



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Algoritmos eficientes para aplicaciones en tomografía óptica

Tesis presentada para optar al título de Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas

Lic. Enzo Leopoldo Gaggioli

Director de tesis: Dr. Darío Mitnik

Director Asistente: Dr. Claudio Delrieux

Consejero de Estudios: Dr. Rafael Ferraro

Lugar de trabajo: Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE), UBA–CONICET

Buenos Aires, 2022

Algoritmos eficientes para aplicaciones en tomografía óptica

En esta Tesis se presenta un algoritmo *paralelo* eficiente para la resolución del problema inverso en tomografía óptica basado en la ecuación de transferencia radiativa en el dominio temporal. Esta ecuación provee un modelo físicamente preciso para el transporte de fotones en el tejido biológico, pero el alto costo computacional asociado a su resolución representa un obstáculo para su utilización en tomografía óptica, y otras áreas. En esta Tesis se aborda este problema mediante un número de innovaciones computacionales y de modelado, que incluyen 1) La incorporación de un método espectral de alto orden (continuación de Fourier en ordenadas discretas (FC–DOM)) que permite resolver la ecuación de transporte con gran precisión y con reducido esfuerzo computacional. 2) Una estrategia de paralelización basada en la descomposición del dominio espacial que presenta *escalabilidad ideal* para los problemas directos e inversos; 3) Una estrategia de Fuentes Múltiples Superpuestas (FMS) que resuelve el problema inverso de transporte con un costo computacional que es *independiente del número de fuentes empleadas*, y el cual acelera significativamente la reconstrucción de los parámetros ópticos. Adicionalmente, esta contribución presenta una derivación intuitiva de la formulación del problema adjunto para el cálculo de los gradientes funcionales, que incorpora las condiciones de borde de Fresnel. Se presentan soluciones de problemas inversos realistas en 2D, que fueron obtenidos en un cluster de computadoras con hasta 256 procesadores. La combinación del método FC–DOM, la estrategia de paralelización y la técnica FMS redujo el tiempo computacional requerido para la resolución de estos problemas, de meses a unas pocas horas.

Palabras clave: Propagación de la radiación en la materia, Tomografía óptica, Ecuación de transporte radiativo, Espectroscopía del infrarrojo cercano, Problema inverso.

Efficient algorithms for optical tomography applications

This Thesis presents an efficient *parallel* radiative transfer-based inverse–problem solver for time–domain optical tomography. This equation provides a physically accurate model for the transport of photons in biological tissue, but the high computational cost associated with its solution has hindered its use in time–domain optical–tomography and other areas. In this Thesis this problem is tackled by means of a number of computational and modeling innovations, including 1) The incorporation of a high–order spectral method (Fourier continuation discrete ordinates method (FC–DOM)), allowing the solution of the transport equation with high precision and with low computational cost. 2) A spatial parallel–decomposition strategy with *perfect parallel scaling* for the forward and inverse problems of optical tomography on parallel computer systems; and, 3) A Multiple Staggered Source method (MSS) that solves the inverse transport problem at a computational cost that is *independent of the number of sources employed*, and which significantly accelerates the reconstruction of the optical parameters. Additionally, this contribution presents an intuitive derivation of the adjoint–based formulation for evaluation of functional gradients, including general Fresnel boundary conditions. Solutions of large and realistic 2D inverse problems are presented, which were produced on a 256–core computer system. The combined FC–DOM/parallel/MSS acceleration approach reduced the required computing times by several orders of magnitude, from months to a few hours.

Key words: Radiation transport through matter, Optical tomography, Radiative transfer equation, Near infrared spectroscopy, Inverse problem.

Agradecimientos

En primer lugar quiero y debo agradecer al Dr. Oscar Bruno, cuya colaboración y dedicación hicieron posible que este trabajo lograra la forma que hoy tiene. Oscar dedicó largas horas de su tiempo a trabajar conmigo, y este trabajo es en gran parte el resultado de esa colaboración. La relación profesional y de amistad a la distancia que mantuvimos con Oscar en todos estos años es para mí invaluable. Quiero agradecer también a mi director, el Dr. Darío Mitnik, por haber confiado en mí para hacer este trabajo, y por haberme permitido trabajar con una gran libertad e independencia en todos estos años. Agradezco a mi familia, por el apoyo constante y permanente en todos estos años de estudio, en especial a mi papá, a mi mamá a mi hermana Betiana, mi hermano Juan, a mi hermano José Carlos (Bebe, que ya no está, pero lo llevo siempre presente) y a mi cuñado, Cesar. Son mi núcleo familiar y sin su apoyo nunca hubiera llegado a terminar mi carrera de grado. A la familia Osimi, en especial a Claudio y Marcelo. A mis tíos, primos y sobrinos. A los Doctores Marcelo Ambrosio e Ilán Gomez, ambos fueron muy importantes en el inicio de mi formación de posgrado. Al Dr. Martin Maas, quien me facilitó el contacto con el Dr. Bruno, así como a la FCEyN y al Departamento de Física, y todos los docentes, investigadores y personas encargadas de gestionar el programa de cursos de profesores visitantes. Al Dr. Edwin Jimenez, quien me presto asistencia para que pudiera correr mis códigos en el clúster EMSCAT (donde se realizaron varias de las simulaciones presentadas en esta tesis), y al personal del IAFE, donde pude probar por primera vez mis códigos en un clúster. A los amigos y colegas del IAFE, en especial a Claudia Montanari, Ana Pichel, Silvina Cichowolski, Laura Suad, Maxi Sendra, María Silvia Gravielle, Sebastián López, Federico Nuevo, Sofía Burne, Silvina Cardenas, Gabriela Boscoboinik, Diego Arbó, Esteban Reisin, Rafael Ferraro, y Ernesto Eiroa, con quienes compartí muchas horas de camaradería, movilizaciones, almuerzos, y hasta oficina. Mi paso por el IAFE no hubiera sido igual sin ustedes. A los colegas becarios, por la lucha sostenida durante años en reclamo de reconocimiento pleno a nuestro trabajo como tal. A CONICET, y a cada trabajador Argentino que paga los impuestos, sin el financiamiento de CONICET, no hubiera sido posible este trabajo. A todos los que me acompañaron en este

largo recorrido, en especial a mis amigos de Coghlan, Mauricio Migliorelli, Mariano Mendez, Colo Migliorelli, a mis amigos y ex compañeros de Bahía, Marcos López (Kito), Marcos Paties (Pati), Juan Barrientos, Alejandro Tortello, Matias Garcia Stolock. Al “Cerebro de Boltzmann”: Adrián Gandica y Gabo Catalini, por los años de estudios compartidos, y por tomarse el trabajo de facilitarme trámites desde la distancia. A mi amigo Franco Cortesi. A les que estuvieron y a les que están. A Belén, por acompañarme y mostrarme su mundo. A la Universidad Nacional del Sur y sus docentes, donde realicé mi formación de grado.

También debo agradecer a los docentes de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Disfruté muchísimo cada curso que hice, y valoro enormemente el trabajo que se hace manteniendo una educación de excelencia en las universidades públicas, y gratuitas de nuestro país. Agradezco al secretario académico, Mariano Mayochi por su excelente trabajo. Y a cada trabajador de la administración pública, y de personal de apoyo de CONICET.

A Alexandra Elbakyan, a Sci-Hub y a libgen, por garantizar el acceso a artículos científicos y libros que de otra forma sería muy difícil conseguir, dificultando y limitando la labor científica en países en vías de desarrollo.

La ciencia es la suma del conocimiento adquirido por la humanidad a lo largo de generaciones. Como tal, es el resultado de un trabajo colectivo, que se realiza en sociedad, tanto por el trabajo mancomunado que atraviesa sociedades y generaciones de científicos que avanzan el conocimiento haciendo uso de esa preciada herramienta llamada “método científico”, así como del resto de los trabajadores que hacen al contexto sociocultural que permite que ese trabajo se desarrolle. Esta tesis no hubiera sido posible sin ustedes, por eso, como diría un gran amigo al referirse a las ondas planas, “desde siempre y para siempre”, gracias.

A mi familia.

Índice

Resumen	1
Abstract	2
Agradecimientos	4
1 Introducción	12
1.1 Descripción general del trabajo	14
1.2 Motivación	17
2 El problema directo	21
2.1 La ecuación de transferencia radiativa y su interpretación física	23
2.2 Métodos numéricos	28
2.2.1 Discretización de la variable angular	28
2.2.2 Discretización de la variable temporal	29
2.2.3 Discretización de la variable espacial: el método de Continuación de Fourier (FC)	30
2.2.4 Descomposición de dominio e implementación en paralelo: El método FC-DOM	32
2.3 Validación	36
2.3.1 Convergencia de soluciones manufacturadas	36
2.3.2 Comparación con resultados experimentales	38
2.3.2.1 Fantoma homogéneo	40
2.3.2.2 Fantoma inhomogéneo	42

2.3.3	El fenómeno de rayos	44
2.3.4	Comparación con solución analítica	46
2.4	Existencia de capa límite	48
3	El problema inverso	62
3.1	El esquema <i>MOBIR</i>	66
3.2	El método de minimización BFGS	67
3.2.1	El método de uso de memoria limitada lm–BFGS	68
3.3	El operador de transporte y otras definiciones preliminares	70
3.4	El método de Fuentes Múltiples Superpuestas	71
3.5	El método adjunto para el cálculo de gradientes	73
3.5.1	Verificación numérica de la expresión (3.43) para la derivada funcional	80
3.5.2	Cálculo numérico del gradiente funcional	81
3.6	Datos sintéticos con fuentes láser pulsadas	83
3.7	Algoritmo para la resolución de problemas inversos	87
3.8	Reconstrucciones numéricas del problema inverso	88
3.8.1	Imagen de tumor en cuello humano	90
3.8.2	Imágenes de activación hemodinámica en modelo de cabeza humana .	96
4	Conclusiones	101
Apéndice		110
A	La aproximación de difusión	112
A.0.1	La aproximación P_1	115
B	El algoritmo FC(Gram)	118
C	Resolución de capa límite	124
Bibliografía		132

1 | Introducción

1.1 Descripción general del trabajo

El objetivo principal planteado en esta Tesis es el desarrollo de estrategias computacionales para el estudio de problemas de transporte de partículas neutras, y para la caracterización de los medios atravesados por estas. Específicamente, concierne al estudio de radiación de fotones y flujos de neutrones.

En concreto, lo que buscamos es resolver el llamado **problema inverso**, que consiste en determinar las características del medio participante basados en los datos obtenidos por mediciones de radiación producida por fuentes externas conocidas. La idea fundamental radica en suponer inicialmente unos parámetros físicos del medio (coeficientes de absorción y dispersión en distintas regiones del mismo), y luego, mediante la resolución del **problema directo** (es decir, la solución de la ecuación de transporte), simular los resultados que se medirían en los detectores. Seguidamente, estos se contrastan con los valores reales experimentales, y mediante una serie de iteraciones se busca que las diferencias entre las predicciones teóricas y las mediciones experimentales se minimicen. Si bien esto tiene numerosas aplicaciones, daremos prioridad al estudio orientado hacia la tomografía óptica, y en particular, a la caracterización de medios biológicos (tejido humano). Por ello, sin perder generalidad, nos referiremos mayormente durante el transcurso de esta Tesis, a la ecuación de transporte radiativo (ETR).

La resolución de este problema exige enormes recursos computacionales, fundamentalmente debido a su alta dimensionalidad. Para el problema directo, deben tomarse en cuenta las tres dimensiones espaciales, y en cada punto se deben considerar las direcciones angulares para la propagación de la radiación. Sumado a esto y dado que su solución se obtiene a través de la evolución de un estado inicial, se debe incluir la variable temporal. El problema directo por sí mismo presenta grandes complejidades numéricas, especialmente si los escenarios a resolver incluyen medios inhomogéneos, geometrías complicadas, y condiciones de borde específicas. Por ello, es muy común el uso de la aproximación de difusión, que simplifica notablemente los cálculos. Desafortunadamente, esta aproximación no es válida para medios no dispersivos, especialmente para los casos tratados en nuestro trabajo.

El problema inverso es aún más complicado. En este caso, se supone que se cuenta con resultados experimentales, por ejemplo, el flujo de radiación emitido por ciertas fuentes, y luego medido por ciertos detectores. Lo que se busca determinar, son las propiedades del medio. Para ello, las simulaciones numéricas parten de una configuración inicial, con la que se resuelve la ecuación de transporte, obteniendo los resultados teóricos que representan a las mediciones en los detectores. Este procedimiento se itera, modificando las propiedades del medio, hasta que las diferencias entre las predicciones teóricas y los valores experimentales medidos en los detectores sean despreciables. Como se percibe, este problema exige numerosos pasos de iteración, donde en cada uno de ellos se resuelve un problema directo. Además, la minimización exige el almacenamiento en memoria de los diferentes resultados, que permitan inferir los cambios en los parámetros que llevan hacia el mínimo.

En nuestro trabajo aplicamos un novedoso método de resolución de ecuaciones diferenciales, para el tratamiento de la ecuación de transporte. Se trata del método de continuación de Fourier para ordenadas discretas (FC-DOM, por *Fourier Continuation – Discrete Ordinates Method*), que explicaremos en detalle. Este método convierte cualquier función arbitraria en periódica, y por ende, permite la resolución de las ecuaciones utilizando transformadas de Fourier. Con ello se logran enormes precisiones y una gran economía de recursos computacionales. Dedicamos un capítulo entero al desarrollo del método, a sus aplicaciones en problemas modelo y a la descripción teórica de experimentos, análisis de errores y comparaciones con otros métodos.

Por supuesto que al tratarse de problemas de alta complejidad numérica, es menester dedicar esfuerzos en su resolución mediante técnicas computacionales de alta performance. Si bien es común encontrar que los problemas directos se resuelven utilizando arquitecturas gráficas (GPU), generalmente estos métodos se basan en la aproximación difusiva, la cual no es viable en problemas de tomografía óptica como los que discutiremos. Tampoco son útiles estas arquitecturas para el tratamiento del problema inverso, debido a la enorme demanda de almacenamiento de memoria que requieren estos cálculos. En nuestro trabajo, desarrollamos una estrategia de paralelización basada en una descomposición de dominio. Combinando esta estrategia con el método FC-DOM, se logra un factor de escalabilidad que supera al

número de procesadores empleados (escalabilidad ideal). Esta estrategia de paralelización se explicará en detalle, junto con ciertos ejemplos de su aplicación.

Un componente adicional que desarrollamos en nuestra investigación, consiste en el tratamiento de las fuentes, que pueden encenderse en diferentes tiempos, como un conjunto de fuentes generalizadas. Esto significa, que consideramos a varias fuentes independientes, como una fuente única que varía en el tiempo. De esta manera, es posible resolver el problema inverso una sola vez, en lugar de hacerlo una vez por cada fuente. Con esta estrategia logramos reducir considerablemente los tiempos de cálculo, haciéndolos independientes del número de fuentes. Esto es importante, porque al incrementar las fuentes y los detectores, y al encender las primeras en distintos tiempos, se logra obtener mayor información del sistema, y por consiguiente, una mejor reconstrucción de las características del mismo.

Todas las estrategias y métodos de cálculo serán desarrolladas en detalle, brindando ejemplos de aplicaciones, y comparaciones con resultados analíticos y experimentales. En particular, reproduciremos dos ejemplos reales, de un cuello humano y de una cabeza humana, en los cuales se reconstruyen imágenes de resonancia magnética, a las que le agregamos algunas inclusiones, que pueden representar tumores o regiones de activación hemodinámica. Mostraremos la excelente reproducción teórica de estas imágenes, junto a la discusión correspondiente que demuestra la enorme eficiencia de nuestros métodos.

La organización de esta Tesis es la siguiente: En el Capítulo 2 se describe la ETR y su interpretación física. Se presenta el método FC–DOM, y su validación mediante comparaciones con resultados analíticos y experimentales. Este capítulo finaliza con la identificación y caracterización de las estructuras de capa límite existentes en las soluciones a la ETR, donde se propone un método para la correcta resolución de estas estructuras. En el Capítulo 3 se detallan los métodos y algoritmos utilizados para la resolución del problema inverso. Se realizan reconstrucciones de imágenes tomográficas de un cuello y una cabeza humana, para la identificación de tumores y actividad hemodinámica. Finalmente, en el Capítulo 4 se sintetizan los principales logros de este trabajo.

1.2 Motivación

La importancia del modelado del transporte de partículas neutras difícilmente puede ser sobreestimada, ya que encuentra aplicaciones en diversas áreas de la ciencia y la tecnología, como por ejemplo el transporte de radiación térmica para aplicaciones industriales [1, 2], la dinámica de gases [3], el transporte de radiación en atmósferas estelares y planetarias [4–6], el diagnóstico médico de tumores [7–9], la planificación y dosificación de radiación en radioterapia [10, 11], el diagnóstico de artritis [12, 13], la tomografía óptica por fluorescencia [24–26], y el modelado de transporte de neutrones para el desarrollo y diseño de reactores nucleares [14–16], entre otros [17, 18].

La tomografía óptica es una técnica no invasiva en la que radiación electromagnética es inyectada dentro del medio en estudio. La radiación emergente es detectada mediante fotodetectores ubicados en el contorno del medio que se está analizando. A partir de la luz detectada, se pueden reconstruir los parámetros ópticos que caracterizan al mismo. En las aplicaciones médicas, esta técnica ha demostrado numerosas ventajas, entre ellas su bajo costo, la fácil portabilidad, y el empleo de radiación no ionizante (no es cancerígena). Se utiliza en general radiación proveniente de láseres, en un rango del infrarrojo cercano, entre 600 a 900 nanómetros, que corresponde a la ventana de penetración de la piel humana. Para estas longitudes de onda, el tejido biológico se comporta como un medio altamente dispersivo, y permite sentir varios centímetros en el interior del mismo [21]. Los fotones viajan a través del tejido, sufriendo múltiples colisiones de dispersión elástica, describiendo trayectorias aleatorias. Los componentes del tejido biológico pueden identificarse y caracterizarse mediante el denominado coeficiente de absorción óptica.

La tomografía óptica sirve para obtener información tanto anatómica como funcional. La reconstrucción de las propiedades de absorción en el tejido humano permiten la identificación de tumores [7–9]. Estas técnicas se basan en la detección de hemoglobina, que puede hacerse favorablemente utilizando radiación del infrarrojo cercano. Las células tumorales generan —mediante el proceso de angiogénesis—, los vasos sanguíneos necesarios para su alimentación y reproducción. La obtención de imágenes funcionales del cerebro [21–23], se basa en los

grandes cambios que sufre el coeficiente de absorción de la hemoglobina alrededor de los 650 nm, cuando esta absorbe oxígeno (hemoglobina oxigenada vs. desoxihemoglobina). La activación de diferentes regiones del cerebro es acompañada por una respuesta hemodinámica que lleva sangre oxigenada a las mismas, lo que permite detectar aquellas regiones que están funcionando ante determinadas actividades.

2 | El problema directo

En este trabajo resolvemos el problema **inverso** en tomografía óptica como un problema de minimización no lineal. En primer lugar, se debe resolver el problema **directo**, el cual provee un modelo físico para el transporte de fotones en la materia. En este problema, los parámetros son conocidos (condición inicial, condiciones de contorno, y parámetros ópticos) y lo que se busca es la solución a la ecuación de transporte radiativo (ETR), la cual modela el transporte de los fotones en el medio, y da como resultado la distribución espacial de los fotones, para cada dirección de propagación a cada instante del tiempo.

En esta sección presentamos el problema directo, la ecuación de transporte y los métodos numéricos utilizados para su resolución. Dado que los códigos y algoritmos empleados fueron desarrollados en el marco de esta Tesis, presentaremos comparaciones de nuestros resultados numéricos con soluciones manufacturadas, mediciones experimentales y soluciones analíticas, con el fin de validarlos.

Del análisis del problema directo, hemos encontrado características inherentes a las soluciones de la ETR, en particular, la existencia de capas límites exponenciales. En la sección 2.4 se aborda este problema en detalle, junto con el desarrollo de estrategias numéricas propuestas para su correcta resolución.

2.1 La ecuación de transferencia radiativa y su interpretación física

La ecuación de transferencia radiativa es una ecuación de Boltzmann linearizada que modela el transporte de partículas neutras. Esta ecuación establece la conservación de la energía en forma de radiación electromagnética al atravesar la materia. La radiación interactúa con el medio, el cual absorbe, dispersa, y en el caso general, emite radiación electromagnética. Originalmente, esta ecuación fue derivada mediante consideraciones para la conservación de la energía. Tal es el enfoque que puede encontrarse en, *e.g.* [6, 39]. En trabajos más recientes se estableció la conexión entre la ETR y las ecuaciones de Maxwell [17, 18]. También puede establecerse la relación entre la ETR y la ecuación de Boltzmann, en particular la ETR es una ecuación de Boltzmann linearizada, donde no interviene el término no lineal, que corresponde

a las interacciones de las partículas transportadas con ellas mismas [40, Cap. 4]. Para el caso de partículas neutras, como los fotones, dicho término puede considerarse despreciable. En el contexto de este trabajo utilizaremos el modelo directo para el transporte de fotones en un medio participante (*e.g.* tejido biológico). Para ello consideramos el problema ETR dependiente del tiempo para $0 \leq t \leq T$, con condiciones de contorno de Fresnel, y valores iniciales nulos, en dos dimensiones espaciales

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + \hat{\theta} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + a(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \\ & + b(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = b(\mathbf{x}) \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' + s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ & u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t=0) = 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ & u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = f(\hat{\nu} \cdot \hat{\theta})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) + q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_-, \end{aligned} \tag{2.1}$$

donde las unidades de u son $W/(m^2 \text{sr})$. La velocidad media de la luz en el medio participante es c (el vector de velocidad de los fotones es $\vec{v} = c\hat{\theta}$), $a(\mathbf{x})$ y $b(\mathbf{x})$ son los coeficientes macroscópicos de absorción y dispersión, respectivamente. La función $\eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}')$ se denomina función de fase, y representa la probabilidad de que un fotón viajando en la dirección $\hat{\theta}$ sea dispersado en la dirección $\hat{\theta}'$ por interacciones con el medio participante. El tipo de función de fase que consideramos en esta Tesis posee simetría de rotación, en el sentido de que la probabilidad de dispersión se mantiene invariante ante rotaciones del sistema de coordenadas, dependiendo solamente del ángulo $\alpha = \arccos(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}')$ que se forma entre la dirección del fotón incidente $\hat{\theta}$ y la dirección del fotón emergente $\hat{\theta}'$ en el proceso de dispersión. En particular, utilizaremos como modelo de función de fase la función de Henyey–Greenstein [41]

$$\eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') = \frac{1}{2\pi} \frac{1-g^2}{(1+g^2 - 2g\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}')^{3/2}}, \tag{2.2}$$

donde $g \in [-1, 1]$ caracteriza la anisotropía en los procesos de dispersión: un valor de $g = 1$ ($g = -1$) implica una distribución de probabilidad donde todos los fotones emergen en la misma (opuesta) dirección de incidencia. En el caso de dispersión isótropa, donde los fotones emergen de los eventos de colisión con igual probabilidad en cualquier dirección, se tiene $g = 0$ (ver Fig. 2.1).

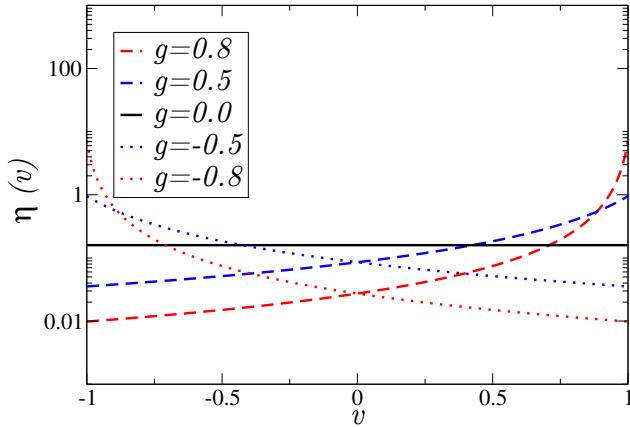


Figura 2.1: Función de fase de Henyey-Greenstein, $\eta(v)$, con $v = \hat{\theta} \cdot \hat{\theta}'$, para distintos valores del factor de anisotropía, g . Para $g \rightarrow 1$ y $g \rightarrow -1$ la función de fase tiende a una distribución delta de Dirac.

En general se exige que la función de fase esté normalizada, de forma tal que

$$\int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta = 1, \quad (2.3)$$

lo cual, físicamente, expresa la conservación de la energía en las colisiones de dispersión, consideradas de tipo elástico. El término $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ modela una fuente ubicada en el interior del dominio, y en tomografía óptica se considera nulo (ya que la radiación incide a través de la frontera $\partial\Omega$), a menos que se indique explícitamente lo contrario.

La Ecuación (2.1) modela el transporte de fotones para una única longitud de onda, que es la longitud de onda de la fuente láser empleada. Los distintos términos en dicha ecuación poseen diferentes significados físicos. El primer término del lado izquierdo, representa la variación temporal de la intensidad específica u para el rayo que viaja en la dirección $\hat{\theta}$. El segundo término es un término de advección, que modela la propagación de los fotones en forma de rayos, reminiscentes a la óptica geométrica. Los términos $a(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ y $b(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ modelan la absorción y dispersión de fotones en el punto \mathbf{x} viajando en la dirección $\hat{\theta}$ a tiempo t . Estos términos eliminan fotones del rayo de dirección $\hat{\theta}$. Para cada par $(x, y) \in \Omega$ habrá un conjunto de direcciones $\hat{\theta} \in S^1$, que para problemas de simetría 2D pueden definirse en el círculo unitario $S^1 = \{\hat{\theta} \in R^2 : \hat{\theta} = \cos(\theta)\hat{x} + \sin(\theta)\hat{y}, \theta \in [0, 2\pi]\}$.

El término integral en el lado derecho de la ecuación puede pensarse como una “fuente” para el rayo que se propaga en la dirección $\hat{\theta}$, la cual modela las contribuciones por dis-

persión desde todos los rayos $\hat{\theta}'$ hacia el rayo $\hat{\theta}$. Dado que trataremos con problemas en dos dimensiones espaciales, esta integral se realiza en el círculo unitario, con $\hat{\theta} \in S^1$, para $\theta \in [0, 2\pi)$.

En tomografía óptica, la condición inicial generalmente se considera nula (segunda línea en la Ec. (2.1)), ya que el medio será iluminado con uno o múltiples pulsos láser, partiendo con las fuentes inicialmente apagadas. También se emplean, generalmente, las condiciones de contorno de Fresnel. El término de Fresnel, $f(\hat{\nu} \cdot \hat{\theta})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)$, modela la reflexión de la radiación electromagnética en la interfase del dominio debido a las diferencias en los índices de refracción con el medio circundante, donde $\hat{\nu}$ indica la normal saliente al contorno $\partial\Omega$ del dominio espacial Ω . El coeficiente de Fresnel para luz no polarizada viene dado por [42]

$$f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) = \begin{cases} \left(\frac{n_\Omega - n_0}{n_\Omega + n_0} \right)^2 & \text{si } \alpha_i = 0, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2(\alpha_t - \alpha_i)}{\sin^2(\alpha_t + \alpha_i)} + \frac{\tan^2(\alpha_t - \alpha_i)}{\tan^2(\alpha_t + \alpha_i)} \right) & \text{si } 0 < \alpha_i < \alpha_c, \\ 1 & \text{si } \alpha_i \geq \alpha_c, \end{cases} \quad (2.4)$$

donde n_Ω indica el índice de refracción en el interior del dominio espacial Ω , y n_0 el índice correspondiente al exterior del dominio. El ángulo $\alpha_i = \arccos(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})$ se mide con respecto a la normal del plano de reflexión, siendo α_t el ángulo que forma la radiación emergente transmitida en la interfase del medio, y α_c el ángulo crítico de reflexión total interna. Estos últimos se obtienen a partir de la ley de Snell. Para el ángulo de transmisión se cumple, en general, $n_\Omega \sin(\alpha_i) = n_0 \sin(\alpha_t)$ y para el ángulo de reflexión total interna $n_\Omega \sin(\alpha_c) = n_0$. La dirección reflejada $\hat{\theta}_r = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}$, donde $\bar{\mathbf{R}} = \bar{\mathbf{1}} - 2\hat{\nu}\hat{\nu}^T$ es la matriz de reflexión (también conocida como transformación de Householder) con respecto al plano de normal $\hat{\nu}$, donde $\bar{\mathbf{1}}$ es la matriz identidad y $\hat{\nu}^T$ indica el vector transpuesto de $\hat{\nu}$. El segundo término en la condición de contorno, q , es la fuente, que en el marco de nuestro trabajo modela uno o múltiples láseres que iluminan el contorno del dominio espacial $\partial\Omega$. Las condiciones de contorno se imponen para la radiación entrante al dominio espacial Ω a través de su contorno $\partial\Omega$. Los conjuntos de direcciones para la radiación entrante (Γ_-) y saliente (Γ_+) se definen según $\Gamma_{\pm} = \{(\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \partial\Omega \times S^1, \pm \hat{\nu} \cdot \hat{\theta} > 0\}$. El último término, s , modela una fuente en el interior del dominio Ω y en general lo consideraremos nulo, a menos que se especifique lo contrario.

A partir de la intensidad específica $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ pueden definirse magnitudes derivadas. Una de ellas es la densidad total de fotones en el punto \mathbf{x} a tiempo t . Esta magnitud es la que se modela, por ejemplo, en la aproximación de difusión (ver apéndice A), y es cuantificada por el flujo escalar

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int_{S^1} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta. \quad (2.5)$$

Análogamente puede definirse la corriente de fotones

$$\vec{J}(\mathbf{x}, t) = \int_{S^1} \hat{\theta} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta, \quad (2.6)$$

la cual es una magnitud vectorial. Dado un plano de normal $\hat{\nu}$, el producto escalar $\vec{J}(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\nu}$ cuantifica el flujo neto de fotones atravesando el plano de normal $\hat{\nu}$ en el punto \mathbf{x} a tiempo t .

Utilizando

$$\hat{\theta} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \nabla \cdot [\hat{\theta} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)], \quad (2.7)$$

e integrando en la variable angular θ la ecuación integro-diferencial (2.1), y utilizando (2.3) se obtiene

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\mathbf{x}, t) + (a(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}))\phi(\mathbf{x}, t) = b(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}, t) + s_0(\mathbf{x}, t) \quad (2.8)$$

donde $s_0 = \int_{S^1} s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta$. Integrando la Ecuación (2.8) en el dominio espacial, utilizando el teorema de la divergencia y reordenando los términos, se llega a la siguiente ecuación de balance

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} s_0(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \oint_{\partial\Omega} \vec{J}(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\nu} dS - \int_{\Omega} a(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}, \quad (2.9)$$

la cual expresa la conservación global de la radiación en el volumen Ω , donde la variación temporal del número total de fotones viene dada por el aporte de la fuente s_0 , menos el flujo de fotones salientes a través de la superficie del dominio $\partial\Omega$, menos los fotones absorbidos por el medio participante. Dado que las interacciones de dispersión consideradas son de tipo elásticas, el número de fotones se conserva en estos procesos, y por lo tanto, los términos asociados al coeficiente de dispersión $b(\mathbf{x})$ no intervienen en el balance global (2.9).

Siendo (2.1) una ecuación de Boltzmann, se encuentra definida en el espacio de las fases, y su solución proporciona información detallada sobre el estado y distribución de los fotones

y de su evolución temporal. Por esta razón, el problema de transferencia radiativa es multi-dimensional, involucra las variables espaciales \mathbf{x} , y las variables angulares $\hat{\theta}$, asociadas a las velocidades de los fotones. Debido a la alta dimensionalidad de la Ec. (2.1), su resolución numérica puede resultar altamente costosa, especialmente cuando se consideran tres dimensiones espaciales. En tal caso, debe agregarse a las dimensiones espaciales y al tiempo, la discretización de la variable angular, que en dicho caso queda definida en la esfera unitaria S^2 . En tres dimensiones, a las tres variables espaciales, se suman dos variables asociadas a las direcciones, y una variable temporal, constituyendo un serio desafío numérico, aún para los métodos más eficientes. Por este motivo, en esta Tesis nos restringimos a casos de simetría 2D, donde el problema puede tratarse en dos dimensiones espaciales, con una única variable angular, $\hat{\theta}(\theta)$.

2.2 Métodos numéricos

El tratamiento numérico de la ETR dependiente del tiempo requiere de una discretización de todas las variables en el espacio de fases, es decir, sus variables espaciales, direccionales y temporal. En esta sección describimos un algoritmo que proporciona soluciones con alta precisión numérica. La estrategia de paralelización mediante la descomposición de dominio presenta, además, una eficiencia de escalabilidad *ideal*, demostrada con hasta 256 procesadores. Cabe destacar que para lograr alta precisión numérica, deben exigirse ciertas condiciones de regularidad en la solución numérica, y en los coeficientes de la ETR. En casos de variaciones abruptas, las grillas numéricas empleadas deben ser lo suficientemente densas como para resolverlas. De lo contrario, surgirán errores de aproximación relacionados al orden de diferenciabilidad de la solución, que limitarán el orden de convergencia.

2.2.1 Discretización de la variable angular

Para la discretización de la variable angular empleamos el método de ordenadas discretas. Este es un método espectral, originalmente introducido por Chandrasekhar para el estudio de la propagación de la radiación en atmósferas estelares y planetarias [6]. Posteriormente

fue extendido para el estudio del transporte de neutrones en geometrías generales, para aplicaciones en el desarrollo de reactores nucleares por Carlson *et al.* [43]. Este método permite el tratamiento del término colisional por medio de una integración numérica, en las cuales las M direcciones discretas quedan definidas por las abscisas de la cuadratura. En nuestro algoritmo explícito para 2D, definimos los cosenos directores utilizando la regla trapezoidal, de donde resultan las direcciones discretas $\hat{\theta}_m(\theta_m) = (\hat{\theta} \cdot \hat{x}, \hat{\theta} \cdot \hat{y}) = (\cos(\theta_m), \sin(\theta_m))$.

Dado que la intensidad específica $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ posee simetría rotacional para ángulos de 2π en la variable $\hat{\theta}$, y siempre que la solución de transporte sea lo suficientemente suave, el uso de la regla trapezoidal proporciona aproximaciones con convergencia espectral. Las direcciones discretas se especifican según

$$\theta_m = \frac{2\pi(m-1)}{M}, \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.10)$$

con los pesos de cuadratura dados por $w_m = 2\pi/M$.

Llamando $u_m = u(x, \hat{\theta}_m, t)$ a la intensidad específica en la dirección $\hat{\theta}_m$, la versión semidiscretizada de la Ecuación (2.1) en el dominio de la velocidad resulta

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u_m}{\partial t} + \hat{\theta}_m \cdot \nabla u_m + (a+b)u_m - b \sum_{m'=1}^M w_{m'} p_{m,m'} u_{m'} + \mathcal{O}(e^{-hM}) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M.$$

siendo h una constante y donde el término exponencial expresa el tipo de convergencia.

