



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍAS

**MÉTODOS VARIACIONALES EN ESPACIOS
DE HILBERT PARA LA IDENTIFICACIÓN DE
FUENTES BIOELÉCTRICAS**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS
(MATEMÁTICAS APLICADAS E INDUSTRIALES)**

PRESENTA:

GLORIA YADIRA TRINIDAD BELLO

ASESOR:

DR. L. HÉCTOR JUÁREZ VALENCIA

JURADO CALIFICADOR:

PRESIDENTE: DR. JOAQUÍN DELGADO FERNÁNDEZ

SECRETARIO: DR. L. HÉCTOR JUÁREZ VALENCIA

VOCAL: DR. JACOBO OLIVEROS OLIVEROS

CIUDAD DE MÉXICO, 05/03/2018



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00174

Matrícula: 2153806012

MÉTODOS VARIACIONALES EN ESPACIOS DE HILBERT PARA LA IDENTIFICACIÓN DE FUENTES BIOELÉCTRICAS

En la Ciudad de México, se presentaron a las 12:00 horas del día 5 del mes de marzo del año 2018 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. JOAQUIN DELGADO FERNANDEZ
- DR. JOSE JACOBO OLIVEROS OLIVEROS
- DR. LORENZO HÉCTOR JUAREZ VALENCIA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (MATEMÁTICAS APLICADAS E INDUSTRIALES)

DE: GLORIA YADIRA TRINIDAD BELLO

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

a probar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



GLORIA YADIRA TRINIDAD BELLO
ALUMNA

REVISÓ

LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JOSE GILBERTO CORDOBA HERRERA

PRESIDENTE

DR. JOAQUIN DELGADO FERNANDEZ

VOCAL

DR. JOSE JACOBO OLIVEROS OLIVEROS

SECRETARIO

DR. LORENZO HECTOR JUAREZ VALENCIA

*Dedicado a
mi padres, Guadalupe y Rubén
y hermanos, Diana y Adalberto*

A mi amado esposo, Alejandro

Agradecimientos

A mis padres por todo el amor que me han brindado desde que nací y han estado conmigo en todo momento. Les doy las gracias por apoyarme con mis estudios.

A mi amado esposo, Alejandro, que siempre me brinda su apoyo y está conmigo en los momentos más difíciles, siempre animándome a seguir y cumplir mis metas. Te amo con todo mi corazón.

A mi asesor de tesis, Dr. L. Héctor Juárez Valencia, por sus conocimientos compartidos y sobre todo por su paciencia para que este trabajo concluyera.

A la MCMAI por creer en mí y darme la oportunidad de prepararme más.

Al CONACYT por el apoyo que me otorgó para mis estudios.

Índice general

Agradecimientos	II
1. Introducción	4
2. Modelos para el problema directo y el problema inverso electroencefalográfico	6
2.1. El electroencefalograma y problemas asociados	6
2.2. Formulación del modelo matemático y sus propiedades	8
2.3. Solución débil y clásica del PCE	11
2.4. Formulación del problema directo y el problema inverso electroencefalográfico	14
3. Método variacional de penalización para resolver el problema inverso electroencefalográfico (PIE)	19
3.1. Formulación del problema penalizado (regularizado)	20
3.2. Condiciones de optimalidad y el método de gradiente conjugado . .	22
3.3. Discretización de los problemas elípticos: método de elementos finitos	24
3.4. Resultados numéricos	26
4. Método variacional con multiplicadores de Lagrange para resolver el PIE	38
4.1. El Lagrangiano y las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker	39
4.2. Gradiente conjugado para resolver las ecuaciones normales	42
4.3. Resultados numéricos	45
5. Método variacional de Lagrangiano aumentado	51
5.1. Lagrangiano aumentado para el PIE	51
5.2. Condiciones para la solución	52
5.3. Método iterativo para la solución: ascenso dual	54
5.4. Resultados numéricos	56
6. Conclusiones	64

Capítulo 1

Introducción

El cerebro humano es el mando central del sistema nervioso y es altamente complejo. Dada la naturaleza del cerebro, formado por millones de neuronas las cuales transmiten información desde el sistema nervioso a los diversos órganos y sistemas del cuerpo mediante impulsos electroquímicos, se han desarrollado diversos métodos para el estudio de su actividad eléctrica. En la actualidad existe gran interés en el estudio de las funciones cerebrales, con el propósito de identificar enfermedades con asiento en el sistema nervioso central, tales como epilepsias o tumores. A partir de esto, se han desarrollado estudios experimentales y técnicas capaces de dar información sobre las posibles causas que generan estos daños.

En 1924, Hans Berger [1] fue el primero en descubrir que los patrones de actividad eléctrica del cerebro podrían ser registrados a través de una serie de electrodos colocados en distintos puntos del cuero cabelludo. A estos patrones, se les denominó *electroencefalogramas* (E.E.G). Los potenciales que se registran en el E.E.G provienen de la actividad conjunta y sincronizada de un gran conglomerado de neuronas llamados fuentes bioeléctricas. La importancia del E.E.G radica en que es una técnica no invasiva que proporciona una excelente resolución temporal, lo cual permite que los cambios de la actividad en el cerebro puedan ser registrados de manera casi inmediata (en cuestión de microsegundos). Una desventaja de esta técnica es la poca resolución espacial, lo cual obviamente provoca que se tengan algunas dificultades para determinar la fuente generadora exacta de la actividad cerebral.

A partir de la física del fenómeno y de algunas descripciones matemáticas se ha establecido un modelo para la *localización de fuentes de actividad cerebral*, así como características de dichas fuentes. El modelo da origen a el llamado *problema inverso electroencefalográfico* (**PIE**), el cual pretende inferir la localización de fuentes que producen las mediciones obtenidas por el E.E.G. Como es característico de los problemas inversos, el **PIE** cae dentro de los problemas mal planteados resultando en múltiples soluciones posibles e inestabilidad, por ello se deben determinar condiciones adicionales que nos lleven a una solución acep-

table.

Es importante mencionar que existen trabajos previos donde se ha estudiado el problema inverso electroencefalográfico desde diferentes perspectivas, en este trabajo se exponen algunos resultados obtenidos por Belem [7] cuyo trabajo está basado en la implementación del método de penalización para obtener soluciones al **PIE**.

Este trabajo se puede considerar como una continuación del estudio realizado en la tesis anterior [6], y se incluye un estudio más exhaustivo del **PIE**, además de la introducción y estudio del método de multiplicadores de Lagrange y del método de Lagrangiano aumentado. Para tal propósito, el presente trabajo se divide en 5 capítulos, conclusiones y apéndices. En el capítulo 1 se explica de manera breve algunos conceptos relativos a las bases biofísicas del cerebro humano, además se presenta la técnica del electroencefalograma como vía para obtener información de la actividad eléctrica del cerebro.

En el capítulo 2, se presentan el problema directo y el problema inverso electroencefalográfico (**PIE**) como modelos para describir la actividad eléctrica del cerebro, así como las bases teóricas que los conforman. A partir del conocimiento de potenciales eléctricos medidos con el EEG se pretende describir las fuentes de corriente generadas por la actividad eléctrica cerebral. El capítulo se centra principalmente en el estudio del **PIE** y se detallan las relaciones matemáticas que unen las fuentes y los potenciales eléctricos.

En el capítulo 3 se presenta el **PIE** como un problema de control donde es necesario resolver un problema de optimización con restricciones. En este capítulo se utiliza del algoritmo de gradiente conjugado para determinar la fuente de manera única y estable. Se analizan distintos problemas con la finalidad de validar el método propuesto, además se exponen los resultados numéricos obtenidos.

En el capítulo 4 se desarrolla el método de multiplicadores de Lagrange para resolver el **PIE**, así como las condiciones de Karush-Kunh-Tucker que debe satisfacer la solución óptima, esto deriva en resolver un problema de punto silla. La eficiencia del método se verifica con ejemplos ya analizados en el capítulo anterior, adicionalmente se exponen los resultados numéricos obtenidos para dichos ejemplos. Para finalizar se analiza el caso cuando se introduce 'ruido' en los datos de entrada.

En el capítulo 5 se expone el método de Lagrangiano aumentado con el objetivo de mejorar las soluciones obtenidas con el método de multiplicadores de Lagrange, cuando hay presente errores en los datos. Se propone un método iterativo para encontrar la solución numérica de la fuente. Finalmente se muestran los resultados numéricos obtenidos con la nueva metodología propuesta. Por último se exponen las conclusiones de este trabajo y la bibliografía utilizada.

Capítulo 2

Modelos para el problema directo y el problema inverso electroencefalográfico

Los modelos matemáticos se han utilizado para la descripción y estudio de diferentes procesos y fenómenos. Muchos problemas de gran interés son aquellos denominados problemas inversos los cuales consisten en utilizar el conocimiento de algunas propiedades así como datos o mediciones para determinar características desconocidas de algún fenómeno.

En este trabajo se abordará el estudio del problema inverso electroencefalográfico, el cual consiste en determinar las fuentes bioeléctricas o distribuciones de corriente en el cerebro que provienen de la actividad neuronal, a partir de mediciones obtenidas con el electroencefalograma.

2.1. El electroencefalograma y problemas asociados

Entre las principales técnicas de estudio del cerebro se encuentra la *electroencefalografía*, utilizada para realizar diagnóstico y manejo de pacientes con trastornos convulsivos. El electroencefalograma (EEG) es el registro y evaluación de los potenciales eléctricos generados por grandes conglomerados de neuronas llamados fuentes bioeléctricas, éstos se pueden obtener por medio de electrodos situados en diversos puntos específicos como el cuero cabelludo, la base del cráneo o el cerebro expuesto.

Una de las ventajas del EEG es que la información que proporciona se captura en tiempo real, de forma simple y no invasiva. Sin embargo unos de sus principales inconvenientes es que por su carácter macroscópico y diversidad de configuraciones de fuentes posibles, no se pueden determinar de forma unívoca

los generadores del EEG.

Los modelos que describen la actividad eléctrica del cerebro conducen al estudio de dos problemas matemáticos:

Problema Directo Encefalográfico (PDE). Considerando el cerebro como un medio continuo conductor, con cierta geometría y conductividad variable, y conociendo las corrientes producidas en el mismo, determinar las mediciones de voltaje que se pueden obtener con el EEG.

Problema Inverso Encefalográfico. Considerando el cerebro como un medio continuo conductor, con cierta geometría y conductividad variable, y utilizando las mediciones del potencial que se obtienen con el EEG, obtener las densidades de corriente (fuentes) en el cerebro que produjeron dichas mediciones.

Bases biofísicas y electrofisiológicas

En el estudio de la dinámica de la actividad electromagnética cerebral se distinguen dos niveles:

El nivel microscópico. Describe la actividad de las neuronas y su capacidad para generar señales eléctricas. La base electrofisiológica de esta actividad reside en el estudio de potenciales de acción generados por el flujo de iones a través de canales de membranas. Cabe destacar que el EEG no recibe toda la información, debido a cancelaciones de corrientes iónicas extracelulares producidas por geometrías dendríticas en campo cerrado, según la terminología de Lorente de Nó [2].

El nivel macroscópico. Corresponde a la actividad de redes neuronales las cuales producen oscilaciones electromagnéticas que pueden ser registradas con electrodos en el cuero cabelludo (EEG).

Las mediciones asociadas a ambos niveles son el resultado del flujo de información intra e interneuronal que se transporta mediante señales eléctricas y químicas. Todas las señales eléctricas se producen por el flujo de iones positivos y negativos a través de la membrana celular y el espacio intercelular.

A partir de lo anterior se distinguen dos tipos de corrientes:

Corriente primaria o activa. Es el flujo de iones que corresponde a la corriente microscópica.

Corriente secundaria o pasiva. Son las corrientes inducidas en el espacio intercelular (respuesta eléctrica del medio conductor).

Las corrientes secundarias microscópicas inducen gradientes de potencial proporcionales a la magnitud de la corriente local y la conductividad del medio. Por esto, se dice que son corrientes ohmicas o que cumplen la ley de Ohm **la cual relaciona el campo eléctrico con el gradiente del potencial eléctrico**.

Estudios comparativos con tejidos cerebral y cardíaco [3] muestran que las corrientes secundarias exceden en magnitud a las corrientes primarias generadas en tejidos vivos. Así, las mediciones macroscópicas obtenidas con el EEG son producto esencialmente por las corrientes secundarias microscópicas. Es decir, la corriente primaria del nivel macroscópico está compuesta en mayor parte por la corriente microscópica secundaria.

El problema que se plantea es determinar las fuentes de corriente generadas por la actividad eléctrica cerebral a partir de las mediciones obtenidas con el EEG. La dificultad fundamental del problema es que los modelos considerados dan origen a problemas inversos y, por lo tanto, a problemas mal planteados, en donde la existencia y unicidad de soluciones se puede superar en forma adecuada sin muchas dificultades, pero no así la inestabilidad cuando se utilizan algoritmos numéricos.

2.2. Formulación del modelo matemático y sus propiedades

La actividad electromagnética del cerebro se debe al movimiento de iones en regiones activas. Las fuentes bioeléctricas cerebrales se componen de conglomerados de neuronas las cuales están encargadas de recibir y transmitir información por medio de impulsos eléctricos. Las fuentes pueden ubicarse dentro del volumen ocupado por el cerebro o en la corteza cerebral. La conductividad eléctrica del cerebro puede dar información sobre lesiones presentes en éste, por ejemplo, edemas, tumores o focos epilépticos entre otros. Si una fuente está concentrada en una región del cerebro se puede representar como una función cuadrado integrable. En el análisis del **PIE** en este trabajo sólo se consideran fuentes con esta configuración.

En este trabajo se considera al cerebro como un medio conductor, dividido en capas conductoras correspondientes a diferentes regiones de la cabeza como músculos cerebrales, cerebro, líquido intracraneal, cráneo y cuero cabelludo. Con fines prácticos solo se consideran dos capas de la cabeza disjuntas. Sea $\Omega = \bar{\omega} \cup \Omega_2$ que representa a la cabeza, con ω la región interior correspondiente al cerebro con conductividad constante σ_1 , Ω_2 las capas restantes de la cabeza con conductividad constante σ_2 , S_1 la corteza cerebral y S_2 el cuero cabelludo como se muestra en la figura 2.1.

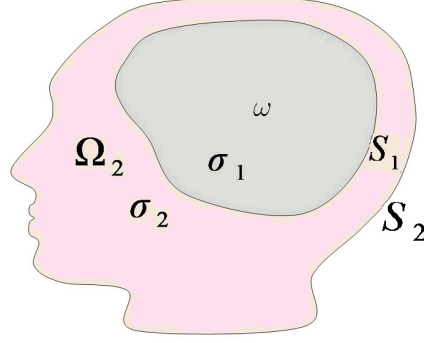


Figura 2.1: Representación de la cabeza como dos medios conductores homogéneos acoplados.

A partir de las ecuaciones de Maxwell se puede encontrar la relación entre los campos electromagnéticos y las corrientes intercerebrales. Una simplificación importante es considerar que se puede aplicar al cerebro la teoría electromagnética casi-estática. Se considera que las corrientes que circulan en el cerebro pueden ser de dos tipos: *ohmicas*, las cuales son generadas por el movimiento de cargas iónicas a través del fluido extracelular y *corrientes impresas* o primarias que son de mayor interés en el estudio del problema inverso, ya que proporcionan información sobre la ubicación espacial de la zona afectada.

Utilizando la notación usual para la densidad de corriente, denotamos por \mathbf{J}_p la densidad volumétrica de las corrientes impresas en ω . Si denotamos por E_1, E_2 los campos eléctricos generados por la actividad bioeléctrica en ω y Ω_2 respectivamente, entonces en la región ω se tiene

$$\mathbf{J}_T^1 = \mathbf{J}_p + \sigma_1 \mathbf{E}_1, \quad (2.1)$$

mientras que en la región Ω_2 sólo se consideran corrientes secundarias, dada la ausencia de fuentes bioeléctricas, por lo tanto

$$\mathbf{J}_T^2 = \sigma_2 \mathbf{E}_2. \quad (2.2)$$

Por la ley de conservación de la carga se cumple la ecuación de continuidad en cada región, es decir

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_T^i + \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (2.3)$$

donde ρ_i representa la densidad de carga eléctrica en cada región.

Dado que en un medio conductor con conductividad σ las cargas se distribuyen muy rápido, la densidad de carga disminuye como

$$\rho \sim e^{\frac{-\sigma}{\epsilon_0} t},$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica. Sobre el cráneo y en otras capas de la cabeza σ_i/ϵ_0 es de orden $1/200$ por este motivo el término $\partial\rho_i/\partial t$ se puede despreciar de la ecuación de continuidad, así

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_T^i = 0, \quad i = 1, 2. \quad (2.4)$$

Del desacoplamiento entre el campo eléctrico y magnético se concluye que $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ (véase [5]). En consecuencia \mathbf{E} puede ser descrito como el gradiente negativo de un potencial escalar u , es decir

$$\mathbf{E}_i = -\nabla u_i, \quad i = 1, 2. \quad (2.5)$$

Sustituyendo (2.5) con $i = 1$ en (2.4) se obtiene

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{J} + \sigma_1 \mathbf{E}_1) &= \nabla \cdot (\mathbf{J} + \sigma_1 (-\nabla u_1)) \\ &= \nabla \cdot \mathbf{J} - \nabla \cdot (\sigma_1 \nabla u_1) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$-\nabla \cdot (\sigma_1 \nabla u_1) = f \quad \text{en } \omega, \quad (2.6)$$

con $f = -\nabla \cdot \mathbf{J}$. En forma análoga, cuando se toma $i = 2$ en (2.5) y se sustituye en (2.4), se obtiene

$$-\nabla \cdot (\sigma_2 \nabla u_2) = 0 \quad \text{en } \Omega_2. \quad (2.7)$$

Como ya se ha mencionado, las regiones ω y Ω_2 se consideran medios con diferente conductividad; debido a las condiciones de continuidad, se deben satisfacer las siguientes condiciones de transmisión en su interfase S_1 :

$$\begin{aligned} u_1 &= u_2 & \text{sobre } S_1, \\ \sigma_1 \frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{n}_1} &= \sigma_2 \frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}_1} & \text{sobre } S_1, \end{aligned} \quad (2.8)$$

en donde \mathbf{n}_1 denota a la normal exterior unitaria a ω sobre S_1 , por lo que $\partial/\partial \mathbf{n}_1$ indica la derivada normal en esa dirección sobre S_1 . La primera condición en (2.8) indica que los potenciales son iguales en dicha interfase y la segunda condición que las corrientes son iguales ahí mismo. Además, se considera que el medio exterior a toda la región Ω , el cual está formado por aire, tiene conductividad nula, por lo que es natural imponer la siguiente condición de frontera

$$\frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}_2} = 0 \quad \text{sobre } S_2, \quad (2.9)$$

en donde \mathbf{n}_2 es la normal exterior unitaria a Ω sobre su frontera S_2 y $\partial/\partial \mathbf{n}_2$ la derivada normal exterior a Ω sobre su frontera S_2 .

