

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

IZABELA PATRÍCIO

TOMOGRAFIA DIFUSA

CURITIBA  
2012

IZABELA PATRÍCIO

TOMOGRAFIA DIFUSA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Antônio Leitão.

CURITIBA  
2012

# Agradecimentos

Não posso começar a escrever essas palavras sem antes agradecer ao apoio dos meus pais, sempre presentes em todos os momentos da minha vida e também aos meus queridos irmãos.

Além deles, não posso deixar de agradecer ao meu noivo Túlio, uma pessoa maravilhosa que entrou na minha vida e dela nunca mais irá sair. Muito obrigada por toda sua paciência, carinho, sua alegria em cada passo dado nessa caminhada e seu apoio incondicional sem o qual muitas coisas que desejo não teriam o porquê de um dia serem conquistadas.

Quero agradecer aos meus amigos da PPGMA, principalmente a Karla, sempre me incentivando e me entendendo nos momentos mais complicados. Aos professores que me ajudaram nessa caminhada, principalmente aos meus Professores Yuan Jin Yun, Jorge Zubelli e meu orientador Antônio Leitão.

E os meus sinceros agradecimentos a todos que me ajudaram, me apoiaram e até aqueles que colocaram alguns obstáculos no meio do caminho, vocês foram essenciais para essa conquista.

# Resumo

O objetivo desse trabalho é apresentar a modelagem matemática, discutir a solubilidade, e investigar métodos numéricos para um problema inverso relacionado à tomografia difusa. Em particular, são abordados dois métodos numéricos distintos para resolver o problema inverso. O primeiro deles consiste em resolver o problema inverso utilizando a minimização de uma função de erro e segue a metodologia proposta por Singer, Grümbaum, Kohn e Zubelli (1992), [17]. O segundo deles consiste em resolver o problema inverso no caso particular em que a difusão é isotrópica, através de um método de determinação dos parâmetros ao longo das diagonais, como proposto por Grümbaum (1992), [8].

**Palavras-chave:** "Problemas inversos", identificação de parâmetros, tomografia difusa.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>iii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>6</b>
<b>2 Modelagem Matemática</b>	<b>8</b>
<b>3 Problema Direto e Inverso</b>	<b>24</b>
3.1 Problema Direto . . . . .	24
3.2 Problema Inverso . . . . .	27
<b>4 Resolução do Problema Inverso</b>	<b>28</b>
4.1 Mínimos quadrados . . . . .	28
4.2 Método de Levenberg-Marquardt . . . . .	29
4.3 Método das diagonais . . . . .	33
<b>5 Resolução do Problema Direto</b>	<b>39</b>
5.1 Método do Gradiente Conjugado . . . . .	40
<b>6 Exemplos numéricos</b>	<b>50</b>
6.1 Implementação dos mínimos quadrados . . . . .	50
6.2 Implementação do método das diagonais . . . . .	54

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo dos mecanismos de propagação das radiações eletromagnéticas tem possibilitado a compreensão e estudo de inúmeros fenômenos e mecanismos da natureza. Em particular, o conhecimento destes mecanismos foi aproveitado na medicina possibilitando a reconstrução do interior do corpo humano. Isto foi possível graças a propriedade que o corpo humano possui de difundir radiação seja da forma ultrasônica, infravermelha ou de neutrons. Esta área de estudo é denominada de Tomografia Médica. Em particular, o uso da Tomografia por raios-X tornou-se uma importante ferramenta para diagnósticos médicos.

O primeiro trabalho que teve um caráter inovador sobre Tomografia Difusa foi o paper Singer et al. (Science 1992), [17]. O ponto principal é que antes desse trabalho todas as tentativas de reconstruir o interior de um objeto via infravermelho haviam sido feitas tentando adaptar os algoritmos e modelos lineares já utilizados para raios-X ou outros modelos lineares. Porém, até 1992 nunca havia sido proposto uma modelagem partindo de "primeiros princípios" e que levasse em conta o aspecto de "múltiplos espalhamentos" e a importância de usar tal informação. Tal inovação pode ser também confirmada pela patente que saiu no mesmo ano e pelas mais de 100 citações do trabalho.

Note que o caso de tomografia por ultra-som, apesar de poder ser considerada como "tomografia difusa", não resolve o problema de espalhamento em sua forma não-linear, pois ela faz uso da chamada aproximação de Boen (ou de altas frequências/pequenas perturbações).

A objetivo desse trabalho é estudar o uso de radiações de baixa energia, na faixa do infravermelho, no lugar do raio-X para executar a reconstrução não-invasiva do interior do corpo humano. A dificuldade do uso de baixas energias, entretanto, é que neste caso a radiação não se propaga mais em linha reta. Deste modo, passa-se a considerar os efeitos de difusão e espalhamento da radiação incidente sobre o corpo. A presença de significativa quantidade tanto de difusão como de espalhamento requer a consideração de infinitos caminhos não retilíneos ligando a fonte de radiação ao detector. Assim, a amostragem no detector das partículas emergentes do corpo, intuitivamente, conterá a "memória" dos múltiplos caminhos percorridos.

Este trabalho apresenta um modelo simples e prático de propagação de radiação in-

fravermelha num meio desconhecido. Este modelo é substancialmente diferente daquele utilizado na tomografia por raio-X tradicional. Ele também não leva em consideração o tempo de transição e o problema inverso obtido é não linear ao contrário daquele obtido na tomografia por raio-X.

Iniciamos este trabalho descrevendo a modelagem matemática para um modelo geral de tomografia difusa, baseado no paper [7] depois para um caso mais específico, o qual será abordado numericamente, como já foi feito no paper [17]. A modelagem é feita pela discretização do meio num número suficiente de pequenos elementos de área que são denominados de pixels. As partículas que entram num pixel poderão ser absorvidas por ele ou sobreviver e passar para um pixel adjacente de acordo com uma certa probabilidade. O modelo proposto considera todos os possíveis caminhos entre uma fonte e um detector associando para cada um destes caminhos uma probabilidade. O valor desta probabilidade vai depender das características de espalhamento e atenuação dos pixels componentes do caminho. Devido a sua simplicidade, o modelo pode ser empregado em um variedade de situações físicas além da propagação de fótons.

Depois de descrita a modelagem, descreveremos o problema direto e o problema inverso que estão relacionados com o problema de tomografia difusa. Veremos também que resolver o problema de tomografia difusa nada mais é que resolver o problema inverso que apresentaremos a seguir. Depois disso, mostraremos duas formas de resolver o problema inverso, uma forma que usa o problema direto em cada passo e o método de Levenberg-Marquardt, como foi feito em [17] e a outra forma que usa como estratégia encontrar o resultado pelas diagonais do objeto discretizado, como foi feito em [3]. Por fim, faremos a implementação das duas resoluções do problema inverso.

## Capítulo 2

# Modelagem Matemática

Em tomografia o objetivo é reconstruir o interior de um objeto a partir de dados de fronteira. O raio X é um exemplo clássico da tomografia. Esta última permite uma análise de dados mais fácil, porque os raios de alta energia viajam em uma linha reta. A noção de tomografia difusa tem sido usada como uma tentativa de modelar o movimento de fótons que sofrem atenuação e dissipação quando incidem através da matéria com características desconhecidas.

O modelo aqui apresentado, no caso bidimensional, consiste em discretizar o objeto por meio de pequenos elementos de área assumindo que as propriedades físicas e químicas dentro de cada área se mantêm constante. Isto é, dividimos o objeto em quadrados, os quais nós chamamos de pixels (ou voxels no caso tridimensional). Normalmente, o tamanho do pixel corresponde à resolução desejada na reconstrução. Esse modelo se aproxima tanto mais da realidade quanto maior for o número de elementos de área usados na discretização do objeto, tanto qualitativamente quanto quantitativamente.

No que se segue descrevemos o modelo proposto nos trabalhos [17], [7] e [16]. Dados  $x_i = i\rho$ ,  $y_i = i\rho$ , definimos o pixel  $(i, j)$  como sendo o conjunto

$$\Delta_{ij} = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x_i - \frac{1}{2}\rho < x < x_i + \frac{1}{2}\rho \text{ e } y_j - \frac{1}{2}\rho < y < y_j + \frac{1}{2}\rho \right\},$$

onde  $\rho$  é o tamanho do pixel e  $\Delta_{ij}$  é o pixel  $(i, j)$ .

Para determinar o tipo de tecido constituinte de cada elemento de área é necessário determinar as características de absorção ou espalhamento desses elementos de área. Isto é, precisamos determinar se esses elementos de área absorvem ou espalham radiação e com qual probabilidade isso ocorre. Isso é importantíssimo na hora de resolver o problema de tomografia difusa.

Assumimos que a radiação consiste de um grande número de partículas, emitidas por uma fonte numa posição arbitrária, que entram no objeto. Uma vez que existe o objeto, se a partícula não for pega por um detector de partículas, que também está numa posição arbitrária, esta partícula não pode mais voltar ao objeto.

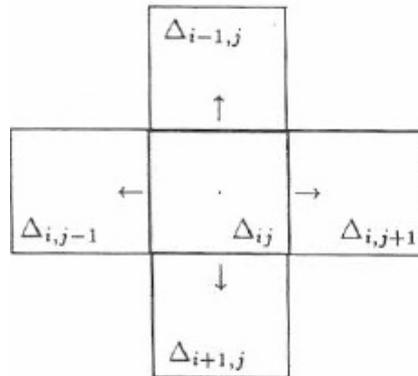


Figura 2.1: Movimento de uma partícula. Figura retirada de [5].

Na figura 2.1 temos a representação do movimento da partícula. Em nosso modelo, a partícula sempre se move, indo de um pixel para outro adjacente. Ou seja, ela pode se movimentar de quatro formas distintas: para frente, para trás, para a esquerda e para a direita.

Agora, quando a partícula já está dentro de um pixel, ela poderá vir a ser aniquilada por absorção. Descrevemos isso, com uma probabilidade, denotamos por  $w_{ij}$  a probabilidade da partícula não ser absorvida no pixel  $\Delta_{ij}$ . Portanto, cada pixel terá uma probabilidade  $w_{ij}$  anexada a ele.

Assim, quando a partícula não é absorvida pelo pixel,  $w_{ij} \neq 0$ , temos que ela irá continuar sua trajetória, a qual será descrita pelas probabilidades da partícula ir para frente, para trás, para direita ou para esquerda.

Definimos essas probabilidades da seguinte forma: cada vez que uma partícula entrar no pixel  $\Delta_{ij}$  e não for absorvida, ela terá uma probabilidade

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{ij} \\ b_{ij} \\ s_{ij} \end{array} \right\} \text{ da partícula ir } \left\{ \begin{array}{l} \text{para frente} \\ \text{para trás} \\ \text{para um dos lados} \end{array} \right\}$$

Como pode ser visto na figura 2.2.

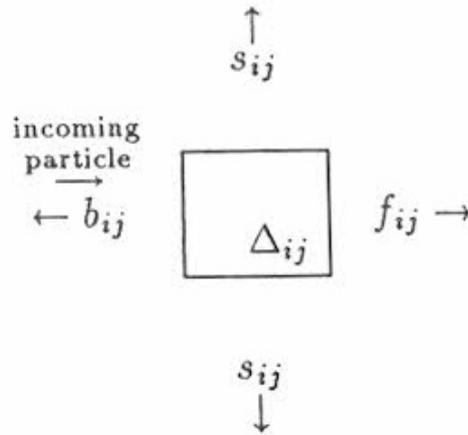


Figura 2.2: Diferentes probabilidades associadas ao movimento da partícula. Figura retirada de [5].

Note que no caso bidimensional as as probabilidades  $f_{ij}$ ,  $b_{i,j}$  e  $s_{i,j}$  e satisfazem

$$b_{ij} + 2s_{ij} + f_{ij} = 1. \quad (2.1)$$

Pois, pela forma que definimos, não existe nenhuma outra direção para a partícula se movimentar do pixel que está situada para um adjacente.

Já no caso tridimensional, teríamos que

$$b_{ijk} + 4s_{ijk} + f_{ijk} = 1. \quad (2.2)$$

Agora, para emitirmos uma partícula para o corpo e capturá-la depois de ter transitado por ele, precisamos posicionar fontes e detectores ao seu redor. Convencionamos a posição das fontes e dos detectores anexando para cada pixel externo, isto é, um com  $i \in \{1, N\}$  ou  $j \in \{1, N\}$ , uma fonte. É conveniente colocar os detectores localizados na extensão da grade os quais os índices são  $i \in \{0, N + 1\}$  ou  $j \in \{0, N + 1\}$ , isto é, os detectores estão localizados, fora da extensão do objeto. Veja figura 2.3.

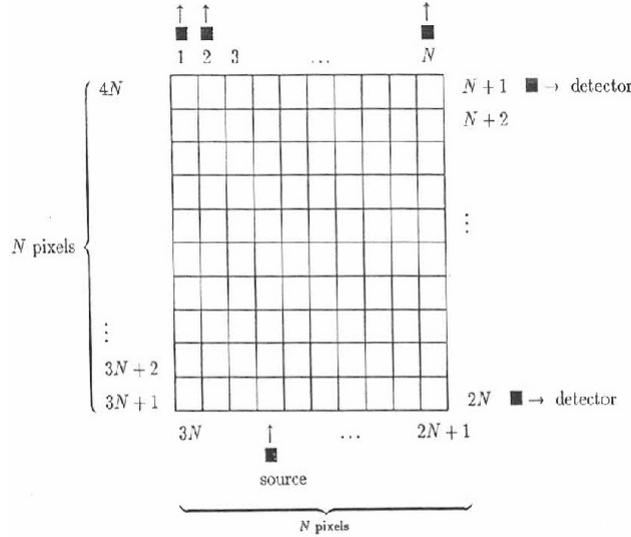


Figura 2.3: Diagrama das fontes e detectores em posições genéricas, com a convenção para os seus números. Figura retirada de [5].

Nós podemos medir, para todas as possibilidades de pares de fonte-detector a intensidade relativa de radiação transmitida. Assumimos que esta intensidade relativa corresponde a probabilidade de entrar numa dada fonte e sair por um determinado detector.

A partir do modelo acima mencionado, o objeto é caracterizado pelo conjunto de  $3N^2$  variáveis,  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ , pois temos a relação entre as probabilidades dada pela equação (2.1) onde  $b_{ij} = 1 - (f_{ij} + 2s_{ij})$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ . E assim, para cada pixel temos três probabilidades,  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$  como são  $N^2$  pixels, temos  $3N^2$  variáveis.

Além disso, existem  $16N^2$  possibilidades de posição para os pares de fonte-detector. Pois temos  $4N$  possibilidade de posição para detectores e  $4N - 4$  possibilidades de posição para fontes, no entanto, temos que considerar que nos pixels dos cantos, temos que saber qual dos lados a partícula está entrando. Sendo assim, temos também,  $4N$  possibilidades de posições para as fontes. Portanto, como estamos interessados no par fonte-detector, temos  $4N \times 4N = 16N^2$  possibilidades de posição para o par fonte-detector. Veremos mais tarde, na modelagem do problema inverso, que para realizar um reconstrução não há necessidade de termos  $16N^2$  medidas.

As quantidades  $w_{ij}, f_{ij}, s_{ij}$  e  $b_{ij}$  são probabilidades, logo, satisfazem a seguinte desigualdade:

$$0 \leq w_{ij}, f_{ij}, s_{ij}, b_{ij} \leq 1. \quad (2.3)$$

Se tivermos  $w_{ij}, f_{ij}, s_{ij}$  e  $b_{ij}$  satisfazendo (2.3) e também a equação (2.1) (ou (2.2) para

o caso tridimensional), dizemos que  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$  pertencem à uma região física. É importante ressaltar que o caso em que  $w_{ij} = 1$ , para todo  $i, j$  é crítico, uma vez que isso significa que não há atenuação. E também note que se  $s_{ij} = b_{ij} = 0$  para todo  $i, j$ , teríamos o modelo de tomografia de raio-X.

Agora, faremos uma abordagem para um caso geral feito no paper [7]. Como já descrevemos, de cada fonte a partícula é injetada em apenas um pixel adjacente, depois disso, essa partícula percorre uma trajetória aleatória pelos pixels até chegar ao pixel onde um dos detectores está localizado.

A motivação desta abordagem mais geral vem do fato que, em sendo a escolha da dimensão do pixel (ou voxel), é natural perguntarmos o que acontece quando agregamos quatro (ou mais) pixels que se intersectam na aresta (ou vértice) e formamos um novo reticulado mais grosso.

Sendo assim, a evolução temporal do sistema é governada por uma cadeia de Markov com espaço de estado discreto e tempo discreto. A probabilidade do primeiro passo de transição é denotado pela matriz  $P$ . Existem três estados para o fóton: entrando, saindo e movendo-se no interior do objeto. Os dois primeiros correspondem aos estados das partículas nas fontes e detectores, respectivamente.