2.2.2 Discretización de la variable temporal

La evolución temporal se realiza empleando el método de Adams–Bashforth de cuarto orden, que ofrece una buena relación entre precisión y estabilidad. Llamando $u_m^k = u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_m, t^k)$, con $t^k = (k-1)\Delta t$ a la solución de la ETR dependiente del tiempo, se propaga temporalmente utilizando

$$u_m^{k+1} = u_m^k + c\Delta t \sum_{\ell=0}^3 \chi_\ell \mathcal{L}(u_m^{k-\ell}) + \mathcal{O}(\Delta t^4) + \mathcal{O}(e^{-hM}) \quad (2.11)$$

donde

$$\mathcal{L}(u_m^k) = b \sum_{m'=1}^M w_{m'} p_{m,m'} u_{m'}^k - (b+a)u_m^k - \hat{\theta}_m \cdot \nabla u_m^k$$

con los coeficientes $\chi_0 = 55/44$, $\chi_1 = -59/24$, $\chi_2 = 37/24$ y $\chi_4 = -3/8$. Nuestro esquema permite emplear condiciones iniciales arbitrarias, tal como se muestra para la solución de las

ecuaciones de Navier–Stokes en la Sección 5 de la ref. [44]. En nuestro trabajo, los cuatro pasos temporales iniciales necesarios para inicializar el esquema son considerados nulos. Esta configuración es apropiada para el modelo directo en tomografía óptica, dado que utilizaremos pulsos láser que inyectan radiación, con las fuentes inicialmente apagadas.

2.2.3 Discretización de la variable espacial: el método de Continuación de Fourier (FC)

Para la discretización espacial, desarrollamos la implementación del método de Continuación de Fourier (FC) [45–47]. Partiendo de una función arbitraria, el método FC produce una función continuada, que la convierte en periódica. El método FC es un tipo de colocación de Fourier que permite el tratamiento de condiciones de contorno arbitrarias, con convergencia de tipo espectral. Éste método ha sido aplicado a la resolución de las ecuaciones de Navier–Stokes [46, 48], la ecuación de difusión [45], y la ecuación de onda [49], entre otras. En esta Tesis extendimos su uso para la resolución de la Ecuación (2.1) [33].

Describiremos brevemente el método FC (para mayor detalle, ver apéndice B). Utilizamos una grilla uniforme en la dirección \hat{x} , de tamaño Δx (análogamente en la dirección \hat{y})

$$\Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N} = \frac{x_{N+1} - x_1}{N}, x_i = x_{\min} + (i - 1)\Delta x$$

Aproximaremos el gradiente espacial mediante el método FC. Para construir la función periódica de, *e.g.* $g(x) = u_m^k(x, y_j)$ para un dado y_j , consideramos dos vectores que son generados a partir de la función discretizada $\mathbf{g} = [g_1, \dots, g(x_i), \dots, g_{N+1}]^T$. Llamamos a estos vectores \mathbf{g}_l y \mathbf{g}_r . El primero se obtiene de proyectar los primeros d_l puntos de \mathbf{g} , g_1, \dots, g_{d_l} en una base de polinomios Gram (ver apéndice B). El segundo, \mathbf{g}_r , se obtiene de proyectar los últimos d_r puntos $g_{N+2-d_r}, \dots, g_{N+1}$ en dicha base. El proceso de continuación puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Los d_l puntos g_1, \dots, g_{d_l} y los d_r $g_{N+2-d_r}, \dots, g_{N+1}$ son proyectados en una base de polinomios Gram.
2. Se generan continuaciones suaves a cero $\tilde{\mathbf{g}}_l$ y $\tilde{\mathbf{g}}_r$ sobre la base de extensiones precalculadas con alta precisión (ver Apéndice B) para cada uno de los polinomios Gram.

3. Se generan dos nuevos vectores \mathbf{g}_l y \mathbf{g}_r que expanden las dimensiones de $\tilde{\mathbf{g}}_l$ y $\tilde{\mathbf{g}}_r$ a $C+E$, agregando un número E de componentes nulas al vector. Esta extensión es utilizada para obtener vectores cuya dimensión puede factorizarse en números primos pequeños, permitiendo el uso eficiente de la Transformada Rápida de Fourier.
4. La función discreta continuada de $N+1+C+E$ componentes vendrá dada por el vector \mathbf{g}_c :

$$\mathbf{g}_c = \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \mathbf{g}_l + \mathbf{g}_r \end{bmatrix},$$

donde $\mathbf{g}_i = g(x_i)$ corresponde a la i -ésima componente del vector de $N+1$ elementos dados por la función original discretizada.

El tercer paso permite la utilización eficiente de la Transformada Rápida de Fourier (FFT, del inglés Fast Fourier Transform), independientemente del número de puntos utilizados en la grilla. Si $g(x)$ es una función suave, con derivadas continuas, el procedimiento de continuación detallado genera una función suave y periódica tal que $\mathbf{g}_{c,i} = \mathbf{g}_i$ para $i = 1, 2, \dots, N+1$.

Como ejemplo, en la Fig. (2.2) se muestra la continuación producida para la función $g(x) = 12 + x^2 - e^{x/3}$ en el intervalo $x \in [0, 6]$. Utilizamos $N = 60$ puntos en la grilla, con $C = 25$ puntos de continuación (en círculos), y $d_l = d_r = 5$ (diamantes). Eligiendo $E = 4$, se obtiene $N_p = N + 1 + C + E = 90$, que se puede factorizar en números primos pequeños ($N_p = 2 \times 3 \times 3 \times 5$). En general, fijamos N_p ajustando el número E de forma tal que $N_p = \prod_{\gamma=1}^F \pi_\gamma$, con los factores primos pequeños cumpliendo $\pi_1 \leq \pi_2 \leq \dots \leq \pi_F \leq 5$.

Utilizando la transformada de Fourier discreta (donde ahora i representa a la unidad imaginaria):

$$g_c(x_j) = \sum_{k=-N_p/2}^{N_p/2} a_k \exp \left(\frac{2\pi i k}{b} [x_j - x_{\min}] \right). \quad (2.12)$$

Para reforzar la estabilidad y la robustez del método, empleamos un filtro exponencial que atenúa los modos de mayor frecuencia [46]:

$$\hat{a}_k = a_k \times \exp \left(-\alpha \left| \frac{2k}{N_p} \right|^{2\beta} \right), \quad (2.13)$$

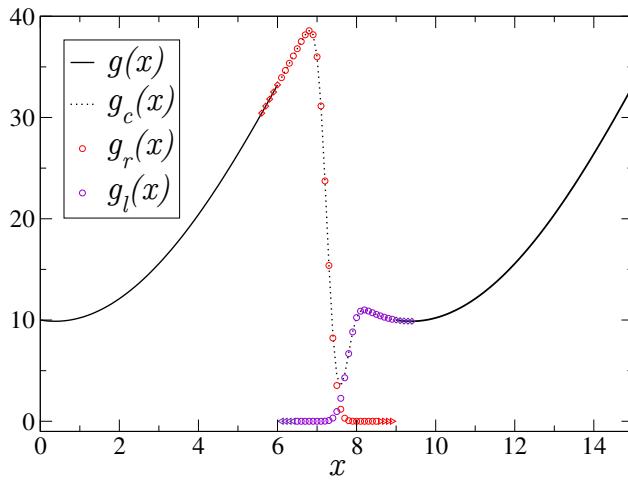


Figura 2.2: Función $g(x) = 12 + x^2 - e^{x/3}$ y su continuación de Fourier. La función original está definida para $x \in [0, 6]$. Los círculos muestran las continuaciones a cero, $g_l(x)$ y $g_r(x)$. La línea punteada muestra la continuación periódica obtenida. Los diamantes muestran los puntos en los extremos de la función que se utilizan en la proyección en polinomios Gram para generar las continuaciones a cero, con $d_l = d_r = 5$. Los triángulos muestran los $E = 4$ puntos extra utilizados en este ejemplo.

donde usamos $\alpha = 2$ y $\beta = 55$, siendo estos valores apropiados para el esquema de Adams–Bashforth de cuarto orden empleado. La derivada se obtiene a partir de la representación de Fourier:

$$\frac{dg_c(x_j)}{dx} = \sum_{k=-N_p/2}^{N_p/2} \frac{2\pi ik}{b} \hat{a}_k \exp\left(\frac{2\pi ik}{b}[x_j - x_{\min}]\right), \quad (2.14)$$

con el período de la función continuada dado por $b = (N_p - 1)\Delta x$.

2.2.4 Descomposición de dominio e implementación en paralelo: El método FC–DOM

Para afrontar el alto costo computacional asociado a la resolución numérica de la ETR, empleamos una estrategia de descomposición del dominio espacial Ω , que permite su implementación en sistemas de computación en paralelo. Con este fin, el dominio es dividido en subdominios solapados, tales que $\Omega = \cup_{s=1}^{N_c} \Omega_s$. En el interior del dominio discretizado Ω , los subdominios Ω_s se superponen en cuatro puntos de la grilla numérica. La paralelización

consiste en asignar a cada proceso un subdominio Ω_s con $N_{x,s}$ y $N_{y,s}$ puntos en cada dirección espacial, siendo el número total de procesos N_c , típicamente el número total de procesadores físicos disponibles.

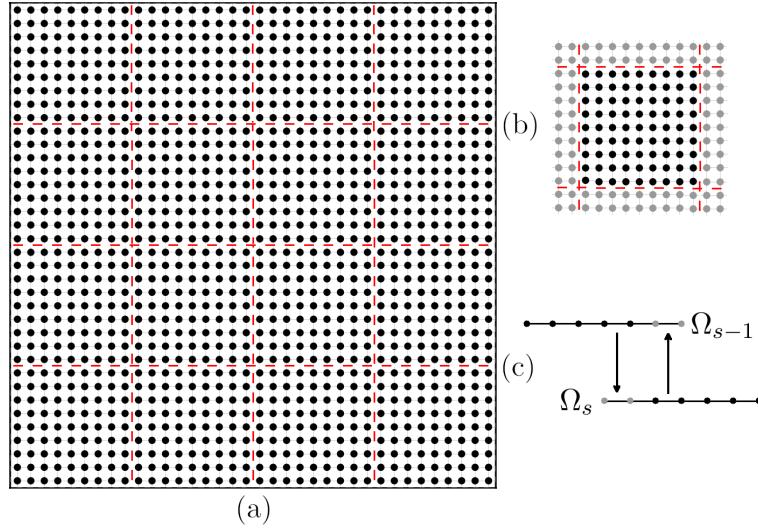


Figura 2.3: a) El dominio Ω es dividido en subdominios disjuntos $\tilde{\Omega}_s$ de modo que $\Omega = \cup_{s=1}^{N_c} \tilde{\Omega}_s$. b) Cada subdominio $\tilde{\Omega}_s$ es extendido en dos puntos (círculos grises) en cada dirección espacial, formando una descomposición en subdominios solapados Ω_s , los cuales se superponen con los subdominios vecinos de forma que $\Omega = \cup_{s=1}^{N_c} \Omega_s$. En esta región se recibe información de subdominios vecinos. c) Intercambio de información en los bordes de los subdominios solapados Ω_s y Ω_{s-1} . El procesador s envía a su vecino $s - 1$ la información del tercer y cuarto punto de la grilla s , y recibe de su vecino los primeros dos puntos.

Cada subdominio contiene un conjunto de puntos $x_s \in [x_{\min,s}, x_{\max,s}]$ y $y_s \in [y_{\min,s}, y_{\max,s}]$, con los puntos en la grilla dados por $x_i = x_{\min,s} + (i-1)\Delta x$ e $y_j = y_{\min,s} + (j-1)\Delta y$. Definimos $u_m^k(x, y_j) \equiv u_{m,j}^k(x)$ la intensidad específica discretizada a tiempo t^k , en la dirección $\hat{\theta}_m$, donde se fijó $y_j \in y_s$ para cualquier $x \in x_s$. Similarmente definimos $u_m^k(x_i, y) \equiv u_{m,i}^k(y)$. Al final de cada paso temporal, se realiza el intercambio de puntos entre subdominios vecinos para todos los bordes que no son físicos (bordes originados por la partición), para cada proceso, en cada dirección espacial, y para cada punto de la grilla en esa dirección, como se ilustra en la Figura (2.3).

En suma, el algoritmo que resulta de la combinación del método FC con el método de

ordenadas discretas (D.O.M., del inglés discrete ordinates method), y el método de propagación temporal, lo denominamos método FC–DOM [33]. El pseudocódigo se presenta en el algoritmo (1).

Algoritmo 1 FC–DOM en paralelo

- 1: Generar descomposición de dominio
 - 2: Asignar un subdominio Ω_s a cada procesador.
 - 3: **para** cada Ω_s **hacer** en paralelo
 - 4: Asignar vectores iniciales para el esquema de Adams–Bashforth.
 - 5: **para** cada paso temporal k **hacer**
 - 6: **para** Cada dirección $\hat{\theta}_m$ **hacer**
 - 7: **para** cada y_j **hacer** en la dirección \hat{x}
 - 8: Aplicar la continuación de Fourier a $u_{m,j}^k(x)$.
 - 9: Aplicar la Transformada Rápida de Fourier para obtener Ec. (2.12).
 - 10: Evaluar $\partial u_{m,j}^k(x)/\partial x$ usando la Ec. (2.14).
 - 11: **terminar**
 - 12: **para** cada x_i **hacer** en la dirección \hat{y}
 - 13: Aplicar la continuación de Fourier a $u_{m,i}^k(y)$.
 - 14: Aplicar la Transformada Rápida de Fourier para obtener Ec. (2.12).
 - 15: Evaluar $\partial u_{m,i}^k(y)/\partial y$ usando Ec. (2.14).
 - 16: **terminar**
 - 17: Evaluar el lado derecho de la Ec. (2.11).
 - 18: Imponer condiciones de borde.
 - 19: Intercambiar bordes no físicos entre subdominios vecinos.
 - 20: **terminar**
 - 21: **terminar**
 - 22: **terminar**
-

Para realizar un estudio de escalabilidad proponemos un problema típico, con $N = 2000$ puntos en cada coordenada espacial $M = 16$ direcciones, y $T = 1000$ pasos temporales. Se utilizó un cluster con procesadores Intel Xeon E5-2630 v3 at 2.40GHz de 24 núcleos físicos y

128Gb de memoria RAM por nodo. Esta máquina implementa la tecnología “Intel turbo”, que acelera el desempeño del procesador dependiendo de la carga de trabajo y el entorno operativo. Para realizar un análisis correcto de escalabilidad, y balancear apropiadamente la carga de los nodos, utilizamos 16 procesadores por nodo, comparando los tiempos computacionales entre 1 y 16 nodos. En la Figura 2.4 se observan los tiempos de cómputo normalizados $t^* = t/t_{16}$ con respecto al tiempo de cómputo en 16 procesadores. Como se observa, el algoritmo propuesto presenta *escalabilidad paralela perfecta* hasta los 256 procesadores para los que fue probado.

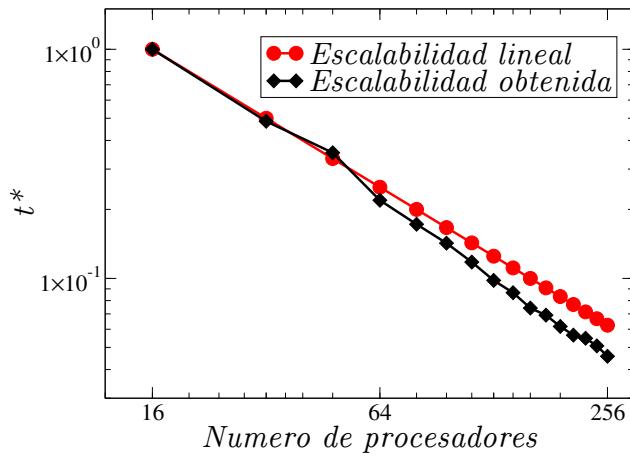


Figura 2.4: Estudio de escalabilidad para problema modelo. Círculos rojos: escalabilidad perfecta, para 256 procesadores $1/t^* = 16$. Diamantes negros: Escalabilidad obtenida, $1/t^* = 21.872$, dando una eficiencia de 136.7%.

La razón por la cual la escalabilidad obtenida es supralineal se desarrolla ampliamente en el trabajo de Albin y Bruno [46] (sección 6). Esencialmente, esto se debe a que las transformaciones FFT poseen una complejidad computacional $\mathcal{O}(N \log(N))$.

En la referencia [36] se realiza una revisión de algoritmos propuestos en la literatura para la parallelización de la ETR. Todas las estrategias muestran una escalabilidad significativamente por debajo de la ideal, con excepción de la ref. [37], que presenta resultados para escenarios muy restringidos. En adición a los ejemplos presentados, hemos comparado el tiempo de cómputo empleado para resolver un problema modelo en 2D planteado por Fujii [38, p. 153], para el que reporta un tiempo de cálculo de 44,3 horas utilizando un único procesador. Pudimos resolver este problema empleando los mismos parámetros y la misma grilla numérica,

en menos de treinta minutos, utilizando 64 procesadores. Nuestros algoritmos resultan en escalabilidad ideal, independientemente del régimen de transporte, sin restricciones para los coeficientes de absorción y dispersión, el número de fuentes empleadas o el número de ordenadas discretas que se utilicen.

2.3 Validación

Dado que los algoritmos y los códigos utilizados han sido desarrollados originalmente en este trabajo, ha sido necesario realizar exhaustivas pruebas de convergencia y validación. Para ello, hemos corroborado nuestros resultados tanto con valores experimentales como con soluciones analíticas reportadas en la literatura.

2.3.1 Convergencia de soluciones manufacturadas

Para mostrar las propiedades de convergencia del algoritmo propuesto, estudiamos un problema manufacturado, analizando el error generado en la propagación de la solución. Con este fin, resolvemos el problema ETR dado por

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + \hat{\theta} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + a(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \\ + b(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' + s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t=0) = u_0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1, \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = u_b, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_-. \end{aligned}$$

para $0 \leq t \leq T$.

Proponemos la solución manufacturada

$$u^{\text{an}}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = e^{-(x-t)^2 - (y-t)^2 - \cos(\theta)^2}.$$

donde el término de la fuente $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$, la condición inicial $u_0(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ y las condiciones de contorno $u_b(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ en la Ecuación (2.3.1) se obtienen, respectivamente, aplicando el operador de transporte, evaluando a tiempo $t = 0$ y en Γ_- la solución manufacturada propuesta (2.3.1).

Resolvemos el problema (2.3.1) en un dominio cuadrado

$\Omega = \{\mathbf{x} \in [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]\}$ donde $x_{\min} = y_{\min} = 0$ cm, $x_{\max} = y_{\max} = 3$ cm, y evolucionamos la solución hasta el tiempo final $T = 3$ ps. Utilizamos una descomposición de 8 subdominios para poder realizar estas pruebas en una PC de escritorio. El coeficiente de dispersión en el medio considerado es isótropo, con $g = 0$, $a(\mathbf{x}) = 0.35/\text{cm}$ y $b(\mathbf{x}) = 20/\text{cm}$. Evaluamos el error máximo obtenido en todo el dominio comparando el flujo escalar dado por la Ecuación (2.5) obtenido numéricamente comparado con el obtenido analíticamente

$$\phi^{\text{an}}(\mathbf{x}, t) = \int_{2\pi} u^{\text{an}}(\mathbf{x}, \theta, t) d\theta = k_\phi \times e^{-(x-t)^2 - (y-t)^2},$$

$$k_\phi = \int_{2\pi} e^{-\cos(\theta)^2} d\theta \simeq 4,052876133898710,$$

y estudiamos las propiedades de convergencia para todas las variables involucradas. La constante k_ϕ se calcula con 16 dígitos de precisión. La solución numérica es evaluada hasta el tiempo final T , y luego se calcula el error máximo según

$$\varepsilon = \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |\phi^{\text{num}}(\mathbf{x}, T) - \phi^{\text{an}}(\mathbf{x}, T)|.$$

El error numérico es en general una función de cada una de las variables discretizadas en la ETR, *i.e.* $\varepsilon = \varepsilon(\Delta x, \Delta \theta, \Delta t)$. Al comparar el término del error para una grilla de una dada variable, el resto de los parámetros de discretización permanecen fijos.

El alto orden de convergencia del algoritmo FC–DOM en paralelo para la solución manufacturada propuesta se muestra en la Figura (2.5). Esta convergencia es la esperada dadas

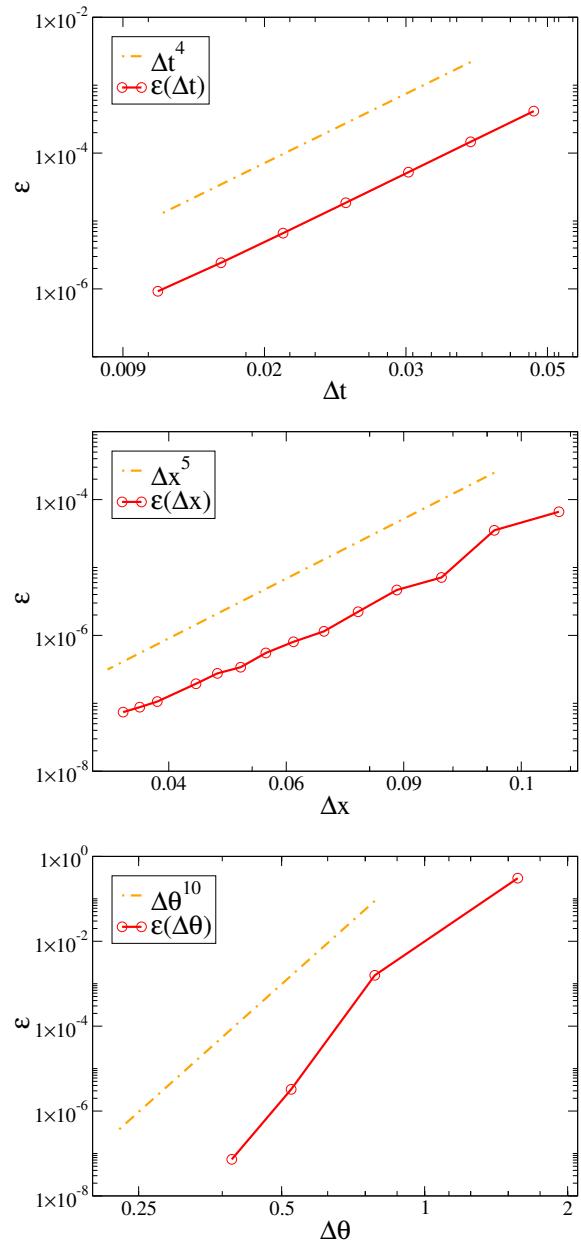


Figura 2.5: Convergencia del algoritmo FC–DOM en paralelo para cada una de las variables en la ETR. Las líneas rectas discontinuas muestran la pendiente para un orden de convergencia prescripto.

las aproximaciones numéricas empleadas.

2.3.2 Comparación con resultados experimentales

En esta sección comparamos los resultados producidos por el algoritmo FC–DOM con resultados experimentales obtenidos para varios medios similares al tejido humano, realizados por Klose *et al.* [12]. En las mediciones reportadas en dicha referencia, se utilizan fantomas compuestos de resina epoxy y tinta, con una concentración de monoeféreas de dióxido de silicio (SiO_2). La tinta permite ajustar la absorción óptica del fantoma, mientras que las monoeféreas de silicio determinan su dispersión. Las propiedades ópticas del medio (los coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$ y dispersión $b(\mathbf{x})$ y el factor de anisotropía g) han sido determinadas por Klose *et al.* mediante diferentes métodos independientes. Estos incluyen simulaciones de Monte–Carlo, la técnica de esfera integradora, aproximación de difusión, y teoría de dispersión de Mie para ondas electromagnéticas.

La aproximación de difusión, ampliamente utilizada en tomografía óptica para el modelado de transporte de fotones en el tejido biológico, es válida para medios de alta dispersión, baja absorción y en regiones alejadas de las fuentes. Dado que nuestro método resuelve el problema ETR completo, podemos considerar adecuadamente medios con baja absorción y dispersión, como puede ser el fluido cerebroespinal en la cabeza, o la tráquea en un cuello humano.

Analizaremos dos arreglos experimentales diferentes propuestos por Klose *et al.*. Estos poseen simetría 2D, apropiada para nuestro tratamiento. En el primer experimento, se simula un cubo homogéneo, de propiedades ópticas dadas en la Tabla 2.1. En el segundo, la geometría del fantoma también es cúbica, pero contiene una inhomogeneidad en forma de anillo cilíndrico, con agua en su interior. Esta inhomogeneidad es similar a la que se encuentra en el fluido cerebroespinal, y el fantoma constituye un modelo simple para una cabeza humana. En ambos experimentos, los fantomas fueron iluminados con luz láser en el infrarrojo ($\lambda = 678 \text{ nm}$), en tres posiciones a lo largo del eje x . Se detectó la luz emergente en dos de las caras de los fantomas, como se muestra en la Figura (2.6).

El método de continuación de Fourier extiende la intensidad específica en el borde del

Tabla 2.1: Propiedades ópticas de los fantomas

$b [cm^{-1}]$	$a [cm^{-1}]$	g	n_Ω
58	0.35	0.8	1.56

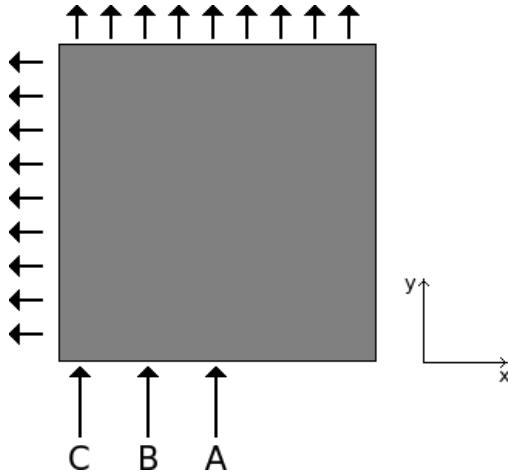


Figura 2.6: Arreglo experimental de Klose *et al.* [12]. Las flechas apuntando hacia el fantoma (A, B y C) muestran las tres posiciones diferentes en las que se inyectó la luz láser. Las flechas salientes muestran las posiciones de los detectores con las que se midió la radiación saliente.

dominio, permitiendo el tratamiento de condiciones de borde generales y no periódicas. Esto previene el surgimiento del fenómeno de Gibbs debido a la no periodicidad de la función. La fuente $q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ y los parámetros ópticos también pueden dar origen al fenómeno de Gibbs si no son tratados correctamente. Los problemas numéricos que surgen debido a discontinuidades son resueltos mediante aproximaciones arbitrariamente precisas introduciendo funciones suaves que presentan variaciones rápidas en la región de discontinuidad (en conjunto con discretizaciones capaces de resolver dichas variaciones).

Dado que nuestro algoritmo resuelve el problema ETR dependiente del tiempo, y que los resultados experimentales reportados por Klose *et al.* son independientes del tiempo, evaluaremos la corriente de fotones saliente

$$\vec{J}_+(\mathbf{x}, t) = \int_{\Gamma_+} [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta, \quad (2.15)$$

utilizando una función sigmoidea para el perfil temporal, $T(t)$, que varía suavemente desde

cero hasta uno. La solución independiente del tiempo se adquiere a un tiempo asintótico. La fuente láser se modela por la función

$$q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = T(t) \exp\left(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_s|^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2.16)$$

donde el valor de $\sigma = 0.1$ cm es el reportado para el experimento y \mathbf{x}_s representa la posición del láser. La información direccional de la fuente puede ser muy valiosa en diversos tipos de experimentos. En el caso particular que analizamos, el medio es altamente dispersivo. Por lo tanto, los fotones pierden rápidamente esta información luego de atravesar una corta distancia (del orden del camino libre medio).

Se resuelve la ETR para un número de pasos temporales, hasta que la solución alcanza, numéricamente, el comportamiento asintótico [45], para el cual $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial u}{\partial t} = 0$. Luego se evalúa el operador de la Ecuación (2.15) en las regiones de la superficie en $\partial\Omega$ donde se ubican los detectores. Una vez calculada la corriente de fotones salientes, se realiza una normalización para ubicar la lectura de los resultados experimentales (reportados en escala arbitraria) en la misma escala que los obtenidos por el método FC–DOM. Para las detecciones a lo largo del eje x se normalizó con respecto al máximo valor de cada curva. Las lecturas de los detectores sobre el eje y se normalizaron ajustando el punto en la grilla numérica que se encontró más cerca de la posición reportada para alguno de los detectores.

2.3.2.1 Fantoma homogéneo

El primer arreglo experimental reportado por [12] se basa en un fantoma homogéneo con los parámetros ópticos dados en la Tabla 2.1. El fantoma posee un tamaño de 3 cm a lo largo de los ejes x e y . La posición del láser \mathbf{x}_s es, para los tres casos considerados $A = (1.5, 0)$ cm, $B = (0.9, 0)$ cm y $C = (0.3, 0)$ cm. En la Figura (2.7) se muestra el flujo escalar (2.5) correspondiente a las tres posiciones de la fuente láser \mathbf{x}_s .

Como puede apreciarse en la figura, el flujo escalar para el caso A es simétrico con respecto al eje vertical situado en la posición de la fuente, pero el sistema pierde esta propiedad cuando la posición de la fuente se ubica más cerca de los bordes, dando lugar a reflexiones que afectan la intensidad de la luz con una dependencia angular particular.

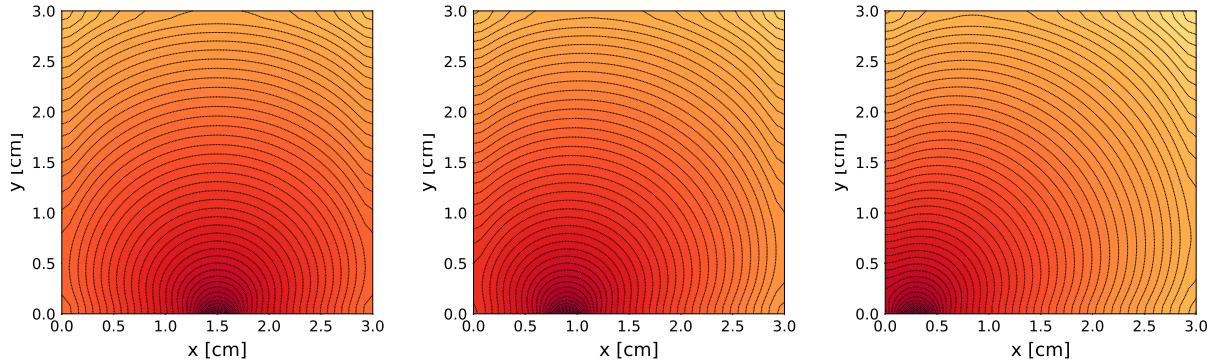


Figura 2.7: Flujo escalar $\phi(\mathbf{x})$ (2.5) obtenido en la simulación para el fantoma homogéneo. Las tres figuras muestran los resultados obtenidos para las fuentes ubicadas en A (izquierda), B (centro) y C (derecha). Debido al decaimiento exponencial inherente a la solución, la figura se presenta en escala logarítmica para apreciar los detalles.

El flujo de fotones que llegan a los detectores, ubicados en el borde $\partial\Omega$ del dominio, se obtuvo mediante la Ecuación (2.15). Los resultados se muestran en la Figura (2.8), para los 28 detectores ubicados en el borde a lo largo del eje x (izquierda) y para los 28 detectores en la dirección y a la derecha. Se observa un acuerdo excelente entre los resultados simulados (líneas) y los datos experimentales (en símbolos). El máximo flujo de fotones salientes \mathcal{J}_+ en los experimentos B, y particularmente en el C, se encuentran desviados con respecto a la posición de la fuente láser. Esto puede explicarse considerando la radiación que está siendo reflejada y que escapa a través de la superficie de la izquierda. A medida que la fuente se acerca más al borde, el ángulo de incidencia de la radiación con respecto a la normal de la superficie aumenta. Por lo tanto, más radiación resulta reflejada desde puntos cercanos a la superficie, propagándose hacia el interior del medio participante, contribuyendo al máximo. También se espera que la contribución de fotones dispersados por el medio desde la región a la derecha sea relativamente mayor que desde la izquierda, ya que la radiación dispersada en esta última tiende a escapar por el borde. También puede observarse un aumento en el flujo de fotones en la región más cercana al borde, proveniente de fotones que han sufrido reflexión total interna.

Este experimento también fue simulado y analizado por Klose *et al.* [12] en el marco de

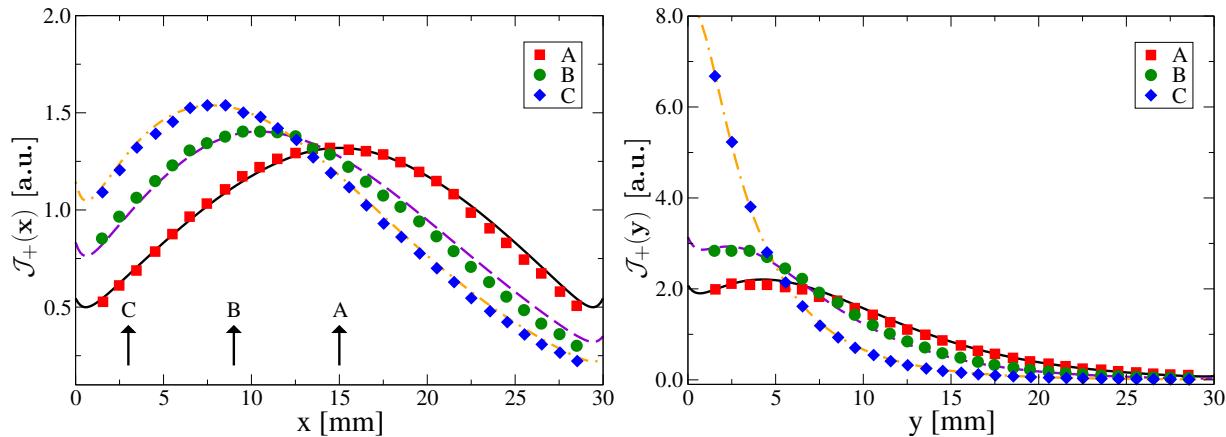


Figura 2.8: Radiación transmitida medida por Klose [12] (símbolos), y simulada mediante el método FC-DOM (líneas) para el fantoma homogéneo.

la teoría ETR independiente del tiempo.

