

# Empleo de técnicas de regularización para la solución del problema inverso unidimensional en la Tomografía Óptica Difusa

## Use of regularization technics for the solution of the one-dimensional Difusse Optical Tomography inverse problem

Carmen Tejeda Toledo<sup>1\*</sup>, Luis Orlando Castellanos Pérez<sup>2</sup>

**Resumen** Los problemas inversos se han convertido en una herramienta de gran potencial dentro de las Matemáticas. En la presente investigación se abordarán elementos relacionados con la teoría general de los problemas inversos y su aplicabilidad a la tomografía óptica difusa. Se hará uso de la pseudoinversa de Moore-Penrose como caso particular de inversa generalizada. Se describirán elementos relacionados con el método de descomposición en valores singulares de una matriz, la solución de sistemas lineales en el sentido de mínimos cuadrados y la teoría general de la regularización, abordada a través de tres métodos fundamentales: la descomposición en valores singulares truncada, la regularización de Tikhonov y el método de las iteraciones de Landweber. Además se formulará y resolverá el problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa por los métodos ya mencionados, realizando una comparación entre ellos para seleccionar el que brinda mejor comportamiento ante diferentes variaciones de los parámetros involucrados.

**Abstract** Inverse problems have become a tool of great potential in Mathematics. In the current research, elements related to the general theory of inverse problems and their applicability to the diffuse optical tomography are exposed. The Moore-Penrose pseudoinverse as particular case of generalized inverse is also presented. Furthermore, elements related to the singular value decomposition of a matrix, the solution of linear systems in the sense of least square, and the general theory of regularization, approached through three fundamental methods: the truncated singular value decomposition, the Tikhonovs regularization, and the Landwebers iterative method are described. The methods already mentioned are used to numerically solve the one dimensional version of the inverse problem in diffuse optical tomography, which model is also described in this paper, making a comparison between them to select the one that provides better behavior against different variations of the parameters involved.

### Palabras Clave

pseudoinversa — tomografía — problema inverso — regularización

<sup>1</sup> Departamento de Licenciatura en Matemática, Universidad de Holguín, Holguín, Cuba, ctejedat@uho.edu.cu

<sup>2</sup> Departamento de Licenciatura en Matemática, Universidad de Holguín, Holguín, Cuba, locp@uho.edu.cu

\*Autor para Correspondencia

## Introducción

La tomografía óptica difusa construye imágenes a partir del comportamiento de un grupo de fotones al atravesar un cuerpo utilizando luz casi infrarroja. Ofrece varias ventajas: es una modalidad de examen no invasiva, da posibilidad de ser usada para exámenes neonatales, el sistema de obtención de imágenes es seguro, de bajo costo, relativamente simple y, en la mayoría de los casos, incluso transportable; además la obtención de informaciones precisas sin causar daños a los pacientes es de gran valor para un diagnóstico certero. El

enfoque más usado de este problema inverso responde a la versión tridimensional, para la cual se han planteado varios métodos de regularización y modelos computacionales. La complejidad que encierra esta versión tridimensional la hace inaccesible para un país subdesarrollado como Cuba donde todavía no se ha estudiado esta técnica, hasta donde pudo conocer esta investigación, ni se cuenta con los recursos materiales para implementarla; entonces se impone la necesidad de desarrollar y resolver la versión unidimensional de este problema inverso como base para comprender y poder lle-

var a la práctica el problema tridimensional. Lo planteado anteriormente, genera la siguiente **problemática** expresada en el hecho de que desde el punto de vista matemático, en la actualidad, todavía no hay una teoría totalmente completa que permita apoyar las investigaciones médicas dedicadas a la detección del cáncer de manera no invasiva. Es por ello que esta investigación se propone como **objetivo**: determinar cuál método de regularización lineal brinda mejor precisión para resolver el problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa..

## 1. Problemas Inversos

En las últimas dos décadas los problemas inversos se han posicionado como una de las áreas de mayor crecimiento en Matemática Aplicada. En [4] se define como problema inverso aquel que tiene el objetivo de determinar causas a través de efectos observados. Las teorías físicas permiten hacer predicciones, es decir, dada una descripción completa de un sistema físico (modelo), se puede predecir el resultado de algunas mediciones, éste es el llamado problema directo. El problema inverso consiste en utilizar el resultado real de algunas medidas para deducir los valores de los parámetros que caracterizan el sistema. En general, se considera a los Problemas Inversos como rama de las Matemáticas a raíz de la aparición de los trabajos de Tikhonov [9], con la introducción de los métodos de regularización para problemas mal planteados: el argumento básico es que sus ideas permitieron a la comunidad científica romper con lo que ahora se considera un prejuicio histórico y que tiene su origen en un concepto que, por otro lado, ha hecho avanzar grandemente las Ecuaciones en Derivadas Parciales: el concepto de problema bien propuesto o bien planteado (*well-posed*). Hadamard [5] afirmó que los problemas de interés físico son aquellos que tienen una solución única que depende continuamente de los datos, es decir, es estable con respecto a toda perturbación en los datos. Los problemas que no satisfacen alguna de estas condiciones, se denominan mal planteados (*ill-posed*).