$P$  é uma matriz cujas linhas e colunas são rotuladas pelos estados entrando e saindo, respectivamente, e cujas entradas são as probabilidades de um fóton se mover de um estado arbitrário de entrada para um estado arbitrário de saída. Esta definição ficará mais clara no decorrer deste capítulo. Convencionamos a rotulação dos estados como na figura 2.4. Nessa figura, os estados entrando são os números com quadrados, os estados saindo são os números com círculos e os estados movendo-se no interior do objeto são os números com os losangos. Note que, nesse caso estamos considerando, 8 fontes e 8 detectores. Existem  $4 \times 4 = 16$  probabilidades para cada um dos quatro pixels, dando um total de 64 probabilidades desconhecidas.

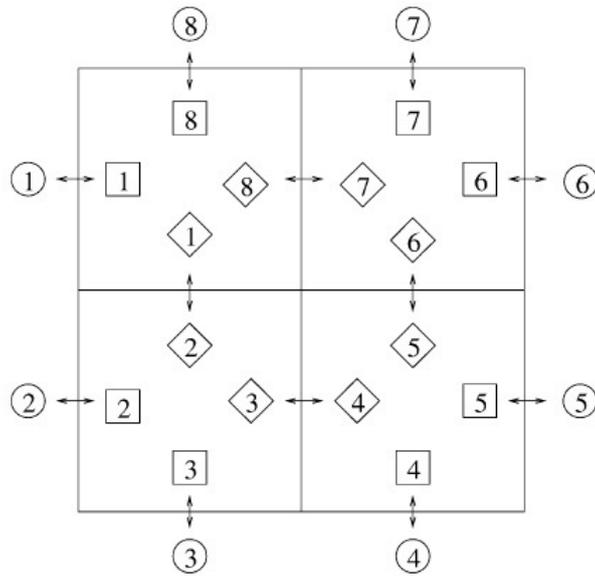


Figura 2.4: Rotulação dos estados para a matriz  $P$ . Figura retirada de [7].

A fim de recuperar as probabilidades é preciso pelo menos tantos dados independentes como incógnitas. Lembre-se que os oito detectores estão posicionados ao redor do exterior do sistema. Quando um fóton é lançado por uma fonte no sistema através de uma borda externa, ele ou é absorvido em algum pixel do sistema ou é detectado, uma vez que deixa o sistema, por um detector.

A matriz de probabilidade do primeiro passo de transição  $P$  é naturalmente decomposta em blocos que conectam diferentes tipos de estados. Denotamos por:

- $P_{IO}$  o bloco referente a um passo da transição de um estado arbitrário ‘incoming’ para um estado arbitrário ‘outgoing’, isto é,  $P_{IO}[s, t]$  = a probabilidade de um fóton mover do estado ‘incoming’  $s$  direto para o estado ‘outgoing’  $t$ ;
- $P_{HH}$  o bloco referente a um passo da transição de um estado arbitrário ‘hidden’ para um estado arbitrário ‘hidden’, isto é,  $P_{HH}[s, t]$  = a probabilidade de um fóton mover do estado ‘hidden’  $s$  direto para o estado ‘hidden’  $t$ ;
- $P_{IH}$  o bloco referente a um passo da transição de um estado arbitrário ‘incoming’ para um estado arbitrário ‘hidden’, isto é,  $P_{IH}[s, t]$  = a probabilidade de um fóton mover do estado ‘incoming’  $s$  direto para o estado ‘hidden’  $t$ ;
- $P_{HO}$  o bloco referente a um passo da transição de um estado arbitrário ‘hidden’ para um estado arbitrário ‘outgoing’, isto é,  $P_{HO}[s, t]$  = a probabilidade de um fóton mover do estado ‘hidden’  $s$  direto para o estado ‘outgoing’  $t$ .

Sendo assim, a escolha dos nomes das variáveis de  $P$  indicam a correspondente transição, por exemplo, N11S significa que entrou no pixel (1, 1) pelo norte e saiu pelo sul.

Logo, temos que as matrizes são dadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 P_{HH} &= \begin{pmatrix} 0 & N11S & 0 & 0 & 0 & 0 & N11L & 0 \\ S21N & 0 & 0 & S21L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O21N & 0 & 0 & O21L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L22O & 0 & 0 & L22N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S22O & 0 & 0 & S22N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & N12S & 0 & 0 & N12O \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L12S & 0 & 0 & L12O \\ 0 & O11S & 0 & 0 & 0 & 0 & O11L & 0 \end{pmatrix}, \\
 P_{H0} &= \begin{pmatrix} N11O & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N11N \\ 0 & S21O & S21S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & O21O & O21S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L22S & L22L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S22S & S22L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N12L & N12N & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L12L & L12N & 0 \\ O11O & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & O11N \end{pmatrix}, \\
 P_{IH} &= \begin{pmatrix} 0 & L11S & 0 & 0 & 0 & 0 & L11L & 0 \\ L21N & 0 & 0 & L21L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ N21N & 0 & 0 & N21L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N22O & 0 & 0 & N22N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & O22O & 0 & 0 & O22N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & O12S & 0 & 0 & O12O \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S12S & 0 & 0 & S12O \\ 0 & S11S & 0 & 0 & 0 & 0 & S11L & 0 \end{pmatrix}, \\
 P_{IO} &= \begin{pmatrix} L11O & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L11N \\ 0 & L21O & L21S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N21O & N21S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N22S & N22L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & O22S & O22L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & O12L & O12N & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S12L & S12N & 0 \\ S11O & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S11N \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Temos que

$$Q = Q_{IO} = P_{IO} + P_{IH}(I - P_{HH})^{-1}P_{HO}.$$

A equação acima nos dá a relação de entrada-saída  $Q$ , onde  $Q[i, j]$  é a probabilidade da partícula chegar no estado 'outgoing'  $j$  (a localização de um detector) tendo saído no estado 'incoming'  $i$  (a localização de uma fonte).

Uma forma de ver que a relação acima está correta, é observando, que usando a propriedade de Markov, temos que

$$Q_{IO} = P_{IO} + P_{IH}Q_{HO}$$

e

$$Q_{HO} = P_{HO} + P_{HH}Q_{HO}.$$

Dizemos que uma forma de **resolver o problema direto** é quando calculamos  $Q$  a partir de  $P_{IO}$ ,  $P_{HH}$ ,  $P_{HO}$  e  $P_{IH}$ . Ou seja, são dadas  $P_{IO}$ ,  $P_{HH}$ ,  $P_{HO}$  e  $P_{IH}$  e queremos encontrar  $Q$ . E para **resolver o problema inverso**, é dado  $Q$ , queremos calcular  $P_{IO}$ ,  $P_{HH}$ ,  $P_{HO}$  e  $P_{IH}$ .

Quando resolvemos o problema inverso são encontradas entradas nulas na matriz de dados. Devido a essa não-linearidade nas condições de consistência, as seguintes submatrizes 4x4 da matriz de dados 8x8 tem posto menor ou igual a 2.

$$\begin{pmatrix} Q[1,5] & Q[1,6] & Q[1,7] & Q[1,8] \\ Q[2,5] & Q[2,6] & Q[2,7] & Q[2,8] \\ Q[3,5] & Q[3,6] & Q[3,7] & Q[3,8] \\ Q[4,5] & Q[4,6] & Q[4,7] & Q[4,8] \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

$$\begin{pmatrix} Q[5,1] & Q[5,2] & Q[5,3] & Q[5,4] \\ Q[6,1] & Q[6,2] & Q[6,3] & Q[6,4] \\ Q[7,1] & Q[7,2] & Q[7,3] & Q[7,4] \\ Q[8,1] & Q[8,2] & Q[8,3] & Q[8,4] \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\begin{pmatrix} Q[7,3] & Q[7,4] & Q[7,5] & Q[7,6] \\ Q[8,3] & Q[8,4] & Q[8,5] & Q[8,6] \\ Q[1,3] & Q[1,4] & Q[1,5] & Q[1,6] \\ Q[2,3] & Q[2,4] & Q[2,5] & Q[2,6] \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$\begin{pmatrix} Q[3,7] & Q[3,8] & Q[3,1] & Q[3,2] \\ Q[4,7] & Q[4,8] & Q[4,1] & Q[4,2] \\ Q[5,7] & Q[5,8] & Q[5,1] & Q[5,2] \\ Q[6,7] & Q[6,8] & Q[6,1] & Q[6,2] \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Aproveitando a natureza dos modelos Markovianos, pode-se facilmente provar que essas matrizes tem posto deficiente. Para isso defina:

$$\begin{cases} p_{i,j} = & \text{propabilidade de ir diretamente do estado incoming } i \text{ para o estado hidden } j. \\ s_{i,j} = & \text{probabilidade de partir do estado hidden } i \text{ e chegar no estado outgoing } j. \end{cases}$$

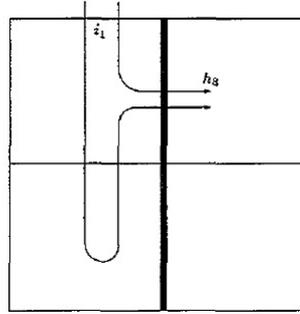


Figura 2.5: Duas rotas dadas por  $p_{1,8}$ . Figura retirada de [7].

Com a finalidade de obter a deficiência do rank da matriz (2.4), um fóton é injetado diretamente se esta trajetória sai do estado incoming  $i$  para o estado hidden  $j$  incluindo somente a travessia da barreira vertical mais grossa como mostra a figura 2.5. Por exemplo, nessa figura, existem duas trajetórias  $p_{1,8}$ .

Note que

$$\begin{aligned} Q[1, 5] &= p_{1,8}s_{8,5} + p_{1,5}s_{5,5} \\ Q[1, 6] &= p_{1,8}s_{8,6} + p_{1,5}s_{5,6} \\ Q[1, 7] &= p_{1,8}s_{8,7} + p_{1,5}s_{5,7} \\ Q[1, 8] &= p_{1,8}s_{8,8} + p_{1,5}s_{5,8} \end{aligned} \quad (2.8)$$

ou ainda,

$$\begin{pmatrix} Q[1, 5] & Q[1, 6] & Q[1, 7] & Q[1, 8] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{1,8} & p_{1,5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{8,5} & s_{8,6} & s_{8,7} & s_{8,8} \\ s_{5,5} & s_{5,6} & s_{5,7} & s_{5,8} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Denotaremos por  $Q_{lr}$  a submatriz 4x4 das probabilidades as quais um fóton vai da esquerda para direita do sistema, iniciando nas fontes 1, 2, 3 ou 4 e terminando nos detectores 5, 6, 7 ou 8. Da mesma forma,  $Q_{rl}$  é a submatriz 4x4 das probabilidades as quais um fóton vai da direita para esquerda do sistema. E por fim,  $Q_{tb}$  e  $Q_{bt}$  são as submatrizes representando as probabilidades do fóton ir de baixo pra cima e de cima para baixo, respectivamente.

Sendo assim, podemos escrever as submatrizes  $Q_{lr}$ ,  $Q_{tb}$ ,  $Q_{rl}$  e  $Q_{bt}$ , usando a mesma notação, da seguinte forma, respectivamente:

$$\begin{pmatrix} Q[1,5] & Q[1,6] & Q[1,7] & Q[1,8] \\ Q[2,5] & Q[2,6] & Q[2,7] & Q[2,8] \\ Q[3,5] & Q[3,6] & Q[3,7] & Q[3,8] \\ Q[4,5] & Q[4,6] & Q[4,7] & Q[4,8] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{1,8} & p_{1,5} \\ p_{2,8} & p_{2,5} \\ p_{3,8} & p_{3,5} \\ p_{4,8} & p_{4,5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{8,5} & s_{8,6} & s_{8,7} & s_{8,8} \\ s_{5,5} & s_{5,6} & s_{5,7} & s_{5,8} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\begin{pmatrix} Q[7,3] & Q[7,4] & Q[7,5] & Q[7,6] \\ Q[8,3] & Q[8,4] & Q[8,5] & Q[8,6] \\ Q[1,3] & Q[1,4] & Q[1,5] & Q[1,6] \\ Q[2,3] & Q[2,4] & Q[2,5] & Q[2,6] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{7,3} & p_{7,6} \\ p_{8,3} & p_{8,6} \\ p_{1,3} & p_{1,6} \\ p_{2,3} & p_{2,6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{3,3} & s_{3,4} & s_{3,5} & s_{3,6} \\ s_{6,3} & s_{6,4} & s_{6,5} & s_{6,6} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

$$\begin{pmatrix} Q[5,1] & Q[5,2] & Q[5,3] & Q[5,4] \\ Q[6,1] & Q[6,2] & Q[6,3] & Q[6,4] \\ Q[7,1] & Q[7,2] & Q[7,3] & Q[7,4] \\ Q[8,1] & Q[8,2] & Q[8,3] & Q[8,4] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{5,4} & p_{5,1} \\ p_{6,4} & p_{6,1} \\ p_{7,4} & p_{7,1} \\ p_{8,4} & p_{8,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{4,1} & s_{4,2} & s_{4,3} & s_{4,4} \\ s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} & s_{1,4} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

$$\begin{pmatrix} Q[3,7] & Q[3,8] & Q[3,1] & Q[3,2] \\ Q[4,7] & Q[4,8] & Q[4,1] & Q[4,2] \\ Q[5,7] & Q[5,8] & Q[5,1] & Q[5,2] \\ Q[6,7] & Q[6,8] & Q[6,1] & Q[6,2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{3,2} & p_{3,7} \\ p_{4,2} & p_{4,7} \\ p_{5,2} & p_{5,7} \\ p_{6,2} & p_{6,7} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{2,7} & s_{2,8} & s_{2,1} & s_{2,2} \\ s_{7,7} & s_{7,8} & s_{7,1} & s_{7,2} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Desde que cada uma destas submatrizes  $4 \times 4$  é o produto de uma matriz  $4 \times 2$  com uma matriz  $2 \times 4$ , logo essas submatrizes  $4 \times 4$  tem posto, no máximo, 2.

Generalizando, considere agora, um problema  $m \times n$  como na figura 2.6. Seja  $Q_{lr}$  a submatriz representando a probabilidade dos fótons os quais entram no sistema pela esquerda e saem pela direita atravessando a linha grossa na vertical.

Nesse caso,

$$Q_{lr} = \begin{pmatrix} Q[1, m+2k+1] & Q[1, m+2k+2] & \cdots & Q[1, N] \\ Q[2, m+2k+1] & Q[2, m+2k+2] & \cdots & Q[2, N] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q[m+2k, m+2k+1] & Q[m+2k, m+2k+2] & \cdots & Q[m+2k, N] \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

onde  $N = 2(m+n)$ .

Na proposição a seguir, mostraremos que o rank da matriz  $Q_{lr}$ , no caso geral, também é deficiente. Como também as outras matrizes,  $Q_{tb}$ ,  $Q_{rl}$  e  $Q_{bt}$ . Isso nos dará uma possibilidade de analisar os dados independentes do nosso problema inverso.

**Proposição 2.1.**  $\text{Rank}(Q_{lr}) \leq m$ .

*Demonstração.* Para qualquer  $Q[i, j]$  em  $Q_{lr}$  temos que  $Q[i, j] = \sum_{\alpha=1}^m p_{i,\alpha} s_{\alpha,j}$ , isto é,

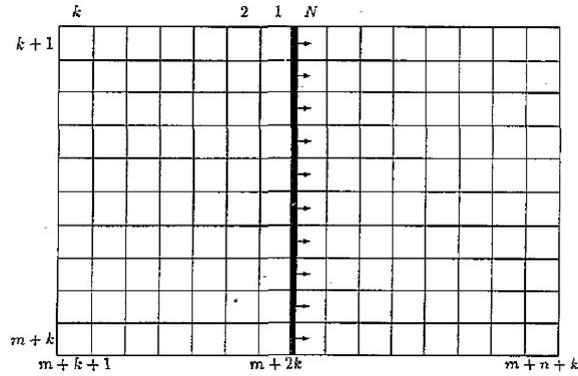


Figura 2.6: Um exemplo de um sistema grande. A linha grossa separa o estado da esquerda, do estado da direita. Figura retirada de [7].

$$Q_{lr} = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & \cdots & p_{1,m} \\ p_{2,1} & p_{2,2} & \cdots & p_{2,m} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ p_{m+2k,1} & p_{m+2k,2} & \cdots & p_{m+2k,m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{1,m+2k+1} & s_{1,m+2k+2} & \cdots & s_{1,N} \\ s_{2,m+2k+1} & s_{2,m+2k+2} & \cdots & s_{2,N} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ s_{m,m+2k+1} & s_{m,m+2k+2} & \cdots & s_{m,N} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Desde que  $Q_{lr}$  é o produto de uma matriz  $(m+2k) \times m$  com uma matriz  $m \times (2(n-k)+m)$ , logo o rank da matriz  $Q_{lr}$  é no máximo  $m$ . O mesmo argumento é válido para  $Q_{rl}$ ,  $Q_{tb}$  e  $Q_{bt}$ , embora os ranks de  $Q_{tb}$  e  $Q_{bt}$  são no máximo  $n$ .