2.3.2.2 Fantoma inhomogéneo

El segundo fantoma contiene una región de “vacío” en forma de anillo, rellena de agua, de diámetro $d = 2,8$ cm, en donde el coeficiente de absorción y dispersión están dados por $a(\mathbf{x}) = b(\mathbf{x}) = 0$. En el resto del medio, se consideran los parámetros ópticos de la Tabla 2.1. Las dimensiones de este fantoma a lo largo del eje x e y es de 4 cm. Se realizaron simulaciones para tres experimentos, de acuerdo a las posiciones \mathbf{x}_s de la fuente $A = (2.0, 0)$ cm, $B = (1.2, 0)$ cm, y $C = (0.4, 0)$ cm. Para mantener el orden de la convergencia del método, las discontinuidades en los parámetros ópticos del medio deben ser evitadas. De otra forma, el fenómeno de Gibbs deterioraría la precisión de los cálculos. Por esta razón, implementamos una aproximación suave a los coeficientes, haciendo uso de la función ventana introducida por Bruno *et al.* [50] en otro contexto. Esta función provee una transición suave hacia la región de vacío. En la Figura (2.9), se muestra una representación de los parámetros ópticos utilizados para el fantoma inhomogéneo, donde puede observarse la transición suave a la inhomogeneidad en forma de anillo. El flujo escalar para el fantoma inhomogéneo se muestra en la Fig. (2.10). Estos resultados muestran claramente el efecto de la región de vacío, en la cual los fotones viajan libremente. Esta característica implica que este problema no puede ser correctamente resuelto mediante la aproximación de difusión. El flujo de fotones que

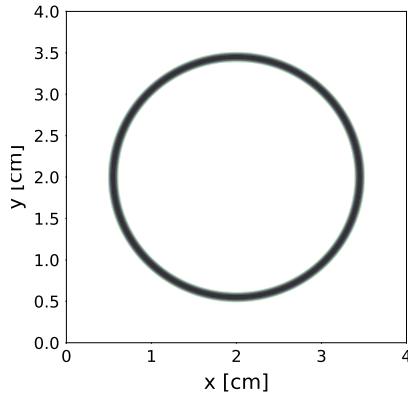


Figura 2.9: Coeficiente de dispersión para el fantoma inhomogéneo, con región de vacío en forma de anillo donde $a(\mathbf{x}) = b(\mathbf{x}) = 0$.

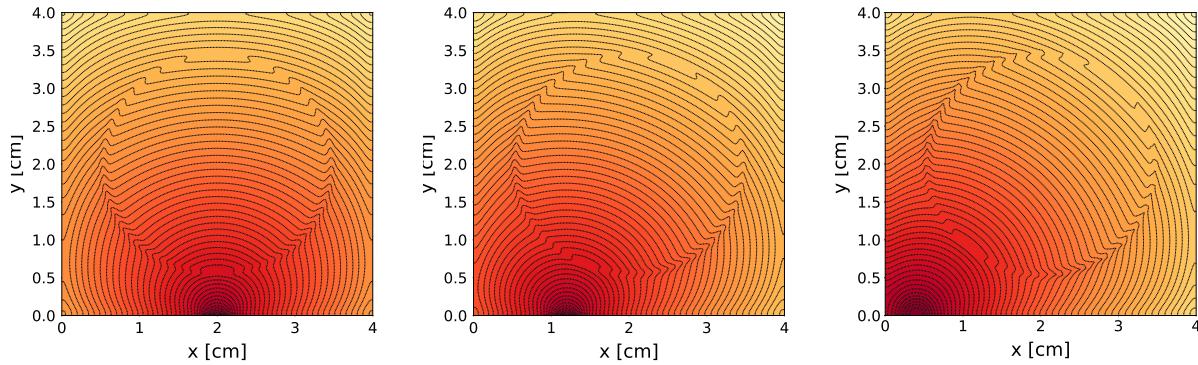


Figura 2.10: Flujo escalar $\phi(\mathbf{x})$ (2.5) obtenido en las simulaciones para el fantoma inhomogéneo. A (izquierda), B (centro) y C (derecha).

llegan a los 38 detectores ubicados en la frontera del dominio se muestra en la Figura (2.11). Se observa un buen acuerdo entre teoría y experimento, aunque con mayores desviaciones respecto al caso del fantoma homogéneo. Estas desviaciones pueden explicarse por el hecho de que en nuestras simulaciones no estamos teniendo en cuenta la reflexión de Fresnel que ocurre en la interface del anillo cilíndrico, lo cual requeriría de un tratamiento especial [51].

La presencia de regiones de vacío, como la que se encuentra en el fluido cerebroespinal en la cabeza, o entre órganos en el cuerpo –el fluido sinovial en las articulaciones [13], o la tráquea en el cuello humano [52]–, requiere del uso de la ETR como modelo físico, ya que la aproximación de difusión de fotones no es apropiada en este régimen de transporte. Tanto

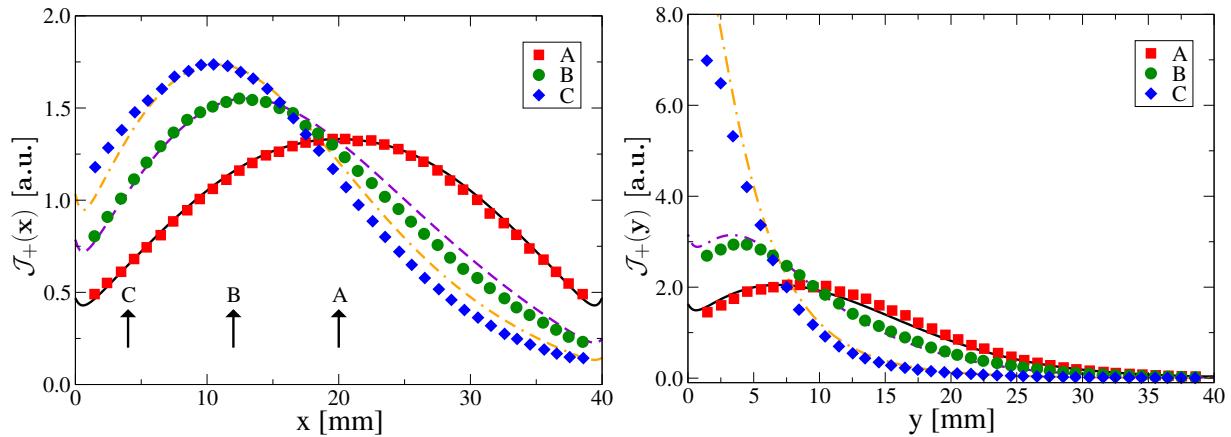


Figura 2.11: Radiación transmitida medida por Klose [12] (símbolos), y radiación obtenida mediante las simulaciones FC-DOM, para el fantoma inhomogéneo (líneas).

este experimento como el previo, han sido simulados por Klose *et al.* [12] mediante el uso de diferencias finitas, utilizando la ETR independiente del tiempo.

2.3.3 El fenómeno de rayos

En esta sección presentamos el último caso independiente del tiempo que trataremos en esta Tesis. Este concierne a un fenómeno importante que surge en las aproximaciones numéricas que utilizan métodos de ordenadas discretas para resolver la ETR [39]. Se trata del fenómeno de rayos, el cual se manifiesta esencialmente en medios de baja dispersión. El fenómeno de rayos se origina en la discretización de la variable angular $\hat{\theta}$. Debido a dicha discretización, las direcciones posibles para la propagación de los fotones se encuentra limitada. Cuando existen fuentes localizadas, se originan variaciones rápidas en la intensidad específica cerca de estas. La propagación del flujo queda restringida en las direcciones discretas, dando origen a oscilaciones espurias, conocidas como efecto de rayos.

Analizamos un problema de referencia ampliamente utilizado, diseñado específicamente para estudiar este efecto numérico. Dadas las dimensiones del mismo, los fotones no llegarán a sufrir suficientes eventos de colisión. Reproducimos el caso reportado por Crosbie y Schrenker [53], el cual proporciona flujos considerados exactos [54, 55], utilizando el método FC-DOM para soluciones independientes del tiempo obtenidas por relajación del caso de-

pendiente del tiempo.

Consideramos un dominio bidimensional cuadrado, de lado unitario, que contiene un medio puramente dispersivo (sin absorción) con $b(\mathbf{x}) = 1$. La dispersión considerada es isótropa ($g = 0$). La radiación incide de manera uniforme sobre la superficie inferior del medio. El resto de los bordes presentan condiciones de contorno de vacío ($n_\Omega = n_s$ de donde $f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) = 0$). El observable considerado es la componente en y de la corriente de fotones (2.6) $\mathcal{J}_y(x, y = 1)$. En la Figura (2.12) se presentan los resultados obtenidos (líneas), y los valores de referencia (símbolos). Se observa que el efecto de rayos se manifiesta en discretizaciones relativamente gruesas de la variable angular, y disminuye al aumentar el número de direcciones. El método de continuación de Fourier sólo trata al operador diferencial en las variables espaciales, independientemente de la discretización angular. Por lo tanto, no resuelve el fenómeno de rayos y otras estrategias deben ser consideradas para solucionarlo.

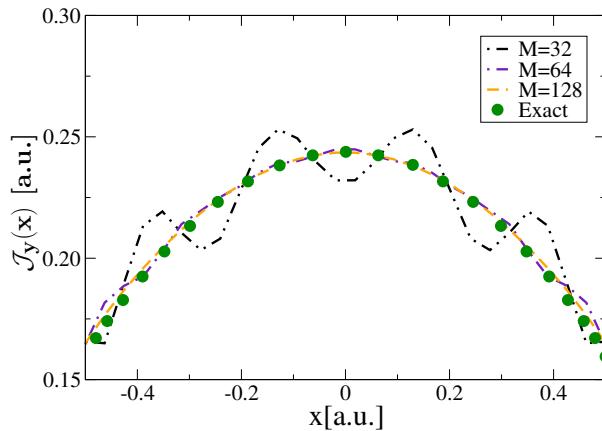


Figura 2.12: Círculos: corriente de fotones exacta en la dirección y , $\mathcal{J}_y(x)$. Líneas: valores simulados obtenidos por el método FC-DOM, para un número variable de direcciones: $M = 32, 64, 128$. El gráfico se presenta en unidades arbitrarias (a.u.).

En medios altamente dispersivos, el comportamiento singular que origina el fenómeno de rayos resulta rápidamente atenuado lejos de la fuente, debido a que la radiación directa (los fotones balísticos que no han sufrido dispersión) decaen rápidamente [54], redistribuyendo la radiación en todas las direcciones. Este fenómeno no suele ser un problema en tejidos biológicos, ya que estos son altamente dispersivos.

2.3.4 Comparación con solución analítica

En esta sección validamos nuestros métodos computacionales dependientes del tiempo calculando el flujo escalar para una fuente puntual en un medio infinito, y comparándolo con la solución analítica dada por Paasschens [56]. En este problema, un medio bidimensional infinito, isótropo y homogéneo es iluminado por una fuente puntual isótropa ubicada en el origen de coordenadas $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \delta(\mathbf{x})\delta(t)$.

El flujo escalar resultante en este caso es

$$\begin{aligned} \phi(r, t) = & \frac{e^{-ct(a+b')}}{2\pi} \delta(ct - r) + \frac{b'}{2\pi ct} \left(1 - \frac{r^2}{c^2 t^2}\right)^{-1/2} \\ & \times \exp \left[b' \sqrt{c^2 t^2 - r^2} - ct(a + b') \right] H(ct - r), \end{aligned} \quad (2.17)$$

donde $H(x)$ es la función escalón de Heaviside, y se ha hecho uso del coeficiente de dispersión reducido $b' = (1 - g)b$, el cual aproxima la anisotropía en la dispersión. Para esta simulación empleamos un fantoma homogéneo con las propiedades ópticas dadas en la Tabla 2.1, de donde $c = 0.019$ cm/ps, utilizando el coeficiente de dispersión reducido con $g = 0.8$, y función de fase isótropa (con $g = 0$ en la Ec. (2.2)).

El primer término en la expresión (2.17) representa el pico balístico [56], originado por los fotones que no han sufrido dispersión, y que arriban a una distancia r de la fuente en un tiempo $t = r/c$. En el caso de medios altamente dispersivos, este término resulta rápidamente atenuado a unos pocos milímetros de la fuente. Para las simulaciones numéricas empleamos condiciones de borde de vacío, en las cuales el flujo entrante a través de la superficie del dominio $\partial\Omega$ es nulo

$$u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = 0 \quad \text{en } \Gamma_- . \quad (2.18)$$

A los efectos prácticos, para evitar inestabilidades originadas por el fenómeno de Gibbs, y demandas computacionales significativas, la función delta de Dirac de la fuente es aproximada con una función Gaussiana.

Comparamos los resultados numéricos obtenidos por el método FC–DOM (FC) con una aproximación al gradiente espacial obtenido por el método *upwind* de diferencias finitas de tercer orden (FD) utilizado en [38]. En la Figura 2.13 se muestran los resultados obtenidos por ambos métodos junto con la solución analítica. En ambos casos el acuerdo es excelente.

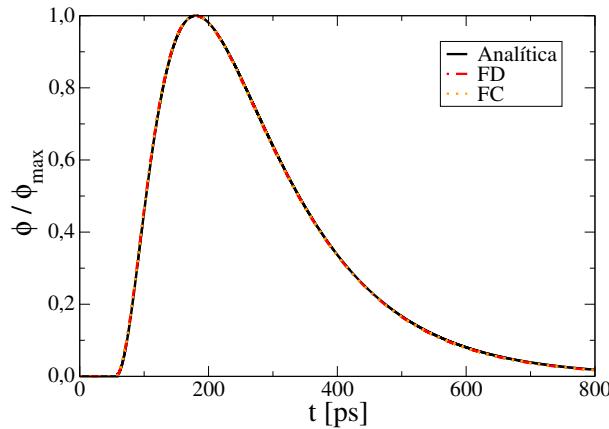


Figura 2.13: Solución analítica Ec. (2.17), y soluciones numéricas obtenidas por el método FC-DOM (FC) y FD-DOM (FD) para un medio homogéneo infinito iluminado por un pulso puntual.

Para dar una idea cuantitativa de la convergencia obtenida por el método FC en comparación con el método de diferencias finitas, definimos el error con respecto a la solución analítica como

$$\Delta\phi(r) = \sqrt{\frac{\int_{t_0}^{t_f} |\phi^a(r, t) - \phi^n(r, t)|^2 dt}{\int_{t_0}^{t_f} \phi^a(r, t)^2 dt}}, \quad (2.19)$$

donde $\phi^a(r, t)$ es el flujo escalar analítico (2.17), y $\phi^n(r, t)$ son los flujos escalares obtenidos a partir de las simulaciones numéricas (Ec. (2.5)), con los métodos FC y FD. Utilizamos un tiempo inicial $t_0 = 70$ ps y un tiempo final $t_f = 400$ ps. El tiempo inicial es elegido de forma tal que el pico balístico ya haya pasado por el punto de observación r , evitando así el comportamiento singular del mismo. El tiempo final es elegido en forma tal de evitar efectos de borde. En contraste con el acuerdo cualitativo mostrado en la Figura 2.13, los errores fueron calculados en este caso sin normalización. En lugar de utilizar la función Gaussiana como aproximación a la delta de Dirac, se utilizó la solución analítica (Ec. (26) en la referencia [56]) a $t = t_0$ como condición inicial. De esta manera, la solución es exacta a $t = t_0$, evitando errores numéricos asociados al comportamiento singular de la función delta de Dirac. Consideraremos el error $\Delta\phi(r, t)$, con $r = 1.27$ cm desde la fuente. En la tabla 2.2 mostramos los errores producidos por los métodos FC y FD para una simulación utilizando $M = 16$ direcciones discretas, con $T = 3.3 \times 10^5$ pasos temporales, y un número variable de puntos en las coordenadas espaciales, con $\Delta = \Delta x = \Delta y$.

Tabla 2.2: Convergencia con respecto al flujo escalar analítico

Δ	$\Delta\phi_{FC}(r)$	$\Delta\phi_{FD}(r)$
0.250	5.8×10^{-3}	1.5×10^{-1}
0.125	1.8×10^{-4}	2.2×10^{-2}
0.100	4.7×10^{-5}	1.1×10^{-2}

La Tabla 2.2 muestra claramente que el error obtenido usando el método FC es significativamente menor al obtenido mediante el método FD, para todos los valores de N probados. Esto puede explicarse por el hecho de que el método FC, a diferencia de diferencias finitas y elementos finitos, es un método espectral que presenta un error de dispersión despreciable.

2.4 Existencia de capa límite

En secciones previas demostramos el alto orden de convergencia numérica del método FC-DOM para el caso de un problema manufacturado. La solución propuesta utilizada en la Sección 2.3.1 es suave, y no presenta gradientes significativos en ninguna de sus variables. Los teoremas de convergencia para los métodos numéricos exigen, en general, que las soluciones continuas subyacentes que se intentan aproximar cumplan ciertas condiciones de regularidad. Discontinuidades en las soluciones o en sus derivadas, degradan el orden de convergencia. En particular, en esta sección estudiaremos una estructura de capa límite [57] que existe en forma casi ubicua en las soluciones a la ecuación ETR. De acuerdo a la teoría de ecuaciones diferenciales, las capas límites se manifiestan en regiones pequeñas donde las soluciones presentan variaciones rápidas. Matemáticamente, estas estructuras aparecen en las soluciones de las ecuaciones diferenciales cuando la derivada de mayor orden viene multiplicada por un parámetro pequeño [58, Cap. 9]. La presencia de la capa límite degrada considerablemente el orden de convergencia. Sólo pueden obtenerse soluciones precisas haciendo enormes esfuerzos computacionales. Este es un fenómeno novedoso que no se encuentra detallado en la bibliografía. La estructura de capa límite ayuda a explicar problemas numéricos reportados

en la bibliografía a lo largo de décadas [39, 59–62] (en particular, las oscilaciones que ocurren en la llamada “discretización de diamante”), fenómeno numérico que, a nuestro criterio, no había sido correctamente comprendido hasta ahora.

La capa límite impone el uso de grillas numéricas densas. Debido a la condición de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), para evitar cálculos extremadamente costosos y poder utilizar pasos temporales razonables, se deben utilizar métodos de evolución temporal implícitos. El desarrollo de métodos numéricos eficientes para los casos multidimensionales exige de estrategias sofisticadas [48]. Para facilitar la descripción y el análisis de este fenómeno, en esta sección trabajaremos con una única dimensión espacial. Esto se corresponde a problemas de tres dimensiones con simetría de traslación en dos de las variables espaciales. Las conclusiones que se obtienen de este análisis son generales, y se extienden naturalmente a problemas multidimensionales y en el dominio temporal. Nuestro trabajo sienta los cimientos para el desarrollo de métodos numéricos altamente eficientes en casos generales.

Como se mencionó anteriormente, la ETR es una ecuación de Boltzmann linearizada, que provee un modelo general para el transporte de partículas neutras. No se limita al transporte de fotones, sino que incluye el caso de neutrones. Esta es comúnmente utilizada para el diseño y desarrollo de reactores nucleares, entre otras aplicaciones [6, 39, 59, 60, 62–64]. Dado que las escasas menciones que se hacen a la estructura de capa límite pertenecen al área de transporte de neutrones, serán frecuentes las referencias bibliográficas en dicha área.

La capa límite se manifiesta como transiciones abruptas de carácter exponencial, que se dan en regiones cercanas a los bordes. Físicamente, este fenómeno se origina debido a que para las direcciones entrantes paralelas al borde, las partículas atraviesan caminos geométricos relativamente grandes hacia el interior del dominio. Esto puede producir tanto decaimientos como crecimientos exponenciales en la intensidad específica. La ecuación ETR independiente del tiempo, en una dimensión espacial modela el transporte en una geometría plana paralela descripta en la Figura 2.14. Por simplicidad, consideramos el caso isótropo,

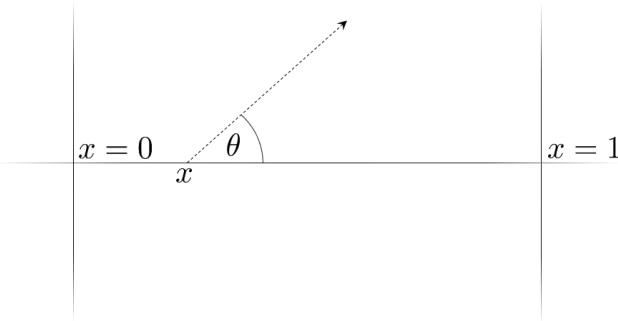


Figura 2.14: Geometría unidimensional: $\xi = \cos(\theta)$.

con condiciones de borde de Fresnel

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial x} u(x, \xi) + \mu_t(x) u(x, \xi) &= \frac{\mu_s(x)}{2} \int_{-1}^1 u(x, \xi') d\xi' + q(x, \xi), \\ u(x = 0, \xi) &= \mathcal{R}(\xi) u(x = 0, \xi_R) \quad \forall \xi > 0, \\ u(x = 1, \xi) &= \mathcal{R}(\xi) u(x = 1, \xi_R) \quad \forall \xi < 0. \end{aligned} \tag{2.20}$$

donde $\xi = \cos(\theta)$, $\mu_s(x)$ y $\mu_a(x)$ denotan los coeficientes de dispersión y absorción respectivamente, llamamos $\mu_t(x) = \mu_a(x) + \mu_s(x)$ al coeficiente de transporte total, y $q(x, \xi)$ representa una fuente externa. Las condiciones de borde de Fresnel modelan la reflexión de las partículas en el borde, donde $\xi_R = -\xi$ representa el coseno de la dirección reflejada y $\mathcal{R}(\xi)$ es el coeficiente de Fresnel correspondiente [42].

Dado que el coeficiente ξ que acompaña a la derivada de mayor orden en (2.20) tiende a cero cuando $\theta \rightarrow \pi/2$, se espera que ocurra una capa límite que presente variaciones rápidas en la solución $u(x, \xi)$ para tales direcciones, y para valores de x en regiones cercanas a los bordes en $x = 0$ y $x = 1$. Como consecuencia surgirán gradientes que tienden a infinito para puntos (x, ξ) cercanos a $(0, 0)$ y $(1, 0)$. Estas estructuras de capa límite, son generadas por la imposición de las condiciones de borde en conjunto con la existencia de un parámetro ξ infinitesimal que acompaña a la derivada de mayor orden del operador diferencial. En nuestro caso particular las condiciones de borde son impuestas en (2.20) para las direcciones entrantes (salientes), con $\xi > 0$ ($\xi < 0$) para puntos cercanos a $x = 0$, (resp. $x = 1$)—y es para dichas direcciones que se espera la aparición de la capa límite.

Siguiendo la referencia [58], para caracterizar la estructura de capa límite en *e.g.* $x = 0$, utilizamos una *solución interna* de la forma $U(X, \xi) = u(\xi X, \xi)$; la capa límite alrededor de

$x = 1$ puede ser tratada de manera análoga. La solución asintótica de primer orden $U_0(X, \xi)$ de $U(X, \xi)$ cuando $\xi \rightarrow 0^+$ satisface la ecuación a *coeficientes constantes*

$$\frac{\partial U_0(X, \xi)}{\partial X} + \mu_t(0)U_0(X, \xi) = \frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 U_0\left(\frac{\xi X}{\xi'}, \xi'\right) d\xi' + q(0, \xi), \quad (2.21)$$

con condiciones de borde inducidas por (2.20). La Ecuación (2.21) nos dice que la derivada $\frac{\partial U_0(X, \xi)}{\partial X}$ se encuentra acotada cuando $\xi \rightarrow 0^+$, y, por lo tanto, que la función $U_0(X, \xi)$ caracteriza la estructura de capa límite en la solución $u(x, \xi)$ mediante la relación

$$u(x, \xi) \sim u_0(x, \xi) = U_0(x/\xi, \xi) \text{ si } (x, \xi) \rightarrow (0^+, 0^+). \quad (2.22)$$

El argumento puede extenderse a problemas en dos y tres dimensiones, incluyendo el dominio temporal y dominios generales curvos. En tales casos, la capa límite presenta gradientes que no están acotados en la proximidad de los bordes en direcciones paralelas a estos (situación que a escalas apropiadas se corresponde con la geometría de la Fig. 2.14 para $\theta \rightarrow \pi/2$).

Utilizando el factor integrante, y definiendo

$$I(x, \xi) = \int_0^x e^{\frac{\mu_t(0)y}{\xi}} \left[\frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' + q(0, \xi) \right] dy,$$

se obtiene

$$u_0(x, \xi) = \frac{e^{-\mu_t(0)x/\xi}}{\xi} \left[\xi u(0, \xi) + I(x, \xi) \right], \quad (2.23)$$

la cual exhibe de manera explícita el carácter exponencial de la capa límite. Los distintos términos de la solución asintótica para la capa límite poseen diferente interpretación física. Expandiendo la igualdad (2.23) podemos escribir

$$u_0(x, \xi) = e^{-\mu_t(0)x/\xi} \times u(0, \xi) + \frac{e^{-\mu_t(0)x/\xi}}{\xi} \times \int_0^x e^{\frac{\mu_t(0)y}{\xi}} \frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' dy \\ + \frac{e^{-\mu_t(0)x/\xi}}{\xi} \times \int_0^x e^{\frac{\mu_t(0)y}{\xi}} q(0, \xi) dy, \quad (2.24)$$

donde el primer término representa el flujo entrante a través del borde en la dirección ξ que no ha sufrido colisiones, el cual posee una atenuación exponencial debido a las interacciones de absorción y dispersión con el medio. El segundo término representa las contribuciones del medio debido a los procesos dispersivos, que sufren tanto una atenuación como un crecimiento exponencial, debido a la suma de contribuciones en el interior del medio. Finalmente, el

último término representa las contribuciones del medio debido a las fuentes q en el interior de éste, las cuales también vienen dadas por contribuciones y atenuaciones en el interior del medio.

La estructura de capa límite puede visualizarse fácilmente considerando la solución exacta de la Ecuación (2.20) para el caso de coeficientes constantes sin dispersión ($\mu_s(x) = 0$), de donde obtiene la solución analítica

$$u(x, \xi) = \begin{cases} \frac{q}{\mu_a} \left[1 - \frac{\eta(\xi)}{e^{\mu_a x / \xi}} \right] & \forall \xi > 0, \\ \frac{q}{\mu_a} \left[1 - \frac{\eta(\xi)}{e^{\mu_a(x-1) / \xi}} \right] & \forall \xi < 0, \end{cases} \quad (2.25)$$

con

$$\eta(\xi) = \frac{\mathcal{R}(|\xi|) - 1}{\mathcal{R}(|\xi|)e^{-\mu_a/|\xi|} - 1}.$$

Por simplicidad, consideramos condiciones de borde de vacío ($\mathcal{R}(\xi) = 0$). La solución se muestra en la Figura 2.15, donde se observa claramente la estructura de capa límite cuando $(x, \xi) \rightarrow (0^+, 0^+)$.

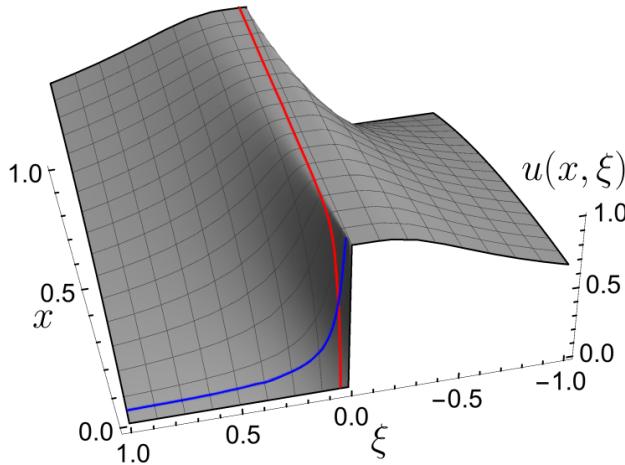


Figura 2.15: Solución (2.25) $u(x, \xi)$ de la Ecuación (2.20) con $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Se observa la capa límite en las variables x y ξ para $(x, \xi) \rightarrow (0^+, 0^+)$ (enfatizadas en las curvas roja y azul).

Los dos métodos numéricos utilizados de manera predominante para resolver la ecuación de transporte son el método de armónicos esféricos, y el método de ordenadas discretas. Ambos fallan en la resolución de las estructuras de capa límite, lo cual puede apreciarse en resultados presentados en la literatura [16, 65–68].

En vista de la expresión [69, p. 77] para la determinación del error en la integración de Gauss–Legendre, el error para la cuadratura de ℓ -puntos decrece como $32V/15\pi j(2\ell+1-j)^j$ siempre que la derivada $j \leq 2\ell$ esté acotada por la constante V . Introduciendo el cambio de variable $\xi' = r^p$ en la integral de la Ecuación (2.20), buscamos una cota V para la derivada j -ésima del integrando. Utilizando la versión integrada de la Ecuación (2.20), similar a (2.23), combinando dos términos exponenciales, y utilizando el hecho de que para un entero no negativo k la integral $\int_0^\infty t^k e^{-t} dt$ es finita, encontramos que (Apéndice C)

$$\left| \frac{\partial^j}{\partial r^j} [u(x, r^p) r^{p-1}] \right| \leq W r^{p-j-1} \text{ para } (x, r) \rightarrow (0^+, 0^+), \quad (2.26)$$

para alguna constante W ; llamando $V = W r^{p-j-1}$ se obtiene la cota deseada, la cual es *uniforme para todos los valores relevantes de x y r* (siempre que $p \geq j + 1$). Los detalles de la demostración pueden encontrarse en el Apéndice C.

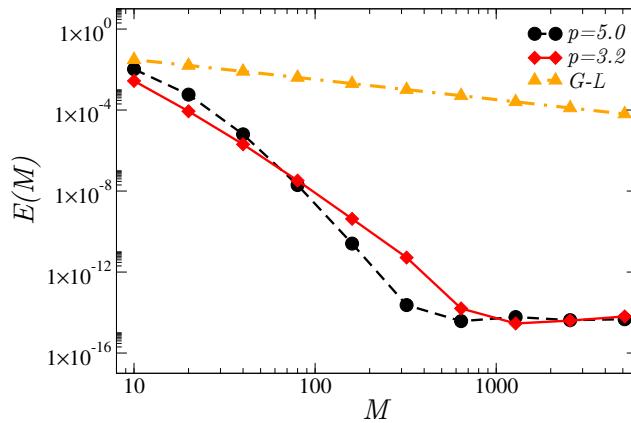


Figura 2.16: Error de la integral numérica respecto a la analítica $E(M) = \max_x |\sum_{i=1}^M w_i u(x, \xi_i) - I^{an}(x)|$ obtenida para la solución (2.25) con $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Los errores corresponden a la cuadratura (2.27) con $p = 5$ y $p = 3.2$. G–L: Error dado por la cuadratura de Gauss–Legendre sin el cambio de variable propuesto.

Para el caso considerado, con $\mathcal{R}(\xi) = 0$, dividiendo la integral en el punto de capa límite $\xi = 0$ se tiene

$$\int_0^1 u(x, \xi) d\xi \sim \sum_{i=1}^{M/2} w_i u(x, \xi_i). \quad (2.27)$$

Llamando r_i y w_i^{GL} a las abscisas y pesos de la cuadratura de Gauss–Legendre en el intervalo

$[0, 1]$, definimos $\xi_i = r_i^p$ y $w_i = p \times r_i^{p-1} \times w_i^{GL}/2$. Las abscisas y los pesos correspondientes a los valores negativos de ξ se obtienen por simetría.

Se encontró el valor $p = 3.2$ como óptimo, el cual provee una convergencia excelente para la integral de dispersión en la variable ξ , y a su vez limita la rapidez de las variaciones de la capa límite en la variable espacial x (Fig. 2.16).

Para resolver la capa límite en x , utilizamos el cambio de variable logarítmico $v = \log\left(\frac{x}{1-x}\right)$, que origina una grilla con puntos extremadamente cercanos al borde (Fig. 2.17).

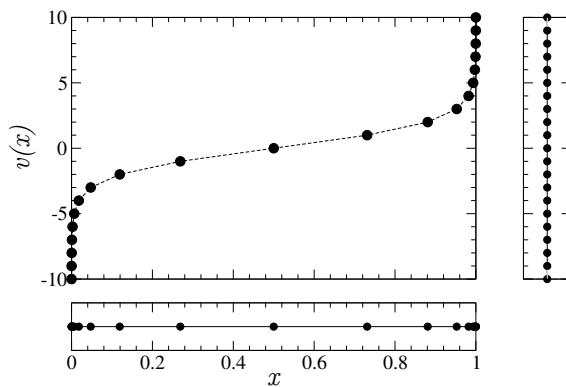


Figura 2.17: Cambio de variable $v(x) = \log\left(\frac{x}{1-x}\right)$. Una grilla uniforme en la variable v genera una discretización en x con puntos que se acumulan en la cercanía de los bordes.

Dado que las cotas halladas (2.26) para las derivadas del integrando con respecto a la nueva variable r son *uniformes para todo* x , el procedimiento no deteriora la convergencia de la cuadratura de la integral colisional. Por lo tanto se logra un alto orden de convergencia en ambas variables ξ y x .

Resolvemos la ecuación de transporte que resulta en el nuevo dominio computacional $[v_{\min}, v_{\max}]$, con $[x'_{\min}, x'_{\max}] = [\frac{e^{v_{\min}}}{e^{v_{\min}}+1}, \frac{e^{v_{\max}}}{e^{v_{\max}}+1}]$, y condiciones de bordes en x'_{\min} y x'_{\max} obtenidas a partir de la solución asintótica (2.23). Utilizando las nuevas variables, el problema de transporte

dependiente del tiempo resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(v, \xi, t) + \xi(2 + 2 \cosh(v)) \frac{\partial}{\partial v} u(v, \xi, t) + \mu_t u(v, \xi, t) &= \frac{\mu_s}{2} \int_{-1}^1 u(v, \xi', t) d\xi' + q, \\ u(v, \xi, t_{\min}) &= 0, \\ u(v_{\min}, \xi, t) &= u_0(x'_{\min}, \xi, t) \quad \forall \xi > 0, \\ u(v_{\max}, \xi, t) &= u_0(x'_{\max}, \xi, t) \quad \forall \xi < 0. \end{aligned} \tag{2.28}$$

Con el fin de evitar las limitaciones impuestas por la condición de CFL, utilizamos un

esquema implícito BDF (*backward differentiation formula*) de evolución temporal de tercer orden.

Para evitar el alto costo en la inversión de matrices grandes a cada paso temporal, el término colisional se obtiene por extrapolación polinomial.

La versión discreta con propagación temporal implícita de la Ecuación (2.28) resulta

$$[\bar{\mathbf{1}} + \beta \Delta t \xi_j (2 + 2 \cosh(v)) \bar{\mathbf{D}} + \beta \Delta t \mu_t \bar{\mathbf{1}}] u_j^{n+1} = \sum_{k=0}^{s-1} \alpha_k u_j^{n-k} + \beta \Delta t \frac{\mu_s}{2} \sum_{i=1}^M w_i \tilde{u}_i^{n+1} + \beta \Delta t q^{n+1},$$

donde $u_j^{n+1} = u(v, \xi_j, t^{n+1})$, $t^{n+1} = n\Delta t$, siendo α_k y β los coeficientes BDF, con $s = 3$. El término extrapolado a tercer orden viene dado por $\tilde{u}_j^{n+1} = \sum_{\kappa=0}^2 (-1)^\kappa \binom{3}{\kappa+1} u_j^{n-\kappa}$.

