

# Solución numérica del problema inverso de Fraunhofer con técnicas de regularización

LÓPEZ J.¶  
GUERRA V.¶  
HERNÁNDEZ M.\*\*  
ALVAREZ M. \*\*  
GARCÉS I.\*\*

## Resumen

En este artículo se estudia un modelo matemático concreto proveniente de la construcción de un equipo medidor de diámetros de partículas esféricas mediante el empleo de técnicas láser. Se analiza la dificultad del cálculo de su solución numérica y se describen algunas de las técnicas de regularización más recomendadas para este tipo de problemas. Se muestran los principales resultados de una extensa experimentación numérica realizada con datos reales, a partir de los cuales se dan conclusiones sobre el mejor método a utilizar.

## 1. Introducción

Actualmente existe un gran número de procesos industriales en los que resulta imprescindible la determinación de la distribución de tamaños de partículas en soluciones y aerosoles. Dentro de las técnicas más usadas para este fin se encuentran las que utilizan la *disfracción láser* como principio físico.

Para tal propósito se construyen equipos comerciales de alta calidad que, basados en estas técnicas, proporcionan resultados satisfactorios. Uno de los aspectos más complicados en la construcción de estos equipos está vinculado con el diseño del

---

¶Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México (jle@hp.ciencias.unam.mx).

¶Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF) Cuba. (vguerra@cidet.icmf.inf.cu).

\*\*Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica (IMRE), Cuba (led@ffuh.fmq.uh.edu.cu).

*software* correspondiente, el cual presupone la solución numérica de una ecuación integral de Fredholm de primera especie. En este tipo de ecuaciones integrales no es posible garantizar la continuidad de la solución con respecto a los datos, lo cual hace que el problema entre en la categoría de los llamados "mal planteados" (*ill-posed*) a la Hadamard. La principal característica de los problemas mal-planteados consiste en que sus soluciones resultan muy sensibles ante pequeñas perturbaciones en los datos y son, por tanto, difíciles de calcular numéricamente, si se tiene en cuenta que en la práctica los datos generalmente presentan errores de diversa naturaleza.

El objetivo de este trabajo consiste en estudiar y proponer dentro de las técnicas de regularización numérica conocidas, aquellas que permitan procesar eficientemente las mediciones realizadas por un equipo confeccionado en el Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica (IMRE) de la Universidad de La Habana. Los métodos numéricos propuestos deben ser capaces de producir soluciones comparables a las obtenidas por un equipo comercial de la firma Malvern Instruments.

El artículo está organizado de la siguiente forma: las dos secciones que siguen están dedicadas a la descripción del modelo matemático que describe el proceso físico y al análisis de la dificultad de su solución numérica; en la siguiente se describen de manera sencilla y unificada varias técnicas numéricas de cálculo de soluciones regularizadas: descomposición en valores singulares truncada, regularización de Tíjonov y método de la pseudoinversa minimal, y se analizan diferentes criterios de selección del parámetro de regularización para dichas técnicas; en la última sección se detallan los resultados numéricos obtenidos utilizando las diferentes estrategias mencionadas en una colección de observaciones medidas por el equipo construido en el IMRE, y se realiza un análisis comparativo con las correspondientes soluciones obtenidas por el equipo comercial.

## 2. Descripción del modelo matemático

En esta sección se describe, utilizando el conocimiento de las leyes físicas que rigen el proceso de difracción de la luz, la deducción de las ecuaciones matemáticas que permiten modelar el proceso de medición del tamaño de partículas esféricas y opacas en soluciones y aerosoles.

Como se sabe, según el patrón de difracción de Fraunhofer la intensidad dispersada para una partícula perfectamente esférica y opaca de diámetro  $D$  satisface la ecuación

$$i(\theta, \alpha) = \frac{i_0 \lambda^2 \alpha^4}{16\pi^2} \left( \frac{2J_1(\alpha\theta)}{\alpha\theta} \right)^2,$$

donde

- $i_0$  es la intensidad que llega a la muestra,
- $\lambda$  es la longitud de onda del haz,
- $J_1$  la función de Bessel de primer orden,
- $\theta$  el ángulo entre el eje óptico y la dirección de observación y
- $\alpha$  el parámetro adimensional dado por  $\frac{\pi D}{\lambda}$ .

En una distribución de tamaño de partículas la intensidad total dispersada resulta ser una combinación lineal de las intensidades dispersadas correspondientes a cada tamaño de partícula, con un peso igual al número diferencial de partículas  $\eta(\alpha)$  para cada tamaño en la muestra

$$I(\theta) = \int_0^{\infty} i(\theta, \alpha)\eta(\alpha)d\alpha. \quad (1)$$

El problema de calcular la intensidad resultante  $I(\theta)$  para una distribución conocida de partículas  $\eta(\alpha)$  es llamado *problema directo* de la difracción de Fraunhofer, y no presenta gran dificultad matemática. El problema que se presenta en este caso es el cálculo de  $\eta(\alpha)$  a partir del conocimiento experimental de  $I(\theta)$  y es conocido como *problema inverso* de Fraunhofer.