El conjunto de ecuaciones (2.6)-(2.9) definen un modelo electrostático de medio continuo, el cual describe el comportamiento de la actividad eléctrica en el cerebro y el cuero cabelludo. Como se puede observar, este modelo de dos capas está descrito por un problema elíptico con valores en la frontera denominado problema de contorno electroencefalográfico (**PCE**).

2.3. Solución débil y clásica del PCE

Es conveniente dar algunas definiciones para el estudio de la existencia y unicidad del **PCE**. Para ello se considera que el dominio Ω es un subconjunto abierto de \mathbb{R}^2 , conexo y acotado, cuya frontera $\partial\Omega$ es Lipschitz-continua.

Espacios de Sobolev

Definición 1. Una función $u(x)$ definida sobre $\Omega \in \mathbb{R}^n$ se dice que pertenece al espacio $L_2(\Omega)$ si

$$\int_{\Omega} |u(x)|^2 dx < \infty,$$

es decir, es integrable en el sentido de Lebesgue.

Definición 2. El espacio de Sobolev de orden m , para $m \geq 0$ denotado por $H^m(\Omega)$, es el completamiento del espacio $C^m(\Omega)$, bajo la norma

$$\|u\|_{2,m} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq m} |D^{\alpha}u|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

donde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ y $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$.

Definición 3. Se dice que una función $v \in L_2(\Omega)$ es la derivada generalizada de orden α de otra función $u \in L_2(\Omega)$ si se satisface:

$$\int u(x) D^{\alpha} \phi(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int v(x) \phi(x) dx, \quad \forall \phi \in C_0^{\infty}(\Omega),$$

donde

$$C_0^{\infty}(\Omega) = \{\phi \in C^{\infty}(\Omega) : \text{sup}(\phi(x)) \subseteq \Omega\}$$

y

$$D^{\alpha} \phi(x) = \frac{\partial^{|\alpha|} \phi(x)}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_n}},$$

con $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Definición 4. Dada $f \in L_2(\omega)$, una función $u \in H^1(\Omega)$ es solución débil del **PCE** si se cumple que

$$\int_{\omega} f v dx = \int_{\omega} \sigma_1 \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega_2} \sigma_2 \nabla u \cdot \nabla v dx, \quad (2.10)$$

para toda $v \in H^1(\Omega)$, donde $\Omega = \bar{\omega} \cup \Omega_2$.

Teorema 1. Existe la solución débil $u \in H^1(\Omega)$ del **PCE** si $f \in L_2(\omega)$ y cumple que

$$\int_{\omega} f dx = 0. \quad (2.11)$$

Además, si

$$\int_{\Omega} u dx = 0, \quad (2.12)$$

entonces la solución es única y

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq C \|f\|_{L_2(\omega)}, \quad (2.13)$$

donde la constante C no depende de f .

Demostración. En $H^1(\Omega)$ un producto interno equivalente al usual viene dado por

$$\langle u, v \rangle_1 = \int_{\Omega} \sigma (u \cdot v + \nabla u \cdot \nabla v) dx.$$

Además considérese en $L_2(\Omega)$ el producto interno definido por

$$\langle w, v \rangle_0 = \int_{\Omega} \sigma w v dx.$$

Así

$$\langle w, v \rangle_0 = \int_{\omega} \sigma_1 w v dx + \int_{\Omega_2} \sigma_2 w v dx.$$

Debido a que la fuente f es nula fuera de ω , se obtiene

$$\langle f, v \rangle_0 = \int_{\omega} \sigma_1 f v dx \quad (2.14)$$

y a partir de la definición 4 para una solución débil del **PCE** obtenemos

$$\langle u, v \rangle_1 - \langle u, v \rangle_0 = \langle f, v \rangle_0, \quad \forall v \in H_1(\Omega). \quad (2.15)$$

Por el teorema de representación de Riez existen operadores lineales y continuos $A, F : H_1(\Omega) \rightarrow H_1(\Omega)$ tales que $\langle f, v \rangle_0 = \langle F(f), v \rangle_1$ y $\langle u, v \rangle_0 = \langle A(u), v \rangle_1$, respectivamente. De manera que la ecuación (2.15) se puede expresar en la forma

$$\langle u, v \rangle_1 - \langle A(u), v \rangle_1 = \langle F(f), v \rangle_1.$$

Por propiedad del producto escalar se tiene

$$\langle u - A(u) - F(f), v \rangle_1 = 0, \quad \forall v \in H_1(\Omega),$$

de donde

$$u - A(u) = F(f).$$

Denotando $T = F(f)$, la alternativa de Fredholm nos dice que la ecuación $u - A(u) = T$ tiene solución si $T \in N(I - A^*)^\perp$, es decir

$$\langle T, y \rangle_1 = 0, \tag{2.16}$$

para toda y solución de la ecuación homogénea $y - A^*(y) = 0$, con A^* el operador adjunto de A . Por otra parte se demostrará que el operador A es autoadjunto.

Por la definición de A se tiene

$$\langle u, v \rangle_0 = \langle A(u), v \rangle_1.$$

De forma análoga para v

$$\langle v, u \rangle_0 = \langle A(v), u \rangle_1.$$

Dado que para funcionales lineales se cumple que

$$\langle A(v), u \rangle_1 = \langle u, A(v) \rangle_1.$$

Entonces

$$\langle A(u), v \rangle_1 = \overline{\langle A(v), u \rangle_1} = \langle u, A(v) \rangle_1,$$

ésto muestra que A es autoadjunto. Así $A = A^*$ y por lo tanto $y - A(y) = 0$.

A continuación se demuestra que $\lambda = 1$ es valor propio de A . Los valores propios de A satisfacen la propiedad

$$Au = \lambda u,$$

considerando el producto interno definido en $H^1(\Omega)$ se tiene

$$\langle Au, v \rangle_1 = \langle \lambda u, v \rangle_1,$$

tomando $\lambda = 1$, se obtiene

$$\langle Au, v \rangle_1 = \langle u, v \rangle_1.$$

Dado que $\langle Au, v \rangle_1 = \langle u, v \rangle_0$, se concluye que $\lambda = 1$ es valor propio de A . Las constantes son funciones propias del operador A asociadas al valor propio $\lambda = 1$, ya que

$$\langle A(1), v \rangle_1 - \langle 1, v \rangle_1 = \langle 1, v \rangle_0 - \langle 1, v \rangle_1 = 0.$$

Por lo tanto las soluciones de la ecuación homogénea $y - A(y) = 0$ son las funciones constantes. De (2.16) se concluye que la condición necesaria y suficiente de existencia de solución débil del **PCE** es

$$\langle T, 1 \rangle_1 = 0, \quad (2.17)$$

lo cual implica en (2.14) que

$$\langle f, 1 \rangle_0 = \int_{\omega} \sigma_1 f \, dx = 0.$$

Consideremos el subespacio $\mathcal{V}(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} u \, dx = 0\}$ con producto escalar

$$\langle u, v \rangle_3 = \int_{\omega} \sigma_1 \nabla u_1 \cdot \nabla v_1 \, dx + \int_{\Omega_2} \sigma_2 \nabla u_2 \cdot \nabla v_2 \, dx.$$

Si u es la solución débil del PCE y pertenece a $\mathcal{V}(\Omega)$, entonces existen constantes positivas C_1, C_2 y C_3 tales que

$$\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C_1 \langle u, u \rangle_3 \leq C_2 \langle u, u \rangle_1 \leq C_2 C_3 \langle f, u \rangle_{L_2(\Omega)}.$$

Por la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \|u\|_{L_2(\Omega)} \|f\|_{L_2(\Omega)} \leq C \|u\|_{H^1(\Omega)} \|f\|_{L_2(\Omega)},$$

donde las constantes C_1, C_2, C_3, C son positivas y no dependen de f y u , entonces

$$\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \|f\|_{L_2(\Omega)}.$$

Por consiguiente, en $H^1(\Omega)$ existe la única función u que satisface (2.10).

Solución Clásica del PCE

Una **solución clásica**- o solución fuerte- del problema **PCE** es una función $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\bar{\Omega})$ que satisface la ecuación y la condición de frontera que describe el PCE en sentido usual. Por otra parte, las condiciones para que la solución débil u del PCE sea una solución clásica del PCE es que $\partial\Omega \in C^3$ y que $f \in H^2(\Omega)$ (ver [4]).

2.4. Formulación del problema directo y el problema inverso electroencefalográfico

El conjunto de ecuaciones (2.6)-(2.9) corresponden al problema elíptico con valores en la frontera denominado problema de contorno electroencefalográfico

(PCE).

Consideremos los siguientes espacios de funciones:

$$\mathcal{U} = \{f \in L_2(\omega) : \int_{\omega} f d\omega = 0\}, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{V} = \{u \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} u d\Omega = 0\}, \quad (2.19)$$

$$\mathcal{W} = \{v \in L_2(\Gamma) : \int_{\Gamma} v d\Gamma = 0\}. \quad (2.20)$$

El modelo definido por las ecuaciones (2.6)-(2.9) también se puede escribir de manera simplificada como un problema elíptico con coeficientes variables (conductividad constante por regiones), de la siguiente manera:

Ecuación de estado (EE). Dado $f \in \mathcal{U}$, encontrar $u \in \mathcal{V}$ tal que

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla u) = f|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma, \quad (2.22)$$

en donde Γ denota la frontera exterior $\partial\Omega$. Como ya sabemos, $\Omega = \bar{\omega} \cup \Omega_2$ y la conductividad σ toma el valor constante σ_1 en el dominio interior ω y σ_2 en el dominio anular Ω_2 , además \mathbf{n} es la normal exterior unitaria a Ω sobre su frontera Γ . Obsérvese que en esta formulación no es necesario incluir las condiciones de transmisión (2.8), pues éstas ya están incluidas de manera implícita en esta nueva formulación del problema.

Nota. De ahora en adelante nos referiremos al modelo simplificado (2.21)-(2.22) en lugar del PCE definido por las ecuaciones (2.6)-(2.9).

Denotando por \hat{v} las mediciones obtenidas por el EEG, nos enfocaremos en el estudio de dos problemas:

Problema directo: Dado $f \in \mathcal{U}$ encontrar $u|_{\Gamma}$, en donde $u \in \mathcal{V}$ satisface la EE. Es decir, cada fuente definida sobre la región interior ω tiene un efecto directo en el valor potencial eléctrico sobre la frontera exterior Γ . Esta acción se puede definir matemáticamente mediante el siguiente operador

$$K : \mathcal{U} \mapsto \mathcal{W}, \quad K f = u|_{\Gamma}, \quad (2.23)$$

en donde $u \in \mathcal{V}$ es la solución de la EE (2.21)-(2.22) cuando se impone la fuente f .

Por el teorema 1, sabemos que la ecuación de estado EE (equivalente al PCE) tiene una solución débil única. Además, por la desigualdad (2.13) la relación entre f y u define el operador continuo $T : \mathcal{U} \mapsto \mathcal{V}$, con $T(f) = u$. Por lo tanto, el

operador K es la composición de este operador continuo con el operador de traza, $tr(u) = u_{\Gamma}$. Es decir, $K = tr \circ T$ y, por lo tanto el operador K define un operador lineal compacto, el cual es continuo también.

En conclusión, el problema directo, expresado en forma matemática, consiste en la evaluación directa

$$\text{Dado } f \in \mathcal{U}, \text{ encontrar } u|_{\Gamma} = K f,$$

la cual involucra la solución de la ecuación de estado (2.21) y (2.22) y produce una solución única u que se obtiene de manera estable por la continuidad del operador T y el operador de traza. Es decir, pequeñas perturbaciones de f producen pequeñas variaciones de u y por consiguiente de su traza sobre Γ , u_{Γ} .

Problema inverso electroencefalográfico: Este problema se puede describir, basado en el modelo anterior, como se indica a continuación. Dada \hat{v} en Γ , encontrar la fuente $f \in \mathcal{U}$ de manera que la solución $u \in \mathcal{V}$ sea tal que $u|_{\Gamma} = \hat{v}$.

Es decir, dado el potencial eléctrico \hat{v} en la frontera exterior, se trata de determinar la fuente eléctrica (densidad de corriente) en la región interior ω que da lugar a dicha actividad eléctrica en la frontera. Utilizando el operador K , el problema matemático asociado se puede plantear de la siguiente manera:

Dado $\hat{v} \in \mathcal{W}$, calcular $f \in \mathcal{U}$, tal que

$$K f = \hat{v}. \tag{2.24}$$

Es decir, ahora hay que resolver una ecuación operacional para encontrar la solución f , a diferencia del problema directo en donde simplemente hay que realizar una evaluación de K en f .

El problema inverso (2.24) es más complicado debido que ahora aparecen algunas dificultades fundamentales:

1. Puede que este problema no tenga solución, pues no necesariamente cualquier potencial eléctrico \hat{v} dado sobre Γ es generado por una fuente $f \in L_2(\omega)$, a menos que \hat{v} se encuentre en el espacio imagen del operador K .
2. Si $\hat{v} \in Im(K)$, el problema inverso $K f = \hat{v}$ está sobredeterminado, ya que la solución de la ecuación de estado debe satisfacer dos condiciones de frontera: la condición $\sigma \partial u / \partial \mathbf{n} = 0$ y la condición $u|_{\Gamma} = \hat{v}$.
3. El operador lineal K , al ser compacto, es continuo pero no tiene inversa continua, por lo que no es posible resolver directamente la ecuación operacional de manera estable. Por lo tanto, una perturbación de \hat{v} puede dar origen a una ‘solución’ muy alejada de la solución original.

Es decir el problema inverso es un problema mal planteado en el sentido de Hadamard y si éste tiene solución, no es posible calcularla en forma estable por métodos tradicionales. Por estas razones es importante redefinir el problema de manera que se tenga una solución única y después diseñar algoritmos que permitan encontrar dicha solución de manera estable. Un primer paso es asegurar que ‘existe’ una solución siempre y cuando la medición \hat{v} en Γ sea ‘razonable’. El siguiente teorema de densidad nos permite asegurar que es posible encontrar una muy buena aproximación a una solución $f \in \mathcal{U}$ si los datos \hat{v} se encuentran en el espacio \mathcal{W} .

Teorema 2. $\text{Im}(K)$ es denso en \mathcal{W} bajo la norma usual en $L_2(\Gamma)$.

Demostración. Es claro que $\text{Im}(K)$ es un subespacio vectorial de \mathcal{W} , pues K es lineal y $K(0) = 0$. Para demostrar que $\text{Im}(K)$ es denso en \mathcal{W} basta verificar que

Si existe $\hat{v} \in \mathcal{W}$ tal que

$$\langle Kf, \hat{v} \rangle_{L_2(\Gamma)} = 0 \quad \text{para toda } f \in \mathcal{U}, \quad (2.25)$$

entonces $\hat{v} = 0$.

Esta propiedad se puede interpretar como que el ortogonal a $\overline{\text{Im}(K)}$ es el espacio vectorial nulo. Para demostrarlo, sea $u|_{\Gamma} = Kf$ en donde u es solución de la **ecuación de estado**

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla u) = f|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \quad (2.26)$$

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma, \quad (2.27)$$

y sea v solución de la **ecuación adjunta**

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla v) = 0 \quad \text{en } \Omega, \quad (2.28)$$

$$\sigma \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} = \hat{v} \quad \text{sobre } \Gamma. \quad (2.29)$$

Multiplicando por u la ecuación (2.28) e integrando sobre Ω , se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\sigma \nabla v) u \, d\Omega = \int_{\Omega} \sigma \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega - \int_{\Gamma} \sigma \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} u \, d\Gamma \\ &= \int_{\Omega} \sigma \nabla v \cdot \nabla u \, d\Omega - \int_{\Gamma} \hat{v} u \, d\Gamma \\ &= \int_{\omega} f v \, d\omega - \int_{\Gamma} \hat{v} u \, d\Gamma \\ &= \int_{\omega} f v \, d\omega - \langle \hat{v}, Kf \rangle_{L_2(\Gamma)} \quad \text{para toda } f \in \mathcal{U}, \quad (2.30) \end{aligned}$$

en donde en la penúltima igualdad se ha usado la formulación variacional de las ecuaciones de estado (2.26)–(2.27) con v como función de prueba, i.e.

$$\int_{\Omega} \sigma \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega = \int_{\omega} f v \, d\omega \quad \text{para toda } v \in H^1(\Omega). \quad (2.31)$$

Utilizando (2.25) y (2.30), se obtiene que $v = 0$ sobre ω , siendo v solución de (2.28)–(2.29). Por lo tanto, utilizando el teorema de unicidad de Mizohata [11] se obtiene $v = 0$ en todo Ω . Se concluye que para que el potencial v , solución de (2.28)–(2.29), sea cero en todo Ω se debe satisfacer que $\hat{v} = 0$ sobre Γ , lo cual demuestra el teorema.