Nuevamente, $\bar{\mathbf{1}}$ es el operador identidad, mientras que $\bar{\mathbf{D}}$ representa al operador de diferenciaciónpectral obtenido mediante el método de continuación de Fourier.

La Fig. 2.18 muestra las excelentes propiedades de convergencia obtenidas mediante el algoritmo propuesto para $\mu_s = \mu_a = q = 1$. Dado que no se conoce una solución analítica para este problema, calculamos el error comparando las soluciones en diferentes grillas, tomando como referencia a la más fina de ellas. El alto orden de convergencia obtenido sugiere que los cambios de variables propuestos en x y ξ permiten resolver las capas límite en ambas variables. Se definió el error para las Figuras (2.18) (a) y (b) según $E(\Delta v, M, \Delta t) = \max_{x, \xi} |u(x, \xi) - u^c(x, \xi)|$, donde $u^c(x, \xi)$ es la solución convergida,

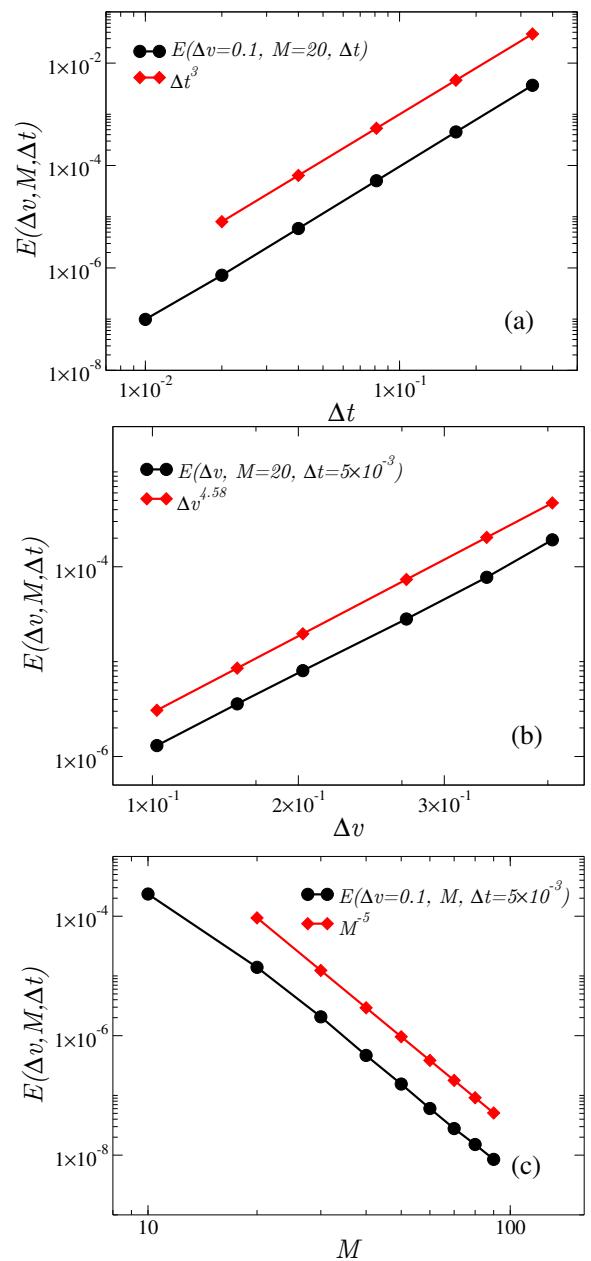


Figura 2.18: Círculos: error obtenido en diferentes grillas numéricas para el algoritmo propuesto. Diamantes: orden de convergencia.

obtenida en la grilla mas fina. Debido a que las diferentes grillas direccionales poseen abscisas que no coinciden entre sí, el error calculado en la Fig. (c) utiliza el flujo escalar, con $E(\Delta v, M, \Delta t) = \max_x |\sum_{i=1}^M w_i u(x, \xi_i) - \phi^c(x)|$.

A continuación, emplearemos el algoritmo propuesto para explorar y demostrar el carácter de las estructuras de capa límite. Por simplicidad, en el resto de este capítulo nos restringiremos al caso de la ETR independiente del tiempo. Como se describió anteriormente en la Sección 2.3.2, las soluciones se obtienen evaluando las evoluciones temporales a tiempos asintóticos. Estas se muestran en las Figuras 2.19 a 2.21. La Fig. 2.19 muestra las estructuras

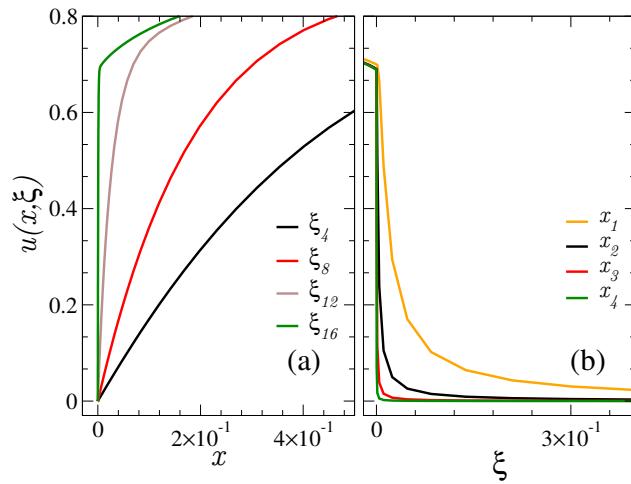


Figura 2.19: Capas límite obtenidas como solución de la Ecuación (2.28) para un entorno de $x = 0$ y $\xi = 0$, con $\mu_a = \mu_s = q = 1$ para distintos valores de ξ y de x , con $\xi_i > \xi_{i+1} > 0$ y $x_i > x_{i+1}$.

de capa límite en las variables x y ξ con $\mu_s = \mu_a = q = 1$ (con parámetros numéricos $N = 250$, $M = 40$, y $-v_{\min} = v_{\max} = 25$). Como puede observarse, los valores más chicos de ξ originan capas límite que se comprimen en regiones espaciales más pequeñas, tal como sugiere el análisis realizado. La Fig. 2.20 muestra la existencia de capas límite incluso para medios altamente difusivos, con $\mu_a = q = 1$ fijo. En esta figura, $\xi = \xi_{\min} \simeq 10^{-6}$, para los parámetros $N = 200$, $M = 20$ y $-v_{\min} = v_{\max} = 20$. En general, en problemas difusivos (donde $\mu_s \gg \mu_a$ y $\mu_s \gg q$ y $\mu_s \gg |x_{\max} - x_{\min}|$) las funciones tienden a ser más regulares en la variable ξ [70]. Siendo la dispersión el fenómeno dominante, la solución resulta fuertemente “promediada” entre las direcciones. Sin embargo, tienden a tener pendientes más abruptas a medida que aumenta el coeficiente de dispersión. Cuando la dispersión es grande,

se verifica numéricamente que $u(x, \xi)$ es prácticamente independiente de la dirección, excepto en la región de capa límite. Se ha reportado en la literatura la existencia de oscilaciones no

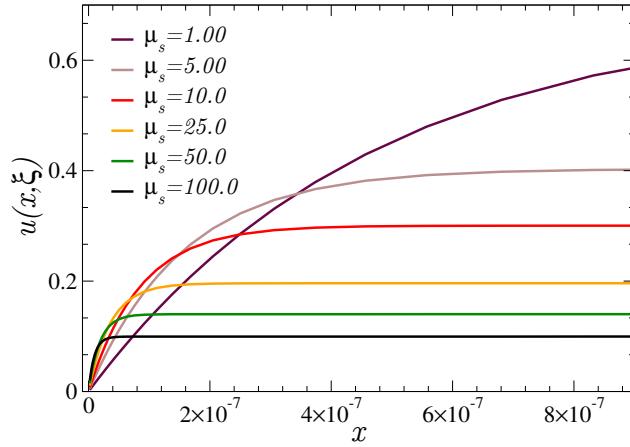


Figura 2.20: Capas límite obtenidas resolviendo la Ecuación (2.28), con $\mu_a = q = 1$ para distintos valores de μ_s . Se muestran las soluciones para la dirección $\xi = \xi_{\min} \simeq 10^{-6}$. Notar las pendientes elevadas que existen para $x \rightarrow 0^+$.

físicas asociadas a problemas numéricos. Estas surgen principalmente al emplear el esquema de diferencias finitas de Diamante (DD) [60, 61, 70]. En las referencias [60, 70] se atribuye este problema numérico a las condiciones de borde anisótropas, capas límite no difusivas y/o a un alto coeficiente de absorción. Por el contrario, en nuestro trabajo demostramos que esta interpretación es errónea. Las capas límite surgen aún con condiciones de borde isótropas, y para cualquier valor de los coeficientes de absorción y dispersión. En particular, nuestra contribución demuestra en forma explícita la existencia de capas límite exponenciales, originadas al imponer cualquier condición de borde para valores de ξ pequeños, lo cual no fue considerado en ninguno de los trabajos anteriores.

Por ejemplo, la referencia [70] trata un problema difusivo de transporte (el Problema 1 en dicha referencia). Este es el mismo que plantea la Ecuación (2.20) con $\mu_s = \mu_t = 1000$, $q = 0.1$ y $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Se trata de un caso difusivo, con condiciones de borde isótropas, sobre el que dicha referencia afirma [70, pp. 317] “... dado que el término de orden dominante en la expansión asintótica de la ecuación de transporte analítica es isótropo, este término no posee una capa límite para este problema”. En contraste, la Figura 2.21 muestra que las capas límite persisten en este problema, y no fueron detectadas debido a que la grilla numérica utilizada

no era lo suficientemente densa como para resolverlas. La solución obtenida por el método FC-DOM implícito, con el cambio de variable propuesto, se obtuvo con $M = 40$ direcciones discretas y $N = 400$ puntos en la variable espacial. En comparación, en la implementación del esquema DD se utilizaron $N = 10000$ puntos. Aún teniendo en cuenta el alto costo computacional que requiere este grillado, no logra evitar las oscilaciones espurias.

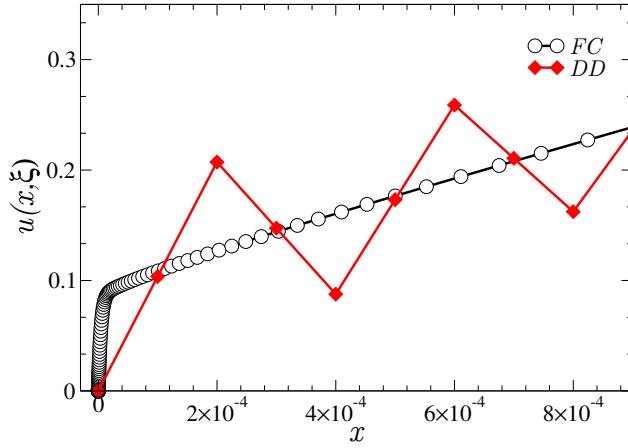


Figura 2.21: Solución $u(x, \xi_{15})$ de la Ec. (2.20) con $\mu_t = \mu_s = 1000$, $q = 0.1$ y $\xi_{15} \simeq 10^{-3}$ donde pueden apreciarse las oscilaciones espurias originadas por el esquema DD. Se utilizaron $N = 10000$ puntos espaciales para el método DD y tan sólo $N = 400$ para el FC.

En la Figura 2.22 se muestran las soluciones obtenidas por ambos esquemas en regiones lejanas a la capa límite, para distintas grillas espaciales. Puede apreciarse que si bien las oscilaciones que emergen del método DD lo hacen en cercanías del origen, se propagan hacia todo el dominio espacial.

Cerraremos la sección con un breve resumen de los resultados de nuestra investigación. Hemos encontrado una región particular, en la cual aparecen gradientes muy abruptos, que no pueden ser resueltos con los métodos numéricos tradicionales, sino que exigen un tratamiento especial. Las condiciones físicas que hacen posible la aparición de las capas límite están relacionadas con que en el borde existan fuentes, haya dispersión, o condiciones de contorno no nulas. La teoría desarrollada predice gradientes abruptos en regiones espaciales x' de orden $x' \sim \mathcal{O}(\xi/\mu_t(0))$, y en regiones direccionales ξ' de orden $\xi' \sim \mathcal{O}(\mu_t(0)x)$. La explicación física, relaciona a valores pequeños de las direcciones entrantes ξ en puntos espaciales x cerca del borde (cf. fig. 2.14), con caminos geométricos largos. Tanto el análisis asintótico como las

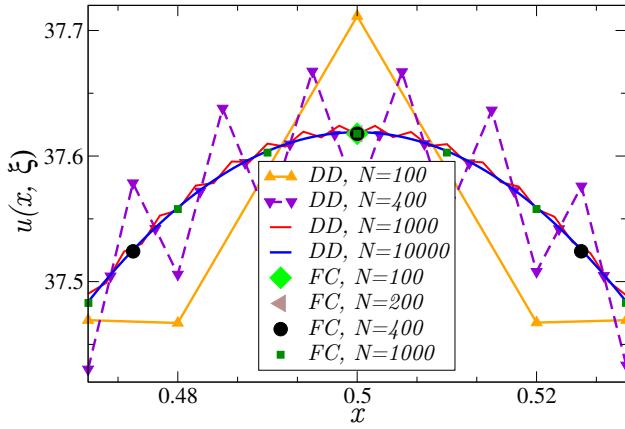


Figura 2.22: Solución $u(x, \xi_{15})$ de la Ec. (2.20), (cf. Fig. 2.21), para distintas grillas espaciales, lejos de la región de capa límite. Como se observa, las oscilaciones originadas en las cercanías del borde por el esquema DD se extienden a todo el dominio espacial.

simulaciones numéricas demuestran que las estructuras irregulares aparecen durante toda la evolución temporal y sólo pueden ser resueltas utilizando grillas numéricas extremadamente finas, lo que resulta prácticamente irrealizable. Si bien el fenómeno se produce en puntos muy cercanos al borde, los errores producidos en esa región espacial se propagan, produciendo oscilaciones espurias en las soluciones, y degradando la convergencia de los métodos numéricos empleados. En nuestro trabajo hemos logrado no sólo identificar la presencia de las capas límite, sino también tratarlas correctamente con un cambio de variable que acumula los puntos de la grilla numérica cerca del borde. La combinación de esta técnica, con el uso del método FC-DOM para la resolución de las ecuaciones diferenciales, permiten superar todas las dificultades numéricas mencionadas durante décadas en diversos trabajos, muchos de ellos haciendo un diagnóstico equivocado de sus causas.

3 | El problema inverso

En las secciones previas abordamos el problema **directo** de transporte de radiación en la materia mediante la ETR. En este problema los parámetros ópticos $a(\mathbf{x})$, $b(\mathbf{x})$, la función de fase $\eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}')$, la velocidad de la luz en el medio participante c , las fuentes internas $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ y las condiciones iniciales y de contorno son datos. Se busca encontrar la solución $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ a la Ecuación (2.1). En el problema **inverso**, alguno de los parámetros son conocidos, y se dispone de mediciones experimentales obtenidas por detectores. A partir de estas mediciones, el objetivo de este problema es la reconstrucción de las características del medio, incluyendo al resto de los parámetros desconocidos.

En el contexto de esta Tesis, reconstruiremos, para distintos problemas, el coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$ en tomografía óptica. Esto encuentra numerosas aplicaciones. Por ejemplo, para aplicaciones médicas, identificación de tumores [7–9], imágenes funcionales del cerebro [21–23], y la caracterización de diferentes constituyentes del tejido. En el caso de tomografía por fluorescencia y tomografía de bioluminiscencia [24, 26, 31], se intentan determinar las fuentes $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ en la Ec. (2.1). Estas fuentes están relacionadas a los coeficientes de absorción de los cromóforos y fluoróforos. En aplicaciones de diagnóstico y monitoreo para el tratamiento de tumores, se asume cierta información previa del coeficiente de dispersión $b(\mathbf{x})$. Esta se obtiene, generalmente, mediante técnicas de imágenes de alta resolución [71, 72], *e.g.* resonancia magnética, que poseen ciertas limitaciones. El alto costo y la baja disponibilidad de este tipo de aparatos dificulta el seguimiento de tratamientos asistidos por diagnóstico de imágenes. Por el contrario, los dispositivos utilizados en tomografía óptica son portables. Las imágenes que generan permiten determinar regiones, como por ejemplo ciertos tejidos óseos, o el aire en la tráquea del cuello humano, en las cuales los coeficientes de absorción toman valores conocidos. Adicionalmente, estas sirven para imponer cotas superiores e inferiores de $a(\mathbf{x})$, lo que permite restringir el espacio de funciones donde se busca minimizar la función objetivo. Si bien en este trabajo nos enfocamos en la reconstrucción del coeficiente de absorción, los algoritmos y las estrategias propuestas pueden ser fácilmente generalizadas para otros parámetros.

En la figura 3.1 esquematizamos los problemas directos e inverso, tal como son tratados en esta Tesis.

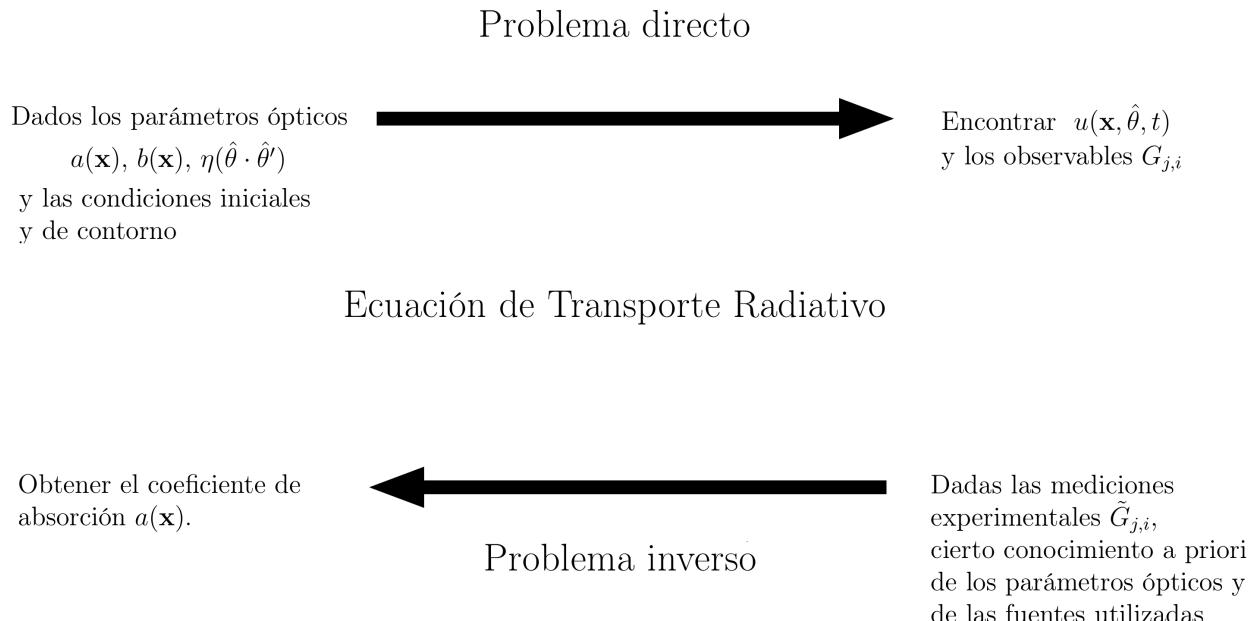


Figura 3.1: Grafico esquemático de los problemas directo e inverso.

Para la resolución del problema inverso, utilizamos el esquema *MOBIR*, presentado en la sección siguiente.

3.1 El esquema MOBIR

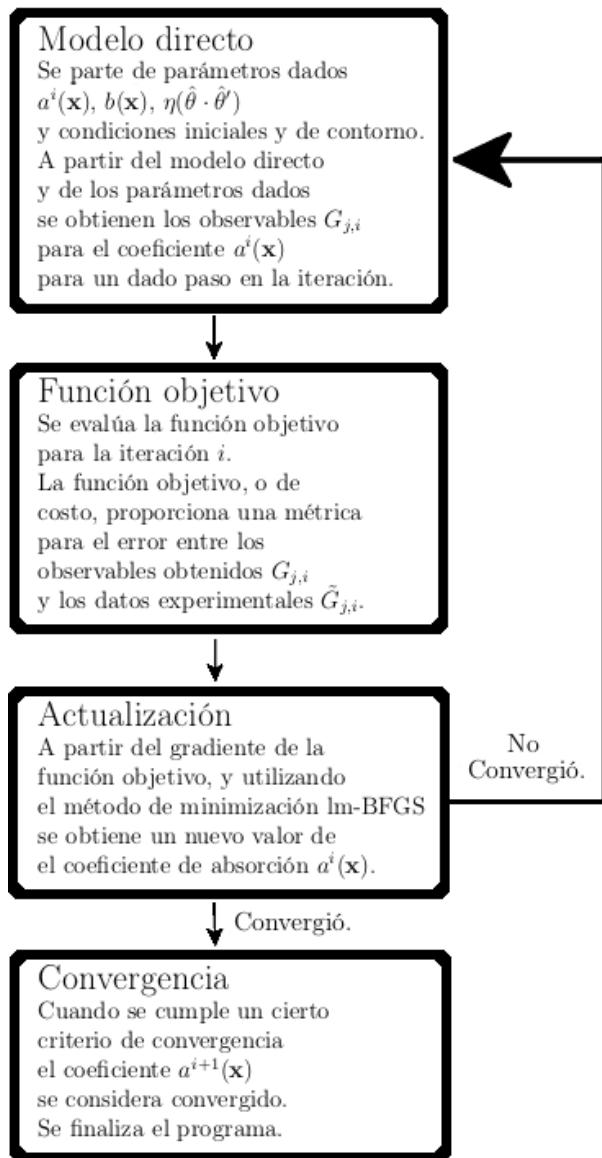


Figura 3.2: Esquema MOBIR.

En este trabajo desarrollamos un algoritmo tipo MOBIR [73, 74] (del inglés, *Model Based Iterative Image Reconstruction*). Este esquema se basa en un modelo físico, y un método de minimización iterativo para la reconstrucción del parámetro deseado en el problema inverso. Como se muestra en la Figura 3.2, en este esquema, el modelo directo es utilizado para obtener los observables simulados. Luego se evalúa el error entre los datos experimentales y los simulados por medio de la función objetivo. A continuación, utilizando un método de minimización, se actualiza el coeficiente $a^{i+1}(\mathbf{x})$ a ser utilizado en la iteración subsiguiente. Este procedimiento se repite hasta converger. El modelo físico utilizado es la Ecuación de Transporte Radiativo (2.1). Para la minimización del funcional objetivo (que será introducido en una sección posterior) emplearemos el método de minimización de Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) con uso de memoria reducido (lm–BFGS, de su sigla en inglés) [29]. Este puede ser considerado un caso particular de los métodos quasi–Newton [27, 75, 76]. El pro-

blema inverso en tomografía óptica es resuelto como un problema de optimización no lineal. A partir de un coeficiente de absorción $a^0(\mathbf{x})$ inicial, se actualiza su valor en cada paso de la

iteración i , mediante el método lm–BFGS según [76]

$$\mathbf{a}^{i+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^i(\mathbf{x}) + \alpha^i \mathbf{d}^i(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

donde $\mathbf{a}^i(\mathbf{x})$ es el vector obtenido a partir del coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$, con la variable \mathbf{x} discretizada, α^i es el largo del paso de Newton (consideraremos, por simplicidad $\alpha^i = 1$, en general α^i debe satisfacer las condiciones de Wolfe [75]). En el caso del método de Newton (o *steepest descent*), la dirección de descenso vendrá dada por el gradiente $\mathbf{d}^i = -\nabla_a g[\mathbf{a}^i]$, donde la función objetivo g será definida posteriormente. En el contexto de esta Tesis la dirección de descenso será determinada por el método lm–BFGS, muy eficiente en tomografía óptica [27, 28, 76].

3.2 El método de minimización BFGS

Siguiendo a Nocedal [75, Cap. 2 y 6], el método BFGS parte de considerar la expansión de Taylor a segundo orden de la función objetivo $g[\mathbf{a}]$ que buscamos minimizar

$$g[\mathbf{a}^i + \mathbf{d}^i] \approx g[\mathbf{a}^i] + (\mathbf{d}^i)^T \nabla_a g[\mathbf{a}^i] + \frac{1}{2} (\mathbf{d}^i)^T \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^i + t\mathbf{d}^i] \mathbf{d}^i \equiv m(\mathbf{d}^i). \quad (3.2)$$

donde $t \in (0, 1)$, y $(\mathbf{d}^i)^T$ indica el vector traspuesto a \mathbf{d}^i .

Exigiendo que se anule la derivada de $m(\mathbf{d}^i)$, se llega la dirección de Newton, dada por

$$\mathbf{d}^i = -(\nabla_a^2 g^i)^{-1} \nabla_a g^i. \quad (3.3)$$

El principal obstáculo para la aplicación de la dirección de Newton radica en el cálculo de la inversa del Hessiano $\nabla_a^2 g^i$ de la función objetivo, que en tomografía óptica puede resultar extremadamente costoso, debido a la alta dimensionalidad de la ETR. Por este motivo, el método BFGS implementa una aproximación del Hessiano (mas concretamente, de la inversa del Hessiano) que es actualizada a cada paso de la iteración.

Exigiendo que el gradiente de la Ecuación (3.2) coincida con el gradiente de la función objetivo en los últimos dos iterandos sucesivos se llega a

$$\nabla_a^2 g[\mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i] \approx \nabla_a g[\mathbf{a}^{i+1}] - \nabla_a g[\mathbf{a}^i]. \quad (3.4)$$

Esta última relación nos permite aproximar el Hessiano utilizando las derivadas de la función objetivo obtenidas para dos iteraciones sucesivas. La inversa del Hessiano es aproximada exigiendo que se cumpla la relación (3.4), que puede escribirse

$$(B^{i+1})^{-1}y^i = s^i, \quad (3.5)$$

con $s_i = \mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i$ y $y^i = \nabla_a g[\mathbf{a}^{i+1}] - \nabla_a g[\mathbf{a}^i]$. La fórmula BFGS para actualizar el Hessiano en cada iteración viene dada por [75]

$$(B^{i+1})^{-1} = (V^i)^T (B^i)^{-1} V^i + \rho^i s^i (s^i)^T, \quad (3.6)$$

la cual cumple la relación (3.5), donde $\rho^i = \frac{1}{(y^i)^T s^i}$ y $V^i = \bar{\mathbf{1}} - \rho^i y^i (s^i)^T$. La dirección de descenso, finalmente, se obtiene de la Ecuación (3.3) reemplazando el Hessiano por su aproximación B^i

$$\mathbf{d}^i = -(B^i)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^i]. \quad (3.7)$$

3.2.1 El método de uso de memoria limitada lm–BFGS

En nuestro algoritmo para la resolución del problema inverso, el coeficiente de absorción es actualizado en cada iteración utilizando la relación

$$\mathbf{a}^{i+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^i(\mathbf{x}) - (B^i)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^i]. \quad (3.8)$$

La discretización de la inversa del Hessiano $(B^i)^{-1}$ se representa con una matriz, que para el problema 2D tiene $N_x \times N_y$ puntos. La manipulación y almacenamiento de esta matriz puede ser sumamente costosa. Por ello, se utiliza una versión aproximada, en la cual sólo se almacenan los vectores $\{s^k, y^k\}$, $k = i-m, \dots, i-1$ para un dado número de puntos m previos a la iteración i -esima. Se utiliza una aproximación inicial al Hessiano $(B^i)_0^{-1}$ [75, Cap. 7]

$$(B^i)_0^{-1} = \gamma^i \bar{\mathbf{1}}, \quad \gamma^i = \frac{(s^{i-1})^T y^{i-1}}{(y^{i-1})^T y^{i-1}}, \quad (3.9)$$

y de la Ecuación (3.6) se tiene la relación de recurrencia

$$\begin{aligned}
 (B^{i+1})^{-1} = & (V^{i-1})^T \dots V^{i-m})^T (B^i)_0^{-1} (V^{i-m} \dots V^{i-1}) \\
 & + \rho^{i-m} (V^{i-1})^T \dots V^{i-m+1})^T s^{i-m} (s^{i-m})^T (V^{i-m+1} \dots V^{i-1+1}) \\
 & + \rho^{i-m+1} (V^{i-1})^T \dots V^{i-m+2})^T s^{i-m+1} (s^{i-m+1})^T (V^{i-m+2} \dots V^{i-1}) \\
 & + \dots \\
 & + \rho^{i-1} s^{i-1} (s^{i-1})^T.
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

de donde surge el algoritmo (2) [29, 75]

Algoritmo 2 lm-BFGS

- 1: dados m , \mathbf{a}^i , y $\nabla_a g[\mathbf{a}^i]$
 - 2: $q = \nabla_a g[\mathbf{a}^i]$
 - 3: **para** $k = i - 1, i - 2, \dots, i - m$ hacer
 - 4: $\alpha^k = \rho^k (s^k)^T q$,
 - 5: $q = q - \alpha^k y^k$,
 - 6: **terminar**
 - 7: $r = (B_0^k)^{-1} q$,
 - 8: **para** $k = i - m, i - m + 1, \dots, i - 1$ hacer
 - 9: $\beta = \rho^k (y^k)^T r$,
 - 10: $r = r + s^k (\alpha^k - \beta)$,
 - 11: **terminar**
 - 12: Finalizar programa, con $(B^k)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^k] = r$.
-

En esta Tesis utilizaremos el valor de $m = 5$, partiendo de un coeficiente inicial $a^0(\mathbf{x})$ dado por cierto conocimiento previo. En la Sec. 3.8, esto se ejemplifica utilizando la imagen de resonancia magnética de un cuello humano. Las cotas inferiores $a^l(\mathbf{x})$ y superiores $a^u(\mathbf{x})$ del coeficiente de absorción limitan el subespacio de soluciones posibles a $a^l(\mathbf{x}) \leq a^i(\mathbf{x}) \leq a^u(\mathbf{x})$. Una condición física que debe cumplirse siempre es que la cota inferior no sea negativa. Las regiones a estudiar que se diferencian del medio conocido se denominan inclusiones. En aquellos tejidos donde se sabe que no habrán inclusiones, el coeficiente de absorción puede fijarse utilizando $a^l(\mathbf{x}) = a^u(\mathbf{x}) = a^0(\mathbf{x})$, cuyo valor se obtiene de la información preliminar.

Si por la naturaleza del diagnóstico que se está realizando, se espera que una dada inclusión no se encuentre dentro de cierto tipo de tejido, puede restringirse la minimización para excluirlo del cálculo. Esto ocurre, por ejemplo, en la tráquea del cuello humano, que al estar llena de aire, no puede contener un tumor en su interior. Adicionalmente, se conocen cotas para el tipo de inclusión que se estudia, *e.g.* existen límites superiores e inferiores para los excesos de absorción producidos por la existencia de tumores, que también son utilizados para limitar el espacio de soluciones del problema inverso. El algoritmo mediante el cual se imponen dichas cotas en los coeficientes se detalla en la ref. [29].

3.3 El operador de transporte y otras definiciones preliminares

En esta sección, haremos uso del operador de transporte, el cual definimos según

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[u] \equiv & \frac{1}{c} \frac{\partial u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)}{\partial t} + \hat{\theta} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + a(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \\ & + b(\mathbf{x}) \left[u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) - \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' \right], \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde se hizo explícita la dependencia del operador de transporte \mathcal{T} con respecto a $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$.

Consideramos el problema ETR de valores iniciales y condiciones de contorno

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[u] &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t = 0) &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &= f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) + q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_- \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde todas las cantidades fueron definidas en la Sección 2.1.

Introducimos la “función ventana” [49]

$$w(v) = \begin{cases} 1 & \text{for } v = 0, \\ \exp\left(\frac{2e^{-1/|v|}}{|v|-1}\right) & \text{for } 0 < |v| < 1, \\ 0 & \text{for } |v| \geq 1. \end{cases} \quad (3.13)$$

de la variable real v , la cual se anula para $|v| \geq 1$ y realiza una transición suave a uno en el intervalo $-1 < v < 1$. Esta función será utilizada de diferentes formas en las secciones

subsiguientes— incluyendo el modelado del perfil temporal y angular de los pulsos láser, así como el modelado de la sensibilidad espacial de los fotodetectores.

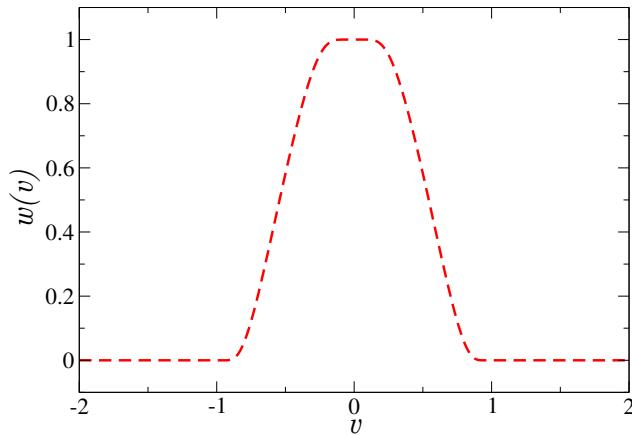


Figura 3.3: Gráfico de la función ventana $w(v)$ (3.13) utilizada para modelar los perfiles temporales y angular de las fuentes láser, así como la sensibilidad espacial de los fotodetectores.

3.4 El método de Fuentes Múltiples Superpuestas

En los problemas de tomografía óptica, la absorción y dispersión del medio requieren el uso de un número de fuentes lumínicas, que permitan sensar las diferentes regiones del dominio en consideración. Para esto, en general, se utiliza el denominado “método de barrido” (MB), del inglés, “Transport Sweep”. En éste, se requiere la resolución de un problema directo y un problema adjunto para cada fuente $q_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$, $i = 1, \dots, N_q$ con N_q el número total de fuentes empleadas. El costo computacional en este método se incrementa linealmente con el número de fuentes utilizadas.

Debido a la atenuación exponencial de la intensidad lumínica, las fuentes aportan una cantidad de fotones despreciables en los detectores alejados de las mismas. Esto hace que se pierda una gran cantidad de información, aún incrementando la cantidad de fuentes utilizadas. Esto nos motivó a concebir un método innovador con el que podemos evitar el desperdicio de esfuerzos computacionales. En esta Tesis introducimos el método de Fuentes Múltiples Superpuestas (FMS), que consiste en la utilización de “fuentes generalizadas”. Estas fuentes representan una o múltiples fuentes láser activadas con ciertos retrasos temporales.

Esto conforma un único problema directo en el cual todos los detectores reciben información de las fuentes, lo que brinda ventajas considerables en su costo computacional, como demostraremos más adelante.