## 2. Preliminares Matemáticos. Inversa generalizada

La inversa generalizada es una generalización de la noción de inversa de matrices la cual se aplica a matrices no cuadradas, como caso particular de inversa generalizada se encuentra la pseudoinversa de Moore-Penrose [1], descubierta por Eliakim Hastings Moore en 1920 y reinventada por Sir Roger Penrose en 1955.

**Definición 2.1 Pseudoinversa de Moore-Penrose.** Sean  $m$  y  $n \in \mathbb{N}$  y sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Una matriz  $A^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$  se dice que es la pseudoinversa de Moore-Penrose de  $A$  si satisface las condiciones siguientes:

1. Condición general:  $AA^+A = A$
2. Condición reflexiva:  $A^+AA^+ = A^+$

3. Condición normalizada:  $AA^+ \in \mathbb{R}^m$  es autoadjunta, es decir  $AA^+ = (AA^+)^t$

4. Condición normalizada reversa:  $A^+A \in \mathbb{R}^n$  es autoadjunta, es decir  $A^+A = (A^+A)^t$

### 2.1 Descomposición en valores singulares

La descomposición en valores singulares (SVD) es una importante factorización de una matriz rectangular análoga a la diagonalización de matrices simétricas. Los siguientes teoremas [1] garantizan la SVD de cualquier matriz  $A$  y una expresión para su pseudoinversa.

**Teorema 2.1** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $\text{rang}(A) = r = \min\{m, n\}$ . Entonces existen matrices unitarias  $U \in \mathbb{R}^m$  y  $V \in \mathbb{R}^n$  tales que

$$A = USV^t \quad (1)$$

donde  $S \in \mathbb{R}^{m \times n}$  es una matriz que tiene como  $r$  primeros elementos de la diagonal los valores singulares positivos de  $A$  y todos los otros elementos iguales a cero.

**Teorema 2.2** La pseudoinversa de Moore-Penrose  $A^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$  de  $A$  está dada por

$$A^+ = VS^+U^t \quad (2)$$

donde  $S^+$  es la pseudoinversa de  $S$ , cuyos elementos son los recíprocos de los valores singulares no nulos de  $A$ , y  $U$  y  $V$  son las matrices ortogonales que resultan de descomponer a  $A$  en valores singulares.

### 2.2 Solución de sistemas lineales en el sentido de mínimos cuadrados

Se parte del siguiente problema. Sean  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $y \in \mathbb{R}^m$  dados. Determinar  $x \in \mathbb{R}^n$  tal que  $y = Ax$ . Cuando este problema no tiene solución lo que se hace es relajar el concepto de solución considerando soluciones aproximadas; en mínimos cuadrados se toma  $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$  que cumple  $\|A\hat{x} - y\| = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - y\|$  [1].

**Teorema 2.3** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $y \in \mathbb{R}^m$ . El problema de minimización

$$\hat{x} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - y\|$$

tiene la misma solución  $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$  que la ecuación  $A^t A \hat{x} = A^t y$ . Además es única si y solo si  $\mathcal{N}(A^t A) = \{0\}$ .

## 3. Métodos de regularización para la solución de problemas mal planteados

El mal planteamiento de los problemas inversos es resuelto usando técnicas conocidas como de regularización que consisten en introducir alguna clase de información a priori acerca de la solución deseada para estabilizar el problema. En términos matemáticos, su objetivo consiste en aproximar la solución  $x$  de la ecuación  $y = Ax$ , a partir del conocimiento del dato directo perturbado  $y^\delta$  con un nivel de error dado:

$\|y - y^\delta\| \leq \delta$ . Las definiciones y los teoremas que se brindan a continuación reflejan los aspectos esenciales dentro de la teoría de la regularización [6].

**Definición 3.1** Una estrategia de regularización es una familia de matrices  $R_\alpha : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $\alpha \geq 0$ , de forma que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} R_\alpha A x = x, \forall x \in \mathbb{R}^n \quad (3)$$

El parámetro  $\alpha$  es llamado parámetro de regularización y  $x^{\alpha, \delta} = R_\alpha y^\delta$  es la aproximación de la solución  $x$  de  $y = Ax$ .

**Teorema 3.1** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  una matriz con sistema singular  $(u_i, \sigma_i, v_i)$ , y sea  $q$  una función,  $q : (0, \infty) \times [\sigma_r, \sigma_1] \rightarrow \mathbb{R}$ , tal que para cada  $\alpha \geq 0$  existe una constante  $C(\alpha)$  de forma que:

1.  $|q(\alpha, \sigma)| \leq C(\alpha)\sigma$ ,  $\sigma \in [\sigma_r, \sigma_1]$
2.  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} q(\alpha, \sigma) = 1$ ,  $\sigma \in [\sigma_r, \sigma_1]$

Entonces la familia de matrices  $R_\alpha \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $\alpha > 0$ , definidas como

$$R_\alpha y := \sum_{i=1}^r \frac{1}{\sigma_i} q(\alpha, \sigma_i) (y, u_i) v_i, y \in \mathbb{R}^m \quad (4)$$

describe una estrategia de regularización con  $\|R_\alpha\| \leq C(\alpha)$ . La función  $q$  es llamada una función filtro regularizadora para  $A$ .