Nota. Introduciendo el operador adjunto $K^* : \mathcal{W} \rightarrow \mathcal{U}$, definido por $K^* \hat{v} = v|_{\omega}$, en donde v es la solución de (2.28)–(2.29) con promedio cero, la última igualdad en (2.30) se puede escribir de la siguiente manera

$$\langle Kf, \hat{v} \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle f, K^* \hat{v} \rangle_{L_2(\omega)}. \quad (2.32)$$

Capítulo 3

Método variacional de penalización para resolver el problema inverso electroencefalográfico (PIE)

En el capítulo anterior hemos demostrado que el PIE es un problema mal planteado en el sentido de Hadamard, y que debe reformularse para poder encontrar soluciones, aún y cuando formalmente no la tenga, es decir a pesar de que el dato \hat{v} no se encuentre en $Im(K)$. Asimismo, se hace indispensable obtener reformulaciones del problema que permiten calcular aproximaciones estables a las posibles soluciones. Gracias al resultado de densidad, introducido en el teorema 2, basta con suponer que $\hat{v} \in L_2(\Gamma)$ para aspirar a formular modelos que nos permitan obtener una solución del PIE. Una forma de reformular el problema inverso es considerarlo como un problema de controlabilidad, en donde el control es f y actúa en el dominio interior ω :

Dado $\hat{v} \in L_2(\Gamma)$, encontrar $f \in \mathcal{U}$ que minimice el siguiente funcional de costo

$$J(f) = \frac{1}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 = \frac{1}{2} \int_{\omega} |f|^2 d\omega \quad (3.1)$$

y que satisface la restricción $Kf = \hat{v}$.

Recordemos que es posible que la restricción no se satisfaga exactamente. Sin embargo, desde el punto de vista computacional, es suficiente con obtener una buena solución aproximada. Partiendo de este modelo de optimización es posible explorar varios enfoques. En este trabajo mencionaremos tres, el modelo con regularización/penalización, el modelo con multiplicadores de Lagrange y el modelo de Lagrangiano aumentado, este último es un modelo de optimización que se puede pensar como una combinación de los primeros dos.

3.1. Formulación del problema penalizado (regularizado)

Este enfoque fue abordado por primera vez en 2015 en la tesis [7]. Por esta razón se presentará este método de manera muy resumida y sólo se repetirá aquel material que es esencial para el desarrollo de este trabajo y para entender mejor los métodos de multiplicadores de Lagrange y de Lagrangiano aumentado. También se incluirán algunos resultados que no aparecen en aquel trabajo.

Aprovechando el resultado de densidad (teorema 2), podemos alcanzar una de las soluciones aproximadas simplemente agregando a (3.1) una penalización de la norma de la diferencia $Kf - \hat{v}$, obteniendo un nuevo funcional cuadrático:

$$J_k(f) = \frac{1}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 + \frac{k}{2} \|Kf - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}^2 = \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} (u|_{\Gamma} - \hat{v})^2 d\Gamma, \quad (3.2)$$

en donde $k > 0$ es el parámetro de penalización y generalmente toma valores grandes: a mayor k más se penaliza la diferencia $Kf - \hat{v}$. En (3.2) $u|_{\Gamma} = Kf$ denota la restricción de la solución $u \in H^1(\Omega)$ de la ecuación de estado con fuente f . Un poco más adelante daremos argumentos que justifican que el problema exacto de controlabilidad (3.1) puede aproximarse mediante los siguientes problemas aproximados del tipo de penalización:

$$\begin{cases} f_k \in \mathcal{U}, \\ J_k(f_k) \leq J_k(f), \quad \forall f \in \mathcal{U}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Utilizando argumentos de continuidad y de convexidad fuerte se puede garantizar que (3.3) tiene un único mínimo f_k (ver, por ejemplo [8]), el cual está caracterizado por

$$DJ_k(f_k) = 0,$$

en donde DJ_k denota la derivada del funcional J_k . La evaluación de esta derivada en cualquier $f \in \mathcal{U}$, se puede obtener mediante perturbaciones y cálculo variacional (ver [7] para los detalles). También pueden utilizarse argumentos formales en términos de los operadores lineales K y su operador adjunto K^* , para obtener la expresión

$$DJ_k(f) = f + k K^* (Kf - \hat{v}),$$

de donde se observa que primero se debe calcular $Kf = u|_{\Gamma}$, siendo u solución de la **ecuación de estado** con fuente f :

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla u) = f|_{\omega}, \quad \text{en } \Omega, \quad (3.4)$$

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma. \quad (3.5)$$

Después se calcula $p|_\omega = K^*(u|_\Gamma - \hat{v})$, en donde p es la solución de la **ecuación adjunta** con condición de frontera $\sigma \partial p / \partial \mathbf{n} = u|_\Gamma - \hat{v}$:

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla p) = 0, \quad \text{en } \Omega, \quad (3.6)$$

$$\sigma \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = u|_\Gamma - \hat{v}, \quad \text{sobre } \Gamma. \quad (3.7)$$

Al final, se obtiene

$$DJ_k(f) = (f + kp)|_\omega. \quad (3.8)$$

Volviendo al estudio de las propiedades del problema variacional (3.3), podemos observar que gracias a la propiedad de densidad, demostrada en el teorema 2, para cada potencial eléctrico $\hat{v} \in \mathcal{W}$ y $\epsilon > 0$ existe $f_\epsilon \in \mathcal{U}$ tal que

$$\|Kf_\epsilon - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)} \leq \epsilon$$

y debido a que $J_k(f_k) \leq J_k(f_\epsilon)$, se sigue que

$$\|Kf_k - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}^2 \leq \frac{1}{k} \|f_\epsilon\|_{L_2(\omega)}^2 + k\epsilon^2.$$

Escogiendo $\epsilon = 1/k$, se obtiene

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Kf_k = \hat{v} \quad \text{en } L_2(\Gamma). \quad (3.9)$$

Podemos decir más cuando $\hat{v} \in \text{Im}(K)$, es decir $\hat{v} = Kf$ para algún $f \in \mathcal{U}$, ya que en este caso

$$\|f_k\|_{L_2(\omega)}^2 + k \|Kf_k - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}^2 \leq \|f\|_{L_2(\omega)}^2,$$

así que

$$\|f_k\|_{L_2(\omega)} \leq \|f\|_{L_2(\omega)} \quad \text{y} \quad \|Kf_k - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)} \leq \frac{1}{\sqrt{k}} \|f\|_{L_2(\omega)}, \quad (3.10)$$

y por un argumento similar a uno en [6], se puede probar que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f_k = f \quad \text{en } L_2(\omega). \quad (3.11)$$

Las propiedades (3.9), (3.10) y (3.11), justifican que se considere a (3.3) como problema aproximado de minimización del funcional (3.1).

La formulación variacional por medio de penalización del PIE permite obtener soluciones estables y convergentes, cuando se utiliza apropiadamente, ya que el procedimiento de penalización de la restricción también se puede considerar como un procedimiento de regularización de Tijonov, en donde el parámetro de regularización es justamente $\alpha = 1/k$. Es decir el problema (3.3) es equivalente a minimizar el siguiente funcional, en donde $\alpha > 0$ es pequeño:

$$J_\alpha(f) = \frac{\alpha}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 + \frac{1}{2} \|Kf - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}^2. \quad (3.12)$$

3.2. Condiciones de optimalidad y el método de gradiente conjugado

La solución de norma mínima del funcional cuadrático y convexo (3.2) se calcula utilizando un método iterativo de descenso de tipo gradiente, puesto que tenemos la forma de evaluar su derivada. Antes de proponer un algoritmo, vale la pena destacar las propiedades de optimalidad del mínimo f_k .

Condiciones de optimalidad. Sea f_k la única solución del problema (3.3), y denotemos por u_k y p_k la solución correspondiente a la ecuación de estado y la ecuación adjunta, respectivamente. Entonces la tripleta (f_k, u_k, p_k) está caracterizada por las siguientes relaciones (sistema de optimalidad):

$$\left\{ \begin{array}{l} f_k + k p_k = 0 \quad \text{en } \omega, \\ -\nabla \cdot (\sigma \nabla u_k) = f_k|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial u_k}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \\ -\nabla \cdot (\sigma \nabla p_k) = 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial p_k}{\partial \mathbf{n}} = u_k|_{\Gamma} - \hat{v} \quad \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right. \quad (3.13)$$

Estas condiciones relacionan f_k , u_k y p_k en forma fuertemente implícita. Un método iterativo para resolver el problema de minimización (3.3) equivale a desacoplar iterativamente este sistema de optimalidad.

El problema de minimización (3.3) es un problema bien planteado en espacio de control \mathcal{U} , el cual es un espacio de Hilbert con producto interno $\langle f_1, f_2 \rangle_{L_2(\omega)} = \int_{\omega} f_1 f_2 d\omega$. Es, por lo tanto, un caso particular de los problemas de minimización en espacios de Hilbert cuya solución de gradiente conjugado se trata en, por ejemplo ([8],[16],[17]). Por lo tanto la solución de (3.3) se puede obtener por medio del siguiente algoritmo de gradiente conjugado (consultar [7] para más detalles):

Algoritmo de gradiente conjugado (GC)

Inicialización

1. Dada $f^0 \in \mathcal{U}$, resolver

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla u^0) &= f^0|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial u^0}{\partial \mathbf{n}} &= 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

2. Luego resolver

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla p^0) &= 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial p^0}{\partial \mathbf{n}} &= (u^0|_{\Gamma} - \hat{v}) \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

3. Evaluar $g^0 = f^0 + k p^0|_\omega$.

4. Hacer $d^0 = -g^0$.

Descenso

Para $n \geq 0$, suponiendo conocidos f^n, g^n, d^n , encontrar $f^{n+1}, g^{n+1}, d^{n+1}$, realizando lo siguiente:

5. Resolver para \bar{u}^n

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{u}^n) &= d^n|_\omega \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{u}^n}{\partial \mathbf{n}} &= 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

6. Luego resolver para \bar{p}^n

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{p}^n) &= 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{p}^n}{\partial \mathbf{n}} &= \bar{u}^n|_\Gamma \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

7. Evaluar $\bar{g}^n = d^n + k \bar{p}^n|_\omega$.

8. Calcular $\delta_n = -\frac{\langle g^n, d^n \rangle_{L_2(\omega)}}{\langle \bar{g}^n, d^n \rangle_{L_2(\omega)}}$.

9. Evaluar $f^{n+1} = f^n + \delta_n d^n$.

10. Evaluar $g^{n+1} = g^n + \delta_n \bar{g}^n$.

Prueba de convergencia y nueva dirección conjugada

Si $\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\omega)} \leq \varepsilon \langle g^0, g^0 \rangle_{L_2(\omega)}$, parar y tomar $f_k = f^{n+1}$.
En caso contrario, realizar lo siguiente:

11. Calcular $\beta_n = \frac{\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\omega)}}{\langle g^n, g^n \rangle_{L_2(\omega)}}$.

12. Evaluar $d^{n+1} = -g^{n+1} + \beta_n d^n$.

13. Hacer $n = n + 1$ y volver al paso 5.

Un aspecto crucial en el algoritmo, es el cálculo del paso δ_n en cada iteración (paso 8), el cual es una aproximación al mínimo de la función unidimensional convexa

$$\phi_k(\delta) = J_k(f^n + \delta d^n). \quad (3.14)$$

Se puede utilizar un método de búsqueda de línea, pero es mucho mejor calcular el mínimo δ_n de esta función de manera exacta, ya que con un poco de esfuerzo se puede demostrar que

$$\phi'_k(\delta_k) = \langle DJ_k(f^n + \delta_n d^n), d^n \rangle_{L_2(\omega)} = 0, \quad (3.15)$$

en donde $DJ_k(f^n + \delta_n d^n) = DJ_k(f^n) + \delta_n \bar{g}^n$ con \bar{g}^n como se indica en el paso 7. Se sustituye esta expresión en (3.15) y se despeja δ_n , obteniendo la expresión en el paso 8. Además, también se obtiene la fórmula en el paso 10 para actualizar el gradiente.

El mayor costo computacional de este algoritmo está asociado al cálculo de las soluciones de los problemas elípticos en los pasos 5 y 6, en cada iteración. Estos problemas son problemas elípticos con condiciones de frontera Neumann del tipo

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla v) = f|_\omega \quad \text{en } \Omega, \quad (3.16)$$

$$\sigma \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} = g \quad \text{sobre } \Gamma, \quad (3.17)$$

cuya formulación variacional es

$$\int_{\Omega} \sigma \nabla v \cdot \nabla w \, d\Omega = \int_{\omega} f w \, d\omega + \int_{\Gamma} g v \, d\Gamma, \quad \forall w \in H^1(\Omega), \quad (3.18)$$

y tiene solución única en el espacio cociente

$$H^1(\Omega)/\mathbb{R} = \left\{ v \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} v \, d\Omega = 0 \right\},$$

si $f \in L_2(\omega)$ y $g \in L_2(\Gamma)$, y además se satisface la condición de compatibilidad (se obtiene de (3.18) con $w = 1$)

$$\int_{\omega} f \, d\omega + \int_{\Gamma} g \, d\Gamma = 0. \quad (3.19)$$

Por lo tanto, con esas condiciones, la solución es única salvo constantes y si v es una solución, entonces $v - \bar{v}$, donde $\bar{v} = (1/|\Omega|) \int_{\Omega} v \, d\Omega$, es la solución en $H^1(\Omega)/\mathbb{R}$.

Por otro lado, cuando alguna de las funciones f y g en (3.19) es cero, como ocurre con los problemas que aparecen en el algoritmo de GC, entonces la integral de la otra función debe ser cero. Por lo tanto, las funciones f^n , d^n , g^n , en el algoritmo de gradiente conjugado, deben satisfacer que su promedio sobre el dominio ω sea cero.

3.3. Discretización de los problemas elípticos: método de elementos finitos

La realización computacional del algoritmo de gradiente conjugado requiere de la solución de dos problemas elípticos en la inicialización (pasos 1 y 2) y otros dos en cada iteración (pasos 5 y 6). La solución numérica de estos problemas es estándar y puede obtenerse por muchos métodos de aproximación. En este trabajo nosotros preferimos el método de los elementos finitos, ya que este método de

aproximación está basado en métodos variacionales y, por lo tanto, es consistente y está en sintonía con el hecho de que el problema inverso electroencefalográfico ha sido formulado con un modelo variacional, que incluye la minimización de un funcional cuadrático convexo.

Consideramos, por lo tanto, el problema elíptico modelo (3.16)–(3.17), con formulación variacional (3.18). Con el objeto de aproximar el espacio de funciones $V = H^1(\Omega)$, primero realizamos una triangulación en elementos finitos, \mathcal{T}_h , del dominio $\bar{\Omega}$ la cual satisface las siguientes propiedades clásicas: (i) \mathcal{T}_h es una colección finita de triángulos cerrados T contenidos en $\bar{\Omega}$, donde h denota la longitud de la mayor arista de todos ellos; (ii) $\bar{\Omega}_h = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$ es una aproximación de la región $\bar{\Omega}$; (iii) Si $T, T' \in \mathcal{T}_h$ con $T \neq T'$, se debe cumplir ya sea $T \cap T' = \emptyset$ o bien que T y T' tienen un vértice o una arista en común. La figura 3.1 muestra una región y una triangulación de ella.

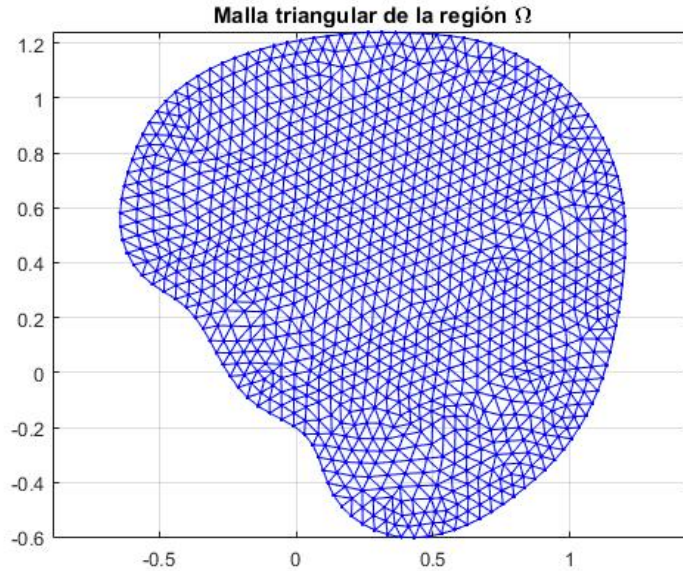


Figura 3.1: malla irregular i2 con 2192 elementos y 1155 nodos.

El espacio lineal V se aproxima mediante el siguiente subespacio de dimensión finita

$$V_h = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}_h) : v_h|_T \in \mathbb{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_h\}, \quad (3.20)$$

en donde $C^0(\bar{\Omega}_h)$ denota al espacio de funciones continuas definidas sobre la región $\bar{\Omega}_h$ y \mathbb{P}_1 es el conjunto de polinomios de grado ≤ 1 . Es decir las funciones en $V = H^1(\Omega)$ se aproximan mediante funciones continuas que restringidas a cada triángulo son polinomios lineales (i.e polinomios lineales por tramos). Para mayores detalles consultar [9] y [10].

Por lo tanto el problema variacional (3.21) se puede aproximar mediante la siguiente formulación variacional discreta.

Encontrar $v_h \in V_h$, tal que

$$\int_{\Omega_h} \sigma \nabla v_h \cdot \nabla w_h \, d\Omega = \int_{\omega_h} f_h w_h \, d\omega + \int_{\Gamma_h} g_h w_h \, d\Gamma, \quad \forall w_h \in V_h. \quad (3.21)$$

En esta formulación f_h es la aproximación lineal por tramos de f en ω_h y g_h es la aproximación lineal por tramos de g sobre Γ_h . Cabe destacar que, con el objeto de tener una formulación discreta consistente, es conveniente que la aproximación ω_h del subdominio ω se la unión de un subconjunto de triángulos de \mathcal{T}_h , de otra manera su frontera no estaría formada por aristas de triángulos y se requeriría de métodos más elaborados para poder encontrar soluciones adecuadas.