Los métodos MB y FMS se basan en el uso de dos tipos diferentes de fuentes, que pueden expresarse como

$$q = q_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \sum_{k=1}^{N_s} s_{k,i}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad i = 1, 2, \dots, N_q, \quad (3.14)$$

donde i distingue a cada fuente generalizada, y el índice k indica el número de fuentes láser contenido en cada una de ellas. Para las fuentes en el método MB, fijamos $N_s = 1$ y, en general, $N_q > 1$. Esto implica que existen N_q fuentes láser, y cada una de ellas requiere la resolución de un problema directo y adjunto para cada iteración en el problema inverso. En nuestro método FMS, utilizamos $N_s > 1$ y $N_q = 1$. Esto significa que N_s fuentes láser son superpuestas en una única “fuente generalizada”. Sólo debe resolverse un único par de problemas directo y adjunto por iteración para la resolución del problema inverso.

Utilizando la función ventana (3.13), definimos

$$s_{k,i}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k,i}|^2}{2\sigma_x^2}\right) w(\beta_{k,i}(\theta)) w(\gamma_{k,i}(t)), \quad (3.15)$$

para las posiciones de las fuentes láser $\mathbf{x}_{k,i} \in \partial\Omega$, de diámetro σ_x . La ventana $w(\beta_{k,i})$, con

$$\beta_{k,i}(\theta) = \frac{|\theta - \theta_{k,i}|}{\sigma_\theta}, \quad (3.16)$$

representa el comportamiento angular de la radiación para cada láser (k, i) , donde $0 \leq \theta_{k,i} < 2\pi$ es el ángulo de la dirección $\hat{\theta}_{k,i}$ en la que apunta y σ_θ es su dispersión angular. Similarmente $w(\gamma_{k,i})$, con

$$\gamma_{k,i}(t) = \frac{|t - \tau_{k,i}|}{\sigma_t}, \quad (3.17)$$

modela el perfil temporal de cada pulso, con retardos $\tau_{k,i} \geq 0$, y duración $2\sigma_t$.

En cada “barrido” del método MB, cada fuente lumínica i se aplica sin retardo temporal ($\tau_{i,1} = 0$), y se guardan los valores registrados por todos los fotodetectores utilizados [28, 77]. Por otra parte, en el método FMS, el encendido de distintas N_s fuentes a tiempos diferentes se representa con una única fuente generalizada ($N_q = 1$), con retardos temporales $\tau_{1,k} \geq 0$. En

este método se requieren simulaciones más largas en comparación con el tiempo requerido para cada una de las N_q fuentes del método MB. Sin embargo, como se demuestra en la Sección 3.8, la estrategia de fuentes superpuestas permite obtener ganancias significativas en términos del costo computacional total para todo el proceso de inversión, sin detrimiento de la precisión.

3.5 El método adjunto para el cálculo de gradientes

Para resolver el problema inverso es necesario considerar las mediciones registradas por $N_d \geq 1$ detectores, donde el detector j -ésimo ($1 \leq j \leq N_d$) ubicado en el punto $\mathbf{x}_j \in \partial\Omega$, queda caracterizado por el operador de medición $G_j = G_j[u](t)$ definido como

$$G_j[u] = \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0} [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} w \left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|}{\sigma_d} \right) u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta dS \quad (3.18)$$

para cualquier función $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ definida en $(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \in \Omega \times S^1 \times [0, T]$. Utilizando la función (3.13), y llamando $\sigma_d > 0$ al área efectiva de los detectores, el factor w caracteriza la sensibilidad espacial del detector j -ésimo. dS denota el elemento de área en $\partial\Omega$. El operador de medición $G_j[u]$ cuantifica el flujo de fotones transmitidos a través de la superficie del detector. Para cada fuente generalizada q_i se consideran N_d detecciones resueltas en el tiempo. El número y la ubicación de los detectores se mantienen fijos durante el proceso de inversión.

En vista de las consideraciones previas (Sección 3), en lo que sigue haremos explícita la dependencia del operador de transporte \mathcal{T} y de la solución u en la Ecuación (3.11) con respecto al coeficiente de absorción $a = a(\mathbf{x})$, llamando

$$\mathcal{T}[u] = \mathcal{T}[u, a] = \mathcal{T}[u, a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \quad (3.19)$$

y

$$u = u[a] = u[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (3.20)$$

respectivamente.

Expresamos el problema inverso para el parámetro óptico $a(\mathbf{x})$ en términos del problema de minimización de la función objetivo

$$\Lambda[a] = \sum_{i=1}^{N_q} g_i[u_i], \quad (3.21)$$

donde, para un dado coeficiente de absorción a ,

$$u_i = u_i[a] = u_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \quad (3.22)$$

denota la solución $u = u_i$ de la Ecuación (3.12) con $q = q_i$. Para N_q fuentes generalizadas q_i , y N_d detecciones $\tilde{G}_{j,i}$ para cada una de ellas, se obtiene un número total de mediciones $N_q \times N_d$. Los términos de la función objetivo g_i están dados por la funcional

$$g_i[u] = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_d} \int_0^T (G_j[u] - \tilde{G}_{j,i})^2 dt. \quad (3.23)$$

Para minimizar la función objetivo (3.21) utilizamos el algoritmo de descenso por gradiente lm-BFGS (ver ref. [29] y Sección 3.2), el cual se basa en el uso de la derivada funcional $\frac{d\Lambda}{da}[a; \delta a]$ con respecto al coeficiente de absorción $a = a(\mathbf{x})$ en la dirección δa . El operador $\frac{d}{da}$ denota la diferenciación de Gateaux [78]. Para una función $a = a(\mathbf{x})$ y una perturbación $\delta a = \delta a(\mathbf{x})$, la derivada de Gateaux de una funcional $h = h[a]$ en la dirección δa se define según

$$\frac{dh}{da}[a; \delta a] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{h[a + \varepsilon \delta a] - h[a]}{\varepsilon}. \quad (3.24)$$

Las derivadas parciales de Gateaux para un operador general $w \equiv w[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ (por ejemplo, el operador de transporte $\mathcal{T}[u]$, la solución $u[a]$ a la Ecuación (3.12), etc.):

$$\frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{w[a + \varepsilon \delta a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) - w[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)}{\varepsilon}. \quad (3.25)$$

En lo que sigue, utilizaremos las derivadas de Gateaux para la composición de funcionales y operadores, en los cuales se satisface la regla de la cadena. Por ejemplo, para $h \circ w[a] = h[w[a]]$ se cumple

$$\frac{d(h \circ w)}{da}[a; \delta a] = \frac{dh}{dw} \left[w[a]; \frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a] \right]. \quad (3.26)$$

A continuación presentamos nuestra demostración para esta relación (Gaggioli y Bruno [79]). Al perturbar ε por la función $\delta a = \delta a(\mathbf{x})$, resulta el coeficiente $(a + \varepsilon \delta a)$, y el operador perturbado $w[a + \varepsilon \delta a]$. Utilizando la definición de la derivada de Gateaux (3.25) obtenemos

$$w[a + \varepsilon \delta a] = w[a] + \varepsilon \frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a] + o(\varepsilon)$$

donde $\frac{o(\varepsilon)}{\varepsilon} \rightarrow 0$ para $\varepsilon \rightarrow 0$. En otras palabras, el error en la aproximación $w[a + \varepsilon\delta a] \approx w[a] + \varepsilon \frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a]$ es mucho mas pequeño que ε . Por lo tanto, puede aproximarse

$$h[w[a + \varepsilon\delta a]] \approx h\left[w[a] + \varepsilon \frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a]\right]$$

en el cociente incremental, de la forma (3.25), para la derivada de la función compuesta $h[w[a]]$, de donde resulta

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{h[w[a + \varepsilon\delta a]] - h[w[a]]}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{h[w[a] + \varepsilon \frac{\partial w}{\partial a}[a; \delta a]] - h[w[a]]}{\varepsilon},$$

que equivale al lado derecho de (3.26). ■

La derivada funcional de la función objetivo (3.21) viene dada por

$$\frac{d\Lambda}{da} = \sum_{i=1}^{N_q} \frac{d(g_i \circ u_i)}{da}[a; \delta a]. \quad (3.27)$$

Para obtener las derivadas de la suma del lado derecho de esta ecuación aplicamos la regla de la cadena (3.26), de donde resulta

$$\frac{d(g_i \circ u_i)}{da}[a; \delta a] = \frac{dg_i}{du}\left[u_i[a]; \frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a]\right], \quad (3.28)$$

o, utilizando (3.18) y (3.23), y definiendo $\mathcal{G}[a; \delta a] \equiv \frac{d(g_i \circ u_i)}{da}[a; \delta a]$ donde

$$\begin{aligned} \mathcal{G}[a; \delta a] &\coloneqq \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0} \sum_{j=1}^{N_d} \left(G_j[u_i[a]] - \tilde{G}_{j,i} \right) [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] \\ &\quad \times \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} w\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|}{\sigma_d}\right) \frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta dS dt. \end{aligned} \quad (3.29)$$

En vista de la Ecuación (3.29), los gradientes (3.27) necesarios para la estrategia de minimización en un contexto discreto podrían generarse evaluando y sustituyendo la derivada $\frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a]$, para cada a discretizado. Sin embargo, el cálculo de estas derivadas parciales utilizando, por ejemplo, un esquema de diferencias finitas, requiere la evaluación de una solución al problema de transporte (3.12) para cada dirección δa , lo cual claramente constituye un costo computacional inabordable para cualquier problema realista. Para sobreponernos a esto nos basamos en la estrategia del método adjunto, que se describe a continuación.

Para evaluar la Ecuación (3.29) en forma eficiente debemos eliminar la dependencia en la derivada $\frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a]$. Como se indica a continuación, esto puede lograrse considerando el

problema de valores iniciales y de contorno, que se obtiene mediante diferenciación, para un coeficiente a y en la dirección δa , de cada una de las tres ecuaciones en el problema de transporte. En particular, de la primer línea en (3.12) obtenemos

$$0 = \frac{d\mathcal{T}}{da} [u_i[a], a; \delta a] = \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial u} \left[u_i[a], a; \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \right] + \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial a} [u_i[a], a; \delta a]. \quad (3.30)$$

Pero, por linealidad de \mathcal{T} , tenemos qué $\mathcal{T}[u + \varepsilon \frac{\partial u}{\partial a}] = \mathcal{T}[u] + \varepsilon \mathcal{T}[\frac{\partial u}{\partial a}]$ y de la definición de la derivada de Gateaux (3.25)

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial u} \left[u_i[a], a; \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \right] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}[u_i + \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a], a] - \mathcal{T}[u_i, a]}{\varepsilon}, \quad (3.31)$$

de donde

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial u} \left[u_i[a], a; \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \right] = \mathcal{T} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a], a \right], \quad (3.32)$$

y, por lo tanto, de (3.12), resulta

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial a} [u_i[a], a; \delta a] + \mathcal{T} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a], a \right] = 0 \quad (3.33)$$

Esta relación provee, para cada $(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$, una ecuación lineal para las dos incógnitas $u_i[a]$ y $\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a]$.

Para eliminar la cantidad $\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a]$ en el lado derecho de la Ecuación (3.29) sustraemos a ambos lados de dicha identidad una “combinación lineal con coeficientes apropiados” λ obtenida a partir de la relación (3.33)—o, más precisamente, de la integral en $(\mathbf{x}, \theta, t) \in \Omega \times [0, 2\pi) \times [0, T]$ del producto de la relación (3.33) por una función apropiada $\lambda(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$.

Por simplicidad notacional, expresamos estas integrales en términos del producto escalar

$$\langle v, w \rangle = \int_0^T \int_{\Omega} \int_{S^1} v(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) w(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta d\mathbf{x} dt \quad (3.34)$$

para las funciones v y w de las variables $(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$. Para una función $\lambda_i = \lambda_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ obtenemos de (3.33) la ecuación

$$\left\langle \lambda_i, \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial a} [u_i, a; \delta a] \right\rangle + \left\langle \lambda_i, \mathcal{T} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a], a \right] \right\rangle = 0, \quad (3.35)$$

eliendo una función λ_i apropiada, buscamos sustraer este término en la Ec. (3.29) de forma tal de eliminar el término problemático $\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a]$.

Para elegir la función λ_i que cumpla la cancelación deseada, utilizamos integración por partes para expresar el segundo sumando en la Ec. (3.35) como una integral del producto de dos funciones, una de las cuales es el término $\frac{\partial u_i}{\partial a}$. La integración por partes de este segundo sumando da como resultado la suma de una integral “volumétrica” \mathcal{A} (una integral sobre $\Omega \times [0, 2\pi] \times [0, T]$) más una suma de términos de “borde” $\mathcal{B} + \mathcal{C}$:

$$\left\langle \lambda_i, \mathcal{T} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a], a \right] \right\rangle = \mathcal{A} + \mathcal{B} + \mathcal{C} \quad (3.36)$$

donde

$$\mathcal{A}[a; \delta a] := \int_0^T \int_{\Omega} \int_{S^1} \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \left[-\frac{1}{c} \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} - \hat{\theta} \cdot \nabla \lambda_i + (a + b) \lambda_i - b \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') \lambda_i d\theta' \right] d\theta d\mathbf{x} dt, \quad (3.37)$$

$$\mathcal{B}[a; \delta a] := \int_{\Omega} \int_{S^1} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \lambda_i \right]_0^T d\theta d\mathbf{x} \quad (3.38)$$

y

$$\mathcal{C}[a; \delta a] := \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{S^1} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \lambda_i \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] d\theta dS dt. \quad (3.39)$$

Sustrayendo la combinación lineal (3.35) de la Ec. (3.29) y utilizando las relaciones (3.36)-(3.39) obtenemos

$$\frac{d(g_i \circ u_i)}{da} [a; \delta a] = \mathcal{G} - \mathcal{A} - \mathcal{B} - \mathcal{C} - \left\langle \lambda_i, \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial a} [u_i, a; \delta a] \right\rangle. \quad (3.40)$$

La cantidad $\frac{\partial u_i}{\partial a}$ en (3.40) resultará eliminada, como es deseado, si y sólo si

$$\mathcal{A} + \mathcal{B} + \mathcal{C} = \mathcal{G}, \quad (3.41)$$

dado que el último término en el lado derecho de la Ec. (3.40) no contiene a $\frac{\partial u_i}{\partial a}$. Una vez elegida la función λ_i tal que se satisfaga la relación (3.41), y utilizando la derivada de Gateaux

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial a} [u_i, a; \delta a] = \delta a(\mathbf{x}) u_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (3.42)$$

de (3.40) resulta la expresión

$$\frac{d(g_i \circ u_i)}{da} [a; \delta a] = - \left\langle \lambda_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \delta a(\mathbf{x}) u_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \right\rangle \quad (3.43)$$

para la derivada funcional, la cual no contiene el término desafiante $\frac{\partial u_i}{\partial a}$.

Para obtener la solución $\lambda_i = \lambda_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ a la ec. (3.41) notamos que, en vista de los dominios de integración espacial en las ecuaciones (3.29) y (3.37)-(3.39), la Ec. (3.41) se satisface si y sólo si se cumplen las condiciones (i) $\mathcal{A} = 0$, (ii) $\mathcal{B} = 0$ y (iii) $\mathcal{C} - \mathcal{G} = 0$. La condición (i) claramente implica que el término en corchetes para (3.37) se anule:

$$\mathcal{T}^*[\lambda_i[a], a] \equiv -\frac{1}{c} \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} - \hat{\theta} \cdot \nabla \lambda_i + (a + b)\lambda_i - b \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') \lambda_i d\theta' = 0. \quad (3.44)$$

Donde definimos el operador *adjunto* de transporte \mathcal{T}^* .

Para cumplir la condición (ii) imponemos la condición “final” $\lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t = T) = 0$, dado que en vista de (3.12), tenemos qué $\frac{\partial u_i}{\partial a} = 0$ para $t = 0$.

El término de borde (iii), finalmente, requiere descomponer la integral (3.39) en dos integrales \mathcal{C}_- y \mathcal{C}_+ , donde cada una queda restringida a los dominios angulares $\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} < 0$ y $\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}[a; \delta a] &= \mathcal{C}_-[a; \delta a] + \mathcal{C}_+[a; \delta a] \\ &= \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \left[\int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} < 0} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \lambda_i \frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a] d\theta + \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \lambda_i \frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a] d\theta \right] dS dt. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Incorporando la condición de contorno de Fresnel que se obtiene por diferenciación de la Ec. (3.12), $\frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)$ ($(\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_-$) en el término \mathcal{C}_- tenemos

$$\mathcal{C}_-[a; \delta a] = \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} < 0} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)[a; \delta a] d\theta dS dt. \quad (3.46)$$

Dado que el término $\mathcal{C} - \mathcal{G} = 0$ involucra dos integrales en $\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0$, buscamos llevar la integral \mathcal{C}_- en $\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} < 0$ al dominio $\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0$ mediante el cambio de variable $\hat{\theta}_r = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}$, siendo $\bar{\mathbf{R}}$ la matriz de reflexión definida en la Sección 2.1, y donde, dado que para la matriz de reflexión $\bar{\mathbf{R}} = \bar{\mathbf{R}}^{-1}$, vale que $\hat{\theta} = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}_r$:

$$\mathcal{C}_-[a; \delta a] = - \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta}_r \cdot \hat{\nu} > 0} \hat{\theta}_r \cdot \hat{\nu} \lambda_i(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}_r, t) f(\bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}_r \cdot \hat{\nu}) \frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)[a; \delta a] d\theta_r dS dt. \quad (3.47)$$

sustituyendo la variable muda $\hat{\theta}_r$ por $\hat{\theta}$ y usando nuevamente que $\hat{\theta}_r = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}$ y que $f(\bar{\mathbf{R}}\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) = f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})$:

$$\mathcal{C}_-[a; \delta a] = - \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)[a; \delta a] d\theta dS dt. \quad (3.48)$$

Finalmente, podemos escribir la condición (iii) $\mathcal{C} - \mathcal{G} = 0$ como

$$\begin{aligned} \mathcal{C} - \mathcal{G} &= \int_0^T \oint_{\partial\Omega} \int_{\hat{\theta} \cdot \hat{\nu} > 0} \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} \frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a] \left[\lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^{N_d} \left(G_j[u_i[a]] - \tilde{G}_{j,i} \right) [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] \times \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} w\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|}{\sigma_d}\right) \right] d\theta dS dt = 0. \end{aligned} \quad (3.49)$$

La condición (3.49) se cumplirá si y sólo si

$$\begin{aligned} \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &= f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) \\ &+ \sum_{j=1}^{N_d} \left(G_j[u_i[a]] - \tilde{G}_{j,i} \right) [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] \times \hat{\theta} \cdot \hat{\nu} w\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|}{\sigma_d}\right) \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_+. \end{aligned} \quad (3.50)$$

En suma, hemos demostrado que se cumplirán las condiciones (i), (ii) y (iii) si se eligen los “coeficientes” λ_i en forma tal que sean soluciones del problema adjunto

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^*[\lambda_i[a], a] &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t = T) &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1, \quad \text{y} \\ \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &= f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) + \sum_{j=1}^{N_d} \left(G_j[u_i] - \tilde{G}_{j,i} \right) \times [1 - f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})] w\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|}{\sigma_d}\right), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_+. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Por lo tanto, la función $\lambda_i(\mathbf{x}, \theta, t)$ necesaria en la Ec. (3.43) puede obtenerse resolviendo el *problema de transporte adjunto* (3.51) en el intervalo temporal $T \geq t \geq 0$. Una vez hallada la función λ_i , la componente del gradiente funcional (3.43) en la dirección δa puede obtenerse en forma eficiente por integración, que en vista de la relación (3.34), se expresa cómo

$$\frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a] = - \int_0^T \int_{\Omega} \int_{S^1} \lambda(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \delta a(\mathbf{x}) u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta d\mathbf{x} dt. \quad (3.52)$$

Este procedimiento será validado comparando el gradiente funcional con la derivada funcional obtenida por diferencias finitas.

Nuestra derivación del problema adjunto es original, y a saber de los autores, no se ha reportado en la bibliografía ninguna que incluya las condiciones de borde de Fresnel. Sólo existe una interpretación física al problema (3.51) para el caso de condiciones de contorno de vacío (donde $f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) = 0$) [77, 80]. En esta interpretación, partículas *virtuales* de intensidad

dada por las diferencias $G_j[u_i] - \tilde{G}_{j,i}$ son inyectadas a través de los detectores, y propagadas hacia atrás en el tiempo y en el espacio (notar que tanto el signo de la derivada temporal, como el de las direcciones $\hat{\theta}$ resulta invertido para el problema adjunto). Esta interpretación del problema adjunto aplica idénticamente en el presente caso, que incluye las reflexiones de Fresnel.

El operador \mathcal{T} y su adjunto \mathcal{T}^* satisfacen la relación

$$\left\langle \lambda_i, \mathcal{T} \left[\frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \right] \right\rangle = \left\langle \mathcal{T}^* [\lambda_i[a], a], \frac{\partial u_i}{\partial a} [a; \delta a] \right\rangle \quad (3.53)$$

siempre que estén dadas las condiciones (i), (ii) y (iii).

3.5.1 Verificación numérica de la expresión (3.43) para la derivada funcional

En esta sección presentamos verificaciones numéricas para la derivada funcional (3.43), así como una comprobación de la precisión obtenida para dicha expresión. Con este fin, consideramos un problema del tipo (3.12) con condiciones de borde de Fresnel (2.4), que se describe a continuación. Compararemos la derivada funcional obtenida mediante la expresión (3.52) con la obtenida por la aproximación de diferencias finitas

$$\frac{d(g \circ u)}{da} [a; \delta a]^{FD} \sim \frac{g[u[a + \varepsilon \delta a]] - g[u[a]]}{\varepsilon} \quad (3.54)$$

para una dada dirección $\delta a(\mathbf{x})$, y un valor apropiado del parámetro ε . Utilizaremos el índice de refracción $n_\Omega = 1.4$ para el dominio espacial $\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] = [0, 3] \times [0, 3]$ con $n_0 = 1$ en el exterior del dominio Ω . Por simplicidad utilizaremos $\delta a(\mathbf{x}) = 1$, con coeficientes de absorción y dispersión constantes $a(\mathbf{x}) = a$ y $b(\mathbf{x}) = b$. Estudiaremos los errores producidos en los dos métodos señalados anteriormente, MB y FMS. Sin pérdida de generalidad, consideramos una única fuente generalizada $q_1 = q$. Para el método MB se incluye una única fuente láser incidente en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0.0)$. Para FMS se incorpora la combinación de cuatro fuentes láser, cada una ubicada en el centro del dominio espacial cuadrado Ω , con $\mathbf{x}_{1,s} = (1.5, 0.0)$ cm, $\mathbf{x}_{2,s} = (3.0, 1.5)$ cm, $\mathbf{x}_{3,s} = (1.5, 3.0)$ cm y $\mathbf{x}_{4,s} = (0, 1.5)$ cm. En estas pruebas, empleamos un único detector para ambos métodos, ubicado

en $\mathbf{x}_d = (0.0, 0.75)$ cm. Los retardos temporales de las fuentes usadas en FMS son de 50 ps entre fuentes sucesivas y cada pulso tiene una duración total de 60 ps. El sistema fue evolucionado para ambos métodos MB y FMS hasta un tiempo final de 600 ps. Utilizamos una discretización con $N_x = N_y = 200$ espaciales, $M = 32$ direcciones discretas y $T = 60000$ pasos temporales, tanto para el problema directo como el adjunto.

Consideramos el error relativo

$$e = \frac{\left| \frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a]^{\text{Adj}} - \frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a]^{\text{FD}} \right|}{\left| \frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a]^{\text{Adj}} \right|}, \quad (3.55)$$

para cuantificar la calidad del método adjunto propuesto, donde $\frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a]^{\text{Adj}}$ y $\frac{d(g \circ u)}{da}[a; \delta a]^{\text{FD}}$ denotan las derivadas funcionales obtenidas por el método adjunto y por diferencias finitas, respectivamente. Empleamos el valor $\varepsilon = 0.0001$ para la aproximación por diferencias finitas (3.54). La Tabla (3.1) muestra los errores de las derivadas funcionales para varios

Tabla 3.1: Diferencias obtenidas para las derivadas funcionales

$a[1/cm]$	$b[1/cm]$	g	e_{TS}	e_{MSS}
0.35	80	0.9	8×10^{-5}	9×10^{-5}
0.35	20	0.0	8×10^{-5}	1×10^{-3}
0.35	8.0	0.0	3×10^{-4}	2×10^{-4}
0.35	0.1	0.0	9×10^{-5}	3×10^{-4}

regímenes de transporte, incluyendo diferentes coeficientes de dispersión b y de anisotropía g . El acuerdo observado en todos los casos es excelente. Como mostraremos en la sección siguiente, el método adjunto reduce la complejidad computacional en varios órdenes de magnitud para el cálculo del gradiente funcional. Sin embargo, esto no impacta en la precisión con la que se determina el mismo.

3.5.2 Cálculo numérico del gradiente funcional

A continuación describiremos el empleo del método adjunto para el cálculo de la derivada funcional (3.52) en la determinación del gradiente de la función objetivo. Discretizamos el

dominio espacial Ω asumiendo $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} \in \Omega$ donde $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} = (x_{\min} + [\ell_1 - 1]\Delta x)\hat{x} + (y_{\min} + [\ell_2 - 1]\Delta y)\hat{y}$, $\ell_1 = 1, \dots, N_x + 1$, $\ell_2 = 1, \dots, N_y + 1$.

Estamos interesados en calcular las variaciones de la función objetivo con perturbaciones $\delta a(\mathbf{x})$ del coeficiente de absorción en cada dirección posible. Las perturbaciones escogidas son un conjunto de funciones definidas para cada uno de los puntos $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} \in \Omega$. Estas funciones tienen forma piramidal, donde cada una de ellas tiene un valor igual a uno en un único punto $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}$, y es cero en el resto de los puntos, tal como se ilustra en la Fig. 3.4 La función piramidal

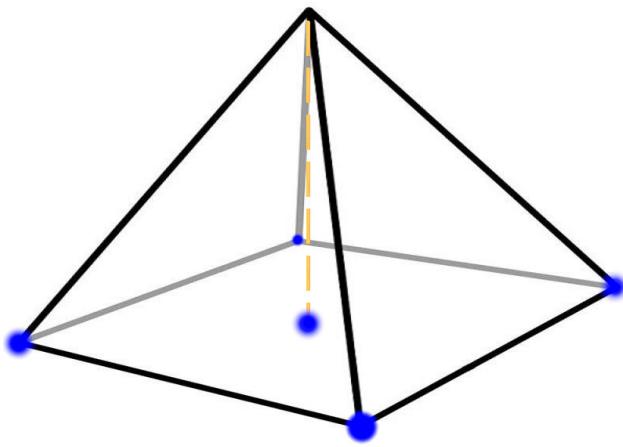


Figura 3.4: Función de forma piramidal utilizada para producir las variaciones en el coeficiente de absorción. Esta función vale uno en un punto dado y se anula en el resto de los puntos de la grilla discreta.

discretizada es aproximada como un producto de deltas de Kronecker $\delta a_{\ell_1, \ell_2} = \delta_{r, \ell_1} \times \delta_{s, \ell_2}$. Llamando $\nabla_a g(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2})$ al valor del gradiente funcional en la dirección $\delta a_{\ell_1, \ell_2}$, la versión discreta de la Ecuación (3.52) resulta

$$\begin{aligned} \nabla_a g(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}) &= - \int_0^T \int_{\Omega} \int_{S^1} \lambda(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \delta a(\mathbf{x}) u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta d\mathbf{x} dt \\ &\sim - \sum_{m,j} \lambda_{\ell_1, \ell_2, m, j} u_{\ell_1, \ell_2, m, j} \Delta\theta \Delta x \Delta y \Delta t, \end{aligned} \quad (3.56)$$

donde $\lambda_{\ell_1, \ell_2, m, j} \sim \lambda(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}, \hat{\theta}_m, t_j)$ y $u_{\ell_1, \ell_2, m, j} \sim u(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}, \hat{\theta}_m, t_j)$. Cabe notar que la Ecuación (3.56) representa la derivada funcional para una única dirección $\delta a_{\ell_1, \ell_2}$ correspondiente a la componente (ℓ_1, ℓ_2) del gradiente funcional discreto, donde el gradiente total discretizado estará

dado por las perturbaciones en todas las direcciones posibles

$$\nabla_a g(\mathbf{x}) = (\nabla_a g(\mathbf{x}_{1,1}), \nabla_a g(\mathbf{x}_{1,2}), \dots, \nabla_a g(\mathbf{x}_{N_x+1, N_y+1})) . \quad (3.57)$$

En el método adjunto, la evaluación de la Ecuación (3.56) para todas las componentes (ℓ_1, ℓ_2) del gradiente funcional requiere únicamente la resolución de un problema directo de transporte, y de su correspondiente problema adjunto para cada fuente generalizada $q = q_i$. En cambio, el método de diferencias finitas hace uso de la Ecuación (3.54), que demanda la resolución de un número mucho más grande de problemas directos. En este último caso deben evaluarse $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ problemas de transporte (uno por cada perturbación del coeficiente $a(\mathbf{x})$ en el dominio discretizado). En el ejemplo que estamos analizando en esta sección, $N_x = N_y = 200$, por lo cual el método adjunto reduce el tiempo computacional en un factor 40401. Cabe mencionar también que el método adjunto requiere el almacenamiento en memoria de las soluciones completas de los problemas directos y adjunto de transporte para varios pasos temporales (3.56). El algoritmo paralelo propuesto en esta Tesis es apropiado para este problema, ya que no solo permite reducir el tiempo computacional, sino que también distribuye los requerimientos de memoria en los diferentes nodos.

Como ilustración, en la Figura 3.5 se muestra el gradiente completo $\nabla_a g(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2})$ para $1 \leq \ell_1 \leq N_x + 1$ y $1 \leq \ell_2 \leq N_y + 1$. El problema a simular consiste en una única fuente ubicada en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)$ cm y un único detector ubicado en $\mathbf{x}_d = (0, 1.0)$ cm. Elegimos el caso en el cual el detector mide $\tilde{G}_{j,i}(t) = 1$. Como se observa en la figura, el gradiente contiene información de los trayectos determinados por los fotones que salen desde la fuente y arriban al detector. Dichos trayectos definen una región donde el gradiente es más sensible a las variaciones del medio participante. Esto muestra la importancia de contar con varias fuentes y varios detectores que sean capaces de sensar la totalidad del dominio.

3.6 Datos sintéticos con fuentes láser pulsadas

En esta sección simularemos escenarios que pueden ocurrir en tomografía óptica. A diferencia de los casos estudiados hasta ahora, trataremos situaciones con fuentes láser pulsadas que inciden sobre la superficie del dominio. Modelamos la radiación colimada de las fuentes

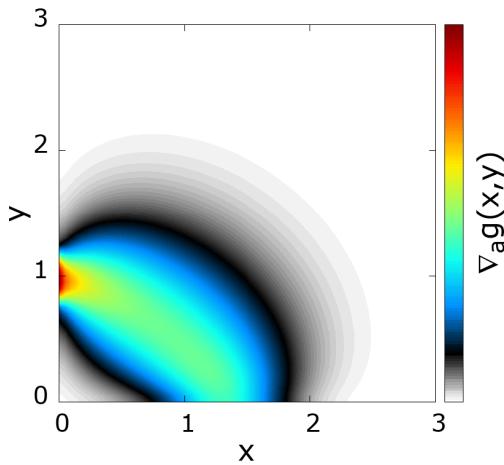


Figura 3.5: Gradiente espacial (3.56) para todas las direcciones discretas posibles $1 \leq \ell_1 \leq N_x + 1$ y $1 \leq \ell_2 \leq N_y + 1$, con una única fuente y un único detector ubicados en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)$ cm y $\mathbf{x}_d = (0, 1.0)$ cm respectivamente. Dado que se utilizaron datos artificiales, la escala carece de sentido en esta figura, y por eso no se muestra.

por medio de una función de la variable $\hat{\theta}$, que tienen máximos abruptos en las direcciones incidentes de cada láser. Resolvemos el problema directo (2.1) con condiciones de borde de Fresnel, utilizando el método FC-DOM.

Asumimos un medio con parámetros ópticos constantes $a(\mathbf{x}) = 0.1 \text{ cm}^{-1}$, $b(\mathbf{x}) = 20 \text{ cm}^{-1}$, $g = 0.8$, $n_\Omega = 1.4$ y $n_0 = 1.0$, en un dominio espacial $\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] = [0, 3] \times [0, 3] \text{ cm}^2$.

Como primer caso supondremos una única fuente, centrada en $\mathbf{x}_{1,1} = (1.5, 0)$ cm, apuntando en la dirección normal a la superficie, con $\theta_{1,1} = \pi/2$, y $\sigma_\theta = \pi/4$. Este láser inyecta un pulso de 60 ps de duración. La Figura 3.6 muestra la evolución temporal de una “onda de flujo de fotones” difusos. En la Fig. 3.7 se muestra la lectura de un detector ubicado en $\mathbf{x}_d = (0.0, 0.75)$ cm en función del tiempo. Dado que en situaciones realistas se espera que los datos experimentales presenten ruido, agregamos un 10% de fluctuaciones aleatorias. Este tipo de simulaciones se utiliza para construir datos sintéticos en el método MB.

A continuación resolveremos un problema directo en el cual se introducen diversas fuentes pulsadas que se encienden en distintos tiempos. Mostramos la resolución de este tipo de pro-

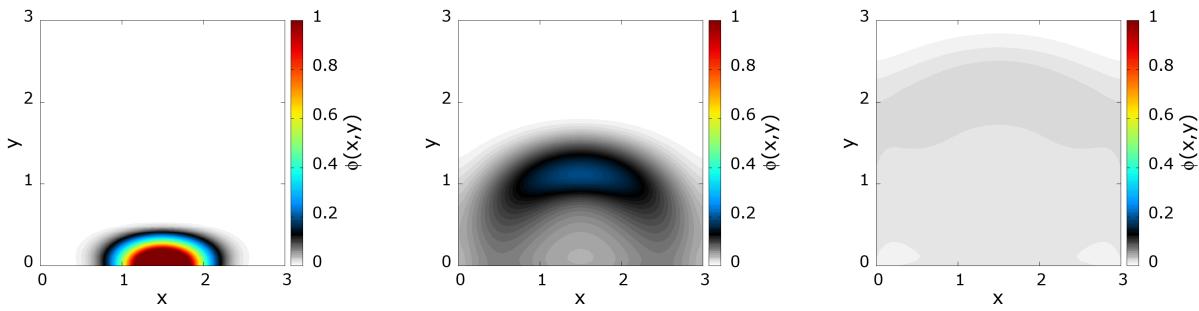


Figura 3.6: Simulación para el modelo directo utilizando el método FC-DOM en paralelo. En la figura se muestra el flujo escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$ debido a una fuente láser ubicada en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)$ cm para tres tiempos diferentes. De izquierda a derecha: $t = 30$ ps, $t = 100$ ps y $t = 170$ ps.

