



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

**Algorítmos eficientes para la resolución del problema
inverso 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

Algorítmos eficientes para la resolución del problema inverso en tomografía óptica

En este trabajo se desarrollan algorítmos eficientes para la resolución de los problemas directos e inversos necesarios en la disciplina de tomografía óptica. Para ello, utilizamos la Ecuación de Transporte Radiativo (ERT) como modelo físico de transporte para la radiación en la materia. La ERT es resuelta por medio de algoritmos basados en el Método de Continuación de Fourier en Ordenadas Discretas (FC-DOM, de su sigla en inglés). Estos algorítmos permiten resolver la ERT de forma eficiente y en entornos de máquinas paralelas con escabilidad ideal, como se muestra en esta tesis.

La identificación de una capa límite, previamente no descripta en la literatura, permite explicar por qué los métodos numéricos existentes para la resolución de la ERT no presentan un alto orden de convergencia. En esta tesis se presenta una teoría que permite identificar dicha capa límite, proveyendo estrategias para su resolución que logran alto orden de convergencia a la ERT, lo cual es demostrado en la sección 2.4 para el caso de una única dimensión espacial.

Para la resolución del problema inverso en tomografía óptica utilizamos el método de minimización de Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) con uso de memoria reducido (lm-BFGS, de su sigla en inglés), para el cual es necesario el cálculo eficiente del gradiente de la función objetivo involucrada. Para ello, desarrollamos la teoría que permite el cálculo eficiente de dicho gradiente mediante la resolución del problema adjunto.

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

Índice

Resumen	1
1 Introducción	5
2 El modelo directo	11
2.1 La ecuación de transferencia radiativa y su interpretación física	12
2.2 Métodos numéricos	16
2.2.1 Discretización de la variable angular	17
2.2.2 Discretización de la variable temporal	18
2.2.3 Discretización de la variable espacial: el método FC	18
2.2.4 Descomposición de dominio e implementación en paralelo: El método FC-DOM	21
2.3 Validación	25
2.3.1 Convergencia de soluciones manufacturadas	25
2.3.2 Comparación con resultados experimentales	27
2.3.2.1 Fantoma homogéneo	29
2.3.2.2 Fantoma inhomogéneo	31
2.3.3 El fenómeno de rayos	33
2.3.4 Comparación con solución analítica	35
2.4 Existencia de capa límite	37
3 El problema inverso	51
3.1 El esquema <i>MOBIR</i>	53

3.2	El método de minimización BFGS	54
3.2.1	El método de uso de memoria limitada lm-BFGS	55
3.3	El operador de transporte y otras definiciones preliminares	58
3.4	El método de Fuentes Múltiples Superpuestas	58
3.5	La función objetivo y el formalismo del método adjunto para el cálculo de su gradiente	61
3.5.1	Verificación numérica de la expresión (3.43) para la derivada funcional	68
3.5.2	Cálculo numérico del gradiente funcional	70
3.6	Datos sintéticos con fuentes láser pulsadas	72
3.7	Algoritmo para la resolución del problema inverso	75
3.8	Reconstrucciones numéricas	77
4	Conclusiones	86

Introducción

La ecuación de transporte radiativo (ETR de ahora en adelante) es la forma lineal de la ecuación de transporte de Boltzmann, cuyo dominio de definición es el espacio de las fases. Ésta ecuación modela el transporte de radiación electromagnética en un medio participante —la radiación en el proceso de transporte interactúa con el medio, siendo absorbida, dispersada y emitida por éste—. La ETR modela también el transporte de partículas neutras en general (para las cuales las interacciones mutuas entre las partículas involucradas en el proceso de transporte puede ser despreciada). La importancia del modelado del transporte de partículas neutras (siendo los fotones la partícula involucrada en el proceso de transporte de radiación electromagnética) difícilmente puede ser sobreestimada, ya que dicho modelado encuentra aplicaciones en diversas áreas de la ciencia y la tecnología, como lo es 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] y el modelado de transporte de neutrones para el desarrollo y diseño de reactores nucleares [14–16], entre otros [17, 18]. En cuanto al transporte de radiación electromagnética, la ETR puede derivarse, bajo ciertas aproximaciones, como un límite asintótico para soluciones de las ecuaciones de Maxwell. La cantidad modelada por la ETR, comúnmente denominada intensidad específica, queda relacionada en dicho límite con el vector de Poynting [19, 20] en la teoría ondulatoria del electromagnetismo. Los fenómenos ondulatorios como la interferencia y la difracción no son capturado por la ETR, la cual expresa esencialmente la conservación de la energía irradiada a escala mesoscópica en el campo

electromagnético.

La tomografía óptica es una técnica tomográfica no invasiva en la que radiación electromagnética no ionizante es inyectada dentro del tejido en estudio. La radiación emergente es detectada mediante fotodetectores ubicados en el contorno del tejido biológico que se está analizando. A partir de la luz detectada, el objetivo es la reconstrucción de los parámetros ópticos que caracterizan al tejido biológico. Esta técnica tiene la capacidad de proporcionar información funcional y anatómica.

Algunas de las ventajas relativas de esta técnica tomográfica que se encuentra aún en desarrollo, respecto a técnicas ya establecidas, son la portabilidad y su bajo costo. La utilización de radiación no ionizante implica que este tipo de radiación no es cancerígena, a diferencia de los rayos-X, por lo cual es una técnica que podría reemplazar a las tomografías computarizadas de rayos-X para el diagnóstico de cáncer de mama, entre otros.

La ETR es utilizada en tomografía óptica como un modelo para el transporte de fotones en el tejido biológico a una longitud de onda previamente determinada, que típicamente proviene de una fuente láser. La “ventana óptica” ubicada en el rango de longitudes de onda del espectro electromagnético comprendida entre los 600 a 900 nanómetros permite a la radiación en el infrarrojo cercano penetrar y sensar varios centímetros en el interior del tejido biológico [21]. Para estas longitudes de onda del espectro electromagnético, el tejido humano se comporta como un medio altamente dispersivo. Los fotones viajan através del tejido, sufriendo múltiples colisiones de dispersión elástica, describiendo trayectorias aleatorias.

Los componentes del tejido biológico pueden identificarse y caracterizarse explotando el denominado coeficiente de absorción óptica, o en conjunto los coeficientes de absorción y de dispersión, ambos dependientes de los componentes del tejido. Debido a las interacciones altamente dispersivas dentro del tejido, la información de la trayectoria de los fotones se pierde, y no puede ser efectivamente explotada, lo que da como resultado los bajos niveles de resolución que se obtienen en esta disciplina. Esta es una característica particular de la técnica, que la distingue de la tomografía por rayos-X, donde los fotones sufren poca dispersión y la transformada de Radon resulta eficiente para la obtención de las imágenes. A sí mismo, dado que el coeficiente de absorción depende fuertemente en la longitud de

onda de la radiación electromagnética utilizada, esta técnica provee alto contraste, ya que dicha longitud de onda se puede ajustar a la longitud de onda de absorción del medio de interés que quiere detectarse, *e.g.* utilizando radiación alrededor de los 650nm para distinguir hemoglobina oxigenada de la desoxihemoglobina [21]. La angiogenesis cumple un rol central en el crecimiento de los tumores. Este es el mecanismo mediante el cual las células tumorales generan los vasos sanguíneos necesario para que las células cancerosas se alimenten y se reproduzcan. Por este motivo un caso de particular interés es la detección de la hemoglobina, ya que esta indica la presencia de vasos sanguíneos, los cuales pueden ser un indicador de la presencia y del estado de un tumor, para su detección o para monitoreo y seguimiento en su tratamiento. Por otra parte, la activación de diferentes regiones del cerebro es acompañada por una respuesta hemodinámica que lleva sangre oxigenada a las mismas. La detección de la hemoglobina oxigenada es por lo tanto un indicador de actividad cerebral, con aplicaciones en neurociencias.

La reconstrucción de las propiedades de absorción en el tejido humano permiten la identificación de tumores [7–9], la obtención de imágenes funcionales del cerebro [21–23], y la caracterización de los diferentes constituyentes del tejido humano para diagnóstico médico, entre otros. En este trabajo nos enfocamos en la reconstrucción del coeficiente de absorción, aunque el enfoque propuesto puede ser fácilmente generalizado para la reconstrucción de otros parámetros, como *e.g.*, el problema de determinar las fuentes en la ETR, que encuentra aplicaciones en la disciplina relacionada de tomografía óptica por fluorescencia [24–26], y la reconstrucción simultánea de los coeficientes de absorción y de dispersión [27, 28].

En este trabajo resolvemos el problema inverso en tomografía óptica como un problema de minimización no lineal para el que empleamos el método quasi-Newton de descenso de gradiente denominado Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) con uso de memoria reducido lm-BFGS [29]. Éste es un método de minimización iterativo que se vale del gradiente, y de una aproximación al Hessiano de la función objetivo (a ser introducida en la sección 3) para encontrar el mínimo deseado. En las referencias [28, 30] el problema inverso en tomografía óptica en dos dimensiones espaciales (2D) es presentado, utilizando la ETR dependiente del tiempo, sin considerar las condiciones de contorno de Fresnel. Debido a los altos costos

computacionales, solo se emplean grillas numéricas de poca resolución, haciendo que estos enfoques no sean adecuados para situaciones reales, que pueden requerir de soluciones numéricas mejor convergidas, y dominios espaciales más grandes. Los métodos de alto orden permiten obtener soluciones precisas de la ETR utilizando grillas numéricas mas gruesas, en comparación a métodos de menor orden. Esto impacta en los recursos computacionales requeridos para una precisión dada, en términos de tiempo computacional y exigencias de memoria, que se vuelven prohibitivos muy rápidamente debido a la alta dimensionalidad de la ETR. Los algoritmos propuestos en este trabajo pueden ser fácilmente extendidos a geometrías de tres dimensiones espaciales (3D). En geometrías 2D, la ETR conserva la complejidad matemática de los problemas 3D, exigiendo menor cantidad de recursos computacionales.

La ecuación de transporte radiativo proporciona un modelo físicamente preciso para el transporte de fotones en el tejido biológico [31, 32], pero su aplicabilidad en el contexto de los problemas inversos en tomografía óptica se ha visto obstaculizada por el alto costo computacional requerido para su solución.

El desarrollo de estrategias eficientes y de algoritmos capaces de distribuir el trabajo en máquinas paralelas es particularmente importante para la resolución de los problemas directos e inversos para la ETR en 3D, donde las exigencias de memoria RAM y los requisitos computacionales se vuelven prohibitivos muy rápidamente debido a la alta dimensionalidad de la ETR, que en problemas 3D involucra dos variables direccionales asociadas a las velocidades en 3D (definidas en la esfera unitaria), además de las tres variables espaciales y el tiempo.

En esta tesis se abordan estas dificultades y exigencias computacionales mediante una combinación de tres estrategias principales, (i) el uso de un enfoque espectral basado en el método de continuación de Fourier en ordenadas discretas (FC-DOM) [33] para la solución del problema de transporte de los fotones en el tejido humano; (ii) Una implementación en máquinas paralelas sumamente eficiente del Método FC-DOM basado en una estrategia de descomposición del dominio espacial involucrado; y (iii) Una configuración de fuentes múltiples superpuestas (FMS), que utiliza ciertas combinaciones de fuentes que operan simultáneamente en lugar de secuencias de fuentes únicas utilizadas en enfoques anteriores. En suma, dicha estrategia implementada en un clúster de computadoras con 256 núcleos físicos,

da como resultado una aceleración del tiempo de cálculo de varios órdenes de magnitud—lo que hace posible resolver problemas inversos en dominios del tamaño necesario para abordar problemas tales como el de la obtención de imágenes dentro de un modelo de cuello humano simplificado considerado en la Sección 3.8.

La estrategia de paralelización propuesta presenta una serie de ventajas. A diferencia de otros algoritmos reportados en la literatura, el enfoque presentado en este trabajo es altamente eficiente independientemente de el número de fuentes empleadas (*cf.* [34]). Estrategias de computo en paralelo basadas en arquitecturas de GPU [35] han mostrado ser apropiadas para aplicaciones de tomografía óptica basadas en la aproximación de difusión. Desafortunadamente, la aproximación de difusión no es físicamente precisa en un amplio rango de situaciones, y, debido a las altas exigencias en memoria de almacenamiento requerida para la resolución del problema inverso —el cual exige guardar en memoria soluciones completas de la ETR para el problema directo y el problema adjunto— la utilización de GPUs en este contexto no parece viable. Cabe mencionar que el uso de GPUs es una estrategia valida para reconstrucciones basadas en métodos estocásticos de Monte Carlo. Pero estos métodos son intrínsecamente altamente ineficientes. En la referencia [36] se realiza una revisión de algoritmos propuestos en la literatura para la paralelización de la ETR. Todas las estrategias de paralelización muestran una eficiencia significativamente por debajo de la ideal, con excepción de la ref. [37], la cual presenta una estrategia de paralelización por encima de la ideal, pero la aplicabilidad del método está restringida a medios no absorbentes y no dispersantes, para los cuales se conocen soluciones analíticas. La estrategia de paralelización desarrollada en esta tesis presenta escalabilidad ideal, independientemente del régimen de transporte en el que se requiere resolver la ETR, sin restricciones para los coeficientes de absorción y dispersión empleados, el número de fuentes o el número de ordenadas discretas que necesiten utilizarse. Como referencia, se obtuvo una eficiencia de 136,7 % para las pruebas de escalabilidad realizadas con hasta 256 procesadores por medio de la paralelización propuesta para el método FC-DOM (ver sec. 2.2.4 fig. 2.3). En la referencia [38, p. 153] se informa un tiempo de cálculo de 44,3 horas para la resolución de la ETR de un problema modelo en 2D por medio un único procesador. La solución del mismo problema utilizando los mismos parametros y la

misma resolución de la grilla numérica, corriendo en 64 procesadores, se obtiene mediante la estrategia de paralelización del algoritmo FC-DOM propuesto en menos de treinta minutos.

Como se mencionó anteriormente, una reducción adicional significativa en el tiempo de cálculo requerido para la solución del problema inverso es lograda mediante la explotación del método FMS propuesto—el cual, combinando múltiples fuentes en cada solución a la ETR, reduce el número de soluciones ETR directas y adjuntas requeridas. En esta tesis se demuestra la aceleración por un factor de seis, para la precisión en la reconstrucción del problema inverso, relativo al tiempo requerido por el “método de barrido” encontrado ubícuamente en tomografía óptica.

El modelo directo

Como mencionamos en la introducción, en este trabajo resolvemos el problema inverso como un problema de minimización no lineal, basado en un modelo físico para el transporte de fotones. Este modelo para el transporte de los fotones, para el cual empleamos la ecuación de transferencia radiativa, es lo que se denomina el modelo directo. En el modelo directo, los parámetros para el problema de transferencia radiativa son conocidos (condición inicial, condiciones de contorno, y parámetros ópticos) y lo que se busca es la solución a la 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. El problema inverso será abordado más adelante, y su diferencia principal con el modelo directo es que lo que busca determinarse no es la distribución de fotones, si no un parámetro óptico en la ETR que permite caracterizar el medio donde se produce el transporte de los fotones, para lo cual se cuenta con ciertas “mediciones” experimentales.

En esta sección presentamos el modelo directo, *i.e.*, la ETR que utilizaremos en la resolución del problema inverso en la sección 3, junto con los métodos numéricos desarrollados para su resolución. Además, dado que los códigos y algoritmos para la resolución de la ETR fueron desarrollados en el marco de esta tesis, presentaremos comparaciones de los resultados numéricos obtenidos con soluciones manufacturadas, mediciones experimentales y soluciones analíticas, con el fin de validar estos códigos.

Así mismo, se presentan algunas características, propias de las soluciones a la ETR. En el marco de esta tesis se desarrolló una descripción detallada de la existencia de capas límite en las soluciones a la ETR que presenta desafíos numéricos. Abordaremos esta cuestión también en detalle, así como las consecuencias numéricas de dicha capa límite, y estrategias para su

resolución.

2.1 La ecuación de transferencia radiativa y su interpretación física

La ecuación de transferencia radiativa (ETR) 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 puede también emitir 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 conexión 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 por considerarse despreciable, y el cual, físicamente corresponde a las interacciones de las partículas transportadas con ellas mismas [40, Cap. 4]. En el contexto de este trabajo utilizaremos la ETR como modelo para el transporte de fotones en un medio participante. Para ello consideramos el problema ETR dependiente del tiempo para $0 \leq t \leq T$, con condiciones de contorno y valores iniciales en dos dimensiones espaciales

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

$$u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t=0) = 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1$$

$$u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = f(\hat{\nu} \cdot \hat{\theta})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) + q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_-,$$

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 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 foton emergente $\hat{\theta}'$ en el proceso de dispersión. En particular, utilizaremos como modelo de función de fase la función de Henyey-Greenstein [41]

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

donde $g \in [-1, 1]$ caracteriza la anisotropía en los procesos de dispersión: un valor de $g = 1$ ($g = -1$) caracteriza una distribución de probabilidad donde todos los fotones emergen del proceso de dispersión en la dirección (opuesta) de incidencia. En el caso de dispersión isotrópica, donde los fotones emergen de los eventos de colisión con igual probabilidad en cualquier dirección se tiene $g = 0$. Además, esta función de fase está normalizada, de forma tal qué

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

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 lo consideraremos 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 de una única longitud de onda, que es la longitud de onda de la fuente láser empleada.

Los diferentes términos en la ecuación (2.1) poseen diferente significado físico. El primer término del lado izquierdo de la ecuación simplemente representa la variación temporal de la intensidad específica 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 dispersión 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 $\hat{\theta} \in S^1$, donde la integración se realiza simplemente para $\theta \in [0, 2\pi)$.

La condición inicial es considerada nula en el marco de esta tesis (segunda línea en la ec. (2.1)), ya que el medio será iluminado con uno o múltiples pulsos láser, partiendo con las fuentes láser inicialmente apagadas.

Las condiciones de contorno empleadas se denominan condiciones de contorno de Fresnel. El término de Fresnel en la condición de contorno, $f(\hat{\nu} \cdot \hat{\theta})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)$, donde $\hat{\nu}$ indica la normal saliente al contorno $\partial\Omega$ del dominio espacial Ω , modela la reflexión de la radiación electromagnética en la interfase del dominio donde se modela el transporte de la radiación con el medio circundante debido a las diferencias en los índices de refracción. El coeficiente de Fresnel para luz no polarizada viene dado por [42]

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

donde n_Ω y n_0 indican los índices de refracción en el interior del dominio espacial Ω y en el exterior del mismo. El ángulo $\alpha_i = \arccos(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})$ se mide con respecto a la normal del plano de reflexión, siendo α_t y α_c el ángulo que forma la radiación emergente transmitida en la interfase del medio, y el ángulo crítico de reflexión total interna, respectivamente. Estos últimos se obtienen a partir de la ley de Snell. Para el ángulo de transmisión se cumple $n_\Omega \sin(\alpha_i) = n_0 \sin(\alpha_t)$ y el ángulo de reflexión interna total viene dado por $n_\Omega \sin(\alpha_c) = n_0$. 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 esta tesis modela uno o múltiples láseres iluminando 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, 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

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

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

Utilizando qué

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

integrando en la variable angular θ la ecuación integrodiferencial en (2.1) y utilizando (2.3) se tiene

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

donde $\tilde{s} = \int_{S^1} s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) d\theta$. 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

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

la cual expresa la conservación global de la radiación en el volumen Ω , donde la variación temporal en el número total de fotones viene dada por el aporte de la fuente \tilde{s} , menos el flujo de fotones a través de la superficie del dominio $\partial\Omega$, menos los fotones que son absorbidos por el medio participante en procesos de absorción pura. A pesar de que no fueron incluidos en este análisis, también deben ser consideradas en esta relación de balance global la condición

inicial y las condiciones de contorno. Dado que los procesos de dispersión que nos interesan son de tipo elástico, el número de fotones se conserva en dichos procesos colisionales, y por lo tanto estos procesos no intervienen en el balance global (2.9).

Siendo una ecuación de Boltzmann, la ecuación (2.1) se encuentra definida en el espacio de las fases, y su solución da información detallada sobre el estado y distribución de los fotones y de su evolución temporal. Por esta razón, el problema de transferencia radiativa es un problema multidimensional, que involucra las variables espaciales \mathbf{x} , y las variables angulares $\hat{\theta}$, asociadas a las velocidades de los fotones. Debido a la alta dimensión de la ec. (2.1), su resolución numérica puede ser altamente costosa, especialmente cuando se considera el caso de 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 . Se tienen en total, en tres dimensiones, las tres variables espaciales, dos variables asociadas a las direcciones, y la variable temporal, haciendo a un total de 6 variables, lo cual representa un serio desafío aún para los métodos numéricos más eficientes. Por este motivo, en esta tesis nos restringimos a casos de simetría 2D, donde, debido a la simetría, el problema puede tratarse en de 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 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 para generar una aproximación discreta a la solución de la ETR sobre una grilla numérica discreta del espacio de fases, la cual proporciona una alta precisión numérica para soluciones suaves. El algoritmo propuesto de descomposición de dominio presenta además una eficiencia de escalabilidad *ideal* que fue demostrada con hasta 256 procesadores.