Por último, las integrales en el lado izquierdo de (3.21) se pueden calcular en forma exacta, ya que $\int_{\Omega_h} = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T$, y en cada triángulo T las funciones son polinomios de primer grado. Por otro lado, las integrales en el lado derecho, se pueden aproximar por medio de la regla del trapecio, que es del mismo orden que el método de elementos finitos utilizado, y por lo tanto no degradan la aproximación. Los varios problemas elípticos que ocurren en el algoritmo de gradiente conjugado, al aproximarse, dan lugar a sistemas de ecuaciones lineales con la misma matriz asociada, y difieren solamente de sus lados derechos.

Sin embargo, a pesar de que la matriz común es simétrica y semidefinida positiva, es singular. Esta singularidad está asociada a que la solución de esos problemas elípticos es única salvo constantes, como ya se mencionó en la subsección anterior. Por lo tanto, basta con poner un valor de referencia de la solución (digamos cero) en algún punto de la malla y eliminar la ecuación correspondiente. Si el punto escogido se encuentra en la frontera Γ_h , esta operación tiene el mismo efecto que si se impone una condición de frontera Dirichlet en ese punto de la frontera, obteniendo un subsistema de ecuaciones con matriz no singular. Los sistemas lineales así obtenidos serán no singulares, simétricos y definidos positivos, y se resuelven mediante el método de Choleski.

3.4. Resultados numéricos

En esta sección se muestran los resultados numéricos obtenidos al aplicar el método de gradiente conjugado al problema de detección de la fuente. En los problemas que se abordan a continuación solo consideramos el caso en que la fuente buscada actúa en todo el dominio Ω , es decir, $\omega = \Omega$. El caso más general cuando ω es un subdominio propio de Ω es más complicado, ya que requiere un tratamiento más cuidadoso de los pasos 3 y 7 en el algoritmo de gradiente conjugado, debido a que se requiere no solo restringir las funciones a ω sino proyectar sobre

el subespacio de funciones armónicas \mathcal{U}_a . Este procedimiento no es computacionalmente trivial y se está realizando en un trabajo posdoctoral en colaboración con investigadores de la BUAP.

Ejemplo 1. Consideremos la fuente $f(x, y) = x^2 - y^2$ definida en un dominio circular de radio $R = 1$, con el fin de aplicar el algoritmo desarrollado en la sección 2.2, el valor de la conductividad está dada por $\sigma = 3$. La solución analítica del potencial para este problema es:

$$u(x, y) = \frac{1}{6\sigma}(x^2 - y^2) - \frac{1}{12\sigma}(x^2 + y^2)(x^2 - y^2).$$

El algoritmo de gradiente conjugado descrito en la sección 2.2 fue programado en *Matlab*, se utilizaron tres mallas triangulares diferentes generadas con el toolbox *pdetool*. Para generarlas se utilizó una malla gruesa que llamaremos m1 con 258 elementos y 146 nodos; después se realizaron dos refinamientos regulares sucesivos para obtener las mallas m2 y m3, la primera con 1032 elementos y 549 nodos, y la segunda con 4046 elementos y 2097 nodos respectivamente. En la figura 3.2 se muestra la malla m1 de la región circular.

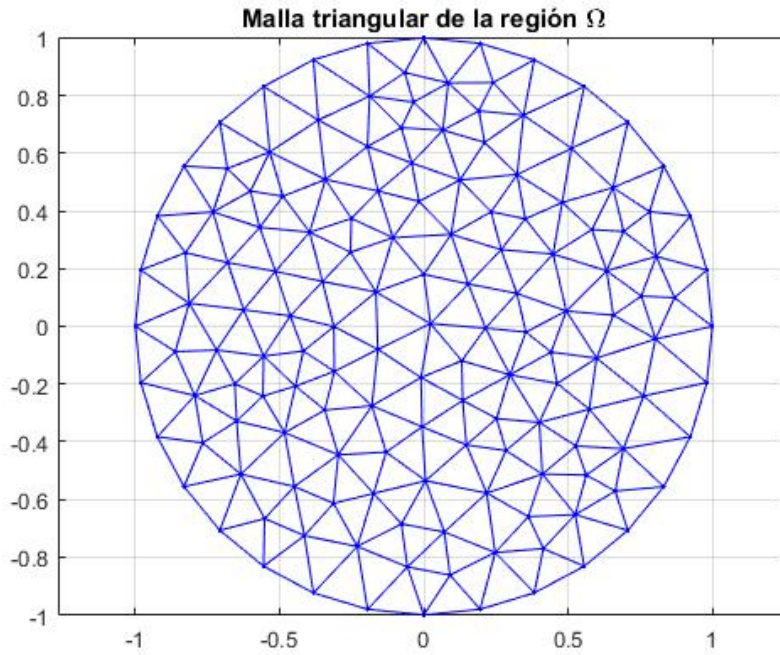


Figura 3.2: malla m1 con 258 elementos y 146 nodos.

En el cuadro 3.1 se muestran los errores relativos obtenidos entre las soluciones numéricas y las exactas, correspondientes al potencial y su valor sobre la frontera además de la fuente, para las distintas mallas. Los errores relativos están dados por $Er(u_h^n, u) = \frac{\|u_h^n - u\|_{L_2(\Omega)}}{\|u\|_{L_2(\Omega)}}$, $Er(u_h^n|_{\Gamma}, \hat{v}) = \frac{\|u_h^n|_{\Gamma} - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}}{\|\hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}}$,

$Er(f_h^n, f) = \frac{\|f_h^n - f\|_{L_2(\Omega)}}{\|f\|_{L_2(\Omega)}}$, en donde el subíndice h indica la solución discreta y el superíndice n indica la iteración. El valor del parámetro de penalización es $k = 10^6$, n representa el número de iteraciones, como criterio de paro se consideró una tolerancia de $\epsilon = 10^{-6}$. El cuadro 3.1 muestra que conforme se refina la malla el error relativo disminuye, lo cual demuestra convergencia respecto al parámetro de discretización. Además, el número de iteraciones es muy pequeño, y en las mallas refinadas se alcanza convergencia en solamente una iteración.

	mallla m1	mallla m2	mallla m3
n	3	1	1
$Er(u_h^n, u)$	3.8841e-03	1.1891e-03	3.3491e-04
$Er(u_h^n _{\Gamma}, \hat{v})$	3.4110e-03	1.1626e-03	3.6006e-04
$Er(f_h^n, f)$	5.8987e-03	1.1687e-03	2.2396e-04

Cuadro 3.1: Errores relativos para las distintas mallas m1, m2, m3.

Las representaciones gráficas del potencial exacto y el recuperado, así como la fuente exacta y la recuperada están exhibidas en las figuras 3.3 y 3.4. Se presentan solamente las gráficas con los resultados en la malla más gruesa, m1, pues de acuerdo al cuadro 3.1 con esta malla ya se obtienen resultados muy buenos.

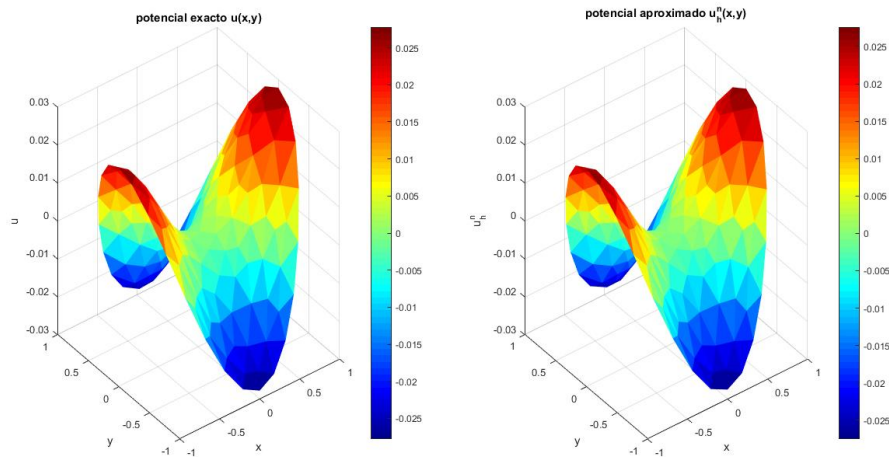


Figura 3.3: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica u_h^n en la región circular con malla m1.

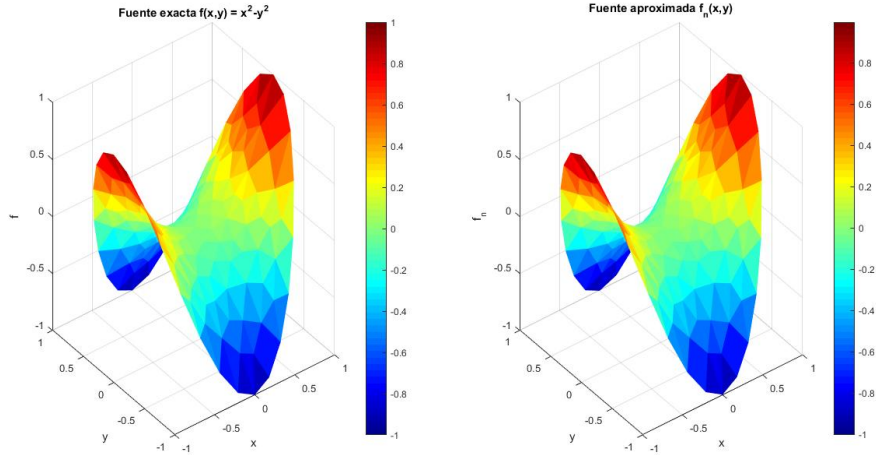


Figura 3.4: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica f_h^n en la región circular con malla m1.

Resultados cuando los datos presentan perturbaciones (ruido)

Para introducir ruido en los datos se generan valores aleatorios de una distribución normal $N(\mu, \sigma)$ mediante la función *random* de MATLAB con media $\mu = 0$ y desviación estándar $\sigma(\delta) = \delta \cdot \max|\hat{v}|$, donde δ representa el error en la medición.

La generación de los datos \hat{v} del potencial en la frontera se obtienen a partir de la solución exacta u y se agrega ruido mediante

$$\hat{v}_\delta = \hat{v} + \eta$$

donde

$$\eta = \text{random}('Normal', \mu, \sigma(\delta), 1, nt),$$

es un vector de números aleatorios de tamaño nt (total de nodos sobre la frontera Γ) *distribuidos normalmente*.

Ejemplo 2. Se resuelve numéricamente el mismo problema, considerado en el ejemplo 1, sobre la misma región circular con la malla m2, pero en esta ocasión con datos perturbados \hat{v}_δ para distintos valores de $\delta = 0, 0.05, 0.1, 0.15$. Con el objetivo de comparar la desviación relativa de los datos perturbados respecto de los datos exactos, se introduce el error relativo $Er(\hat{v}_\delta, \hat{v}) = \frac{\|\hat{v} - \hat{v}_\delta\|}{\|\hat{v}\|}$. Para el caso con $\delta = 0$, se aplicó el algoritmo de gradiente conjugado con un parámetro de penalización $k = 10^6$ y una tolerancia de $\epsilon = 10^{-6}$, para los demás casos, se utilizó $k = 10^3$ y $\epsilon = 10^{-4}$. Como se observa en el cuadro 3.2, los errores relativos de las soluciones numéricas obtenidas son prácticamente del mismo orden que la perturbación introducida en los datos para diferentes valores de δ , esto demuestra la estabilidad del método de penalización respecto de perturbaciones en los datos.

δ	0	0.05	0.1	0.15
$Er(\hat{v}_\delta, \hat{v})$	0	8.2190e-02	1.2248e-01	2.1080e-01
n	1	4	4	5
$Er(u_h^{n,\delta}, u)$	1.189134e-03	9.2187e-02	8.5083e-02	1.2125e-01
$Er(u_h^{n,\delta} _\Gamma, \hat{v})$	1.1626e-03	8.781684e-02	8.135801e-02	1.172337e-01
$Er(f_h^{n,\delta}, f)$	1.168730e-03	1.1023e-01	1.1803e-01	2.0812e-01

Cuadro 3.2: Errores relativos para la malla m2 para distintos valores de δ .

Para ilustrar el comportamiento de las aproximaciones numéricas cuando hay perturbaciones en los datos, en la figura 3.5 se muestra la gráfica del potencial exacto u junto con los potenciales recuperados sobre la frontera del dominio circular Γ . Como se observa no hay una diferencia significativa entre el potencial de frontera exacto u y las aproximaciones numéricas. Por lo tanto, el método de penalización reconstruye de forma eficaz el potencial sobre la frontera.

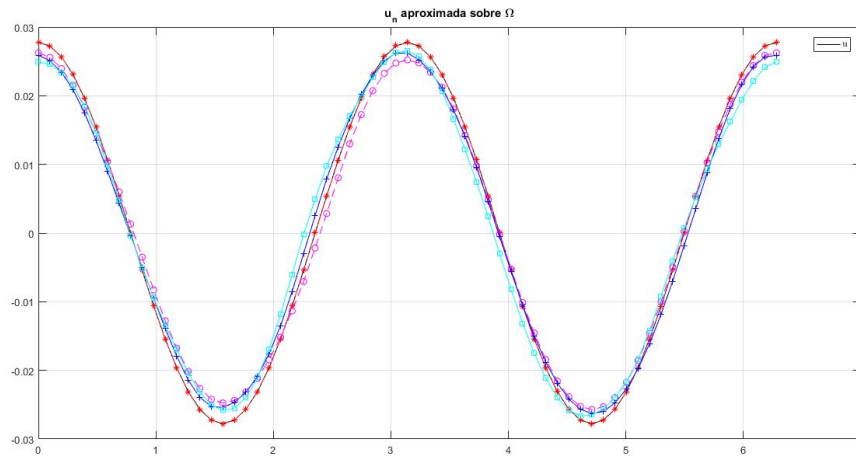


Figura 3.5: Gráficas de la solución exacta $u(\theta)$ (línea continua) y de las soluciones aproximadas $u_h^{n,\delta}(\theta)$ sobre Γ , para $\delta = 0$ (-*), $\delta = 0.05$ (- o), $\delta = 0.1$ (-+), $\delta = 0.15$ (-s) y la malla m2 de la región circular.

Continuando con los resultados numéricos, mostraremos las soluciones obtenidas con el algoritmo de gradiente conjugado cuando se considera un porcentaje de ruido en los datos del 10 %. Las representaciones gráficas del potencial exacto y el recuperado, así como la fuente exacta y la recuperada están exhibidas en las figuras 3.6 y 3.7.

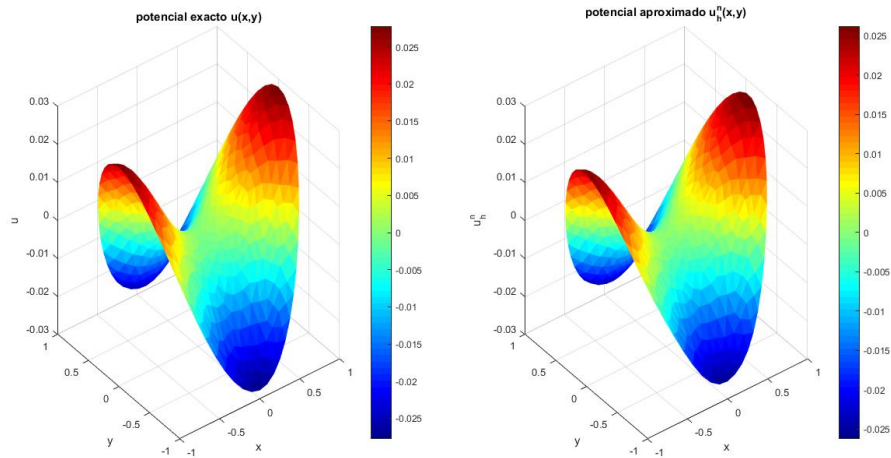


Figura 3.6: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica $u_h^{n,\delta}$ en la región circular con malla m2, $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

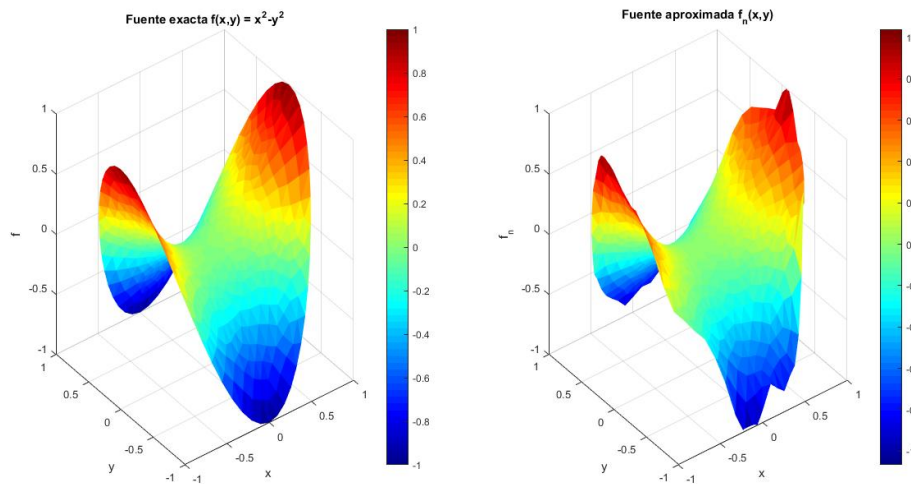


Figura 3.7: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica f_h^n en la región circular con malla m2, $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

En la figura 3.8 se muestran las gráficas de los datos perturbados \hat{v}_δ junto con los potenciales u y su aproximación $u_h^{n,\delta}$ sobre Γ . Por otra parte, en la figura 3.9 se muestra la gráfica de la fuente exacta y la solución numérica sobre la frontera.