Agora consideremos um caso mais geral de uma submatriz de transição da esquerda-direita.  $Q_{lr}$  representa as probabilidades dos fótons iniciarem na esquerda, atravessarem a barreira e saírem do sistema pela direita, como mostra a figura 2.7.

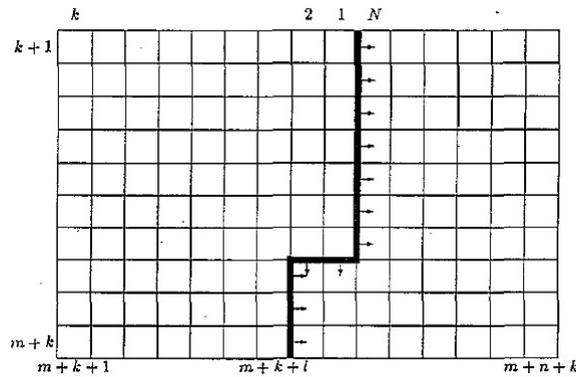


Figura 2.7: Exemplo de um sistema grande com um limite estranho. Nesse exemplo particular,  $k-l=2$ . Figura retirada de [7].

Sem perda de generalidade, assumimos que  $1 \leq l < k < n$ . Então,

$$Q_{lr} = \begin{pmatrix} Q[1, M+1] & Q[N-l+1, M+2] & \cdots & Q[1, N] \\ Q[2, M+1] & Q[N-l+2, M+2] & \cdots & Q[2, N] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q[M, M+1] & Q[N, M+2] & \cdots & Q[M, N] \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

onde  $N = 2(m+n)$  e  $M = m+k+1$ .

Para qualquer  $Q[i, j]$  em  $Q_{lr}$  temos que

$$Q[i, j] = \sum_{\alpha=1}^{m+k-l} p_{i,\alpha} s_{\alpha,j}$$

isto é,

$$Q_{lr} = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & \cdots & p_{2m+2n-l+1, m+k-l} \\ p_{2,1} & p_{2,2} & \cdots & p_{2m+2n-l+2, m+k-l} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ p_{M,1} & p_{M,2} & \cdots & p_{M, m+k-l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{1, M+1} & s_{1, M+2} & \cdots & s_{1, N} \\ s_{2, M+1} & s_{2, M+2} & \cdots & s_{2, N} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ s_{m+k-l, M+1} & s_{m+k-l, M+2} & \cdots & s_{m+k-l, N} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Disso temos que a matriz  $Q_{lr}$  é o produto de uma matriz  $(l+m+k) \times (m+k-l)$  com uma matriz  $(m+k-l) \times (2n+m-l-k)$ .

Portanto, o  $\text{rank}(Q_{lr}) \leq (m+k-l)$ . De forma análoga, temos que as outras submatrizes também tem posto deficiente.

□

Sendo assim, independente tanto do tamanho do problema como na forma de barreira imposta para descrever a trajetória da partícula, temos que o posto das matrizes que descrevem o movimento de cima para baixo, de baixo para cima, esquerda-direita ou direita-esquerda é deficiente. Isso possibilita uma análise da quantidade de dados independente.

Com isso, para um sistema  $N \times N$ , existem  $16N^2$  dados, no entanto esses dados nem sempre são independentes. Dados que são parte de alguma submatriz de posto deficiente estão sujeitos as condições de consistência. De fato, somente os dados correspondentes às entradas não-nulas de  $P_{IO}$  são independentes de todas as condições de consistência.

Não é difícil ver que as entradas não-nulas de  $P_{IO}$  correspondem aos dados independentes. Note que, essas entradas são precisamente aquelas que representam a probabilidade que um fóton vai diretamente de um estado de incoming para um estado de outgoing. Em outras palavras, se  $P_{IO}[i, j] \neq 0$ , então esta é a possibilidade de um fóton sair de um fonte  $i$  e chegar no detector  $j$  sem entrar em nenhum estado hidden. Como um fóton entra somente em um pixel durante a trajetória percorrida, e assim nunca tem a oportunidade de atravessar qualquer uma das barreiras que foram utilizados para obter

as condições de consistência. Daí,  $P_{IO}[i, j] \neq 0$  implica que  $Q[i, j]$  está livre das condições de consistência apresentados anteriormente.

Além do mais, só esses dados estão livres das condições de consistência apresentados anteriormente. Considere um pedaço de dados  $Q[k, l]$  onde  $P_{IO}[k, l] = 0$  e suponha que  $Q[k, l]$  não é parte de algum posto deficiente, submatriz de posto  $N$ . Então não existem barreiras direita-esquerda, esquerda-direita, de cima pra baixa, de baixo pra cima entre a fonte  $k$  e o detector  $l$ . Considere as barreiras que cercam imediatamente a fonte  $k$ , como na figura 2.8. As barreiras não separam a fonte  $k$  do detector  $l$ , para que haja alguma trajetória de  $k$  para  $l$  que não atravesse nenhuma dessas barreiras. Tal caminho não contém estado mover-se pelo interior do objeto, que implica que  $P_{IO}[k, l] \neq 0$ . Mas  $P_{IO}[k, l] = 0$ , contradição. Daí,  $Q[k, l]$  é parte de algum posto defeiciente, submatriz de posto  $N$ .

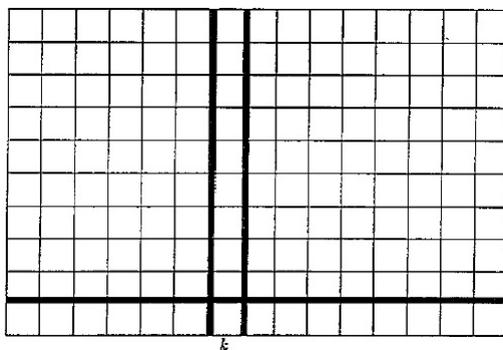


Figura 2.8: A fonte  $k$  é cercada por três barreiras indicada pelas linhas grossas. Figura retirada de [7].

### O modelo anisotrópico

Descrevemos a seguir um modelo mais simples que o apresentado no início do capítulo, trata-se do caso isotrópico associado ao modelo em [5]. Estudaremos esse caso por ter uma quantidade de variáveis menor, no entanto em alguns momentos simplificaremos para o caso isotrópico, principalmente, quando o problema em questão é o problema inverso, que será abordado no próximo capítulo.

A modelagem tanto para o caso anisotrópico, quanto para o isotrópico, é análoga à descrita acima. Para reconstruir a estrutura interna de um objeto contendo heterogeneidade, supomos as seguintes hipóteses:

- divide o objeto em elementos de área (pixel), define o tamanho dos pixels com a finalidade de ter a resolução desejada. Suponhamos que a grade definida para a discretização é composta de um total de  $N^2$  pixels, onde  $N$  é o número de pixels em cada lado. Denotados cada pixel por  $\Delta_{ij}$  onde  $(i, j) \in \Omega = \{(i, j)/1 \leq i, j \leq N\}$ .
- assume que a radiação consiste de um grande número de partículas que penetram na área em posições arbitrárias situadas na fronteira  $\partial\Omega$ , onde  $\partial\Omega = \{(i, j)/i = 1 \text{ ou } i = N \text{ ou } j = 1 \text{ ou } j = N\}$ . Nesta região coloca-se as fontes de partículas, veja na figura 2.9.
- adjacente a  $\partial\Omega$  encontra-se a região  $\Lambda$  situada imediatamente ao redor do corpo. É nessa região que estão posicionados os detectores de partículas.  $\Lambda$  é o produto cartesiano de conjuntos onde um deles é formado por 0 e  $N + 1$  e o outro pelos números naturais de 1 até  $N$ . Como na Figura 2.9.
- o pixel indexado por  $\partial\Omega$  será chamado de externo, enquanto que os pixels que estão em  $\Omega - \partial\Omega$  são chamados de internos.

Os fótons são injetados nos pixels que estão em  $\partial\Omega$ , aleatoriamente, depois disso pode acontecer:

1. o fóton é absorvido pelo pixel  $\Delta_{ij}$  com a probabilidade de  $1 - w_{ij}$ , onde  $w_{ij}$  é a probabilidade de sobrevivência do fóton de passar por  $\Delta_{ij}$ . Chamamos  $w_{ij}$  de coeficiente de sobrevivência de  $\Delta_{ij}$ ;
2. dado um fóton sobrevivente ao pixel  $\Delta_{ij}$ , este é disperso para um pixel adjacente,  $\Delta_{i+1j}$  ou  $\Delta_{i-1j}$  ou  $\Delta_{ij+1}$  ou  $\Delta_{ij-1}$ ;
3. cada partícula que entra num pixel e não é absorvido tem a probabilidade

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{ij} \\ b_{ij} \\ s_{ij} \end{array} \right\} \text{ de ir } \left\{ \begin{array}{l} \text{para frente} \\ \text{para trás} \\ \text{para os lados} \end{array} \right\}$$

Temos que  $f_{ij} + b_{ij} + 2s_{ij} = 1$ .

9		D	D	D	D	D	D	D	D	
8	D	S	S	S	S	S	S	S	S	D
7	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
6	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
5	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
4	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
3	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
2	D	S	I	I	I	I	I	I	S	D
1	D	S	S	S	S	S	S	S	S	D
0		D	D	D	D	D	D	D	D	
j/i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

Figura 2.9: Exemplo da discretização do objeto, reconstruída por  $N = 8$ . O interior de  $\Omega$  é discretizado pelos pixels com a letra I. A borda de  $\Omega$ , denotado por  $\partial\Omega$  é marcado com letra S. O conjunto  $\Lambda$ , onde os detectores estão localizados é marcado por D. Figura retirada de [8].

4. a probabilidade de dispersão para frente é dado por  $w_{ij}f_{ij}$ , para trás é  $w_{ij}b_{ij}$  e para os lados é  $w_{ij}s_{ij}$ ;
5. para cada pixel fornecemos as variáveis  $w$ ,  $f$ ,  $b$  e  $s$ . Como foi feito acima, temos que cada pixel tem quatro variáveis.
6. Como os resultados computacionais são obtidos aqui somente para o caso isotrópico, vale ressaltar que nesse caso as probabilidades de transmissão são todas iguais, i.e.,  $f_{ij}$ ,  $b_{ij}$  e  $s_{ij}$ ,  $\forall (i, j) \in \Omega$  são iguais.

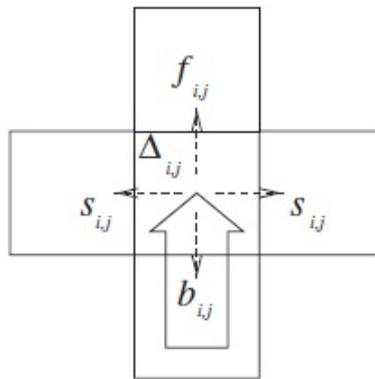


Figura 2.10: O movimento de uma partícula de entrada (indicada pela seta grande) para o pixel com as probabilidades  $f_{i,j}$ ,  $s_{i,j}$  e  $b_{i,j}$  de saída diferentes de acordo com as direções (setas pontilhadas). Figura retirada de [18].

# Capítulo 3

## Problema Direto e Inverso

A tomografia difusa corresponde a um problema inverso. Como veremos neste capítulo, tal problema consiste em: dadas todas as probabilidades de sair de uma fonte arbitrária e chegar num detector arbitrário, encontre os parâmetros de cada pixel, isto é,  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$  para cada pixel.

A fim de estudar e entender esse problema inverso, é necessário estudarmos inicialmente o problema direto correspondente, isto é, dados os parâmetros de cada pixel, encontrar as probabilidades de sair de uma fonte e chegar em um determinado detector. Veremos isso de forma mais clara nesse e no próximo capítulo.

A partir de agora, consideraremos a modelagem para o caso anisotrópico e isotrópico, deixando de lado a abordagem geral que foi descrito na primeira parte do capítulo anterior.

### 3.1 Problema Direto

O problema direto consiste em determinar, para todas as fontes  $s \in \partial\Omega$  e detectores  $d \in \Lambda$ , as probabilidades  $P_{sd}$  que uma partícula inserida de uma fonte na posição  $s \in \partial\Omega$ , chegará num dado detector  $d \in \Lambda$ , assumindo que nós sabemos os valores  $b_{ij}, s_{ij}, f_{ij}$  e  $w_{ij}, \forall \Delta_{ij}$ . Esse problema acaba por ser bem posto e depende analiticamente de dados do interior da região física.

Mais especificamente, dada uma distribuição de parâmetros  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N} \in (0, 1)^{3N^2}$  queremos encontrar a probabilidade de uma partícula injetada da fonte  $s \in \partial\Omega$  ser capturada pelo detector  $d \in \Lambda$ . Para isso construímos um sistema de equações lineares, este por sua vez, é construído por equações de equilíbrio de cada pixel  $\Delta_{ij}$ , que veremos a seguir.

A solução desse problema pode ser obtida introduzindo variáveis internas que dão origem a um sistema grande de equações lineares. Essas variáveis internas são definidas como as probabilidades que uma partícula tem de chegar num detector fixo, dado que a partícula está num pixel  $\Delta_{ij}$  em uma dada direção. Vamos denotar por  $z_{ij}^{ml}$  a probabilidade

de uma partícula ser capturada por um detector na posição  $l$  dado que esta partícula esteja no pixel  $\Delta_{ij}$  vindo pela direção  $m$ , como na figura 3.1.

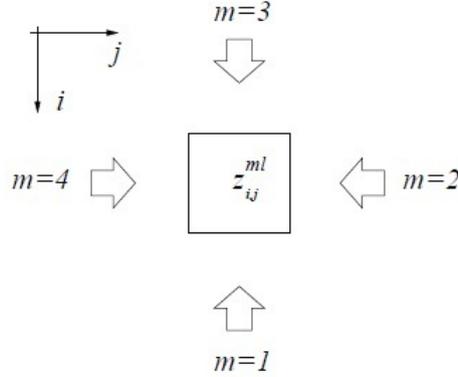


Figura 3.1: Introdução da variável auxiliar  $z_{ij}^{ml}$ . Figura retirada de [5].

Assim, considere um pixel situado no interior do objeto. Podemos escrever a equação de equilíbrio deste modelo no caso anisotrópico da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} z_{ij}^{1d} \\ z_{ij}^{2d} \\ z_{ij}^{3d} \\ z_{ij}^{4d} \end{bmatrix} = w_{ij} \begin{bmatrix} f_{ij} & s_{ij} & b_{ij} & s_{ij} \\ s_{ij} & f_{ij} & s_{ij} & b_{ij} \\ b_{ij} & s_{ij} & f_{ij} & s_{ij} \\ s_{ij} & b_{ij} & f_{ij} & s_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{i-1j}^{1d} \\ z_{ij-1}^{2d} \\ z_{i+1j}^{3d} \\ z_{ij+1}^{4d} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

Essa equação é encontrada pelo fato que  $z_{ij}^{ld}$  depende das variáveis internas dos pixels adjacentes ao pixel  $(i, j)$  e depende também das probabilidades de sair de um dos pixels adjacentes e chegar no pixel  $(i, j)$ . Por exemplo, na primeira linha temos que a probabilidade de chegar no pixel  $(i, j)$  pela direção  $m = 1$  é igual a probabilidade de estar no pixel  $(i - 1, j)$  e ir para frente (com a probabilidade  $w_{ij}f_{ij}$ ) com a direção  $m = 1$ , ou a probabilidade de estar no pixel  $(i, j - 1)$  é ir para o lado (com a probabilidade  $w_{ij}s_{ij}$ ) com a direção  $m = 2$ , ou a probabilidade de estar no pixel  $(i + 1, j)$  e ir para trás (com a probabilidade  $w_{ij}b_{ij}$ ) com a direção  $m = 3$ , ou então a probabilidade de estar no pixel  $(i, j + 1)$  e ir para trás (com a probabilidade  $w_{ij}s_{ij}$ ) com a direção  $m = 4$ . Desta forma, temos que  $z_{ij}^{1d} = w_{ij}f_{ij}z_{i-1j}^{1d} + w_{ij}s_{ij}z_{ij-1}^{2d} + w_{ij}b_{ij}z_{i+1j}^{3d} + w_{ij}s_{ij}z_{ij+1}^{4d}$

Para os pixels das bordas as equações são similares. No entanto, como condição de contorno temos que

$$P_{sd} = z_{ij}^{md} \quad (3.2)$$

para  $(i, j) \in \partial\Omega$  e

$$z_{ij}^{md} = \delta_{(i,j),d} = \begin{cases} 1, & \text{se } d = (i, j) \\ 0, & \text{se } d \neq (i, j) \end{cases} \quad (3.3)$$

para  $(i, j) \in \Lambda$ .