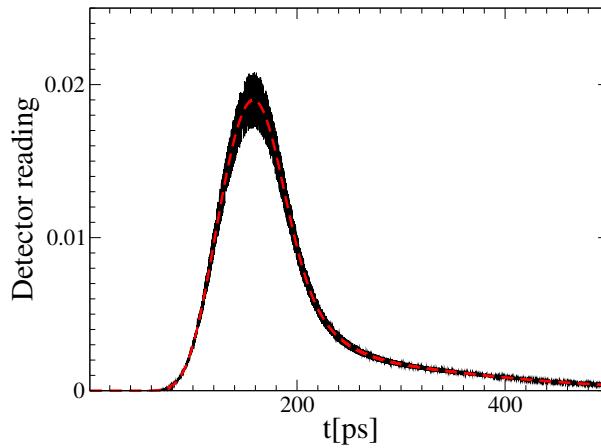


Figura 3.7: Lectura del detector ubicado en $\mathbf{x}_d = (0.0, 0.75)$ cm para una única fuente (curva roja). Agregando un 10% de ruido aleatorio se obtiene la señal sintética (curva negra).

blemas, ya que constituye una simulación típica utilizada en la estrategia FMS. En este ejemplo se inyecta radiación en la dirección normal a la superficie desde cuatro láseres ubicados en el centro de las caras. Cada uno de estos pulsos tiene una duración de 60 ps, y se encienden con una separación temporal de $\tau = 200$ ps. El orden de encendido es: primero la fuente ubicada en y_{\min} , seguida de la fuente en y_{\max} , luego la ubicada en x_{\min} y finalmente se enciende la fuente en x_{\max} . En la resolución que utiliza el método FMS estas cuatro fuentes constituyen una única fuente generalizada ($N_q = 1$ y $N_s = 4$). Se imponen estos retardos temporales para desacoplar las señales originadas por las fuentes individuales proveniente de diferentes lugares. La Figura 3.8 muestra el flujo escalar resultante para distintos tiempos.

La Figura 3.9 muestra los valores que mide un detector ubicado en $\mathbf{x}_d = (3.0, 2.25)$

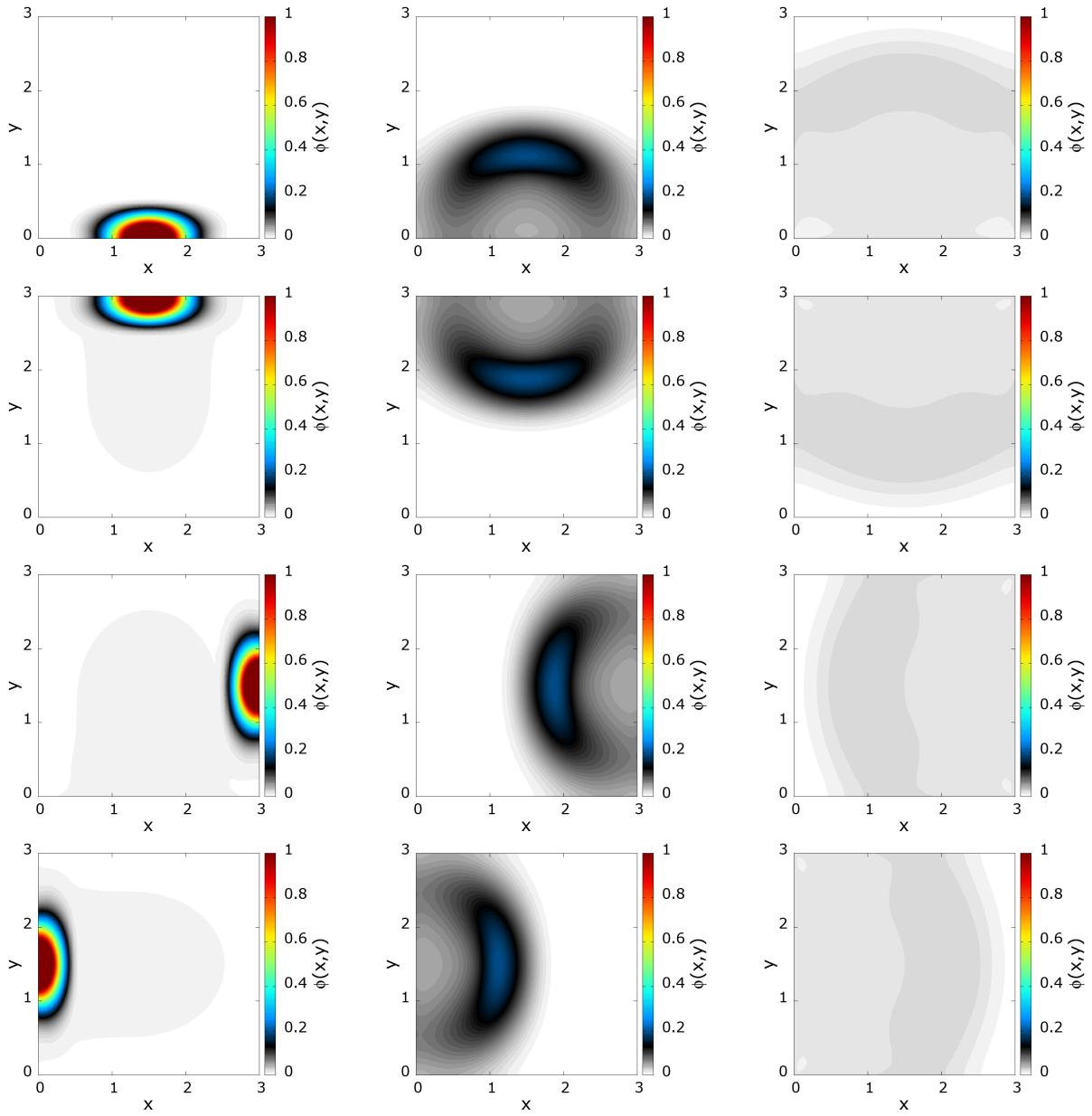


Figura 3.8: Simulación para el problema directo utilizando el método FC-DOM en paralelo y asumiendo una única fuente generalizada que contiene cuatro fuentes láser que se encienden a distintos tiempos. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo: $t = 30 \text{ ps}$, $t = 100 \text{ ps}$ y $t = 170 \text{ ps}$, $t = 230 \text{ ps}$, $t = 300 \text{ ps}$ y $t = 370 \text{ ps}$, $t = 430 \text{ ps}$, $t = 500 \text{ ps}$ y $t = 570 \text{ ps}$, $t = 630 \text{ ps}$, $t = 700 \text{ ps}$ y $t = 770 \text{ ps}$.

en distintos tiempos. Como puede observarse, las señales producidas por cada fuente se superponen. Esto contrasta con la estrategia MB, donde la información de cada fuente está

desacoplada del resto.

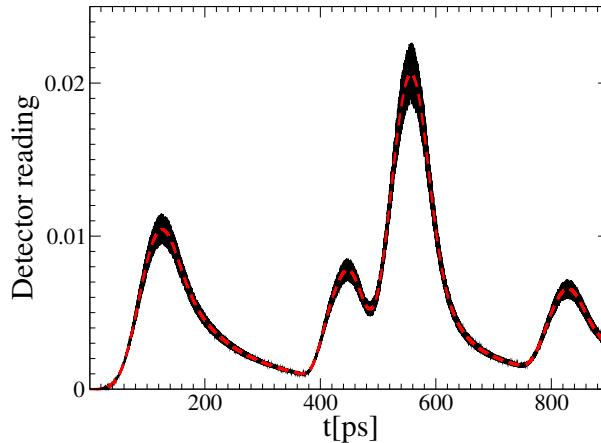


Figura 3.9: Lectura del detector ubicado en $\mathbf{x}_d = (3.0, 2.25)$ para las cuatro fuentes superpuestas, en función del tiempo (curva roja). Agregando un 10% de ruido aleatorio se obtiene la señal sintética (curva negra).

3.7 Algoritmo para la resolución de problemas inversos

Como se indicó anteriormente, proponemos en esta Tesis la utilización de un algoritmo novedoso para el tratamiento de problemas inversos. Esta estrategia se basa en el uso de múltiples fuentes escalonadas en el tiempo (FMS), en lugar de la estrategia de barrido (MB) que subyace en los métodos tradicionalmente presentados en la literatura. En estos métodos previos, por cada fuente láser deben realizarse simulaciones separadas para el par de problemas directo–adjunto, y luego combinar los resultados para obtener el gradiente utilizado en el método de minimización. Por el contrario, en el método FMS que proponemos en nuestro trabajo, se construye la función objetivo utilizando una única fuente generalizada que contiene a todas las fuentes láser, de forma tal que se utiliza *una única simulacion del par directo–adjunto*. Como se demuestra en la Sección 3.8 (de manera cualitativa en las Figuras 3.13 y 3.16 y de forma cuantitativa en las Figuras 3.14 y 3.17), nuestro método reduce los tiempos de cómputo de manera significativa (*e.g.* en un factor de seis), sin que se produzca ningún deterioro en la calidad de la imagen obtenida.

Resolvemos los problemas inversos basándonos en el método iterativo cuasi–Newton de

descenso de gradiente lm–BFGS. En detalle, este método busca el coeficiente de absorción que minimiza la Ec. (3.21) sujeto a las restricciones $a^l(\mathbf{x}) \leq a(\mathbf{x}) \leq a^u(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x}$, o sea, buscamos el coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$ dado por

$$a(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{a^l \leq \tilde{a}(\mathbf{x}) \leq a^u} \Lambda[a]. \quad (3.58)$$

Las restricciones de los valores admisibles de la función $\tilde{a}(\mathbf{x})$ es un conocimiento previo dado por las propiedades de absorción generales del medio considerado. Una propiedad física que siempre debe cumplirse es que $a^l(\mathbf{x}) \geq 0$. Puede incorporarse información adicional adquirida por técnicas de imágenes para reducir aún más el espacio de soluciones admisibles.

El algoritmo para la resolución del problema inverso (Alg. 3), procede de la siguiente manera. A partir de una estimación inicial $a^0(\mathbf{x})$ para el coeficiente de absorción y utilizando las lecturas de los detectores experimentales $\tilde{G}_{j,i}$, con $j = 1, \dots, N_d$ y $i = 1, \dots, N_q$, se resuelven los problemas directos y adjuntos (2.1) y (3.51), y se calcula el gradiente funcional (3.56). Seguidamente, este gradiente se utiliza en el algoritmo lm–BFGS, que devuelve una actualización para coeficiente de absorción $a^1(\mathbf{x})$ el cual reduce las diferencias entre las lecturas de los detectores experimentales y los valores para los detectores simulados. La iteración de este procedimiento converge, mediante el método lm-BFGS, al mínimo de la función objetivo (3.21).

El pseudocódigo con el cual solucionamos el problema inverso de transporte radiativo, para un dado número de iteraciones i_{\max} , se presenta en Algoritmo 3. Aquí $C \in \mathbb{R}$ representa un criterio de convergencia preestablecido. El algoritmo se itera mientras el valor de la función objetivo esté por encima de dicho criterio de convergencia.

3.8 Reconstrucciones numéricas del problema inverso

En esta sección demostraremos las notables ventajas que se obtienen utilizando nuestros métodos aplicándolos a la solución de dos problemas de sumo interés en tomografía óptica y diagnóstico médico: 1) Imagen de tejidos cancerosos en un cuello humano; 2) Respuesta hemodinámica en un modelo de cabeza humana. En ambos, los problemas inversos de tomografía óptica que consideramos conciernen configuraciones en las cuales se buscan inclusiones

Algoritmo 3 Pseudocódigo para la resolución del problema inverso

- 1: Dar una estimación inicial $a^0(\mathbf{x})$
 - 2: **para** $i = 1, \dots, i_{\max}$ **hacer**
 - 3: **para** cada fuente generalizada $q_j, j = 1, \dots, N_q$ **hacer**
 - 4: Resolver el problema directo por medio del Algoritmo 1
 - 5: Evaluar ec. (3.21), si $\Lambda[a] < C$ ir a 10.
 - 6: Resolver el problema adjunto mediante el Algoritmo 1
 - 7: **terminar**
 - 8: Construir el gradiente ec. (3.56)
 - 9: Llamar al algoritmo lm-BFGS para actualizar el coeficiente $a^{i+1}(\mathbf{x})$.
 - 10: **terminar** con $a(\mathbf{x}) = a^i(\mathbf{x})$
-

sobre un tejido de “fondo” que se asume conocido. Estas inclusiones están caracterizadas por un índice de absorción diferente al del tejido que la rodea. Los excesos en la absorción son originados por el aumento de la hemoglobina oxigenada. Este aumento se puede producir por la presencia de un tumor (angiogénesis tumoral) en el tejido (de gran importancia en diagnósticos médicos [7–9, 71, 72]). El exceso de hemoglobina oxigenada también puede dispararse por la respuesta hemodinámica debido a la activación de una región determinada del cerebro (de interés en neurociencias [21–23, 81]).

Resolvemos el problema inverso sobre la base de los datos sintéticos que se obtienen de la solución numérica del problema directo para un coeficiente de absorción “buscado”, $a^v(\mathbf{x})$. Como se describió en la sección anterior, agregamos un 10% de ruido aleatorio a las lecturas resultantes de los detectores para tener en cuenta el ruido experimental. Estudiaremos la convergencia por iteración del algoritmo 3 para un número variable de fuentes y detectores, para una configuración dada. Para evaluar la convergencia en el proceso de reconstrucción cuantificamos el error en la norma L^2 definido como

$$E(i) = \sqrt{\frac{\int_{\Omega} (a^v(\mathbf{x}) - a^i(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} a^v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}} \quad (3.59)$$

donde $E(i)$ corresponde al error L^2 para la iteración i , donde $a^v(\mathbf{x})$ es el coeficiente de absorción “verdadero”, y $a^i(\mathbf{x})$ es el coeficiente de absorción obtenido por el algoritmo 3.

3.8.1 Imagen de tumor en cuello humano

El primer caso de prueba concierne a la aplicación potencial de la técnica de tomografía óptica en el diagnóstico de pacientes para los cuales se dispone de imágenes por resonancia magnética (MRI) del cuello (Fig. 3.10). Describimos una situación teniendo en mente la posible evolución de la metástasis en una región específica del cuerpo (el cuello), tiempo después de haber adquirido la imagen MRI. Similarmente, el procedimiento podría utilizarse para seguir la evolución del tratamiento de un tumor en esta región. La portabilidad y el bajo costo de los sistema de tomografía óptica hacen que estos dispositivos sean mucho mas accesibles para el diagnóstico que las imágenes obtenidas por sistemas MRI, para monitorear la evolución del tratamiento y el avance de un tumor de forma regular.

En las referencias [9, 52] se pueden encontrar estudios sobre el problema directo de la propagación de la luz en el cuello humano. Nosotros utilizamos un modelo similar, para el estudio del problema inverso correspondiente (el cual requiere la resolución repetida del par de problemas directo–adjunto, como se describe en el Algoritmo 3). En particular, nos enfocaremos en la reconstrucción de las propiedades del medio, el estudio de la convergencia y los tiempos computacionales requeridos por los diferentes métodos.

Buscaremos la existencia de un tumor en el tejido blando. Esto se debe a que la angiogénesis tumoral sólo ocurre en este tipo de tejidos. Tanto los coeficientes de la columna vertebral, como los de la médula espinal, y de la tráquea se mantendrán fijos en el proceso de reconstrucción (Tabla 3.2), y fueron tomados de las referencias [52, 82, 83]. Para simplificar

Tabla 3.2: Propiedades ópticas para el modelo de cuello humano

Órgano	$a[1/cm]$	$b[1/cm]$	g	n_Ω
Tejido blando	0.3	80	0.9	1.4
Tráquea	0.0	0.0	0.0	1.0
Columna vertebral	0.25	148	0.9	1.4
Médula espinal	0.17	882	0.9	1.4

el modelo, tomamos el coeficiente de refracción de la tráquea como $n_\Omega = 1.4$. Esto evita las dificultades encontradas para el modelado de la interfase entre la tráquea y el tejido blando. Para mayor precisión se requiere tener en cuenta la reflexión de Fresnel en esta interfase geométricamente compleja. Otras simplificaciones adicionales utilizadas consistieron en no considerar los vasos sanguíneos, y en la geometría del cuello, que se asumió cuadrado.

Restringimos la presencia de las inclusiones (tumores) a regiones levemente alejadas de la superficie del cuello. Este procedimiento permite una mejor convergencia en el problema de reconstrucción, y previene la amplificación de los errores numéricos, originados por la existencia de las capa límite [57] discutidas en la Sección 2.4. En consecuencia, fijamos el valor $a(\mathbf{x}) = a^0(\mathbf{x})$ al valor del fondo en las proximidades de los bordes, para puntos a una distancia menor a 0.5 cm. El mínimo a^l para el coeficiente de absorción vendrá dado por los valores del “fondo” del tejido analizado (que se asume conocido *a priori*). El límite superior estará dado por valores típicos del coeficiente de absorción para el tejido que se está examinando, y lo fijaremos en $a^u = 1 \text{ cm}^{-1}$.

A partir de la imagen MRI se obtiene el coeficiente $a^0(\mathbf{x})$ para la iniciación de las iteraciones. En nuestro ejemplo tomamos la imagen de la Fig. 3.10, de donde se obtienen los coeficientes de absorción $a^0(\mathbf{x})$ y dispersión $b(\mathbf{x})$ que se muestran en la Fig. 3.11 a la izquierda y derecha, respectivamente.

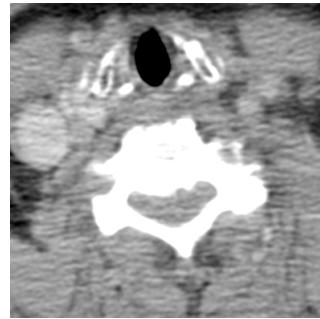


Figura 3.10: Imagen de Resonancia Magnética [84] para el modelo de cuello humano empleado.

En esta simulación, para el método FMS empleamos una única fuente generalizada, la cual contiene múltiples fuentes láser. Las diferentes fuentes láser contenidas en esta única fuente generalizada iluminan el borde del dominio $\partial\Omega$ en la dirección normal al mismo, inyectando la radiación que atraviesa el medio participante, sensándolo. Luego, la radiación es recolectada

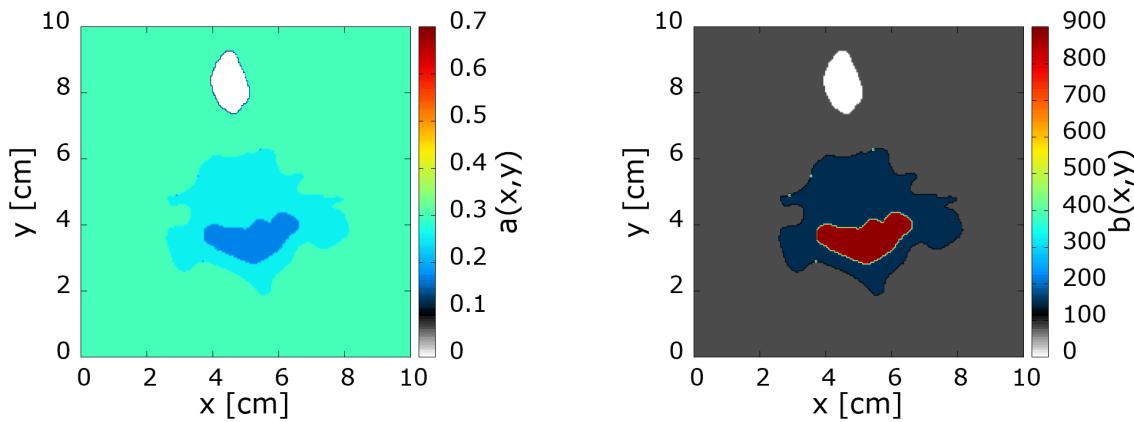


Figura 3.11: Izquierda: coeficiente de absorción generado a partir de la imagen 3.10, el cual fue utilizado como el coeficiente inicial $a^0(\mathbf{x})$ en las reconstrucciones del coeficiente de absorción para este modelo. Derecha: coeficiente de dispersión para el modelo de cuello humano. Los coeficientes de absorción y dispersión para los distintos órganos fueron tomados de las referencias [52, 82, 83].

por los detectores. La configuración que elegimos para la activación de las fuentes es tal

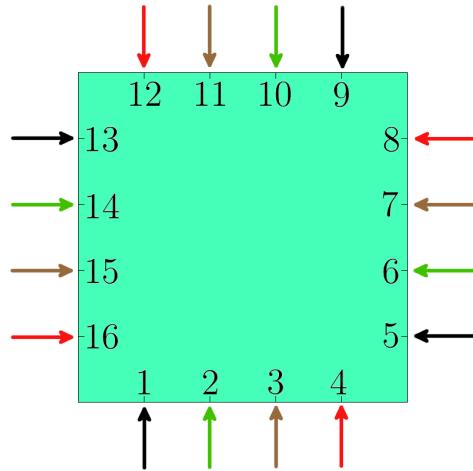


Figura 3.12: Estrategia de activación de fuentes generalizadas empleada para la reconstrucción en el modelo de cuello humano. Las flechas indican la ubicación donde los láser inyectan la radiación, y los colores indican los tiempos de activación.

que se activan de manera simultánea una fuente por cara, como se indica en la Figura 3.12. Utilizamos un retraso temporal de 300 ps para fuentes vecinas ubicadas en una misma cara. Empleamos la notación $\mathbf{x}_{k,1}$ para indicar la posición de cada fuente láser activada a tiempo

$\tau_{k,1}$ ($k = 1, \dots, 16$). En la Tabla 3.3 se muestran los tiempos de activación para cada fuente láser en el método FMS (ver Ecuaciones (3.14) a (3.17)).

Tabla 3.3: Configuración de activación FMS: modelo de cuello humano

$\tau_{k,1}$	$\mathbf{x}_{k,1}$
0 ps	1, 5, 9, 13
300 ps	2, 6, 10, 14
600 ps	3, 7, 11, 15
900 ps	4, 8, 12, 16

El diseño de esta configuración determina que se enciendan de manera simultánea aquellas fuentes que están más alejadas unas de otras. Debido al decaimiento exponencial del flujo de fotones, sólo los detectores ubicados en la cercanía de una fuente registrarán información de la misma. Es por ello que no es necesario que todas las fuentes se enciendan a tiempos diferentes, sino que es posible encender simultáneamente grupos de fuentes lo suficientemente alejadas como para no afectar la calidad de la información obtenida.

Las comparaciones de las propiedades de convergencia de los métodos MB y FMS se ilustran en la Figura 3.13. En ambos casos se utilizaron las mismas grillas numéricas y el mismo número de fuentes láser y detectores, ubicados en idénticas posiciones, realizando los cálculos con igual número de procesadores. Para las simulaciones utilizando MB, cada problema directo fue evolucionado hasta el tiempo final $t_{\max} = 600$ ps. Para dar tiempo suficiente a la relajación de las ondas de fotones producidas por las fuentes activadas de forma más tardía, cada simulación directa en el método FMS fue evolucionada hasta el tiempo final $t_{\max} = 1400$ ps. Como puede apreciarse en la Figura 3.13, ambos métodos presentan propiedades de convergencia similares para un número variable de fuentes y detectores. Sin embargo, para el caso con 16 fuentes, el método FMS requirió 1.3×10^4 segundos para llegar a las 100 iteraciones, mientras que el método MB tomó 8.8×10^4 segundos, lo que implica una aceleración en la reconstrucción por un factor cercano a siete. En la figura además se aprecia que incrementar el número de fuentes y de detectores genera una mejora considerable en la convergencia del

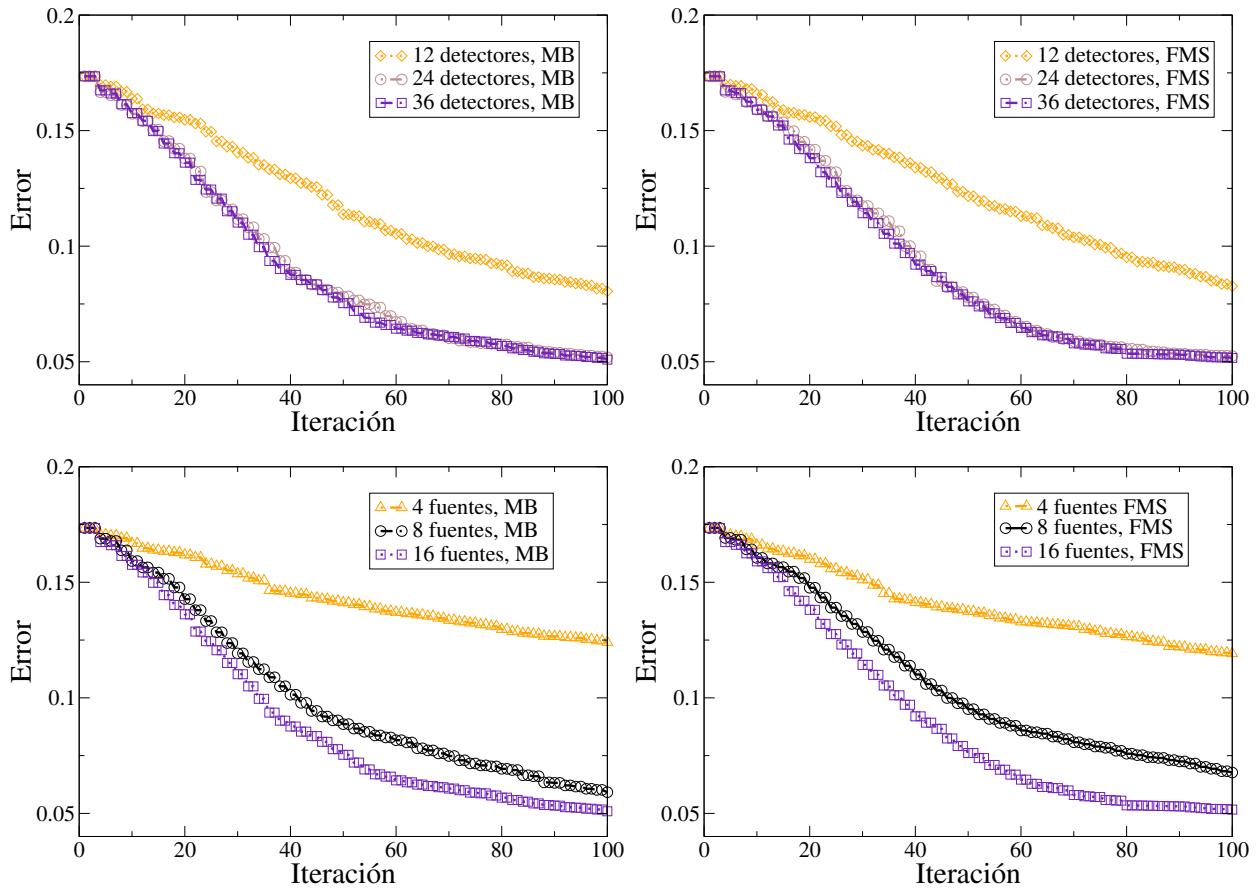


Figura 3.13: Convergencia obtenida para el error en la norma L^2 ec. (3.59) del coeficiente de absorción con respecto al número de iteraciones, para un número variable de detectores (arriba) y de fuentes láser (abajo), para los métodos MB y FMS. A la izquierda: error en la norma L^2 Ec. (3.59) para 100 iteraciones del método MB. Derecha: error en la norma L^2 Ec. (3.59) para 100 iteraciones del método FMS. Para las simulaciones en el panel superior se utilizaron 16 fuentes láser. Para las simulaciones en el panel inferior, se utilizaron 36 detectores.

problema inverso para un número fijo de iteraciones. El número de fuentes tiene un impacto mayor en las reconstrucciones que el número de detectores. Esto puede entenderse de la siguiente manera: la función de las fuentes es producir los fotones que viajan a través del medio participante para sensarlo y finalmente ser recolectados en los detectores. Matemáticamente, las diferencias entre las señales simuladas y experimentales ($G - \tilde{G}$) constituyen las “fuentes” en el problema adjunto (3.51). A su vez, la intensidad de estas fuentes virtuales

depende de la cantidad de fotones originados por las fuentes láser que inyectan la radiación.

En resumen, nuestras simulaciones demuestran la importancia de tener una cantidad de fuentes suficiente como para sensar el medio en las distintas regiones de interés. Dado que ambos métodos emplean idénticas fuentes, la cantidad total de fotones emitidos es la misma. Para una correcta resolución del problema inverso se requiere de un número suficiente de fuentes, pero no tiene relevancia si en el problema directo se asumen fuentes independientes, o la superposición de las mismas. El método MB requiere la resolución del problema directo-adjunto por cada fuente, lo que resulta sumamente costoso desde el punto de vista computacional. Por el contrario, demostramos que es posible desarrollar una estrategia de encendido de dichas fuentes, que nos permite reducir considerablemente este costo, sin perjuicio de los resultados obtenidos.

En la figura 3.14 mostramos el coeficiente de absorción verdadero, junto con los coeficientes de absorción obtenidos mediante la resolución del problema inverso empleando las estrategias MB y FMS, con 16 fuentes y 36 detectores para 100 iteraciones del algoritmo 3. Como puede observarse, las reconstrucciones obtenidas por ambos métodos son de similares

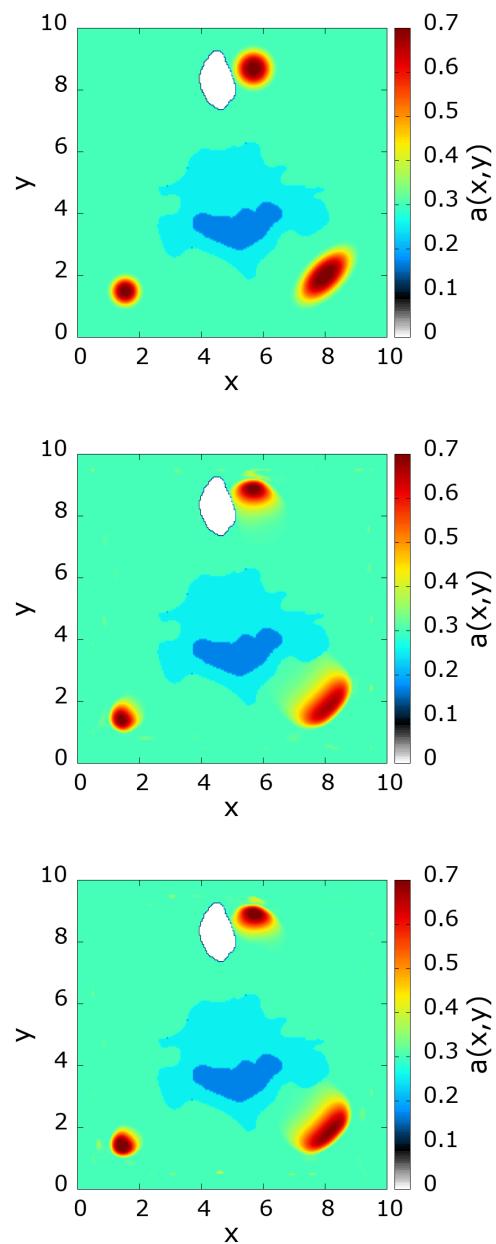


Figura 3.14: De arriba a abajo: coeficiente de absorción verdadero, y coeficientes de absorción obtenidos mediante resolución del problema inverso para 100 iteraciones de los métodos MB y FMS, respectivamente.

características.

3.8.2 Imágenes de activación hemodinámica en modelo de cabeza humana

Finalmente, presentaremos una reconstrucción simulando un modelo de “cabeza humana”. Para esta demostración, utilizaremos un modelo similar a los utilizados en las referencias [12, 28]. Este modelo de cabeza simula la situación típica donde se utiliza tomografía óptica para estudiar la actividad hemodinámica en el cerebro humano, y captura la característica distintiva: el fluido transparente que rodea el cerebro (fluido cerebroespinal). Esta región, ubicada entre el cráneo y el cerebro, cumple la función de amortiguarlo ante movimientos bruscos. Además, el fluido cerebroespinal se encarga de transportar nutrientes hacia el cerebro, y de eliminar metabolitos. Dado que el fluido cerebroespinal presenta coeficientes de absorción y de dispersión despreciables, la ecuación de difusión no es físicamente precisa para modelar el transporte de fotones en esta región, por lo cual debe emplearse la ecuación de transporte.

En la referencia [28] se utilizan 16 fuentes, 4 por cara, para un modelo similar de cabeza. En nuestros cálculos empleamos 16 fuentes y 32 detectores, con 8 detectores por cara. Reconstruimos el coeficiente de absorción utilizando el método MB con 50 iteraciones. Luego repetimos el cálculo utilizando el método FMS, con un número de iteraciones que nos permite obtener un error de convergencia similar al MB en la norma L^2 (3.59). En estas reconstrucciones, nuevamente buscamos inclusiones sobre un fondo conocido, el cual es utilizado como estimación inicial $a^0(\mathbf{x})$. La región del fluido cerebroespinal, así como la región por fuera del mismo, se asumen conocidas (dado que en estas regiones no puede ocurrir la activación cerebral). Buscamos las inclusiones en la región circular interior, donde se encuentra el cerebro.

En este caso la estrategia de activación que utilizamos antes no es la mas apropiada. Para esta simulación todas las fuentes ubicadas en una misma cara se activan de manera simultánea, como se muestra en la Figura 3.15. Nuevamente, utilizamos la notación $\mathbf{x}_{k,1}$ para indicar la posición de la fuente k -ésima activada a tiempo $\tau_{k,1}$. En la Tabla 3.4 se muestra la configuración de activación para cada conjunto de fuentes.

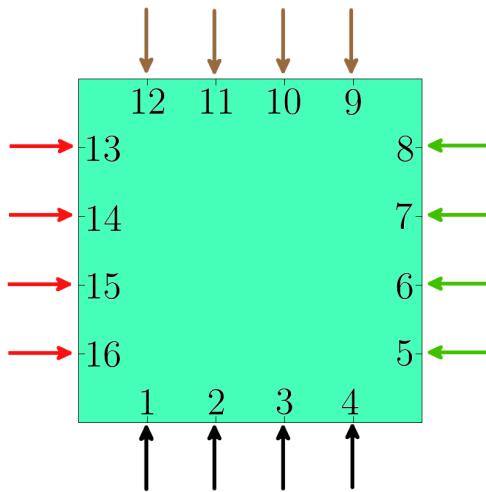


Figura 3.15: Estrategia de activación de fuentes generalizadas empleada para la reconstrucción en el modelo de cabeza humana. Las flechas indican la ubicación de las fuentes ($\mathbf{x}_{k,1}$ con $k = 1, \dots, 16$). Los colores indican los tiempos de activación.

Tabla 3.4: Configuración de activación FMS: modelo de cabeza humana

$\tau_{k,1}$	$\mathbf{x}_{k,1}$
0 ps	1, 2, 3, 4
100 ps	9, 10, 11, 12
400 ps	5, 6, 7, 8
500 ps	13, 14, 15, 16

En la figura 3.16 mostramos la evolución del error Ec. (3.59) para los métodos MB y el método FMS propuesto. En la Figura 3.17 mostramos el coeficiente de absorción verdadero, y los reconstruídos al final de la iteración para cada método. En términos de tiempo computacional, las 50 iteraciones MB tardaron mas de seis veces que las 79 iteraciones FMS. Si los dos métodos emplean el mismo número de iteraciones, FMS sería prácticamente un orden de magnitud más rápido, sin pérdidas significativas en la calidad de los resultados.