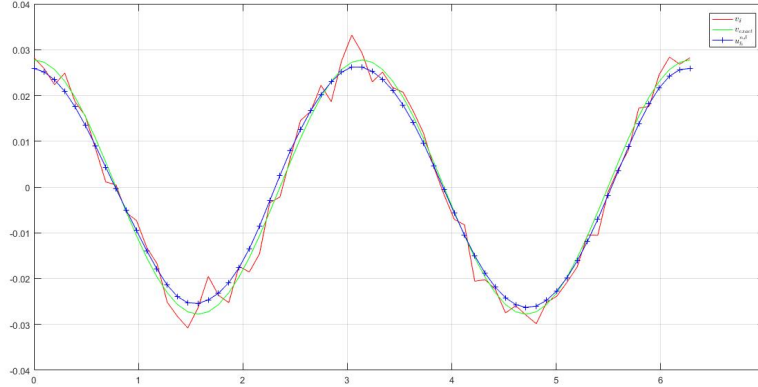


Figura 3.8: Gráfica de los datos \hat{v}_δ (línea roja), $u(\theta)$ (línea verde) y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y cruz) en la frontera de la región circular Γ , con $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

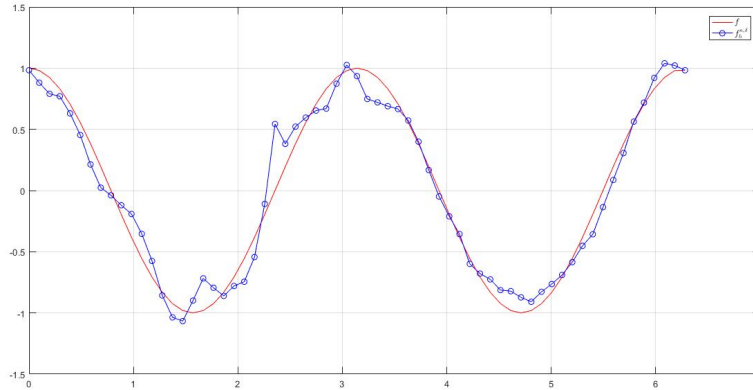


Figura 3.9: Comparación entre la fuente exacta $f(\theta)$ (línea continua) y la solución numérica $f_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y círculo) en la frontera de la región circular Γ , con $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

En la figura 3.9 se puede observar que la fuente recuperada presenta perturbaciones en sus valores sobre la frontera, la razón de esto es debido al error estocástico introducido en los datos de entrada \hat{v}_δ , los cuales afectan a la solución final.

Ejemplo 3. Continuando con los experimentos numéricos, se elige ahora una región irregular sobre la cual se buscan las aproximaciones numéricas de la fuente f y el potencial u . El objetivo de esta elección es determinar la estabilidad del método en un dominio complejo. Consideremos la fuente $f(x, y) = \exp(x)\sin(y)$ definida en la región irregular, las pruebas se han ejecutado sobre dos mallas: una malla fina i2 con 2192 elementos y 1155 nodos, y un refinamiento i3 con 8768 elementos y 4501 nodos; para este ejemplo se consideró como solución 'exacta' del potencial u , la solución numérica obtenida sobre la malla i3. En la figura 3.10 se muestra la malla i2 de la región irregular.

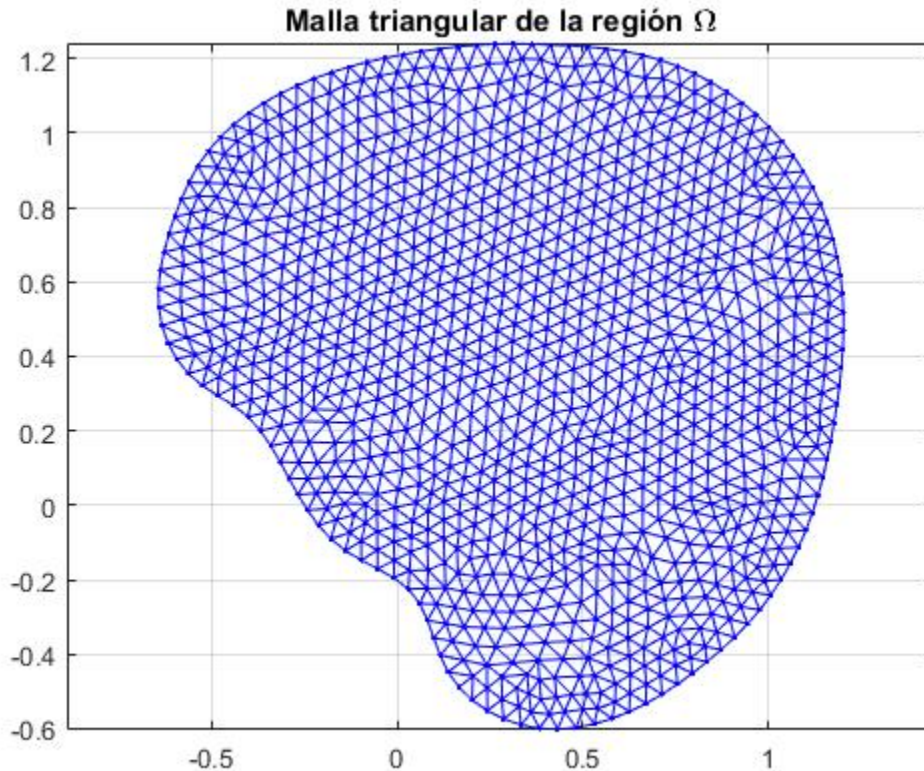


Figura 3.10: malla irregular i2 con 2192 elementos y 1155 nodos.

De forma análoga como en el ejemplo 2, vamos a considerar los errores relativos de las soluciones 'exactas' y las numéricas para la fuente y el potencial. Siguiendo con los valores de $\delta = 0, 0.05, 0.1, 0.15$ se han generado los datos perturbados \hat{v}_δ ; para el caso con $\delta = 0$, se aplicó el algoritmo de gradiente conjugado con parámetro de penalización $k = 10^6$, como criterio de paro se consideró una tolerancia de $\epsilon = 10^{-6}$, para los demás casos, se utilizó $\epsilon = 10^{-4}$ y $k = 10^3$. Como se observa en el cuadro 3.3 los errores relativos para los resultados numéricos del potencial y la recuperación de la fuente (tres últimos renglones), son del mismo orden que las desviaciones relativas de los datos perturbados (segunda renglón) correspondientes a cada valor del parámetro de perturbación δ .

Por otro lado, se observa que el número de iteraciones es menor cuando hay ‘ruido’ presente en los datos de entrada ($n = 4$) que cuando no hay ‘ruido’ ($n = 10$). La razón es que el parámetro de penalización impuesto en el caso sin ‘ruido’ es mayor, lo cual aumenta el número de condición de problemas numéricos, además de que en ese caso también se impuso un criterio de paro en las iteraciones que es más severo, todo con el objeto de asegurar mayor precisión en los resultados numéricos de este caso. No es recomendable utilizar un parámetro de penalización tan alto en los casos con ‘ruido’, ni tampoco un criterio de paro tan severo, debido a que en esos casos el error en los datos de entrada domina al error numérico y no es posible alcanzar la precisión deseada, sino solamente una precisión posible.

Por lo tanto, de acuerdo a los ejemplos mostrados hasta ahora, podemos concluir que el modelo variacional de penalización para regularizar el problema inverso, junto con el algoritmo de gradiente conjugado combinado con discretización de elementos finitos, produce soluciones numéricas estables respecto a perturbaciones, en donde se recupera la fuente volumétrica dentro del mismo rango de precisión que el asociado a los errores de medición del potencial en la frontera del dominio.

δ	0	0.05	0.1	0.15
$Er(\hat{v}_\delta, \hat{v})$	0	8.2290e-02	1.5638e-01	2.1308e-01
n	10	4	4	4
$Er(u_h^{n,\delta}, u)$	1.8082e-03	1.6518e-02	2.0064e-02	4.1678e-02
$Er(u_h^{n,\delta} _\Gamma, \hat{v})$	2.4179e-03	1.8642e-02	2.3079e-02	4.2850e-02
$Er(f_h^{n,\delta}, f)$	1.2689e-02	6.0132e-02	7.0321e-02	8.9766e-02

Cuadro 3.3: Errores relativos sobre la malla i2 para los distintos valores de δ .

Los resultados de la aproximaciones numéricas del potencial sobre Γ y el potencial exacto u se muestran en la gráfica 3.11. Como se observa los valores sobre la frontera para cada potencial son muy similares al potencial exacto aun cuando se han introducido perturbaciones en los datos de entrada.

También se mostrarán algunas gráficas con los resultados numéricos obtenidos con el algoritmo de gradiente conjugado cuando se introduce un error del 10 % ($\delta = 0.1$) en los datos. En la figura 3.12 se grafican los resultados del potencial exacto u y la aproximación $u_h^{\delta,n}$ para la malla i2. Por otra parte, en la figura 3.13 se muestran las gráficas de la fuente exacta y la encontrada numéricamente con la misma malla.

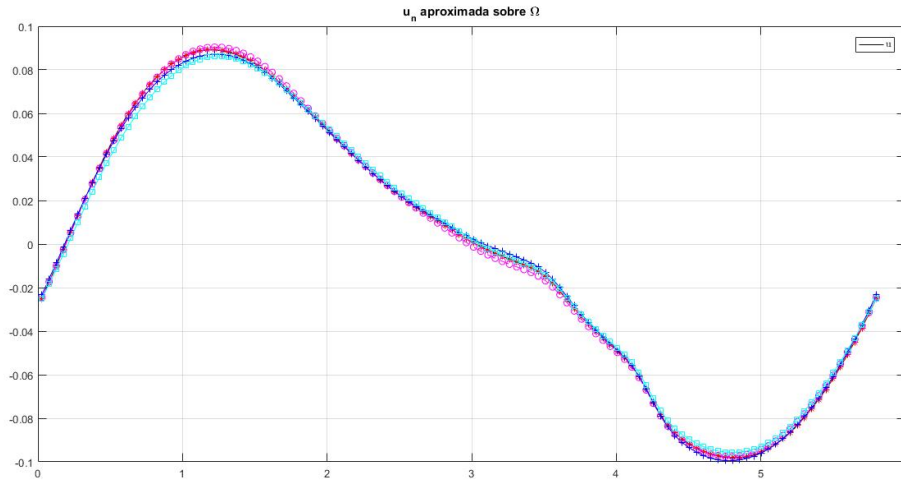


Figura 3.11: Gráficas de la 'solución exacta' $u(\theta)$ (línea continua) y de las soluciones aproximadas $u_h^{n,\delta}$ con $\delta = 0$ (-.*), $\delta = 0.05$ (- - o), $\delta = 0.1$ (-+), $\delta = 0.15$ (-s).

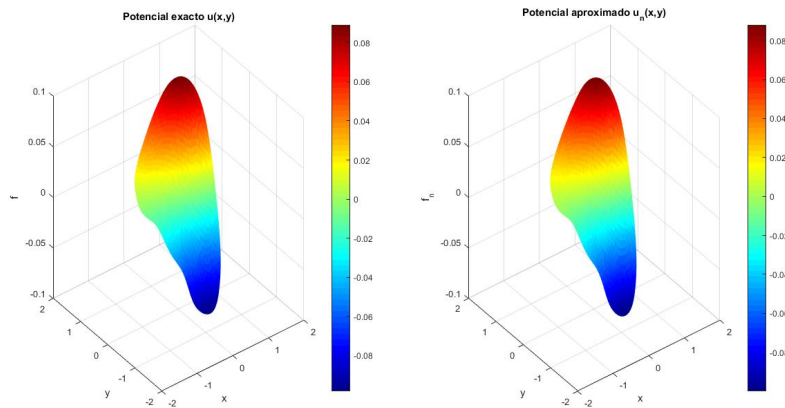


Figura 3.12: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica $u_h^{n,\delta}$ en la región irregular con malla i2, $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

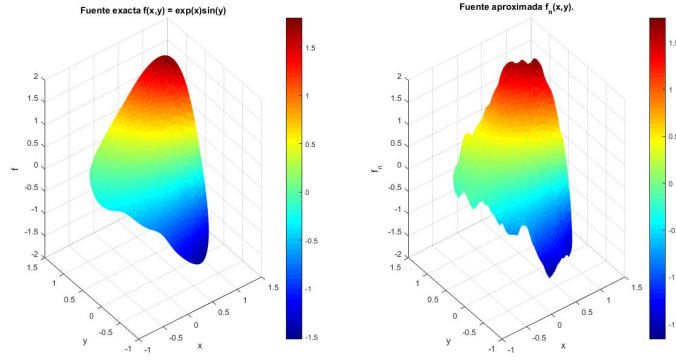


Figura 3.13: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica f_h^n en la región irregular con malla i2, $k = 10^3$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-4}$.

Continuando con los resultados, en la figura 3.14 se grafican los datos perturbados \hat{v}_δ junto con el potencial exacto u y su aproximación $u_h^{\delta,n}$ sobre la frontera del dominio circular Γ y $\delta = 0.1$. De manera análoga, en la figura 3.15 se muestran las gráficas de la fuente exacta y la aproximación $f_h^{n,\delta}$ con el mismo valor de δ .

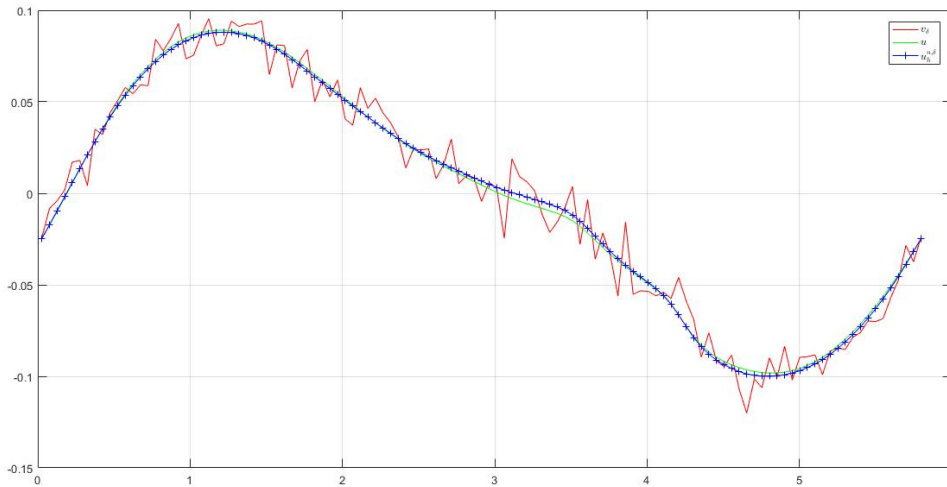


Figura 3.14: Gráfica de los datos \hat{v}_δ (línea roja), $u(\theta)$ (línea verde) y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y cruz) en la frontera de la región irregular Γ , con $k = 10^4$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

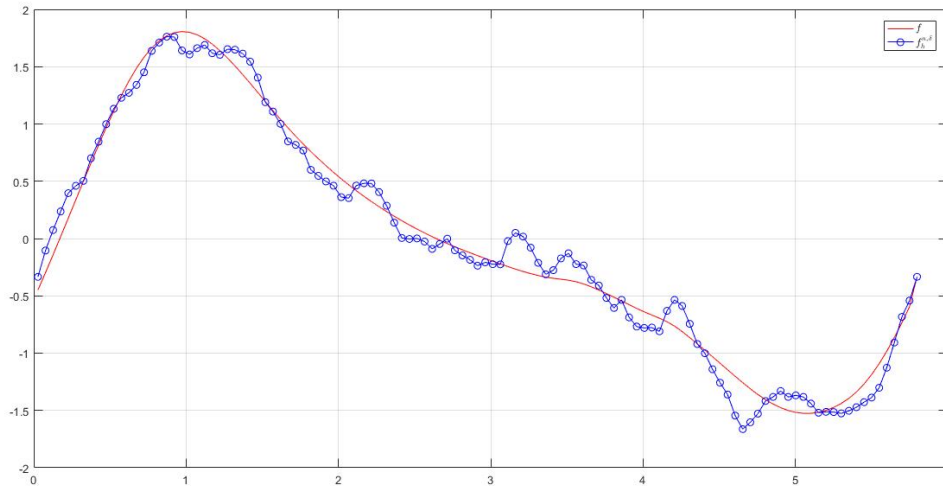


Figura 3.15: Comparación entre la fuente exacta $f(\theta)$ (línea continua) y la solución numérica $f_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y círculo) en la frontera de la región irregular Γ , con $k = 10^4$, $\delta = 0.1$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

Como se observa en la figura 3.15, con el método propuesto se ha obtenido una solución no suave pero cercana a la fuente exacta sobre la frontera. Así, la eficacia del método de penalización ha sido comprobada a partir de los ejemplos mostrados, podemos concluir que el método proporciona soluciones convergentes, así mismo ante la presencia de errores en los datos de entrada, las soluciones han sido estables.

Capítulo 4

Método variacional con multiplicadores de Lagrange para resolver el PIE

Uno de los objetivos de esta tesis es explorar nuevas metodologías para resolver el problema inverso electroencefalográfico (PIE). Puesto que los espacios de funciones en los cuales se formuló el modelo son espacios de Hilbert, es posible explorar otro tipo de métodos que son útiles para resolver problemas de optimización con restricciones. Estos métodos incluyen los métodos de multiplicadores de Lagrange y de Lagrangiano aumentado, los cuales son ampliamente utilizados en problemas de optimización con restricciones en dimensión finita pero que son escasamente utilizados en problemas de dimensión infinita como el PIE. En este capítulo exploraremos el método de multiplicadores de Lagrange para resolver el modelo introducido en el capítulo 2 y en el próximo capítulo estudiaremos el método de Lagrangiano aumentado.

Para mayor claridad, escribimos de nuevo el modelo:

Dado $\hat{v} \in L_2(\Gamma)$ encontrar f que resuelve

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla u) &= f|_{\omega} \text{ en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \text{ sobre } \Gamma, \end{aligned} \tag{4.1}$$

de tal manera que la solución $u|_{\Gamma} = \hat{v}$ satisface una solución de norma mínima, se puede generar resolviendo el siguiente problema de control óptimo

Dado $\hat{v} \in \mathcal{W}$ encontrar $f \in \mathcal{U}$ que minimize el funcional

$$J(f) = \frac{1}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 = \frac{1}{2} \int_{\omega} |f|^2 d\omega \tag{4.2}$$

y que satisface la restricción

$$Kf = \hat{v}. \tag{4.3}$$

Como se ha mencionado anteriormente, nos encontramos ante la posibilidad de que la restricción (4.3) no se satisfaga exactamente, aunque ello no impide encontrar una solución aproximada, gracias al teorema de densidad mostrado anteriormente. Con la finalidad de encontrar el control f que satisface (4.2) se desarrollará el método de multiplicadores de Lagrange.