Cabe destacar que para tener alta precisión numérica, deben exigirse ciertas condiciones de regularidad en la solución numérica, y en los coeficientes de la ETR. Además, siempre que hayan variaciones rápidas en la solución, estas deben ser correctamente resueltas por la

grilla numérica utilizada. De otra forma, aún siendo la solución subyacente a la ETR suave, en la aproximación discreta, las variaciones rápidas que no sean resueltas por una cantidad suficiente de puntos, se manifestaran en el error de aproximación como una discontinuidad, deteriorando la convergencia del algoritmo.

2.2.1 Discretización de la variable angular

Para la discretización en la variable angular de la ETR 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], y que luego 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 de la integral colisional por medio de una cuadratura numérica. Para ello, se fijan un conjunto de M direcciones discretas definidas por las abscisas de la cuadratura de integración. Esto permite el tratamiento numérico de la integral de dispersión. En nuestro algoritmo explícito para 2D, definimos los cosenos directores de estas direcciones discretas 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 en la variable $\hat{\theta}$, el uso de la regla trapezoidal proporciona una regla de cuadratura de convergencia espectral. Las direcciones discretas para la regla trapezoidal 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

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

donde el término exponencial expresa el error en la cuadratura de integración esperado para la convergencia exponencial, que se dará para soluciones suaves, siendo h una constante.

2.2.2 Discretización de la variable temporal

Para evolucionar en el tiempo con alta precisión la solución de la ETR, empleamos un método de Adams-Bashforth de cuarto orden. Este método ofrece una buena relación entre precisión y estabilidad. Llamando $u_m^k = u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_m, t^k)$, con $t^k = (k-1)\Delta t$ la solución a la ETR dependiente del tiempo se obtiene a partir de la condición inicial 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 de Adams-Bashforth de cuarto orden $\chi_0 = 55/44$, $\chi_1 = -59/24$, $\chi_2 = 37/24$ y $\chi_4 = -3/8$. En este trabajo, los cuatro pasos temporales iniciales necesarios para inicializar el esquema de Adams-Bashforth de cuarto orden son considerados nulos. Esta configuración es apropiada para el modelo directo en tomografía óptica, dado que utilizaremos pulsos láser que inyectan radiación, con la fuente láser inicialmente apagada. Es posible emplear condiciones iniciales arbitrarias, tal como se muestra en la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes en la Sección 5 de la ref. [44].

2.2.3 Discretización de la variable espacial: el método FC

En el dominio espacial utilizamos una grilla uniforme, de tamaño Δx en la dirección \hat{x} , y de tamaño Δy en la dirección \hat{y} . Para obtener una aproximación espectral a la solución, utilizamos el método de Continuación de Fourier (FC).

Describiremos el método FC en la dirección \hat{x} . Análogamente se aplica en la dirección \hat{y} . Partimos de la grilla numérica

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

Aproximaremos el gradiente espacial que aparece en la ecuación (2.1) mediante el método FC [33, 45], el cual es un tipo colocación de Fourier que puede aplicarse a funciones no

periódicas, lo que permite el tratamiento de condiciones de contorno arbitrarias. Este método permite obtener una aproximación de alto orden del gradiente espacial en la ec. (2.1) siempre que la solución subyacente sea suave.

Partiendo de una función que no es periódica, el método FC produce una función continua, que convierte a dicha función en periódica. Éste método fue ampliamente descripto en la literatura, y ha sido aplicado a una diversidad de problemas. En esta tesis extendimos el uso de FC para su aplicación en la resolución de la ecuación (2.1).

Para generar 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, g_2, \dots, g_{d_l} en una base de polinomios Gram. El segundo, \mathbf{g}_r , se obtiene de proyectar los últimos d_r puntos $g_{N+1-d_r}, \dots, g_{N+1}$ en dicha base. El proceso de continuación puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Los d_l puntos g_1, g_2, \dots, g_{d_l} y los d_r $g_{N+1-d_r}, g_{N-d_r}, \dots, g_{N+1}$ son proyectados en una base de polinomios Gram.
2. Dicha proyección genera las “continuaciones suaves a cero” $\mathbf{g}'_l = [g'_{l,N+1} = 0, g'_{l,N}, \dots, g'_{l,N+1+C} = g_{d_l}]^T$ y $\mathbf{g}'_r = [g'_{r,N+1-d_r} = g_{N+1-d_r}, \dots, g'_{r,N-d_r+C}, g'_{r,N+1-d_r+C} = 0]^T$ de cada uno de los polinomios ortogonales.
3. Se generan dos nuevos vectores \mathbf{g}_l y \mathbf{g}_r que expanden las dimensiones de \mathbf{g}'_l y \mathbf{g}'_r a $C + E$, donde E es un número de puntos “extra” tal que el número total de puntos $N_p = N + 1 + C + E$ puede factorizarse en números primos pequeños. Estos vectores se obtienen agregando un número E de puntos nulos en los extremos de la continuación, de donde se tiene $\mathbf{g}_l = [g'_{l,N+1} = 0, \dots, g_{l,N+1+E} = 0, \mathbf{g}'_l]^T$ y $\mathbf{g}_r = [\mathbf{g}'_r^T, 0 \dots, g_{r,N+1+C+E} = 0]^T$.
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 qué $\mathbf{g}_{c,i} = \mathbf{g}_i$ para $i = 1, 2, \dots, N + 1$.

Como ejemplo, en la fig. (2.1) 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 puede factorizarse en números primos pequeños de forma qué $N_p = 2 \times 3 \times 3 \times 5$. En general, fijamos N_p ajustando el número E de forma tal qué $N_p = \prod_{\gamma=1}^F \pi_\gamma$, con los factores primos pequeños cumpliendo $\pi_1 \leq \pi_2 \leq \dots \leq \pi_F \leq 5$. Esto permite la utilización de las transformadas de Fourier de forma eficiente.

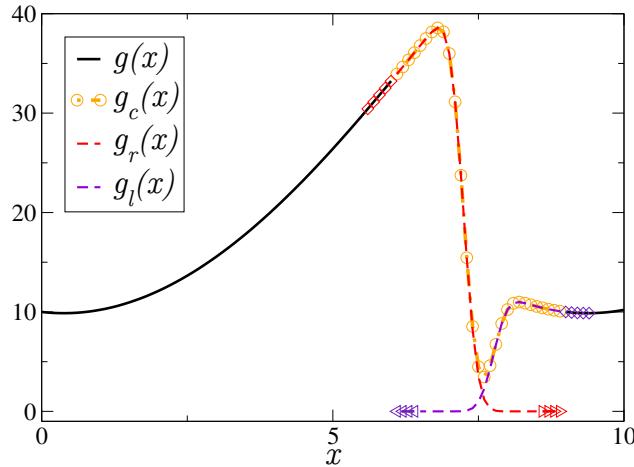


Figura 2.1: Función $g(x) = 12 + x^2 - e^{x/3}$ y su continuación de Fourier. la función original está definida para $x \in [0, 6]$. Las curvas de trazos discontinuos representan las continuaciones a cero, $g_l(x)$ y $g_r(x)$. Los círculos muestran la función periódica obtenida por continuación de Fourier. 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.

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 [45]:

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

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:

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

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 al alto costo computacional asociado a la resolución numérica de la ETR, empleamos una estrategia de descomposición del dominio espacial, Ω . Si bien sería posible emplear estrategias similares en la variable angular, estas estrategias no han mostrado ser eficientes, debido al alto costo que conlleva la comunicación de las diferentes direcciones $\hat{\theta}$ para el cálculo de la integral colisional. Con el fin de realizar la descomposición del dominio espacial, el dominio Ω 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. A cada proceso en paralelo se le asigna 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.

Cada subdominio cubre 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 $y_j = y_{\min,s} + (j - 1)\Delta y$.

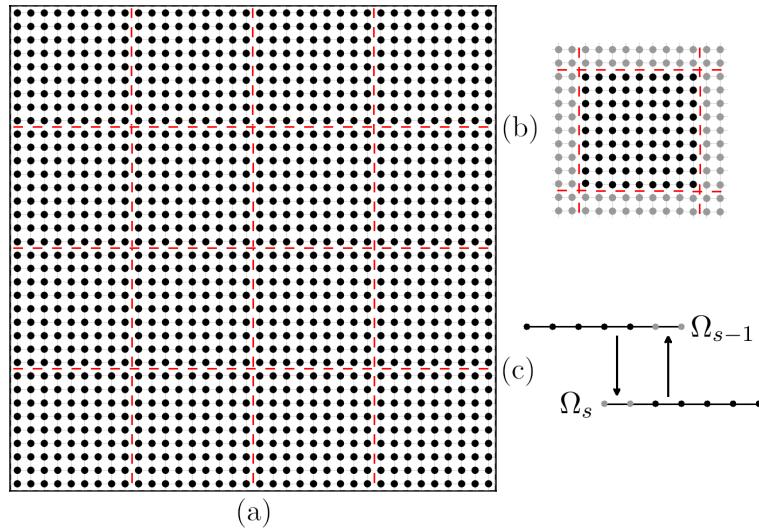


Figura 2.2: a) El dominio Ω es dividido en subdominios disjuntos $\tilde{\Omega}_s$ de forma que $\Omega = \cup_{s=1}^{N_c} \tilde{\Omega}_s$. b) Cada subdominio $\tilde{\Omega}_s$ es extendido en dos puntos (círculos grises) en cada dirección espacial, formando una descomposición en subdominios solapados 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 puntos de la grilla s , y recibe de su vecino los primeros dos puntos.

Llamando $u_m^k(x, y_j) = u_{m,j}^k(x)$ a la intensidad específica discretizada, donde se fijó $y_j \in y_s$ para cualquier $x \in x_s$, similarmente llamamos $u_m^k(x_i, y) = u_{m,i}^k(y)$ para $x_i \in x_s$ fijo para cualquier $y \in y_s$. El final de cada paso temporal, se realiza el intercambio de puntos entre subdominios vecinos. Este intercambio de puntos se realiza para todos los bordes que no son físicos, para cada proceso, en cada dirección espacial, y para cada punto de la grilla en esa dirección, como se ilustra en la figura fig. (2.2).

En suma, el algoritmo que resulta de la combinación del método FC con el método de ordinadas discretas, y el método de propagación temporal, lo denominamos método FC-DOM [33]. Este algoritmo se sumariza en forma de pseudocódigo en el algoritmo (1).

En la fig. (2.3) se muestran los tiempos computacionales normalizados obtenidos para el algoritmo (1) propuesto, para un problema modelo, utilizando diferentes números de procesadores. En esta prueba, se corrió el código implementado en MPI Fortran, y compilado con

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 eq. (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 eq. (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**

el compilador intelMPI. Se utilizaron $N = 2000$ puntos en cada coordenada espacial, y un total de $M = 16$ direcciones discretas, por un total de $T = 1000$ pasos temporales. Para evitar irregularidades en la aceleración paralela originadas por la tecnología “Intel turbo”, la cual opera cuando se utilizan unos pocos procesadores por nodo, y la cual se desactiva gradualmente a medida que se agregan procesadores en una corrida, se presentan los resultados de escaleo con tiempos normalizados con el caso de 16 procesadores en un nodo como referencia. Para tener igual carga en todos los nodos, se utilizaron 16 procesadores por nodos, agregando un nodo estadío del cálculo, hasta completar los 256 procesadores disponibles. Como se observa en la figura, el algoritmo propuesto presenta *escalabilidad paralela perfecta* con hasta los 256 procesadores para los que fue probado.

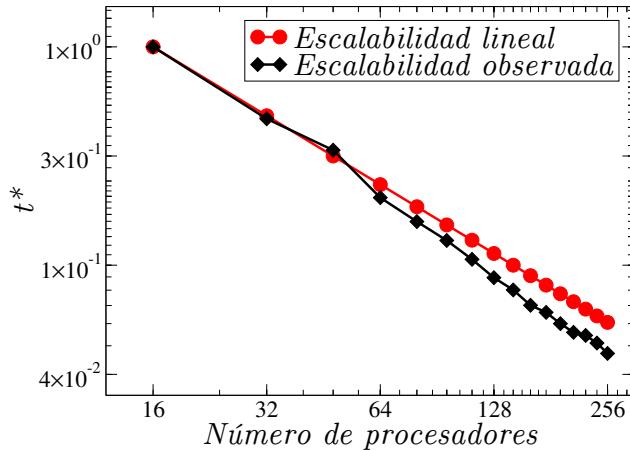


Figura 2.3: Escalabilidad obtenida para el algoritmo propuesto. Los tiempos computacionales medidos en diferente cantidad de procesadores fue normalizada con respecto al tiempo computacional en 16 procesadores, $t^* = t/t_{16p}$ para el problema modelo detallado en el texto. Con 256 procesadores, la escalabilidad perfecta (en círculos rojos) genera una aceleración en el tiempo de computo en un factor $1/t^* = 16$, con respecto al tiempo de computo en 16 procesadores. La escalabilidad obtenida para el algoritmo propuesto (diamantes negros) genera una aceleración $1/t^* = 21.872$, dando una eficiencia de 136.7%.

La razón por la cual la escalabilidad obtenida es supralineal se detalla en la sección 6 de la referencia [45] en el contexto de las ecuaciones de Navier-Stokes, y se debe, esencialmente, a que el costo computacional t_c para el cálculo de las transformadas de Fourier discretas de N puntos es $t_c = \mathcal{O}(N \log(N))$.

2.3 Validación

Dado que los algoritmos y los códigos utilizados fueron desarrollados en esta tesis, se realizaron diferentes pruebas de validación. Estas pruebas, por un lado, tienen como propósito corroborar que los algoritmos desarrollados presentan la convergencia esperada.

Por otra parte, se validaron los códigos con resultados experimentales y soluciones analíticas reportadas en la literatura.

2.3.1 Convergencia de soluciones manufacturadas

Para mostrar las propiedades de convergencia del algoritmo propuesto, estudiamos el error generado en la propagación de un problema manufacturado.

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

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

de 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 evaluando en Γ_- la solución 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 $x_{\min} = y_{\min} = 0\text{cm}$, $x_{\max} = y_{\max} = 3\text{cm}$, y evolucionamos la solución hasta el tiempo final $T = 3\text{ps}$. Utilizamos una descomposición de dominio de 8 subdominios para poder realizar estas pruebas en una PC de escritorio. El coeficiente de dispersión en el medio considerado es isotrópico, 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 flujo escalar analítico

$$\begin{aligned}\phi^{\text{an}}(\mathbf{x}, t) &= \int_{2\pi} u^{\text{an}}(\mathbf{x}, \theta, t) d\theta = k_\phi \times e^{-(x-t)^2 - (y-t)^2}, \\ k_\phi &= \int_{2\pi} e^{-\cos(\theta)^2} d\theta \simeq 4.0528..., \end{aligned}$$

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 las grillas numéricas permanecen fijas en un valor prescripto.

El alto orden de convergencia del algoritmo FC-DOM en paralelo para la solución manufac-
turada propuesta se muestra en la figura (2.4). Esta convergencia es la esperada para los órdenes de convergencia de las aproximaciones numéricas empleadas en cada una de las variables involu-
cradas.

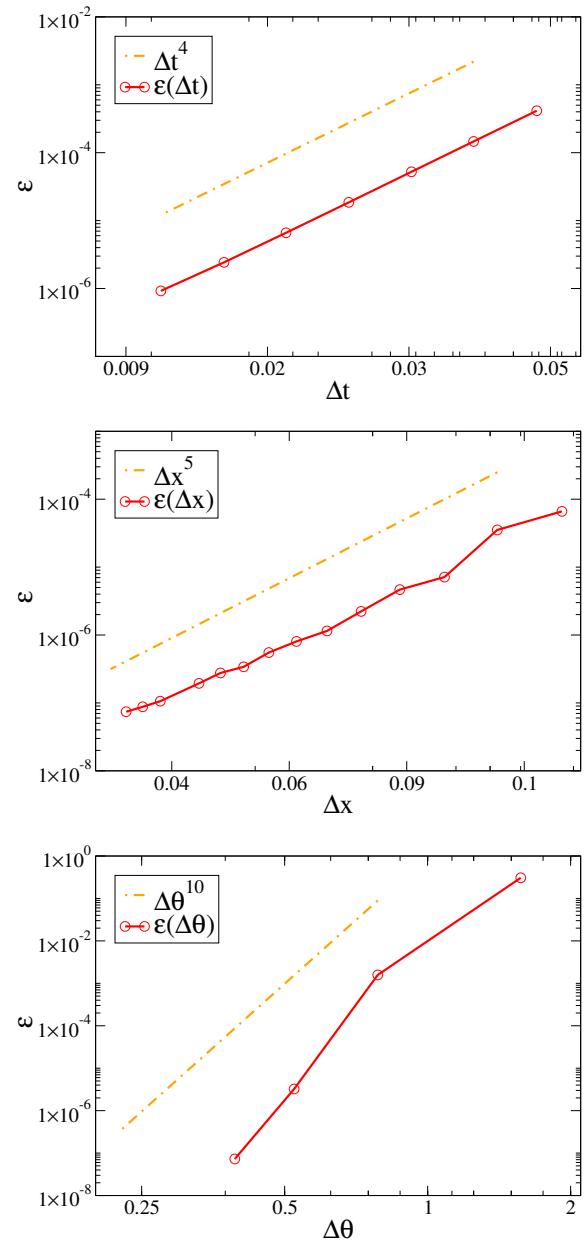


Figura 2.4: Convergencia del algoritmo FC-DOM en paralelo para cada una de las variables en la ETR. La figura se muestra en escala logarítmica. Las líneas rectas discontinuas muestran la pendiente para un orden de convergencia prescripto. El algoritmo presenta convergencia espectral en la variable angular θ .

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 fantomas similes al tejido humano, realizados por en Klose *et al.* [12]. En las mediciones reportadas en dicha referencia, se utilizan fantomas compuestos de resina epoxy y tinta, con una concentración de monoesféricas de dióxido de silicio (SiO_2). La tinta permite ajustar la absorción óptica del fantoma, mientras que las monoesféricas de silicio permiten ajustar las propiedades dispersivas de éste. Las propiedades ópticas del medio (los coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$ y dispersión $b(\mathbf{x})$ y el factor de anisotropía g) fueron determinadas mediante simulaciones de Monte-Carlo, y utilizando la técnica de esfera integradora, así como soluciones analíticas utilizando la aproximación de difusión, y la teoría para la dispersión de ondas electromagnéticas de Mie. Dado que nuestro método resuelve la ETR, y no la aproximación mediante la ecuación de difusión para los fotones (la cual es válida lejos de las fuentes, y en medios de alta dispersión y baja absorción), podemos considerar fantomas que poseen regiones donde hay baja absorción y dispersión, como puede ser el fluido cerebroespinal en la cabeza, o la traquea en un cuello humano en situaciones mas realistas. El arreglo experimental de Klose *et al.* posee simetría 2D, de forma tal que es apropiado para nuestro tratamiento.

Analizaremos dos arreglos experimentales diferentes. En el primero, simulamos un cubo homogéneo, de propiedades ópticas dadas. En el segundo experimento, la geometría del fantoma también es cubica, 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 ($\lambda = 678$ 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 (2.5)

El método de continuación de Fourier extiende la intensidad específica en el borde del dominio, permitiendo el tratamiento de condiciones de borde generales y no periódicas, previniendo 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

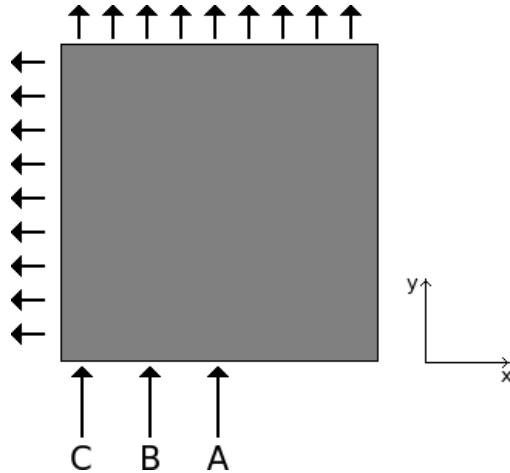


Figura 2.5: Arreglo experimental de Klose *et al.* [12]. Las flechas apuntando hacia fantoma (A, B y C) muestran las tres posiciones diferentes en las que se inyectó la luz láser. Las flechas salientes muestran las posiciones de los detectores con las que se midió la radiación saliente.

