la integración unidimensional. Se define $f_{rad}(r, \theta)$ la función obtenida tras realizar la integración radial. Para cada ángulo de giro se calcula la siguiente expresión:

$$v_{\theta} = f_{rad}(0, \theta) - f_{rad}(0, 0) \quad \text{para } \theta = 0, \dots, N_{\theta} \quad , \quad (4.4)$$

de esta manera, se elimina cualquier posible discontinuidad que pueda darse al integrar más de una vez sobre el mismo punto origen; es decir, se sitúan todas las funciones radiales $f_{rad}(r, \theta)$ a la misma altura. Finalmente, la función obtenida viene dada por:

$$f(r, \theta) = f_{rad}(r, \theta) - v_{\theta} \quad \text{para } r = 0, \dots, N_r, \quad \theta = 0, \dots, N_{\theta} \quad . \quad (4.5)$$

En el caso real en que el ruido está presente en los valores de las derivadas obtenidos experimentalmente, el valor de v_{θ} de la expresión (4.4) se verá afectado e introducirá errores en la topografía final.

4.1.2. Integración angular

A partir de la ecuación (4.3) se deduce que para integrar en el eje angular es necesario realizar una integración radial de referencia. Así, habrá una línea de muestreo en la que se calcula la función mediante la integral radial lo que permite “nivelar” los diferentes perfiles unidimensionales obtenidos tras integrar en la dirección angular. Es decir, la integración radial permite calcular las constantes de integración de cada uno de los perfiles obtenidos en las integrales angulares. A continuación se desarrolla el procedimiento matemático implementado en el que se define $f_{rad}(r, \theta)$ y $f_{ang}(r, \theta)$ como las funciones obtenidas tras realizar la integración radial y angular respectivamente. Se calcula la diferencia entre los valores obtenidos al integrar en las dos direcciones:

$$v_r = f_{rad}(r, 0) - f_{ang}(r, 0) \quad \text{para } r = 0, \dots, N_r \quad , \quad (4.6)$$

de manera que la función final se obtiene a partir de los valores obtenidos en la integración angular y de la diferencia v_r de cada radio:

$$f(r, \theta) = f_{ang}(r, \theta) - v_r \quad \text{para } r = 0, \dots, N_r, \quad \theta = 0, \dots, N_\theta \quad (4.7)$$

De esta manera, se determinan las constantes de integración de los perfiles angulares siendo necesaria una única integración radial. Así, se impone que los perfiles angulares queden “nivelados” sin que haya ninguna discontinuidad. Al igual que en la integración radial, al tener ruido en las derivadas, la cantidad v_r calculada mediante (4.6) se verá afectada por el ruido y por tanto, las constantes de integración serán diferentes para cada perfil angular introduciendo un error en el resultado final.

4.2. Método basado en la minimización de la diferencia de la integración unidimensional en cada dirección

Con el objetivo de mejorar el cálculo de las constantes de integración, se ha desarrollado un método basado en la minimización de la diferencia entre los valores obtenidos integrando en las direcciones radial y angular. Consiste en encontrar las constantes de integración que minimizan esa diferencia. De esta manera se explota mejor la redundancia en las medidas. Así, en la dirección radial, se obtiene para cada ángulo θ , $f_{ang}(r) + c_\theta$ y en la dirección angular, se obtiene para cada radio r , $g_{rad}(\theta) + b_r$, tal y como se indica en la figura 4.3.

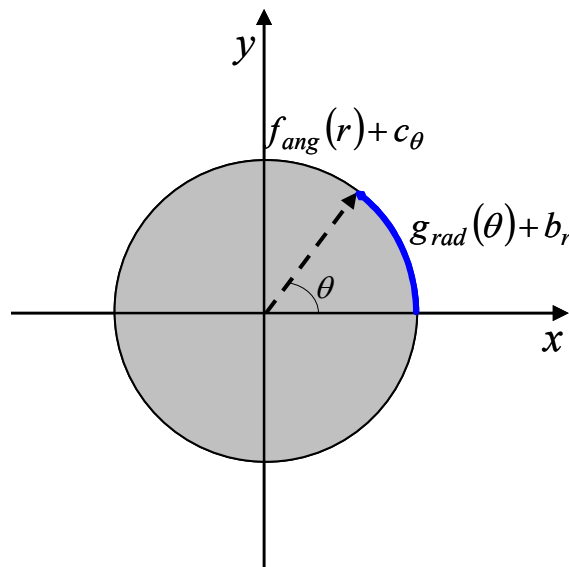


Figura 4.3. Integral de línea evaluada en las direcciones radial y angular, donde c_θ y b_r son las constantes a determinar.

Las dos funciones representadas en la figura 4.3 deben coincidir, y para ello, se minimiza la diferencia entre ellas, lo que permite encontrar las diferentes constantes c_θ y b_r . La diferencia entre los valores obtenidos viene dada por la siguiente expresión:

$$diferencia = \sum_{r,\theta} |f_{ang}(r) + c_\theta - g_{rad}(\theta) - b_r|^2 \quad (4.8)$$

De manera que sus derivadas respecto las constantes c_θ y b_r vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial diferencia}{\partial c_\theta} &= 2 \sum_r (f_{ang}(r) + c_\theta - g_{rad}(\theta) - b_r) \\ \frac{\partial diferencia}{\partial b_r} &= -2 \sum_\theta (f_{ang}(r) + c_\theta - g_{rad}(\theta) - b_r) \end{aligned} \quad (4.9)$$

y anulándolas se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales cuya solución son las constantes c_θ y b_r :

$$\begin{aligned} N_r c_\theta - \sum_r b_r &= \sum_r (g_{rad}(\theta) - f_{ang}(r)) \quad \text{para } \theta = 1, \dots, N_\theta \\ N_\theta b_r - \sum_\theta c_\theta &= \sum_\theta (f_{ang}(r) - g_{rad}(\theta)) \quad \text{para } r = 1, \dots, N_r \end{aligned} \quad (4.10)$$

que se escribe en forma matricial como sigue:

$$\begin{pmatrix} -1 & \dots & -1 & N_r & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & \dots & -1 & 0 & N_r & \dots & \dots & 0 \\ \cdot & & & & & & & \\ \cdot & & & & & & & \\ -1 & \dots & -1 & 0 & \dots & \dots & N_r & \\ N_\theta & \dots & \dots & 0 & -1 & \dots & \dots & -1 \\ 0 & N_\theta & \dots & \dots & 0 & -1 & \dots & -1 \\ \cdot & & & & & & & \\ \cdot & & & & & & & \\ 0 & \dots & \dots & N_\theta & -1 & \dots & \dots & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_{N_r} \\ c_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{N_\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_r (g_{rad}(1) - f_{ang}^1(r)) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \sum_r (g_{rad}(N_\theta) - f_{ang}^{N_\theta}(r)) \\ \sum_\theta (f_{ang}(1) - g_{rad}^1(\theta)) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \sum_\theta (f_{ang}(N_r) - g_{rad}^{N_r}(\theta)) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Para resolver el sistema de ecuaciones lineales (4.11) se ha impuesto la constante global c_l sea igual a cero. Al igual que en el caso de emplear coordenadas cartesianas, la resolución de dicho sistema de ecuaciones implica la inversión de una matriz (que sólo depende de las dimensiones de la función). Una vez encontradas las constantes de integración c_θ y b_r , la función final se calcula mediante una media entre los perfiles radiales y angulares según:

$$f(r, \theta) = \frac{1}{2} (f_{ang}(r) + c_\theta - g_{rad}(\theta) - b_r) . \quad (4.12)$$

4.3. Método basado en las diferencias finitas

A continuación, se adaptan los métodos basados en las diferencias finitas del capítulo 3 a la geometría en coordenadas polares.

4.3.1. Diferencias finitas con una interpolación lineal

Consideremos $f^r(r, \theta), f^\theta(r, \theta)$ las derivadas en la dirección radial y angular respectivamente. Se estudia el método basado en las diferencias finitas en el que se emplea una interpolación lineal de las derivadas (método *DFL*) adaptado para un sistema de coordenadas polares. Con este propósito, se dispone de una red como la representada en la figura 4.4, donde N_r y N_θ son el número de puntos donde las derivadas se miden en la dirección radial y angular respectivamente. Para abreviar la notación, a partir de ahora escribiremos $f(r, \theta)|_{n,m} = f_{nm}$ y $\frac{\partial f(r, \theta)}{\partial r}|_{n,m} = f_{nm}^r$ y de manera similar para la dirección angular $\frac{\partial f(r, \theta)}{\partial \theta}|_{n,m} = f_{nm}^\theta$. Del mismo modo al caso de coordenadas cartesianas, se supone que las derivadas entre dos puntos adyacentes e interiores de la red se interpolan linealmente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial r} &= f_{n,m}^r \left(1 - \frac{r}{a}\right) + f_{n+1,m}^r \frac{r}{a} \\ \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial \theta} &= f_{n,m}^\theta \left(1 - \frac{\theta}{b}\right) + f_{n,m+1}^\theta \frac{\theta}{b} , \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde a y b son las distancias entre los dos puntos adyacentes de la red (n, m) , $(n+1, m)$ en la dirección radial y (n, m) , $(n, m+1)$ en la dirección angular.