**Teorema 3.2** Supongamos que la primera hipótesis del teorema 3.1 se cumple entonces, si la segunda hipótesis del teorema 3.1 se sustituye por:

1. Existe  $C_1 > 0$  tal que  $|q(\alpha, \sigma) - 1| \leq C_1 \frac{\sqrt{\alpha}}{\sigma}$ ,  $\forall \alpha > 0$  y además  $x \in \mathcal{R}(A')$  entonces  $\|R_\alpha A x - x\| \leq C_1 \sqrt{\alpha} \|z\|$  donde  $x = A' z$ .
2. Existe  $C_2 > 0$  tal que  $|q(\alpha, \sigma) - 1| \leq C_2 \frac{\alpha}{\sigma^2}$ ,  $\forall \alpha > 0$  y además  $x \in \mathcal{R}(A'A)$  entonces  $\|R_\alpha A x - x\| \leq C_2 \alpha \|z\|$  donde  $x = A' A z$ .

### 3.1 Descomposición en valores singulares truncada

La descomposición en valores singulares truncada (TSVD) es un método para mejorar el mal condicionamiento del problema reemplazando los más pequeños valores singulares no nulos de  $A$  por ceros [1].

**Teorema 3.3** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  no nula con descomposición en valores singulares  $A = USV^t$  donde  $S_{11} \geq S_{22} \geq \dots \geq S_{rr} > 0$  y  $S_{ij} = 0 \forall i \neq j$ . La descomposición en valores singulares truncada (TSVD) de  $A$  es la matriz

$$A_{(k)} = US_{(k)} V^t$$

donde  $k \in \{1, 2, \dots, r-1\}$  y  $(S_{(k)})_{ii} = S_{ii}$  cuando  $i < k$  y  $(S_{(k)})_{ij} = 0$  en otro caso.

### 3.2 Regularización de Tikhonov

Este método puede ser introducido de dos formas [6]: a través de un problema de minimización o como un caso especial del Teorema 3.1. Para el primer caso Tikhonov sugirió, para superar el mal planteamiento, transformar la ecuación normal a una ecuación de la forma  $(A^t A + \alpha \mathbb{I})x = A^t y$  que tiene la misma solución que el problema de minimización:

$$x_\alpha = \operatorname{argmin} \{ \|Ax - y\|^2 + \alpha \|x\|^2 \}, \alpha > 0.$$

Tomando en cuenta que se trabaja con datos perturbados  $y^\delta$ , se define el funcional de Tikhonov como:

$$J_\alpha(x^\delta) = \|Ax^\delta - y^\delta\|^2 + \alpha \|x^\delta\|^2, \alpha = \alpha(\delta) > 0. \quad (5)$$

Además el valor ínfimo de este funcional  $x^{\alpha, \delta}$  debe satisfacer:  $\|Ax^{\alpha, \delta} - y^\delta\| = \delta$ . Una descripción formal de esta técnica como un problema de minimización se refleja en el siguiente teorema [6]:

**Teorema 3.4** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $\alpha > 0$ . Entonces para cada  $y \in \mathbb{R}^m$  existe un único  $x^\alpha \in \mathbb{R}^n$  tal que

$$J_\alpha(x^\alpha) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} J_\alpha(x)$$

El minimizador  $x^\alpha$  coincide con la solución única de la ecuación normal

$$(A^t A + \alpha \mathbb{I}) x^\alpha = A^t y.$$

Una descripción formal de la regularización de Tikhonov como caso particular del Teorema 3.1 es la siguiente [6]:

**Teorema 3.5** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  una matriz dada. Entonces, para cada  $\alpha > 0$  la matriz  $A^t A + \alpha \mathbb{I}$  es invertible. Más aún, la familia  $R_\alpha := (A^t A + \alpha \mathbb{I})^{-1} A^t$  describe una estrategia de regularización con  $\|R_\alpha\| \leq \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$ .

Es importante preguntarse en cualquier problema que se desee resolver ¿cómo elegir el parámetro de regularización  $\alpha$ ? En este trabajo se escogió el principio de discrepancia de Morozov [6] como criterio de elección de dicho parámetro.

**Teorema 3.6** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  con rango completo por columna. Sea  $y = Ax$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $y \in \mathbb{R}^m$ ,  $y^\delta \in \mathbb{R}^m$  y  $\|y^\delta - y\| \leq \delta \|y^\delta\|$ . Sea  $x^{\alpha(\delta), \delta}$  la solución del método de Tikhonov que satisface  $\|Ax^{\alpha(\delta), \delta} - y^\delta\| = \delta$ ,  $\forall \delta \in (0, \delta_0)$ . Entonces:  $x^{\alpha(\delta), \delta} \rightarrow x$  para  $\delta \rightarrow 0$ , es decir, el Principio de discrepancia es admisible.