4.1. El Lagrangiano y las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker

En esta sección nos enfocaremos en algunos resultados conocidos sobre minimización de funcionales y las condiciones suficientes y necesarias que debe satisfacer la solución del problema de optimización descrito por (4.2) con la restricción (4.3), nos basaremos principalmente en el estudio de las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker, que caracterizan las condiciones de una solución óptima.

Multiplicadores de Lagrange. El método de multiplicadores de Lagrange permite replantear un problema de optimización con restricciones a uno sin restricciones y aplicar las condiciones necesarias para el problema sin restricciones, para ello se introduce una función auxiliar, llamada función Lagrangiana $\mathcal{L}(f, \lambda)$ definida como

$$\mathcal{L}(f, \lambda) = \frac{1}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 - \langle Kf - \hat{v}, \lambda \rangle_{L_2(\Gamma)} = \frac{1}{2} \int_{\omega} |f|^2 d\omega - \int_{\Gamma} (Kf - \hat{v})\lambda d\Gamma. \quad (4.4)$$

La función $\lambda \in \mathcal{W}$ es el multiplicador asociado al problema con restricciones. Al proponer el funcional $\mathcal{L}(f, \lambda)$ definido sobre $\mathcal{U} \times \mathcal{W}$, el problema de optimización con restricciones se transforma en un problema en donde se debe calcular un punto óptimo denominado ‘punto-silla’, que se define a continuación:

Definición. *El punto $(f, \lambda) \in \mathcal{U} \times \mathcal{W}$ es un punto silla de \mathcal{L} si se cumple*

$$\mathcal{L}(f, \mu) \leq \mathcal{L}(f, \lambda) \leq \mathcal{L}(v, \lambda), \quad \forall (v, \mu) \in \mathcal{U} \times \mathcal{W}.$$

De la desigualdad anterior se tiene que f minimiza (4.4) cuando λ es fijo y λ maximiza \mathcal{L} cuando f es fijo. De acuerdo a la teoría de problemas convexos relacionados a optimización en espacios generales (por ejemplo en [15] y [12]), para nuestro problema existe un único punto silla (f, λ) , y éste satisface las condiciones de optimalidad siguientes:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \mathcal{L}(f + \epsilon v, \lambda) = 0, \quad (4.5)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \mathcal{L}(f, \lambda + \epsilon q) = 0. \quad (4.6)$$

El sistema descrito en (4.5-4.6), es conocido como las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) y es el que se resuelve para poder encontrar el punto silla. A continuación se procede a calcular cada uno de los límites. Para calcular el primero, observamos que para toda función $v \in \mathcal{U}$, se tiene

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(f + \epsilon v, \lambda) &= \frac{1}{2} \int_{\omega} (f + \epsilon v)^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - K(f + \epsilon v)) \lambda d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 dx + \epsilon \int_{\omega} f v dx + \frac{\epsilon^2}{2} \int_{\omega} v^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - K(f + \epsilon v)) \lambda d\Gamma.\end{aligned}\tag{4.7}$$

Realizando cálculos, y teniendo en cuenta la linealidad de K , se tiene

$$\mathcal{L}(f + \epsilon v, \lambda) = \mathcal{L}(f, \lambda) + \epsilon \left\{ \int_{\omega} f v d\omega - \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma \right\} + \frac{\epsilon^2}{2} \int_{\omega} v^2 d\omega.$$

Entonces

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}(f + \epsilon v, \lambda) - \mathcal{L}(f, \lambda)}{\epsilon} = \int_{\omega} f v d\omega - \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma.$$

Como este límite es igual al de (4.5) y además $\langle Kv, \lambda \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle v, K^* \lambda \rangle_{L_2(\omega)}$, entonces (f, λ) satisface:

$$\int_{\omega} f v d\omega = \int_{\Gamma} (K^* \lambda) v d\Gamma, \quad \text{para toda } v \in \mathcal{U},$$

de donde se sigue que necesariamente $f = K^* \lambda$, con K^* el operador adjunto a K . De forma análoga se calcula la primera variación de \mathcal{L} respecto a λ . Es decir, para toda función $q \in \mathcal{W}$ se satisface lo siguiente:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(f, \lambda + \epsilon q) &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf)(\lambda + \epsilon q) d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf) \lambda d\Gamma + \epsilon \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf) q d\Gamma.\end{aligned}$$

Por definición del Lagrangiano \mathcal{L} y reagrupando términos, se tiene

$$\mathcal{L}(f, \lambda + \epsilon q) = \mathcal{L}(f, \lambda) + \epsilon \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf) q d\Gamma, \quad \text{para toda } q \in \mathcal{W}.$$

Entonces

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}(f, \lambda + \epsilon q) - \mathcal{L}(f, \lambda)}{\epsilon} = \int_{\Gamma} \hat{v} q d\Gamma - \int_{\Gamma} (Kf) q d\Gamma,$$

y como esta última expresión es igual a (4.6), también vale cero para toda $q \in \mathcal{W}$, entonces se satisface que $\hat{v} = Kf$.

Por lo tanto, la condiciones KKT, en forma operacional, se pueden escribir como:

$$K^* \lambda = f, \quad (4.8)$$

$$K f = \hat{v}. \quad (4.9)$$

Otra forma de escribir este sistema operacional para (f, λ) es mediante la siguiente forma ‘matricial’:

$$\begin{bmatrix} I & -K^* \\ K & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{v} \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Utilizando las definiciones del operador K y su adjunto K^* , estas condiciones de optimalidad expresan que la pareja $(\bar{f}, \bar{\lambda}) \in \mathcal{U} \times \mathcal{W}$ es el punto-silla de \mathcal{L} , donde \bar{f} es el mínimo de J que satisface $K \bar{f} = \hat{v}$, si y sólo si satisface el siguiente sistema de optimalidad:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{f}) = 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{f}}{\partial \mathbf{n}} = \bar{\lambda} \quad \text{sobre } \Gamma. \\ -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{u}) = \bar{f}|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \\ \bar{u}|_{\Gamma} = \hat{v} \quad \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right. \quad (4.11)$$

Obsérvese que en este sistema $\bar{f}|_{\omega} = K^* \lambda$ y $\bar{u}|_{\Gamma} = K \bar{f}|_{\omega}$. Este sistema de ecuaciones es implícito y una forma de resolverlos es mediante un procedimiento iterativo que permita un desacoplamiento del mismo en cada paso. Para generar un algoritmo iterativo es conveniente observar que se puede eliminar f del sistema de optimalidad (4.8)-(4.9). Se aplica K a ambos lados de la ecuación (4.8) y después se sustituye (4.9), con lo cual se obtiene la siguiente ecuación operacional para el multiplicador λ :

$$K K^* \lambda = \hat{v}. \quad (4.12)$$

Por lo tanto, es posible resolver esta ecuación y, una vez conocido λ , en seguida se calcula f mediante (4.8). Obsérvese que el operador $K K^* : \mathcal{W} \mapsto \mathcal{W}$ es

- **Autoadjunto**, pues $\langle K K^* \lambda, \mu \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle K^* \lambda, K^* \mu \rangle_{L_2(\omega)} = \langle \lambda, K K^* \mu \rangle_{L_2(\Gamma)}$ para toda λ y μ en \mathcal{W} .
- **No negativo**: $\langle K K^* \lambda, \lambda \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle K^* \lambda, K^* \lambda \rangle_{L_2(\omega)} = \|K^* \lambda\|_{L_2(\omega)}^2 \geq 0$ para toda $\lambda \in \mathcal{W}$.

Por lo tanto, el problema (4.12) es elíptico y es posible utilizar un algoritmo de gradiente conjugado para resolverlo. A esta ecuación se le denomina sistema de ecuaciones normales para el multiplicador λ y representa el problema dual asociado al problema de minimización con restricciones (4.2)-(4.3). Más aún, dado el carácter elíptico del problema, su solución es un mínimo del funcional cuadrático $F : \mathcal{W} \mapsto \mathbb{R}$, definido por

$$F(\mu) = \frac{1}{2} \|K^* \mu\|_{L_2(\omega)}^2 - \langle \mu, \hat{v} \rangle_{L_2(\Gamma)}, \quad \forall \mu \in \mathcal{W}, \quad (4.13)$$

en donde el término cuadrático también se puede expresar como

$$\frac{1}{2}\langle K^*\mu, K^*\mu \rangle_{L_2(\omega)} = \frac{1}{2}\langle KK^*\mu, \mu \rangle_{L_2(\Gamma)},$$

por lo que inmediatamente encontramos que su derivada es

$$DF(\mu) = KK^*\mu - \hat{v}, \quad \forall \mu \in \mathcal{W}. \quad (4.14)$$

Por lo tanto, $\lambda \in \mathcal{W}$ es un mínimo del funcional F en (4.13) si satisface (4.12).

4.2. Gradiente conjugado para resolver las ecuaciones normales

En esta sección se describe el algoritmo de gradiente conjugado para determinar el multiplicador de Lagrange λ , el cual es solución de las llamadas ecuaciones normales (4.12) asociadas al problema de optimización con restricciones, es decir satisface $KK^*\lambda = \hat{v}$.

Algoritmo de gradiente conjugado(GC)

Inicialización

1. Dada $\lambda^0 \in \mathcal{W}$.
2. Se calcula $f^0 = K^*\lambda^0$.
3. Después, se calcula $\bar{g}^0 = Kf^0$.
4. Evaluar $g^0 = \bar{g}^0 - \hat{v}$.
5. Tomar $d^0 = -g^0$.

Descenso

Para $n \geq 0$ suponiendo conocidos λ^n, g^n, d^n, f^0 , calcular $\lambda^{n+1}, g^{n+1}, d^{n+1}, f^{n+1}$ como sigue:

6. Se calcula $\bar{f}^n = K^*d^n$.
7. Después, se calcula $\bar{g}^n = K\bar{f}^n$.
8. Se define el tamaño de paso $\delta_n = -\langle g^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)} / \langle \bar{g}^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)}$.
9. Actualizar el multiplicador $\lambda^{n+1} = \lambda^n + \delta_n d^n$.
10. Actualizar el gradiente $g^{n+1} = g^n + \delta_n \bar{g}^n$.

Prueba de convergencia y nueva dirección conjugada

11. Si $\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\Gamma)} / \langle g^0, g^0 \rangle_{L_2(\Gamma)} \leq TOL$ tomar $\lambda = \lambda^{n+1}$ y parar. En caso contrario se calcula la nueva dirección conjugada, realizando las siguientes evaluaciones:
12.
$$\beta_n = \frac{\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\Gamma)}^2}{\langle g^n, g^n \rangle_{L_2(\Gamma)}^2}.$$
13. $d^{n+1} = -g^{n+1} + \beta^n d^n.$
14. Hacer $n = n + 1$ y regresar al paso 6).

Fin del Algoritmo.

Conviene hacer algunas aclaraciones sobre el algoritmo anterior.

1. Los pasos 2, 3 y 4, se realizan para encontrar $g^0 = DF(\lambda^0) = KK^*\lambda^0 - \hat{v}$. La primera dirección de descenso es el negativo de esta función, como se indica en el paso 5.
2. El valor δ_n en el paso 8, indica el descenso óptimo en la dirección d^n a partir de λ^n , y se calcula minimizando la función cuadrática escalar (convexa) $\phi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, definida por $\phi(\delta) = F(\lambda^n + \delta d^n)$. La condiciones necesaria de primer orden es

$$\phi'(\delta_n) = \langle DF(\lambda^n + \delta_n d^n), d^n \rangle_{L_2(\Gamma)} = 0. \quad (4.15)$$

Como $g^n = KK^*\lambda^n - \hat{v}$ y $\bar{g}^n = KK^*d^n$, entonces (4.14) implica

$$DF(\lambda^n + \delta_n d^n) = g^n + \delta_n \bar{g}^n. \quad (4.16)$$

Sustituyendo esta expresión en (4.15) y despejando δ_n se llega a

$$\delta_n = -\frac{\langle g^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)}}{\langle \bar{g}^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)}}. \quad (4.17)$$

3. La igualdad en el paso 10 se obtiene de (4.16), pues $DF(\lambda^n + \delta_n d^n) = DF(\lambda^{n+1}) = g^{n+1}$.
4. Finalmente, la generación de la nueva dirección conjugada en el paso 13 se obtiene escogiendo β_n de tal manera que d^{n+1} y d^n sean KK^* -conjugadas, es decir

$$\langle d^{n+1}, KK^*d^n \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle K^*d^{n+1}, K^*d^n \rangle_{L_2(\omega)} = 0.$$

En realidad existen varias fórmulas equivalentes y aquí se ha utilizado la fórmula de Fletcher–Reeves por ser más simple, ver [13] y [14].

Para obtener el algoritmo completo, el cual es el que en la práctica se discretiza y se programa, basta con sustituir las ecuaciones diferenciales asociadas a los operadores K y K^* . Se obtiene el siguiente:

Algoritmo extendido de gradiente conjugado para calcular el multiplicador de Lagrange

Inicialización

1. Dada $\lambda^0 \in \mathcal{W}$.
2. Se calcula f^0 , resolviendo el problema:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\nabla f^0) &= 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{n}} &= \lambda^0 \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

3. Luego, se resuelve para \bar{g}^0 el problema:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{g}^0) &= f|_{\omega}^0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{g}^0}{\partial \mathbf{n}} &= 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

4. Evaluar $g^0 = \bar{g}^0 - \hat{v}$.
5. Hacer $d^0 = -g^0$.

Descenso

Para $n \geq 0$ suponiendo conocidos λ^n, g^n, d^n, f^n , calcular $\lambda^{n+1}, g^{n+1}, d^{n+1}, f^{n+1}$ como sigue:

6. Resolver para \bar{f}^n

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{f}^n) &= 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{f}^n}{\partial \mathbf{n}} &= d^n|_{\Gamma} \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

7. Luego resolver para \bar{g}^n

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma \nabla \bar{g}^n) &= \bar{f}^n|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial \bar{g}^n}{\partial \mathbf{n}} &= 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \end{aligned}$$

8. Se define el tamaño de paso $\delta_n = -\langle g^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)} / \langle \bar{g}^n, d^n \rangle_{L_2(\Gamma)}$.
9. Se actualiza $\lambda^{n+1} = \lambda^n + \delta_n d^n$.
10. Se actualiza $g^{n+1} = g^n + \delta_n \bar{g}^n$.

Prueba de convergencia y nueva dirección conjugada

11. Si $\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\Gamma)} / \langle g^0, g^0 \rangle_{L_2(\Gamma)} \leq TOL$ tomar $\lambda = \lambda^{n+1}$ y parar. En caso contrario se realizan los siguientes pasos:
12. Se calcula $\beta_n = \frac{\langle g^{n+1}, g^{n+1} \rangle_{L_2(\Gamma)}}{\langle g^n, g^n \rangle_{L_2(\Gamma)}}$.
13. Se evalúa $d^{n+1} = -g^{n+1} + \beta_n d^n$.
14. Hacer $n = n + 1$ y regresar al paso 6).

Cabe mencionar que los problemas elípticos con condiciones de frontera Neumann descritos en los pasos 2, 3, 6, 7 son del tipo de ecuaciones descritas en (3.16)-(3.17) y se resuelven por medio del método de elementos finitos como se indica en la sección 3.3.

4.3. Resultados numéricos

En esta sección presentaremos la aplicación de la metodología introducida en este capítulo para resolver el problema inverso electroencefalográfico, donde se busca una solución numérica de la fuente que genere los datos obtenidos del potencial. Se consideran distintas regiones para la búsqueda de la solución del *PIE*. Se retomarán los ejemplos vistos en la sección (3.4).

Ejemplo 1. En este ejemplo se resolverá de nuevo el PIE en un dominio circular pero en esta ocasión con el método de multiplicadores de Lagrange para contrastar con el método de penalización del capítulo 3. Por lo tanto, los datos, parámetros de discretización y mallas son los mismos que en ejemplo 1 de la sección 3.4.

En el cuadro 4.1 de muestran los resultados numéricos obtenidos con las tres mallas cuando se utilizan mediciones exactas \hat{v} sobre la frontera Γ . Los errores relativos obtenidos para el potencial, el potencial sobre la frontera exterior y la fuente, claramente muestran convergencia conforme se refina la malla. Sin embargo, a pesar de que se obtienen buenos resultados en este caso, al comparar con los resultados obtenidos para el mismo problema con el modelo de penalización, y que se muestran en el el cuadro 3.1, se observa una diferencia de precisión en los resultados de aproximadamente un orden de magnitud a favor del enfoque con penalización. Además, el número de iteraciones realizadas por el algoritmo

de gradiente conjugado, es mayor en el caso del modelo de optimización con multiplicadores de Lagrange. Por lo tanto se concluye que el método de penalización del capítulo 3 proporciona resultados más precisos con menos iteraciones en el caso de que los datos (potencial en la frontera exterior) sean exactos.

	mallla m1	mallla m2	mallla m3
n	11	5	3
$Er(u_h^n, u)$	3.0310e-02	7.2512e-03	5.0251e-03
$Er(u _{\Gamma}^h, \hat{v})$	2.861275e-02	6.217060e-03	4.451361e-03
$Er(f_h^n, f)$	4.0639e-02	6.5484e-03	5.0716e-03

Cuadro 4.1: Errores relativos para las distintas mallas.

En la figura 4.1 y 4.2 se muestran las gráficas de los potenciales recuperados sobre la frontera Γ correspondientes a cada mallla de la región circular, claramente se observa que el método de multiplicadores de Lagrange proporciona buenos resultados para el caso sin ruido. Además, de los resultados previamente mostrados en el cuadro 4.1, se puede observar que el mayor error cometido para el cálculo del potencial en la frontera es del 2.8% y corresponde a la mallla más gruesa m1, como se esperaba, este error disminuye conforme se refina la mallla.