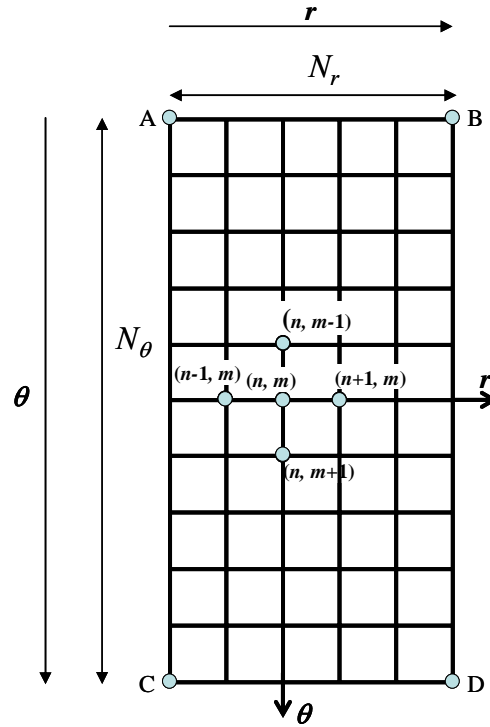


Figura 4.4. Red de puntos.

Integrando las ecuaciones (4.13) se obtiene:

$$\int_0^a \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial r} dr = \int_0^a \left\{ f_{n,m}^r \left(1 - \frac{r}{a}\right) + f_{n+1,m}^r \frac{r}{a} \right\} dr, \quad (4.14)$$

$$f_{n+1,m} - f_{n,m} = \frac{1}{2} (f_{n,m}^r + f_{n+1,m}^r) a ,$$

y de forma similar se obtiene la siguiente expresión para la dirección angular:

$$f_{n,m+1} - f_{n,m} = \frac{1}{2} (f_{n,m}^\theta + f_{n,m+1}^\theta) b . \quad (4.15)$$

De esta manera, para cada punto interior de la red se dispone de 4 ecuaciones asociadas a los 4 puntos adyacentes que tiene cada punto interior:

$$\begin{aligned}
f_{n+1m} - f_{nm} &= \frac{a}{2} (f_{n+1m}^r + f_{nm}^r) \\
f_{nm} - f_{n-1m} &= \frac{a}{2} (f_{nm}^r + f_{n-1m}^r) \\
f_{nm+1} - f_{nm} &= \frac{b}{2} (f_{nm+1}^\theta + f_{nm}^\theta) \\
f_{nm} - f_{nm-1} &= \frac{b}{2} (f_{nm}^\theta + f_{nm-1}^\theta) .
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Estas ecuaciones relacionan el valor de la función a determinar en el punto (n, m) con los valores de la función y de sus derivadas en los puntos adyacentes. Sumando adecuadamente las 4 ecuaciones de (4.16) se obtiene:

$$-f_{nm+1} - f_{n-1m} + 4f_{nm} - f_{n+1m} - f_{nm-1} = \frac{a}{2} (f_{n-1m}^r - f_{n+1m}^r) + \frac{b}{2} (f_{nm-1}^\theta - f_{nm+1}^\theta) . \tag{4.17}$$

La expresión (4.17) es válida para todos los puntos interiores de la red de muestreo. Así, resolviendo dicho sistema, se obtiene el valor de la función f en todos los puntos interiores.

Los puntos de los bordes o de los extremos de la red no tienen cuatro puntos adyacentes de manera que tan sólo alguna de las ecuaciones (4.16) tendrán sentido. En la figura 4.4. se ha representado una red de puntos donde N_r y N_θ son los puntos de medición en la dirección radial y angular respectivamente. Los cuatro puntos extremos A-D se han representado en la figura 4.4. A continuación se desarrolla cómo se modifica el método en estos puntos y en los puntos que forman los bordes de la red. Para ello, se debe tener en cuenta la periodicidad angular, $f_{n, N_\theta} = f_{n, 0}$.

Como ya se mencionó anteriormente, el punto origen será sobremuestreado de tal modo que se ha considerado que todos los puntos que unen los extremos A-C han de tomar el mismo valor. Así, se ha considerado que el valor de la función en el origen sea nulo. Y por tanto, para los puntos extremos A-C se impone que el valor de la función sea nulo:

$$\begin{aligned}
& f_{00} = 0 \quad , \\
\text{A - C :} & \qquad \qquad \qquad f_{0, N_\theta - 1} = 0 \quad .
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Los puntos extremos B y D disponen de tres puntos adyacentes: a su izquierda, por debajo y por encima (éste último debido a la periodicidad angular) y se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$B: -f_{N_r-2,0} + 3f_{N_r-1,0} - f_{N_r-1,1} - f_{N_r-1,N_\theta-2} = \frac{a}{2}(f_{N_r-1,0}^r + f_{N_r-2,0}^r) - \frac{b}{2}(f_{N_r-1,1}^\theta + f_{N_r-1,0}^\theta) + \frac{b}{2}(f_{N_r-1,N_\theta-1}^\theta + f_{N_r-1,N_\theta-2}^\theta), \quad (4.19)$$

$$D: -f_{N_r-1,N_\theta-2} + 3f_{N_r-1,N_\theta-1} - f_{N_r-2,N_\theta-1} - f_{N_r-1,0} = \frac{a}{2}(f_{N_r-1,N_\theta-1}^r + f_{N_r-2,N_\theta-1}^r) + \frac{b}{2}(f_{N_r-1,N_\theta-1}^\theta + f_{N_r-1,N_\theta-2}^\theta) - \frac{b}{2}(f_{N_r-1,0}^\theta + f_{N_r-1,N_\theta-1}^\theta).$$

Una vez estudiados los puntos extremos, a continuación se estudian los puntos que los unen, es decir, los puntos que configuran los bordes de la red de puntos de muestreo. Así, teniendo presente la periodicidad angular de las derivadas, los puntos que unen los extremos A-B y C-D disponen de cuatro puntos adyacentes. Para estos puntos, las ecuaciones (4.16) se escriben:

$$\begin{aligned} f_{n+10} - f_{n0} &= \frac{a}{2}(f_{n+10}^r + f_{n0}^r) \\ f_{n0} - f_{n-10} &= \frac{a}{2}(f_{n0}^r + f_{n-10}^r) \\ f_{n1} - f_{n0} &= \frac{b}{2}(f_{n1}^\theta + f_{n0}^\theta) \\ f_{n0} - f_{nN_\theta-1} &= \frac{b}{2}(f_{n0}^\theta + f_{nN_\theta-1}^\theta). \end{aligned} \quad (4.20)$$

La expresión general (4.17) se reescribe según la siguiente expresión:

$$AB: -f_{n-1,0} + 4f_{n,0} - f_{n,1} - f_{n+1,0} - f_{n,N_\theta-1} = \frac{a}{2}(f_{n,0}^r + f_{n-1,0}^r) - \frac{a}{2}(f_{n+1,0}^r + f_{n,0}^r) - \frac{b}{2}(f_{n,1}^\theta + f_{n,0}^\theta) + \frac{b}{2}(f_{n,0}^\theta + f_{nN_\theta-1}^\theta) = \frac{a}{2}(f_{n-1,0}^r - f_{n+1,0}^r) + \frac{b}{2}(f_{n,N_\theta-1}^\theta - f_{n,1}^\theta). \quad (4.21)$$

De manera similar, para los puntos que configuran el borde que une los puntos C y D se obtiene:

$$\begin{aligned} CD: & 4f_{n,N_\theta-1} - f_{n-1,N_\theta-1} + f_{n+1,N_\theta-1} - f_{n,N_\theta-2} - f_{n,0} = \\ & = \frac{a}{2}(f_{n,N_\theta-1}^r + f_{n-1,N_\theta-1}^r) - \frac{a}{2}(f_{n+1,N_\theta-1}^r + f_{n,N_\theta-1}^r) + \frac{b}{2}(f_{n,N_\theta-1}^\theta + f_{n,N_\theta-2}^\theta) - \frac{b}{2}(f_{n,N_\theta-1}^\theta + f_{n,0}^\theta) = \\ & = \frac{a}{2}(f_{n-1,N_\theta-1}^r - f_{n+1,N_\theta-1}^r) + \frac{b}{2}(f_{n,N_\theta-2}^\theta - f_{n,0}^\theta), \quad n = 0, \dots, N_r - 1. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Los puntos que unen los extremos A-C corresponden al punto origen medido para diferentes ángulos θ . Como ya se mencionó anteriormente, el punto origen será sobremuestreado y todos los puntos que unen los extremos A-C toman el mismo valor que se ha considerado nulo. Finalmente aquellos puntos que unen los extremos B-D disponen de tres puntos adyacentes. Para encontrar la expresión general (4.17) tan solo habrá tres aportaciones de las ecuaciones (4.16). De esta manera, se encuentran las siguientes expresiones para los puntos que unen A-C y B-D:

$$\begin{aligned}
 AC: \quad & f_{0m} = 0, \quad m=0, \dots, N_\theta - 1 \\
 BD: \quad & 3f_{N_r-1,m} - f_{N_r-2,m} - f_{N_r-1,m+1} + f_{N_r-1,m-1} = -\frac{a}{2}(f_{N_r-1,m}^r + f_{N_r-2,m}^r) + \frac{b}{2}(f_{N_r-1,m+1}^\theta + f_{N_r-1,m}^\theta) \\
 & -\frac{b}{2}(f_{N_r-1,m}^\theta + f_{N_r-1,m-1}^\theta) = \\
 & = -\frac{a}{2}(f_{N_r-1,m}^r + f_{N_r-2,m}^r) + \frac{b}{2}(f_{N_r-1,m+1}^\theta - f_{N_r-1,m-1}^\theta) \quad m=0, \dots, N_\theta - 1
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Así, para cada punto se obtiene un sistema lineal de ecuaciones en el que se relaciona los valores de la función a determinar con los de sus derivadas conocidas. Para resolver el sistema se ha utilizado el mismo método iterativo que se presentó en el capítulo anterior. Indicando el número de la iteración mediante el superíndice j , la ecuación (4.17) se escribe según:

$$4f_{nm}^{j+1} = f_{nm+1}^j + f_{n-1m}^j + f_{n+1m}^j + f_{nm-1}^j + \frac{a}{2}(f_{n-1m}^r - f_{n+1m}^r) + \frac{b}{2}(f_{nm-1}^\theta - f_{nm+1}^\theta), \tag{4.24}$$

en la que se calcula el valor de la función en el píxel (n, m) en la iteración $j+1$ a partir de los valores de la función en los píxeles vecinos de la iteración anterior j y de los valores de las derivadas medidas.

Para mejorar la convergencia del método, se ha definido un término v a partir de la expresión (4.24):

$$4v = f_{nm+1}^j + f_{n-1m}^j + f_{n+1m}^j + f_{nm-1}^j + \frac{a}{2}(f_{n-1m}^r - f_{n+1m}^r) + \frac{b}{2}(f_{nm-1}^\theta - f_{nm+1}^\theta), \tag{4.25}$$

que permite calcular f_{nm} mediante:

$$f_{nm}^{j+1} = f_{nm}^j + \text{factor}(v - f_{nm}^j), \quad (4.26)$$

siendo *factor* un factor de convergencia.

4.3.2. Diferencias finitas con una interpolación por “splines” cúbicas

Al igual que en el capítulo 3, se propone una variante del método anterior que consiste en mejorar la interpolación de las derivadas mediante las “splines” cúbicas. En el capítulo 2 se demostró, calculando la función de transferencia, que el método que ajusta las derivadas mediante “splines” cúbicas para la posterior integración analítica es el método más próximo al ideal (método de Fourier). Así, para cada fila, los valores muestreados de la derivada radial se ajustan a una “spline” cúbica y lo mismo se hace con los valores de la derivada angular obtenidos para cada columna, tal y como se muestra a continuación:

$$\left. \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial r} \right|_{\theta=m} = S_m^r(r) = \sum_n S_{n,m}^r(r) = \sum_n s_{n,m}^0 + s_{n,m}^1(r - r_n) + s_{n,m}^2(r - r_n)^2 + s_{n,m}^3(r - r_n)^3, \quad (4.27)$$

$$\left. \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial \theta} \right|_{r=n} = S_n^\theta(\theta) = \sum_m S_{n,m}^\theta(\theta) = \sum_m c_{n,m}^0 + c_{n,m}^1(\theta - \theta_m) + c_{n,m}^2(\theta - \theta_m)^2 + c_{n,m}^3(\theta - \theta_m)^3, \quad (4.28)$$

donde $r \in [r_n, r_{n+1}]$ con $n = 0, \dots, N_r - 1$ siendo N_r el número de puntos de medida en la dirección radial, $s_{n,m}^0, s_{n,m}^1, s_{n,m}^2, s_{n,m}^3$ los coeficientes para cada polinomio cúbico $S_{n,m}^r(r)$ con $m = 0, \dots, N_\theta - 1$ siendo N_θ el número de puntos de medición en la dirección angular. Similarmente, $\theta \in [\theta_m, \theta_{m+1}]$ con $m = 0, \dots, N_\theta - 1$ y $c_{n,m}^0, c_{n,m}^1, c_{n,m}^2, c_{n,m}^3$ son los coeficientes de cada polinomio cúbico $S_{n,m}^\theta(\theta)$ que se calculan teniendo presente que la suma de todos ellos $S_n^\theta(\theta)$ es periódica a lo largo de la dirección angular, y por tanto, debe cumplirse que $S_n^\theta(0) = S_n^\theta(2\pi)$ para todo n .

Así, integrando (4.27) y (4.28) se obtiene:

$$\int_{r_n}^{r_{n+1}} S_m^r(r)dr = \int_{r_n}^{r_{n+1}} S_{n,m}^r(r)dr = \int_{r_n}^{r_{n+1}} s_{n,m}^0 + s_{n,m}^1(r-r_n) + s_{n,m}^2(r-r_n)^2 + s_{n,m}^3(r-r_n)^3 dr, \quad (4.29)$$

$$f_{n+1,m} - f_{n,m} = s_{n,m}^0 a + s_{n,m}^1 \frac{a^2}{2} + s_{n,m}^2 \frac{a^3}{3} + s_{n,m}^3 \frac{a^4}{4},$$

$$\int_{\theta_m}^{\theta_{m+1}} S_n^\theta(\theta)d\theta = \int_{\theta_m}^{\theta_{m+1}} S_{n,m}^\theta(\theta)d\theta = \int_{\theta_m}^{\theta_{m+1}} c_{n,m}^0 + c_{n,m}^1(\theta-\theta_m) + c_{n,m}^2(\theta-\theta_m)^2 + c_{n,m}^3(\theta-\theta_m)^3 d\theta, \quad (4.30)$$

$$f_{n,m+1} - f_{n,m} = c_{n,m}^0 b + c_{n,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m}^3 \frac{b^4}{4},$$

con a y b las distancias entre dos puntos adyacentes de la red de puntos en la dirección radial y angular respectivamente. Al igual que en el método anterior, se obtiene el siguiente sistema lineal de ecuaciones para puntos interiores de la red:

$$\begin{aligned} f_{n+1,m} - f_{n,m} &= s_{n,m}^0 a + s_{n,m}^1 \frac{a^2}{2} + s_{n,m}^2 \frac{a^3}{3} + s_{n,m}^3 \frac{a^4}{4} \\ f_{n,m} - f_{n-1,m} &= s_{n-1,m}^0 a + s_{n-1,m}^1 \frac{a^2}{2} + s_{n-1,m}^2 \frac{a^3}{3} + s_{n-1,m}^3 \frac{a^4}{4} \\ f_{n,m+1} - f_{n,m} &= c_{n,m}^0 b + c_{n,m}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m}^3 \frac{b^4}{4} \\ f_{n,m} - f_{n,m-1} &= c_{n,m-1}^0 b + c_{n,m-1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,m-1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,m-1}^3 \frac{b^4}{4}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Sumando las ecuaciones (4.31) se obtiene:

$$\begin{aligned} -f_{n-1,m} - f_{n+1,m} + 4f_{n,m} - f_{n,m-1} - f_{n,m+1} &= \\ = (s_{n-1,m}^0 - s_{n,m}^0)a + (s_{n-1,m}^1 - s_{n,m}^1)\frac{a^2}{2} + (s_{n-1,m}^2 - s_{n,m}^2)\frac{a^3}{3} + (s_{n-1,m}^3 - s_{n,m}^3)\frac{a^4}{4} + \\ (c_{n,m-1}^0 - c_{n,m}^0)b + (c_{n,m-1}^1 - c_{n,m}^1)\frac{b^2}{2} + (c_{n,m-1}^2 - c_{n,m}^2)\frac{b^3}{3} + (c_{n,m-1}^3 - c_{n,m}^3)\frac{b^4}{4}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

La expresión (4.32) representa un sistema de ecuaciones lineales mediante las que se relaciona el valor de la función en un punto interior (n, m) con los valores de la función y de sus derivadas en los puntos adyacentes. La dependencia con los valores de la derivada se encuentra en los coeficientes tal y como se vio en el capítulo 2 (ver expresiones (2.12)-(2.16)).