### 3.3 Iteraciones de Landweber

Los algoritmos para la regularización de Tikhonov tienden a destruir la estructura específica de la matriz de los coeficientes cuando esta tiene grandes dimensiones. En 1951, Landweber [7] realizó la sugerencia de escribir para el sistema  $y = Ax$  la ecuación normal  $A^t A x = A^t y$  en la forma de una ecuación de punto fijo  $x = (\mathbb{I} - \lambda A^t A)x + \lambda A^t y$  para algún  $\lambda > 0$ , llamado parámetro de relajación. El método iterativo clásico de Landweber [6] tiene el siguiente algoritmo:

$$x^0 = 0; x^{k+1} = x^k - \lambda A^t (A x^k - y) = (\mathbb{I} - \lambda A^t A) x^k + \lambda A^t y \quad (6)$$

donde  $k \in \mathbb{N}$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Por inducción con respecto a  $k$  se obtiene que  $x^k = R_k y$ , donde

$$R_k := \lambda \sum_{i=0}^{k-1} (\mathbb{I} - \lambda A^t A)^i A^t, k = 1, 2, \dots$$

Si  $(u_j, \sigma_j, v_j)$  es el sistema singular de  $A$ , entonces  $R_k$  admite la siguiente representación:

$$R_k y = \sum_{j=1}^r \frac{q(k, \sigma_j)}{\sigma_j} (y, u_j) v_j \quad (7)$$

donde  $q(k, \sigma) = 1 - (1 - \lambda \sigma^2)^k$  es una función filtro que cumple las hipótesis del Teorema 3.2 para  $C(\alpha) = \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$ ,  $C_1 = \frac{1}{2}$ ,  $C_2 = 1$ .

**Teorema 3.7** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  una matriz dada, y sea  $0 < \lambda < \frac{1}{\|A\|^2}$ . Entonces la familia de matrices  $R_k \in \mathbb{R}^{n \times m}$ , definidas por (7) describen una estrategia de regularización con parámetro  $\alpha = \frac{1}{k}$  y  $\|R_k\| \leq \sqrt{k\lambda}$ .

La iteración de Landweber es un método de regularización lineal siempre que la iteración esté truncada en algún índice finito  $k^*$  [6]. Existen dos criterios de parada para la determinación de  $k^*$ , uno a priori donde solo depende del nivel de ruido  $k^* = k^*(\delta)$  y otro a posteriori donde además también depende de los datos perturbados  $k^* = k^*(\delta, y^\delta)$ . En este trabajo se emplea el criterio a posteriori dado por el Principio de discrepancia de Morozov que realiza la iteración siempre que  $\|Ax^{k,\delta} - y^\delta\| > \eta\delta$  se cumpla con  $\eta > 1$ .

#### 4. Problema inverso en la Tomografía Óptica Difusa (DOT)

El objetivo de la obtención de imágenes ópticas usando luz difusa casi infrarroja, es obtener información cuantitativa acerca de cambios en las propiedades ópticas dentro del tejido usando mediciones de frontera, es decir, el objetivo fundamental de la DOT es básicamente reconstruir los coeficientes de absorción y dispersión de un medio macroscópico para mediciones en la frontera. El problema en cuestión parte de los siguientes elementos [2]. Sea  $\Omega = \{x : x \geq 0\}$ . La densidad de energía  $\Phi$  obedece a la versión unidimensional de la ecuación de la difusión de time-dependence:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x, t) - c\mu_a(x) \Phi(x, t) \quad (8)$$

donde  $x \in \Omega$  y el coeficiente de difusión  $D$  se toma constante,  $\mu_a$  se denomina coeficiente de absorción. La densidad de energía debe satisfacer las condiciones inicial y de frontera siguientes:

$$\Phi(x, 0) = \delta(x - x_1) \quad \Phi(0, t) - l_{ext} \frac{d}{dt} \Phi(0, t) = 0 \quad (9)$$

Como  $\Phi$  decrece exponencialmente, se considera para  $k \geq 0$  la transformada de Laplace:

$$\Phi(x, k) = \int_0^\infty e^{-k^2 D t} \Phi(x, t) dt \quad (10)$$

que satisface la ecuación siguiente, donde la dependencia de  $\Phi$  en  $k$  se suprime para simplificar notación:

$$-\frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) + k^2 (1 + \eta(x)) \Phi(x) = \frac{1}{D} \delta(x - x_1) \quad (11)$$

donde  $k$  es el número de onda difusa y  $\eta(x)$  es la parte espacialmente variante de la absorción. El **problema directo** consiste en dadas las distribuciones de fuentes emisoras de fotones en la frontera del dominio y dado el valor de los parámetros ópticos relacionados, determinar el flujo de fotones resultante en la frontera. La solución del problema directo está dada por la siguiente ecuación integral