El *problema inverso* de Fraunhofer es una ecuación integral de Fredholm de primera especie, la cual se caracteriza por ser un problema matemático típicamente *mal-planteado*. La terminología de *mal-planteados* fue introducida por Hadamard en 1902 [4] para caracterizar aquellos problemas matemáticos en los cuales la solución no existe, no es única o no depende continuamente de los datos. Esta última propiedad constituye una seria dificultad para la solución numérica de estos problemas.

A partir de la expansión en funciones propias del núcleo de la ecuación integral (1), se sabe ([16]) que sus valores propios decaen como  $O(n^{-3})$ , lo cual indica que el problema no es de los más difíciles de resolver; y en general, el conocimiento experimental (discreto) de la energía dispersada permitirá una reconstrucción razonable de la distribución de los tamaños de partículas.

Se conocen fundamentalmente dos métodos para hallar una solución de la ecuación integral (1).

Por una parte, se conoce el método de *transformadas integrales*, que se basa en la determinación de expresiones analíticas para  $I(\theta)$  interpolando sus valores experimentales. Este método, a pesar de dar con frecuencia resultados aceptables, posee serias limitaciones (para más detalles ver [1]).

Una familia alternativa de métodos de solución la constituyen aquellos algoritmos basados en cuadraturas numéricas, los cuales transforman la ecuación integral en una ecuación matricial mediante la discretización en las variables  $\theta$  y  $\alpha$ .

En el problema particular que se tiene, la discretización en  $\theta$  está determinada por el hecho de que la medición de las intensidades luminosas difractadas se realiza de forma discreta, por lo que está gobernada por la geometría del detector utilizado. Si se utiliza un detector de anillos concéntricos, la energía dispersada en el  $j$ -ésimo anillo por una partícula está dada por

$$\int_{r_{ij}}^{r_{oj}} i(\theta(r), \alpha)2\pi r dr,$$

donde  $r_{ij}$  y  $r_{oj}$  son los radios internos y externos del  $j$ -ésimo anillo del detector, respectivamente.

Dada una distribución de partículas, la energía total en el  $j$ -ésimo anillo será

$$s_j = \int_0^\infty \eta(\alpha) \left[ \int_{r_{ij}}^{r_{oj}} i(\theta(r), \alpha) 2\pi r dr \right] d\alpha. \quad (2)$$

Para reducir el sistema de relaciones integrales (2) a un sistema de ecuaciones lineales algebraicas, es necesario discretizar la variable  $\alpha$  en menor o igual número de particiones que el número de anillos del detector. Cada partición  $k$  tendrá asociado un diámetro de partículas  $D_k$  que representa la clase  $k$  de partículas. Se sustituye entonces el número diferencial de partículas por una magnitud discreta  $\eta_k = \eta(\alpha_k) d\alpha_k$ , que representa el peso que la clase  $k$  tiene en la intensidad difractada.

Entonces, el número total de partículas de la clase  $k$  se escribe como

$$\eta_k = \frac{6V_k}{\pi D_k^3},$$

donde  $V_k$  es el volumen total de partículas con diámetro  $D_k$ .

La ecuación (2) puede escribirse como

$$S_j = \sum_k \frac{6V_k}{\pi D_k^3} \left[ \int_{r_{ij}}^{r_{oj}} i(\theta(r), \alpha_k) 2\pi r dr \right],$$

que no es más que el sistema de ecuaciones lineales

$$Cv = s, \quad (3)$$

donde  $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m \geq n$ , es la llamada *matriz de dispersión*, y cada elemento  $c_{jk}$  es la energía dispersada por la unidad de volumen de las partículas de la  $k$ -ésima clase en el  $j$ -ésimo anillo detector. Cada elemento  $c_{jk}$  está dado por

$$c_{jk} = \frac{6}{\pi D_k^3} \left[ \int_{r_{ij}}^{r_{oj}} i(\theta(r), \alpha_k) 2\pi r dr \right].$$

El vector  $s$  contiene la energía total detectada en el  $j$ -ésimo anillo detector y  $v$  es el vector que tiene por elemento  $k$ -ésimo el volumen total de partículas con diámetros  $D_k$ .