Al igual que en el caso anterior, los puntos que unen los extremos A-C tienen el mismo valor de manera que estén al mismo nivel que el origen cuyo valor de la función se ha considerado nulo. Y por tanto, para los puntos extremos A y C se impone que el valor de la función sea nulo:

$$\begin{aligned} f_{00} &= 0 \quad , \\ \text{A - C:} \quad f_{0, N_\theta - 1} &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.33)$$

Para los puntos extremos B y D se disponen de tres puntos adyacentes: a su izquierda, por debajo y por encima (éste último debido a la periodicidad angular) y se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} B: -f_{N_\theta - 20} + 3f_{N_\theta - 40} - f_{N_\theta - 11} - f_{N_\theta - 1, N_\theta - 1} &= \left\{ s_{N_\theta - 20, 0}^0 a + s_{N_\theta - 20}^1 \frac{a^2}{2} + s_{N_\theta - 20}^2 \frac{a^3}{3} + s_{N_\theta - 20}^3 \frac{a^4}{4} \right\} - \\ &\quad - \left\{ c_{0,0}^0 b + c_{0,0}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0,0}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0,0}^3 \frac{b^4}{4} \right\} + \left\{ c_{0, N_\theta - 1}^0 b + c_{0, N_\theta - 1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0, N_\theta - 1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0, N_\theta - 1}^3 \frac{b^4}{4} \right\} \\ C: -f_{0, N_\theta - 2} + 3f_{0, N_\theta - 1} - f_{1, N_\theta - 1} - f_{0,0} &= \left\{ s_{0, N_\theta - 1}^0 a + s_{0, N_\theta - 1}^1 \frac{a^2}{2} + s_{0, N_\theta - 1}^2 \frac{a^3}{3} + s_{0, N_\theta - 1}^3 \frac{a^4}{4} \right\} - \\ &\quad - \left\{ c_{0, N_\theta - 1}^0 b + c_{0, N_\theta - 1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0, N_\theta - 1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0, N_\theta - 1}^3 \frac{b^4}{4} \right\} + \left\{ c_{0, N_\theta - 2}^0 b + c_{0, N_\theta - 2}^1 \frac{b^2}{2} + c_{0, N_\theta - 2}^2 \frac{b^3}{3} + c_{0, N_\theta - 2}^3 \frac{b^4}{4} \right\}, \quad (4.34) \\ D: -f_{N_\theta - 1, N_\theta - 2} + 3f_{N_\theta - 1, N_\theta - 1} - f_{N_\theta - 2, N_\theta - 1} - f_{N_\theta - 1, 0} &= \left\{ s_{N_\theta - 2, N_\theta - 1}^0 a + s_{N_\theta - 2, N_\theta - 1}^1 \frac{a^2}{2} + s_{N_\theta - 2, N_\theta - 1}^2 \frac{a^3}{3} + s_{N_\theta - 2, N_\theta - 1}^3 \frac{a^4}{4} \right\} - \\ &\quad - \left\{ c_{0, N_\theta - 1, N_\theta - 1}^0 b + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 1}^3 \frac{b^4}{4} \right\} + \\ &\quad + \left\{ c_{N_\theta - 1, N_\theta - 2}^0 b + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 2}^1 \frac{b^2}{2} + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 2}^2 \frac{b^3}{3} + c_{N_\theta - 1, N_\theta - 2}^3 \frac{b^4}{4} \right\}. \end{aligned}$$

Considerando la periodicidad angular de las derivadas, los puntos que unen los extremos A-B y C-D disponen de cuatro puntos adyacentes. Para los puntos que suponen el borde que une A y B, las ecuaciones (4.31) se escriben según:

$$\begin{aligned} f_{n+10} - f_{n0} &= s_{n,0}^0 a + s_{n,0}^1 \frac{a^2}{2} + s_{n,0}^2 \frac{a^3}{3} + s_{n,0}^3 \frac{a^4}{4} \\ f_{n0} - f_{n-10} &= s_{n-1,0}^0 a + s_{n-1,0}^1 \frac{a^2}{2} + s_{n-1,0}^2 \frac{a^3}{3} + s_{n-1,0}^3 \frac{a^4}{4} \\ f_{n1} - f_{n0} &= c_{n,0}^0 b + c_{n,0}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n,0}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n,0}^3 \frac{b^4}{4} \\ f_{n0} - f_{n, N_\theta - 1} &= c_{n, N_\theta - 1}^0 b + c_{n, N_\theta - 1}^1 \frac{b^2}{2} + c_{n, N_\theta - 1}^2 \frac{b^3}{3} + c_{n, N_\theta - 1}^3 \frac{b^4}{4} \quad , \end{aligned} \quad (4.35)$$

y la expresión general (4.32) se escribe como sigue:

$$\begin{aligned}
 AB: & -f_{n-1,0} - f_{n+1,0} + 4f_{n,0} - f_{n,N_\theta-1} - f_{n,1} = \\
 & = (s_{n-1,0}^0 - s_{n,0}^0)a + (s_{n-1,0}^1 - s_{n,0}^1)\frac{a^2}{2} + (s_{n-1,0}^2 - s_{n,0}^2)\frac{a^3}{3} + (s_{n-1,0}^3 - s_{n,0}^3)\frac{a^4}{4} + \\
 & (c_{n,N_\theta-1}^0 - c_{n,0}^0)b + (c_{n,N_\theta-1}^1 - c_{n,0}^1)\frac{b^2}{2} + (c_{n,N_\theta-1}^2 - c_{n,0}^2)\frac{b^3}{3} + (c_{n,N_\theta-1}^3 - c_{n,0}^3)\frac{b^4}{4} .
 \end{aligned} \quad (4.36)$$

De manera similar, para los puntos que configuran el borde que une los puntos C y D se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & -f_{n-1,N_\theta-1} - f_{n+1,N_\theta-1} + 4f_{n,N_\theta-1} - f_{n,N_\theta-2} - f_{n,0} = \\
 & = (s_{n-1,N_\theta-1}^0 - s_{n,N_\theta-1}^0)a + (s_{n-1,N_\theta-1}^1 - s_{n,N_\theta-1}^1)\frac{a^2}{2} + (s_{n-1,N_\theta-1}^2 - s_{n,N_\theta-1}^2)\frac{a^3}{3} + (s_{n-1,N_\theta-1}^3 - s_{n,N_\theta-1}^3)\frac{a^4}{4} + \\
 & (c_{n,N_\theta-2}^0 - c_{n,N_\theta-1}^0)b + (c_{n,N_\theta-2}^1 - c_{n,N_\theta-1}^1)\frac{b^2}{2} + (c_{n,N_\theta-2}^2 - c_{n,N_\theta-1}^2)\frac{b^3}{3} + (c_{n,N_\theta-2}^3 - c_{n,N_\theta-1}^3)\frac{b^4}{4} .
 \end{aligned} \quad (4.37)$$

Finalmente, el borde A-C corresponde al punto origen y se impone que la función tome el mismo valor en todo el borde de manera análoga al apartado anterior. Por otro lado, para aquellos puntos que unen los extremos B-D sólo tienen tres puntos adyacentes con lo que la expresión (4.32) vendrá dada por:

$$\begin{aligned}
 AC: & f_{0m} = 0, \quad m=0, \dots, N_\theta-1 \\
 BD: & 3f_{N_r-1,m} - f_{N_r-2,m} - f_{N_r-1,m+1} + f_{N_r-1,m-1} = s_{N_r-2,m}^0 a + s_{N_r-2,m}^1 \frac{a^2}{2} + s_{N_r-2,m}^2 \frac{a^3}{3} + s_{N_r-2,m}^3 \frac{a^4}{4} + \\
 & + (c_{N_r-1,m-1}^0 - c_{N_r-1,m}^0)b + (c_{N_r-1,m-1}^1 - c_{N_r-1,m}^1)\frac{b^2}{2} + \\
 & + (c_{N_r-1,m-1}^2 - c_{N_r-1,m}^2)\frac{b^3}{3} + (c_{N_r-1,m-1}^3 - c_{N_r-1,m}^3)\frac{b^4}{4} \quad m=0, \dots, N_\theta-1.
 \end{aligned} \quad (4.38)$$

Así, para cada punto (n, m) se obtiene un sistema lineal de ecuaciones en las que se relaciona el valor de la función a determinar en el punto (n, m) con los valores de la función y de sus derivadas en sus puntos adyacentes. El sistema de ecuaciones se resuelve con el método iterativo (4.26) y se determina la función deseada en los puntos de medición.

4.4. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal periódica

A continuación se presentan resultados numéricos obtenidos con los métodos explicados en los apartados anteriores. Para comparar la precisión de los diferentes métodos de integración se ha implementado una señal periódica presente que en el origen ($r = 0$) la función debe ser nula tal y como se han definido la integral radial (4.4)-(4.5) y angular (4.6)-(4.7). Así, la señal sinusoidal y sus derivadas se han generado mediante:

$$\begin{aligned}
 f_{nm} &= \left[1 - \cos\left(2\pi p_r \frac{n}{N_r}\right) \right] \sin\left(2\pi p_\theta \frac{m}{N_\theta}\right) \\
 f_{nm}^r &= 2\pi p_r \sin\left(2\pi p_r \frac{n}{N_r}\right) \sin\left(2\pi p_\theta \frac{m}{N_\theta}\right) \\
 f_{nm}^\theta &= 2\pi p_\theta \left[1 - \cos\left(2\pi p_r \frac{n}{N_r}\right) \right] \cos\left(2\pi p_\theta \frac{m}{N_\theta}\right).
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

donde N_r y N_θ corresponden al número de píxeles en cada dirección donde las señales han sido evaluadas, p_r y p_θ corresponde al parámetro de frecuencia de la señal sinusoidal en cada dirección. La frecuencia normalizada viene dada por $2p_r/N_r$ o $2p_\theta/N_\theta$ de acuerdo a la dirección. Las funciones obtenidas mediante los métodos estudiados se han comparado con la señal generada analíticamente calculando el error de integración mediante:

$$rms = \sqrt{\frac{1}{N_r N_\theta} \sum_{n,m}^{N_r, N_\theta} |f_{nm}^i - f_{nm}^0|^2} \tag{4.40}$$

donde f^i es la función integrada y f^0 es la función original.