$$\Phi(x) = \Phi_i(x) - k^2 \int_\Omega G(x, y) \Phi(y) \eta(y) dy \quad (12)$$

donde  $G(x, y)$  es una función de Green de la forma

$$G(x, y) = \frac{1}{2Dk} \left( e^{-k|x-y|} + \frac{1 - kl_{ext}}{1 + kl_{ext}} e^{-k|x+y|} \right) \quad (13)$$

y  $\Phi_i(x)$  es el campo incidente que satisface (11) con  $\eta = 0$ . La ecuación integral (12) puede ser linealizada con respecto a  $\eta(x)$  reemplazando  $\Phi$  en la parte derecha por  $\Phi_i$ , la cual es una aproximación precisa cuando el soporte de  $\eta$  ( $supp(\eta)$ ) y  $\eta$  son pequeños. Si además se introduce el dato de dispersión  $\Phi_s = \Phi_i - \Phi$ , se obtiene:

$$\Phi_s(x_1, x_2) = k^2 \int_\Omega G(x_1, y) G(y, x_2) \eta(y) dy \quad (14)$$

Aquí  $\Phi_s(x_1, x_2)$  es proporcional al cambio en la intensidad debido a un punto fuente en  $x_1$  que es medido por un detector en  $x_2$ . En la geometría de retrodispersión, la fuente y el detector están ubicados en el origen ( $x_1 = x_2 = 0$ ); utilizando esto, junto a la ecuación (13) y omitiendo constantes totales, (14) se convierte en la siguiente ecuación integral de Fredholm de primera especie:

$$\Phi_s(k) = \int_0^\infty e^{-kx} \eta(x) dx \quad (15)$$

Lo que permite reformular el **problema directo** como: dada la parte espacialmente variante del coeficiente de absorción  $\eta(x)$  y el núcleo  $K = e^{-kx}$ , determinar el dato de dispersión  $\Phi_s(k)$ . Entonces el **problema inverso** puede definirse como: dado el núcleo  $K = e^{-kx}$  y el dato de dispersión  $\Phi_s(k)$  determinar la parte espacialmente variante del coeficiente de absorción  $\eta(x)$ . Dicho problema inverso podría verse como el de invertir la Transformada de Laplace el cual es un problema exponencial mal planteado y su resultado es una integral de gran complejidad:

$$\eta(x) = \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty ds R\left(\frac{1}{\sigma_s}\right) f_s(x) g_s^*(k) \Phi_s(k) \quad (16)$$

donde el regulador  $R$  es introducido para controlar la contribución de los valores singulares pequeños.

Otra vía de solución pudiera ser tomar dicha integral desde cero hasta un valor finito  $L$ , es decir, transformar el intervalo de  $[0; \infty)$  a un intervalo finito  $[0; L]$ , lo cual es posible pues solo se necesita considerar que la señal  $x$  desaparece fuera de este intervalo que constituye el soporte de dicha variable. Una vía eficiente de resolver este problema inverso mal planteado sería discretizar dicha ecuación integral y luego aplicar los diferentes métodos abordados en la sección anterior.

#### 4.1 Discretización de la ecuación integral

En esta investigación se utilizan dos reglas de discretización de ecuaciones integrales: la regla de Simpson compuesta y la trapezoidal compuesta. La primera se emplea para generar la matriz de los coeficientes y así resolver el problema directo. La segunda regla se emplea para generar la matriz de los coeficientes y así resolver el problema inverso. La **regla de Simpson** compuesta y la **regla Trapezoidal compuesta** constituyen dos de las fórmulas de Newton-Cotes cerradas para la integración numérica, ambas consisten en dividir el intervalo  $[0, L]$  en  $n$  subintervalos de longitud  $h$ . Las hipótesis de la regla de Simpson son las siguientes [3]:

**Teorema 4.1** Sea  $f \in C^4[a, b]$ ,  $n$  par,  $h = \frac{b-a}{n}$  y  $x_j = a + jh$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ . Entonces existe  $\mu \in (a, b)$  tal que la regla de Simpson compuesta para  $n$  subintervalos puede ser escrita como:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2j-1}) + f(b)] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{IV}(\mu) \quad (17)$$

Utilizando las mismas hipótesis anteriores pero cambiando el hecho de que solo es necesario que  $f \in C^2[a, b]$ , la regla trapezoidal puede enunciarse como:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}[f(a) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} (f(x_j)) + f(b)] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\mu) \quad (18)$$

La función en cuestión es  $f(x) = e^{-k_i x} \eta(x)$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $h = \frac{L}{n}$  y  $x_j = jh$  por tanto aplicando Simpson:

$$\Phi_s(k_i) = \int_0^L e^{-k_i x} \eta(x) dx \approx \frac{h}{3}[e^{-k_i x_0} \eta(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} e^{-k_i x_{2j}} \eta(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} e^{-k_i x_{2j-1}} \eta(x_{2j-1}) + e^{-k_i x_n} \eta(x_n)] \quad (19)$$