Como conclusión de nuestras simulaciones, cabe señalar que no existe una estrategia de activación óptima que se pueda aplicar universalmente. Cada caso exige un estudio preliminar, y la correcta determinación se logra en base a la experiencia. Se puede estudiar la

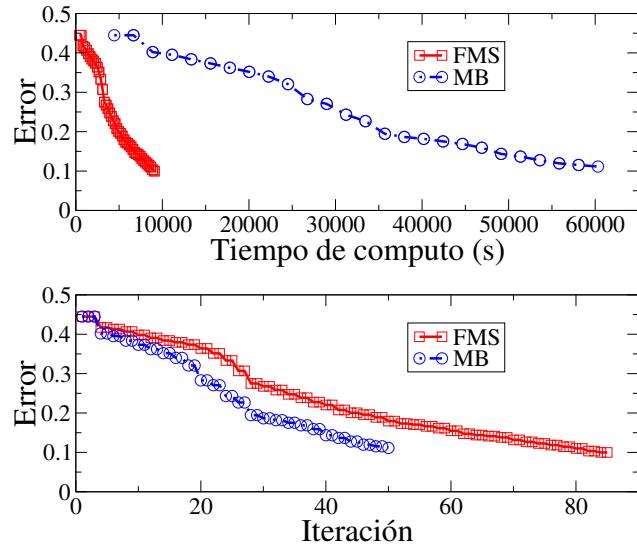


Figura 3.16: Evolución del error en la norma L^2 por iteración Ec. (3.59) para el coeficiente de absorción, obtenido para el modelo de cabeza humana con los métodos MB y FMS.

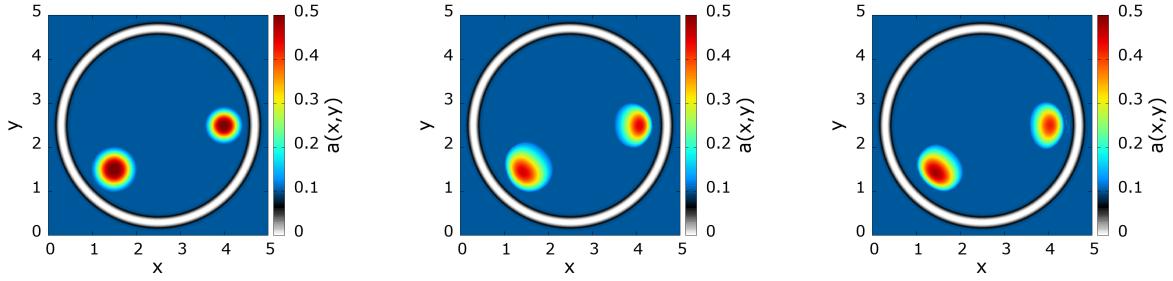


Figura 3.17: Izquierda a derecha: coeficiente de absorción verdadero y reconstruido, con 50 iteraciones MB, y 79 FMS.

posibilidad de utilizar las mismas fuentes físicas, activadas de distinta manera, considerando estos arreglos como distintas fuentes generalizadas. Podemos recomendar como estrategia universal, comenzar los cálculos utilizando FMS. Este método siempre va a producir una rápida estimación del coeficiente de absorción. Si se observa que la convergencia se ameseta, es posible utilizar la estimación dada por este método como valor de inicialización $a^0(\mathbf{x})$ y continuar la reconstrucción con el método MB.

4 | Conclusiones

En este trabajo se desarrollaron estrategias computacionales para el estudio de problemas de transporte de partículas neutras, y la caracterización de los medios que estas atraviesan. En particular, hemos estudiado radiación de fotones y flujos de neutrones.

El objetivo principal ha sido la resolución del problema inverso, que consiste en determinar las características del medio participante mediante los datos obtenidos por mediciones de radiación producida por fuentes externas. En particular, nos hemos enfocado en diversos ejemplos de reconstrucción de las características físicas de tejidos humanos, incluyendo tumores y activaciones hemodinámicas. La resolución de este tipo de problemas exige una enorme cantidad de recursos computacionales, ya que requiere la propagación temporal de la radiación en el medio durante muchas iteraciones, hasta minimizar las diferencias entre las predicciones teóricas y los valores medidos en los detectores. Esta altísima demanda de cálculos limita drásticamente la aplicación de los métodos precisos, imponiendo la necesidad de recurrir a aproximaciones que no siempre producen resultados correctos.

Hemos abordado este problema combinando tres estrategias principales, desarrolladas a lo largo de nuestro trabajo:

1. El uso de un método espectral innovador de alto orden para el tratamiento del problema directo, que permite resolver la ecuación de transporte con gran precisión y con reducido esfuerzo computacional. La novedad del método se basa en la incorporación del procedimiento de continuación de Fourier en ordenadas discretas (FC-DOM) [33]. Este método permite convertir cualquier función arbitraria en periódica, y por ende, resolver los operadores diferenciales utilizando transformadas de Fourier. Con ello se logran resultados prácticamente libres de errores de dispersión.
2. Una efectiva estrategia de descomposición del dominio espacial [79], que permite la implementación del método FC-DOM en máquinas paralelas. El algoritmo presentado en este trabajo muestra que utilizando 256 procesadores, es posible lograr una eficiencia de escala mejor a la ideal (140%). La escalabilidad lograda es mucho mayor que la de todos los resultados reportados hasta el momento, teniendo en cuenta que se aplica a problemas generales, sin restricciones a las características del medio.

3. Una configuración de fuentes múltiples superpuestas (FMS) [79], que permite resolver el problema inverso a un costo computacional independiente del número de fuentes empleados. Con esta metodología logramos acelerar significativamente la reconstrucción de los parámetros ópticos, que en nuestros ejemplos han dado un factor mayor a 6 respecto a los métodos de secuencias de fuentes únicas (MB).

A lo largo de esta Tesis, se describen diversos aspectos y resultados de nuestra investigación. Comenzamos describiendo el método FC–DOM y su implementación en la solución de la ecuación de transporte radiativo, con amplio detalle. Validamos nuestra estrategia presentando diversos ejemplos, comparando la precisión y eficiencia del mismo con otros métodos recientes propuestos en la literatura. Para ello, hemos realizado un análisis de los errores y los tiempos computacionales empleados en distintos escenarios. En primer lugar, mostramos que nuestro método presenta un cuarto orden de aproximación en la derivadas espaciales, mientras que los métodos tradicionales de diferencias finitas son de tercer orden. En segundo término, se empleó una solución manufacturada para validar nuestro método. Esto significa que se propone una función analítica que representa a la intensidad de radiación, y con ella se calcula cuál sería la “fuente manufacturada” correspondiente. Luego, se parte de esta fuente, y se resuelve la ecuación de transporte, obteniendo una intensidad lumínica que se compara con la solución manufacturada inicial. Hicimos esto simulando dos tipos de medios con propiedades ópticas similares al tejido humano. Estos medios tienen representación experimental, mediante fantomas compuestos de epoxy y tinta. En uno de estos arreglos experimentales, se trata de un cubo homogéneo, y en el otro, se introduce un anillo cilíndrico con agua en su interior. Se lograron acuerdos excelentes entre nuestras predicciones y las mediciones experimentales de los detectores. El segundo arreglo mencionado tiene una importancia fundamental, dado que al introducir una inhomogeneidad no dispersiva, se excluye la posibilidad de resolución teórica mediante el uso de la aproximación de difusión. Luego se analizó un problema analítico de referencia, que tiene la particularidad de presentar fenómeno de rayos. Este fenómeno está ligado exclusivamente a las variables angulares, por lo tanto, podemos eludirlo utilizando un grillado más fino en esta discretización. Finalmente, hemos validado el método a través de los resultados obtenidos en un problema de fuente

puntual en un medio infinito, isótropo y homogéneo, para el que se conoce solución analítica. Comparamos nuestras soluciones con las que se obtienen mediante un método de diferencias finitas de tercer orden, obteniendo errores significativamente menores.

Durante nuestra investigación nos topamos con un descubrimiento importante: la existencia de una estructura de capa límite en las soluciones a la ecuación de transporte. Esta se manifiesta en variaciones abruptas de las funciones, que aparecen en regiones espaciales muy cercanas a los bordes. Numéricamente, la existencia de esta capa límite implica una degradación considerable en el orden de convergencia, y otras dificultades como ser la aparición de oscilaciones no físicas en las soluciones. A lo largo de décadas, se han propuesto distintas interpretaciones a estos fenómenos, que han resultado erróneas. En nuestro trabajo, realizamos las simulaciones en un contexto de flujo de neutrones. No sólo describimos las condiciones que producen la aparición de este fenómeno, sino que también propusimos y describimos un método para sobreponerse a las dificultades numéricas que este produce. La metodología se basa en un cambio de variables, que produce una discretización con mucho mayor densidad de puntos en los bordes. Esta discretización, combinada con el método FC–DOM, permite obtener resultados de muy alta precisión, con un significativo ahorro de los recursos computacionales requeridos (por ejemplo, obtenemos mucho mejores resultados en una simulación FC–DOM con 400 puntos de este grillado espacial, comparados a un cálculo que emplea la diferenciación de diamante, utiliza 10000 puntos equiespaciados, y que además presenta soluciones plagadas de oscilaciones espurias).

Dedicamos una sección para explicar la estrategia de paralelización propuesta, demostrando sus ventajas. Si bien los problemas inversos se resuelven mayormente basándose en arquitecturas de GPU [35], estos métodos utilizan la aproximación de difusión, que sólo puede asumirse válida en escenarios particulares. Según la referencia [36], que hace una revisión de los principales algoritmos presentados en la literatura, todas las estrategias de paralelización resultan en una eficiencia significativamente por debajo de la ideal (al menos que se trate de situaciones muy particulares, restringidas a medios no absorbentes ni dispersantes). En los ejemplos que presentamos, obtuvimos una escalabilidad de 140% empleando 256 procesadores. Logramos resolver, por ejemplo, un problema modelo que requiere 2 días de cálculo,

en menos de 30 minutos, utilizando 64 procesadores.

Una reducción adicional significativa se obtuvo mediante el uso del método de múltiples fuentes, desarrollado en nuestra investigación. Con el mismo, podemos lograr factores de aceleración cercanos a la decena, empleando un número alto de fuentes sin necesidad de repetir la solución del problema para cada una de ellas en forma independiente (tal como lo hace el “método de barrido” que es el mayormente utilizado en tomografía óptica).

Durante nuestro trabajo hemos debido dedicar grandes esfuerzos al desarrollo matemático de varias expresiones, a estudios de convergencias, y a la elaboración de métodos que permitan eliminar ciertos términos en las ecuaciones, y facilitar los cálculos. Específicamente, desarrollamos un método adjunto para el cálculo de gradientes funcionales que incluyen condiciones de borde de Fresnel. Dado que esto merece una explicación detallada, antes de presentar los resultados finales de problemas inversos, dedicamos una sección a estos desarrollos.

Finalmente, empleamos todos los algoritmos desarrollados en esta Tesis, para resolver el problema inverso para dos casos de prueba relacionados a la tomografía óptica. En el primer ejemplo, simulamos una imagen de un tumor en un cuello humano. Tomamos una imagen de resonancia magnética de un cuello humano, y la reconstruimos fijando ciertos coeficientes de absorción y dispersión similares a los que se encuentran en los trabajos de referencia. A esa configuración le agregamos una inclusión (tumor) en una región del tejido blando. Asumimos un número determinado de láseres, que iluminan la región en distintos tiempos, y sabiendo las propiedades del medio, resolvimos el problema directo, adquiriendo la información medida por una serie de detectores colocados alrededor del medio en cuestión. Esta información es utilizada entonces para el problema inverso, cuya misión es reconstruir las propiedades del medio, y por supuesto, determinar las dimensiones y posición de la inclusión. Los resultados obtenidos son excelentes. Logramos reconstruir con sumo detalle las imágenes del medio. Logramos también realizar estos cálculos en forma eficiente, diseñando una estrategia de colocación y encendido de las fuentes, que permite superar ampliamente al método de barrido. El segundo caso consiste en la simulación de una cabeza humana, específicamente, de la región ubicada entre el cráneo y el cerebro, en la que se encuentra el fluido cerebroespinal. Dadas las características de los coeficientes de absorción y dispersión, la aproximación difusiva no

es válida en esta región. Aquí también introducimos ciertas inclusiones, que pueden corresponder a regiones en las cuales se produce la activación hemodinámica. Hemos encontrado que dada la geometría del sistema, y probablemente a la configuración de las inclusiones, es preferible alterar el orden de encendido de las fuentes, por lo que concluimos que la ubicación y temporalidad de las mismas merece un estudio específico. De todos modos, con el orden encontrado, logramos reproducir el medio con amplio detalle y precisión, en un tiempo 6 veces menor al empleado con el método de barrido.

Si bien en esta Tesis el desarrollo de algoritmos para la resolución de la ecuación de transporte en forma eficiente ha tenido un enfoque principal en el campo de tomografía óptica, nuestros algoritmos pueden ser aplicados, con alto impacto, en otras áreas de la ciencia y la tecnología de gran interés [1–8, 10, 11, 14–18]

Apéndice

A | La aproximación de difusión

El transporte de fotones en el tejido biológico se resuelve comunmente utilizando la aproximación de difusión. Este modelo es matemáticamente mas simple y resulta en un costo computacional considerablemente menor que el que exige la resolución completa de la ecuación de transporte radiativo. El tejido biológico es un medio altamente dispersivo, para el cual la aproximación de difusión suele considerarse válida.

Para el problema ETR dependiente del tiempo en tres dimensiones espaciales (3D), la solución $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = u(x, y, z, \tilde{\theta}, \varphi, t)$ posee 6 variables independientes. A las tres variables espaciales $\mathbf{x} = (x, y, z)$, deben agregarse dos direcciones de propagación definidas en la esfera unitaria S^2 . Utilizamos $\hat{\theta} = \hat{\theta}(\tilde{\theta}, \varphi) = \cos(\varphi) \sin(\tilde{\theta})\hat{x} + \sin(\varphi) \sin(\tilde{\theta})\hat{y} + \cos(\tilde{\theta})\hat{z}$. Finalmente, debemos incluir la variable temporal t . Para la integral colisional definimos el elemento diferencial de ángulo sólido $d\theta = d\varphi \sin(\tilde{\theta})d\tilde{\theta}$.

La aproximación de difusión reduce la dimensionalidad del problema, que pasa a depender de sólo 4 variables (\mathbf{x}, t) . En los medios donde domina la dispersión, la intensidad específica $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ es aproximadamente isótropa (varía suavemente en la variable $\hat{\theta}$), lo que permite eliminar la dependencia direccional. Físicamente, esto significa que las partículas realizan un número muy grande de colisiones perdiendo la dependencia direccional.

Existen diferentes formas de llegar a esta aproximación. Una de ellas se basa en una expansión perturbativa [32, 70, 85]. El camino libre medio de dispersión, definido como $\ell_b(\mathbf{x}) = \frac{1}{b(\mathbf{x})}$, debe ser mucho mas pequeño que la distancia característica del medio ($\ell_b \ll \mathcal{L}$). Este último requerimiento, físicamente implica que para las distancias del problema (donde \mathcal{L} podría ser por ejemplo, la dimensión de los lados de los dominios Ω considerados anteriormente) las partículas realizarán un número muy grande de colisiones, entrando, por lo tanto, en el régimen difusivo. Además, debe cumplirse que $b(\mathbf{x}) \gg a(\mathbf{x})$. Bajo estas consideraciones, la expansión

perturbativa se realiza utilizando las variables reescaladas

$$\begin{aligned} a(\mathbf{x}) &\rightarrow \varepsilon a(\mathbf{x}) \\ b(\mathbf{x}) &\rightarrow \frac{b(\mathbf{x})}{\varepsilon} \\ s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &\rightarrow \varepsilon s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \\ t &\rightarrow \frac{t}{\varepsilon} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

con $\varepsilon \ll 1$. Estas variables expresan físicamente que la dispersión es el fenómeno dominante tanto para las escalas espaciales como para las temporales. Reemplazando estas variables en la Ec. (2.1), junto con la expansión perturbativa

$$u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = u_0(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + \varepsilon u_1(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + \varepsilon^2 u_2(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + \dots \quad (\text{A.2})$$

e igualando los términos del mismo orden en ε hasta el orden cuadrático, se obtiene la ecuación de difusión.

Las condiciones consideradas son válidas para el interior del dominio espacial Ω . En la proximidad de los bordes, las partículas pueden no haber realizado suficientes colisiones como para entrar en el régimen difusivo. Como vimos en la Sección 2.4 en esta región existen capas límite exponenciales. La intensidad específica de radiación saliente difiere de la entrante, ya que en esta última se imponen las condiciones de contorno. Debido a estas rápidas variaciones en la variable direccional, la radiación no será isótropa, aún cuando las condiciones de borde y las fuentes consideradas lo sean (ver fig. 2.15). Tampoco será válida esta aproximación en la cercanía de fuentes colimadas, con grandes variaciones en la variable direccional $\hat{\theta}$.

Existen otras formas de derivar la ecuación de difusión para los fotones. Si se multiplica la ETR (2.1) por la variable angular $\hat{\theta}$, y se integra sobre esa misma variable, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) + \int_{S^2} d\theta \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \cdot \hat{\theta} \hat{\theta} + [a(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x})] \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) = \\ b(\mathbf{x}) \int_{S^2} \hat{\theta} d\theta \int_{S^2} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' + s_1(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\begin{aligned} s_1(\mathbf{x}, t) &= \int_{S^2} s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \hat{\theta} d\theta, \\ \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) &= \int_{S^2} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \hat{\theta} d\theta, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

De la fórmula de Lagrange para el producto de tres vectores $\vec{v}_1 \times \vec{v}_2 \times \vec{v}_3 = (\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_3)\vec{v}_2 - (\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2)\vec{v}_3$ se obtiene $\hat{\theta} = \hat{\theta}'(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') + \hat{\theta}' \times \hat{\theta} \times \hat{\theta}'$. Utilizando la última identidad reescribimos la integral en el lado derecho de la ecuación (A.3) como

$$\begin{aligned} \int_{S^2} \hat{\theta} d\theta \int_{S^2} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' &= \int_{S^2} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' \int_{S^2} \hat{\theta} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta \\ &= \int_{S^2} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' \int_{S^2} \hat{\theta}'(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta \\ &\quad + \int_{S^2} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' \int_{S^2} \hat{\theta}' \times (\hat{\theta} \times \hat{\theta}') \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Debido a que la función de fase sólo depende del ángulo entre la dirección incidente y la dirección en la que el fotón es dispersado ($\cos(\alpha) = \hat{\theta} \cdot \hat{\theta}'$), la última integral en (A.5) se anula

$$\int_{S^2} \hat{\theta}' \times (\hat{\theta} \times \hat{\theta}') \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta = 0. \quad (\text{A.6})$$

Reordenando los términos, y usando que el factor de anisotropía se define según

$$g = \int_{S^2} \hat{\theta} \cdot \hat{\theta}' \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') d\theta, \quad (\text{A.7})$$

se tiene

$$\int_{S^2} \hat{\theta} d\theta \int_{S^2} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' = g \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) \quad (\text{A.8})$$

Llamando al segundo momento de $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$

$$\bar{\mathcal{J}}_2(\mathbf{x}, t) = \int_{S^2} \hat{\theta} \hat{\theta}' u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta, \quad (\text{A.9})$$

la Ecuación (A.3) puede reescribirse como

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \bar{\mathcal{J}}_2(\mathbf{x}, t) + [a(\mathbf{x}) + b'(\mathbf{x})] \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) = s_1(\mathbf{x}, t), \quad (\text{A.10})$$

donde el coeficiente de dispersión reducido viene dado por $b'(\mathbf{x}) = (1 - g)b(\mathbf{x})$.

Por otra parte, de la Ec. (2.8) para el flujo escalar, tenemos

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) + a(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}, t) = s_0(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.11})$$

Como se mencionó anteriormente, esta ecuación representa la conservación de los fotones para cada punto espacial $\mathbf{x} \in \Omega$, independientemente de la dirección. Hasta este punto no hemos

realizado ninguna aproximación. Si en la ec. (A.11) logramos eliminar $\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t)$, tendremos una ecuación diferencial para el flujo escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$. Buscaremos eliminar $\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t)$ aplicando algunas aproximaciones en la Ec. (A.10) que nos permitan obtener una relación entre $\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t)$ y $\phi(\mathbf{x}, t)$.

A.0.1 La aproximación P_1

La ecuación de transporte puede resolverse expandiendo la parte angular en armónicos esféricos, lo que da lugar a la aproximación P_N . Lejos de los bordes la intensidad de radiación puede expandirse como

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &\sim \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l u_{l,m}(\mathbf{x}, t) Y_{l,m}(\tilde{\theta}, \varphi), \\ u_{l,m}(\mathbf{x}, t) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\tilde{\theta} \sin(\tilde{\theta}) u(\mathbf{x}, \tilde{\theta}, \varphi, t) Y_{l,m}(\tilde{\theta}, \varphi), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

donde $Y_{l,m}(\tilde{\theta}, \varphi)$ representa al armónico esférico de grado l y orden m [87].

Dado que la dispersión tiende a promediar a la función de distribución $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ con respecto a la variable $\hat{\theta}$, volviéndola isótropa, es esperable que en el régimen difusivo la función $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ varíe suavemente. En ese caso, se puede truncar la expansión (A.12). El enfoque utilizado con mayor frecuencia en la literatura para la derivación de la aproximación de difusión consiste en tomar el primer orden P_1 de esta sumatoria [32, 86].

Si bien se espera que, debido a la dispersión, la intensidad específica sea una función isótropa, la dependencia angular no puede ser constante (P_0), ya que en tal caso no podría haber flujo neto de radiación [88, cap. 9, p. 176]. Por esta razón el mínimo orden de la expansión (A.12) debe ser $N = 1$. Es fácil mostrar que

$$\begin{aligned} u_{0,0}(\mathbf{x}, t) Y_{0,0}(\tilde{\theta}, \varphi) &= \frac{\phi(\mathbf{x}, t)}{4\pi}, \\ \frac{4\pi}{3} \sum_{m=-1}^1 u_{1,m}(\mathbf{x}, t) Y_{1,m}(\tilde{\theta}, \varphi) &= \frac{3}{4\pi} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\theta}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

de donde se tiene de (A.12) a primer orden

$$u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \sim \frac{\phi(\mathbf{x}, t)}{4\pi} + \frac{3}{4\pi} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\theta}. \quad (\text{A.14})$$

Reemplazando (A.14) en (A.9) tenemos

$$\bar{\mathcal{J}}_2(\mathbf{x}, t) = \int_{S^2} \hat{\theta} \hat{\theta} \left(\frac{\phi(\mathbf{x}, t)}{4\pi} + \frac{3}{4\pi} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\theta} \right) d\theta. \quad (\text{A.15})$$

Dado que el flujo escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$ y la corriente $\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t)$ no dependen de la variable $\hat{\theta}$, las integrales que constituyen los elementos del tensor de segundo orden $\bar{\mathcal{J}}_2(\mathbf{x}, t)$ están formadas por productos de potencias de funciones trigonométricas que pueden ser evaluadas fácilmente. Se puede verificar que la integral en el segundo término del lado derecho de la ecuación (A.15) se anula, y que [89, cap. 17, p. 544]

$$\int_{S^2} \hat{\theta} \hat{\theta} d\theta = \frac{4\pi}{3} \mathbf{1}, \quad (\text{A.16})$$

de donde se obtiene

$$\nabla \cdot \bar{\mathcal{J}}_2(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3} \nabla \phi(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.17})$$

Asumiendo que la fuente $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ es isótropa, se tendrá $s_1(\mathbf{x}, t) = 0$. Reemplazando estos resultados en la Ecuación (A.10)

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{3} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) + [a(\mathbf{x}) + b'(\mathbf{x})] \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (\text{A.18})$$

Además, considerando que los fotones recorren el camino libre medio en tiempos mucho más pequeños que los considerados para las variaciones temporales de $\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t)$, se puede asumir que $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) \simeq 0$, y utilizando la Ec. (A.18) se llega a la Ley de Fick

$$\vec{\mathcal{J}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{3[a(\mathbf{x}) + b'(\mathbf{x})]} \nabla \phi(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.19})$$

El signo negativo expresa que el flujo de fotones se dirige desde regiones de mayor densidad (o “concentración”) hacia regiones de menor densidad. Definiendo el coeficiente de difusión

$$D(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{3[a(\mathbf{x}) + b'(\mathbf{x})]}, \quad (\text{A.20})$$

y reemplazando en la Ecuación (A.11), se llega finalmente a la ecuación de difusión para la densidad de fotones

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot (D(\mathbf{x}) \nabla \phi(\mathbf{x}, t)) + a(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}, t) = s_0(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.21})$$

Se han reportado diferencias significativas entre los resultados obtenidos para el flujo de fotones resultante de la ecuación (A.21) y el obtenido mediante uso de la ecuación (2.1) aún en el régimen difusivo, y lejos de las fuentes [90]. El problema radica en las condiciones de contorno. Se han desarrollado diferentes teorías para el tratamiento de las mismas. Estas incluyen la utilización de bordes extrapolados como así también flujos que se obtienen integrando la intensidad específica en los bordes. De aquí surgen las condiciones de borde de Robin [23, 32, 88, 91, 92]. En ninguna de estas referencias se discute en forma apropiada las capas límite. Dado que en tomografía óptica las fuentes y los detectores se ubican en el contorno del dominio a analizar, es fundamental obtener una buena representación de estas regiones. Si bien la aproximación de difusión resulta muy conveniente desde el punto de vista computacional, claramente no es capaz de brindar soluciones adecuadas para estos problemas.

B | El algoritmo FC(Gram)

En la Sección 2.2.3 discutimos los métodos utilizados para el tratamiento numérico de las derivadas espaciales en la ETR (2.1). El algoritmo se basa en una estrategia original (desarrollada por O. Bruno) que consiste en convertir cualquier función arbitraria en periódica. Para ello, se utilizan proyecciones en una base de polinomios Gram con continuaciones a cero [47]. En este Apéndice describiremos esta técnica en detalle.

Dada una función $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ definida en una grilla discreta, con $f_j = f(x_j)$, $x_j = (j - 1)h$, $h = 1/N$, $j = 1, 2, \dots, N + 1$, el método de continuación de Fourier genera una función continuada $f_c(x)$ definida en un dominio extendido con C puntos, de modo tal que $f_c : [0, b] \rightarrow \mathbb{R}$, donde $b = (N_p - 1)/N$ y $N_p = N + C + 1$ [46, 47]. La función continuada cumple con ciertas condiciones. En primer lugar, es igual a la función original en el intervalo $x \in [0, 1]$, con $f_c(x_j) = f(x_j)$, $j = 1, \dots, N + 1$. En segundo lugar, es una función periódica, con derivadas suaves en el intervalo extendido. Esto permite que se pueda representar con una serie de Fourier

$$f_c(x) = \sum_{k=-N_p/2}^{N_p/2} a_k \exp\left(i \frac{2\pi k x}{b}\right), \quad (\text{B.1})$$

donde i es la unidad imaginaria, y a_k son los coeficientes de la expansión. Las continuaciones que genera este método son lo suficientemente suaves como para evitar que se presente el fenómeno de Gibbs. Con estas condiciones, las derivadas espaciales de $f(x)$ pueden calcularse en forma eficiente y con alta precisión a partir de la representación (B.1) mediante el uso de la transformada rápida de Fourier

$$\frac{df}{dx}(x) \simeq \frac{df_c}{dx}(x) = \sum_{k=-N_p/2}^{N_p/2} i \frac{2\pi k}{b} a_k \exp\left(i \frac{2\pi k x}{b}\right), \quad (\text{B.2})$$

Para obtener la continuación de Fourier f_c en forma eficiente, el método FC(Gram) utiliza información obtenida evaluando la función f únicamente en unos pocos puntos en los bordes

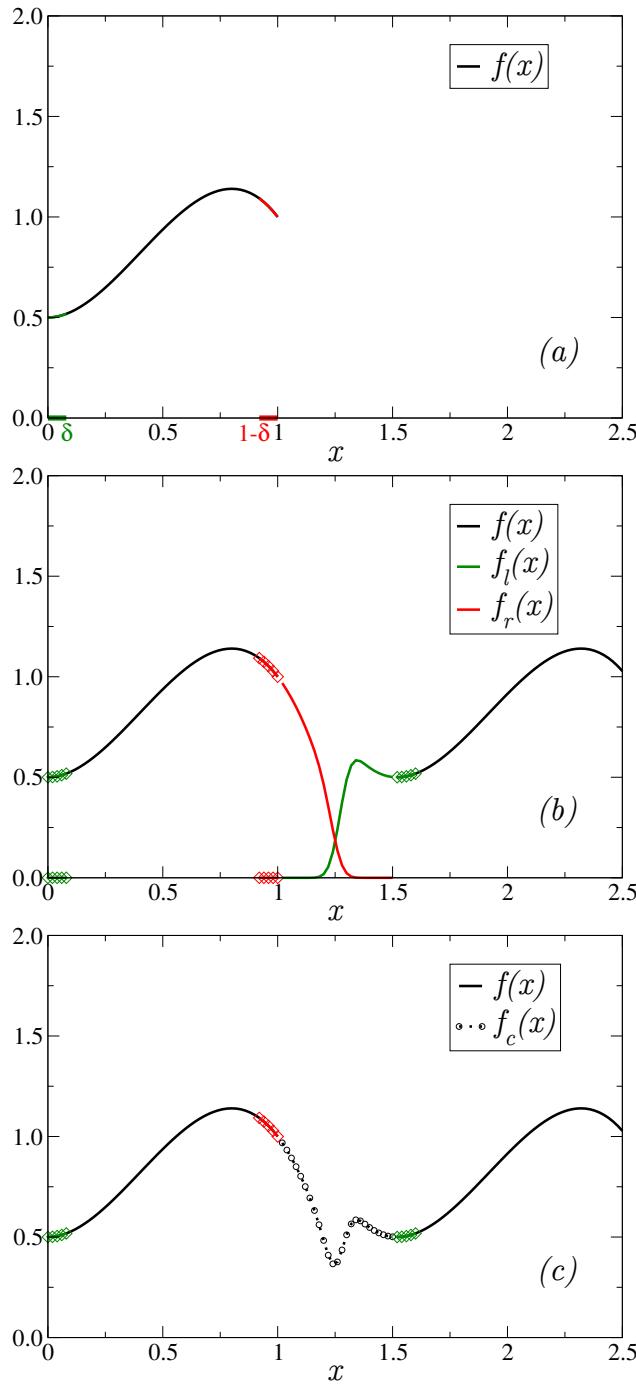


Figura B.1: (a) Función $f(x) = 3x^2 - 2.5x^3 + 0.5$ definida en el dominio $[0, 1]$, con los intervalos $[0, \delta_\ell]$ (verde) $[1 - \delta_r, 1]$ (rojo) considerados para realizar las continuaciones. (b) Continuaciones a cero a izquierda $f_l(x)$ y a derecha $f_r(x)$ obtenidas a partir de la proyección de los $d_\ell = d_r = 5$ puntos (en diamantes). (c) Función continuada resultante, $f_c(x)$, de período $b = 1.52$.

del dominio discretizado. El algoritmo procede mediante la proyección de f en una base de polinomios Gram \mathcal{B}_r (que definiremos más adelante) en los puntos del extremo derecho $\{x_{N+1-d_r}, x_{N+2-d_r}, \dots, x_{N+1}\}$, y polinomios \mathcal{B}_ℓ en los puntos de la izquierda $\{x_1, x_2, \dots, x_{d_\ell}\}$. La proyección en los polinomios $p_r \in \mathcal{B}_r$ genera una continuación que aproxima a la función f en el intervalo $[1-\delta_r, 1]$ y que se vuelve cero de forma suave en $x \geq b$, con $\delta_r = (d_r - 1)h$. Para la continuación a izquierda, se considera la extensión periódica de f , con $f(x_j + b) = f(x_j)$, y similarmente, la proyección en dichos polinomios genera una aproximación a la función original en el intervalo $[b, b + \delta_\ell]$ ($\delta_\ell = (d_\ell - 1)h$) la cual se anula suavemente en $x \leq 1$ (donde el intervalo $[b, b + \delta_\ell]$ corresponde a la continuación periódica de la función original f , con $f(x_1) = f(x_1 + b), f(x_2) = f(x_2 + b), \dots, f(x_{d_\ell}) = f(x_{d_\ell} + b)$ Fig. B.1). En esta Tesis utilizamos $d_\ell = d_r = d = 5$, por lo tanto $\delta_r = \delta_\ell$.

Como ejemplo mostraremos la construcción de la base de polinomios utilizada para la proyección y continuación a cero a la izquierda de la función f . El tratamiento para las continuaciones a derecha es análogo. Consideramos el espacio de polinomios \mathcal{B}_ℓ de grado $< d$ definidos en el intervalo $[0, \delta]$, con $\delta > 0$ un número pequeño.

Para $g, v \in \mathcal{B}_\ell$, $\mathcal{B}_\ell = \{p_1, p_2, \dots, p_{d-1}\}$

$$\langle g, v \rangle = \sum_{j=1}^d g(x_j)v(x_j), \quad (\text{B.3})$$

define un producto escalar en la grilla discreta x_1, x_2, \dots, x_d .

Definimos la matriz de Vandermonde $\bar{P} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ como

$$\bar{P} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{d-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{d-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 1 & x_d & x_d^2 & \dots & x_d^{d-1} \end{bmatrix} = [\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_d], \quad (\text{B.4})$$

con $p_i(x_j) \equiv x_j^i$ y $\vec{p}_i = [p_i(x_1), p_i(x_2), \dots, p_i(x_d)]^T$. Dada la descomposición $\bar{P} = \bar{Q}\bar{R}$, con $\bar{Q}^T\bar{Q} = \bar{\mathbf{I}}$ y \bar{R} una matriz triangular superior, los vectores columna de la matriz \bar{Q} satisfacen la relación de ortogonalidad con respecto al producto escalar (B.3)

$$\langle q_i, q_k \rangle = \sum_{j=1}^d q_{i,j} q_{k,j} = \sum_{j=1}^d q_i(x_j) q_k(x_j) = \vec{q}_i^T \vec{q}_k = \delta_{i,k},$$

con $\delta_{i,k}$ la delta de Kronecker. La matriz \bar{Q} contiene los polinomios Gram en sus columnas

$$\bar{Q} = \begin{bmatrix} q_1(x_1) & q_2(x_1) & \dots & q_d(x_1) \\ q_1(x_2) & q_2(x_2) & \dots & q_d(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_1(x_d) & q_2(x_d) & \dots & q_d(x_d) \end{bmatrix} = [\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_d]. \quad (\text{B.5})$$

Cada elemento de la base de polinomios \mathcal{B}_ℓ podrá expresarse en la base de los polinomios ortogonales \vec{q}_i como $\vec{p}_i = \sum_{j=1}^i r_{j,i} \vec{q}_j$. La matriz \bar{R} contiene los coeficientes de esta expansión.