De esta forma, se ha llegado a la formulación del problema matemático a resolver por estrategias numéricas, que no es otra cosa que hallar la solución de un sistema de ecuaciones lineales sujeto a perturbaciones en su término derecho, las cuales están dadas por las limitaciones propias del equipo medidor de energías utilizado.

### 3. Dificultades numéricas del cálculo de la solución del problema matemático

Como es conocido, resolver el sistema de ecuaciones (3) equivale numéricamente a encontrar la solución  $v$  de norma mínima que minimiza

$$\min_v \|Cv - s\|_2.$$

Este problema es conocido como problema de *mínimos cuadrados lineales*.

El estudio del comportamiento de la solución  $v$  ante perturbaciones en el vector  $s$  ha sido ampliamente abordado en la literatura [2]. Se sabe que cuando la matriz es mal condicionada, o sea, posee un número de condición grande, la solución puede ser muy sensitiva a variaciones en los datos. En el problema que nos ocupa, la mala condicionalidad de la matriz  $C$  implica que pequeños errores cometidos en el proceso de medición del vector energía pueden provocar que el vector de volúmenes obtenidos se encuentre muy alejado del vector solución real del problema.

La complejidad matemática de la solución del sistema (3) que aparece en nuestro problema radica en que la matriz  $C$ , por herencia del mal planteamiento de la ecuación integral original (1), es una matriz mal condicionada [3].

El mal condicionamiento de la matriz en un problema de mínimos cuadrados lineales implica que las técnicas estándares como *factorización QR* y *descomposición en valores singulares (SVD)* por sus siglas en inglés no pueden ser usadas de manera directa.

El efecto del mal condicionamiento de la matriz sobre la solución del problema de *mínimos cuadrados* se aprecia, de manera clara, a partir de la expresión de la solución  $v$  en términos de las SVD [2], la cual se puede escribirse como

$$v = \sum_{i=1}^p \frac{u_i^t s}{\sigma_i} v_i, \quad (4)$$

donde  $u_i$  y  $v_i$  representan los vectores singulares y derechos de la matriz  $C$ , respectivamente;  $\sigma_i$  es el valor singular  $i$ -ésimo de  $C$  estrictamente positivos.

La expresión (4) ilustra claramente que la presencia de valores singulares muy pequeños puede hacer crecer la norma de la solución, caso en el cual las componentes del vector solución estarán dominadas por aquellos sumandos que corresponden a los valores singulares más pequeños y, por supuesto, más susceptibles a errores de los datos.

Nótese que no siempre la presencia de valores singulares pequeños hace que el problema sea muy susceptible a los errores en el vector de energía  $s$ . Cuando los coeficientes  $|u_i^t s|$ , llamados *coeficientes de Fourier*, decaen a cero más rápido que las cantidades  $\sigma_i$ , entonces las perturbaciones en los datos no causan grandes cambios en el vector solución  $v$ . Cuando esto ocurre se dice que se satisfacen las *condiciones discretas de Picard* (para más detalles ver [6]).

De lo anterior se hace claro que los métodos numéricos de solución de un problema de *mínimos cuadrados* con matriz mal condicionada deben basarse en *filtrar las contribuciones a la solución de los valores singulares más pequeños*. Esta es la idea fundamental de los *métodos de regularización*, que serán analizados en la próxima sección.

#### 4. Cálculo de soluciones regularizadas para un problema discreto mal-planteado

El término de *métodos de regularización* fue usado originalmente para nombrar una técnica específica propuesta por el matemático ruso A. Tíjonov [18]. Sin embargo, actualmente se utiliza este término para clasificar a todos aquellos métodos que, incorporando información adicional sobre la solución deseada, evitan el crecimiento en norma de la solución.

Como se había mencionado en la sección anterior, la idea de estos métodos está basada en filtrar las contribuciones de los valores singulares más pequeños, lo cual en términos de la descomposición *SVD* significa tomar soluciones del tipo

$$v_{reg} = \sum_{i=1}^n f_i \frac{u_i^T s}{\sigma_i} v_i, \quad (5)$$

donde los números  $f_i$  se denominan factores de filtro y deben ser tales que tiendan a cero cuando los valores singulares  $\sigma_i$  decrezcan, para que la contribución de los sumandos correspondientes a los valores singulares más pequeños sea efectivamente filtrada. La diferencia entre los diversos métodos de regularización está esencialmente en la forma de definir los factores de filtros. A continuación se describirán brevemente algunos de estos métodos.