Derivadas no ruidosas

La figura 4.5 muestra el error de integración en función de la frecuencia normalizada. La figura 4.5(a) corresponde al error obtenido mediante los métodos basados en la regla del Trapecio mientras que la figura 4.5(b) corresponde a los métodos en que se emplean las “splines” cúbicas. Los métodos se han aplicado en el caso ideal en que las derivadas

analíticas no presentan ruido y son: a) los basados en la integral de línea aplicando la regla de Trapecio (*Trap_Rad* y *Trap_Ang*) o la interpolación por “splines” cúbicas (*CS_Rad* y *CS_Ang*) en la dirección radial y angular respectivamente; b) la minimización de la diferencia entre las funciones obtenidas mediante la integración unidimensional con la regla del Trapecio (*MDTrap*) y con el ajuste por “splines” cúbicas (*MDCS*) y c) los métodos basados en las diferencias finitas *DFL* y *DFCS* según el ajuste de las derivadas. En este experimento las señales han sido evaluadas en $N_r = N_\theta = 256$ píxeles, se ha considerado el mismo parámetro frecuencias en ambas direcciones $p_r = p_\theta$ y en los métodos de las diferencias finitas se han utilizado 100 iteraciones. De la figura 4.5(a) se observa que todos los métodos ofrecen el mismo error; por tanto, no hay diferencias entre los diferentes métodos basados en la regla del Trapecio en el caso ideal de derivadas generadas analíticamente. El mismo comportamiento tienen los métodos basados en las “splines” cúbicas aunque el método de la integral de línea en la dirección angular (*CS_Ang*) difiere ligeramente aumentando el error de integración. Al igual que el caso de coordenadas cartesianas, a bajas frecuencias el error obtenido es bajo y a medida que aumenta la frecuencia de la senoide éste aumenta, es decir, los diferentes métodos reproducen con precisión señales de baja frecuencia pero dejan de ser precisos para señales de alta frecuencia. Comparando los resultados de las figuras 4.5(a) y (b), se aprecia que los métodos que emplean una interpolación lineal (figura 4.5(a)) ofrecen errores más altos que los obtenidos mediante los métodos que emplean una interpolación por “splines” cúbicas (figura 4.5(b)), de acuerdo con los resultados del capítulo anterior. Así se concluye la importancia de conseguir la interpolación de la derivada más precisa posible.

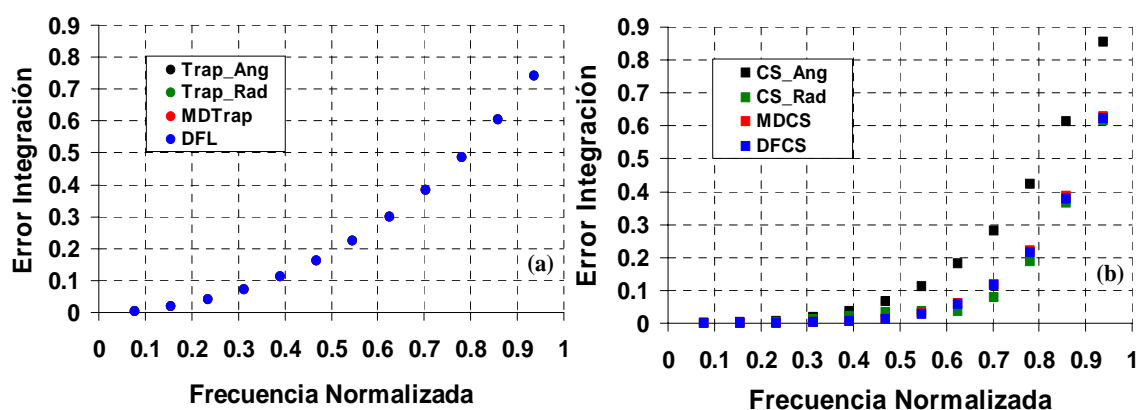


Figura 4.5. Error de integración en función de la frecuencia normalizada de la función sinusoidal a obtener a partir de las derivadas mediante los métodos de integración: (a) *Trap_Ang*, *Trap_Rad*, *MDTrap* y *DFL* y (b) *CS_Ang*, *CS_Rad*, *MDCS* y *DFCS*.

Derivadas ruidosas

Para apreciar la diferencia entre los diferentes métodos de integración presentados, el experimento se ha repetido añadiendo a las derivadas analíticas un ruido gaussiano de varianza 0.25 y valor medio nulo. La figura 4.6 muestra la comparación del error de integración en función de la frecuencia normalizada de la señal sinusoidal a reconstruir a partir de sus derivadas ruidosas. En la figura 4.6(a) se comparan los métodos basados en la regla del Trapecio mientras que en la figura 4.6(b) se muestran los métodos basados en las “splines” cúbicas. En ambos casos, en la región de bajas frecuencias se observa una diferencia entre los métodos basados en la integral de línea y los que minimizan la diferencia entre las integrales según la dirección; se aprecia que éstos últimos ofrecen mejores resultados que los primeros siendo más precisa la minimización de la diferencia entre los valores obtenidos en cada dirección ya que permiten encontrar las constantes de integración para cada fila y columna. A medida que aumenta la frecuencia de la señal sinusoidal la diferencia entre los métodos va disminuyendo. De todas maneras, los métodos basados en las diferencias finitas superan en precisión a los anteriores, siendo mejor el que emplea el ajuste por “splines” cúbicas, *DFCS*. De todas maneras, el método *DFCS* es el que ofrece mejores resultados. Los resultados son análogos a los obtenidos en coordenadas cartesianas.

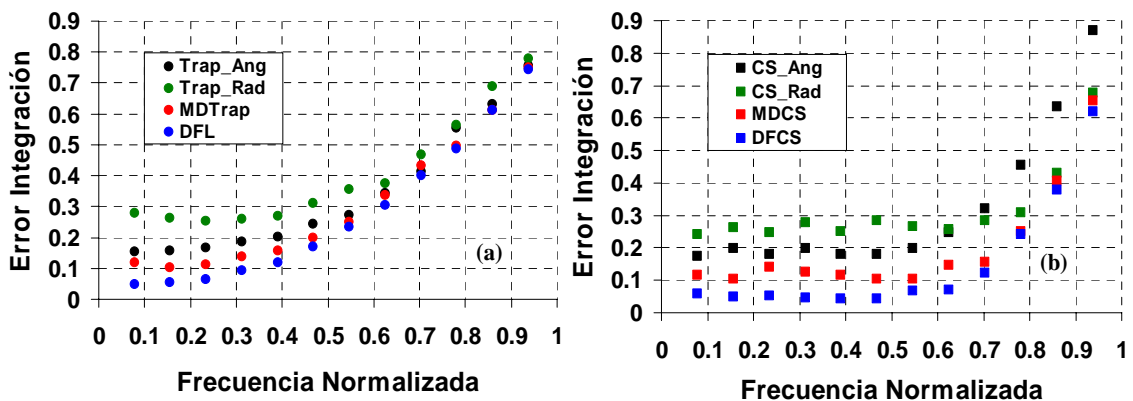


Figura 4.6. Error de integración en función de la frecuencia normalizada de la función sinusoidal a obtener a partir de las derivadas con ruido gaussiano, varianza 0.25 y valor medio nulo mediante los métodos de integración: (a) *Trap_Ang*, *Trap_Rad*, *MDTrap* y *DFL* y (b) *CS_Ang*, *CS_Rad*, *MDCS* y *DFCS*.

Derivadas no ruidosas con un defecto tipo delta

Se ha realizado otro experimento numérico para determinar qué método atenúa mejor los defectos locales que puedan encontrarse en las derivadas como por ejemplo, pequeñas motas de polvo, rayaduras, defectos de fabricación,... De manera similar al

caso de coordenadas cartesianas, se ha realizado una simulación numérica sumando un defecto en las derivadas sin ruido, situado a $3/4$ partes del dominio en ambas direcciones. En este experimento las señales han sido implementadas mediante la ecuación (4.49) en $N_r = N_\theta = 128$ píxeles y con un parámetro de frecuencia $p = 10$, de modo que la frecuencia normalizada es 0.156, correspondiendo a baja frecuencia. La figura 4.7 muestra un ejemplo de la propagación del error de estos métodos. La columna izquierda de la figura corresponde a los métodos en que se emplea la regla del Trapecio: (a) *Trap_Ang*, (c) *Trap_Rad*, (e) *MDTrap* y (g) *DFL*; mientras que la columna de la derecha hace referencia a los métodos basados en las “splines” cúbicas: (b) *CS_Ang*, (d) *CS_Rad*, (f) *MDCS* y (h) *DFCS*. Como es de esperar, los métodos basados en “splines” cúbicas responden mejor (figura 4.5) eliminando la forma sinusoidal que ofrecen los métodos lineales tal y como se aprecia en las figuras 4.7(a)-(c)-(e)-(g). Para los métodos basados en la integral de línea, se aprecia que el error se propaga a lo largo del camino de integración de forma diferente: en la integración angular, la propagación del error introducido por el defecto delta afecta a todo el camino de integración ya que la presencia de la delta hace que la expresión (4.6) $v_r = f_{rad}(r,0) - f_{ang}(r,0)$ sea diferente para el píxel donde se ha situado la delta. De esta forma el perfil final calculado mediante la expresión (4.6) se verá afectado a lo largo de todo el camino de integración que pasa por el píxel donde se ha situado la delta. Sin embargo, en la integración radial, el error que introduce el defecto afecta a partir del mismo, es decir, no afecta a todo el camino de integración; tan sólo afecta a los valores de la función a partir de los píxeles donde se ha situado el defecto delta debido a las expresiones 4.5 y 4.6. De las figuras 4.7(e) y (f) se aprecia que los métodos que minimizan la diferencia entre los valores obtenidos integrando en cada dirección mejoran ligeramente los resultados de los métodos de integral de línea ya que son más precisos al calcular las constantes de integración. Al emplear las diferencias finitas, el error debido a la función delta (defecto añadido a las derivadas) permanece local, alrededor de la posición original del defecto. Así para un muestreo en coordenadas polares, estos métodos ofrecen mejor resultado para el error de integración; y si es posible, el método mejora si previamente se interpolan las derivadas por “splines” cúbicas, de forma similar al caso de coordenadas cartesianas.