Las columnas de la matriz \bar{Q} son los valores de los polinomios Gram ortogonales con respecto al producto escalar discreto (B.3). Adicionalmente, se sobremuestrea la matriz \bar{P} , de forma que $\bar{P}^s \in \mathbb{R}^{(N_s(d-1)+1) \times d}$, con la matriz de Vandermonde evaluada en la grilla numérica refinada $h' = h/N_s$. Los polinomios ortonormales sobremuestreados se obtienen de las columnas de \bar{Q}^s , con

$$\bar{Q}^s = \bar{P}^s \bar{R}^{-1} \quad (\text{B.6})$$

donde \bar{R} se la matriz triangular superior que se obtiene mediante ortogonalización de la matriz \bar{P} sin sobremuestreo. Dado que el problema de ortogonalización de la matriz de Vandermonde (B.4) esta mal condicionado, la descomposición QR se realiza con alta precisión numérica (256 dígitos) mediante el método de ortogonalización de Gram-Schmidt.

El proceso de continuación puede expresarse mediante el operador de continuación \bar{A}

$$\vec{f}_c = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{1}} \\ \bar{A} \end{bmatrix} \vec{f} = \begin{bmatrix} \vec{f} \\ \bar{A} \vec{f} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

donde la matriz \bar{A} es el operador que al aplicarse sobre el vector \vec{f} de valores discretos de la función f genera las continuaciones a cero a derecha y a izquierda, cuya suma da la extensión periódica de la función continuada

$$\bar{A} \vec{f} = \bar{A}_\ell \bar{Q}_\ell \vec{f}_\ell + \bar{A}_r \bar{Q}_r \vec{f}_r. \quad (\text{B.8})$$

donde $\vec{f}_\ell = (f_1, f_2, \dots, f_d)$, $\vec{f}_r = (f_{N+1-d}, f_{N+2-d}, \dots, f_{N+1})$ son los valores de la función discreta utilizados para producir las continuaciones, \bar{Q}_ℓ y \bar{Q}_r son las matrices obtenidas por factorización QR de los polinomios de Vandermonde correspondientes, y donde las matrices

\bar{A}_ℓ y \bar{A}_r generan las transiciones a cero a izquierda y derecha respectivamente, en el intervalo de continuación. Estas se obtienen de resolver un problema de minimización para el polinomio trigonométrico interpolante en la grilla numérica sobresampleada que coincide con los polinomios Gram en los d puntos de la grilla discreta, y que se anula en la región de continuación

$$f^{q_j}(x) = \sum_{k=-M}^M a_k e^{\frac{2\pi i k x}{(d+C+Z+E-1)h}}, \quad (\text{B.9})$$

donde d , C , Z y E representan los d puntos de ajuste (para las continuaciones a izquierda, los puntos $\{x_1, x_2, \dots, x_{d_\ell}\}$) de la función original, los C puntos de continuación, Z puntos donde se exige que la función se anule, E puntos extra que permiten realizar continuaciones de longitud prescripta y $M = (d + C + Z + E)/2$ (para mas detalles, ver [45, 47]).

La Ecuación (B.9) puede escribirse

$$f^{q_j}(x) = \bar{B}^s \vec{a} = \begin{bmatrix} e^{\frac{-i\pi M x_1}{(d+C+Z+E-1)h}} & e^{\frac{-(M+2)i\pi x_1}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{2i\pi k x_1}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{M i\pi x_1}{(d+C+Z+E-1)h}} \\ e^{\frac{-i\pi M x_2}{(d+C+Z+E-1)h}} & e^{\frac{-(M+2)i\pi x_2}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{2i\pi k x_2}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{M i\pi x_2}{(d+C+Z+E-1)h}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ e^{\frac{-i\pi M x_j}{(d+C+Z+E-1)h}} & e^{\frac{-(M+2)i\pi x_j}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{2i\pi k x_j}{(d+C+Z+E-1)h}} & \dots & e^{\frac{M i\pi x_j}{(d+C+Z+E-1)h}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{-M/2} \\ \vdots \\ a_k \\ \vdots \\ a_{M/2} \end{bmatrix},$$

con $\vec{a} = (a_{-M/2}, \dots, a_{M/2})^T$. Luego, buscamos los coeficientes \vec{a} que son solución de

$$\operatorname{argmin}_{\vec{a}=(a_{-M}, \dots, a_M)} \left\| \bar{B}^s \vec{a} - \begin{bmatrix} \vec{q}_j^s(x) \\ \vec{0} \end{bmatrix} \right\|_2, \quad (\text{B.10})$$

la matriz \bar{B}^s se obtiene de evaluar la función (B.9) en los d puntos de ajuste, y en los Z puntos donde se fuerzan los polinomios a anularse, $\vec{q}_j^s(x)$ son las columnas de la matriz \bar{Q}^s en la Ecuación (B.6) y $\vec{0}$ es el vector nulo de dimensión $(Z - 1) \times N_s + 1$. Los coeficientes de Fourier que minimizan la relación (B.10) se encuentran mediante descomposición en valores singulares (SVD). Las matrices \bar{A}_ℓ y \bar{A}_r se obtienen, finalmente, de evaluar la relación (B.9) con los coeficientes que resuelven (B.10) para todo el intervalo $[0, (d + C + Z + E - 1)h]$.

Cabe destacar que este procedimiento solo se usa para obtener un pequeño archivo con parámetros (el cual contiene los elementos de las matrices \bar{A}_ℓ , \bar{Q}_ℓ , \bar{A}_r y \bar{Q}_r), que se incorpora como parte integrante de la subrutina FC, y subsiguientemente se utiliza para la aplicación de la rutina en la expansión de cualquier función discreta $f(x)$ —de acuerdo a la ec. (B.7).

C | Resolución de capa límite

Como se vió en la Sección 2.4, las soluciones de la ETR presentan estructuras de capa límite tanto en las variables espaciales como en la variable angular, ξ . La introducción de un cambio de variable logarítmico (otros cambios de variable también son posibles) genera una densidad de puntos espaciales en la cercanía del borde de modo tal que permita resolver apropiadamente a la capa límite en la variable espacial. Para que la integral colisional sea correctamente resuelta en las proximidades del borde, se propuso el cambio de variable $\xi = r^n$. Esta sección provee una demostración matemática de que la combinación del cambio de variable espacial, en conjunto con el cambio de variable $\xi = r^n$ utilizado en la Sección 2.4 regulariza las derivadas del integrando en $\int_0^1 u_0(x, \xi) d\xi = n \int_0^1 u_0(x, r^n) r^{n-1} dr$ (la demostración para la integral complementaria $\int_{-1}^0 u_0(x, \xi) d\xi$ es análoga).

Partimos de la solución asintótica para la capa límite (2.23)

$$u_0(x, \xi) = \frac{e^{-\mu_t(0)x/\xi}}{\xi} \left(\xi u_0(0, \xi) + \int_0^x e^{\mu_t(0)\frac{y}{\xi}} \left[\frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' + q(0, \xi) \right] dy \right) \quad (\text{C.1})$$

y reescribimos

$$u_0(x, r^n) = \frac{e^{-\mu_t(0)x/r^n}}{r^n} \left(r^n u_0(0, r^n) + \int_0^x e^{\mu_t(0)\frac{y}{r^n}} \left[\frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' + q(0, r^n) \right] dy \right). \quad (\text{C.2})$$

Usamos

$$\int_0^x e^{\mu_t(0)\frac{y}{r^n}} q(0, \xi) dy = r^n \frac{q(0, \xi)}{\mu_t(0)} (e^{\mu_t(0)x/r^n} - 1).$$

Y reescribimos

$$u_0(x, r^n) = \frac{e^{-\mu_t(0)x/r^n}}{r^n} \left(r^n u_0(0, r^n) + r^n \frac{q(0, \xi)}{\mu_t(0)} (e^{\mu_t(0)x/r^n} - 1) + \int_0^x e^{\mu_t(0)\frac{y}{r^n}} \left[\frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' \right] dy \right). \quad (\text{C.3})$$

Considerando el integrando del término colisional con el cambio de variable $\xi = r^n$, necesitamos mostrar que las derivadas de dicho integrando estarán acotadas bajo el cambio de variable, para lo cual debemos calcular

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) &= \frac{d}{dr} \left\{ u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} r^{n-1} + \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) r^{n-1} \right. \\ &\quad \left. + r^{-1} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \int_0^x e^{\mu_t(0)\frac{y}{r^n}} \left[\frac{\mu_s(0)}{2} \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi' \right] dy \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Llamamos $\phi(y) = \int_{-1}^1 u_0(y, \xi') d\xi'$ al término colisional

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) &= \frac{d}{dr} \left\{ u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} r^{n-1} + \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) r^{n-1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mu_s(0)}{2} \int_0^x \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \phi(y) dy \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Por otra parte, tenemos las derivadas:

$$\begin{aligned} \xi(r) &= r^n, \\ \frac{d}{dr} \xi'(r) &= n r^{n-1}, \\ \frac{d}{dr} r^{n-1} &= (n-1) r^{n-2}, \\ \frac{d}{dr} e^{-\mu_t(0)x/r^n} &= \frac{\mu_t(0)nx}{r^{n+1}} e^{-\mu_t(0)x/r^n}, \\ \frac{d}{dr} u_0(0, r^n) &= \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} n r^{n-1}, \\ \frac{d}{dr} \left[\frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right] &= \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} n r^{n-1} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) - q(0, r^n) \frac{nx}{r^{n+1}} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \\ \frac{d}{dr} \left(\int_0^x \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \phi(y) dy \right) &= \int_0^x \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \right) \phi(y) dy \\ &= \int_0^x \frac{1}{r^2} \left(-n(y-x) \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r^n} - e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} \right) \phi(y) dy \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

De las derivadas en (C.6) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [u_0(0, r^n) r^{n-1} e^{-\mu_t(0)x/r^n}] &= n \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} r^{2n-2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} + (n-1) r^{n-2} u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} \\ &\quad + u_0(0, r^n) \frac{\mu_t(0)nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left[r^{n-1} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right] = & (n-1)r^{n-2} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \\ & + \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} n r^{2n-2} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \\ & - q(0, r^n) \frac{nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Introduciendo en (C.5) las relaciones auxiliares en (C.6) a (C.8) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) = & n \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} r^{2n-2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} - (n-1)r^{n-2} u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} \\ & + u_0(0, r^n) \frac{\mu_t(0)nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} + (n-1)r^{n-2} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \\ & + \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} n r^{2n-2} (1 - e^{-\mu_t(0)x/r^n}) - q(0, r^n) \frac{nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \\ & + \frac{\mu_s(0)}{2} \int_0^x \frac{1}{r^2} \left(-n(y-x) \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} - e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r^n} \right) \phi(y) dy \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Luego

$$\begin{aligned} \left| \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) \right| \leq & \left| n \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} r^{2n-2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\ & + \left| (n-1)r^{n-2} u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \left| u_0(0, r^n) \frac{\mu_t(0)nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\ & + \left| (n-1)r^{n-2} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| + \left| \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} n r^{2n-2} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| \\ & + \left| q(0, r^n) \frac{nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \left| \frac{\mu_s(0)}{2} \int_0^x \frac{1}{r^2} \left(-n(y-x) \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} - e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r^n} \right) \phi(y) dy \right| \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Para todos los problemas físicamente admisibles, la integral $\phi(y)$ estará acotada por

$$M = \max \phi(y), \quad (\text{C.11})$$

y dado que $\phi(y) \leq M$, tenemos

$$\begin{aligned}
\left| \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) \right| &\leq \left| n \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} r^{2n-2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\
&+ \left| (n-1)r^{n-2} u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \left| u_0(0, r^n) \frac{\mu_t(0)nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\
&+ \left| (n-1)r^{n-2} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| + \left| \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} nr^{2n-2} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| \\
&+ \left| q(0, r^n) \frac{nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \frac{\mu_s(0)}{2} \frac{M}{r^2} \int_0^x \left| n(y-x) \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r^n} \right| dy + \frac{\mu_s(0)}{2} \frac{M}{r^2} \int_0^x \left| e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} \right| dy
\end{aligned} \tag{C.12}$$

Usamos el cambio de variable $\mu_t(0)(y-x)/r^n = -t$, $dy = r^n dt/\mu_t(0)$ para tener

$$\begin{aligned}
\frac{M}{r^2} \int_0^x \left| n(y-x) \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r^n} \right| dy &= \frac{Mr^n}{\mu_t(0)r^2} \int_0^{\mu_t(0)x/r^n} |te^{-t}| dt \\
\frac{M}{r^2} \int_0^x \left| e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} \right| dy &= \frac{Mr^n}{\mu_t(0)r^2} \int_0^{\mu_t(0)x/r^n} |e^{-t}| dt
\end{aligned} \tag{C.13}$$

Y resulta

$$\begin{aligned}
\left| \frac{d}{dr} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) \right| &\leq \left| n \frac{\partial u_0(0, \xi(r))}{\partial \xi} r^{2n-2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \left| (n-1)r^{n-2} u_0(0, r^n) e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\
&+ \left| u_0(0, r^n) \frac{\mu_t(0)nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| \\
&+ \left| (n-1)r^{n-2} \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| + \left| \frac{1}{\mu_t(0)} \frac{\partial q(0, \xi(r))}{\partial \xi} nr^{2n-2} (1 + e^{-\mu_t(0)x/r^n}) \right| \\
&+ \left| q(0, r^n) \frac{nx}{r^2} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right| + \frac{\mu_s(0)}{2} \frac{Mr^n}{\mu_t(0)r^2} \int_0^{\mu_t(0)x/r^n} |te^{-t}| dt + \frac{\mu_s(0)}{2} \frac{Mr^n}{\mu_t(0)r^2} \int_0^{\mu_t(0)x/r^n} |e^{-t}| dt
\end{aligned} \tag{C.14}$$

Donde todos los términos están acotados para $n \geq 2$.

Vamos a probar la cota para la derivada j -esima. Se prueba por inducción.

Reescribimos (C.5) como

$$\begin{aligned}
 \frac{d^j}{dr^j} (u_0(x, r^n) r^{n-1}) &= \frac{d^j}{dr^j} \left\{ \left[u_0(0, r^n) + \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} e^{\mu_t(0)x/r^n} - \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} \right] r^{n-1} e^{-\mu_t(0)x/r^n} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\mu_s(0)}{2} \int_0^x \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \phi(y) dy \right\} \\
 &= \frac{d^j}{dr^j} \left\{ \left[u_0(0, r^n) - \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} \right] r^{n-1} e^{-\mu_t(0)x/r^n} + \frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} r^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\mu_s(0)}{2} \int_0^x \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \phi(y) dy \right\}
 \end{aligned} \tag{C.15}$$

Para el último término usamos

$$\frac{d^j}{dr^j} \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} = \frac{1}{r^{j+1}} \sum_{l=1}^j c_l \left(\mu_t(0) \frac{(y-x)}{r^n} \right)^l e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} \tag{C.16}$$

Es fácil probar que (C.16) vale para $j = 1$, luego vemos que vale para j , y finalmente derivando para j vemos que entonces se cumple para $j + 1$. Tenemos

$$\begin{aligned}
 \frac{d^j}{dr^j} \left(\int_0^x \frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \phi(y) dy \right) &= \int_0^x \frac{d^j}{dr^j} \left(\frac{e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}}}{r} \right) \phi(y) dy \\
 &= \int_0^x \phi(y) \frac{1}{r^{j+1}} \sum_{l=1}^j c_l \left(\mu_t(0) \frac{(y-x)}{r^n} \right)^l e^{\mu_t(0)\frac{(y-x)}{r^n}} dy \\
 &= \int_0^{\mu_t(0)x/r^n} \phi \left(x - \frac{r^n}{\mu_t(0)} t \right) \frac{\mu_t(0)r^n}{r^{j+1}} \sum_{l=1}^j c_l (-t)^l e^{-t} dt
 \end{aligned} \tag{C.17}$$

Este término estará acotado para $n \geq j + 1$ (para cualquier entero no negativo k la integral $\int_0^\infty t^k e^{-t} dt$ es acotada).

Para los términos que quedan, debemos utilizar una combinación de la regla generalizada para la derivada del producto de funciones, en conjunto con la fórmula de Faà di Bruno [93] para las derivadas de las funciones compuestas. Pero se ve claramente que, de entre estos términos, el que va a determinar la relación asintótica para $r \rightarrow 0^+$ es el que surge de tomar la derivada j -ésima para r^{n-1} en el producto $\frac{q(0, r^n)}{\mu_t(0)} r^{n-1}$, ya que los otros términos están multiplicados por exponentiales negativas que van a cancelar cualquier r^{-p} que pueda surgir.

Dado que

$$\frac{d^j}{dr^j} r^{n-1} = \prod_{i=1}^j (n-i) r^{n-j-1}. \tag{C.18}$$

de donde se demuestra que para $r \rightarrow 0^+$ el término dominante estará acotado siempre que $n \geq j + 1$. ■

Bibliografía

- [1] J. R. Howell, R. Siegel, and M. P. Mengüç, *Thermal Radiation Heat Transfer*. CRC Press, 5th ed., 2011.
- [2] S. T. Thynell, “Discrete-ordinates method in radiative heat transfer,” *International Journal of Engineering Science*, vol. 36, no. 12-14, pp. 1651–1675, 1998.
- [3] J. J. Duderstadt and W. R. Martin, *Transport theory*. 1979.
- [4] J. Qin, J. J. Makela, F. Kamalabadi, and R. R. Meier, “Radiative transfer modeling of the OI 135.6 nm emission in the nighttime ionosphere,” *Journal of Geophysical Research A: Space Physics*, vol. 120, no. 11, pp. 10116–10135, 2015.
- [5] K. F. Dymond, S. E. Thonnard, R. P. McCoy, and R. J. Thomas, “An optical remote sensing technique for determining nighttime F region electron density,” *Radio Science*, vol. 32, no. 5, pp. 1985–1996, 1997.
- [6] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*. London, UK: Dover, first ed., 1960.
- [7] Q. Zhu, S. H. Kurtzman, P. Hegde, S. Tannenbaum, M. Kane, M. Huang, N. G. Chen, B. Jagjivan, and K. Zarfos, “Utilizing optical tomography with ultrasound localization to image heterogeneous hemoglobin distribution in large breast cancers,” *Neoplasia*, vol. 7, no. 3, pp. 263–270, 2005.
- [8] Q. Zhu, P. U. Hegde, A. Ricci, M. Kane, E. B. Cronin, Y. Ardeshtirpour, C. Xu, A. Aguirre, S. H. Kurtzman, P. J. Deckers, and S. H. Tannenbaum, “Early-stage invasive breast cancers: Potential role of optical tomography with US localization in assisting diagnosis,” *Radiology*, vol. 256, no. 2, pp. 367–378, 2010.

- [9] H. Fujii, Y. Yamada, K. Kobayashi, M. Watanabe, , and Y. Hoshi, “Modeling of light propagation in the human neck for diagnoses of thyroid cancers by diffuse optical tomography,” *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, vol. 33, no. 5, p. e2826, 2016.
- [10] O. N. Vassiliev, T. A. Wareing, J. McGhee, G. Failla, M. R. Salehpour, and F. Mourtada, “Validation of a new grid-based Boltzmann equation solver for dose calculation in radiotherapy with photon beams,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 55, no. 3, pp. 581–598, 2010.
- [11] J. L. Bedford, “Calculation of absorbed dose in radiotherapy by solution of the linear Boltzmann transport equations,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 64, no. 2, 2019.
- [12] A. D. Klose, U. Netz, J. Beuthan, and A. H. Hielscher, “Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer — Part 1: forward model,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 72, no. 5, pp. 691–713, 2002.
- [13] U. Netz, J. Beuthan, and H. J. Cappius, “Imaging of Rheumatoid Arthritis in Finger Joints,” vol. 16, pp. 306–310, 2001.
- [14] E. W. Larsen, “An Overview of Neutron Transport Problems and Simulation Techniques,” in *Computational Methods in Transport* (F. Graziani, ed.), (Berlin, Heidelberg), pp. 513–534, Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [15] R. Sanchez and N. J. McCormick, “A Review of Neutron Transport Approximations,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 80, no. 4, pp. 481–535, 1982.
- [16] F. Anlı, F. Yaşa, S. Güngör, and H. Öztürk, “ T_N approximation to neutron transport equation and application to critical slab problem,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 101, no. 1, pp. 129–134, 2006.
- [17] E. G. Mishchenko and C. W. J. Beenakker, “Radiative transfer theory for vacuum fluctuations,” *Physical Review Letters*, vol. 83, no. 26, pp. 5475–5478, 1999.

- [18] R. Prasher, “Generalized equation of phonon radiative transport,” *Applied Physics Letters*, vol. 83, no. 1, pp. 48–50, 2003.
- [19] M. I. Mishchenko, “Vector radiative transfer equation for arbitrarily shaped and arbitrarily oriented particles: a microphysical derivation from statistical electromagnetics,” *Applied Optics*, vol. 41, no. 33, p. 7114, 2002.
- [20] J. Ripoll, “Derivation of the scalar radiative transfer equation from energy conservation of Maxwell’s equations in the far field,” *Journal of the Optical Society of America A*, vol. 28, no. 8, p. 1765, 2011.
- [21] D. Boas, D. Brooks, E. Miller, C. Dimarzio, M. Kilmer, R. Gaudette, and Q. Zhang, “Imaging the Body with Diffuse Optical Tomography,” *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 18, no. 6, pp. 57–75, 2001.
- [22] A. Bluestone, G. Abdoulaev, C. Schmitz, R. Barbour, and A. Hielscher, “Three-dimensional optical tomography of hemodynamics in the human head.,” *Optics express*, vol. 9, no. 6, pp. 272–286, 2001.
- [23] S. R. Arridge, “Optical Tomography in medical imaging,” *Inverse Problems*, vol. 15, pp. R41—R93, 1999.
- [24] A. D. Klose, V. Ntziachristos, and A. H. Hielscher, “The inverse source problem based on the radiative transfer equation in optical molecular imaging,” *Journal of Computational Physics*, vol. 202, no. 1, pp. 323–345, 2005.
- [25] A. D. Klose, “The forward and inverse problem in tissue optics based on the radiative transfer equation: A brief review,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 111, no. 11, pp. 1852–1853, 2010.
- [26] K. Ren, “Recent developments in numerical techniques for transport-based medical imaging methods,” *Communications in Computational Physics*, vol. 8, no. 1, pp. 1–50, 2010.
- [27] K. Ren, G. Bal, and A. H. Hielscher, “Frequency Domain Optical Tomography Based on the Equation of Radiative Transfer,” vol. 28, no. 4, pp. 1463–1489, 2006.

- [28] K. Prieto and O. Dorn, “Sparsity and level set regularization for diffuse optical tomography using a transport model in 2D,” *Inverse Problems*, vol. 33, no. 1, 2017.
- [29] R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, and C. Zhu, “A Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 16, no. 5, pp. 1190–1208, 1995.
- [30] J. Boulanger and A. Charette, “Numerical developments for short-pulsed Near Infra-Red laser spectroscopy. Part II: Inverse treatment,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 91, no. 3, pp. 297–318, 2005.
- [31] A. D. Klose, “Radiative transfer of luminescence light in biological tissue,” in *Light Scattering Reviews 4*, pp. 293–345, Springer Praxis Books, 2009.
- [32] S. R. Arridge and J. C. Schotland, “Optical tomography: Forward and inverse problems,” *Inverse Problems*, vol. 25, no. 12, 2009.
- [33] E. L. Gaglioli, O. P. Bruno, and D. M. Mitnik, “Light transport with the equation of radiative transfer: The Fourier Continuation – Discrete Ordinates (FC–DOM) Method,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 236, 2019.
- [34] A. H. Hielscher and S. Bartel, “Parallel programming of gradient-based iterative image reconstruction schemes for optical tomography,” *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, vol. 73, no. 2, pp. 101–113, 2004.
- [35] M. Doulgerakis, A. Eggebrecht, S. Wojtkiewicz, J. Culver, and H. Dehghani, “Toward real-time diffuse optical tomography: accelerating light propagation modeling employing parallel computing on GPU and CPU,” *Journal of Biomedical Optics*, vol. 22, no. 12, p. 1, 2017.
- [36] P. J. Coelho, “Advances in the discrete ordinates and finite volume methods for the solution of radiative heat transfer problems in participating media,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 145, pp. 121–146, 2014.

- [37] G. Colomer, R. Borrell, F. X. Trias, and I. Rodríguez, "Parallel algorithms for S_N transport sweeps on unstructured meshes," *Journal of Computational Physics*, vol. 232, no. 1, pp. 118–135, 2013.
- [38] H. Fujii, S. Okawa, Y. Yamada, and Y. Hoshi, "Hybrid model of light propagation in random media based on the time-dependent radiative transfer and diffusion equations," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 147, pp. 145–154, 2014.
- [39] E. E. Lewis, , and W. F. Miller, *Computational Methods of Neutron Transport*. Hoboken, USA: John Wiley & Sons, first ed., 1984.
- [40] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and Its Applications*, vol. 67. New York: Springer-Verlag, 1988.
- [41] L. G. Henyey and J. L. Greenstein, "Diffuse radiation in the galaxy," *The Astrophysical Journal*, vol. 93, pp. 70–83, 1941.
- [42] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 1999.
- [43] K. Lathrop, "The early days of the S_N method," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, vol. 66, no. November, pp. 241–242, 1992.
- [44] O. P. Bruno and M. Cubillos, "Higher-order in time "quasi-unconditionally stable" ADI solvers for the compressible Navier-Stokes equations in 2D and 3D curvilinear domains," *Journal of Computational Physics*, vol. 307, pp. 476–495, 2016.
- [45] O. P. Bruno and M. Lyon, "High-order unconditionally stable FC-AD solvers for general smooth domains I. Basic elements," *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 6, pp. 2009–2033, 2010.
- [46] N. Albin and O. P. Bruno, "A spectral FC solver for the compressible Navier-Stokes equations in general domains I: Explicit time-stepping," *Journal of Computational Physics*, vol. 230, no. 16, pp. 6248–6270, 2011.

- [47] F. Amlani and O. P. Bruno, “An FC-based spectral solver for elastodynamic problems in general three-dimensional domains,” *Journal of Computational Physics*, vol. 307, pp. 333–354, 2016.
- [48] O. P. Bruno, M. Cubillos, and E. Jimenez, “Higher-order implicit-explicit multi-domain compressible Navier-Stokes solvers,” *Journal of Computational Physics*, vol. 391, pp. 322–346, 2019.
- [49] O. P. Bruno and A. Prieto, “Spatially dispersionless, unconditionally stable FC-AD solvers for variable-coefficient PDEs,” *Journal of Scientific Computing*, vol. 58, no. 2, pp. 331–366, 2014.
- [50] O. P. Bruno and B. Delourme, “Rapidly convergent two-dimensional quasi-periodic Green function throughout the spectrum-including Wood anomalies,” *Journal of Computational Physics*, vol. 262, pp. 262–290, 2014.
- [51] G. Bal, “Radiative transfer equations with varying refractive index: a mathematical perspective,” *Journal of the Optical Society of America A*, vol. 23, no. 7, p. 1639, 2006.
- [52] H. Fujii, S. Okawa, K. Nadamoto, E. Okada, Y. Yamada, Y. Hoshi, and M. Watanabe, “Numerical modeling of photon migration in human neck based on the radiative transport equation,” *Journal of Applied Nonlinear Dynamics*, vol. 5, no. 1, pp. 117–125, 2016.
- [53] A. L. Crosbie and R. G. Schrenker, “Radiative transfer in a two-dimensional rectangular medium exposed to diffuse radiation,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 31, no. 4, pp. 339–372, 1984.
- [54] M. A. Ramankutty and A. L. Crosbie, “Modified discrete ordinates solution of radiative transfer in two-dimensional rectangular enclosures,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 57, no. 1, pp. 107–140, 1997.

- [55] H. Thierry and T. Kamdem, “Ray Effects Elimination in Discrete Ordinates and Finite Volume Methods,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 29, no. 2, pp. 306–318, 2014.
- [56] J. C. J. Paasschens, “Solution of the time-dependent Boltzmann equation,” *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, vol. 56, no. 1, pp. 1135–1141, 1997.
- [57] E. L. Gaggioli, D. M. Mitnik, and O. P. Bruno, “Skin effect in neutron transport theory,” *Physical Review E*, vol. 104, no. 3, pp. L032801–1–L032801–6, 2021.
- [58] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I*. 1999.
- [59] K. M. Case and Z. P. F, “Linear Transport Theory,” 1967.
- [60] B. G. Petrović and A. Haghighat, “Analysis of inherent oscillations in multidimensional S_N solutions of the neutron transport equation,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 124, no. 1, pp. 31–62, 1996.
- [61] G. Bal, “Fourier analysis of diamond discretization in particle transport,” *Calcolo*, vol. 38, no. 3, pp. 141–172, 2001.
- [62] B. Hunter and Z. Guo, “Numerical smearing, ray effect, and angular false scattering in radiation transfer computation,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 81, pp. 63–74, 2015.
- [63] L. B. Barichello, A. Tres, C. B. Picoloto, and Y. Y. Azmy, “Recent Studies on the Asymptotic Convergence of the Spatial Discretization for Two-Dimensional Discrete Ordinates Solutions,” *Journal of Computational and Theoretical Transport*, vol. 45, no. 4, pp. 299–313, 2016.
- [64] X. Hu and Y. Y. Azmy, “Asymptotic convergence of the angular discretization error in the scalar flux computed from the particle transport equation with the method of discrete ordinates,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 138, p. 107199, 2020.

- [65] J. Rocheleau, “An Analytical Nodal Discrete Ordinates Solution to the Transport Equation in Cartesian Geometry,” Master’s thesis, 2020.
- [66] D. Wang and T. Byambaakhuu, “High-Order Lax-Friedrichs WENO Fast Sweeping Methods for the S_N Neutron Transport Equation,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 193, no. 9, pp. 982–990, 2019.
- [67] R. Harel, S. Burov, and S. I. Heizler, “Asymptotic P_N Approximation in Radiative Transfer Problems,” *Journal of Computational and Theoretical Transport*, vol. 0, no. 0, pp. 1–17, 2020.
- [68] J. C. Chai, H. O. Lee, and P. S. V, “Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method,” *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 24, no. 4, pp. 373–389, 1993.
- [69] L. N. Trefethen, “Is Gauss quadrature better than Clenshaw-Curtis?,” *SIAM Review*, vol. 50, no. 1, pp. 67–87, 2008.
- [70] E. W. Larsen, , J. E. Morel, and W. F. Miller, “Asymptotic solutions of numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes,” *Journal of Computational Physics*, vol. 67, no. 1, pp. 283–324, 1987.
- [71] M. Althobaiti, H. Vavadi, and Q. Zhu, “Diffuse optical tomography reconstruction method using ultrasound images as prior for regularization matrix,” *Journal of Biomedical Optics*, vol. 22, no. 2, p. 026002, 2017.
- [72] M. Guven, B. Yazici, X. Intes, and B. Chance, “Diffuse optical tomography with a priori anatomical information,” *Optical Tomography and Spectroscopy of Tissue V*, vol. 4955, p. 634, 2003.
- [73] A. H. Hielscher, A. D. Klose, and K. M. Hanson, “Gradient-based iterative image reconstruction scheme for time-resolved optical tomography,” *IEEE Transactions on Medical Imaging*, vol. 18, no. 3, pp. 262–271, 1999.

- [74] H. K. Kim and A. H. Hielscher, “A diffusion-transport hybrid method for accelerating optical tomography,” *Journal of Innovative Optical Health Sciences*, vol. 3, no. 4, pp. 293–305, 2010.
- [75] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical optimization*. New York, USA: Springer, second ed., 2006.
- [76] A. D. Klose and A. H. Hielscher, “Quasi-Newton methods in optical tomographic image reconstruction,” *Inverse Problems*, vol. 19, no. 2, pp. 387–409, 2003.
- [77] O. Dorn, “A transport – backtransport method for optical tomography,” *Inverse Problems*, vol. 14, pp. 1107–1130, 1998.
- [78] E. Hille and R. Phillips, *Functional analysis and semi-groups*. Rhode Island, USA: American Mathematical Society, first ed., 1957.
- [79] E. L. Gaglioli and O. P. Bruno, “Parallel inverse-problem solver for time-domain optical tomography with perfect parallel scaling,” *arXiv 2202.09421*, 2022.
- [80] O. Dorn, “Scattering and absorption transport sensitivity functions for optical tomography,” *Optics Express*, vol. 7, no. 13, p. 492, 2000.
- [81] E. Hernandez-Martin and J. L. Gonzalez-Mora, “Diffuse optical tomography in the human brain: A briefly review from the neurophysiology to its applications,” *Brain Science Advances*, vol. 6, no. 4, pp. 289–305, 2020.
- [82] A. N. Bashkatov, E. A. Genina, and V. V. Tuchin, “Optical properties of skin, subcutaneous, and muscle tissues: A review,” *Journal of Innovative Optical Health Sciences*, vol. 4, no. 1, pp. 9–38, 2011.
- [83] M. Dehaes, L. Gagnon, F. Lesage, M. Péligrini-Issac, A. Vignaud, R. Valabrègue, R. Grebe, F. Wallois, and H. Benali, “Quantitative investigation of the effect of the extra-cerebral vasculature in diffuse optical imaging: a simulation study,” *Biomedical Optics Express*, vol. 2, no. 3, p. 680, 2011.

- [84] “Case courtesy of RMH Core Conditions, Radiopaedia.org, rID: 26271.,”
- [85] E. W. Larsen and J. B. Keller, “Asymptotic solution of neutron transport problems for small mean free paths,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 15, no. 1, pp. 75–81, 1974.
- [86] L. V. Wang and H.-I. Wu, *Biomedical Optics*. 2009.
- [87] G. Sansone, *Orthogonal Functions*. New York, USA: Dover Publications, first ed., 1991.
- [88] A. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media*, vol. 1. New York, USA: Academic Press, 1978.
- [89] M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer*. third ed., 2013.
- [90] A. H. Hielscher, R. E. Alcouffe, and R. L. Barbour, “Comparison of finite-difference transport and diffusion calculations for photon migration in homogeneous and heterogeneous tissues,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 43, no. 5, pp. 1285–1302, 1998.
- [91] R. C. Haskell, L. O. Svaasand, T.-T. Tsay, H. M. College, M. S. Mcadams, T.-C. Feng, B. J. Tromberg, and L. . Svaasand, “Boundary Conditions for the Diffusion Equation in Radiative Transfer,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 11, no. 10, p. 2727, 1994.
- [92] M. Xu, W. Cai, M. Lax, and R. R. Alfano, “Photon migration in turbid media using a cumulant approximation to radiative transfer,” *Physical Review E*, vol. 65, no. 6, pp. 1–10, 2002.
- [93] L. E. Fraenkel, “Formulae for high derivatives of composite functions,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 83, no. 2, pp. 159–165, 1978.