Gibbs si no son tratados correctamente. Por esta razón, las funciones que utilizaremos en el modelado de este problema serán funciones suaves. Todas las discontinuidades pueden ser tratadas, dando aproximaciones arbitrariamente precisas mediante la utilización de 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

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

utilizando una función sigmoidea para el perfil temporal, $T(t)$, la cual inicialmente es cero, y suavemente da una transición a uno, dando la solución independiente del tiempo a un tiempo asintótico. La fuente láser vendrá modelada 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 $\sigma = 0.1\text{cm}$ es el reportado para el experimento y \mathbf{x}_s representa la posición del láser. Dado que el medio es altamente dispersivo, toda la información direccional de la

fuente, la cual puede ser valiosa en otro tipo de experimentos, se pierde rápidamente luego de que los fotones atraviesan una distancia de algunos caminos libre medio dentro del fantoma.

Se resuelve la ETR para un número de pasos temporales, hasta que la solución alcanza, numéricamente, el comportamiento asintótico [46], para el cual $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial u}{\partial t} = 0$, y luego se evalúa el operador de la ecuación (2.15) para la posición de 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 de las lecturas obtenidas 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.

En la tabla 2.1 se muestran las propiedades ópticas de los fantomas utilizados.

Tabla 2.1: Propiedades ópticas de los fantomas

μ_s [cm^{-1}]	μ_a [cm^{-1}]	g	n_Ω
58	0.35	0.8	1.56

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 3cm 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 (2.6) se muestra el flujo escalar (2.5) para el arreglo experimental, 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 en el borde que afectan la intensidad de la luz con una dependencia angular particular.

El flujo de fotones que llegan a los detectores, ubicados en el borde $\partial\Omega$ del dominio, se

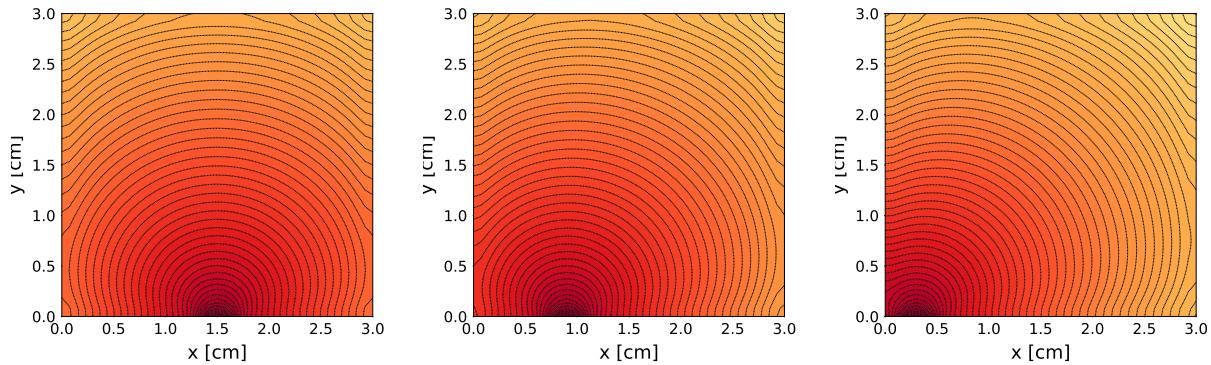


Figura 2.6: Flujo escalar $\phi(\mathbf{x})$ (2.5) obtenido en la simulación para el fantoma homogéneo. Las tres figuras muestran los resultados obtenidos para las fuentes ubicadas en A (izquierda), B (centro) y C (derecha). Debido al decaimiento exponencial inherente a la solución, la figura se presenta en escala logarítmica para apreciar los detalles.

obtuvo mediante la ecuación (2.15). Los resultados se muestran en la figura (2.7), 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 si se considera 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, los cuales se propagan hacia la derecha en 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 la radiación dispersada desde la región izquierda, ya que la radiación dispersada en esta última tiende a escapar por el borde de la izquierda. 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 la teoría ETR independiente del tiempo.

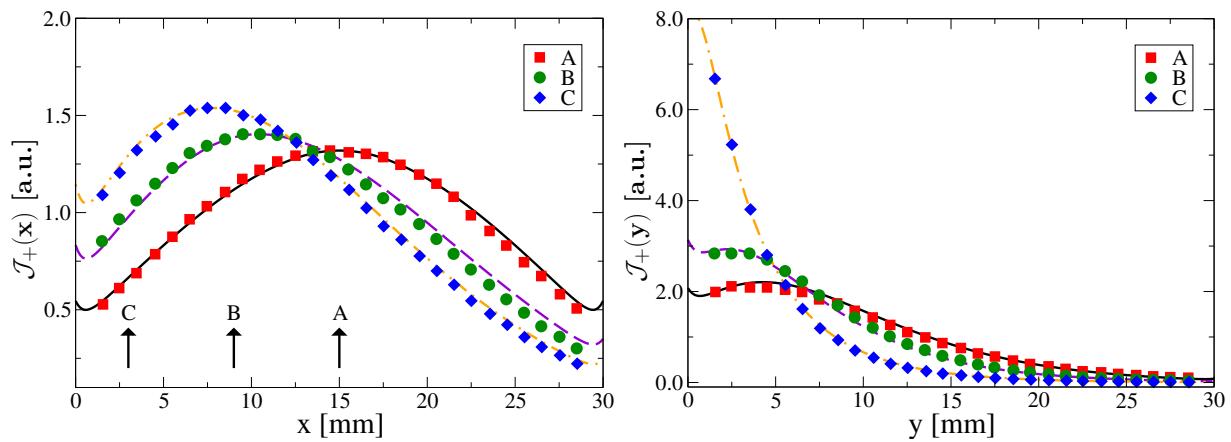


Figura 2.7: Radiación transmitida medida por Klose [12] (símbolos), y simulada mediante el método FC-DOM (líneas) para el fantoma homogéneo.

2.3.2.2 Fantoma inhomogéneo

El segundo fantoma, el cual contiene una región de “vacío” en forma de anillo, rellena de agua de diámetro $d = 2,8\text{cm}$, en donde el coeficiente de absorción y dispersión están dados por $\mu_a = \mu_s = 0$. 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 4cm. 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 evitar el deterioro de la convergencia del método por discontinuidades en los coeficientes, 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.* [47] en otro contexto. Esta función ventana provee una transición suave hacia la región de vacío, previniendo el surgimiento de las oscilaciones debido al fenómeno de Gibbs. En la figura (2.8), 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. (2.9). Estos resultados muestran características similares a los cálculos para el fantoma homogéneo, donde se destaca el efecto de la región de vacío. En esta región, los

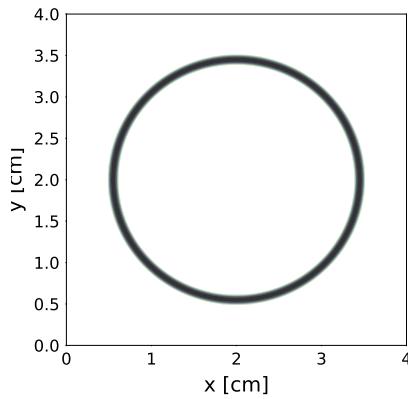


Figura 2.8: Coeficiente de dispersión para el fantoma inhomogéneo, con región de vacío en forma de anillo. Dentro de esta región, los parámetros ópticos dan una transición a $\mu_a = \mu_s = 0$.

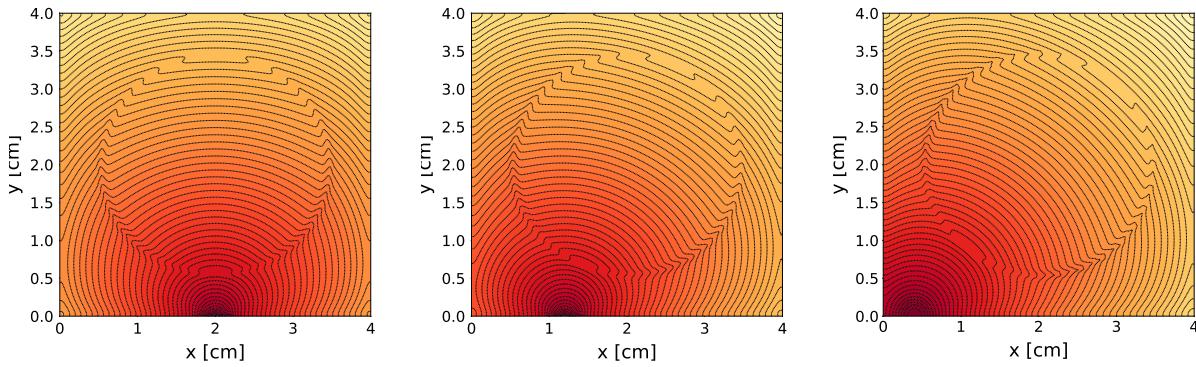


Figura 2.9: Flujo escalar $\phi(\mathbf{x})$ (2.5) obtenido en las simulaciones para el fantoma inhomogéneo. A (izquierda), B (centro) y C (derecha).

fotones viajan libremente, característica que no puede ser capturada mediante la aproximación de difusión.

El flujo de fotones llegando a los 38 detectores ubicados en la frontera del dominio se muestra en la figura (2.10). Se observa un buen acuerdo entre teoría y experimento, aunque con mayores desviaciones respecto al caso del fantoma homogéneo. Estas desviaciones pueden explicarse en 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 [48].

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 traquea en el cuello humano [49]–, 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. Este

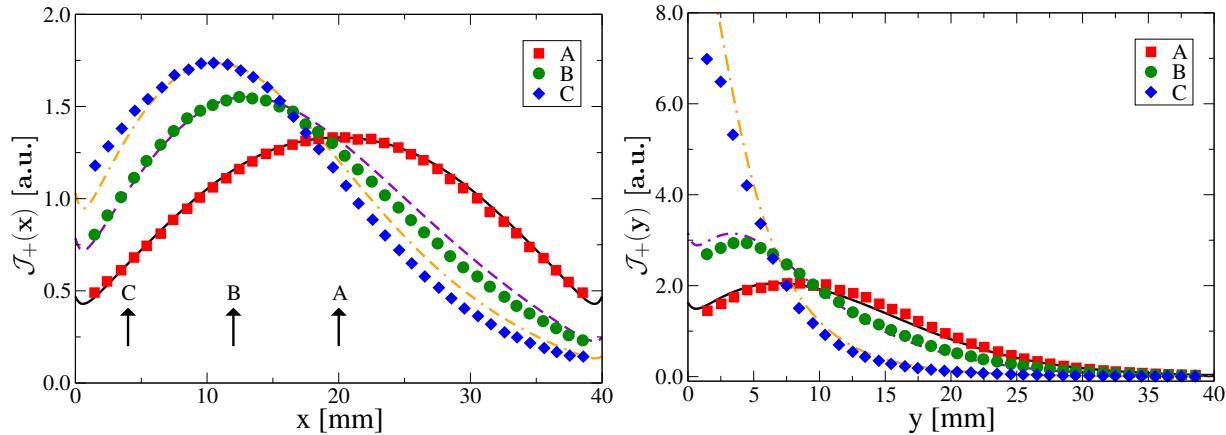


Figura 2.10: Radiación transmitida medida por Klose [12] (símbolos), y radiación obtenida mediante las simulaciones FC-DOM, para el fantoma inhomogéneo (en líneas).

experimento, como el previo, también fue simulado por Klose *et al.* [12] mediante 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, que concierne a un fenómeno numérico importante en la literatura de aproximaciones numéricas a la ETR mediante el método de ordenadas discretas [39]. Para esto, comparamos los resultados FC-DOM con un caso de referencia ampliamente utilizado en transferencia radiativa, que sirve como prueba para lo que se denomina el fenómeno de rayos.

El fenómeno de rayos se origina debido a la discretización de la variable angular $\hat{\theta}$. Debido a dicha discretización, las direcciones posibles para la propagación de los fotones se encuentra limitada a las M direcciones dadas para la cuadratura numérica, $\hat{\theta}_m$. Cuando existen fuentes localizadas, se originan variaciones rápidas en la intensidad específica cerca de las fuentes. El flujo esta restringido a propagarse en las direcciones discretas, dando origen a oscilaciones espurias, conocidas como efecto de rayos.

Reproducimos el caso reportado por Crosbie y Schrenker [50], el cual proporciona flujos considerados exactos [51, 52], utilizando el método FC–DOM descripto anteriormente, para soluciones independientes del tiempo obtenidas por relajación del caso dependiente del tiempo.

Consideramos un dominio bidimensional cuadrado, de lado unitario, el cual contiene un medio puramente dispersivo (sin absorción) con $b(\mathbf{x}) = 1$. La dispersión considerada es isotrópica ($g = 0$). 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 (2.11) se presentan los resultados obtenidos (en líneas), y los valores de referencia (en símbolos). Se observa que el efecto de rayos se presenta para esta prueba para discretizaciones relativamente gruesas de la variable angular, y disminuye al aumentar el número de direcciones. Debido a que el fenómeno de rayos se origina por la discretización de la variable angular, el método FC–DOM no resuelve este fenómeno.

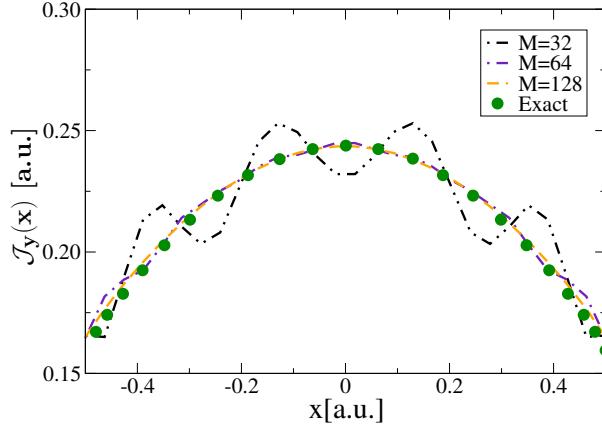


Figura 2.11: Corriente de fotones exacta en la dirección y , $\mathcal{J}_y(x)$ (en círculos), y valores simulados obtenidos por el método FC–DOM, para un número variable de direcciones: $M=32, 64, 128$ (líneas). El gráfico se presenta en unidades arbitrarias (a.u.).

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 que origina el fenómeno (los fotones balísticos que no han sufrido dispersión) decaen rápidamente [51], con la radiación siendo redistribuida en todas las direcciones. El método de contin-

uación de Fourier sólo trata el operador diferencial en las variables espaciales de la ETR, independientemente de la discretización angular. Otras estrategias deben ser consideradas para solucionar el fenómeno de rayos cuando es necesario. Debido a que el tejido biológico es altamente dispersivo, en general en tomografía óptica el medio aprticipante presenta alta dispersión, por lo cual el fenómeno de rayos no suele ser un problema (aún en presencia de regiones de vacío, cuando se encuentran rodeadas de un medio altamente dispersivo).

2.3.4 Comparación con solución analítica

En esta sección validamos nuestros métodos computacionales dependientes del tiempo calculando el flujo escalar, y comparandolo con la solución analítica dada por Paasschens [53] para una fuente puntual en un medio infinito. En el problema presentado por Paaschens, un medio bidimensional infinito, isotrópico y homogéneo es iluminado por una fuente puntual isotrópica ubicada en el origen de coordenadas $s(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \delta(\mathbf{x})\delta(t)$.

La solución para este problema es

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

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 manteniendo una función de fase isotropa.

Para este cálculo, simulamos un fantoma homogéneo con las propiedades ópticas dadas en la tabla 2.1, de donde $c = 0.019\text{cm}/\text{ps}$.

El primer término en la expresión (2.17) representa el pico balístico [53], originado por los fotones que no han sufrido dispersión, y que arriban al punto 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 entrando 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.

Además, 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 2.12 se muestran los resultados obtenidos por ambos métodos junto con la solución analítica. En ambos casos el acuerdo es excelente.

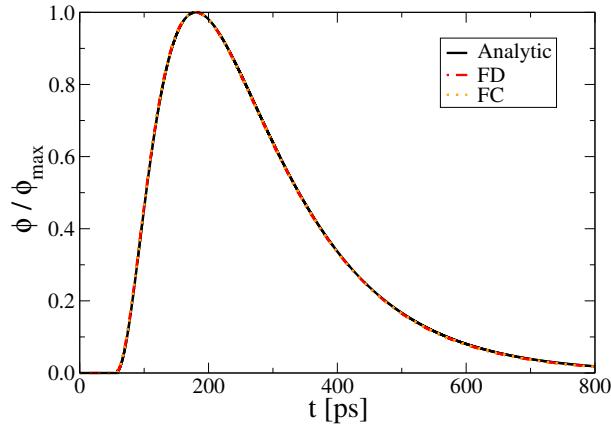


Figura 2.12: Solución analítica ec. (2.17), y soluciones numéricas obtenidas por el método FC-DOM (FC) y FD-DOM (FD) para un medio homogéneo "infinito" iluminado por un pulso puntual.

Para dar una idea cuantitativa de la convergencia obtenida para el método FC en comparación con el método de diferencias finitas empleado, 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 (2.5), y $\phi^n(r, t)$ son los flujos escalares obtenidos a partir de las simulaciones numéricas, con los métodos FC y FD. Utilizamos un tiempo inicial $t_0 = 70\text{ps}$ y un tiempo final $t_f = 400\text{ps}$. El tiempo inicial es elegido de forma tal que el

pico balístico ya pasó el punto de observación r , evitando así el comportamiento singular del mismo. El tiempo final es elegido de forma tal de evitar efectos de borde. En contraste con el acuerdo cualitativo mostrado en la figura 2.12, los errores fueron calculados en este caso sin normalización, y en lugar de utilizar la función Gaussiana como aproximación, la solución analítica (ec. (26) en la referencia [53]) a $t = t_0$ fue utilizada como condición inicial para evolucionar temporalmente la solución hasta el tiempo final t_f . Este procedimiento da una aproximación exacta a la solución a $t = t_0$, evitando errores numéricos asociados al comportamiento singular de la función delta de Dirac. Consideramos el error $\Delta\phi(r, t)$, con $r = 1.27\text{cm}$ 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 del uso del método FC es significativamente menor al obtenido mediante el método FD, en órdenes de magnitud, y para todos los valores de N probados. Esto puede explicarse en el hecho de que el método FC, a diferencia de los métodos de diferencias finitas y elementos finitos, es un método que por ser espectral, 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 propuesto para el caso de soluciones manufacturadas.

La solución manufacturada que utilizamos 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, ciertas condiciones de regularidad de las soluciones subyacentes que se intentan aproximar. Cuando las soluciones, o sus derivadas, no son continuas, los métodos no presentaran el orden de convergencia deseado. El orden de convergencia de los métodos numéricos depende, en general, de la regularidad de la solución y sus derivadas. En particular, en esta sección estudiaremos una estructura de capa límite [54] que existe de forma casi ubicua en las soluciones a la ecuación ETR, que no había sido previamente detallada en la bibliografía, y que representa una dificultad para la solución numérica de la ETR con alta precisión. En esta sección nos valdremos de la versión en una única dimensión espacial de la ETR, para el caso independiente del tiempo. Esto se corresponde a problemas de tres dimensiones con simetría de traslación en dos de las variables espaciales. El modelo en una dimensión independiente del tiempo representa el caso más simple para el estudio de la capa límite, y análisis que realizaremos se aplica a los casos multidimensionales en el dominio temporal.

El contexto de esta sección será ligeramente diferente al de secciones previas, ya que abundará en referencias bibliográficas en el contexto del análisis de transporte de neutrones. La razón de ello es que en el análisis realizado de la bibliografía, encontramos que las escasas menciones que se hacen a esta estructura de capa límite, que a nuestro criterio no había sido correctamente descripta ni detallada, son en el contexto de transporte de neutrones. Esta estructura de capa límite ayuda a explicar problemas numéricos reportados en la bibliografía a lo largo de décadas (en particular, las oscilaciones que ocurren en la llamada “discretización de diamante”), fenómeno numérico el cual, a nuestro criterio, no había sido correctamente comprendido hasta ahora.

Si bien el desarrollo de métodos numéricos de alto orden de convergencia para la ecuación de transporte en problemas más generales de varias dimensiones para los casos más generales escapa al alcance de esta tesis, nuestro trabajo sienta los cimientos para el desarrollo de métodos numéricos altamente eficiente, como lo demostraremos para el caso de una dimensión espacial en el dominio temporal. El desarrollo de métodos numéricos eficientes de las mismas características para los casos multidimensionales requiere de métodos sofisticados como

los elaborados en el contexto de las ecuaciones de Navier-Stokes [55], ya que requieren de métodos de evolución temporal implícitos, por las limitaciones que impone la condición de Courant–Friedrichs–Lewy al resolver con grillas apropiadas estas capa límite de naturaleza exponencial. Debido a la multidimensionalidad de la ETR, la implementación de métodos de evolución temporal implícitos pueden resultar sumamente costosos, y se requiere de estrategias sumamente eficientes para su implementación. Por este motivo, en esta sección nos límitamos al caso 1D, teniendo en cuenta que el mismo análisis aplica al caso multidimensional.