##### 4.1. Descomposición en Valores Singulares Truncada (TSVD)

Uno de estos métodos consiste en tomar los factores de filtro de la forma

$$f_i = \begin{cases} 1, & \text{si } \sigma_i > \varepsilon, \\ 0, & \text{si } \sigma_i \leq \varepsilon, \end{cases}$$

donde  $\varepsilon$  es una cantidad que depende del nivel de perturbación de los datos. Este método se conoce con el nombre de *descomposición en valores singulares truncada* (TSVD por sus siglas en inglés). Nótese que este método elimina los sumandos correspondientes a los valores singulares pequeños, los cuales, como se analizó anteriormente, no siempre hacen crecer la norma de la solución y, por el contrario, pueden contener información importante que es desechada con el empleo de este método. El método TSVD es útil cuando la matriz  $C$  del problema tiene una distribución de valores singulares que permite establecer con facilidad los grupos de valores singulares grandes y pequeños, o sea, cuando se trata de matrices *mal condicionadas* pero de *rango bien determinado* [5].

## 4.2. Método de Regularización de Tíjonov

El método de *Regularización de Tíjonov* [18] constituye, sin dudas, la estrategia más fundamentada y popular que se conoce en nuestros días para la búsqueda de soluciones regularizadas de problemas mal-planteados. En el caso discreto que nos ocupa, el método propone soluciones  $v_{reg}$  en las cuales los factores de filtro se escriben en la forma

$$f_i = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2). \quad (6)$$

El parámetro  $\lambda$  es conocido como *parámetro de regularización*, y controla el peso del aporte del valor singular  $i$ -ésimo en la solución, el filtrado efectivo tendrá lugar cuando  $\sigma_i < \lambda$ .

Aunque la implementación numérica del método de regularización de Tíjonov requiere del empleo de técnicas estándares del álgebra matricial numérica, su uso eficiente involucra una juiciosa selección del parámetro de regularización. En los últimos años ha sido desarrollada una gran variedad de criterios de elección de  $\lambda$ , cuya efectividad depende mucho del problema en concreto que se tiene. Los criterios de elección de parámetros se dividen en dos grandes grupos:

- los que se basan en el conocimiento del nivel de perturbación  $\delta$  de los datos.
- los que no requieren del conocimiento explícito de  $\delta$  para hallar la solución regularizada.

Dentro del primer grupo se destaca el *principio de discrepancia* [15], el cual se basa en hallar el parámetro de regularización de forma tal que

$$\|Cv_{reg} - s\|_2 = \delta,$$

donde  $\delta$  es el nivel de perturbación del vector de observaciones  $s$ .

En el segundo grupo son muy conocidos los siguientes métodos:

- *L-curva* [7]. Este criterio elige el parámetro de regularización como aquel valor de  $\lambda$  en el cual se alcanza el punto de máxima curvatura de la curva paramétrica continua

$$(\log \|Cv_\lambda - s\|, \log \|v_\lambda\|),$$

donde  $v_\lambda$  es la solución  $v_{reg}$  dada por la expresión (5) para un  $\lambda$  dado.

- *Validación cruzada generalizada* [19]. Se basa en elegir el parámetro  $\lambda$  que minimice la función de validación cruzada

$$G = \frac{\|Cv_{reg} - s\|_2^2}{(\text{traza}(I_m - CC^T))^2},$$

donde  $C^I$  es una matriz que produce la solución  $v_{reg}$  cuando dicha matriz es multiplicada por  $s$ , o sea,  $v_{reg} = C^I s$ .

- *Quasi-optimalidad* [17]. Escoge el parámetro de regularización como el valor de  $\lambda$  que minimiza la expresión

$$Q = \lambda \left\| \frac{dv_\lambda}{d\lambda} \right\| = \left( \sum_{i=1}^p \left( f_i (1 - f_i) \frac{u_i^T s}{\sigma_i} \right)^2 \right)^{1/2},$$

donde  $f_i$  son los factores de filtro dados por (6).

### 4.3. Método de la Seudoinvertida Minimal

El método de la *Seudoinvertida Minimal* fue propuesto por A. Leónov en los artículos [11] y [12]. Este método, a diferencia del método de regularización de Tíjonov, proporciona un algoritmo para hallar una aproximación a la seudoinvertida de la matriz  $C$  con independencia del comportamiento del vector de observaciones  $s$ . Esta propiedad del método lo hace muy útil cuando se desean calcular las soluciones de diversos sistemas de ecuaciones lineales que posean la misma matriz  $C$  y diferentes miembros derechos  $s$ . La aproximación de la seudoinvertida dada por este método se denomina *matriz seudoinvertida minimal*, y posee la importante propiedad de ser una matriz  $\tilde{C}$  que estando a una distancia de  $C$  no mayor que un nivel dado, la norma de su seudoinvertida posee mínimo.