Para o caso isotrópico, temos que

$$f_{ij} = s_{ij} = b_{ij} = \frac{1}{4},$$

assim a equação de equilíbrio (3.1), reduz à

$$z_{ij}^d - \frac{w_{ij}}{4} (z_{i-1,j}^d + z_{i+1,j}^d + z_{i,j-1}^d + z_{i,j+1}^d) = 0 \quad (3.4)$$

No caso isotrópico não há necessidade de especificar a direção da partícula de entrada, pois nesse caso as probabilidades de ir para frente, para trás e para os lados são as mesmas.

Para os pixels situados na fronteira do objeto, região  $\Lambda$ , aplicam-se as condições de contorno (3.3). Sendo assim, alguns valores de  $z_{i\pm 1, j\pm 1}^{m,l}$  do lado direito da equação (3.1) podem ser zero ou um, de acordo com a presença do detector  $l$  próximo ao pixel  $\Delta_{ij}$ .

Agora, seja  $z(l)$  o vetor cujas componentes são as probabilidades  $z_{ij}^{ml}$  com  $1 \leq i, j \leq N$  e  $1 \leq m \leq 4$ . O nosso problema que consistia em achar as probabilidades  $P_{sd}$ , com  $1 \leq s, d \leq 4N$  equivale à resolução de  $4N$  sistemas de equações lineares da forma:

$$Az(l) = b(l)$$

onde  $A$  depende de  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$  e  $b(l)$  depende da posição do detector e dos valores de  $w$ ,  $f$  e  $s$  adjacentes ao detector.

A boa colocação do problema direto é garantida pela próxima proposição cuja demonstração pode ser encontrada na seção 3 de [5].

**Proposição 3.1.** *Suponha que  $0 \leq w_{ij} < 1$  para  $1 \leq i, j \leq N$  e seja  $z = (z_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ . Então, o sistema de  $N^2$  equações obtido considerando a equação (3.4) para  $1 \leq i, j \leq N$  e usando as condições nas bordas dadas pelas equações (3.2) e (3.3) tem uma única solução  $z \in \mathbb{R}^{N^2}$ .*

O argumento para a demonstração dessa proposição é a hipótese que de  $f_{ij}, s_{ij}, b_{ij}$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ , são probabilidades, e portanto  $f_{ij} + 2s_{ij} + b_{ij} = 1$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ . E ainda, a atenuação é sempre menor que 1, isto é,  $w_{ij} < 1$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ . Logo a matriz que define o problema é diagonalmente dominante, o que implica que a matriz  $A$  é inversível e portanto o sistema tem solução.

## 3.2 Problema Inverso

Agora assumamos que são dados os valores de  $P_{sd}$  para um número suficientemente grande de pares  $(s, d)$  de fontes e detectores, respectivamente, com  $1 \leq s, d \leq 4N$ , dos  $16N^2$  possíveis pares de fonte/detectores. O problema inverso consiste em determinar os valores  $b_{ij}$ ,  $s_{ij}$ ,  $f_{ij}$  e  $w_{ij}$ ,  $\forall (i, j) \in \Omega$ . Esse problema é altamente não linear.

Assumimos que nenhuma das probabilidades de sobrevivência  $w_{ij}$ , com  $1 \leq i, j \leq N$ , se anula. A razão dessa hipótese é o fato de que, sem ela a reconstrução dos parâmetros pode ser impossível. Um exemplo desta situação seria o caso de um pixel envolvido por quatro pixels com probabilidade zero de sobrevivência, nesse caso a partícula não poderia continuar a trajetória até um detector.

Uma questão importante para este problema seria o conhecimento de quão redundante seriam os valores de  $P_{sd}$ . Uma resposta parcial é dada pela seguinte proposição, veja em [?].

**Proposição 3.2.** *Dada uma distribuição  $(w_{ij}, f_{ij}, s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$  na região física, com  $w_{ij} < 1$ , a medida obtida colocando-se um detector na posição  $d$  e uma fonte na posição  $s$  é igual à medida obtida revertendo as posições. Ou seja,  $P_{sd} = P_{ds}$ .*

*Demonstração.*

A prova vem da interpretação probabilística de  $P_{sd}$ . Seja  $\alpha = \{(i_s, j_s), \dots, (i_d, j_d)\}$  um caminho ligando a fonte  $s$  com o detector  $d$ .

Dado um pixel  $(i, j)$  em  $\alpha$ , denota-se por  $t_{ij}$  o valor de uma das diferentes probabilidades de transição  $f_{ij}$ ,  $s_{ij}$  e  $b_{ij}$  de acordo com a direção do movimento da partícula na continuação do caminho após este pixel. A probabilidade que uma partícula emergirá no detector  $d$  uma vez que esteja viajando no caminho  $\alpha$  é dada pelo produto de todos os valores  $w_{ij}t_{ij}$  com  $(i, j)$  em  $\alpha$ . Por  $(i, j)$  estar em  $\alpha$ , diz-se que  $(i, j)$  é uma das entradas na  $n$ -upla ordenada  $\alpha$ . Denota-se por  $L_{sd}$  o conjunto de todos os caminhos ligando  $s$  a  $d$  tem-se

$$P_{sd} = \sum_{\alpha \in L_{sd}} \prod_{(i,j) \in \alpha} w_{ij}t_{ij}$$

No entanto, temos que a probabilidade de virar à direita é igual à probabilidade de virar à esquerda. Portanto, pode-se dizer que cada caminho em  $L_{sd}$  e o caminho contrário em  $L_{ds}$  tem a mesma probabilidade. Logo,  $P_{sd} = P_{ds}$ .

Esta proposição implica que pode-se restringir à apenas  $8N^2 + 2N$  das possíveis  $16N^2$  medições, isso porque se reduz a metade, no entanto, na divisão foi retirado duas vezes as diagonais e por isso elas são somadas. Como queremos determinar apenas  $3N^2$  variáveis, o problema inverso é sobredeterminado.  $\square$

# Capítulo 4

## Resolução do Problema Inverso

Resolver o problema de tomografia difusa é equivalente a resolver o problema inverso discutido no capítulo anterior. Para isso utilizamos dois métodos: uma abordagem dos mínimos quadrados iterativamente regularizados; um método direto denominado método das diagonais. Na abordagem dos mínimos quadrados a estratégia é linearizar o problema inverso e usar um método iterativo baseado em regularizações iterativas denominado método de Levenberg-Marquardt. Já o método das diagonais, que só é implementado para o caso isotrópico, se consiste em calcular sequencialmente os valores de  $w_{ij}$  ao longo da  $p$ -ésima diagonal (i.e., a diagonal descrita por  $i + j = p + 1$ ), e ao mesmo tempo calcular os valores de  $z_{kl}^d$  para os pixels  $(k, l)$  da  $(p + 1)$ -ésima diagonal (i.e., a diagonal dada por  $k + l = p + 2$ ).

### 4.1 Mínimos quadrados

A resolução do problema inverso pela abordagem dos mínimos quadrados é feita da seguinte forma: iniciamos com um chute inicial  $(w_{ij}^0, f_{ij}^0, s_{ij}^0)_{1 \leq i, j \leq N}$ , com esses valores resolvemos o problema direto, calculando as probabilidades de sair de uma determinada fonte e chegar num determinado detector, isto é, os  $C_{ls}^0$ , para todo par  $(l, s)$  (par de fonte/detector). Nesse trabalho, resolvemos o problema direto usando o método iterativo do Gradiente Conjugado, mas podemos usar os métodos de Jacobi ou então do Gauss-Seidel, ou ainda, métodos diretos. Depois de feito isso, queremos minimizar a  $\sum_{l=1}^D \sum_{s=1}^S (P_{ls} - C_{ls}^0)^2$ . Para encontrar o mínimo usamos o método de Levenberg-Marquardt. Com isso, encontramos novos dados  $(w_{ij}^1, f_{ij}^1, s_{ij}^1)_{1 \leq i, j \leq N}$ .

Fazemos esse mesmo procedimento, até quando o erro

$$E = \sum_{l=1}^D \sum_{s=1}^S (P_{ls} - C_{ls}^n)^2$$

ficar abaixo de uma cota, onde  $D$  é a quantidade de detectores e  $S$  é a quantidade de fontes do nosso problema. E ainda,  $C_{ls}^n$  denota a solução calculada para a configuração

$(w_{ij}^n, f_{ij}^n, s_{ij}^n)_{1 \leq i, j \leq N}$ .

## 4.2 Método de Levenberg-Marquardt

Usaremos o método de Levenberg-Marquardt, [11] para resolver o problema inverso. Este algoritmo produz soluções para o problema de minimizar funções, geralmente, não lineares, sobre o espaço dos parâmetros. Este método pode ser considerado como o método que vive entre o método de Gauss-Newton e o método do gradiente. O algoritmo foi publicado por Kenneth Levenberg, enquanto trabalhava no Frankford Army Arsenal. Este foi redescoberto por Donald Marquardt quando trabalhava como estatístico no DuPont.

De maneira similar aos resultados conhecidos para resolver problemas diretos (bem postos), métodos do tipo gradiente exigem muitas iterações para convergir. Por outro lado, métodos tipo Newton possuem taxas de convergência melhores.

Métodos do tipo Newton são usualmente escolhidos para encontrar soluções de problemas não lineares, existe uma quantidade de dificuldades surgindo no caso mal posto. A idéia principal de métodos tipo Newton consiste em fazer, repetidamente, a linearização do operador  $F(x) = y$  ao redor de alguma solução aproximada  $x_k^\delta$ , e então resolver o problema linearizado

$$F'(x_k^\delta)(x_k^\delta - x_{k+1}^\delta) = y^\delta - F(x_k^\delta) \quad (4.1)$$

para  $x_{k+1}^\delta$ . No entanto, se  $F$  é contínua e compacta, então  $F'(x_k^\delta)$  é compacta, e portanto, (4.1) é mal posto. Consequentemente, (4.1) normalmente não têm solução (ainda sem solução pelo método dos mínimos quadrados), e será novamente necessário obter soluções aproximadas por algum tipo de regularização.

A idéia original do Método de Levenberg-Marquardt é minimizar o resíduo  $\|y^\delta - F(x)\|$ , sujeito a *região de confiança*  $\|x - x_k^\delta\| \leq \eta_k$ . Isto é equivalente a minimizar

$$\|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)z\|^2 + \alpha_k \|z\|^2 \quad (4.2)$$

para  $z = z_k$ , onde  $\alpha_k$  é o correspondente multiplicador de Lagrange. A região de confiança refere-se a presumir a validade de linearização (4.1). Então o processo é iterado com  $x_{k+1}^\delta = x_k^\delta + z_k$  e, possivelmente um ajuste do raio da região de confiança  $\eta_k$ .

Uma das maneiras de atualizar o raio de confiança, é fazer a comparação de concordância entre o resíduo atual e o resíduo previsto, isto é,

$$\|y^\delta - F(x_{k+1}^\delta)\| \text{ versus } \|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x_{k+1}^\delta - x_k^\delta)\|.$$

O parâmetro  $\eta_k$  é aumentado (se a concordância é boa) ou diminuído (se a concordância for ruim), por algum fator constante, por exemplo, 2.

Outra justificativa para (4.2) é a regularização induzida pela adição do termo de penalidade  $\alpha_k \|z\|^2$  para o problema linearizado. Isto é equivalente a aplicar o método de regularização de Tikhonov para o problema linearizado  $F'(x_k^\delta)h = y^\delta - F(x_k^\delta)$  produzindo o processo de iteração

$$x_{k+1}^\delta = x_k^\delta + \left(F'(x_k^\delta)^* F'(x_k^\delta) + \alpha_k I\right)^{-1} F'(x_k^\delta)^* (y^\delta - F(x_k^\delta)), \quad (4.3)$$

onde  $y^\delta$  são os dados com erro satisfazendo a estimativa  $\|y^\delta - y\| \leq \delta$ .

A seqüência de iterações que dependem dos parâmetros de regularização  $\alpha_k$  tem que ser escolhida apropriadamente. Note que, a direção de atualização  $z_k$  é a direção de descida do resíduo  $\|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(z - x_k^\delta)\|$ . Assim, temos que escolher  $\alpha_k$  de modo que o método convirja.

A proposta é determinar  $\alpha_k$  de acordo com o princípio da discrepância *a posteriori*, da seguinte forma: seja  $\alpha := \alpha_k$ , tal que

$$p_k^\delta(\alpha) := \|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x_{k+1}^\delta(\alpha) - x_k^\delta)\| = q \|y^\delta - F(x_k^\delta)\|, \quad (4.4)$$

para algum  $q \in (0, 1)$ .

Note que se  $x_{k+1}^\delta(\alpha)$  minimiza (4.2) para  $\alpha_k := \alpha$ , temos que

$$p_k^\delta(\alpha) = \|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x_{k+1}^\delta(\alpha) - x_k^\delta)\| = \alpha \left\| \left(F'(x_k^\delta)^* F'(x_k^\delta) + \alpha I\right)^{-1} (y^\delta - F(x_k^\delta)) \right\|.$$

E ainda, se  $y^\delta - F(x_k^\delta) \neq 0$  e se  $F'$  é contínua, segue imediatamente que a função  $p_k^\delta$  é contínua e decrescente.

Além disso,

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} p_k^\delta(\alpha) = \|y^\delta - F(x_k^\delta)\|,$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} p_k^\delta(\alpha) = \|P_k^\delta(y^\delta - F(x_k^\delta))\| \leq \|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x - x_k^\delta)\|$$

para algum  $x \in D(F)$ , onde  $P_k^\delta$  é ortogonal a projeção sobre  $R(F'(x_k^\delta))^\perp$ .

Seja  $x^+ \in B_\rho(x_0)$  denotando a solução de  $x_0$ -norma mínima e  $\gamma > 1$ . Se

$$\|y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x^+ - x_k^\delta)\| \leq \frac{q}{\gamma} \|y^\delta - F(x_k^\delta)\|, \quad (4.5)$$

então (4.4) possui uma única solução  $\alpha_k$ . (Para mostrar isso, pode-se usar o Teorema do valor intermediário).

Agora vamos mostrar que o método de Levenberg-Marquardt é um método de regularização. Primeiro, estabeleceremos a monotonia da iteração.

**Proposição 4.1.** *Seja  $0 < q < 1 < \gamma$ . Suponha que o operador tenha solução e que (4.5) seja satisfeita, de forma que, exista  $\alpha_k$  determinado por (4.4). Então:*

$$\begin{aligned} & \|x_k^\delta - x^+\|^2 - \|x_{k+1}^\delta - x^+\|^2 \geq \|x_{k+1}^\delta - x_k^\delta\|^2, \\ \|x_k^\delta - x^+\|^2 - \|x_{k+1}^\delta - x^+\|^2 & \geq 2 \frac{\gamma - 1}{\gamma \alpha_k} \left\| y^\delta - F(x_k^\delta) - F'(x_k^\delta)(x_{k+1}^\delta - x_k^\delta) \right\|^2 \geq 2 \frac{(\gamma - 1)(1 - q)q}{\gamma \|F'(x_k^\delta)\|^2} \left\| y^\delta - F(x_k^\delta) \right\|^2. \end{aligned}$$

A demonstração está em [11].

Para mostrar a convergência da iteração para dados sem ruídos, temos que supor que valha a seguinte condição de cone local:

$$\|F(x) - F(\tilde{x}) - F'(x)(x - \tilde{x})\| \leq c \|x - \tilde{x}\| \|F(x) - F(\tilde{x})\|, \quad (4.6)$$

$x, \tilde{x} \in B_{2\rho}(x_0) \subset D(F)$ .

**Teorema 4.2.** *(Convergência para dados exatos) Suponha que  $F(x) = y$  possui uma solução, que  $F'$  seja uniformemente limitada na bola  $B_\rho(x^+)$  e que  $\|x_0 - x^+\| \leq q/c$ . Suponha ainda que  $\alpha_k$  seja determinado por (4.4) e que (4.6) seja satisfeita. Então, o método de Levenberg-Marquardt converge para a solução de  $F(x) = y$ , quando  $k \rightarrow \infty$ .*

A demonstração desse teorema encontra-se em [11].

Note que, pelo teorema 4.2, para termos a convergência para dados exatos é necessário satisfazer a condição (4.6). No entanto, no nosso problema de tomografia difusa, não conseguimos estabelecer se essa condição é satisfeita, pelo fato de não termos a função  $F$  explícita.