Como se mencionó anteriormente, la ETR es una ecuación de Boltzmann linearizada, la cual provee de un modelo general para el transporte de partículas neutras, que no se limita al transporte de fotones, si no que incluye el caso de transporte de neutrones, la cual es utilizada en el modelado para el diseño y desarrollo de reactores nucleares entre otras disciplinas [6, 39, 56–60]. En esta sección identificamos y caracterizamos a una capa límite que, a pesar de presentarse *e.g.* en sistemas de autofunciones en problemas unidimensionales de transporte [56, Cap. 4], no ha sido correctamente descripta previamente en la literatura. Los problemas numéricos que surgen al intentar resolver numéricamente la ETR son materia de una basta investigación y discusión en la literatura [39, 56–58, 61] que se mantiene vigente.

Esta estructura de capa límite presenta transiciones abruptas en las soluciones a la ETR, con gradientes de carácter exponencial que se dan en regiones cercanas a los bordes, para las direcciones entrantes que se aproximan a la dirección paralela al borde. Físicamente, esto se origina debido a que para dichas direcciones, las partículas atraviesan caminos geométricos relativamente grandes hacia el interior del dominio, lo que puede originar tanto decaíimientos como crecimientos exponenciales en la intensidad específica en dichas direcciones, dependiendo de la naturaleza del problema. La ecuación ETR independiente del tiempo, en una dimensión espacial modela el transporte en una geometría plano paralela descripta en la figura 2.13. Por simplicidad, consideraremos el caso isotrópico, con condiciones de borde de

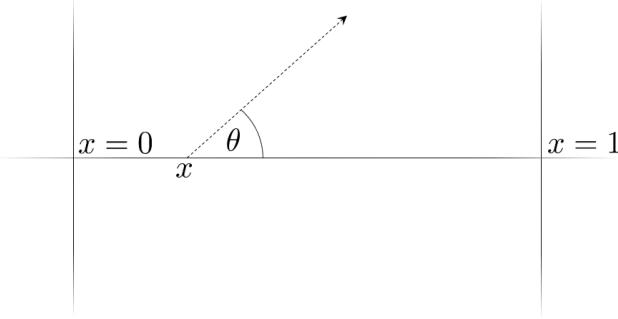


Figura 2.13: Geometría unidimensional: $\xi = \cos(\theta)$.

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 $x = 1$ [62, Cap. 9], teniendo como consecuencia la existencia de gradientes que tienden a infinito para puntos (x, ξ) cercanos a $(0, 0)$ y $(1, 0)$. Estas estructuras de “capa límite”, que 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, solo ocurren para las direcciones entrantes (salientes), con $\xi > 0$ ($\xi < 0$) para puntos cercanos a $x = 0$, (resp. $x = 1$)—dado que es para dichas direcciones que se imponen las condiciones de borde en la ecuación (2.20).

Siguiendo la referencia [62], 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. 2.13 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 diferentes términos de la solución asintótica para la capa límite poseen diferente significado físico. 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 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 2.14, donde se observa claramente la estructura de capa límite cuando $(x, \xi) \rightarrow (0^+, 0^+)$.

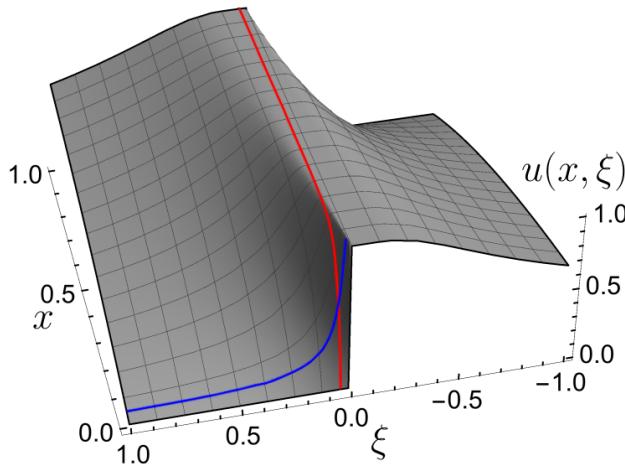


Figura 2.14: Solución (2.25) $u(x, \xi)$ de la ecuación. (2.20) con $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Se observa la capa límite en las variables x y ξ para $(x, \xi) \rightarrow (0^+, 0^+)$ (enfatizadas en las curvas roja y azul).

Los dos métodos numéricos utilizados de manera predominante en la literatura para resolver la ecuación de transporte son el método de armónicos esféricos, y el método de ordenadas discretas. Ambos métodos fallan en la resolución de las estructuras de capa límite, lo cual puede apreciarse en resultados presentados en la literatura [16, 63–66]

En vista de la expresión [67, p. 77] para el término del error en la cuadratura de integración de Gauss–Legendre, ampliamente utilizada en la literatura de ordenadas discretas, 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 -esima 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 qué

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

para alguna constante W ; llamando $V = Wr^{p-j-1}$ 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**.

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

$$\int_0^1 u(x, \xi) d\xi \sim \sum_{i=1}^{M/2} w_i u(x, \xi_i), \quad (2.26)$$

donde, llamando r_i y w_i^{GL} a las abscissas 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 , el cual a su vez limita la rapidez de las variaciones de la capa límite en la variable x . Para resolver la capa límite en la variable x , utilizamos el cambio de variable logarítmico $v = \log(\frac{x}{1-x})$, el cual origina una grilla de discretización espacial con una densidad de puntos exponencial en la cercanía de los bordes, con puntos extremadamente cercanos al borde (sin detrimento en la convergencia de la cuadratura de la integral colisional, en vista de las cotas halladas en la derivada del integrando con respecto a la nueva variable r mencionada anteriormente, las cuales son *uniformes para todo x*), lo cual provee alto orden de convergencia en ambas variables ξ y x .

Resolvemos la ecuación de transporte que resulta en el nuevo dominio computacional

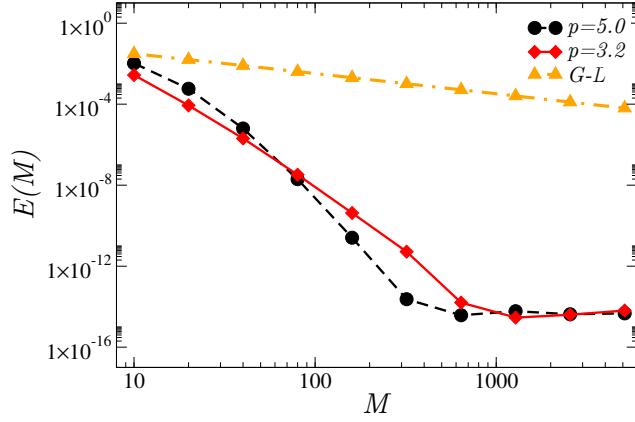


Figura 2.15: Error de la integral numérica comparado con la integral analítica $E(M) = \max_x |\sum_{i=1}^M w_i u(x, \xi_i) - I^{an}(x)|$ obtenida para la solución dada en (2.25) con $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Los errores son comparados con los obtenidos para la cuadratura de la ecuación (2.26), donde también se muestra el error dado por la cuadratura de Gauss–Legendre (G–L) sin el cambio de variable típicamente utilizada.

$[v_{\min}, v_{\max}]$, 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 para la capa límite de la ecuación (2.23). Utilizando las nuevas variables, resulta el problema de transporte dependiente del tiempo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(v, \xi, t) + \xi(2 + 2 \cosh(v)) \frac{\partial}{\partial v} u(v, \xi, t) + \mu_t u(v, \xi, t) &= \frac{\mu_s}{2} \int_{-1}^1 u(v, \xi', t) d\xi' + q, \\ u(v, \xi, t_{\min}) &= 0, \\ u(v_{\min}, \xi, t) &= u_0(x'_{\min}, \xi, t) \quad \forall \xi > 0, \\ u(v_{\max}, \xi, t) &= u_0(x'_{\max}, \xi, t) \quad \forall \xi < 0. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Con el fin de evitar las limitaciones impuestas por la condición de Courant–Friedrichs–Lewy, 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 de la ecuación (2.27) resulta

$$[\bar{\mathbf{1}} + \beta \Delta t \xi_j (2 + 2 \cosh(v)) \bar{\mathbf{D}} + \beta \Delta t \mu_t \bar{\mathbf{1}}] u_j^{n+1} = \sum_{k=0}^{s-1} \alpha_k u_j^{n-k} + \beta \Delta t \frac{\mu_s}{2} \sum_{i=1}^M w_i \tilde{u}_i^{n+1} + \beta \Delta t q^{n+1}, \tag{2.28}$$

donde $u_j^{n+1} = u(v, \xi_j, t^{n+1})$, $t^{n+1} = n\Delta t$, con α_k y β los coeficientes BDF de tercer orden, 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 diferenciación espectral obtenido mediante el método de continuación de Fourier. Este procedimiento resulta en una versión implícita del método FC-DOM.

La fig. (2.16) demuestra las excelentes propiedades de convergencia obtenidas mediante el algoritmo propuesto con $\mu_s = \mu_a = q = 1$. Dado que no se conoce una solución analítica para este problema, el error fue obtenido comparando la solución en diferentes grillas, utilizando una solución de referencia en una grilla mas fina. El alto orden de convergencia obtenido sugiere que los cambios de variables propuestos en las variables x y ξ dan origen a grillas numéricas adecuadas, capaces de resolver las capas límite involucradas en ambas variables. Se definió el error para las figuras (2.16) (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, obtenida en la grilla mas fina. Debido a que las diferentes grillas direccionales poseen diferentes abscisas que no coinciden entre sí, para la figura (c) el error fue calculado utilizando el flujo escalar, con $E(\Delta v, M, \Delta t) = \max_x |\sum_{i=1}^M w_i u(x, \xi_i) - \phi^c(x)|$.

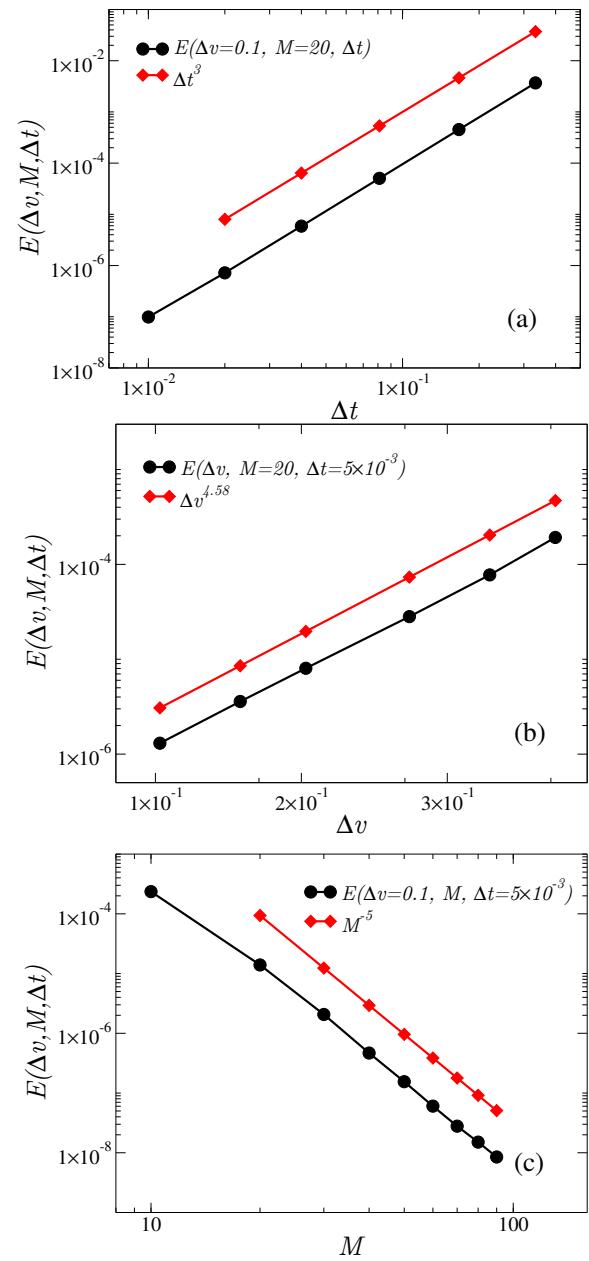


Figura 2.16: En círculos se muestra el error obtenido en diferentes grillas numéricas para el algoritmo propuesto. Las líneas de diamantes indican el orden de convergencia. En el texto se detalla como se determinó el error.

A continuación, utilizaremos el algoritmo propuesto para explorar y demostrar el carácter de las estructuras de capa límite consideradas. Por simplicidad, en el resto de esta sección nos restringiremos al caso de la ETR independiente del tiempo con soluciones obtenidas mediante el algoritmo dependiente del tiempo propuesto, dejando a la solución relajar temporalmente, como se describió en la sección 2.3.2. Las soluciones resultantes independientes del tiempo obtenidas se muestran en las figuras 2.17 a 2.19; estas estructuras de capa límite existen para todos los tiempos en las soluciones obtenidas en el dominio temporal.

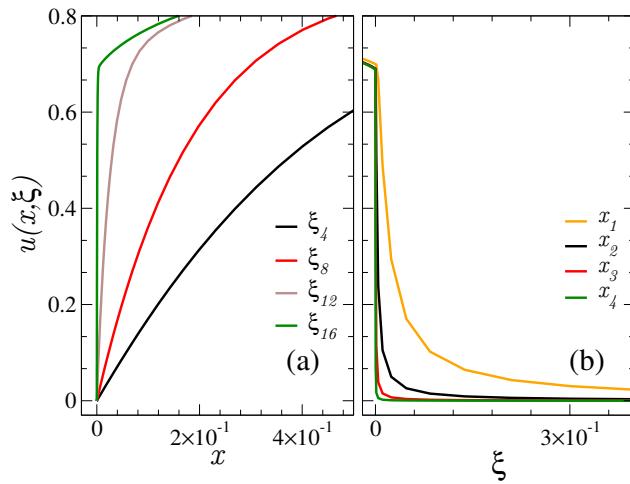


Figura 2.17: Capas límite obtenidas como solución de la ecuación (2.27) para un entorno de $x = 0$ y $\xi = 0$, con $\mu_a = \mu_s = q = 1$ para distintos valores de ξ y de x , con $\xi_i > \xi_{i+1} > 0$ y $x_i > x_{i+1}$.

La fig. 2.17 muestra las estructuras 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 en la figura 2.17, los valores mas chicos de ξ originan capas límite que se comprimen en regiones espaciales mas pequeñas, tal como sugiere el análisis de capa límite realizado previamente.

La fig. 2.18 demuestra la existencia del fenómeno de capa límite incluso para medios altamente difusivos, con $\mu_a = q = 1$ fijo. En esta figura, se muestra la dirección $\xi = \xi_{\min} \simeq 10^{-6}$, para los parámetros $N = 200$, $M = 20$ y $-v_{\min} = v_{\max} = 20$. Claramente, incluso siendo que para los problemas difusivos (donde $\mu_s \gg \mu_a$ y $\mu_s \gg q$ y $\mu_s \gg |x_{\max} - x_{\min}|$ [68]) tienden a ser mas regulares en la variable ξ —debido a que siendo la dispersión el fenómeno dominante, la solución de transporte resulta fuertemente “promediada”

entre las direcciones—, las capa límite que surgen en la variable espacial con coeficiente de dispersión creciente tienden a tener pendientes más abruptas cuando $x \rightarrow 0^+$. De hecho, fue verificado numéricamente que bajo estas condiciones, la solución de transporte independiente del tiempo, $u(x, \xi)$ para distintos valores de ξ difieren, esencialmente, en la región de capa límite. Han habido esfuerzos en la literatura para comprender un tipo de oscilaciones no

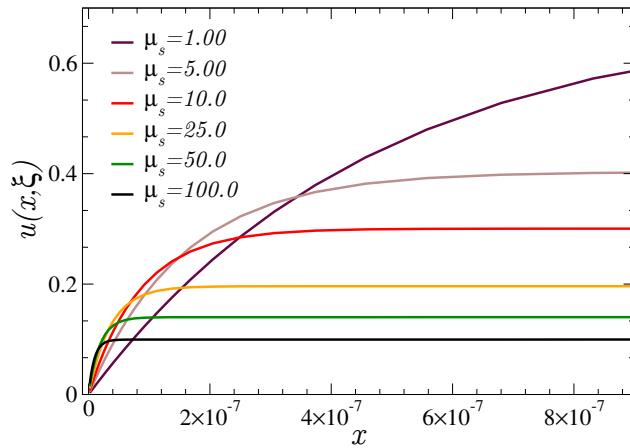


Figura 2.18: Capas límite obtenidas resolviendo la ecuación (2.27), con $\mu_a = q = 1$ para distintos valores de μ_s . Se muestran las soluciones para la dirección $\xi = \xi_{\min} \simeq 10^{-6}$. Notar las pendientes elevadas que existen para $x \rightarrow 0^+$.

físicas, originadas meramente por un fenómeno numérico que surge al resolver la ecuación de transporte empleando el esquema de diferencias finitas de Diamante (DD) [57, 61, 68]. En las referencias [57, 68] se atribuye este fenómeno numérico a condiciones de borde anisotrópicas, capas límite no difusivas y/o a un alto coeficiente de absorción. En esta tesis se demuestra la existencia de estas capa límite incluso para el caso de condiciones de borde isotropicas, y para todos los valores de los coeficientes de absorción y dispersión, con una interpretación diferente a la reportada en la literatura. En particular, nuestra contribución demuestra de forma explícita la existencia de capas límite exponenciales, originadas por la imposición de las condiciones de borde en conjunto con valores de ξ pequeños, lo cual no fue considerado en las dicusiones previas.

Por ejemplo, la referencia [68] trata un problema difusivo de transporte (el Problema 1 en dicha referencia) el cual, luego de reescalar las constantes, puede formularse como an la ecuación (2.20) con $\mu_s = \mu_t = 1000$, $q = 0.1$ y $\mathcal{R}(\xi) = 0$. Este es un problema puramente

difusivo, con condiciones de borde isotrópicas, sobre la que dicha referencia afirma [68, pp. 317] "...dado que el término de orden dominante en la expansión asintótica de la ecuación de transporte analítica es isotrópico, este término no posee una capa límite para este problema". En contraste, la figura 2.19 muestra que las capa límite estan presentes en este problema, aunque no fueron vistas por el autor debido a que no fueron correctamente resueltas. La solución obtenida por el método FC–DOM implícito con el cambio de variable propuesto que se muestra en dicha figura fue obtenido con $M = 40$ direcciones discretas y $N = 400$ puntos en la variable espacial. Para la solución obtenida con nuestra implementación del esquema DD se utilizaron $N = 10000$ puntos en la fig. 2.19— la cual claramente muestra las oscilaciones espurias producidas por el esquema DD en este contexto. En la figura se

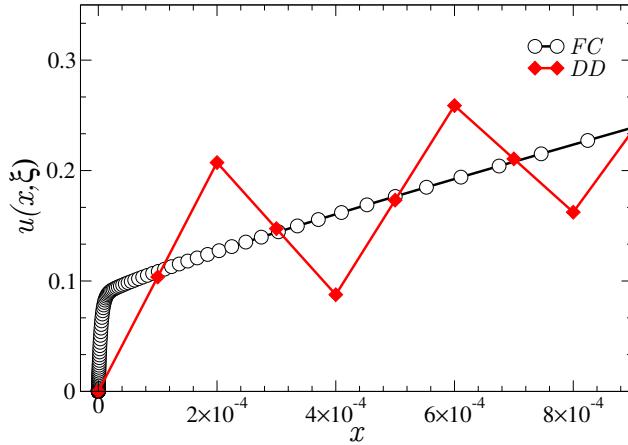


Figura 2.19: Solution $u(x, \xi_{15})$ of Eq. (2.20) with $\mu_t = \mu_s = 1000$, $q = 0.1$ and $\xi_{15} \simeq 10^{-3}$, showing the oscillations originated in the DD scheme due to the large slopes at the boundary layer. $N = 400$ discrete points are used in the spatial variable for the FC method, and $N = 10000$ for the DD method.

muestran las soluciones obtenidas por ambos esquemas en regiones lejanas a la capa límite, con grillas espaciales variables. Puede apreciarse que las oscilaciones originadas por grillas que no resuelven correctamente la capa límite tienen efectos en la precisión de la solución que se propagan hacia todo el dominio espacial.