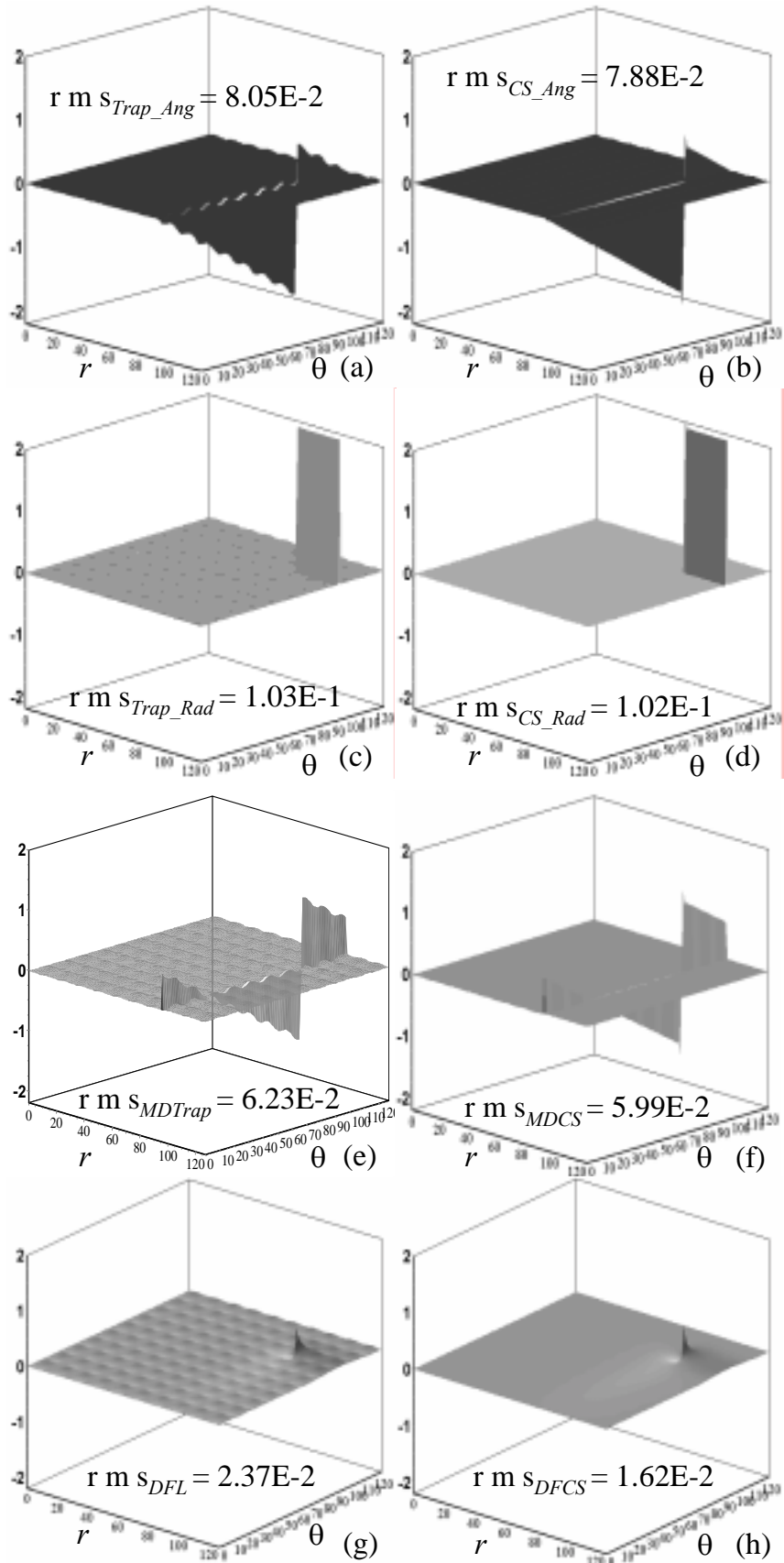


Figura 4.7. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del rms cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas a las que se le ha sumado un defecto (función delta) mediante los métodos basados en la regla del Trapecio: (a) $Trap_Ang$, (c) $Trap_Rad$, (e) $MDTrap$, (g) DFL y los basados en las “splines cúbicas: (b) CS_Ang , (d) CS_Rad , (f) $MDCS$ y (h) $DFCS$.

4.5. Comparación de los diferentes métodos de integración con una señal arbitraria

Una vez estudiado el caso de una señal periódica, a continuación se estudia el caso de una señal arbitraria. Para ello, se ha implementado una función f_{nm} analítica con el objetivo de determinar la precisión de los métodos de integración descritos. La función analítica y sus derivadas vienen dadas por:

$$\begin{aligned}
 f_{nm} &= \left[\left(\frac{n}{N_r} \right)^2 + \frac{5}{N_r} \exp\{-10(n - N_r + 1)^2\} \right] \sin\left(\frac{m}{N_\theta} \right) \\
 f_{nm}^r &= 2 \sin\left(\frac{m}{N_\theta} \right) \left[\frac{n}{N_r} \sin\left(\frac{m}{N_\theta} \right) - 50 \left(\frac{2n - N_r + 1}{N_r} \right) \exp\{-10(n - N_r + 1)^2\} \right] \\
 f_{nm}^\theta &= \left[2 \left(\frac{n}{N_r} \right)^2 \sin\left(\frac{m}{N_\theta} \right) + \frac{5}{N_r} \exp\{-10(n - N_r + 1)^2\} \right] \cos\left(\frac{m}{N_\theta} \right).
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

La figura 4.8 muestra la función y sus derivadas; la figura 4.8(a) y (b) corresponden a las derivadas radial y angular respectivamente y la figura 4.8(c) a función original generada analíticamente. Las tres funciones se han evaluado en $N_r = 64$ píxeles en la dirección radial y $N_\theta = 128$ píxeles en la dirección angular.

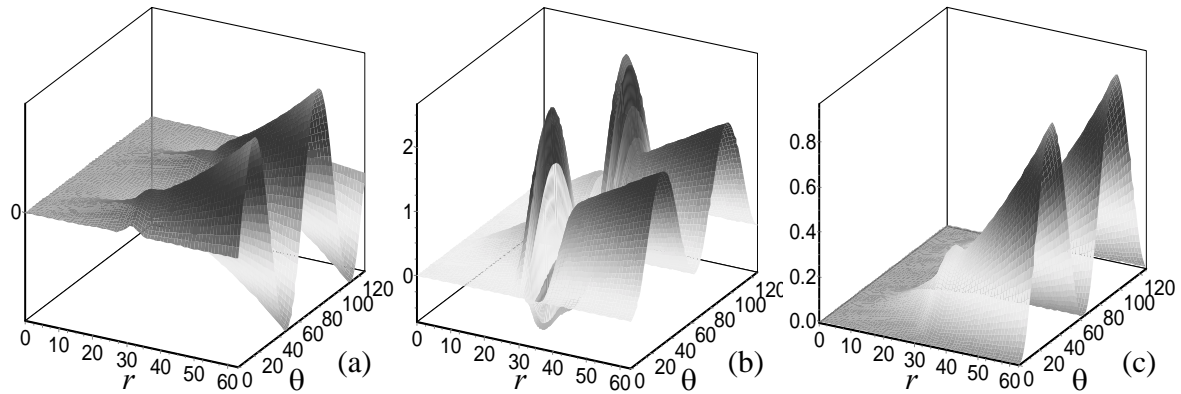


Figura 4.8. (a) Derivada angular f^θ , (b) derivada radial f^r y (c) Función f

Los diferentes algoritmos de reconstrucción estudiados se han comparado calculado el error cuadrático medio (4.40)

A continuación se presenta el estudio de los diferentes métodos de integración para tres casos particulares:

- el caso ideal en que las derivadas no presentan ningún tipo de ruido

- el caso en que las derivadas presentan un defecto tipo delta simulando posibles defectos en la superficie a medir como por ejemplo motas de polvo, rayaduras, defectos de fabricación, y
- el caso en que las derivadas son ruidosas