Para dados com ruído a iteração tem que ser parada num número apropriado de passos. Se este índice  $k_*$  é determinado pelo princípio de discrepância, isto é,

$$\left\| y^\delta - F(x_{k_*}^\delta) \right\| \leq \tau \delta < \left\| y^\delta - F(x_k^\delta) \right\|, 0 \leq k < k_*, \quad (4.7)$$

com a constante  $\tau$  sendo maior que  $1/q$ , então obteremos a convergência da itera  $x_{k_*}^\delta$  para uma solução de  $F(x) = y$  com o nível de ruído  $\delta$  tendendo a zero.

**Teorema 4.3.** *Sejam as hipóteses do teorema anterior satisfeitas. Seja  $k_* = k_*(\delta, y^\delta)$  o índice de parada dada pelo princípio da discrepância com  $\tau > 1/q$ . Então, o método de Levenberg-Marquardt é terminado em um número finito de passos  $k_*$ , e*

$$k_*(\delta, y^\delta) = O(1 + |\ln \delta|).$$

Além disso, as iteras  $x_{k_*}^\delta$  de Levenberg-Marquardt convergem para a solução da equação  $F(x) = y$  quando  $\delta \rightarrow 0$ .

Em [11] encontra-se a demonstração desse teorema.  
A taxa de convergência em condições de origem (4.7), isto é,

$$x^+ - x_0 = (F'(x^+)^* F'(x^+))^\mu v, \quad \mu > 0, \quad v \in N(F'(x^+))^\perp,$$

tem sido estabelecido para

$$0 < \mu_{\min} \leq \mu \leq 1/2, \quad (4.8)$$

sob a condição

$$F'(x) = R_x F'(x^+) \text{ e } \|I - R_x\| \leq c_R \|x - x^+\|, \quad x \in B_\rho(x_0) \subset D(F). \quad (4.9)$$

Mais detalhes desses resultados em [11].

A fim de deduzir taxas de convergência, tanto  $\alpha_k$  e o índice de parada  $k_*$  são escolhidos a-priori, ou seja, de acordo com

$$\alpha_k = \alpha_0 q^k, \text{ para algum } \alpha_0 > 0, \quad q \in (0, 1), \quad (4.10)$$

e

$$\eta_{k_*} \alpha_{k_*}^{\mu + \frac{1}{2}} \leq \delta < \eta_k \alpha_k^{\mu + \frac{1}{2}}, \quad 0 \leq k < k_*, \quad (4.11)$$

$$\eta_k := \eta(k+1)^{-(1+\epsilon)}, \text{ para algum } \eta > 0, \quad \epsilon > 0. \quad (4.12)$$

**Teorema 4.4.** *Seja uma solução  $x^+$  de  $F(x) = y$  e suponha que valem (4.8) e (4.7) para algum  $0 < \mu \leq 1/2$  e  $\|v\|$  suficientemente pequena. Além disso, sejam  $\alpha_k$  e  $k_*$  escolhidos de acordo com (4.10) e (4.12) com  $\eta$  suficientemente pequeno, respectivamente. Então as iterações de Levenberg-Marquardt definidas por (4.3) permanecem em  $B_\rho(x_0)$  e convergem com a taxa*

$$\|x_{k_*} - x^+\| = O\left(\left(\delta(1 + |\ln \delta|)^{(1+\epsilon)}\right)^{\frac{2\mu}{2\mu+1}}\right).$$

Além disso,

$$\|F(x_{k_*}^\delta) - y\| = O\left(\delta(1 + |\ln \delta|)^{(1+\epsilon)}\right)$$

e

$$k_* = O(1 + |\ln \delta|).$$

Para o caso em que não há ruído ( $\delta = 0, \eta = 0$ ), obtemos que

$$\|x_k - x^+\| = O(\alpha_k^\mu),$$

e que

$$\|F(x_k) - y\| = O\left(\alpha_k^{\mu+\frac{1}{2}}\right).$$

### 4.3 Método das diagonais

Nesta seção nós descreveremos, apenas para o caso isotrópico, dois algoritmos que podem ser usados para resolver o problema inverso, no caso bidimensional, [8]. Isto é, queremos resolver o problema de reconstruir os valores  $w_{ij}$  a partir das medições externas, que são as probabilidades dos pares de fonte-detector. Assumiremos que as probabilidades de sobrevivência  $w_{ij}$ , com  $1 \leq i, j \leq N$ , são não nulas. Temos que assumir isso, pois se permitíssemos que alguns dos valores de  $w_{ij}$  desaparecesse, poderíamos não conseguir reconstruir o interior do objeto, como por exemplo na situação de um pixel delimitado por outros quatro pixels com probabilidades de sobrevivência nula.

A estratégia para os dois algoritmos que apresentaremos a seguir, consiste em calcular sequencialmente os valores de  $w_{ij}$  ao longo da  $p$ -ésima diagonal, ou seja, da diagonal descrita por  $i + j = p + 1$ . E ao mesmo tempo calcular os valores de  $z_{kl}^d$  para os pixels  $(k, l)$  da  $(p + 1)$ -ésima diagonal, isto é, da diagonal dada por  $k + l = p + 2$ . A cada passo do processo usamos somente uma única medição externa e os valores de  $w_{ij}$  e  $z_{ij}^d$  calculados no passo anterior. Por conveniência, considere que para  $1 \leq i, j \leq N$

$$v_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{4}{w_{ij}}. \quad (4.13)$$

Dessa forma temos que a equação (3.4) pode ser escrita como:

$$v_{ij}z_{ij}^d - (z_{i-1j}^d + z_{i+1j}^d + z_{ij-1}^d + z_{ij+1}^d) = 0. \quad (4.14)$$

Iniciaremos a demonstração dos algoritmos que iremos usar, com a reconstrução dos valores de  $v$  das duas primeiras diagonais. Para tal, assumimos que conhecemos apenas as probabilidades  $z_{ij}^d$  de sair da fonte localizada em  $(i, j) \in \partial\Omega$  e chegar ao detector  $d \in D$  e também, a localização dos detectores onde  $z_{ij}^d = \delta_{(i,j),d}$ .

Para encontrar  $v_{11}$  podemos usar a equação (4.14) com  $(i, j) = (1, 1)$ , logo

$$v_{11}z_{11}^d - (z_{01}^d + z_{21}^d + z_{10}^d + z_{12}^d) = 0, \quad (4.15)$$

onde  $z_{21}^d = P_{d,(2,1)}$ ,  $z_{12}^d = P_{d,(1,2)}$ ,  $z_{01}^d = \delta_{(0,1),d}$  e  $z_{10}^d = \delta_{(1,0),d}$ .

Se assumimos que  $w_{ij} \neq 0$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ , podemos mostrar que o valor de  $z_{11}^d$  é não nulo. Para ver isso podemos usar a interpretação probabilística de  $z_{ij}^d$ , que nada mais é que a soma de todas as trajetórias ligando o pixel  $(i, j)$  ao detector  $d$  dos produtos das probabilidades de sobrevivência de cada pixel ao longo da trajetória, como foi feito

na demonstração da proposição 3.2. Portanto, podemos escrever  $v_{11}$  a partir da equação (4.15). Para cálculos práticos com presença de ruído nós podemos escolher na realidade, qualquer conjunto de medidas e executar uma determinação mais apropriada para  $v_{11}$ .

Agora vamos olhar os valores de  $v_{ij}$  na segunda diagonal. Nós temos que

$$v_{12}z_{12}^d - (z_{02}^d + z_{22}^d + z_{21}^d + z_{13}^d) = 0 \quad (4.16)$$

$$v_{21}z_{21}^d - (z_{20}^d + z_{22}^d + z_{11}^d + z_{31}^d) = 0. \quad (4.17)$$

Lembre-se que nós não conhecemos apenas os valores de  $v_{12}$ ,  $v_{21}$  e  $z_{22}^d$  (note que somente no caso em que  $N = 2$  nós conhecemos  $z_{22}^d$ , mas esse caso é trivial). A partir disso, podemos formar um sistema linear com essas variáveis. Se nós determinamos dois valores de detectores, sejam eles  $d_1$  e  $d_2$ , temos um sistema de quatro equações e quatro incógnitas  $v_{12}$ ,  $v_{21}$ ,  $z_{22}^{d_1}$  e  $z_{22}^{d_2}$ .

A condição para existência e unicidade das soluções do sistema de equações aqui formado é

$$\det \begin{bmatrix} -z_{12}^{d_1} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -z_{21}^{d_1} & 1 & 0 \\ -z_{12}^{d_2} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -z_{21}^{d_2} & 0 & 1 \end{bmatrix} \neq 0 \quad (4.18)$$

isto é,  $z_{12}^{d_1}z_{21}^{d_2} - z_{21}^{d_1}z_{12}^{d_2} \neq 0$ .

Esta condição também é satisfeita para o caso mais genérico, veja em [3].

O modelo para arbitrar a diagonal é feito da seguinte forma: suponha que já encontramos todos os valores de  $v_{ij}$  para  $i + j < p + 1$  e todos os valores de  $z_{ij}^d$  para  $i + j \leq p + 1$  e  $d \in \{d_1, \dots, d_p\}$ .

Nós agora formaremos um sistema de  $p^2$  equações e  $p^2$  incógnitas. Sendo que as incógnitas são:  $v_{i,p-i+1}$  para  $1 \leq i \leq p$  e  $z_{i+1,p-i+1}^d$  para  $1 \leq i \leq p - 1$  e  $d \in \{d_1, \dots, d_p\}$ . E as equações são dadas pela expressão (4.14), com  $j = p - i + 1$ . Note que, na equação (4.14), os valores das quantidades  $z_{ij}^d$ ,  $z_{i-1,j}^d$  e  $z_{i,j-1}^d$  já são conhecidos (pois foram encontrados no passo anterior). Como no caso em que  $p = 2$ , visto acima, a condição de existência e unicidade desse sistema é uma propriedade genérica, veja em [3]. Uma vez que este sistema de equações é resolvido, podemos calcular os valores de  $z_{ij}^d$  com  $i + j \leq p + 1$  e  $d \notin \{d_1, \dots, d_p\}$ . Uma forma de fazer isso é da seguinte forma:

Processo 1

1. Para cada  $i = 1, \dots, p - 1$ , faça:

(a) para cada  $j = 2, \dots, p - i + 1$ , faça  $z_{i+1,j}^d = v_{ij}z_{ij}^d - z_{i-1,j}^d - z_{i,j-1}^d - z_{i,j+1}^d$

Note que esse processo funciona porque nós estamos usando em cada passo os valores de  $z_{ij}^d$  e de  $v_{ij}$  que são conhecidos pelo passo anterior. Na figura 4.1 nós descrevemos a seqüência dos valores calculados pelo processo 1.

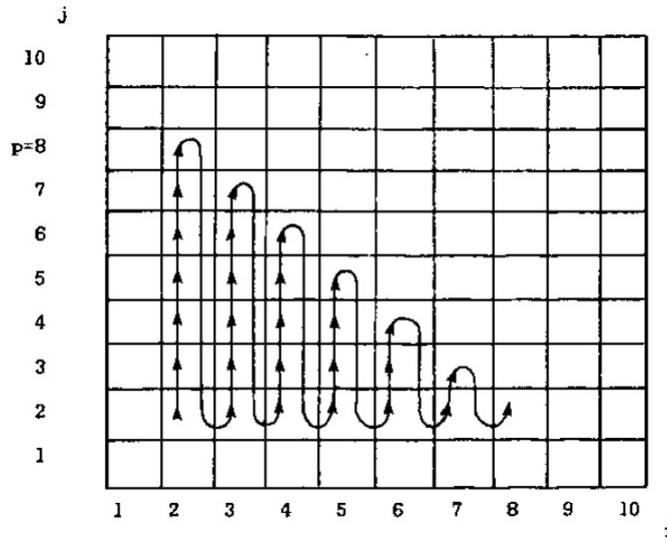


Figura 4.1: Descrição para  $p = 8$ , da seqüência dos passos em recorrência dos valores de  $z_{ij}^d$  dados pelos processo 1. Figura retirada de [8].

Resumindo, no passo  $p$ -ésimo, com  $p \leq N$ , nós encontramos os valores de  $v_{ij}$  ao longo da  $p$ -ésima diagonal e o valores de  $z_{ij}^d$  ao longo da  $(p + 1)$ -ésima diagonal. Os detectores são escolhidos de tal forma que o determinante do sistema de equações correspondente seja não nulo. Depois que nós temos os valores de  $v_{ij}$  da  $p$ -ésima diagonal nós podemos calcular os valores de  $z_{ij}^d$  para  $i + j \leq p + 2$  para outros detectores. Isso nos fornece os valores de  $z_{ij}^d$  para  $p + 1$  detectores e para  $i + j \leq p + 2$ , e assim podemos prosseguir indutivamente.

Os algoritmos a seguir formalizam a discussão feita até agora.

*Algoritmo 1*

1. Encontre  $v_{11}$  pela equação (4.15).
2. Para cada  $1 < p \leq N$ :
  - (a) Resolva o sistema de equações obtido pela variação de  $1 \leq i \leq p$  e  $d$  no conjunto  $\{(0, 1), \dots, (0, p)\}$  na equação (4.14).
  - (b) Encontre  $z_{ij}^d$  para  $d = (0, p+1)$  e  $i+j \leq p+2$  usando o processo descrito acima.
3. Repita os passos 1 e 2 iniciando pelo pixel  $(N, N)$  e indo na direção da diagonal central. Ou ainda, reflita com relação a diagonal central, todas as medidas e os valores computados até agora e repita os passos 1 e 2.

O próximo algoritmo usa as informações de todos os detectores possíveis, isto é,  $4N$  detectores, a cada passo.

*Algoritmo 2*

1. Encontre  $v_{11}$  pela equação (4.15).
2. Para cada  $1 < p \leq N$ , construa um sistema de equações sobredeterminado com as variáveis  $(v_{i,p-i+1})_{1 \leq i \leq p}$  e  $(z_{i+1,p-i+1})_{1 \leq i \leq p-1, d \in D}$  para  $j = p - i + 1$  na equação (4.14),  $1 \leq i \leq p - 1$  e  $d \in D$ . Resolva esse sistema sobredeterminado usando um método de mínimos quadrados linear (por exemplo, decomposição QR ou SVD).
3. Reflita com relação a diagonal central, todas as medidas e os valores computados até agora e repita os passos 1 e 2.

Agora, para entendermos o porquê do sistema de equações linear formado a cada passo do algoritmo 1, isto é, para cada  $p$ , tem solução e esta solução é única, iniciamos olhando para o caso em que  $p = 2$ .

Se escolhermos dois detectores, sejam eles  $d_1$  e  $d_2$ , como já vimos, a matriz do sistema linear de equações é dado por

$$\begin{pmatrix} -z_{12}^{d_1} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -z_{21}^{d_1} & 1 & 0 \\ -z_{12}^{d_2} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -z_{21}^{d_2} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

e a determinante dessa matriz é  $\det = z_{12}^{d_1} z_{21}^{d_2} - z_{21}^{d_1} z_{12}^{d_2}$ . Está claro que este determinante é o determinante da matriz 2x2 dada por

$$\begin{pmatrix} z_{12}^{d_1} & z_{12}^{d_2} \\ z_{21}^{d_1} & z_{21}^{d_2} \end{pmatrix}.$$

Da mesma forma, para o caso em que  $p = 3$ , arbitrando os detectores  $d_1$ ,  $d_2$  e  $d_3$ , temos que a matriz correspondente ao sistema linear de equações é

$$\begin{pmatrix} -z_{13}^{d_1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -z_{22}^{d_1} & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -z_{31}^{d_1} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -z_{13}^{d_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -z_{22}^{d_2} & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -z_{31}^{d_2} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -z_{13}^{d_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -z_{22}^{d_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -z_{31}^{d_3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

assim, o determinante dessa matriz é o mesmo que o determinante da matriz 3x3 dada por

$$\begin{pmatrix} z_{13}^{d_1} & z_{13}^{d_2} & z_{13}^{d_3} \\ z_{22}^{d_1} & z_{22}^{d_2} & z_{22}^{d_3} \\ z_{31}^{d_1} & z_{31}^{d_2} & z_{31}^{d_3} \end{pmatrix}.$$

Portanto, para qualquer  $p \leq N$  e para um  $q \geq p$  arbitrário, considere a função racional de  $v_{ij}$  dada por

$$D_{p,q} \equiv \det \begin{pmatrix} z_{1p}^1 & z_{1p}^2 & \cdots & z_{1p}^{p-1} & z_{1p}^q \\ z_{2,p-1}^1 & z_{2,p-1}^2 & \cdots & z_{2,p-1}^{p-1} & z_{2,p-1}^q \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ z_{p,1}^1 & z_{p,1}^2 & \cdots & z_{p,1}^{p-1} & z_{p,1}^q \end{pmatrix}.$$

O super-índice  $k$  em  $z_{ij}^k$  denota um detector na localização  $(0, k)$ .