Físicamente, los valores pequeños de ξ para las direcciones entrantes en puntos espaciales x cerca del borde (cf. fig. 2.13) estan asociados a caminos geométricos largos, lo que da origen a las transiciones abruptas de capa límite observadas. Esta estructura de capa límite, que no fue previamente reportada en la literatura, constituye un fenómeno físico que no fue

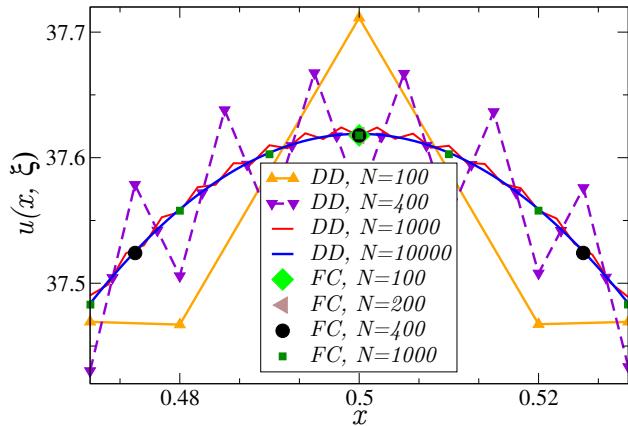


Figura 2.20: Solución $u(x, \xi_{15})$ a la ec. (2.20), de la fig. 2.19, para un número variable de puntos en la grilla espacial, lejos de la región de capa límite. Como se observa en esta figura, los problemas numéricos originados por la capa límite en las cercanías del borde en el esquema DD se extienden a todo el dominio espacial.

correctamente descripto, ni caracterizado por varias décadas, y que como se demostró en la fig. 2.19 y a lo largo de esta sección, posee importantes implicancias en la física y en las simulaciones numéricas de los fenómenos de transporte.

En particular, tanto el análisis asintótico de la capa límite que derivó en la ecuación (2.23), así como las pruebas numéricas, sugieren que existirá una capa límite siempre que en un entorno del borde existan fuentes, haya dispersión, o condiciones de contorno no nulas. La teoría desarrollada predice una capa límite que se desarrollará con gradientes abruptos en regiones espaciales x' de orden $x' \sim \mathcal{O}(\xi/\mu_t(0))$, y en regiones direccionales ξ' de orden $\xi' \sim \mathcal{O}(\mu_t(0)x)$. Si las grillas numéricas empleadas no resuelven correctamente estas regiones, las soluciones obtenidas para problemas que reflejan situaciones realistas para aplicaciones en tomografía óptica (y otras disciplinas donde se requiere la solución a la ecuación ETR con condiciones de contorno arbitrarias) gozarán de un orden de convergencia limitado por la existencia de derivadas no acotadas en el integrando colisional, y por la existencia de soluciones subyacentes que en el dominio espacial discretizado también lucirán como discontinuas debido a la falta de resolución en la grilla numérica, con consecuencias e implicaciones similares a las observadas en esta sección para la integral colisional en la fig. 2.15 para la aproximación numérica del operador diferencial en la ecuación de transporte.

Si bien el desarrollo de algoritmos capaces de resolver las capas límite en más dimensiones espaciales es un tema de investigación vigente que escapa al alcance de esta tesis, los resultados obtenidos en el marco de la misma establecen los cimientos para la elaboración de nuevos métodos numéricos capaces de hacerlo, de relevancia e impacto en varias disciplinas tecnológicas y científicas.

El problema inverso

En las secciones previas abordamos el problema directo de transporte de radiación en la materia mediante la ETR. En síntesis, el problema directo consta de, dados 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 y las condiciones iniciales y de contorno, encontrar la solución $u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ a la ecuación (2.1).

Para el problema inverso en tomografía óptica, alguno de los parámetros ópticos es desconocido, o conocido sólo parcialmente, y se dispone de mediciones experimentales de detectores colocados en el contorno del dominio que se quiere analizar. A partir de las mediciones experimentales de estos detectores, el objetivo es la reconstrucción de uno o más de los parámetros ópticos. En el caso de tomografía por fluorescencia y tomografía de bioluminiscencia, lo que se intenta reconstruir son las fuentes s en la ec. (2.1) [24, 26, 31], que vienen relacionadas a los coeficientes de absorción de los cromoforos y fluoroforos.

En el contexto de esta tesis, nos limitaremos a la reconstrucción del coeficiente de absorción, $a(\mathbf{x})$. La reconstrucción de dicho coeficiente encuentra aplicaciones en tomografía de fluorescencia, y en tomografía óptica. La reconstrucción de las propiedades de absorción en tomografía óptica permite la identificación de tumores [7–9], la obtención de imágenes funcionales del cerebro humano [21–23], y la caracterización de diferentes constituyentes del tejido humano para la obtención de imágenes en medicina. En este trabajo nos enfocamos en la reconstrucción del coeficiente de absorción, pero los algoritmos y las estrategias propuestas pueden ser fácilmente generalizadas para la reconstrucción de otros parámetros.

Generalmente, para aplicaciones en diagnóstico y monitoreo en el tratamiento de tumores,

se asume cierta información previa para el coeficiente de dispersión, $b(\mathbf{x})$, obtenida por técnicas de obtención de imágenes de alta resolución [69, 70] *e.g.* Resonancia Magnética. Este conocimiento previo obtenido por otras técnicas, también brinda información limitada en el parámetro óptico de absorción $a(\mathbf{x})$, como pueden ser los coeficientes de absorción para ciertos tejidos óseos, o el aire en regiones como la traquea del cuello humano, como también se conocen cotas superiores e inferiores para dicho parámetro, lo que permite restringir el espacio de funciones donde se busca minimizar la función objetivo. El uso de técnicas de alta resolución, como la Resonancia Magnética, posee ciertas limitaciones, como el alto costo, la baja disponibilidad de este tipo de aparatos (lo que impone una dificultad a la hora de seguir la evolución de un tratamiento asistido por diagnóstico de imágenes), y adicionalmente los dispositivos utilizados en tomografía óptica son portables, lo que permite tenerlos disponibles para su uso en diversas situaciones. En la figura 3.1 esquematizamos los problemas directos e inverso, tal como son tratados en esta tesis.

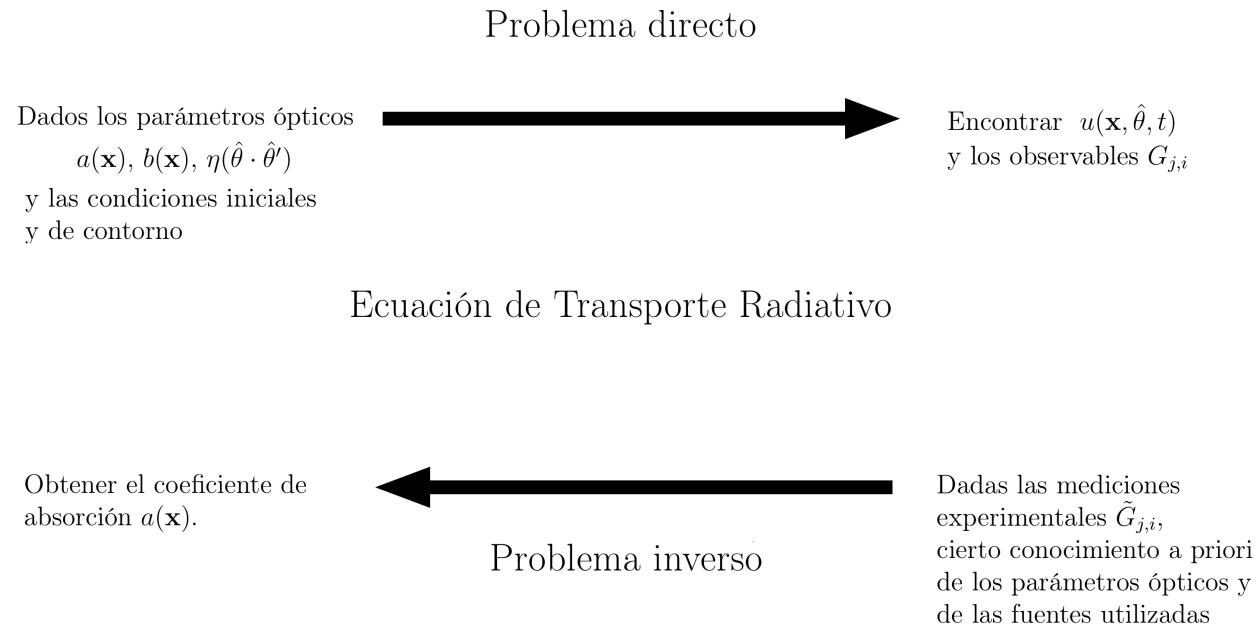


Figura 3.1: Gráfico esquemático de los problemas directo e inverso, tal como son considerados en esta tesis.

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

3.1 El esquema MOBIR

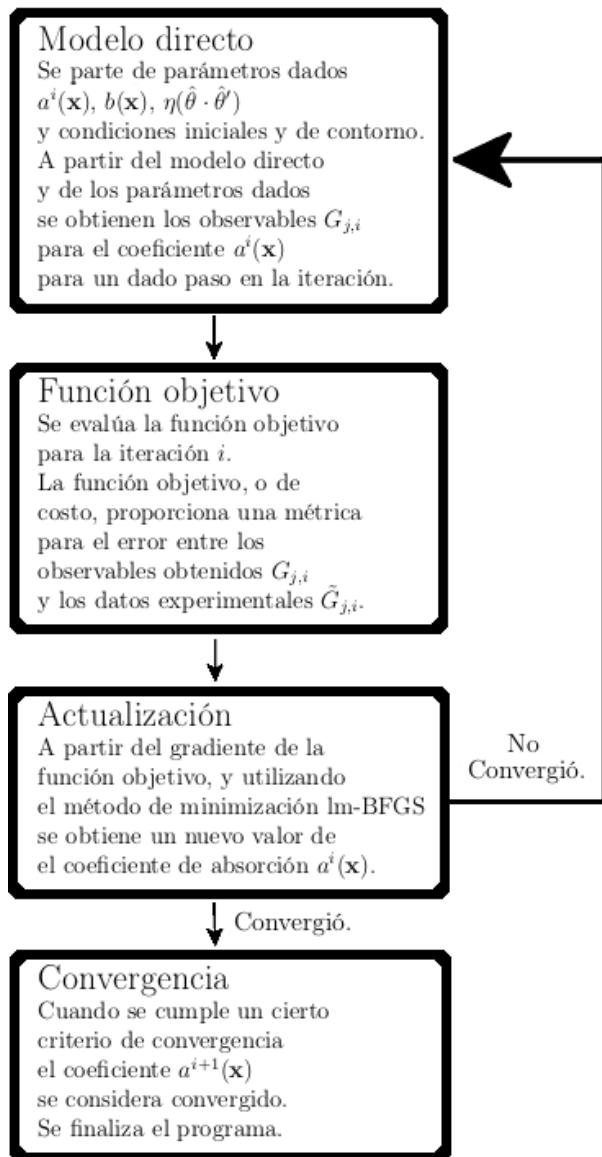


Figura 3.2: Esquema MOBIR. El modelo directo es utilizado para obtener los observables simulados. Se evalúa el error entre los datos experimentales y los simulados por medio de la función objetivo. Luego, utilizando un método de minimización, se actualiza el coeficiente $a(\mathbf{x})^{i+1}$ a ser utilizado en la iteración subsiguiente, hasta cumplir un cierto criterio de convergencia.

En este tesis desarrollamos un algoritmo tipo MOBIR [71, 72] (del inglés, *Model Based Iterative Image Reconstruction*). Este tipo de esquemas se basan en un modelo físico, y un método de minimización iterativo para la reconstrucción del parámetro deseado en el problema inverso.

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].

El problema inverso en tomografía óptica es resuelto como un problema de optimización no lineal. A partir de un valor inicial para el coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})^0$, el coeficiente de absorción es buscado de forma iterativa, actualizando su valor en cada iteración mediante el método lm-BFGS, el cual es un caso particular de los métodos de cuasi-Newton [27, 73, 74]. Partiendo del valor inicial $a^0(\mathbf{x})$, el cual en general es estimado a partir de información obtenida de manera previa por otros métodos de imágenes, el coeficiente de absorción es

actualizado en cada paso de la iteración $i + 1$, según [74]

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

donde $\mathbf{a}^i(\mathbf{x})$ debe ser interpretado como el vector obtenido a partir de el coeficiente de absorción en el dominio espacial Ω discretizado, con α^i el largo del paso de Newton (que lo consideraremos en general $\alpha^i = 1$), y $\mathbf{d}^i(\mathbf{x})$ la dirección de descenso. En el caso del método de Newton (o *steepest descent*), la dirección de descenso vendrá dada por el gradiente $\mathbf{d}^i = -\nabla_a$ de la función objetivo g (que será definida posteriormente). En el contexto de esta tesis emplearemos el método lm-BFGS, ya que este método mostrado ser eficiente en el contexto de tomografía óptica [27, 28, 74].

3.2 El método de minimización BFGS

Siguiendo a Nocedal [73], el método BFGS parte de considerar la expansión de Taylor a segundo orden de la función objetivo que buscamos minimizar, la cual estará evaluada para el coeficiente $\mathbf{a}(\mathbf{x})$, lo notaremos, por simplicidad $g[\mathbf{a}]$

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

donde $t \in (0, 1)$, y $(\mathbf{d}^i)^T$ indica el vector traspuesto a \mathbf{d}^i . Además, si g es al menos dos veces diferenciable se cumple qué

$$\nabla_a g[\mathbf{a}^i + \mathbf{d}^i] \approx \nabla_a g[\mathbf{a}^i] + \int_0^1 \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^i + t\mathbf{d}^i] \mathbf{d}^i dt \quad (3.3)$$

para algún $t \in (0, 1)$. Exigiendo que se anule la derivada de $m(\mathbf{d}^i)$, se llega la dirección de Newton, dada por

$$\mathbf{d}^i = -(\nabla_a^2 g^i)^{-1} \nabla_a g^i. \quad (3.4)$$

El principal obstáculo para la aplicación de la dirección de Newton es la necesidad de calcular la inversa del Hessiano de la función objetivo, $\nabla_a^2 g^i$, lo cual en tomografía óptica, debido a la alta dimensionalidad de la ETR, puede resultar extremadamente costoso.

Por este motivo, el método BFGS implementa una aproximación del Hessiano de la función objetivo (mas concretamente, a la inversa del Hessiano) que es actualizada a cada paso de la iteración. Sumando y restando el término $\nabla_a^2 g \mathbf{d}^i$ en la ecuación (3.3) se llega a

$$\nabla_a g[\mathbf{a}^i + \mathbf{d}^i] \approx \nabla_a g[\mathbf{a}^i] + \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^i] \mathbf{d}^i + \int_0^1 (\nabla_a^2 g[\mathbf{a}^i + t\mathbf{d}^i] - \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^i]) \mathbf{d}^i dt \quad (3.5)$$

Dado que se asume la continuidad de $\nabla_a g$, el término de la integral es $o(||\mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i||)$. Tomando $\mathbf{d}^i = \mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i$ se llega a la relación

$$\begin{aligned} \nabla_a g[\mathbf{a}^{i+1}] &\approx \nabla_a g[\mathbf{a}^i] + \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i] + o(||\mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i||). \\ \therefore \nabla_a^2 g[\mathbf{a}^{i+1} - \mathbf{a}^i] &\approx \nabla_a g[\mathbf{a}^{i+1}] - \nabla_a g[\mathbf{a}^i]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Esta última relación nos permite aproximar el Hessiano utilizando las derivadas de la función objetivo obtenidos para dos iteraciones sucesivas. La inversa del Hessiano de la función objetivo es aproximada exigiendo que se cumpla la última relación en (3.6), que puede escribirse

$$(B^{i+1})^{-1} y^i = s^i, \quad (3.7)$$

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 [73]

$$(B^{i+1})^{-1} = (V^i)^T (B^i)^{-1} V^i + \rho^i s^i (s^i)^T, \quad (3.8)$$

la cual cumple la relación (3.7), 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 (3.4) reemplazando el Hessiano por su aproximación B^i

$$\mathbf{d}^i = -(B^i)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^i]. \quad (3.9)$$

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

$$\mathbf{a}^{i+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^i(\mathbf{x}) - (B^i)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^i] \quad (3.10)$$

Debido a que la aproximación a la inversa del Hessiano, $(B^i)^{-1}$, en tomografía óptica es una matriz que para el problema 2D discretizado, con $N_x \times N_y$ puntos por cada coordenada espacial tendrá dimensiones $B^i \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$, la manipulación y almacenamiento de esta matriz puede ser sumamente costosa. Por ello, para evitar la manipulación y el almacenamiento de esta matriz, se utiliza una versión aproximada de $(B^i)^{-1}$, para la cual 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. Para esto se utiliza una aproximación inicial al Hessiano $(B^i)_0^{-1}$

$$(B^i)_0^{-1} = \gamma^i \bar{\mathbf{1}}, \quad \gamma^i = \frac{(s^{i-1})^T y^{i-1}}{(y^{i-1})^T y^{i-1}}, \quad (3.11)$$

y utilizando la ecuación (3.8) se tiene la relación de recurrencia

$$\begin{aligned} (B^{i+1})^{-1} &= (V^{i-1})^T \dots V^{i-m})^T (B^i)_0^{-1} (V^{i-m} \dots V^{i-1}) \\ &\quad + \rho^{i-m} (V^{i-1})^T \dots V^{i-m+1})^T s^{i-m} (s^{i-m})^T (V^{i-m+1} \dots V^{i-1+1}) \\ &\quad + \rho^{i-m+1} (V^{i-1})^T \dots V^{i-m+2})^T s^{i-m+1} (s^{i-m+1})^T (V^{i-m+2} \dots V^{i-1}) \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \rho^{i-1} s^{i-1} (s^{i-1})^T. \end{aligned} \quad (3.12)$$

de donde se tiene el algoritmo (2) [29, 73]

En esta tesis utilizaremos el algoritmo lm-BFGS para encontrar el mínimo de la función objetivo. En todos los casos, usaremos el valor de $m = 5$, y se parte de un coeficiente inicial $a^0(\mathbf{x})$ dado por cierto conocimiento obtenido previamente, como puede ser la imagen de resonancia magnética de un cuello humano utilizada en la sec. 3.8. Adicionalmente, es posible incluir cotas para el coeficiente de absorción que deseamos reconstruir, de forma tal que el proceso de minimización sea realizado en un subespacio tal que $a^l(\mathbf{x}) \leq a^i(\mathbf{x}) \leq a^u(\mathbf{x})$, de forma tal que el coeficiente de absorción, para cada punto espacial \mathbf{x} se encuentre restringido por las cotas inferior $a^l(\mathbf{x})$ y superior $a^u(\mathbf{x})$. Esto restringe el espacio de soluciones posibles, permitiendo explotar información a priori obtenida por otros métodos de imágenes. Una condición física que debe cumplirse siempre es que la cota inferior para el coeficiente de absorción cumpla $a^l(\mathbf{x}) \geq 0$. Similarmente, se conocen cotas superiores para el coeficiente de absorción, y además, puede utilizarse los valores conocidos de $a(\mathbf{x})$ como cotas sobre aquellos tejidos donde se sabe que la inclusión no puede ocurrir, o si, por la naturaleza del diagnóstico