Las soluciones regularizadas propuestas por el método de la *Seudoinvertida Minimal* se obtienen de la expresión (5) utilizando los factores de filtro

$$f_i = \begin{cases} (x_i(\lambda))^{-1}, & \text{si } 0 < \lambda < \lambda_k, \\ 0, & \text{si } \lambda \geq \lambda_k, \end{cases}$$

donde  $x_i(\lambda)$  se define como la solución de la ecuación

$$x^4 - x^3 = \lambda(\sigma_i)^{-4}$$

que pertenece al intervalo  $[1, 3/2]$ .

Para la elección del parámetro  $\lambda$  en este caso se tienen dos algoritmos fundamentalmente:

- Cuando se conoce el nivel de perturbación  $\varepsilon$  de los datos, Leónov propone determinar el parámetro  $\lambda$  de forma tal que se satisfaga la ecuación

$$\sum_{i=1}^n (x_i(\lambda)\sigma_i - \sigma_i)^2 = h^2.$$

Desde el punto de vista teórico es posible demostrar que la solución  $v_{reg}$  obtenida utilizando los factores de filtro descritos para este parámetro  $\lambda$  converge a la solución exacta cuando el nivel de perturbación tiende a cero, con una convergencia asintótica óptima del orden de  $O(h + \delta)$ , donde  $h$  y  $\delta$  son los niveles de perturbación en la matriz  $C$  y en el vector de observaciones  $s$ , respectivamente.

- Cuando el nivel de perturbación de los datos no es conocido o solamente se dispone de una cota máxima para este valor, el algoritmo de Máximo Balance [13], propone un criterio heurístico para determinar el parámetro  $\lambda$ . El criterio consiste en hallar este parámetro como el valor de  $\lambda$  que corresponde al punto de esquina de la curva paramétrica dada por

$$\left( \sum_{i=1}^n (x_i(\lambda)\sigma_i - \sigma_i)^2, \sum_{i=1}^n \psi(x_i(\lambda)\sigma_i) \right),$$

donde

$$\psi(a) = \begin{cases} a^{-1}, & \text{si } a \neq 0; \\ 0, & \text{si } a = 0. \end{cases}$$

## 5. Resultados numéricos

La no existencia de resultados teóricos que permitan de antemano elegir el método más eficiente para dar solución a un problema concreto discreto mal-planteado impone la necesidad de la realización de una experimentación numérica extensa que resulte decisiva en la elección del método de solución a utilizar. En esta sección se realiza un estudio numérico comparativo de las soluciones dadas por los diferentes métodos de regularización y los diversos criterios de elección del parámetro descritos en la sección anterior.

La experimentación numérica fue desarrollada sobre el sistema MATLAB (Versión 5.0) y con ayuda de los *toolboxes* REGUTOOL [8] y SEUDOIN [14]. Se trabajó con una matriz de dispersión  $C$  de orden  $30 \times 30$  para la cual se confeccionó una colección de vectores energías medidos por el equipo construido en el IMRE y las correspondientes soluciones obtenidas por un equipo comercial de la firma Malvern Instruments.

En el caso particular que nos ocupa no se dispone de información exacta sobre el nivel de perturbación a que están sujetas las mediciones realizadas para los vectores energías; sólo se conoce que ésta no es superior a  $10^{-4}$ . Por lo anterior, para la experimentación numérica fueron analizadas las siguientes técnicas de regularización:

- TSVD
- Regularización de Tíjonov con L-curva
- Regularización de Tíjonov con Validación Cruzada Generalizada
- Regularización de Tíjonov con Cuasi-optimalidad
- Método de la Seudoinverta Minimal con el criterio de Leónov
- Método de la Seudoinverta Minimal con Máximo Balance

Los resultados de la experimentación se presentan en dos partes fundamentales: primeramente se analiza con detalles el problema para un vector de observación  $s$  de la colección de ejemplos de pruebas creada utilizando diferentes métodos de solución. En segundo lugar, se muestran y analizan los resultados obtenidos para trece de los juegos de datos de que se dispone.

El primer paso en la solución de un problema de un sistema de ecuaciones lineales con matriz  $C$  mal condicionada ( $cond(C) = 5,6460e+008$ ) consiste en el análisis de las condiciones discretas de Picard, las cuales se presentan en la figura 1. Nótese que en este caso los coeficientes de Fourier no decaen a zero más rápido que los valores singulares de la matriz  $C$ , lo cual provoca que los sumandos en la expresión (4) correspondientes a los valores singulares más pequeños, sean muy grandes en magnitud y, por tanto, puede afirmarse que para este ejemplo no se satisfacen las condiciones discretas de Picard.