Agora, para mostrar que esses determinantes são não nulos em um conjunto aberto e denso de  $\mathbb{R}^{N^2}$  é suficiente provar que eles não são identicamente nulos. Então os valores de  $v_{ij}$  onde qualquer um desses determinantes é nulo está na união das variedades de dimensão menor determinadas pelo anulamento de polinômios determinados por essas variáveis. No complemento de um tal conjunto podemos resolver as equações lineares exclusivamente.

Para exibir explicitamente um conjunto dos valores de  $v_{ij}$  onde as determinantes não podem sumir, considere o caso limite onde todas as variáveis  $w_{ij}$  estão muito próximas de zero, dizemos que tem o valor  $\epsilon > 0$  em comum independentemente de  $(i, j)$ .

Neste ponto, vale a pena insitir numa especial escolha da posição dos detectores para garantir esta condição algébrica. Vamos escolher  $d_k$  na posição  $(0, k)$ , para  $1 \leq k \leq p - 1$ . E para  $d_p$  arbitramos a posição  $(0, q)$ , com  $p \leq q \leq N$ .

Para mostrar que a escolha dos lugares dos detectores garante que o determinante é não nulo, primeiro, vamos mostrar a situação para  $p = 2$  e  $p = 3$ . Nesses casos, as matrizes são dadas por

$$\begin{pmatrix} e^2 & e^{q-1} \\ e^2 & qe^{q+1} \end{pmatrix}$$

e

$$\begin{pmatrix} e^3 & e^2 & e^{q-2} \\ 2e^3 & e^2 & (q-1)e^q \\ e^3 & 3e^4 & \frac{1}{2}q(q+1)e^{q+2} \end{pmatrix},$$

respectivamente. Note que, depois de escalonada, essas colunas são linearmente independentes, independentes dos valores que multiplicam as constantes  $e$  com diferentes potências.

Para o caso mais geral onde estamos lidando com as equações onde  $i + j = p + 1$ , ignorando os valores que multiplicam a constante  $e$ , temos que

$$\begin{pmatrix} e^p & e^{p-1} & e^{p-2} & e^{p-3} & \dots & e^2 & e^{q-p+1} \\ e^p & e^{p-1} & e^{p-2} & e^{p-3} & \dots & e^2 & e^{q-p+3} \\ e^p & e^{p-1} & e^{p-2} & e^{p-3} & \dots & e^4 & e^{q-p+5} \\ e^p & e^{p-1} & e^{p-2} & e^{p-3} & \dots & e^6 & e^{q-p+7} \\ \vdots & \vdots & \vdots & e^{p-3} & \dots & \vdots & \vdots \\ e^p & e^{p-1} & e^p & e^{p+1} & \dots & e^{2p-4} & e^{q+p-3} \\ e^p & e^{p+1} & e^{p+2} & e^{p+3} & \dots & e^{2p-2} & e^{q+p-1} \end{pmatrix}$$

A razão para isso é simples, no limite onde  $w_{ij}$  é muito pequeno, os únicos caminhos que realmente contamos para computar a probabilidade de ir de um pixel para o detector são os de comprimento mínimo. Além disso, cada trajetória (na ordem principal) tem uma probabilidade dada por  $e$  elevado à uma potência dada pelo comprimento da trajetória. As constantes encontradas acima são exatamente o número de caminhos de comprimento mínimo unindo cada um dos pixels  $(i, j)$  ao detector correspondente.

Enfim, depois de escalonada cada uma das colunas por uma potência apropriada de  $e$  essas matrizes dão uma matriz a qual seus elementos abaixo da antidiagonal principal são todos zero. E as constantes que aparecem na antidiagonal principal são todos igual a um. Depois do escalonamento apropriado as matrizes ficam da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dessa forma, o determinante não pode ser identicamente zero, como queríamos provar.

## Capítulo 5

# Resolução do Problema Direto

Neste capítulo, discutimos a resolução do problema direto relacionado à tomografia difusa. Tal resolução é necessária não somente para gerar os dados para o problema inverso, como também para implementar o método de mínimos quadrados (note que a cada passo do método de Levenberg-Marquardt é necessário resolver um problema direto).

O problema direto pode ser resolvido utilizando tanto métodos diretos como iterativos. A resolução pode ser feita no caso isotrópico como no anisotrópico, para o caso isotrópico basta fazer  $f = s = b = \frac{1}{4}$ .

Para resolver pelo método direto, é necessário montar uma matriz  $A$  que é quadrada de ordem  $4N^2$  e depende exclusivamente dos valores de  $w$ ,  $f$  e  $s$  do corpo em questão. Os índices de cada elemento  $a_{kl}$  da matriz  $A$  são atribuídos segundo uma função biunívoca  $f$  que associa a cada tripla  $(i, j, m)$  um valor que será um dos índices dos coeficientes da matriz  $A$ . No programa em questão usou-se:

$$f(i, j, m) = i + (j - 1)n + (m - 1)n^2 \quad (5.1)$$

onde  $n$  representa a dimensão das arestas do quadrado.

Cada valor  $a_{kl}$ , em módulo, da matriz  $A$  representa a probabilidade de um fóton que tenha entrado num determinado pixel  $(i, j)$  segundo uma certa direção  $m$  dados pelo valor  $k = f(i, j, m)$  saia desse pixel para um outro adjacente  $(\widehat{i}, \widehat{j})$  segundo uma direção  $\widehat{m}$  indicada pelo valor de  $l = f(\widehat{i}, \widehat{j}, \widehat{m})$ . Dessa forma cada  $a_{kl}$  é composto por um dos seguintes produtos:  $-wf$ ,  $-ws$ ,  $-wb$ , 0 e 1 conforme o caso.

A matriz  $A$  é formada escrevendo a equação da forma (3.1) para cada pixel integrante do corpo, mantendo as parcelas constantes do lado direito, e passando os coeficientes das variáveis para o lado esquerdo. As parcelas que ficarem no lado direito formarão um vetor  $b$ . Cada elemento  $b_k$  será escrito a partir do conhecimento do posicionamento do detector e do pixel-direção dados pelo índice  $k$ . O valor de  $b_k$  será formado por uma soma de até duas parcelas (já que cada pixel pode, no máximo, fazer divisa com dois pixels de  $\Lambda$ ) da forma  $wfD()$ ,  $wsD()$  ou  $wbD()$  no caso do pixel em questão pertencer a

um dos vértices, podendo também ser nulo no caso dos pixels no interior do corpo. A função  $D$  será não nula apenas na posição sobre a superfície na qual estiver localizado o detector.

Como a matriz  $A$  cresce com  $N^4$ , a utilização de métodos diretos se torna proibitiva para valores elevados de  $n$ . Sendo assim, passa a ser crucial o uso de métodos iterativos tais como o do Jacobi, Gauss Seidel, Gradiente Conjugado, pois estes não necessitam que a matriz  $A$  seja gerada e armazenada em memória. Outro fator que torna o emprego de métodos iterativos bastante atraente é que a matriz  $A$  associada ao problema direto é diagonal dominante o que acelera a velocidade de convergência de tais métodos. Na implementação, foi utilizado o método do gradiente conjugado, por esse motivo, a próxima seção trata sobre este método.

## 5.1 Método do Gradiente Conjugado

O método do gradiente conjugado de Hestenes e Stiefel[HS] foi originalmente desenvolvido como um método direto deliniado para resolver um sistema linear  $n \times n$  definido positivo. Como método direto, ele geralmente é inferior à eliminação gaussiana com pivotamento, pois ambos os métodos requerem  $n$  passos para determinar uma solução, e os passos do método do gradiente conjugado têm um custo maior em cálculos comparado com os da eliminação gaussiana.

Todavia, o método do gradiente conjugado é muito útil como método iterativo de aproximação para resolver sistemas esparsos de grande tamanho com entradas não nulas que aparecem em padrões predizíveis. Quando a matriz está preconditionada para que os cálculos sejam mais eficazes, bons resultados são obtidos em aproximadamente  $\sqrt{n}$  passos. Empregado dessa maneira, esse método é preferível à eliminação gaussiana e aos métodos iterativos, como o método de Jacobi e de Gauss-Seidel.

Vamos supor que a matriz  $A$  seja definida positiva. Usaremos a notação de produto interno

$$\langle x, y \rangle = x^t y,$$

onde  $x$  e  $y$  são vetores  $n$ -dimensionais.

Quando  $A$  é definida positiva,  $\langle x, Ax \rangle = x^t Ax > 0$ , a menos que  $x = 0$ . Além disso, como  $A$  é simétrica, temos que  $x^t Ay = x^t A^t y = (Ax)^t y$ , temos que para cada  $x$  e  $y$ ,

$$\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle.$$

**Teorema 5.1.** *O vetor  $x^*$  é uma solução do sistema linear definido positivo  $Ax=b$  se e somente se  $x^*$  minimiza*

$$g(x) = \langle x, Ax \rangle - 2 \langle x, b \rangle.$$

*Demonstração.* Sejam  $x$  e  $v \neq 0$  vetores fixos e  $t$  um número real variável. Temos que

$$\begin{aligned}
g(x + tv) &= \langle x + tv, Ax + tAv \rangle - 2 \langle x + tv, b \rangle \\
&= \langle x, Ax \rangle + t \langle v, Ax \rangle + t \langle x, Av \rangle + t^2 \langle v, Av \rangle - 2 \langle x, b \rangle - 2t \langle v, b \rangle \\
&= \langle x, Ax \rangle - 2 \langle x, b \rangle + 2t \langle v, Ax \rangle - 2t \langle v, b \rangle + t^2 \langle v, Av \rangle,
\end{aligned}$$

de modo que

$$g(x + tv) = g(x) + 2t \langle v, Ax - b \rangle + t^2 \langle v, Av \rangle. \quad (5.2)$$

Como  $x$  e  $v$  são fixos, definimos a função quadrática  $h$  em  $t$  como

$$h(t) = g(x + tv).$$

Então,  $h$  assume um valor mínimo quando  $h'(t) = 0$ , pois seu coeficiente  $t^2$ ,  $\langle v, Av \rangle$ , é positivo. Como

$$h'(t) = 2 \langle v, Ax - b \rangle + 2t \langle v, Av \rangle,$$

o mínimo ocorre quando

$$\hat{t} = -\frac{\langle v, Ax - b \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle},$$

e, a partir da equação (5.2),

$$\begin{aligned}
h(\hat{t}) &= g(x) - 2 \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} \langle v, b - Ax \rangle + \left( \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} \right)^2 \langle v, Av \rangle \\
&= g(x) - \frac{\langle v, b - Ax \rangle^2}{\langle v, Av \rangle}.
\end{aligned}$$

Assim, para qualquer vetor  $v \neq 0$ , temos que  $g(x + \hat{t}v) < g(x)$ , a menos que  $\langle v, b - Ax \rangle = 0$ , em cujo caso  $g(x) = g(x + \hat{t}v)$ .

Suponha que  $x^*$  satisfaça  $Ax^* = b$ . Então  $\langle v, b - Ax^* \rangle = 0$  para qualquer vetor  $v$ , e  $g(x)$  não pode ser menor que  $g(x^*)$ . Assim,  $x^*$  minimiza  $g$ .

Por outro lado, suponha que  $x^*$  seja um vetor que minimiza  $g$ . Então, para qualquer vetor  $v$ , temos que  $g(x^* + \hat{t}v) \geq g(x^*)$ . Assim,  $\langle v, b - Ax^* \rangle = 0$ . Isso implica que  $b - Ax^* = 0$ , e por consequência,  $Ax^* = b$ .

□

Para iniciar o método do gradiente conjugado, escolhemos  $x$ , uma solução aproximada de  $Ax^* = b$ , e  $v \neq 0$ , para obter uma **direção de busca** na qual afastar-se de  $x$  para melhorar a aproximação. Seja  $r = b - Ax$  o vetor residual associado a  $x$ , com

$$t = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \frac{\langle v, r \rangle}{\langle v, Av \rangle}.$$

Se  $r \neq 0$  e se  $v$  e  $r$  não são ortogonais, então  $x + tv$  dá um valor menor para  $g$  que  $g(x)$ ,

e possivelmente está mais próximo de  $x^*$  do que de  $x$ . Isso sugere o seguinte método.

Seja  $x^{(0)}$  uma aproximação inicial a  $x^*$  e seja  $v^{(l)} \neq 0$  uma direção de busca inicial. Para  $k = 1, 2, 3, \dots$ , calculamos:

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle},$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}$$

e escolhamos uma nova direção de busca  $v^{(k+1)}$ . O objetivo é fazer essa escolha de modo que a sequência de aproximações  $\{x^{(k)}\}$  convirja rapidamente para  $x^*$ .

Para escolher as direções de busca, vemos  $g$  como uma função das componentes de  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ . Assim,

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle x, Ax \rangle - 2 \langle x, b \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j - 2 \sum_{i=1}^n x_i b_i.$$

Ao calcular as derivadas parciais em relação às variáveis componentes  $x_k$  temos

$$\frac{\partial g}{\partial x_k}(x) = 2 \sum_{i=1}^n a_{ki} x_i - 2b_k.$$

Portanto, o gradiente de  $g$  é

$$\nabla g(x) = \left( \frac{\partial g}{\partial x_1}(x), \frac{\partial g}{\partial x_2}(x), \dots, \frac{\partial g}{\partial x_n}(x) \right)^t = 2(Ax - b) = -2r,$$

onde o vetor  $r$  é o vetor residual de  $x$ .

O cálculo multivariável nos diz que a direção de máximo decréscimo no valor de  $g(x)$  é a direção dada por  $-\nabla g(x)$ , ou seja, na direção do residual  $r$ . O método que escolhe

$$v^{(k+1)} = r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

é chamado de *método do decréscimo máximo*.

Um método alternativo usa um conjunto de vetores de direção não nulos  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$  é denominado **A-ortogonal**. Não é difícil demonstrar que um conjunto de vetores A-ortogonais associados com a matriz definida positiva  $A$  é linearmente independente. Esse conjunto de direções de busca dá

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{\langle v^{(k)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}$$

e  $x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}$ .

O seguinte teorema mostra que essa escolha de direções de busca gera a convergência

em quase todos  $n$  passos, de modo que, como um método direto, ele produz a solução exata, desde que a aritmética seja precisa.

**Teorema 5.2.** *Seja  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$  um conjunto  $A$ -ortogonal de vetores não nulos associados à matriz  $A$  definida positiva, e seja  $x^{(0)}$  arbitrário. Sejam*

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} \text{ e } x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)},$$

para  $k = 1, 2, \dots, n$ . Então, supondo uma aritmética precisa,  $Ax^{(n)} = b$ .

*Demonstração.*

Como, para cada  $k = 1, 2, \dots, n$ ,

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)},$$

temos

$$\begin{aligned} Ax^{(n)} &= Ax^{(n-1)} + t_n Av^{(n)} \\ &= (Ax^{(n-2)} + t_{n-1} Av^{(n-1)}) + t_n Ax^{(n)} \\ &\vdots \\ &= Ax^{(0)} + t_1 Av^{(1)} + t_2 Av^{(2)} + \dots + t_n Av^{(n)} \end{aligned}$$

e subtraindo  $b$  desse resultado, temos que

$$Ax^{(n)} - b = Ax^{(0)} - b + t_1 Av^{(1)} + t_2 Av^{(2)} + \dots + t_n Av^{(n)}.$$

Agora calculamos o produto interno de ambos os lados com o vetor  $v^{(k)}$  e usamos as propriedades do produto interno e o fato de que  $A$  é simétrica para obter

$$\begin{aligned} \langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_1 \langle Av^{(1)}, v^{(k)} \rangle + t_2 \langle Av^{(2)}, v^{(k)} \rangle + \dots + t_n \langle Av^{(n)}, v^{(k)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_1 \langle v^{(1)}, Av^{(k)} \rangle + t_2 \langle v^{(2)}, Av^{(k)} \rangle + \dots + t_n \langle v^{(n)}, Av^{(k)} \rangle. \end{aligned}$$

A propriedade de  $A$ -ortogonalidade implica, para cada  $k$ ,

$$\langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle = \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle. \quad (5.3)$$

Todavia,

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle},$$

de modo que

$$\begin{aligned} t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-1)} \rangle \\ &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} + Ax^{(0)} - Ax^{(1)} + \dots - Ax^{(k-2)} + Ax^{(k-2)} - Ax^{(k-1)} \rangle \\ &= \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle + \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} - Ax^{(1)} \rangle + \dots + \langle v^{(k)}, b - Ax^{(k-2)} - Ax^{(k-1)} \rangle. \end{aligned}$$

Mas para qualquer  $i$ ,

$$x^{(i)} = x^{(i-1)} + t_i v^{(i)} \text{ e } Ax^{(i)} = Ax^{(i-1)} + t_i Av^{(i)},$$

de modo que

$$Ax^{(i-1)} - Ax^{(i)} = -t_i Av^{(i)}.$$

Assim,

$$t_k \langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle - t_1 \langle v^{(k)}, Av^{(1)} \rangle - \dots - t_{k-1} \langle v^{(k)}, Av^{(k-1)} \rangle.$$

Por causa da A-ortogonalidade,  $\langle v^{(k)}, Av^{(i)} \rangle = 0$  para  $i \neq k$ , de modo que

$$\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle t_k = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle.$$

A partir da equação (5.3).

$$\begin{aligned} \langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + \langle b - Ax^{(0)}, v^{(k)} \rangle \\ &= \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

O vetor  $Ax^{(n)} - b$  é ortogonal ao conjunto A-ortogonal de vetores  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$ . Isso implica que  $Ax^{(n)} - b = 0$ . □

O uso de um conjunto A-ortogonal  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$  de vetores de direção produz o que se chama de um método de *direção conjugada*. O seguinte teorema mostra a ortogonalidade dos vetores residuais  $r^{(k)}$  e os vetores de direção  $v^{(j)}$

**Teorema 5.3.** *Os vetores residuais  $r^{(k)}$ , onde  $k = 1, 2, \dots, n$ , para um método de direção conjugada, satisfazem as equações*

$$\langle r^{(k)}, v^{(j)} \rangle = 0, \text{ para cada } j = 1, 2, \dots, k.$$

A demonstração desse teorema é feito por meio de indução matemática.