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  $(B^k)^{-1} \nabla_a g[\mathbf{a}^k] = r.$ 

```

que se está realizando, se espera que una dada inclusión se encuentre dentro de cierto tipo de tejido, restringiendo mediante cotas la reconstrucción para que ocurra dentro del tejido esperado, fijando los valores para el resto de los tejidos, como puede ser, la existencia de una región de absorción y dispersión nula en la traquea para el cuello humano, o las regiones óseas para el caso en el que se intenta dar un diagnóstico para un tipo de tumor específico, como lo puede ser para el cáncer de tiroides, donde se sabe que el tumor se encontrará localizado en el tejido blando. El procedimiento por el cual se imponen dichas cotas en los coeficientes puede encontrarse 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

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[u] = & \frac{1}{c} \frac{\partial u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)}{\partial t} + \hat{\theta} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) + a(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) \\ & + b(\mathbf{x}) \left[u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) - \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') u(\mathbf{x}, \hat{\theta}', t) d\theta' \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[u] &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t=0) &= 0, \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Omega \times S^1 \\ u(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) &= f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu})u(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t) + q(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad (\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_- \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde todas las cantidades fueron definidas en la sección 2.1.

Para concluir esta sección, mencionamos la “función ventana” [75]

$$w(v) = \begin{cases} 1 & \text{for } v = 0, \\ \exp\left(\frac{2e^{-1/|v|}}{|v|-1}\right) & \text{for } 0 < |v| < 1, \\ 0 & \text{for } |v| \geq 1. \end{cases} \quad (3.15)$$

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 ángular de los pulsos láser, así como el modelado de la sensibilidad espacial de los fotodetectores.

3.4 El método de Fuentes Múltiples Superpuestas

El problema inverso en tomografía óptica en el dominio temporal, es ubicuamente resuelto utilizando el denominado “método de barrido” (MB), del inglés, “Transport Sweep”. En éste

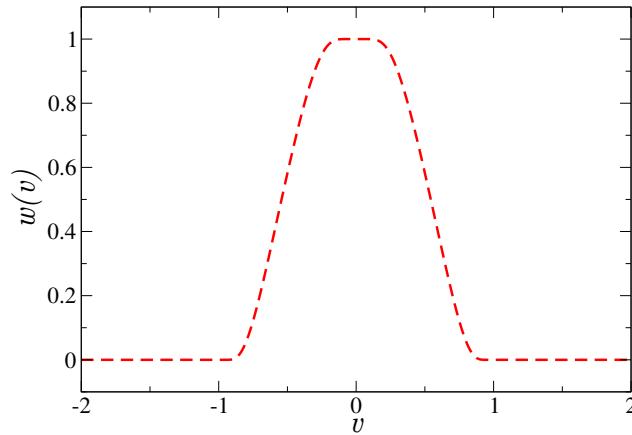


Figura 3.3: Grafico de la función ventana $w(v)$ (3.15) utilizada para modelar los perfiles temporales y ángular de las fuentes láser, así como la sensibilidad espacial de los fotodetectores.

método, se requiere la resolución de un problema directo y un problema adjunto para cada fuente $q_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$, $i = 1, \dots, N_q$ en la ecuación (3.14), con N_q el número total de fuentes empleadas. El mayor inconveniente que encuetra este método es que el costo computacional incrementa linealmente con el número de fuentes utilizadas. En general, cada fuente permite sensar diferentes partes del dominio espacial en consideración. Dado que la intensidad lumínica de las fuentes laser empleadas sufre una atenuación de tipo exponencial, debido a la absorción y a la dispersión en el interior del medio participante, en general se requiere la utilización de fuentes múltiples. Debido a la atenuación exponencial de la intensidad lumínica, en general, la iluminación entre fuentes lejanas no suele afectarse entre sí. Motivados por este hecho en esta tesis introducimos un método de Fuentes Múltiples Simultáneas (FMS). Este método se vale del uso de “fuentes generalizadas”, las cuales pueden representar una o múltiples fuentes láser, las cuales pueden ser activadas, con ciertos retrasos temporales, de forma superpuesta en un único problema directo, lo que brinda ventajas en el costo computacional que serán demostradas mas adelante.

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

$$q = q_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \sum_{k=1}^{N_s} s_{k,i}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t), \quad i = 1, 2, \dots, N_q \quad (3.16)$$

para ciertos valores enteros de N_q y N_s . Utilizando la función ventana (3.15), definimos

$$s_{k,i}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = \exp(-|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k,i}|^2/2\sigma_x^2)w(\beta_{k,i})w(\gamma_{k,i}), \quad (3.17)$$

para las posiciones de las fuentes láser $\mathbf{x}_{k,i} \in \partial\Omega$, con el diámetro de la iluminación láser sobre la superficie del dominio $\partial\Omega$ siendo σ_x , y la distribución angular $\beta_{k,i} = |\theta - \theta_{k,i}|/\sigma_\theta$, donde $\theta_{k,i}$ ($0 \leq \theta_{k,i} < 2\pi$) y σ_θ modelan el ángulo para la dirección $\hat{\theta}_{k,i}$ en la que apunta el láser y la distribución angular de la radiación para el láser (k, i) -ésimo, respectivamente. Similarmente, $\gamma_{k,i} = |t - \tau_{k,i}|/\sigma_t$, modela el pulso láser, con retardos temporales $\tau_{k,i} \geq 0$ para diferentes fuentes láser, y donde σ_t denota la mitad de la duración total del pulso láser.

Para las fuentes en el método MB fijamos $N_s = 1$ y, en general, $N_q > 1$ (se utiliza una secuencia de $N_q > 1$ fuentes láser, requiriendo la resolución de N_q pares de problemas directos y adjuntos por cada iteración en el problema inverso), mientras que en el método FMS propuesto, utilizamos $N_s > 1$ y $N_q = 1$ (de forma que $N_s > 1$ fuentes laser son superpuestas en una única “fuente generalizada”, requiriendo por lo tanto la resolución de un único par de problemas directo y adjunto por iteración para la resolución del problema inverso). En cada “barido” del método MB cada una de las $N_q > 1$ fuentes laser es aplicada de forma independiente de las otras, con todos los retardos temporales $\tau_{i,1} = 0$ ($1 \leq i \leq N_q$), y se guardan los valores registrados por todos los fotodetectores utilizados [28, 76]. En el método FMS propuesto, en cambio, se utiliza una única fuente generalizada ($N_q = 1$), la cual incorpora las contribuciones de las $N_s > 1$ fuentes laser alrededor de $\partial\Omega$, con retardos temporales $\tau_{1,k} \geq 0$. Debido a los retardos temporales utilizados, en el método FMS se requieren simulaciones mas largas para la resolución de los problemas directo y adjunto, en comparación con las simulaciones requeridas para cada una de las $N_q > 1$ fuentes en el método MB. Sin embargo, como se demuestra en la sección 3.8, la estrategia de fuentes simultáneas permite obtener ganancias significativas en términos del costo computacional total para todo el proceso de inversión, sin detrimiento en la precisión de la reconstrucción obtenida.

3.5 La función objetivo y el formalismo del método ad-junto para el cálculo de su gradiente

Tanto el método MB como el método FMS se basan en el uso de $N_d \geq 1$ 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

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

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 (3.15), y llamando $\sigma_d > 0$ al área efectiva de los detectores, el factor $w(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|/\sigma_d)$ caracteriza la sensibilidad espacial del detector j -ésimo, y dS denota el elemento de área en $\partial\Omega$. Claramente, 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 tenemos un número N_d de detecciones resueltas en el tiempo. El número y la ubicación de los detectores permanecen fijos durante el proceso de inversión.

En vista de las consideraciones hechas previamente en la sección 3, en lo que sigue haremos explícita la dependencia del operador de transporte \mathcal{T} y de la solución u en la ecuación (3.13) 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 (3.14) con $q = q_i$ (donde se incluyó un detalle creciente de derecha a izquierda en la ecuación (3.21) concerniente a la dependencia de u_i en a , y las variables espaciales, angular y temporal), y donde, para un dado número de mediciones $N_q \times N_d$ en los detectores $\tilde{G}_{j,i}$ (N_d detecciones $\tilde{G}_{j,i}$ para cada una de las N_q fuentes generalizadas q_i) y utilizando la ecuación (3.18), g_i denota 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 secciones 3.2 y 3.2.1), 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 . Aquí notamos $\frac{d}{da}$ a la diferenciación de Gateaux [77]: para una dada función $a = a(\mathbf{x})$ y una dada perturbación $\delta a = \delta a(\mathbf{x})$, la derivada de Gateaux de una dada funcional $h = h[a]$ en la dirección δa se define según

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

Puede darse una definición similar para las derivadas parciales de Gateaux de un operador $w = w[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ (como, *e.g.*, el operador (3.13), la solución $u = u[a] = u[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ a la ecuación (3.14), 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, utilizamos las derivadas de Gateaux para la composición de funcionales y operadores, para los cuales se satisface la regla de la cadena. Por ejemplo, para la composición $h \circ w[a] = h[w[a]]$ se tiene la deintidad de la regla de la cadena

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

En nuestro contexto, podemos ilustrar esta relación como sigue. Al considerar una perturbación ε por la función $\delta a = \delta a(\mathbf{x})$ del coeficiente a , resulta el coeficiente perturbado $(a + \varepsilon \delta a)$, de donde se tiene el operador perturbado $w[a + \varepsilon \delta a]$ (en nuestro caso, el operador perturbado puede ser *e.g.* la solución $w[a + \varepsilon \delta a]$ del problema (3.14) perturbado con coeficiente de

absorción ($a + \varepsilon\delta a$); cf. ec. (3.20).) 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

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

y, por lo tanto, claramente, el 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), $\frac{d(g_i \circ u_i)}{da}[a; \delta a] = \mathcal{G}[a; \delta a]$ donde

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

Claramente, 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 substituyendo en esta ecuación la derivada $\frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a]$, para cada a discretizado en el proceso de minimización mediante el algoritmo lm-BFGS. Sin embargo, la evaluación de estas derivadas parciales utilizando, por ejemplo, un esquema de diferencias finitas, requiere la evaluación de una

solución al problema de transporte (3.14) para cada dirección δa , lo cual claramente constituye un costo computacional inabordable para cualquier problema realista. Para evitar este costo computacional nos basamos en la estrategia del método adjunto, que se describe a continuación.

Para evaluar la derivada de la ec. (3.29) de forma eficiente debemos eliminar la dependencia en la derivada $\frac{\partial u_i}{\partial a}[a; \delta a]$ del lado derecho de dicha ecuación. 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 valores iniciales y de contorno (3.14). En particular, para la primera línea en (3.14) 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 (3.14), resulta la relación

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

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, 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 $\lambda(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$. (Más abajo también incorporamos ecuaciones adicionales relacionadas a las condiciones iniciales y de contorno en la ec. (3.14)).

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 dada función $\lambda_i = \lambda_i[a](\mathbf{x}, \hat{\theta}, t)$ obtenemos de (3.33) la ecuación

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

para la cual, eligiendo 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 $\Omega \times [0, 2\pi] \times [0, T]$) mas 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

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

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

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

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

Claramente, la cantidad $\frac{\partial u_i}{\partial a}$ en (3.40) resultara eliminada, como es deseado, sí y sólo sí

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

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 satisface 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 desafinante $\frac{\partial u_i}{\partial a}$.

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 sí 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:

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

En lo que sigue, llamaremos al operador que interviene en esta ecuación $\mathcal{T}^*[\lambda_i[a], a]$.

Para cumplir la condición (ii) imponemos la condición “final” $\lambda_i(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t = T) = 0$, dado que en vista de (3.14), 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 las integrales quedan restringidas 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. (3.14), $\frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}, t) = f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) \frac{\partial u_i}{\partial a}(\mathbf{x}, \hat{\theta}_r, t)$ ($(\mathbf{x}, \hat{\theta}) \in \Gamma_-$) 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 $\hat{\theta}_r = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}$, con $\bar{\mathbf{R}}$ 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 qué $\hat{\theta} = \bar{\mathbf{R}}\hat{\theta}_r$:

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

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

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

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 sí y sólo sí

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

En suma, llamando $\mathcal{T}^*[\lambda_i[a], a] = -\frac{1}{c} \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} - \hat{\theta} \cdot \nabla \lambda_i + (a + b) \lambda_i - b \int_{S^1} \eta(\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}') \lambda_i d\theta'$, hemos demostrado que se cumplirán las condiciones (i), (ii) y (iii) si se eligen los “coeficientes” λ_i de forma tal que sea solución 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 $T \geq t \geq 0$, con condición final homogénea a tiempo $t = T > 0$. Una vez hallada la función λ_i , la componente del gradiente funcional (3.43) en la dirección δa puede obtenerse de forma computacionalmente eficiente por integración, que en vista de la relación (3.34), puede expresarse 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, y se evaluará la precisión del método adjunto para el cálculo del gradiente funcional en la sección subsiguiente, mediante comparación con la derivada funcional obtenida por diferencias finitas.

Si bien nuestra derivación del problema adjunto es independiente de otras, y a saber de los autores, no se ha realizado en la bibliografía una derivación del problema adjunto incluyendo condiciones de borde de Fresnel, en la bibliografía se ha dado una interpretación física al problema (3.51) para el caso de condiciones de contorno de vacío (donde $f(\hat{\theta} \cdot \hat{\nu}) = 0$) [76, 78]. En dicha interpretación física del problema adjunto, partículas *virtuales* de intensidad dada por las diferencias $G_j[u_i] - \tilde{G}_{j,i}$ entre los registros en los detectores obtenidos en las simulaciones $G_j[u_i]$ para un dado coeficiente $a(\mathbf{x})$ y los registros de los detectores experimentales $\tilde{G}_{j,i}$ 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). 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 los términos de borde se anulen, 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 λ_i obtenida como solución del problema adjunto (3.51). Con este fin, consideraremos un problema del tipo (3.14)