Como ya se mencionó, es conocido que los valores propios del kernel de la ecuación integral (1) a resolver tienden a cero como  $O(k^{-3})$ . Por tanto, un análisis de la conducta de los valores singulares de la matriz del sistema de ecuaciones mostrados en la figura 1, nos permite afirmar que los valores singulares  $\sigma_{20}, \dots, \sigma_{30}$ , corresponden a los errores introducidos en el proceso de discretización, razón por la cual su contribución a la solución debe ser anulada. Utilizando lo anterior, es claro que una elección adecuada del parámetro  $\varepsilon$  en el factor de filtro que corresponde al método TSVD consiste en tomar  $\sigma_{19} < \varepsilon \leq \sigma_{20}$ .

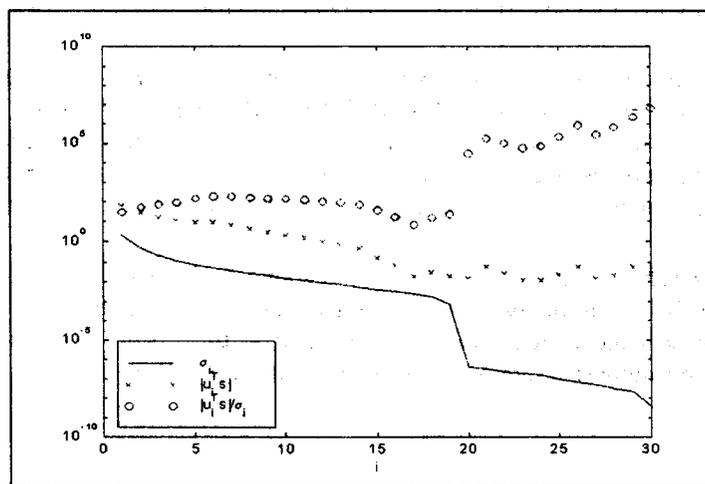
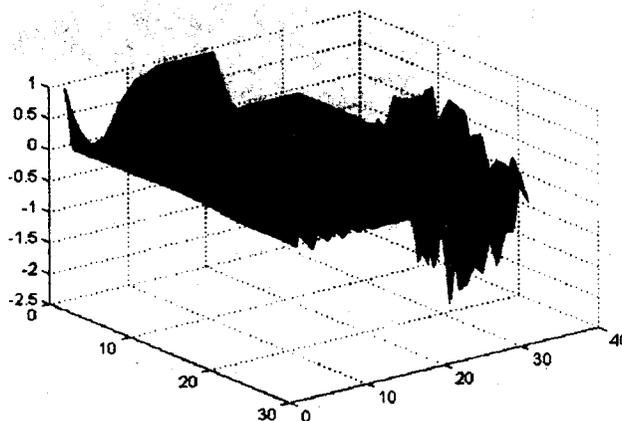


Figura 1. Condiciones discretas de Picard.

La figura 2 muestra las diferentes soluciones obtenidas utilizando el método TSVD tomando los factores de filtro  $f_i$  para el parámetro  $\varepsilon = \sigma_1, \dots, \sigma_n$  y la solución dada por el equipo comercial para el vector energía  $s$  que se tiene (en lo adelante la llamaremos *solución exacta*). Nótese que para  $\varepsilon$  muy pequeños el filtrado de las contribuciones de los valores singulares pequeños, es insuficiente lo que trae como consecuencia un aumento en la magnitud y en el número de cambios de signo de

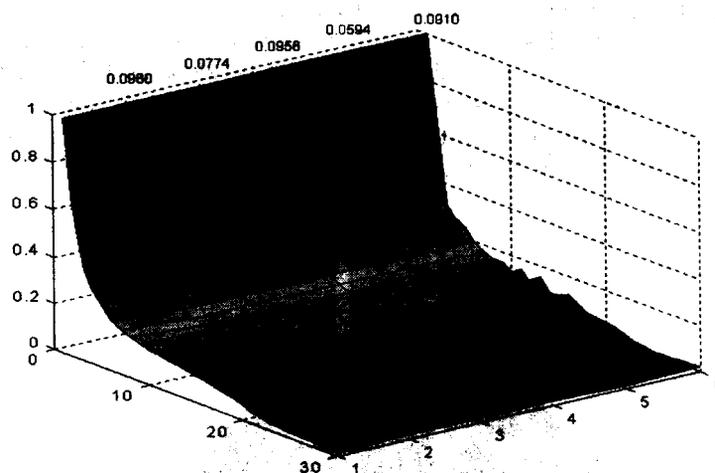
la solución dada por el método de regularización. Los factores de filtro obtenidos para los valores de  $\varepsilon$  grandes eliminan el efecto de valores singulares que sí tienen un peso importante, obteniéndose soluciones regularizadas alejadas de la solución real del problema. Nótese que para la elección del parámetro  $\varepsilon$  sugerida por el conocimiento teórico del problema, la solución obtenida por el método TSVD constituye una buena aproximación de la solución exacta.