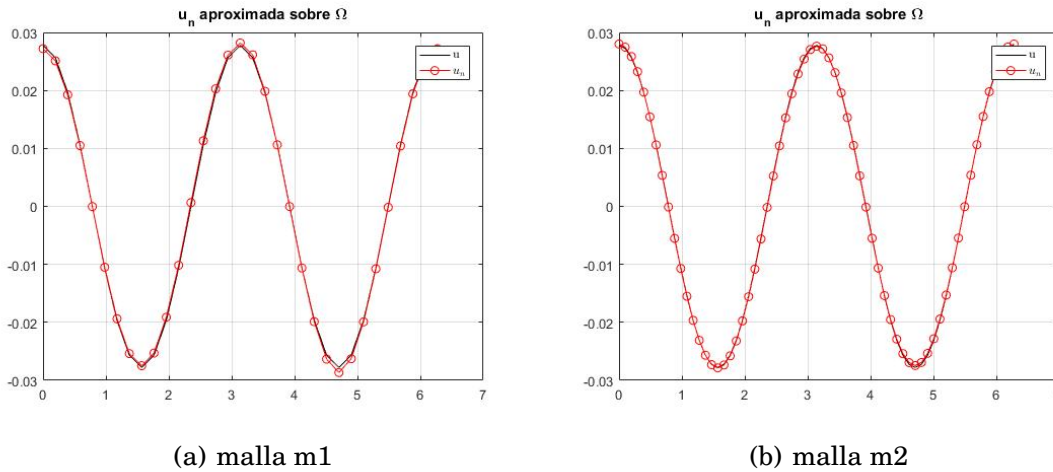


Figura 4.1: Gráfica de la solución exacta $u(\theta)$ (línea continua) sobre Γ y de las soluciones aproximadas (en círculos rojos) en las mallas m1 y m2.

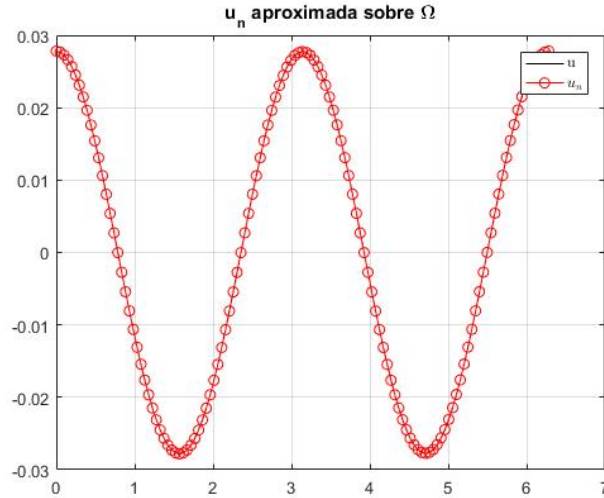


Figura 4.2: Gráfica de la solución exacta $u(\theta)$ (línea continua) sobre Γ y de la solución aproximada (en círculos rojos) en la malla m3.

En la figura 4.3 se exhiben las gráficas del potencial exacto u y la aproximación u_h^n para la malla m1. Por otro lado, la figura 4.4 muestra las gráficas de las fuente exacta y la encontrada numéricamente con la misma malla.

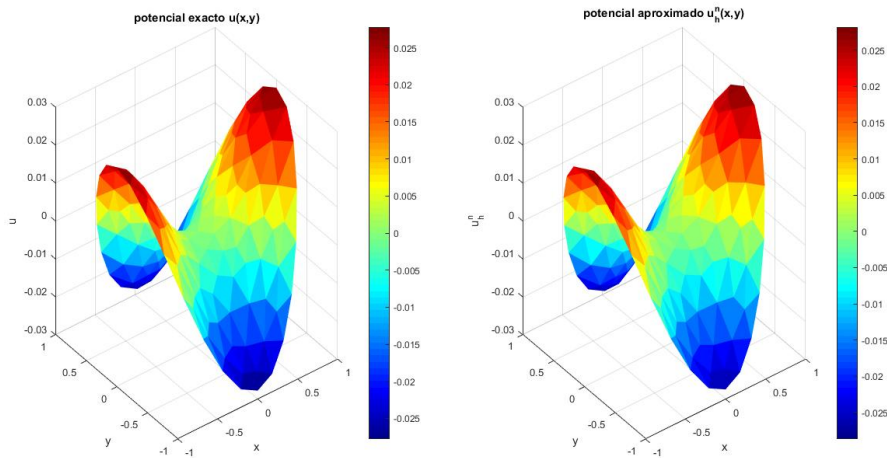


Figura 4.3: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica u_h^n en la región circular para la malla m1.

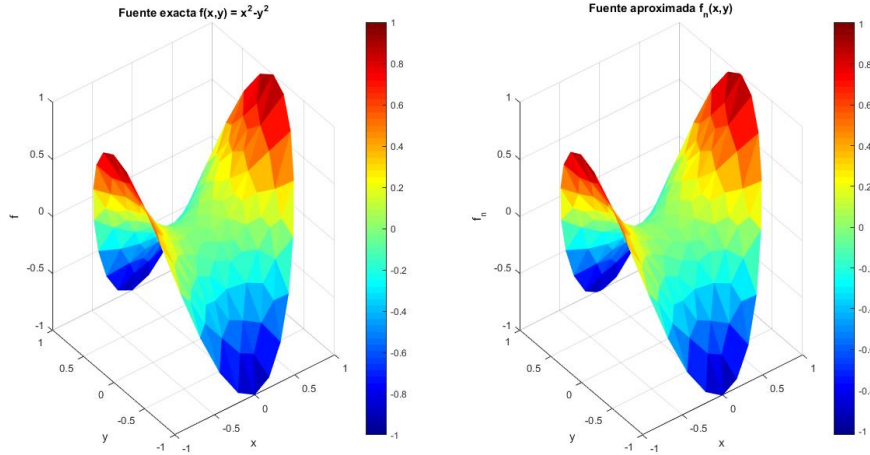


Figura 4.4: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica f_h^n en la región circular para la malla m1.

Resultados con ruido en los datos

Ejemplo 2. En este ejemplo se considera el enfoque de multiplicadores de Lagrange para el mismo problema que en el ejemplo anterior sobre el dominio circular, pero ahora se introducen perturbaciones en los datos. Se utilizan los mismos parámetros de discretización que en el ejemplo 2 de la sección 3.4 y diferentes valores para el nivel del ruido δ .

En el cuadro 4.2 se muestra los errores relativos previamente definidos para la fuente, así como el potencial y sus valores en la frontera, cuando tenemos datos perturbados \hat{v}_δ para los siguientes valores de $\delta = 0, 0.025, 0.05$. Como criterio de paro se consideró $\epsilon = 10^{-3}$ o bien un máximo de 51 iteraciones. De acuerdo a los resultados es claro que el método es inestable para resolver el problema, pues ya para una perturbación del 3% en los datos ($\delta = 0.025$) se observa una desviación de la fuente exacta del 79% aproximadamente, muy a pesar de que el potencial calculado numéricamente difiere del exacto solamente el 10% aproximadamente.

δ	0.01	0.025	0.05
$Er(\hat{v}_\delta, \hat{v})$	1.2419e-02	3.0331e-02	7.1379e-02
n	2	51	51
$Er(u_h^{n,\delta}, u)$	1.5025e-02	9.1988e-02	9.2979e-01
$Er(u _\Gamma^{n,\delta}, \hat{v})$	1.899403e-02	1.036087e-01	9.248152e-01
$Er(f_h^{n,\delta}, f)$	1.8373e-02	7.8717e-01	2.3413e+00

Cuadro 4.2: Errores relativos para los distintos datos perturbados \hat{v}_δ sobre la malla m2 de la región circular.

En la figura 4.5 se exhiben las gráficas del potencial exacto u y la aproximación $u_h^{n,\delta}$ para la malla m2 y $\delta = 0.025$. Por otra parte, en la figura 4.6 muestra las gráficas de las fuente exacta y la solución numérica encontrada sobre la misma malla y $\delta = 0.025$.

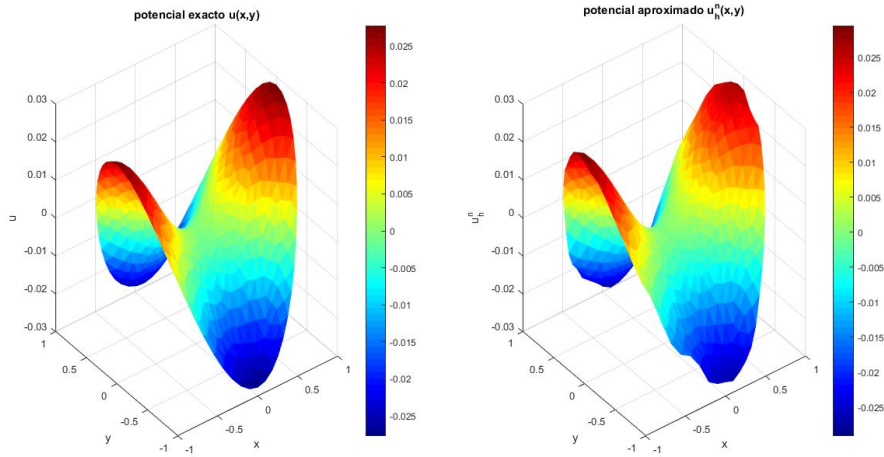


Figura 4.5: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica $u_h^{n,\delta}$ en la región circular con malla m2, $\delta = 0.025$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

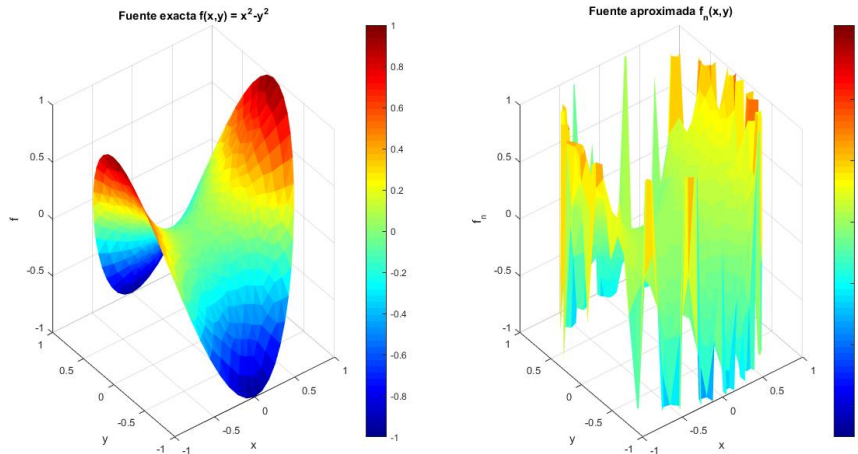


Figura 4.6: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica $f_h^{n,\delta}$ en la región circular con malla m2, $\delta = 0.025$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

En la figura 4.7 se muestra la gráfica de los valores obtenidos de la norma del gradiente, denotada como $\|g^n\|_{L_2(\Gamma)}$ para el caso $\delta = 0.025$. Cabe aclarar que el cálculo de g^n se realiza en el paso 10 del GC. Es importante señalar, que en el algoritmo de GC se paran las iteraciones cuando se excede un número máximo de iteraciones establecido o bien cuando se satisface la condición de convergencia en

el paso 11. Para este caso el número máximo de iteraciones se fijó en 51, es decir no se obtiene convergencia del método de gradiente conjugado pues claramente $\|g^n\|_{L_2(\Gamma)} = \|KK^*\lambda^n - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}$ no converge a cero. No obstante, se puede observar en la gráfica que los valores de $\|g^n\|_{L_2(\Gamma)}$ oscilan conforme avanzan las iteraciones y por ende, las aproximaciones numéricas obtenidas para la fuente, así como para el potencial, no serán cercanas a las soluciones exactas, de hecho para el nivel del ruido introducido en este caso, el porcentaje de error para el cálculo de la fuente es de 79 %, de acuerdo al cuadro 4.2.

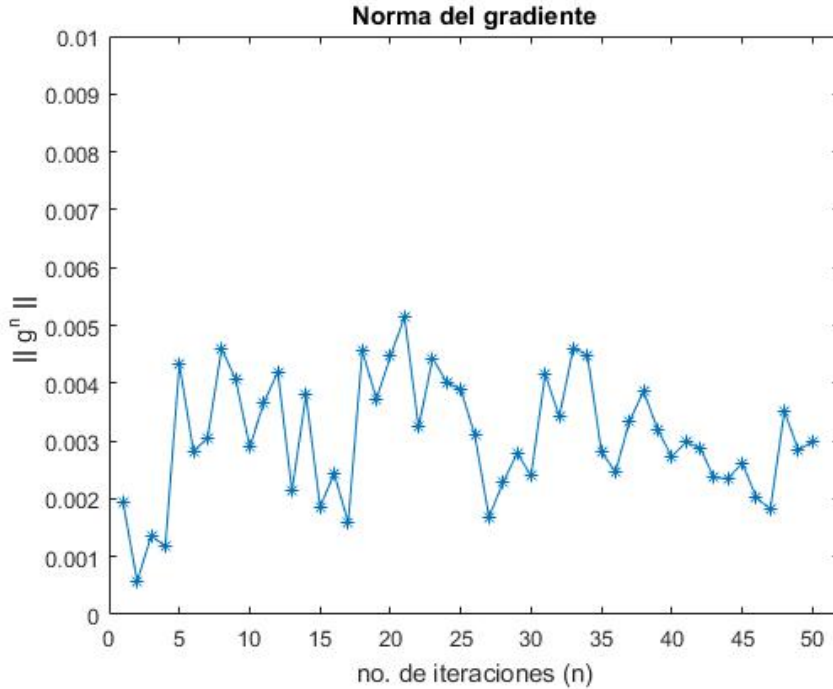


Figura 4.7: Norma del gradiente g^n para el caso $\delta = 0.025$.

De acuerdo a los resultados numéricos, para el modelo con multiplicadores de Lagrange el algoritmo de gradiente conjugado propuesto para resolver el problema dual (ecuaciones normales (4.12)) no es estable para el cálculo de la fuente, cuando los datos de potencial sobre la frontera exterior Γ son perturbados por ‘ruido’ estocástico. La razón es que en el procedimiento no hay ningún proceso de estabilización, como ocurre cuando se utiliza penalización. De hecho, recordemos que el operador K es compacto, así que el operador adjunto K^* también lo es y, en consecuencia el operador KK^* no tiene inversa continua, al ser compacto y estar definido sobre un espacio de Hilbert de dimensión infinita. Por lo tanto, es necesario estabilizar de alguna manera el procedimiento y una posible alternativa es combinar el método de multiplicadores de Lagrange con el método de penalización, es decir mediante el método Lagrangiano aumentado, como se verá en el siguiente capítulo.

Capítulo 5

Método variacional de Lagrangiano aumentado

En el capítulo anterior discutimos el método de multiplicadores de Lagrange para la solución del problema inverso electroencefalográfico. Los resultados numéricos mostraron que, a pesar de que proporciona buenos resultados para datos exactos, el método no es estable con respecto a perturbaciones en los datos. Por esta razón, en este capítulo se propone el uso del método de Lagrangiano aumentado como una nueva técnica para encontrar una solución estable al problema inverso electroencefalográfico. Particularmente, se aplicará el método a los ejemplos ya propuestos en los capítulos anteriores.

5.1. Lagrangiano aumentado para el PIE

El método de Lagrangiano aumentado se propuso de forma independiente por Hestenes [18] y Powell [19] en 1969, como un nuevo algoritmo para resolver problemas no lineales con restricciones de igualdad. La idea básica del método consiste en anexar un término de penalización a la Lagrangiana ordinaria para obtener una Lagrangiana penalizada, de esta forma se relaciona con el método de penalización cuadrático. Al abordar la resolución de problemas de optimización con el algoritmo de Lagrangiano aumentado, se reduce la posibilidad de un mal condicionamiento en los subproblemas que son generados con el enfoque de penalización, ya que se introducen estimaciones explícitas del multiplicador de Lagrange en cada paso de la función que será minimizada. La forma de describir el Lagrangiano aumentado es la siguiente:

$$\mathcal{L}_k(f, \lambda) = \frac{1}{2} \|f\|_{L_2(\omega)}^2 + \langle \hat{v} - Kf, \lambda \rangle_{L_2(\Gamma)} + \frac{k}{2} \|Kf - \hat{v}\|_{L_2(\Gamma)}^2 \quad (5.1)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{\omega} |f|^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf)\lambda d\Gamma + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} |Kf - \hat{v}|^2 d\Gamma. \quad (5.2)$$

Una ventaja al introducir el Lagrangiano aumentado es que, la adición del

término $\frac{k}{2}\|Kf - \hat{v}\|_{L^2(\Gamma)}^2$ a la Lagrangiana \mathcal{L} mejorará las propiedades de convergencia de los algoritmos descritos más adelante.