con condiciones de borde de Fresnel, que se describe a continuación—y el cual sirve para ilustrar, en particular, la capacidad de la expresión para la derivada funcional de producir el gradiente necesario en los métodos de minimización empleados, para el método adjunto desarrollado en este trabajo (el cual incluye las condiciones de borde de Fresnel). Para esto, 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 $n_s = 1$ en el exterior del dominio Ω . Por simplicidad utilizaremos $\delta a = 1$, con coeficientes espaciales de absorción y dispersión constantes $a(\mathbf{x}) = a$ y $b(\mathbf{x}) = b$, y, sin perdida de generalidad, consideramos una única fuente generalizada $q_1 = q$ para ambos métodos, donde el método MB incluye una única fuente láser incidente en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0.0)$, y el método FMS consiste en la combinación de cuatro fuentes láser, cada una ubicada en el centro del dominio espacial cuadrado Ω , con $\mathbf{x}_{1,s} = (1.5, 0.0)$, $\mathbf{x}_{2,s} = (3.0, 1.5)$, $\mathbf{x}_{3,s} = (1.5, 3.0)$ y $\mathbf{x}_{4,s} = (0, 1.5)$ (en la sección ?? se darán mas detalles sobre el modelado de las fuentes). En estas pruebas, empleamos un único detector para ambos métodos, con $\mathbf{x}_d = (0.0, 0.75)$. Los retardos temporales requeridos por el método FMS se fijan dando un desplazamiento temporal inicial de 50ps entre fuentes sucesivas, comenzando con la fuente $\mathbf{x}_{1,s}$ ubicada en y_{\min} , y sucediéndose el resto de las fuentes en sentido antihorario, en el orden dado por la sucesión $\mathbf{x}_{1,s}$, $\mathbf{x}_{2,s}$, $\mathbf{x}_{3,s}$ y $\mathbf{x}_{4,s}$. Utilizamos una duración total de 60ps para cada pulso, y el sistema fue evolucionado para ambos métodos MB y FMS hasta un tiempo final de 600ps. Utilizamos una discretización espacial con $N_x = N_y = 200$ puntos 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) demuestra el acuerdo observado entre los valores de la derivada

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	0.00008	0.00009
0.35	20	0.0	0.00008	0.00097
0.35	8.0	0.0	0.00027	0.00016
0.35	0.1	0.0	0.00009	0.00026

funcional obtenida por diferencias finitas y por el método adjunto para varios regímenes de transporte, incluyendo diferentes valores del coeficiente de sipersión b y del coeficiente de anisotropía g , para ambos métodos MB y FMS. El acuerdo observado en todos los casos es excelente, y sugiere que las grandes ganancias que se obtienen en términos de costo computacional mediante el méotodo adjunto, el cual para el cálculo del gradiente funcional total implica un factor del órden de $(N_x + 1) \times (N_y + 1) = 40,401$, no impacta en la presición con la que se determina dicho gradiente.

3.5.2 Cálculo numérico del gradiente funcional

Los gradientes numéricos utilizados en las secciones siguientes se obtuvieron resolviendo los problemas directos y adjuntos, seguidos del uso de la versión discreta de la ecuación (3.52) para un número de perturbaciones $\delta a(\mathbf{x})$ —las cuales son elegidas de forma tal de que provean una variación del coeficiente de absorción $a(\mathbf{x})$ en cada uno de los puntos del dominio espacial Ω discretizado $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} \in \Omega$ para la discretización $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} \in \Omega$ donde $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} = (x_{\min} + [\ell_1 - 1]\Delta x)\hat{x} + (y_{\min} + [\ell_2 - 1]\Delta y)\hat{y}$, $\ell_1 = 1, \dots, N_x + 1$, $\ell_2 = 1, \dots, N_y + 1$. Para la perturbación $\delta a(\mathbf{x})$ elegimos una función de forma piramidal, la cual es igual a uno en el punto $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2} \in \Omega$, y se anula en y más allá de los primeros vecinos de dicho punto en la grilla discreta. La función piramidal

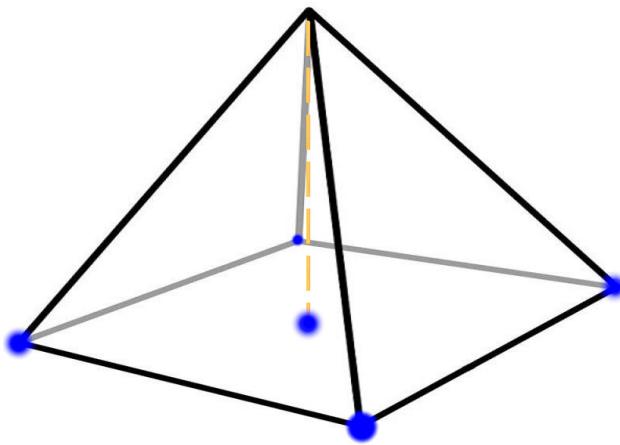


Figura 3.4: Función de forma piramidal utilizada para producir las variaciones en el coeficiente de absorción. Esta función vale uno en el punto $\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}$ y se anula a partir de los primeros vecinos de la grilla discreta.

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

$$\nabla_a g(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}) \sim - \sum_{m,j} \lambda_{\ell_1, \ell_2, m, j} u_{\ell_1, \ell_2, m, j} \Delta\theta \Delta x \Delta y \Delta t, \quad (3.56)$$

donde $\lambda_{\ell_1, \ell_2, m, j} \sim \lambda(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}, \theta_m, t_j)$ y $u_{\ell_1, \ell_2, m, j} \sim u(\mathbf{x}_{\ell_1, \ell_2}, \theta_m, t_j)$. 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 función generalizada $q = q_i$. En cambio, el uso de la ecuación (3.54) demanda la resolución de un número mucho más grande de problemas directos, donde debe evaluarse la resolución de $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ problemas de transporte, uno para cada perturbación del coeficiente $a(\mathbf{x})$ en el dominio discretizado.

Cabe mencionar también que el método adjunto requiere el almacenamiento en memoria de las soluciones completas a los problemas directos y adjunto de transporte para varios pasos temporales para realizar las integrales correspondientes (3.56). El algoritmo paralelo propuesto en esta tesis es apropiado para este problema, ya que permite dividir simultáneamente el costo computacional y los requerimientos de memoria en sistemas distribuidos.

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 $1 \leq \ell_2 \leq N_y + 1$ para ciertos valores $\tilde{G}_{j,i}$, con una única fuente y un único detector ubicados en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)$ y $\mathbf{x}_d = (1.0, 0)$, respectivamente.

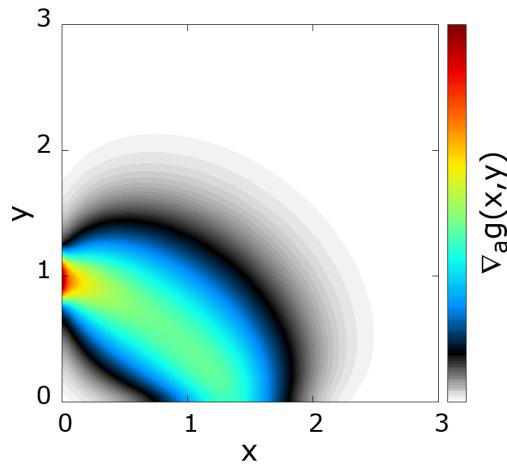


Figura 3.5: Gradiente espacial (3.56) para todas las direcciones discretas posibles $1 \leq \ell_1 \leq N_x + 1$ y $1 \leq \ell_2 \leq N_y + 1$, con una única fuente y un único detector ubicados en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)$ y $\mathbf{x}_d = (1.0, 0)$ respectivamente. Dado que se utilizaron datos artificiales,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

3.6 Datos sintéticos con fuentes láser pulsadas

En las situaciones realistas en tomografía óptica, tipicamente radiación colimada proveniente de una fuente láser incide en la superficie del dominio en estudio. En esta sección damos algunos detalles para el modelo directo utilizado en las siguientes secciones para la resolución del problema inverso. Modelamos la radiación colimada de las fuentes láser por medio de una función picuda de la variable θ , donde el pico de esta función coincide con la dirección

del láser incidente. Resolvemos la ecuación (2.1) con condiciones de Fresnel, utilizando los parámetros $a(\mathbf{x}) = 0.1/\text{cm}$, $b(\mathbf{x}) = 20/\text{cm}$, $g = 0.8$, $n_\Omega = 1.4$ y $n_s = 1.0$, en un dominio espacial $\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] = [0, 3] \times [0, 3]$.

Mostraremos resultados para el método MB, y el método FMS. En el método MB empleamos una única fuente generalizada (3.16), con $N_q = N_s = 1$, centrada en $\mathbf{x}_{1,1} = (1.5, 0)$, apuntando en la dirección normal a la superficie, de forma qué $\theta_{1,1} = \pi/2$, con $\sigma_\theta = \pi/4$. En esta configuración, una fuente láser inyecta radiación y_{\min} en la dirección normal a $\partial\Omega$ (Fig. 3.6).

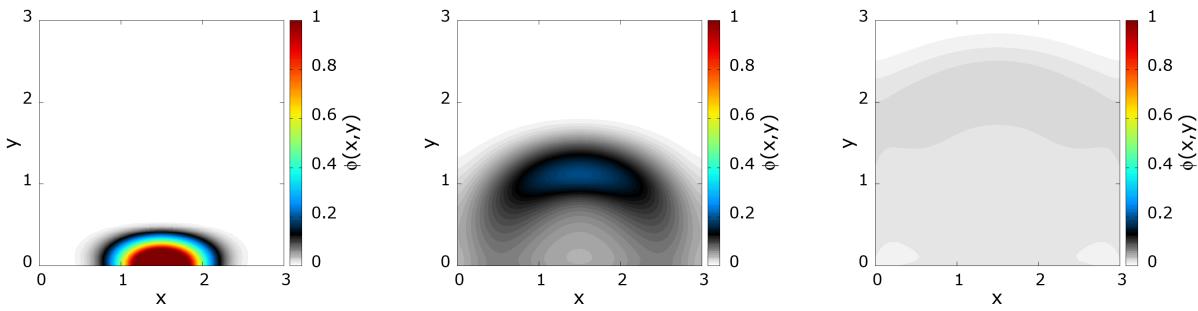


Figura 3.6: Simulación para el modelo directo MB utilizando el método FC-DOM en paralelo 1 presentado en la sección 2.2.4. En la figura se muestra el flujo escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$, ec. (2.5) para tres tiempos diferentes utilizando el método MB con una única fuente generalizada. De izquierda a derecha se tiene $t = 30\text{ps}$, $t = 100\text{ps}$ y $t = 170\text{ps}$, para una fuente láser inyectando radiación en $\mathbf{x}_s = (1.5, 0)\text{cm}$. La figura muestra la evolución temporal de una “onda de flujo de fotones” difusos.

Para el método FMS, utilizamos una única fuente generalizada, con cuatro fuentes superpuestas, de forma qué $N_q = 1$ y $N_s = 4$. Cada fuente inyecta radiación en la dirección normal a $\partial\Omega$ a través del centro de las caras, con retardos temporales $\tau = 200\text{ps}$ entre fuentes sucesivas, comenzando con 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 y_{\max} (Fig. 3.7).

Para las reconstrucciones numéricas presentadas en la sección siguiente, utilizamos datos “sintéticos”, esto es, datos generados de manera numérica con el algoritmo FC-DOM, para un dado coeficiente $a(\mathbf{x})$. Dado que en situaciones realistas se espera que los datos experimentales presenten ruido, agregamos a los datos sintéticos un 10% de ruido aleatorio a los datos sintéticos simulados utilizados en las reconstrucciones del problema inverso.

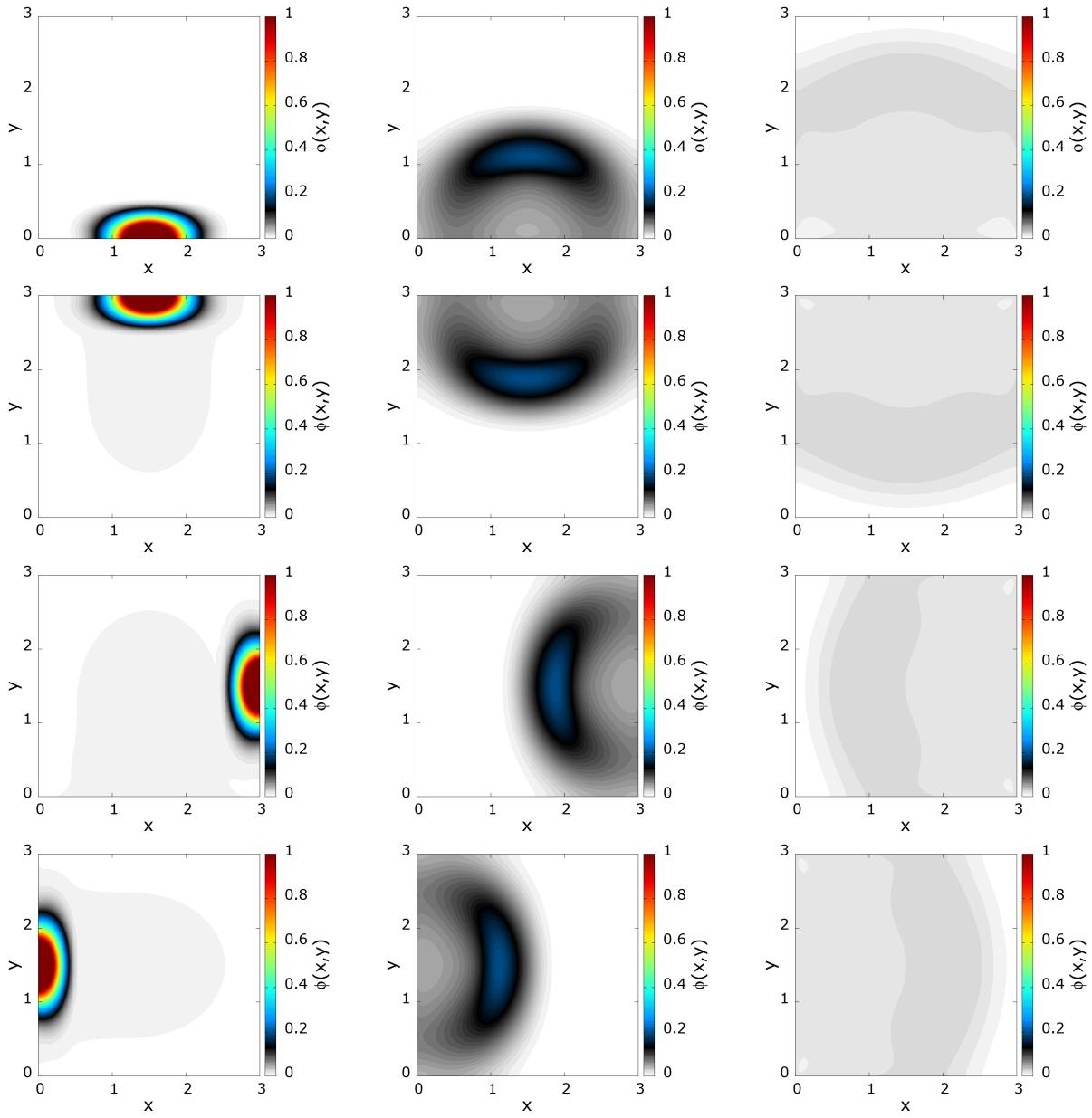


Figura 3.7: Simulación para el modelo directo FMS utilizando el método FC-DOM en paralelo 1 presentado en la sección 2.2.4. En la figura se muestra el flujo escalar $\phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x})$, ec. (2.5) para tiempos diferentes utilizando el método FMS con una única fuente generalizada que contiene cuatro fuentes láser superpuestas, con tiempos de retraso $\tau = 200\text{ps}$. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, se tiene $t = 30\text{ps}$, $t = 100\text{ps}$ 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 $t = 770\text{ps}$.

Como puede observarse en la figura 3.7, para el método MB, dado que cada fuente láser individual es tratada mediante una simulación independiente de las otras fuentes, cada señal originada por los fotones transportados en el medio participante desde el láser hasta los detectores se encuentra desacoplada de la señal de las otras fuentes. En el método FMS, en cambio, las señales de todas las fuentes láser individuales aparece mezclada en los detectores. El rol de los retardos temporales utilizados en el método FMS es desacopla en algún grado para un dado detector las señales originadas por fuentes láser individuales proveniente desde diferentes lugares.

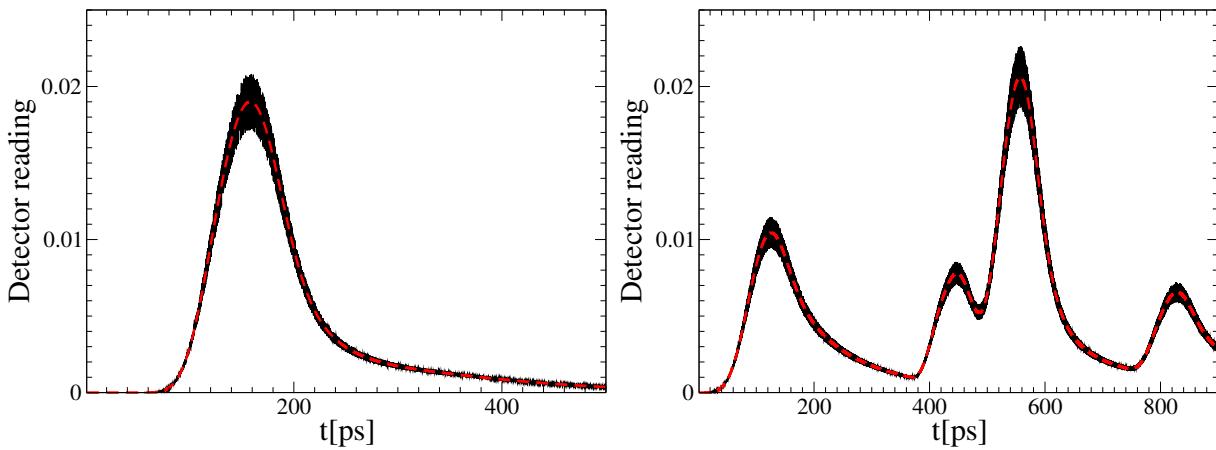


Figura 3.8: Lectura del detector $G[u_1]$ en la ec. (3.18) para una única fuente generalizada del método MB, y una fuente generalizada con $N_s = 4$ para el método FMS, antes y después de agregar un 10% de ruido aleatorio a la señal. El detector utilizado se ubicó en $\mathbf{x}_d = (3.0, 2.25)$. Cada fuente láser individual se ubicó en el centro de las caras del dominio cuadrado. Como puede observarse, en el método FMS las lecturas de los detectores aparecen mezcladas. Utilizamos un retraso temporal $\tau = 200\text{ps}$ entre las fuentes ubicadas en las diferentes caras.

3.7 Algoritmo para la resolución del problema inverso

Como se indicó anteriormente, el algoritmo propuesto en esta tesis para la resolución del problema inverso incorpora, en particular, la estrategia FMS, basada en el uso de fuentes que se aplican en un único problema directo, en lugar de la estrategia MB utilizada previamente en la literatura. En el método MB, por cada fuente láser deben realizarse un par de simu-

laciones para el problema directo y el problema adjunto, para luego combinar los resultados para obtener el gradiente utilizado en el método lm-BFGS. En cambio, en el método FMS propuesto, se construye la función objetivo utilizando una única fuente generalizada que contiene a todas las fuentes láser, de forma tal que se utiliza un único par de simulaciones para los problemas directos y adjuntos, lo cual, como se demuestra en la sección 3.8 (de manera cualitativa en las figuras 3.11 y 3.13 y de forma cuantitativa en las figuras 3.12 y 3.14) reduce los tiempos de computo para el problema inverso de manera significativa (*e.g.* en un factor de seis en la figura 3.13), sin que se produzca un deterioro en la calidad de la imagen obtenida.

Buscamos el coeficiente de absorción que minimiza la ec. (3.21) sujeto a las restricciones $a^l(\mathbf{x}) \leq a(\mathbf{x}) \leq a^u(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x}$, *i.e.*, buscamos el coeficiente $a(\mathbf{x})$ que es solución del problema

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

Las restricciones impuestas en el proceso de minimización están dadas por propiedades generales conocidas del coeficiente de absorción ($a^l(\mathbf{x}) \geq 0$ es una condición física que siempre debe cumplirse), y por cierto conocimiento del coeficiente, obtenido previamente por otras técnicas tomográficas, lo cual reduce el espacio de soluciones admisibles al problema de minimización (3.58).

El algoritmo para la resolución del problema inverso 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), a partir de lo cual se calcula el gradiente funcional (3.56). El gradiente funcional se pasa al algoritmo lm-BFGS, que devuelve una actualización para coeficiente de absorción $a^1(\mathbf{x})$ que 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 algoritmo para la solución del problema inverso de transporte radiativo, para un dado número de iteraciones i_{\max} , se sumariza en el algoritmo 3. En este algoritmo, $C \in \mathbb{R}$ 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.

Algoritmo 3 Algoritmo para la resolución del problema inverso en paralelo

- 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), sí $\Lambda[a] < C$ 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 $a(\mathbf{x}) = a^i(\mathbf{x})$
-

3.8 Reconstrucciones numéricas

En esta sección aplicamos los algoritmos desarrollados en las secciones previas al problema inverso en tomografía óptica. Los problemas inversos en tomografía óptica que consideramos conciernen a configuraciones en las cuales se buscan inclusiones sobre un tejido de “fondo” que se asume conocido. Esta situación describe, *e.g.*, los excesos en la absorción de la radiación originados por la presencia de hemoglobina oxigenada en el cerebro, producida por la respuesta hemodinámica debido a la activación de una región determinada del cerebro [?, 21–23], para aplicaciones neurocientíficas, o el exceso de hemoglobina oxigenada originada por la presencia de un tumor para aplicaciones en diagnósticos médicos [7–9, 69, 70].

La primera demostración que haremos ilustrará una aplicación potencial de la técnica de tomografía óptica para el diagnóstico de un paciente para el cual se dispone de una imagen por resonancia magnética (MRI) del cuello (fig. 3.9). Describimos una situación teniendo en mente la aplicación potencial para el estudio de la 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 sistemas de tomografía óptica hace que estos dispositivos sean mucho más 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, 49] se realizó un estudio sobre el problema directo de la propagación de la luz en el cuello humano. Aquí presentamos un modelo similar, y extendemos la idea para el estudio de la convergencia del problema inverso siguiendo las líneas de las referencias [9, 49] con la intención de capturar algunas de las características más importantes del cuello humano, manteniendo una geometría simple.

Estudiaremos la convergencia por iteración del algoritmo 3 para un número variable de fuentes y detectores, para una dada configuración. 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 en la norma 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 en la iteración i -ésima.

Buscaremos la existencia de un tumor en el tejido blando. Los coeficientes de la columna vertebral, la médula espinal, y la tráquea se mantendrán fijos en el proceso de reconstrucción, con $a^l(\mathbf{x}) = a^u(\mathbf{x}) = a(\mathbf{x})$ en estas regiones, con los coeficientes dados para cada tipo de tejido correspondiente, los cuales se presentan en la tabla 3.2, y fueron tomados de las referencias [49, 79, 80].

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

Para simplificar el modelo, tomamos el coeficiente de refracción de la traquea como $n_{\Omega} =$

1.4. Esto evita las dificultades encontradas para el modelado de la interfase entre la traquea y el tejido blando, el cual para un modelado mas preciso requiere tener en cuenta la reflexión de Fresnel en esta interfase goemétricamente compleja. Otras simplificaciones adicionales utilizadas consistieron en no considerar los vasos sanguíneos, y en la simplificación de la geometría del cuello, el cual se tomo como una geometría cuadrada.

Por otra parte, fijamos el valor $a(\mathbf{x}) = a^l(\mathbf{x}) = a^u(\mathbf{x})$ al valor del fondo en las proximidades de los bordes, para puntos a una distancia menor a 0.5cm. Este procedimiento genera una mejor convergencia en el problema de reconstrucción del coeficiente $a(\mathbf{x})$, y previene la amplificación de los errores numéricos, originados por la existencia de las capa límite [54] discutidas en la sección 2.4. La resolución de la capa límite en el problema multidimensional exige de métodos numéricos más sofisticados que escapan al alcance de esta tesis.

Aplicamos el algoritmo para la reconstrucción del coeficiente de absorción, y comparamos los métodos MB y FMS propuesto en este trabajo. Para ello, producimos datos sintéticos de la forma descripta en la sección 3.6, donde agregamos un 10% de ruido aleatorio a los datos obtenidos para los detectores mediante las simulaciones numéricas, de forma de obtener resultados que se acerquen a una situación experimental real.