**Figura 2.** Soluciones obtenidas por TSVD. A la izquierda: solución exacta, de izquierda a derecha: soluciones para  $\varepsilon = \sigma_1, \dots, \sigma_n$ .

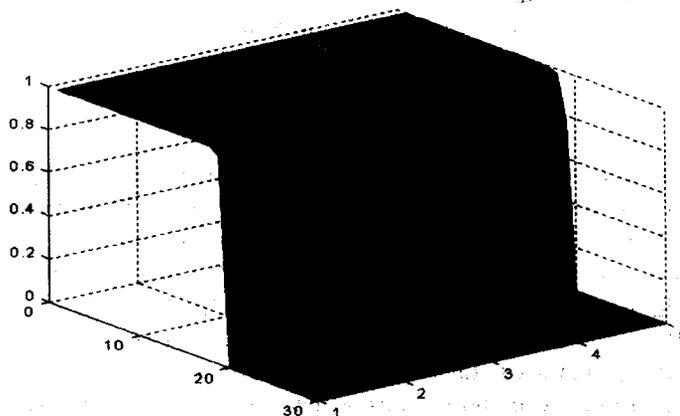
A continuación se analizarán los resultados obtenidos para este ejemplo con el empleo del método de Regularización de Tijonov y método de la Seudoinversa Minimal utilizando diferentes criterios de elección del parámetro.

De la figura 3 se aprecia que, de los criterios de elección de parámetro que no utilizan información alguna sobre el nivel de perturbación de los datos, en este ejemplo el más adecuado es el criterio de Validación Cruzada seguido muy cerca por los criterios de la L-curva y Cuasi-optimalidad. La solución más próxima a la exacta, se obtiene cuando se emplea el criterio de Máximo Balance utilizando el conocimiento del nivel máximo de perturbación para los datos de que se dispone. Se muestra, además, la solución obtenida por el método de la Seudoinversa Minimal utilizando el conocimiento del nivel de perturbación máximo para el cálculo del parámetro  $\lambda$ . Los resultados alcanzados por este método hubieran sido mejores si para el cálculo del parámetro se utilizara el nivel exacto de perturbación en los datos, el cual no es conocido en el caso que se analiza.



**Figura 3.** Soluciones exacta y regularizadas por diferentes métodos. 1. Exacta, 2. L-curva, 3. Validación cruzada, 4. Cuasi-optimalidad, 5. Máximo balance, 6. Minimal. El valor sobre la curva representa el error relativo de la solución regularizada respecto a la exacta.

Los factores de filtro usados para cada uno de los métodos usados se presentan en la figura 4. Nótese que estos difieren en cada uno de los métodos, lo cual establece las diferencias entre las soluciones regularizadas mostradas en la figura 3.



**Figura 4.** Factores de filtro para los diferentes métodos de regularización. 1. L-curva, 2. VCG, 3. Cuasi-opt, 4. Máx. balance, 5. Minimal.

En la tabla 1 se presentan los errores relativos para un conjunto de ejemplos de prueba dentro de la colección creada. Se aprecia que el método de solución que ofrece

Tabla 1: Errores relativos para los diferentes métodos en la colección de prueba.

	TSVD	L-curva	VCG	Quasi-opt	Max Balance	Minimal
1	0,2487	0,2513	2,1474	0,2513	0,2686	0,2504
2	0,0857	0,0856	0,0795	0,0851	0,0809	0,0853
3	0,3770	0,3685	1,7750	0,3767	0,2006	0,3761
4	0,2437	0,2512	0,2275	0,2514	0,1924	0,2488
5	0,2394	0,2393	2,3477	0,2392	0,1792	0,2391
6	0,0944	0,1029	1,8053	0,1026	0,1200	0,0994
7	0,1316	0,1318	2,1753	0,1314	0,1099	0,1309
8	0,2743	0,2747	2,1753	0,2751	0,2567	0,2748
9	0,0688	0,0726	1,6386	0,0721	0,0750	0,0706
10	0,0346	0,0369	2,0626	0,0364	0,0422	0,0360
12	0,0321	0,0394	1,9312	0,0388	0,0576	0,0364
13	0,0826	0,0960	0,0774	0,0956	0,0594	0,091

mejores resultados en promedio es el de Máximo Balance utilizando la información del nivel de perturbación máximo de los datos. Dentro de los métodos que no utilizan información alguna sobre el nivel de ruido de las observaciones, se comportan de manera muy similar los métodos de la L-curva y Quasi-optimalidad. Por otra parte, resulta interesante observar que el criterio de Validación Cruzada se comporta de manera muy variable con respecto a los diferentes juegos de datos; nótese que existen casos como el 2 y el 13, en los que este criterio permite obtener los errores relativos más pequeños; sin embargo, se tienen otros juegos de datos en los que las soluciones son realmente desacertadas.