Derivadas no ruidosas

La figura 4.9 muestra el mapa de errores y el valor del *rms* calculado mediante (4.40) cuando la integración se realiza mediante los diferentes métodos estudiados. Las figuras 4.9(a)-(c)-(e)-(g) corresponden al error producido cuando se emplea la integración angular (*Trap_Ang*), radial (*Trap_Rad*) mediante la regla del Trapecio; cuando se considera la minimización de la diferencia entre las dos integraciones como criterio para determinar las constantes de integración (*MDTrap*) y cuando se emplean las diferencias finitas (*DFL*). De manera análoga, las figuras 4.9(b)-(d)-(f)-(h) corresponden a los mismos métodos de integración utilizando las “splines” cúbicas (*CS_Ang*, *CS_Rad*, *MDCS* y *DFCS*). Para este caso ideal en que las derivadas son analíticas y no presentan ningún tipo de defecto ni de ruido, los métodos que emplean la misma interpolación de las derivadas ofrecen un error similar, independientemente del método escogido. Y como es de esperar, los métodos en los que se emplean las “splines” cúbicas ofrecen mejores resultados que los que emplean una interpolación lineal. El valor del *rms* obtenido mediante el método *DFCS* es inferior que el obtenido con el método *DFL*, de acuerdo con la función de transferencia del método *DFCS* que se aproxima mejor a la analítica de la operación numérica de integrar. El error producido en la integración con los métodos de diferencias finitas es del mismo orden de magnitud que el obtenido con los métodos basados en la integral de línea que emplean la misma de interpolación para ajustar las derivadas. En este caso ideal en que las derivadas no presentan ningún ruido ni defecto, se observa que métodos como *CS_Ang*, *CSRad* o *MDCS* ofrecen mejor resultado que el método *DFL* tal y como muestra la figura 4.9.

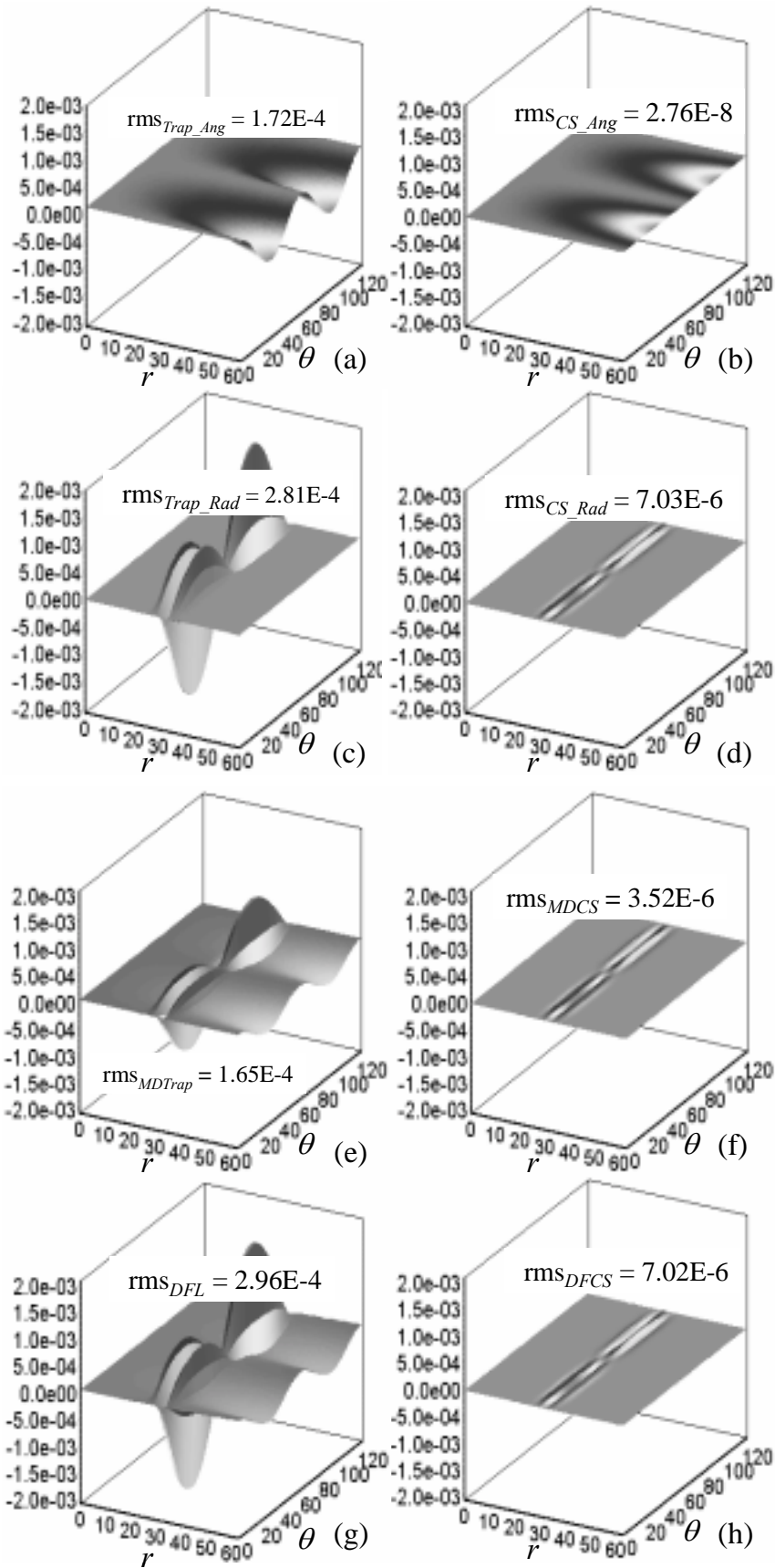


Figura 4.9. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del rms cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas sin ruido mediante los métodos basados en la regla del Trapecio: (a) $Trap_Ang$, (c) $Trap_Rad$, (e) $MDTrap$, (g) DFL y los basados en las "splines cúbicas: (b) CS_Ang , (d) CS_Rad , (f) $MDCS$ y (h) $DFCS$.

Derivadas no ruidosas con un defecto tipo delta

Para evaluar la propagación del error que pueden introducir posibles motas de polvo en la muestra, rayaduras, posibles defectos de fabricación,... se ha realizado un experimento numérico que consiste en simular la presencia de un defecto tipo delta de Dirac en las derivadas. La función delta, situada en $n = \frac{3}{4}N_r$ y $m = \frac{3}{4}N_\theta$, se suma a las derivadas de la función deseada. La figura 4.10 muestra un ejemplo de la propagación del error producido en la integración realizada. De manera análoga al caso anterior de una señal periódica, la columna de la izquierda de la figura 4.10 corresponde al mapa de errores y el *rms* obtenido con los métodos basados en la integral de línea (*Trap_Ang* y *Trap_Rad*), en la minimización de la diferencia entre los valores obtenidos en las dos direcciones (*MDTrap*) y en las diferencias finitas (*DFL*) en los que se emplea la regla del Trapecio; mientras que la columna de la derecha corresponde al mapa de errores y el *rms* de los mismos métodos empleando las “splines” cúbicas, *CS_Ang*, *CS_Rad*, *MDCS* y *DFCS*. De manera similar al caso de una señal sinusoidal, se observa que la propagación del error introducido por el defecto delta es diferente según la dirección: en la integración angular la presencia de la delta influye a lo largo de todo el camino de integración que pasa por el píxel donde se ha situado mientras que, en la integración radial, el error que introduce el defecto afecta a partir del mismo, es decir, tan sólo afecta a los valores de la función a partir de los píxeles donde se ha situado el defecto delta. Los métodos que minimizan la diferencia entre las integraciones radial y angular también sufren la propagación del defecto a lo largo de todo el camino de integración ya que el perfil final se obtiene mediante la media (4.12) de los perfiles obtenidos radial y angularmente. Aún así, los métodos *MDTrap* y *MDCS* ofrecen mejores *rms* que los métodos *Trap_Ang* y *CS_Ang*. Mediante los métodos de diferencias finitas el error introducido por el defecto tipo delta se mantiene local, es decir, no se propaga a lo largo de todo el dominio de la función. El valor del *rms* del método *DFCS* es inferior que el del método *DFL* ya que las “splines” cúbicas interpolan mejor las derivadas que posteriormente se integran. De la figura 4.10, se aprecia que los métodos de diferencias finitas ofrecen mejores resultados que los obtenidos mediante los métodos basados en la integral de línea y los de la minimización.