Aplicando trapezoidal compuesta:

$$\Phi_s(k_i) = \int_0^L e^{-k_i x} \eta(x) dx \approx$$

$$\frac{h}{2}[e^{-k_i x_0} \eta(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} e^{-k_i x_j} \eta(x_j) + e^{-k_i x_n} \eta(x_n)] \quad (20)$$

Si se expresa la sumatoria (19) en forma matricial, se obtiene el sistema de ecuaciones lineales  $y = Bx$ , donde

$$y = \begin{bmatrix} \Phi_s(k_1) \\ \Phi_s(k_2) \\ \vdots \\ \Phi_s(k_m) \end{bmatrix}$$

$$B = \frac{h}{3} \begin{bmatrix} e^{-k_1 x_0} & 4e^{-k_1 x_1} & 2e^{-k_1 x_2} & \dots & e^{-k_1 x_n} \\ e^{-k_2 x_0} & 4e^{-k_2 x_1} & 2e^{-k_2 x_2} & \dots & e^{-k_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ e^{-k_m x_0} & 4e^{-k_m x_1} & 2e^{-k_m x_2} & \dots & \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} \eta(x_0) \\ \eta(x_1) \\ \eta(x_2) \\ \vdots \\ \eta(x_{n-2}) \\ \eta(x_{n-1}) \\ \eta(x_n) \end{bmatrix}$$

Si se expresa la sumatoria (20) en forma matricial, se obtiene el sistema de ecuaciones lineales  $y = Ax$ , donde  $x$  y se mantiene iguales pero el núcleo  $B$  cambia y se transforma en la matriz  $A$  dada a continuación:

$$A = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} e^{-k_1 x_0} & 2e^{-k_1 x_1} & 2e^{-k_1 x_2} & \dots & e^{-k_1 x_n} \\ e^{-k_2 x_0} & 2e^{-k_2 x_1} & 2e^{-k_2 x_2} & \dots & e^{-k_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ e^{-k_m x_0} & 2e^{-k_m x_1} & 2e^{-k_m x_2} & \dots & e^{-k_m x_n} \end{bmatrix}$$

Se concluye que:  $y$  es un vector de orden  $m \times 1$ ,  $A$  y  $B$  son matrices de orden  $m \times (n+1)$  y  $x$  es de orden  $(n+1) \times 1$ , es válido aclarar que también se tendrá en cuenta el caso en que  $m \neq n+1$ .

## 5. Principales resultados

Como parte de este trabajo se elaboraron códigos de programación en el software MATLAB de ambas reglas de discretización abordadas anteriormente, además de los códigos de la descomposición en valores singulares de una matriz y de los tres métodos de regularización, con sus distintos enfoques. Posteriormente se resuelve un problema test [6], similar al problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa que viene dado por la siguiente ecuación integral de Fredholm de primera especie:

$$\int_0^1 (1+ts)e^{ts} x(s) ds = e^t, \quad 0 \leq t \leq 1,$$



la cual tiene solución única  $x(t) = 1$ . Con los resultados obtenidos se verificó que los métodos implementados en MATLAB son válidos para resolver un problema inverso mal planteado.

Para resolver el problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa se emplean los siguientes datos:

$\Omega = \{x \in \mathbb{R} : 0 \leq x \leq 9\}$ , se emplean los valores reales de los parámetros ópticos en las longitudes de onda entre  $750\text{nm}$  y  $830\text{nm}$  reportados en [8],  $0,02 \leq \mu_a \leq 0,08$  y  $4 \leq \mu'_s \leq 14$ , expresados en  $\text{cm}^{-1}$ , el factor de anisotropía  $g = 0,9$ , el número de onda difusa, expresada en  $\text{cm}$ , varía de modo decreciente en el rango de  $0,157079632679$  a  $0,04487989505128$ . Para obtener el rango en que varía la parte espacialmente variante de la absorción  $\eta(x)$  se elaboraron en MATLAB dos funciones que muestran el comportamiento de los coeficientes de absorción y dispersión reducido, se creó además un programa principal que se utilizará para el procesamiento de los datos y la obtención de los resultados.