O método do gradiente conjugado de Hestenes e Stiefel escolhe as direções de busca  $\{v^{(k)}\}$  durante o processo iterativo de tal maneira que os vetores residuais  $\{r^{(k)}\}$  sejam

mutualmente ortogonais. Para construir os vetores de direção  $\{v^{(1)}, v^{(2)}, \dots\}$  e as aproximações  $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots\}$ , partimos de uma aproximação inicial  $x^{(0)}$  e usamos a direção de máximo decréscimo  $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$  como a primeira direção de busca  $v^{(1)}$ .

Suponha que tenhamos calculado as direções conjugadas  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(k-1)}\}$  e as aproximações  $\{x^{(1)}, \dots, x^{(k-1)}\}$  com

$$x^{(k-1)} = x^{(k-2)} + t_{k-1}v^{(k-1)},$$

onde

$$\langle v^{(i)}, Av^{(j)} \rangle = 0 \text{ e } \langle r^{(i)}, r^{(j)} \rangle = 0 \text{ para } i \neq j.$$

Se  $x^{(k-1)}$  é solução de  $Ax = b$ , terminamos. Caso contrário,  $r^{(k-1)} = b - Ax^{(k-1)} \neq 0$ , e pelo teorema 5.3, temos que  $\langle r^{(k-1)}, v^{(i)} \rangle = 0$  para  $i = 1, 2, \dots, k-1$ . Então usamos  $r^{(k-1)}$  para gerar  $v^{(k)}$  fazendo

$$v^{(k)} = r^{(k-1)} + s_{k-1}v^{(k-1)}.$$

Queremos escolher  $s_{k-1}$  de modo que

$$\langle v^{(k-1)}, Av^{(k)} \rangle = 0.$$

Como

$$Av^{(k)} = Ar^{(k-1)} + s_{k-1}Av^{(k-1)}$$

e

$$\langle v^{(k-1)}, Av^{(k)} \rangle = \langle v^{(k-1)}, Ar^{(k-1)} \rangle + s_{k-1} \langle v^{(k-1)}, Av^{(k-1)} \rangle,$$

teremos  $\langle v^{(k-1)}, Av^{(k)} \rangle = 0$  quando

$$s_{k-1} = -\frac{\langle v^{(k-1)}, Ar^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k-1)}, Av^{(k-1)} \rangle}.$$

Também podemos mostrar que com essa escolha de  $s_{k-1}$  temos  $\langle v^{(k)}, Av^{(i)} \rangle = 0$ , para cada  $i = 1, 2, \dots, k-2$ . Assim,  $\{v^{(1)}, \dots, v^{(k)}\}$  é um conjunto A-ortogonal.

Temos escolhido  $v^{(k)}$ , calculamos

$$t_k = \frac{\langle v^{(k)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k-1)} + s_{k-1}v^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} + s_{k-1} \frac{\langle v^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}.$$

Pelo teorema 5.3,  $\langle v^{(k)}, r^{(k-1)} \rangle = 0$ , de modo que

$$t_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}. \quad (5.4)$$

Assim,

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}.$$

Para calcular  $r^{(k)}$ , multiplicamos por  $A$  e subtraímos  $b$  para obter

$$Ax^{(k)} - b = Ax^{(k-1)} - b + t_k Av^{(k)}$$

ou

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} + t_k Av^{(k)}.$$

Assim,

$$\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle = \langle r^{(k-1)}, r^{(k)} \rangle + t_k \langle Av^{(k)}, r^{(k)} \rangle = -t_k \langle r^{(k)}, Av^{(k)} \rangle.$$

Além disso, a partir da equação (5.7),

$$\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle = t_k \langle r^{(k)}, Av^{(k)} \rangle,$$

de modo que

$$s_k = -\frac{\langle v^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = -\frac{\langle r^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} = \frac{(1/t_k) \langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{(1/t_k) \langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}.$$

Em resumo, temos a fórmula

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}; v^{(1)} = r^{(0)};$$

e, para  $k = 1, 2, \dots, n$ ,

$$\begin{aligned} t_k &= \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k-1)}, Av^{(k-1)} \rangle}, \\ x^{(k)} &= x^{(k-1)} + t_k v^{(k)}, \\ r^{(k)} &= r^{(k-1)} + t_k Av^{(k)}, \\ s_k &= \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}, \\ v^{(k+1)} &= r^{(k)} + s_k v^{(k)}. \end{aligned} \tag{5.5}$$

Em vez de apresentar um algoritmo para o método do Gradiente Conjugado usando essas fórmulas, ampliaremos o método para incluir o *precondicionamento*. Se a matriz  $A$  é mal condicionada, esse método é altamente suscetível aos erros de arredondamento. Assim, apesar de a resposta exata ser obtida em  $n$  passos, isso não é comum. Como método direto, o método do gradiente conjugado não é tão bom como a eliminação gaussiana com pivoteamento. O principal uso do método do gradiente conjugado é como método iterativo aplicado a um sistema mais bem condicionado. Nesse caso, com frequência obtemos uma solução aproximada aceitável em cerca de  $\sqrt{n}$  passos.

Para aplicar o método a um sistema mais bem condicionado, queremos escolher uma matriz não singular de condicionamento  $C$ , de modo que

$$\tilde{A} = C^{-1}A(C^{-1})^t$$

esteja mais bem condicionada. Para simplificar a notação, usaremos a matriz  $C^{-t}$  para nos referir  $(C^{-1})^t$ .

Consideremos o sistema linear

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b},$$

onde  $\tilde{x} = C^t x$  e  $\tilde{b} = C^{-1}b$ . Então

$$\tilde{A}\tilde{x} = (C^{-1}AC^{-t})(Cx) = C^{-1}Ax.$$

Assim, podemos resolver  $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$  em termos de  $\tilde{x}$  e, então, obter  $x$  multiplicando por  $C^{-t}$ . Contudo, em vez de escrever de novo a equação (5.5) usando  $\tilde{r}^{(k)}$ ,  $\tilde{v}^{(k)}$ ,  $\tilde{x}^{(k)}$  e  $\tilde{s}_k$ , incorporamos o preconditionamento de maneira implícita.

Como

$$\tilde{x}^{(k)} = Cx^{(k)},$$

temos

$$\tilde{r}^{(k)} = \tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x}^{(k)} = C^{-1}b - (C^{-1}AC^{-t})C^t x^{(k)} = C^{-1}(b - Ax^{(k)}) = C^{-1}r^{(k)}.$$

Sejam  $\tilde{v}^{(k)} = Cv^{(k)}$  e  $w^{(k)} = C^{-1}r^{(k)}$ . Então

$$\tilde{s}_k = \frac{\langle \tilde{r}^{(k)}, \tilde{r}^{(k)} \rangle}{\langle \tilde{r}^{(k-1)}, \tilde{r}^{(k-1)} \rangle} = \frac{\langle C^{-1}r^{(k)}, C^{-1}r^{(k)} \rangle}{\langle C^{-1}r^{(k-1)}, C^{-1}r^{(k-1)} \rangle},$$

de modo que

$$\tilde{s}_k = \frac{\langle w^{(k)}, w^{(k)} \rangle}{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}. \quad (5.6)$$

Assim,

$$\tilde{t}_k = \frac{\langle \tilde{r}^{(k-1)}, \tilde{r}^{(k-1)} \rangle}{\langle \tilde{v}^{(k)}, \tilde{A}\tilde{v}^{(k)} \rangle} = \frac{\langle C^{-1}r^{(k-1)}, C^{-1}r^{(k-1)} \rangle}{\langle C^t v^{(k)}, C^{-1}AC^{-t}C^t v^{(k)} \rangle} = \frac{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}{\langle C^t v^{(k)}, C^{-1}Av^{(k)} \rangle}$$

e

$$\tilde{t}_k = \frac{\langle w^{(k-1)}, w^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle}. \quad (5.7)$$

Além disso,

$$\tilde{x}^{(k)} = \tilde{x}^{(k-1)} + \tilde{t}_k + \tilde{t}_k \tilde{v}^{(k)}, \text{ de modo que } C^t x^{(k)} = C^t x^{(k-1)} + \tilde{t}_k C^t v^{(k)}$$

e

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \tilde{t}_k v^{(k)}. \quad (5.8)$$

Continuando dessa forma,

$$\tilde{r}^{(k)} = \tilde{r}^{(k-1)} - \tilde{t}_k \tilde{A} \tilde{v}^{(k)},$$

de modo que

$$C^{-1} r^{(k)} = C^{-1} r^{(k-1)} - \tilde{t}_k C^{-1} A C^{-t} \tilde{v}^{(k)}, \quad r^{(k)} = r^{(k-1)} - \tilde{t}_k A C^{-t} C^t v^{(k)}$$

e

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} - \tilde{t}_k A v^{(k)}. \quad (5.9)$$

Por último,

$$\tilde{v}^{(k+1)} = \tilde{r}^{(k)} + \tilde{s}_k \tilde{v}^{(k)} \text{ e } C^t v^{(k+1)} = C^{-1} r^{(k)} + \tilde{s}_k C^t v^{(k)},$$

e, assim,

$$v^{(k+1)} = C^{-t} C^{-1} r^{(k)} + \tilde{s}_k v^{(k)} = C^{-t} w^{(k)} + \tilde{s}_k v^{(k)}. \quad (5.10)$$

O método do Gradiente Conjugado preconditionado baseia-se no uso das equações (5.6) a (5.10) na ordem (5.7), (5.8), (5.9), (5.6), (5.10). O algoritmo a seguir implementa esse procedimento.

#### Algoritmo do Método do Gradiente Conjugado Precondicionado

Para resolver  $Ax = b$  dada a matriz de preconditionamento  $C^{-1}$  e a aproximação inicial  $x^{(0)}$ :

ENTRADA	o número de equações e incógnitas $n$ ; as entradas $a_{ij}, 1 \leq i, j \leq n$ , a matriz $A$ ; as entradas $b_j, 1 \leq j \leq n$ , do vetor $b$ ; as entradas $\gamma_{ij}, 1 \leq i, j \leq n$ , da matriz de preconditionamento $C^{-1}$ ; o número máximo de iterações $N$ ; tolerância $TOL$ .
SAÍDA	a solução aproximada $x_1, \dots, x_n$ e o residual $r_1, \dots, r_n$ ou uma mensagem indicando que foi excedido o número de iterações.

PASSO 1 - Faça:	$r = b - Ax; \text{ (Calcula } r^{(0)})$ $w = C^{-1}r; \text{ (Nota: } w = w^{(0)})$ $v = C^{-t}w; \text{ (Nota: } v = v^{(1)})$ $\alpha = \sum_{j=1}^n w_j^2.$
PASSO 2	Faça $k = 1$ .
PASSO 3	Enquanto ( $k \leq N$ ) siga os Passos 4-7
PASSO 4 - Se $\ v\  < TOL$ , então	SAÍDA (Vetor solução; $x_1, \dots, x_n$ ); SAÍDA (com residual; $r_1, \dots, r_n$ ); (O procedimento foi bem-sucedido.) PARE
PASSO 5 - Faça:	$u = Av; \text{ (Nota: } u = Av^{(k)})$ $t = \frac{\alpha}{\sum_{j=1}^n v_j u_j}; \text{ (Nota: } t = t_k)$ $x = x + tv; \text{ (Nota: } x = x^{(k)})$ $r = r - tu; \text{ (Nota: } r = r^{(k)})$ $w = C^{-1}r; \text{ (Nota: } w = w^{(k)})$ $\beta = \sum_{j=1}^n w_j^2. \text{ (Nota: } \beta = \langle w^{(k)}, w^{(k)} \rangle)$
PASSO 6 - Se $ \beta  < TOL$ então se $\ r\  < TOL$ então	SAÍDA (Vetor solução; $x_1, \dots, x_n$ ); SAÍDA (com residual; $r_1, \dots, r_n$ ); (O procedimento foi bem-sucedido.) PARE.
PASSO 7 - Faça:	$s = \beta/\alpha; \text{ (} s = s_k)$ $v = C^{-t}w + sv; \text{ (Nota: } v = v^{(k+1)})$ $\alpha = \beta; \text{ (Atualiza } \alpha.)$ $k = k + 1.$
PASSO 8 - Se ( $k > n$ ) então	SAÍDA (O número máximo de iterações foi excedido ); (O procedimento não foi bem-sucedido.) PARE.

# Capítulo 6

## Exemplos numéricos

Nesse capítulo, iremos comparar os dois métodos de resolução do problema inverso que foram descritos. Sendo assim, implementamos os mesmos exemplos para a reconstrução que usa o método de Levenberg-Marquardt, ou seja, o método dos mínimos quadrados e a reconstrução pelas diagonais, isto é, o método das diagonais. Em ambas as resoluções, usamos todos os dados possíveis, ou seja,  $4N$  detectores e  $4N - 4$  fontes. Portanto, para o método das diagonais usamos o algoritmo 2 explicitado na seção 4.3.

A implementação desse trabalho foi feita usando o Matlab. Fizemos os testes apenas para o caso isotrópico. Nas imagens que colocaremos a seguir, fizemos a plotagem dos  $w_{ij}$  de cada pixel  $(i, j)$ .

### 6.1 Implementação dos mínimos quadrados

Fizemos a implementação dos mínimos quadrados utilizando o pacote Toolbox do Matlab para executar o método de Levenberg-Marquardt. Iniciamos os testes fazendo  $N = 4$ , com o chute inicial igual a 1 em todos os pixels, ou seja,  $w_{ij} = 1, \forall i, j$ . Como podemos observar na figura 6.1, a reconstrução sem ruído é muito boa, pelo fato de termos todos os dados do problema e a resolução ser pequena, já que  $N = 4$ . No entanto, para encontrar essa solução o número de iterações foi muito grande. O critério de parada para o caso sem ruído foi pelo fato que o resíduo,  $r = 7.779143 \times 10^{-14}$ , ficou menor que  $1 \times 10^{-3}$ , sendo que este valor foi dado.

Na prática, é esperado que as medidas obtidas dos detectores estejam submetidas a um certo nível de ruído. Por este motivo, testamos também com dados com ruído, nesse caso consideramos os novos dados com ruído para cada par de fonte-detector  $\tilde{P}_{sd}$  dados por  $\tilde{P}_{sd} = (\alpha r) + P_{sd}$ , onde  $r$  é uma variável randômica com distribuição uniforme no intervalo  $(0, 1)$  e  $\alpha$  o nível de ruído. Note que, no mesmo exemplo da figura 6.1, com ruído de 1% a reconstrução ainda é razoável, já com ruído de 2% e 5% a reconstrução fica muito ruim.

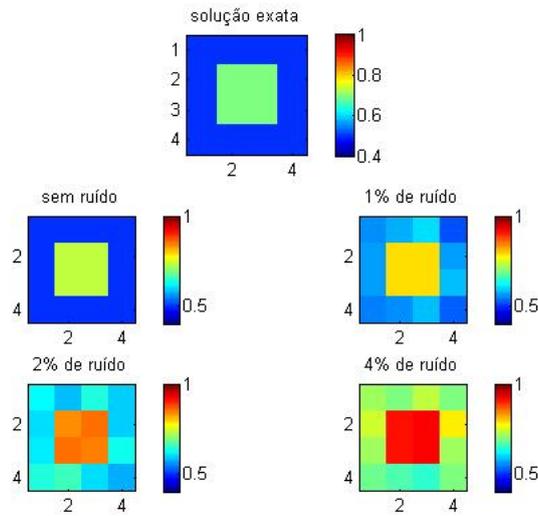


Figura 6.1: Método de Levenberg com  $N = 4$ .