Como mencionamos anteriormente, la situación que simulamos es una en la cual se buscan inclusiones sobre cierto “fondo” conocido. La situación que ilustramos en este primer caso corresponde a los excesos de absorción originados por la presencia de hemoglobina oxigenada debido a la presencia de un tumor en el tejido, lo cual encuentra aplicaciones tanto en el diagnostico de la enfermedad, así como en el seguimiento del tratamiento de la misma.

El mínimo a^l para el coeficiente de absorción vendrá dado por los valores del “fondo” del tejido analisado (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 $a^u = 1$.

La imagen MRI es tomada como el coeficiente inicial $a^0(\mathbf{x})$ para la iniciación de las iteraciones.

En esta demostración, para el método FMS empleamos una única fuente generalizada la cual contiene multiples fuentes láser. Las diferentes fuentes láser contenidas en esta única



Figura 3.9: Imagen de Resonancia Magnética [81] para el modelo de cuello humano empleado.

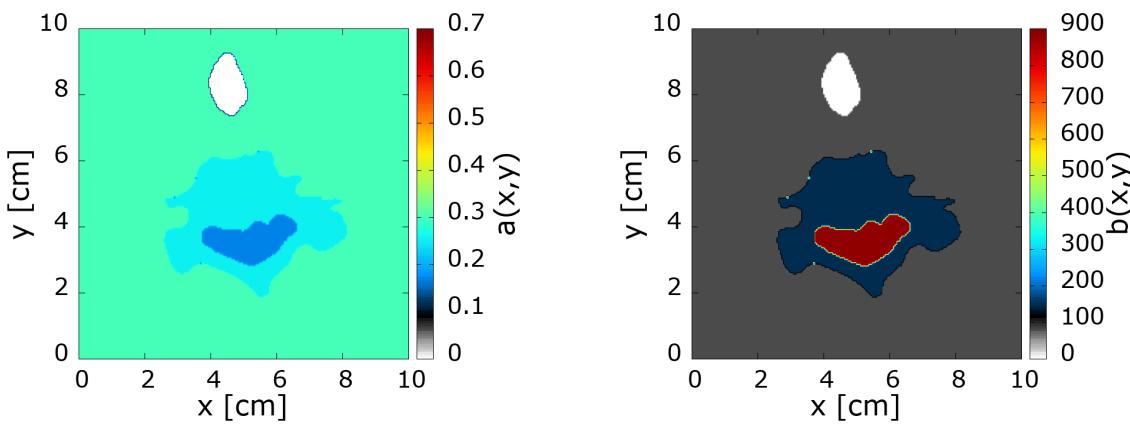


Figura 3.10: Izquierda: coeficiente de absorción generado a partir de la imagen 3.9, el cual fue utilizado como el coeficiente inicial $a^0(\mathbf{x})$ en las reconstrucciones del coeficiente de absorción para éste modelo. Derecha: coeficiente de dispersión para el modelo de cuello humano. Los coeficientes de absorción y dispersión para los distintos órganos fueron tomados de las referencias [49, 79, 80].

fuentे generalizada iluminan el borde del dominio $\partial\Omega$ en la dirección normal al mismo, inyectando la radiación que atraviesa el medio participante, sensándolo, y luego es recolectada por los detectores. La configuración que elegimos para la activación de las fuentes es tal que se activan de manera simultánea una fuente por cara. Utilizamos un retraso temporal de 300ps para fuentes vecinas ubicadas en una misma cara. En detalle, para el caso con 16 fuentes, fijamos $\tau_{1,1} = 0$ ps para las fuentes simultáneas ubicadas en $\mathbf{x}_1^1 = (2.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_1^2 = (10.0, 2.0)$, $\mathbf{x}_1^3 = (8.0, 10.0)$, $\mathbf{x}_1^4 = (0.0, 8.0)$, donde utilizamos el supraíndice para indicar las diferentes fuentes láser individuales, y el subíndice para indicar el tiempo de retraso temporal correspondiente $\tau_{k,1}$ (ver la ecuación (3.16)). El resto de las fuentes se configuran

de la siguiente manera: $\mathbf{x}_2^1 = (4.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_2^2 = (10.0, 4.0)$, $\mathbf{x}_2^3 = (6.0, 10.0)$, $\mathbf{x}_2^4 = (0.0, 6.0)$ con $\tau_{2,1} = 300\text{ps}$, $\mathbf{x}_3^1 = (6.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_3^2 = (10.0, 6.0)$, $\mathbf{x}_3^3 = (4.0, 10.0)$, $\mathbf{x}_3^4 = (0.0, 4.0)$ con $\tau_{3,1} = 600\text{ps}$ and $\mathbf{x}_4^1 = (4.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_4^2 = (10.0, 4.0)$, $\mathbf{x}_4^3 = (6.0, 10.0)$, $\mathbf{x}_4^4 = (0.0, 6.0)$ con retraso temporal $\tau_{4,1} = 900\text{ps}$.

Este arreglo fue guiado por la idea de utilizar en el método FMS como fuentes simultáneas aquellas que están geométricamente más alejadas unas de otras. Debido al decaimiento exponencial en la onda de densidad de fotones difusos (ver fig. 3.6), es esperable que cada fuente láser tenga un efecto despreciable en las lecturas de los detectores cercanos a otras fuentes geométricamente lejanas, aún cuando fueron activadas de manera simultánea. 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 $t_{\max} = 1400\text{ps}$. Para los casos en los que se utilizaron un número menor de fuentes, la configuración para la activación de las mismas fue similar. Para el método MB, cada simulación directa fue evolucionada hasta el tiempo final $t_{\max} = 600\text{ps}$, con los detectores y las fuentes ubicados en las mismas posiciones que las utilizadas en el método FMS, y utilizando las mismas grillas numéricas, e igual número de procesadores en cada caso.

Como puede apreciarse en la figura 3.11, los métodos MB y FMS presentan propiedades de convergencia similares para un número variable de fuentes y detectores. Sin embargo, para el caso con 16 fuentes, el método FMS tomó 12689 segundos para llegar a las 100 iteraciones, del algoritmo 3, mientras que el método MB tomó 88093 segundos, dando 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 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, dado que 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, si bien los detectores son necesarios para conocer la distribución de los fotones en el medio, en el problema adjunto (3.51) son las diferencias $(G_j[u_i] - \tilde{G}_{j,i})$ los que cumplen el rol de las fuentes, pero la intensidad de estas “fuentes” en el problema adjunto dependen de la cantidad

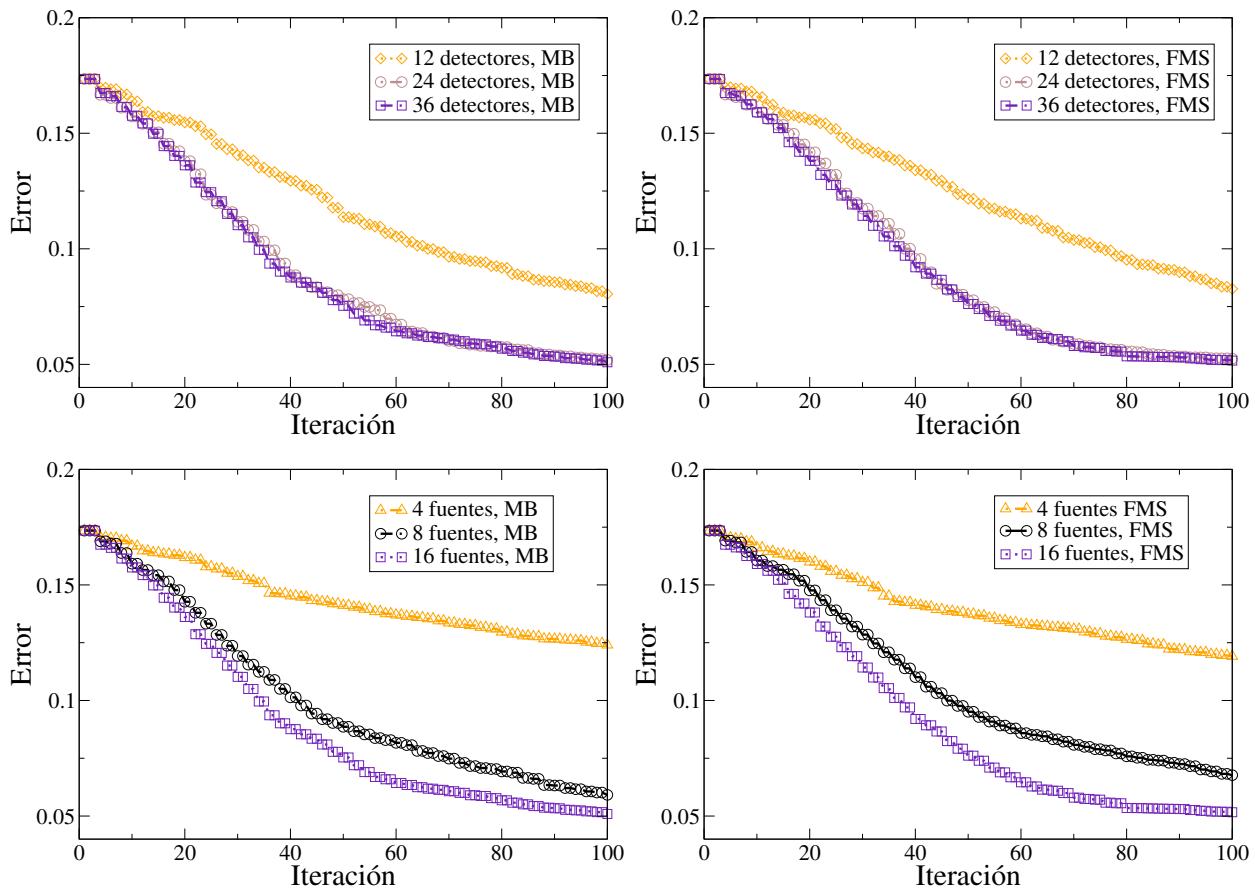


Figura 3.11: Convergencia obtenida para el error en la norma L^2 ec. (3.59) del coeficiente de absorción con respecto al número de iteraciones, para un número variable de detectores (arriba) y de fuentes láser (abajo), para los métodos MB y FMS. A la izquierda: error en la norma L^2 ec. (3.59) para 100 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.

de fotones originados en las fuentes láser que inyectan la radiación en el medio participante para llegar luego a los detectores. Puede argumentarse que por esta misma razón, es más importante la cantidad de fuentes que inyectan radiación en el medio para sensar la totalidad de $\partial\Omega$, que si esas fuentes son simuladas en problemas directos separados, lo cual sugiere que el método FMS es una estrategia de optimización adecuada que permite ganar tiempo de cómputo aprovechando el uso de fuentes simultáneas en único problema directo.

En la figura 3.12 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 características. Finalmente, presentaremos una reconstrucción simulando un “modelo de cabeza”. Para esta demostración, utilizaremos el modelo de cabeza 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 más importante en este contexto, el cual es la región ubicada entre el cráneo y el cerebro, la cual contiene un fluido de baja absorción y baja dispersión, conocido como fluido cerebroespinal. Esta región cumple la función de amortiguar al cerebro 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 de fotones no es físicamente preciso 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 de cabeza similar.

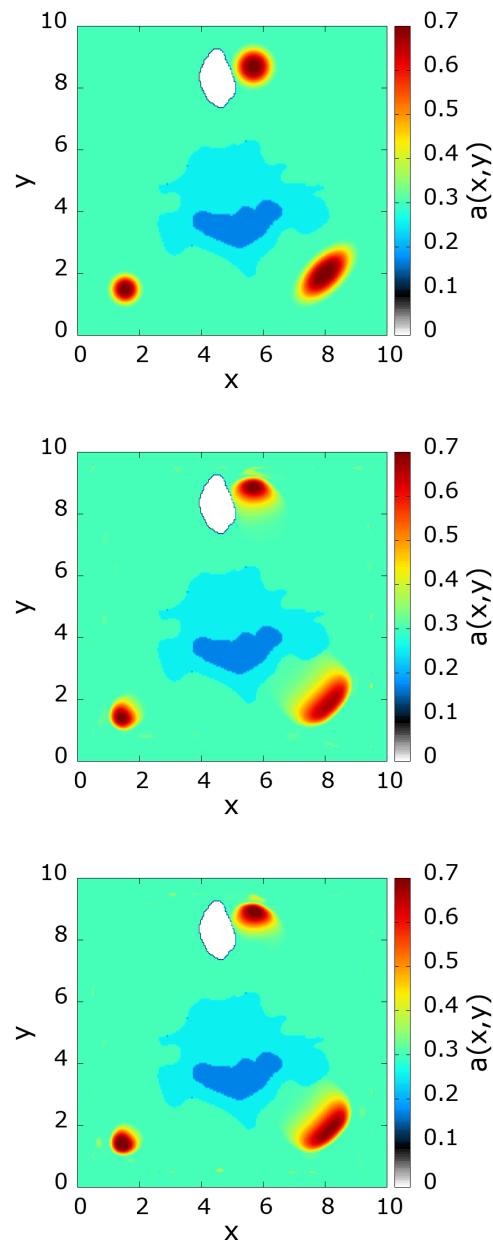


Figura 3.12: De arriba a abajo: coeficiente de absorción verdadero, y coeficientes de absorción obtenidos mediante resolución del problema inverso para 100 iteraciones de los métodos MB y FMS, respectivamente.

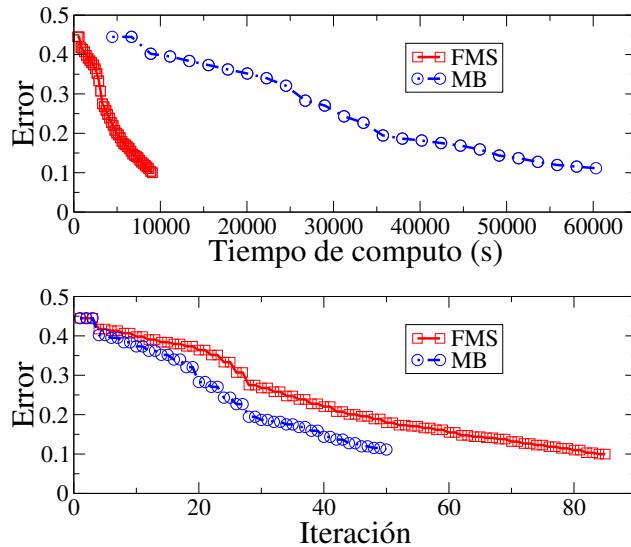


Figura 3.13: Evolución del error en la norma L^2 por iteración ec. (3.59) para el coeficiente de absorción, obtenido para el modelo de cabeza humana para los métodos MB y FMS.

Aquí emplearemos 32 detectores, con 8 detectores por cara, e igual número de fuentes. Mostramos el coeficiente de absorción después de 50 iteraciones del método MB, e iteramos el método FMS hasta obtener un error de convergencia similar 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 conocidos (dado que en estas regiones no puede ocurrir la activación cerebral), y se mantienen fijos durante el proceso de reconstrucción. Buscamos las inclusiones en la región circular interior, dado que es en esta región donde se encontraría el cerebro en una situación menos idealizada.

Para mostrar que también pueden emplearse otras estrategias de activación, en esta prueba utilizaremos una configuración diferente para la activación de las fuentes en el método FMS. Todas las fuentes ubicadas en una misma cara serán activadas de manera simultánea. En la notación utilizada anteriormente, tendremos $\mathbf{x}_1^1 = (1.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_1^2 = (2.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_1^3 = (3.0, 0.0)$, $\mathbf{x}_1^4 = (4.0, 0.0)$, con retardo temporal $\tau_{1,1} = 0\text{ps}$. Luego $\mathbf{x}_2^1 = (1.0, 5.0)$, $\mathbf{x}_2^2 = (2.0, 5.0)$, $\mathbf{x}_2^3 = (3.0, 5.0)$, $\mathbf{x}_2^4 = (4.0, 5.0)$ con $\tau_{2,1} = 100\text{ps}$, $\mathbf{x}_3^1 = (5.0, 1.0)$, $\mathbf{x}_3^2 = (5.0, 2.0)$, $\mathbf{x}_3^3 = (5.0, 3.0)$, $\mathbf{x}_3^4 = (5.0, 4.0)$ con $\tau_{3,1} = 400\text{ps}$ y $\mathbf{x}_4^1 = (0.0, 1.0)$, $\mathbf{x}_4^2 = (0.0, 2.0)$, $\mathbf{x}_4^3 = (0.0, 3.0)$, $\mathbf{x}_4^4 = (0.0, 4.0)$ con retardo temporal de $\tau_{4,1} = 500\text{ps}$.

En la figura 3.13 mostramos la evolución del error ec. (3.59) para los métodos MB y el método FMS propuesto. En la figura 3.14 mostramos el coeficiente de absorción verdadero, y los obtenidos al final de la iteración para cada método.

En términos de tiempo computacional, las cincuenta iteraciones del método MB tomaron mas de seis veces que las setenta y nueve iteraciones del método FMS. Si los dos métodos fueran iterados igual número de iteraciones, se obtendrían reconstrucciones similares, con un detrimiento en favor del método MB, pero con el método FMS realizando las iteraciones en casi un orden de magnitud más rápido. La calidad de las reconstrucciones han mostrado depender en la discretización numérica utilizada. En particular, si se utilizan menos direcciones discretas, se obtienen reconstrucciones de menor calidad para ambos métodos, posiblemente debido a la aparición del efecto de rayos en el interior de la región de baja absorción y dispersión.

También es posible emplear otras estrategias de activación en el método FMS. A pesar de que no hemos explorado otras posibilidades, es posible incluir más fuentes generalizadas, con diferentes estrategias de activación cada una de ellas.

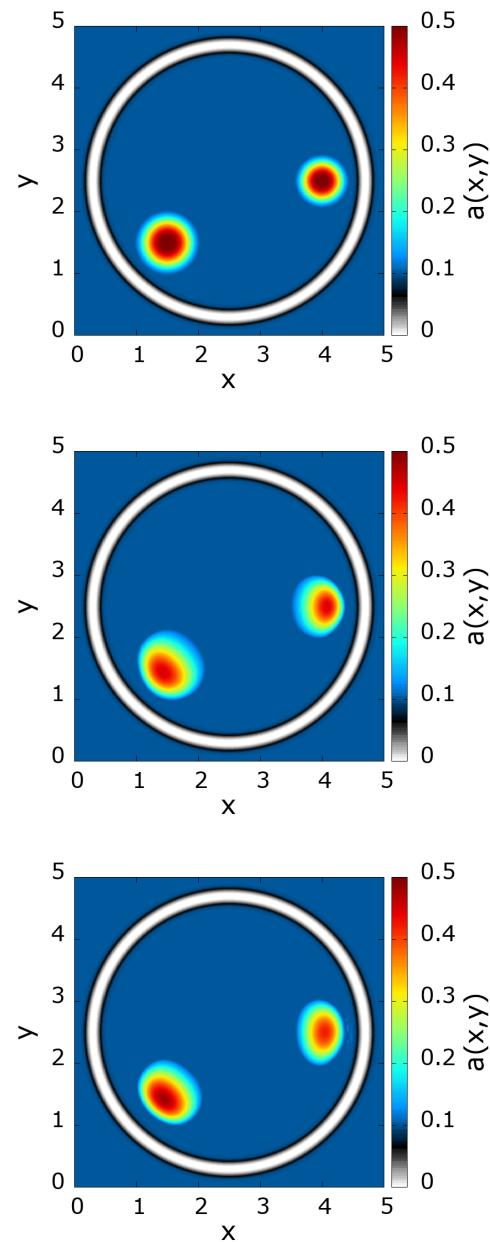


Figura 3.14: De arriba a abajo: coeficiente de absorción verdadero, y coeficientes de absorción obtenidos para 50 iteraciones del método MB, y 79 iteraciones del método FMS.

Conclusiones

En este trabajo hemos desarrollado métodos numéricos eficientes para la resolución de los problemas directos e inversos con aplicaciones en tomografía óptica. Si bien el foco de esta tesis ha sido el desarrollo de algoritmos para la resolución de la ETR de forma eficiente en el campo de tomografía óptica, dado que la ETR es una ecuación de Boltzmann linearizada de utilidad en el modelado de diversos fenómenos físicos, y como se mencionó en la introducción, estos algoritmos pueden ser aplicados e impactan en otras áreas de la ciencia y la tecnología de gran interés [1–8, 10, 10, 11, 11, 14–18]

Hemos desarrollado algoritmos que permiten obtener soluciones a la ETR de forma eficiente, en entornos de máquinas paralelas, y que para el caso de soluciones suaves presentan un alto orden de convergencia. Demostramos que los códigos desarrollados en esta tesis son matemáticamente correctos mediante comparación con soluciones manufacturadas y soluciones analíticas, así como también demostramos que son físicamente precisos mediante comparación con resultados experimentales reportados en la literatura.

En aplicaciones realistas, surge el fenómeno de capas límite exponenciales estudiado en la sección 2.4, el cual representa un desafío vigente, que a consideración del autor no ha sido correctamente abordado en la literatura. Por esta razón, en esta tesis se desarrolló la teoría de capa límite correspondiente, y se demostró el carácter exponencial de esta capa límite, el cual se manifiesta incluso para problemas altamente difusivos.

Hemos demostrado que es posible tener alto orden de convergencia en situaciones realistas para el caso dependiente del tiempo en una única dimensión espacial, explotando el análisis asintótico desarrollado en esta tesis para las capas límite. Queda vigente la generalización

y el desarrollo de algoritmos capaces de resolver las estructuras de capa límite existentes en el caso multidimensional. Si bien este último problema no fue abordado en el marco de esta tesis, la teoría desarrollada en el marco de la misma sienta las bases para el desarrollo de algoritmos de alto orden de convergencia en el caso multidimensional, también de interés e impácto en diversas áreas de la ciencia y la tecnología.

Hemos extendido el uso de los algoritmos desarrollados para el problema directo al problema inverso en tomografía óptica. Desarrollamos una formulación mediante el método adjunto para la obtención del gradiente de la función objetivo, que incluye las condiciones de borde de Fresnel, de importancia en tomografía óptica. Resolvimos el problema inverso en tomografía óptica mediante el uso del método cuasi-Newton lm-BFGS. Demostramos que es posible obtener una aceleración adicional mediante la estrategia de Fuentes Multiples Simultáneas, donde las múltiples fuentes láser presentan una activación de forma sincronizada, que permite optimizar los tiempos de simulación. Mostramos que esta estrategia produce una aceleración en un factor de seis y siete para los casos estudiados, produciendo imágenes de similar calidad a las obtenidas mediante el Método de Barrido utilizado ubicuamente en la literatura.

En el marco del problema inverso, posibles direcciones futuras de investigación incluyen el estudio del impacto de la estructura de capa límite en las reconstrucciones, y la generalización de los algoritmos presentados en esta tesis a otros problemas relacionados, como lo es la obtención simultánea de los coeficientes de absorción y dispersión, o la aplicación a problemas de tomografía por fluorescencia [26,31].

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. Ardeshirpour, 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. Gaggioli, 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] 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.
- [46] 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.

- [47] 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.
- [48] 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.
- [49] 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.
- [50] 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.
- [51] 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.
- [52] 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.
- [53] 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.
- [54] E. L. Gaglioli, 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.
- [55] 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.

- [56] K. M. Case and Z. P. F, “Linear Transport Theory,” 1967.
- [57] B. G. Petrović and A. Haghigat, “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.
- [58] 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.
- [59] 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.
- [60] 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.
- [61] G. Bal, “Fourier analysis of diamond discretization in particle transport,” *Calcolo*, vol. 38, no. 3, pp. 141–172, 2001.
- [62] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I*. 1999.
- [63] J. Rocheleau, “An Analytical Nodal Discrete Ordinates Solution to the Transport Equation in Cartesian Geometry,” Master’s thesis, 2020.
- [64] 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.
- [65] R. Harel, S. Burov, and S. I. Heizler, “Asymptotic PN Approximation in Radiative Transfer Problems,” *Journal of Computational and Theoretical Transport*, vol. 0, no. 0, pp. 1–17, 2020.

- [66] 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.
- [67] L. N. Trefethen, “Is Gauss quadrature better than Clenshaw-Curtis?,” *SIAM Review*, vol. 50, no. 1, pp. 67–87, 2008.
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] 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.
- [71] 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.
- [72] 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.
- [73] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical optimization*. New York, USA: Springer, second ed., 2006.
- [74] 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.

- [75] 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.
- [76] O. Dorn, “A transport – backtransport method for optical tomography,” *Inverse Problems*, vol. 14, pp. 1107–1130, 1998.
- [77] E. Hille and R. Phillips, *Functional analysis and semi-groups*. Rhode Island, USA: American Mathematical Society, first ed., 1957.
- [78] O. Dorn, “Scattering and absorption transport sensitivity functions for optical tomography,” *Optics Express*, vol. 7, no. 13, p. 492, 2000.
- [79] 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.
- [80] M. Dehaes, L. Gagnon, F. Lesage, M. Péligrini-Issac, A. Vignaud, R. Valabregue, 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.
- [81] “Case courtesy of RMH Core Conditions, Radiopaedia.org, rID: 26271.,”