En el mismo se utiliza  $m = 26$  y  $n = 16$  para la discretización, se determina el rango de variación de la solución exacta  $\eta(x)$  dada por un vector de orden  $17 \times 1$ , se genera la matriz  $B$  para resolver el problema directo por la regla de Simpson lo cual permite conocer los datos, es decir, la parte derecha del sistema  $y$ , la cual es un vector de orden  $26 \times 1$ , se determina por la regla trapezoidal el núcleo  $A$  de la ecuación integral para resolver el problema inverso, el cual es una matriz mal condicionada pues su número de condicionamiento  $\kappa(A) = 2,1256 \cdot 10^{17}$  y sus valores singulares tienden a cero, luego este problema inverso es mal planteado y es necesario aplicar métodos de regularización para su resolución. Se considera que los datos y elaborados anteriormente están sujetos a ciertos ruidos, lo que ocurre frecuentemente debido a que, en general, estos datos provienen de la discretización de una función continua o porque, como es el caso, es un dato obtenido experimentalmente y por tanto está sujeto a errores de medición y aproximación. El vector con ruidos  $y^\delta$  se generó utilizando el comando de MATLAB `rand` a través de la siguiente expresión  $y^\delta = y + \delta(-\text{ones}(\text{size}(y)) + 2\text{rand}(\text{size}(y)))$ . Al utilizar las funciones implementadas en MATLAB en el programa principal se determina el error entre la solución exacta y la solución con ruidos, sin emplear regularización, y se determinaron los errores para diferentes valores de  $\delta$ . Las figuras 1 y 2 demuestran el resultado de cualquier intento por resolver el sistema sin regularización. Se realizaron, para cada método, tablas y figuras con valores para el error cuando hay presentes distintos niveles de ruido  $\delta$  y diferentes variaciones del parámetro de regularización  $\alpha$ . Esto permitió realizar comparaciones entre el método de Tikhonov en sus dos variantes y la *TSVD*, en donde se concluyó que Tikhonov como problema de minimización es el mejor de los tres, y al comparar las diferentes variantes del método iterativo de Landweber se concluyó que tanto la que emplea el número de iteraciones *a priori* como la que emplea la función filtro son las más adecuadas, es válido aclarar que su uso depende de la disponibilidad de memoria y de tiempo para realizar la *SVD* que es

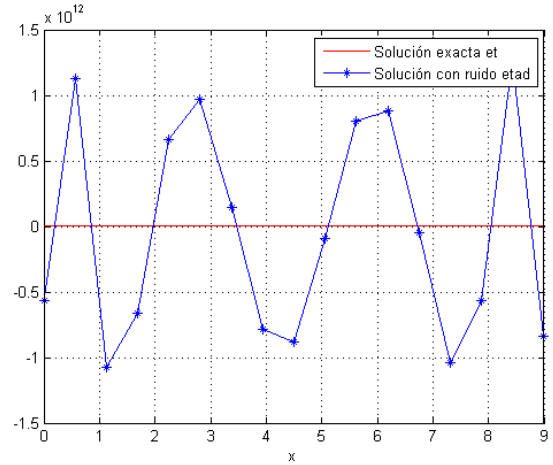


Figura 1. Comparación entre solución exacta y con ruido  $\delta = 0,5$

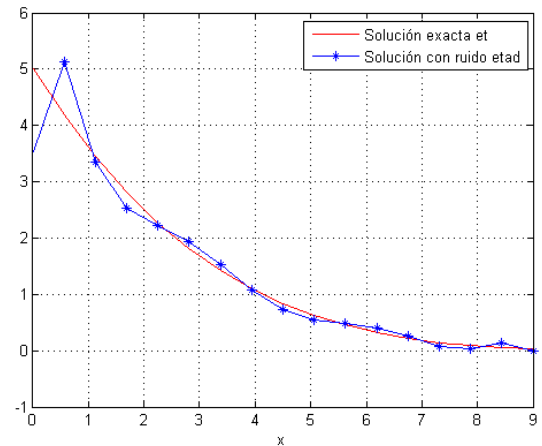


Figura 2. Comparación entre solución exacta y con ruido  $\delta = 0$

una operación costosa en ambos sentidos.

Las figuras 3, 5, 4 y 6 reflejan el comportamiento de la solución exacta y el de las soluciones regularizadas, para distintos niveles de ruido ( $\delta = 0,1$  y  $\delta = 0$ ), obtenidas para Tikhonov, como problema de minimización y para Landweber, con el número de iteraciones dado *a priori*. A partir de ellas se puede notar que los valores obtenidos por Landweber son mayores que los obtenidos por Tikhonov, aunque el primero es más estable con respecto a perturbaciones del lado derecho, inclusive para  $\delta$  grandes. Para dar cumplimiento al objetivo de esta investigación, que es determinar cuál de los métodos abordados brinda mejor precisión para resolver el problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa, se concluye que el método de Tikhonov brinda una solución aproximada más precisa que la obtenida por el método iterativo de Landweber.