Los resultados que se presentan en la primera columna de la tabla 1 nos permiten afirmar que si, además de la disminución del error relativo, se tiene en cuenta la dificultad computacional de los algoritmos, el método más apropiado en los ejemplos analizados es el de TSVD utilizando los factores de filtro que corresponden a  $\varepsilon = \sigma_{20}$ .

## 6. Conclusiones

Como resultado del estudio realizado para solucionar numéricamente el modelo matemático proveniente de la construcción de un equipo medidor de diámetros de partículas en soluciones y aerosoles, podemos concluir que las características de la matriz del problema de mínimos cuadrados lineales proveniente de la ecuación integral que modela el fenómeno físico establecen la necesidad de la utilización de técnicas de regularización para su solución.

Dentro de ellas los mejores resultados en cuanto a disminución del error relativo fueron obtenidos por el criterio de Máximo Balance, utilizando la información sobre el nivel máximo de perturbación en los datos establecido por las limitaciones del equipo medidor de energías.

En cuanto a las técnicas que no utilizan información alguna sobre el nivel de ruido

en los datos, podemos concluir que los criterios L-curva y Cuasi-optimalidad dan soluciones aceptables y muy similares; en nuestros ejemplos no se recomienda el uso del método de Validación Cruzada para elegir el parámetro de regularización por comportarse de forma muy variable en los juegos de datos de que se dispone.

Si además de la disminución del error relativo en la solución propuesta se tiene en cuenta el costo computacional del algoritmo, puede concluirse que el método de solución más apropiado para la solución del problema propuesto lo constituye el método TSVD. Lo anterior es válido cuando la distribución de los valores singulares de la matriz de discretización  $C$  permite una elección apropiada del parámetro de truncamiento  $\varepsilon$  en los factores de filtro correspondientes.

Es importante resaltar el hecho de que sólo la conjugación del conocimiento tanto teórico como numérico del problema a resolver posibilita la solución eficiente de los problemas mal planteados que aparecen cada vez con mayor frecuencia en la ciencia de nuestros días.

## Referencias

- [1] GÁRCES I., *Aplicaciones de la Difracción Láser en la determinación de tamaños de partículas*. Tesis de Diploma. Facultad de Física, Universidad de La Habana (1995).
- [2] GOLUB G.H., VAN LOAN C.F., *Matrix Computations*, Second Edition, The Johns Hopkins, University Press, Baltimore (1989).
- [3] GROETSCH C.W., *The Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Equations of first kind*, Pitman Boston (1984).
- [4] HADAMARD J., "Sur les Problèmes Aux Dérivées Partielles et leur signification Physique", *Bull. Univ. Princeton*, 13, pp. 49-52 (1902).
- [5] HANSEN P.C. "The truncated as a method for regularization", *BIT* 27, 354-373 (1987).
- [6] HANSEN P.C. "The discrete Picard condition for discrete ill-posed problems", *BIT* 30, 658-672, (1990).
- [7] HANSEN P.C. "Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve", *SIAM Rev.* 34, 561-580, (1992).
- [8] HANSEN P.C. "Regularization tools, a MATLAB package for analysis and solution of discrete ill-posed problems", *Report UNIC 92-03, UNI-C, versión 3.0 para MATLAB 5.2* (1998).
- [9] HIRLEMAN E.D., "Optimal Scaling of the Inverse Fraunhofer Diffraction Particle Sizing Problem: the linear system produced by quadrature". *Part Charact.* 4; 128-133, (1987).
- [10] HIRLEMAN E.D., "Modelling of multiple scattering effects in Fraunhofer diffraction particle size analysis". *Part. Part. Syst. Charact.* 5; 57-65, (1988).
- [11] LEONOV A.S., "The method of minimal pseudo-inversed matrix", *USSR Comput. Math and Math. Phys.* 27, pp. 1123-1138 (1987).
- [12] LEONOV A.S., "The minimum pseudo inverse matrix method: theory and numerical implementation". *Comput. Maths. Math. Phys.*, Vol.31, No. 10, pp. 1-13 (1991).
- [13] LÓPEZ J, GUERRA V., "Maximum Balance Criterion for Choosing the Parameter  $\lambda$  in the Minimal Pseudoinverse Method", presentado a la revista *Inverse Problems* (1998).
- [14] LÓPEZ J., GUERRA V., *SEUDOIN: Toolbox en MATLAB para el cálculo de la pseudoinversa de una matriz*, (en vías de publicación, disponible con los autores) (1998).