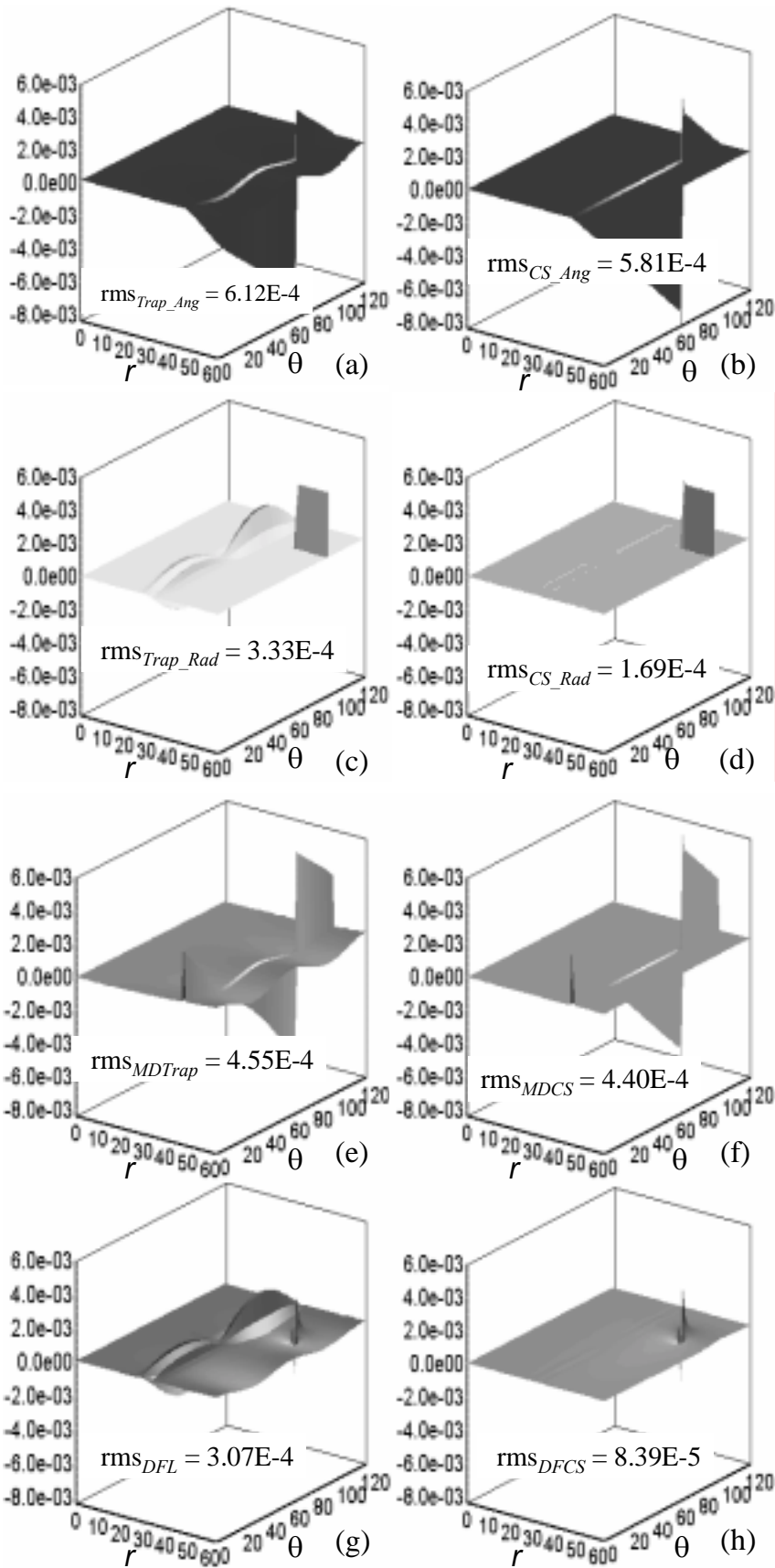
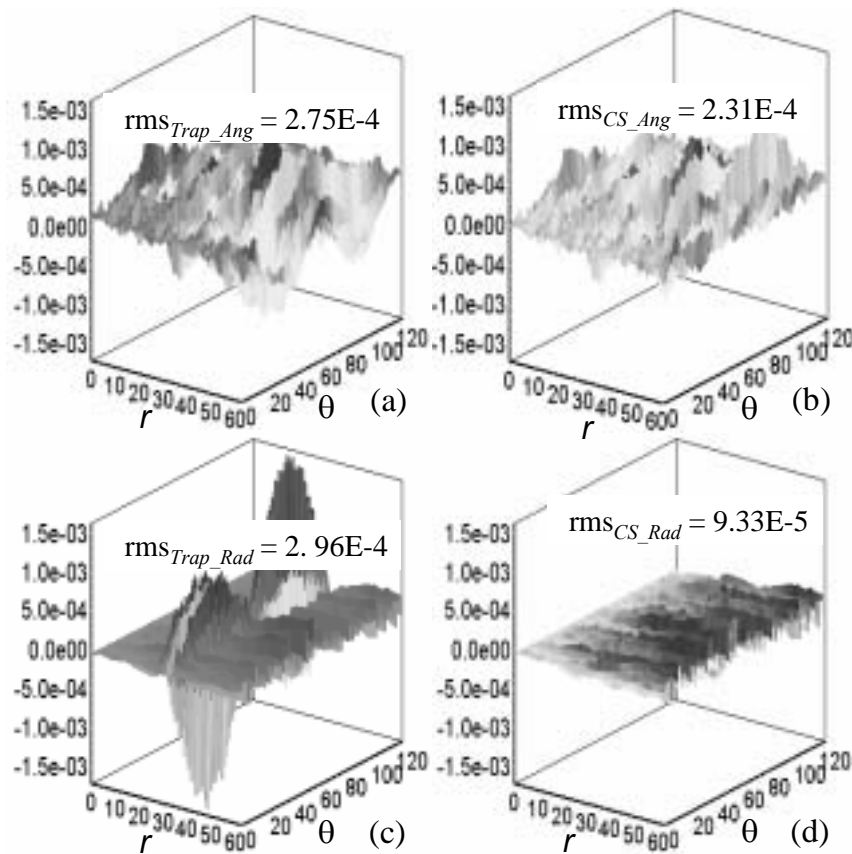


Figura 4.10. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del rms cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas sin ruido con un defecto delta mediante los métodos basados en la regla del Trapecio: (a) $Trap_Ang$, (c) $Trap_Rad$, (e) $MDTrap$, (g) DFL y los basados en las “splines cúbicas: (b) CS_Ang , (d) CS_Rad , (f) $MDCS$ y (h) $DFCS$.

Derivadas ruidosas

La figura 4.11 muestra el mapa de errores y el valor del *rms* calculado mediante (4.40) en la integración de las derivadas que presentan un ruido analítico de tipo blanco, gaussiano, media nula y varianza 10^{-6} . Las figuras de la columna de la izquierda corresponden a los métodos que emplean la regla del Trapecio, *Trap_Ang*, *Trap_Rad*, y *MDTrap* y *DFL* respectivamente y las de la columna de la derecha corresponden a los mismos métodos de integración utilizando las “splines” cúbicas (*CS_Ang*, *CS_Rad*, *MDCS* y *DFCS*). Los resultados obtenidos son similares a los obtenidos al caso de derivadas no ruidosas: los métodos *DFL* y *DFCS* mejoran los resultados respecto al resto de métodos analizados. Así pues, los métodos de las diferencias finitas son los más apropiados para la integración para los casos más reales: ruido y defectos en las derivadas.



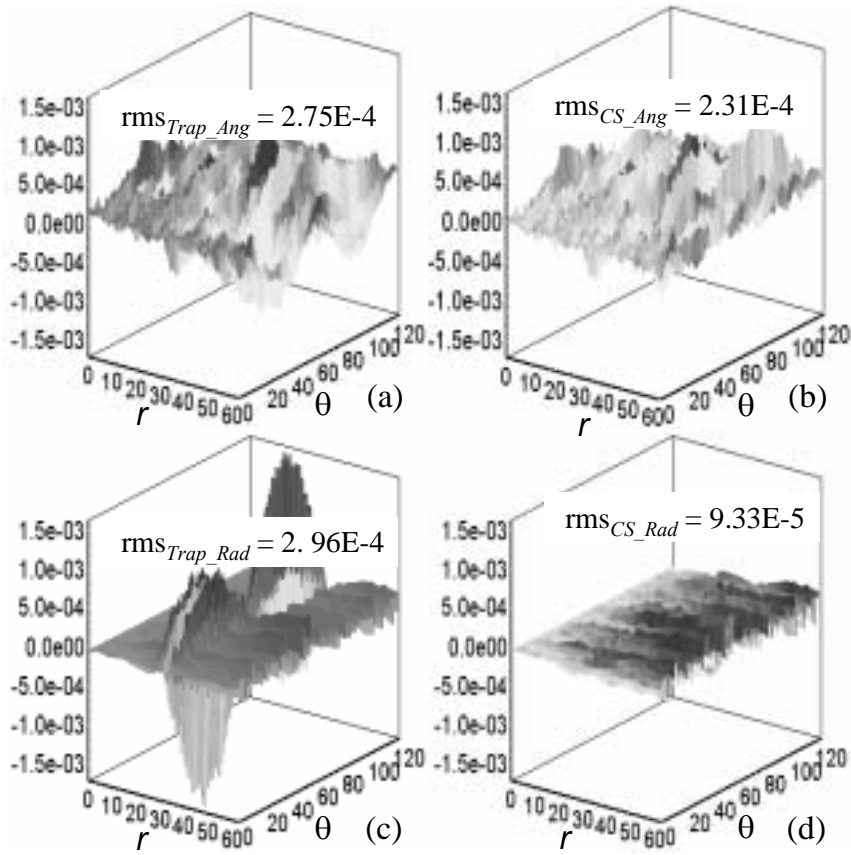


Figura 4.10. Diferencia entre la señal analítica y la integrada y valor del rms cuando la integración se realiza a partir de unas derivadas con ruido de varianza 10^{-6} mediante los métodos basados en la regla del Trapecio: (a) $Trap_Ang$, (c) $Trap_Rad$, (e) $MDTrap$, (g) DFL y los basados en las “splines cúbicas: (b) CS_Ang , (d) CS_Rad , (f) $MDCS$ y (h) $DFCS$.