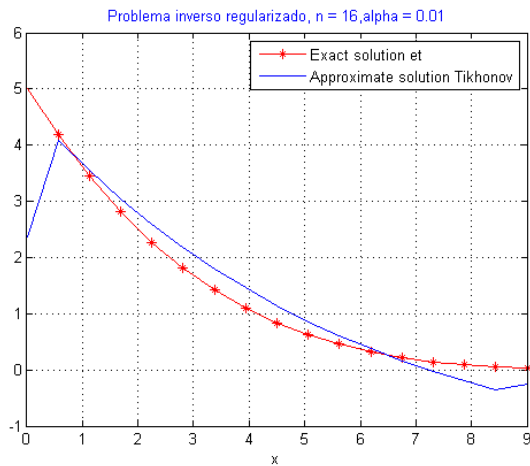


Figura 3. Exacta y Tikhonov  $\delta = 0,1$

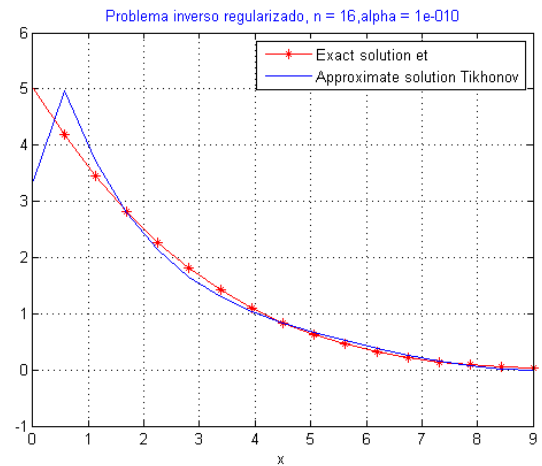


Figura 5. Exacta y Tikhonov  $\delta = 0$

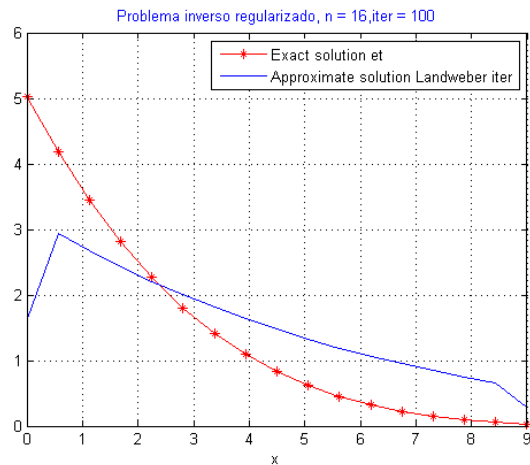


Figura 4. Exacta y Landweber  $\delta = 0,1$

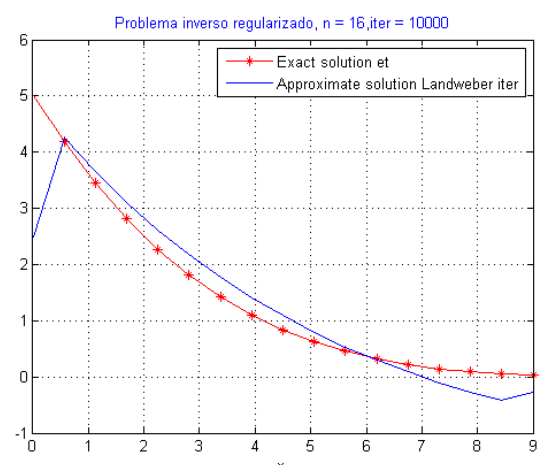


Figura 6. Exacta y Landweber  $\delta = 0$

## 6. Conclusiones

Los resultados obtenidos permiten concluir que:

- Los fundamentos teóricos-metodológicos estudiados sobre la teoría general de los problemas inversos y la teoría general de la regularización, resultaron de vital importancia para un correcto análisis del problema inverso unidimensional en la tomografía óptica difusa.
- La SVD de una matriz constituye la base para la realización de una familia importante de métodos de regularización abordados en el trabajo.
- El problema inverso unidimensional en la DOT es reducible a la discretización de una ecuación integral de Fredholm de primera especie, el cual es un problema inverso mal planteado, obteniéndose un sistema de ecuaciones lineales al cual resulta imprescindible aplicar los métodos de regularización descritos.
- Las simulaciones numéricas realizadas de los problemas abordados, corroboran las estimaciones teóricas y muestran que el método de Landweber brinda estabilidad con respecto a distintos niveles de ruido y que el

método de Tikhonov es el que brinda la solución más precisa.

- La implementación se realizó sobre MATLAB, software que resultó efectivo, por sus atributos: exactitud y confiabilidad.

## Agradecimientos

Los autores desean agradecer a todas las personas que de un modo u otro contribuyeron a la realización de este trabajo, sin su dedicación y paciencia esto no hubiera sido posible.

## Referencias

- [1] Joao Carlos Alves Barata. Notas para un Curso de Física-Matemática. *Departamento de Física-Matemática, USP, Sao Paulo, Brasil*, 2016.
- [2] Simon R. Arridge and John C. Schotland. *Optical tomography: forward and inverse problems*. 2009.

- [3] Ricahrd L. Burden and J. Douglas Faires. *Numerical Analisis*. Brooks/Cole, Cengage Learning, USA, 2011.
- [4] H.W. Engl and A. Neubauer. Regularization of inverse problems.
- [5] J. Hadamard. *Lectures on the Cauchy Problem in Linear Partial Differential Equations*. Yale University Press, New York,, 1923.
- [6] Andreas Kirsch. *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Second Edition, Springer, New York,, 2011.
- [7] L. Landweber. *An iteration formula for Fredholm integral equations of the first kind*. Am.J.Math., 1951.
- [8] Elder Rubens Silveira Rampazzo Filho and Marcelo Idel Vasserman. Tomografía por Óptica Difusa-Protótipo de 16 canales. *Escuela Politécnica de la Universidad de Sao Paulo. Departamento de Ingeniería Mecánica*, 2010.
- [9] A.N. Tikhonov. *Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method*. 1963.