No caso em que o ruído é de 1% o critério de parada foi que a norma relativa do passo atual,  $3.405845 \times 10^{-7}$ , ficou menor que  $1 \times 10^{-6}$ , este valor também foi dado. E além disso, o resíduo  $r = 1.617836 \times 10^{-6}$  ficou menor que  $1 \times 10^{-3}$ . Com ruído de 2% o critério de parada foi porque a norma relativa do passo,  $8.822013 \times 10^{-7}$ , estava menor que  $1 \times 10^{-6}$ . E o resíduo,  $r = 2.447775 \times 10^{-5}$ , ficou menor do que  $1 \times 10^{-3}$ . Já com ruído de 4% o critério de parada foi também porque a norma relativa do passo atual,  $9.934348 \times 10^{-7}$ , ficou menor do que  $1 \times 10^{-6}$ , e além disso, o resíduo,  $r = 3.370136 \times 10^{-4}$ , ficou menor do que  $1 \times 10^{-3}$ .

Fizemos também o teste com  $N = 8$ , com o mesmo chute inicial que no teste de  $N = 4$ , isto é,  $w_{ij} = 1$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$ . Na figura 6.2 vemos que a reconstrução sem ruído já fica pior que no caso em que  $N = 4$ . Principalmente nos pixels internos, pelo fato que a convergência nos pixels internos é muito lenta, e o problema tem dimensões bem maiores já que a matriz  $A$  do problema direto é na ordem de  $N^2$ , para o caso isotrópico, o que faz com que o programa demore muito para encontrar a solução quanto maior for a discretização do problema, ou seja, quanto maior for o  $N$ . E as reconstruções com ruído, já nem conseguem alterar os  $w$ 's dos pixels bem do interior.

O critério de parada para o caso sem ruído foi pelo fato que o resíduo,  $r = 3.927839 \times 10^{-12}$ , ficou menor que  $1 \times 10^{-3}$ , sendo que este valor foi dado. Além disso, a norma relativa do passo atual,  $4.928051 \times 10^{-7}$ , ficou menor que  $1 \times 10^{-6}$ , este valor também foi dado. No caso em que o ruído é de 1% o critério de parada foi pelo fato que a norma relativa do passo atual,  $2.961903 \times 10^{-7}$ , ficou menor que  $1 \times 10^{-6}$ . E além disso, o resíduo  $r = 3.549004 \times 10^{-5}$  ficou menor que  $1 \times 10^{-3}$ . Com ruído de 2% o critério de parada foi porque a norma relativa do passo,  $7.064986 \times 10^{-7}$ , estava menor que  $1 \times 10^{-6}$ . E o resíduo,  $r = 6.869172 \times 10^{-4}$ , ficou menor do que  $1 \times 10^{-3}$ .

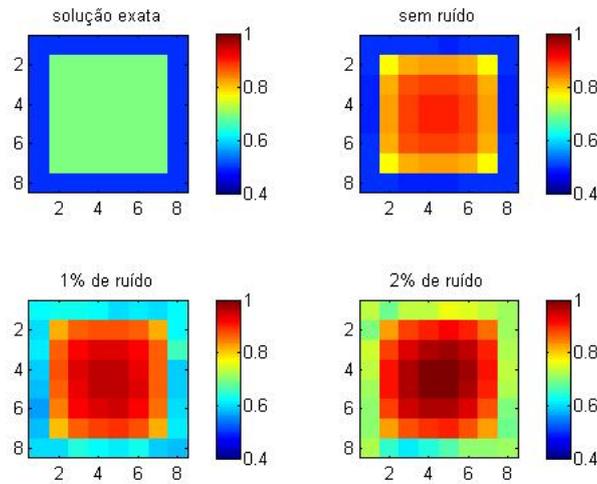


Figura 6.2: Método de Levenberg com  $N = 8$ .

Observamos também, que a convergência dos pixels das bordas é extremamente rápida, porém, nos pixels internos a convergência é muito lenta. Fizemos o teste para analisar esta convergência, onde o chute inicial foi  $w_{ij} = 0,3$ , para todo  $1 \leq i, j \leq N$  e  $N = 4$  e dados exatos. E analisamos que a convergência dos pixels da borda é em no máximo 10 iterações, no entanto, para os pixels internos a convergência é bem mais demorada, como pode ser visto na figura 6.3.

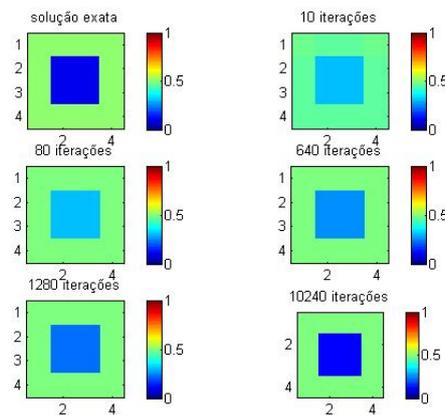


Figura 6.3: Método de Levenberg com  $N = 4$ .

Para o caso em que  $N = 8$ , com dados exatos, podemos observar que a convergência para solução dos pixels internos é muito lenta. Na figura 6.4 vemos que a quantidade de iterações para encontrar uma solução não muito boa, principalmente para os pixels do interior, é muito maior que para o caso  $N = 4$ . E, além disso, a solução desejada não é encontrada.

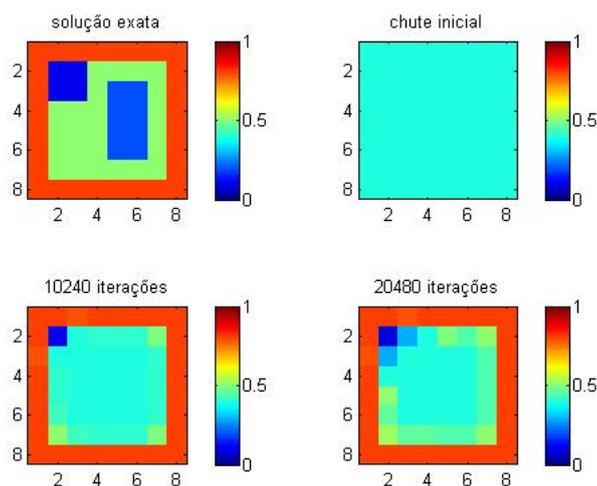


Figura 6.4: Método de Levenberg com  $N = 8$ .

## 6.2 Implementação do método das diagonais

Para o método das diagonais fizemos a implementação apenas do algoritmo 2 com todas as fontes e todos os detectores possíveis, para podermos comparar as duas formas de resolução abordadas neste trabalho. Para tal, testamos os mesmos exemplos que na abordagem de mínimos quadrados para assim analisarmos a diferença entre as duas soluções do problema inverso discutidas no capítulo 4. Para resolver os sistemas de equação que aparecem para encontrar os valores de  $v_{ij}$  em cada diagonal usamos o método QR.

Sendo assim, fizemos o teste para  $N = 4$ , com a figura 6.5, podemos ver que a reconstrução sem ruído é perfeita. A vantagem desse método é que o tempo que o programa leva para encontrar a solução é muito mais rápida que pela resolução dos mínimos quadrados.

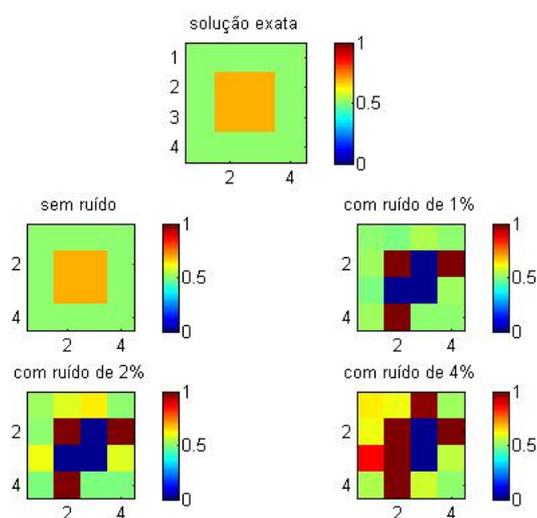


Figura 6.5: Método das diagonais com  $N = 4$ .

No entanto, quando fizemos os testes com ruído, os resultados não foram tão bons nos  $w's$  das últimas diagonais calculadas, que são as diagonais internas. Consideramos aqui os novos dados com ruído  $\tilde{P}_{sd}$  como sendo  $\tilde{P}_{sd} = (\alpha r) + P_{sd}$ , onde  $r$  é uma variável randômica com distribuição uniforme no intervalo  $(0, 1)$  e  $\alpha$  o nível de ruído.

Fizemos, também, o teste para  $N = 8$ . Na figura 6.6, podemos observar que a reconstrução sem ruído é perfeita, no entanto com 1% de ruído a reconstrução fica muito pior que a reconstrução pela abordagem de minimização.

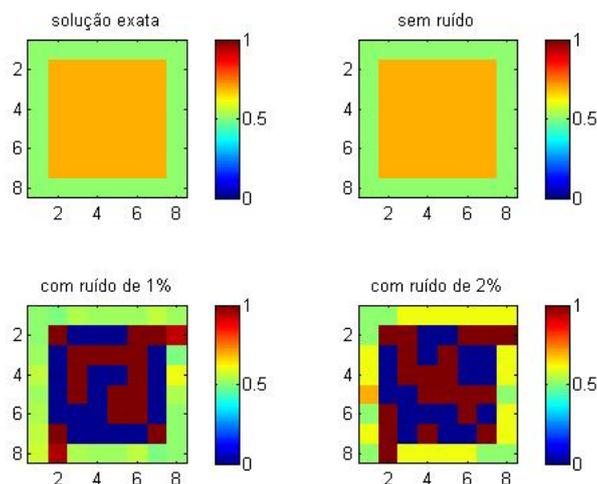


Figura 6.6: Método das diagonais com  $N = 8$ .

O teste que nós analisamos a convergência do método de mínimos quadrados para os pixels internos não faz sentido no método das diagonais, já que o processo de resolver o problema inverso não usa de iterações. No entanto, fizemos o mesmo teste (que o da figura 6.3) para este método com dados exatos e a solução é perfeita e o programa encontra a solução rapidamente. Veja figura 6.7.

Fizemos também o caso de  $N = 8$  com dados exatos, o mesmo teste da figura 6.4, para este método e o que obtivemos foi a solução desejada num tempo muito curto. Veja figura 6.8.

Com este estudo podemos concluir que o problema inverso é altamente não linear e extremamente mal condicionado, por este motivo precisa de regularização. Porém, estamos resolvendo um problema bastante difícil e que na prática podem haver informações adicionais que ajudem na regularização. Dificuldades semelhantes ocorrem com tomografia por impedância e aqui também para se tornar prático é necessário informação a-posteriori.

Note que não estamos utilizando dados temporais sobre as partículas. Isto porém, já foi proposto como um modo de melhorar os resultados e obter mais informações.

E também, o uso aditivo, diferentemente do ruído multiplicativo, pode explicar a degradação substancial das reconstruções.

Além disso, é importante enfatizar que provavelmente a razão pela qual os resultados estão dando tão ruins é porque o gradiente está sendo aproximado por diferenças finitas

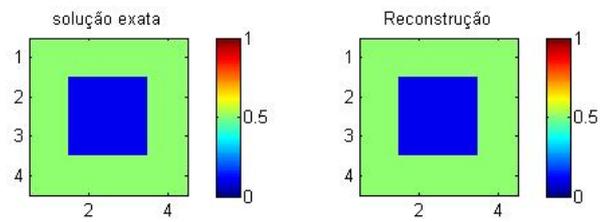


Figura 6.7: Método das diagonais com  $N = 4$ .

dentro da rotina do matlab. Já nas implementações (que foram usadas nos trabalhos aqui citados) foi calculado o gradiente através de um algoritmo.

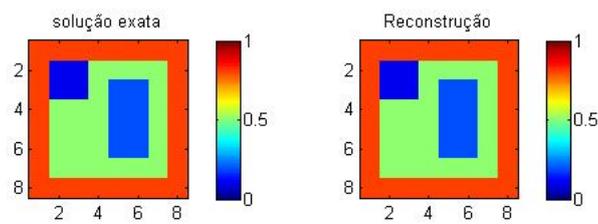


Figura 6.8: Método das diagonais com  $N = 8$ .

# Bibliografia

- [1] BURDEN, R. L., AND FAIRES, J. D. *Análise Numérica*.
- [2] DE CARVALHO REIS, A. C. Reconstrução não invasiva de objetos que difudem radiação, 1995.
- [3] GRÜNBAUM, F. A. Diffuse tomography: the isotropic case. *Inverse Problems* 8 (1992), 409–419.
- [4] GRÜNBAUM, F. A., LATHAM, G. A., SINGER, J. R., AND ZUBELLI, J. P. Diffuse tomography. In *Proceedings of the Laser Spectroscopy Symposium of the S. P. I. E. Los Angeles Meeting Jan. 1991* (1991), Progress in Biomedical Optics **1431**, pp. 232–238.
- [5] GRÜNBAUM, F. A., LATHAM, G. A., SINGER, J. R., AND ZUBELLI, J. P. Imaging of media that diffuse and scatter radiation. In *Radar and Sonar, Part 2*. Springer, New York, 1993, pp. 57–70.
- [6] GRÜNBAUM, F. A., LATHAM, G. A., AND ZUBELLI, J. P. An inverse problem for a model of scattered and diffused radiation. In *Mini-Conference on Inverse Problems in Partial Differential Equations (Canberra, 1990)*. Austral. Nat. Univ., Canberra, 1992, pp. 69–81.
- [7] GRÜNBAUM, F. A., AND MATUSEVICH, L. F. Explicit inversion formulas for a model in diffuse tomography. *Advances in Applied Mathematics* 29 (2002), 172–183.
- [8] GRÜNBAUM, F. A., AND ZUBELLI, J. P. Diffuse tomography: computational aspects of the isotropic case. *Inverse Problems* 8, 3 (1992), 421–433.
- [9] GRÜNBAUM, F. A., AND ZUBELLI, J. P. Diffuse tomography. In *Proceedings of the Meeting on Physiological Imaging, Spectroscopy, and Early Detection, Los Angeles, Jan. 1993* (1993), SPIE Proceedings **1887**, pp. 263–270.
- [10] HOFMANN, B. *Regularization for applied inverse and ill-posed problems*, vol. 85 of *Teubner-Texte zur Mathematik [Teubner Texts in Mathematics]*. BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1986. A numerical approach, With German, French and Russian summaries.

- [11] KALTENBACHER, B., AND NEUBAUER, A. *Iterative Regularization Methods for Nonlinear Ill-Posed Problems*. Deutsche Nationalbibliothek.
- [12] KIRSCH, A. *An Introduction on the Mathematical Theory of Inverse Problems*, second ed.
- [13] LEITÃO, A., MARKOWICH, P. A., AND ZUBELLI, J. P. Inverse problems for semiconductors: models and methods. In *Transport phenomena and kinetic theory*, Model. Simul. Sci. Eng. Technol. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2007, pp. 117–149.
- [14] LEITÃO, A., AND ZUBELLI, J. P. Iterative regularization methods for a discrete inverse problem in MRI. *Cubo* 10, 2 (2008), 135–144.
- [15] PATCH, S. A note on consistency conditions in three dimensional diffuse tomography. Quinto, Eric Todd (ed.) et al., *Tomography, impedance imaging, and integral geometry*. 1993 AMS-SIAM summer seminar, June 7-18, 1993, Mount Holyoke College, South Hadley, MA, USA. Providence, RI: American Mathematical Society. *Lect. Appl. Math.* 30, 211-230 (1994)., 1994.
- [16] PATCH, S. Consistency conditions in diffuse tomography. *Inverse Probl.* 10, 1 (1994), 199–212.
- [17] SINGER, J. R., GRÜNBAUM, F. A., KOHN, P., AND ZUBELLI, J. P. Image reconstruction of the interior of bodies that diffuse radiation. *Science* 248 (1990), 990–993.
- [18] SVAITER, B. F., AND ZUBELLI, J. P. Convexity for the diffuse tomography model. *Inverse Problems* 7 (2001), 729–738.
- [19] ZUBELLI, J. P. *An introduction to inverse problems. Examples, methods and questions*. Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA), Rio de Janeiro, 1999. Appendix A by the author and Luis Orlando Castellano Pérez.