5.2. Condiciones para la solución

De forma análoga con el método de multiplicadores de Lagrange, al proponer el Lagrangiano aumentado $\mathcal{L}_k(f, \lambda)$ definido en $\mathcal{U} \times \mathcal{W}$ se establecen las condiciones de optimalidad para el cálculo del punto-silla, el cual se obtiene a partir de las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker mostradas a continuación

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \mathcal{L}_k(f + \epsilon v, \lambda) = 0, \quad (5.3)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \mathcal{L}_k(f, \lambda + \epsilon q) = 0. \quad (5.4)$$

Ahora procederemos a realizar el cálculo de primer límite: para toda $v \in \mathcal{U}$, se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_k(f + \epsilon v, \lambda) &= \frac{1}{2} \int_{\omega} (f + \epsilon v)^2 d\omega + \int_{\Gamma} [\hat{v} - K(f + \epsilon v)] \lambda d\Gamma + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} (K(f + \epsilon v) - \hat{v})^2 d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \epsilon \int_{\omega} f v d\omega + \frac{\epsilon^2}{2} \int_{\omega} v^2 d\omega \\ &\quad + \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf) \lambda d\Gamma - \epsilon \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} ((Kf - \hat{v}) + \epsilon Kv)^2 d\Gamma \\ &= \left\{ \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - Kf) \lambda d\Gamma + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} (Kf - \hat{v})^2 d\Gamma \right\} \\ &\quad + \epsilon \int_{\omega} f v d\omega - \epsilon \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma + \epsilon k \int_{\Gamma} (Kf - \hat{v})(Kv) d\Gamma \\ &\quad + \frac{\epsilon^2}{2} \int_{\omega} v^2 d\omega + \frac{\epsilon^2 k}{2} \int_{\Gamma} (Kv)^2 d\Gamma. \end{aligned}$$

Realizando cálculos, y teniendo en cuenta la linealidad de K , obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_k(f + \epsilon v, \lambda) &= \mathcal{L}_k(f, \lambda) + \epsilon \int_{\omega} f v d\omega - \epsilon \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma + \epsilon k \int_{\Gamma} (Kf - \hat{v})(Kv) d\Gamma \\ &\quad + \frac{\epsilon^2}{2} \int_{\omega} v^2 d\omega + \frac{\epsilon^2 k}{2} \int_{\Gamma} (Kv)^2 d\Gamma. \end{aligned}$$

Entonces

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}_k(f + \epsilon v, \lambda) - \mathcal{L}_k(f, \lambda)}{\epsilon} = \int_{\omega} f v d\omega - \int_{\Gamma} (Kv) \lambda d\Gamma + k \int_{\Gamma} (Kf - \hat{v})(Kv) d\Gamma - k \int_{\Gamma} \hat{v} (Kv) d\Gamma.$$

Por (5.3) y dado que $\langle K v, \lambda \rangle_{L_2(\Gamma)} = \langle v, K^* \lambda \rangle_{L_2(\omega)}$, entonces (f, λ) satisface:

$$\int_{\omega} f v d\omega + k \int_{\omega} (K^* K f) v d\omega = \int_{\omega} (K^* \lambda) v d\omega + k \int_{\omega} (K^* \hat{v}) v d\omega \quad \text{para toda } v \in \mathcal{U}. \quad (5.5)$$

De donde se encuentra que f satisface la ecuación operacional $f + kK^*Kf = K^*\lambda + kK^*\hat{v}$. De forma análoga se calcula la primera variación de \mathcal{L}_k respecto a λ . Así, para toda función $\mu \in \mathcal{W}$ se tiene que:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_k(f, \lambda + \epsilon\mu) &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - K f)(\lambda + \epsilon\mu) d\Gamma + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} (K f - \hat{v})^2 d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} \int_{\omega} f^2 d\omega + \int_{\Gamma} (\hat{v} - K f) \lambda d\Gamma + \epsilon \int_{\Gamma} (\hat{v} - K f) \mu d\Gamma \\ &\quad + \frac{k}{2} \int_{\Gamma} (K f - \hat{v})^2 d\Gamma. \end{aligned}$$

Por definición de \mathcal{L}_k y reagrupando términos, se obtiene

$$\mathcal{L}_k(f, \lambda + \epsilon\mu) = \mathcal{L}_k(f, \lambda) + \epsilon \int_{\Gamma} (\hat{v} - K f) \mu d\Gamma.$$

Por lo tanto

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}_k(f, \lambda + \epsilon\mu) - \mathcal{L}_k(f, \lambda)}{\epsilon} = \int_{\Gamma} \hat{v} \mu d\Gamma - \int_{\Gamma} (K f) \mu d\Gamma.$$

Por la condición (5.4), el limite vale cero para toda $\mu \in \mathcal{W}$, por lo tanto se satisface que $\hat{v} = K f$.

Por lo tanto, el sistema obtenido por medio de las condiciones KKT, se puede expresar en forma operacional como sigue:

$$f + kK^*Kf = K^*\lambda + kK^*\hat{v}, \quad (5.6)$$

$$Kf = \hat{v}. \quad (5.7)$$

O bien en la forma matricial como

$$\begin{bmatrix} I + kK^*K & -K^* \\ K & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} kK^*\hat{v} \\ \hat{v} \end{bmatrix}.$$

Utilizando la definición del operador K y su adjunto K^* , las condiciones de optimalidad establecen que la pareja $(f_k, \lambda_k) \in \mathcal{U} \times \mathcal{W}$ es el punto-silla de \mathcal{L}_k si satisface el sistema de optimalidad siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_k + k p_k = 0 \quad \text{en } \omega, \\ -\nabla \cdot (\sigma \nabla u_k) = f_k|_{\omega} \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial u_k}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \\ -\nabla \cdot (\sigma \nabla p_k) = 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \sigma \frac{\partial p_k}{\partial \mathbf{n}} = u_k|_{\Gamma} - \hat{v} - \frac{1}{k} \lambda_k \quad \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right. \quad (5.8)$$

Es importante enfatizar que la solución f_k , es también solución del problema de minimización descrito en (4.2)-(4.3). Además, claramente se observa el hecho que f_k , u_k y p_k están relacionados en forma implícita por ello se requiere de un método iterativo que permita desacoplar el sistema de optimalidad.

5.3. Método iterativo para la solución: ascenso dual

El objetivo de esta sección es el desarrollo del método iterativo que permita la búsqueda del punto-silla de \mathcal{L}_k , así como determinar una aproximación numérica de la fuente f . A continuación se muestra el esquema iterativo general que se utiliza en este caso:

Método iterativo de minimización y ascenso dual para resolver el problema de punto-silla.

Inicialización

1. Se elige $\lambda^0 \in \mathcal{W}$ arbitraria.
2. Conocida λ^0 , resolver para f^0

$$f^0 = \arg \min_f \mathcal{L}_k(f, \lambda^0).$$

Iteraciones

Para $n \geq 0$ suponiendo conocido λ^n , f^n , calcular λ^{n+1} , f^{n+1} como sigue

3. Actualizamos el valor del multiplicador

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n - k(K f^n - \hat{v}).$$

4. Resolver para f^{n+1}

$$f^{n+1} = \arg \min_f \mathcal{L}_k(f, \lambda^{n+1}).$$

Prueba de convergencia

5. Si $\|f^{n+1} - f^n\|_{L_2(\omega)} / \|f^0\|_{L_2(\omega)} \leq \epsilon$ tomar $f^* = f^{n+1}$ y parar. En caso contrario
6. Hacer $n = n + 1$ y regresar al paso 3.

Como se observa en el paso 3 es necesario minimizar \mathcal{L}_k cuando λ^{n+1} es fija. Obviamente este es el paso más crítico, y también el más caro computacionalmente, del esquema iterativo. Sin embargo, este problema es similar al problema de la minimización del funcional convexo J_k en el capítulo 3 y la única diferencia es el término adicional asociado al multiplicador, es decir

$$\arg \min_f \mathcal{L}_k(f, \lambda^{n+1}) = \min_f J_k(f) + \langle \hat{v} - K f, \lambda^{n+1} \rangle, \quad (5.9)$$

donde J_k es la función de penalización descrita en (3.2). Por consiguiente, este nuevo funcional también es convexo y su mínimo f satisface las condiciones de primer orden:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_k(f, \lambda^{n+1})}{\partial f} = 0. \quad (5.10)$$

El cálculo de esta derivada se obtiene a partir de técnicas del calculo variacional y de las propiedades del operador K y su adjunto K^* , de manera análoga a como se han calculado en las secciones y capítulos anteriores otras derivadas y límites de operadores. En esta ocasión, después de realizar los cálculos correspondientes, se obtiene que el mínimo f^{n+1} satisface la siguiente ecuación operacional

$$f + k K^*(K f - \hat{v}) - K^* \lambda^{n+1} = 0.$$

Nótese que los dos primeros términos corresponden a la derivada del funcional J_k , la cual fue descrita en la sección 3.1. Por otro lado, es necesario evaluar el término $K^* \lambda^{n+1}$, pero en lugar de ello podemos expresar (5.3) en la forma

$$f + k K^* \left(K f - \hat{v} - \frac{1}{k} \lambda^{n+1} \right) = 0. \quad (5.11)$$

De esta manera se evita evaluar dos veces el operador K^* y además nos permite visualizar la consistencia de esta expresión con (5.6) y las condiciones de optimalidad (5.8), así como su relación con las condiciones de optimalidad (3.13) cuando se utiliza el método de penalización. Por lo tanto, para obtener una solución aproximada de esta última ecuación, y asimismo para resolver numéricamente el problema de optimización (5.9), el cual aparece en el paso 2 y el paso 4 del algoritmo iterativo de minimización y ascenso dual, se utiliza el mismo programa de optimización que aquel utilizado con el método de penalización, con ajustes mínimos.

5.4. Resultados numéricos

En esta sección se muestran los resultados numéricos de la aplicación del algoritmo de Lagrangiano aumentado al problema inverso electroencefalográfico. El método se aplicará a los mismos problemas ya resueltos con los métodos anteriores con el objeto de comparar los resultados numéricos obtenidos.

Ejemplo 1. Se considera nuevamente la región circular y las mallas propuestas en ejemplo 1 de la sección 3.4, así como los datos que se utilizaron para realizar los experimentos numéricos.

La implementación del algoritmo de iterativo de minimización y ascenso dual se llevó a cabo utilizando la discretización de los subproblemas elípticos con el método de elementos finitos sobre la malla m_2 , en donde los datos perturbados \hat{v}_δ fueron generados para los siguientes niveles de perturbación: $\delta = 0, 0.05, 0.1, 0.15$. Las iteraciones se paran si se alcanza la precisión deseada ϵ o bien si se realizan un máximo de 100 iteraciones en el paso 6. Por otro lado, para el problema de minimización en los pasos 2 y 4 se utiliza el método de GC con un máximo de 10 iteraciones en cada caso. Para el caso sin ruido en los datos ($\delta = 0$), se consideró como parámetro de penalización $k = 10^3$ y una tolerancia de $\epsilon = 10^{-6}$, para los demás casos se utilizó $k = 10^2$ y una tolerancia de $\epsilon = 10^{-3}$ tanto para el algoritmo iterativo como para el GC. Debido a que a restricción $Kf = \hat{v}$ ya ha sido forzada con la introducción del multiplicador λ , ya no es necesario penalizar excesivamente la discrepancia $Kf - \hat{v}$, es decir no es necesario un valor grande para parámetro k . Un beneficio inmediato es que con $k = 100$, por ejemplo, los sistemas discretos ya no serán tan mal condicionados como en el caso que se utiliza exclusivamente penalización con valores mayores, mejorando las propiedades de convergencia de los métodos iterativos involucrados sin perder precisión en los resultados.

En el cuadro 5.1 se muestran los errores relativos obtenidos para los distintos valores de δ . El número de iteraciones total n , será un promedio entre las iteraciones del algoritmo iterativo de minimización y ascenso dual y las realizadas por el gradiente conjugado. En los resultados obtenidos se puede apreciar que los errores relativos de las soluciones numéricas respecto de la solución exacta son menores a la perturbación introducida en los datos en la mayoría de los casos, especialmente para los casos con mayor perturbación. Así por ejemplo, con una discrepancia en los datos del 21%, la fuente se recupera con un error del 15% aproximadamente, mientras que el potencial se recupera incluso con menor desviación (ver última columna del cuadro 5.1). Los resultados claramente muestran la superioridad, además de la propiedad de estabilización, de este método con respecto al método de multiplicadores de Lagrange, mejorando también la precisión obtenida con el método de penalización, al menos para este ejemplo en particular.

δ	0	0.05	0.1	0.15
$Er(\hat{v}_\delta, \hat{v})$	0	8.218957e-02	1.224817e-01	2.108044e-01
n	9	15	15	15
$Er(u_h^{n,\delta}, u)$	1.1683e-03	4.3137e-02	3.3683e-02	8.0973e-02
$Er(u_h^{n,\delta} _\Gamma, \hat{v})$	1.4547e-03	3.9323e-02	3.1001e-02	8.2415e-02
$Er(f_h^{n,\delta}, f)$	1.6983e-02	8.2505e-02	9.1249e-02	1.4767e-01

Cuadro 5.1: Errores relativos para las soluciones exactas y numéricas sobre la malla m2.

En la figura 5.1 se muestra el potencial exacto u sobre la frontera Γ junto con los potenciales recuperados cuando hay ruido en los datos (es decir, cuando hay errores en las mediciones del potencial en la frontera) para los distintos valores de δ . Como se puede observar no hay una diferencia significativa entre la solución exacta y las recuperadas numéricamente, lo cual ilustra con mayor detalle los resultados mostrados en el penúltimo renglón del cuadro 5.1, donde los errores relativos para las soluciones en la frontera muestran que la mayor desviación para el potencial en la frontera $u_h^{\delta,n}|_\Gamma$, es de 8.2%, el cual se obtiene para el caso de mayor ruido en los datos.

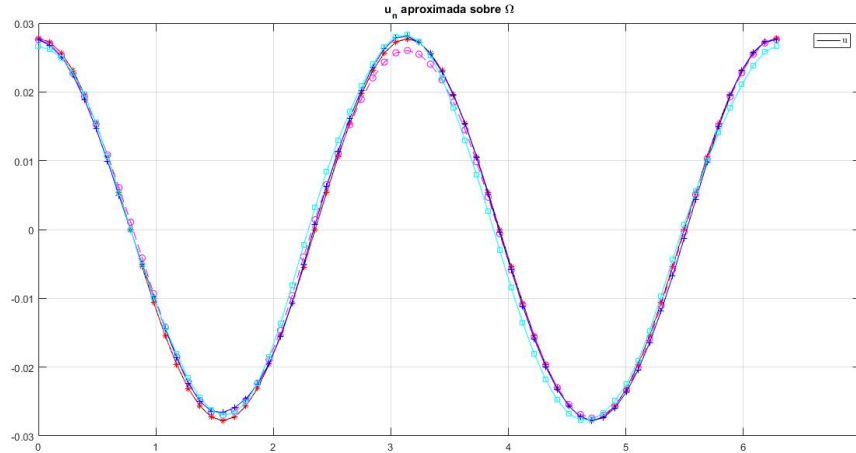


Figura 5.1: Gráficas del potencial exacto $u(\theta)$ (línea continua) y de las soluciones aproximadas $u_h^{n,\delta}(\theta)$ en la frontera de la región circular Γ , con $\delta = 0(-.*)$, $\delta = 0.05(- - o)$, $\delta = 0.1(- +)$, $\delta = 0.15(- s)$.

En la figura 5.2 se muestra las gráficas del potencial exacto y la aproximación $u_h^{n,\delta}$ para la malla m2. Así mismo, en la figura 5.3 se muestran las gráficas de la fuente exacta y la aproximación numérica encontrada con la misma malla.

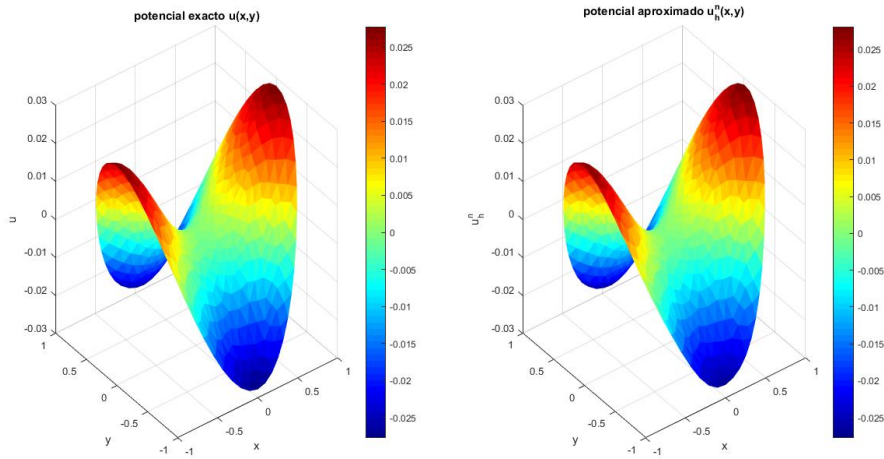


Figura 5.2: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica $u_h^{n,\delta}$ en la región circular con malla m2, $\delta = 0.1$, $k = 10^2$, y $\epsilon = 10^{-3}$.

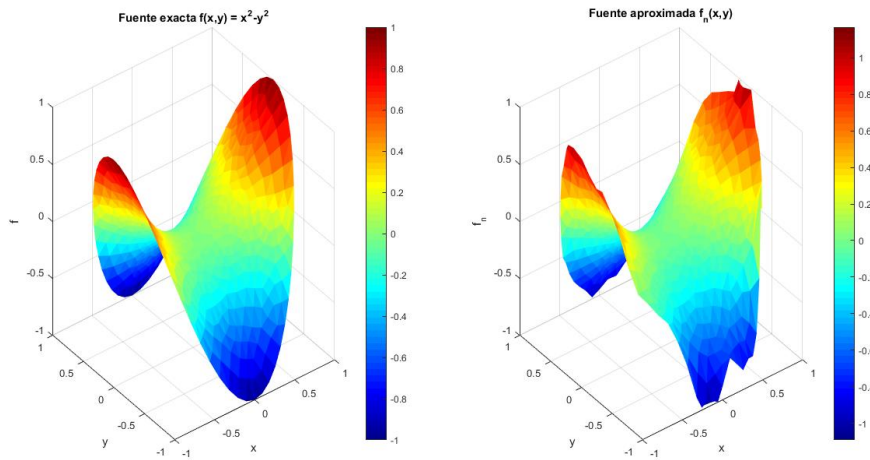


Figura 5.3: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica $f_h^{n,\delta}$ en la región circular con malla m2, con $\delta = 0.1$, $k = 10^2$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

Continuando con los resultados, en la figura 5.4 se muestran las gráficas de los datos perturbados v_δ junto con el potencial exacto u y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}$ sobre la frontera Γ para el caso particular $\delta = 0.1$. Asimismo, en la figura 5.5 se muestra la gráfica de la fuente exacta y la obtenida numéricamente para el mismo valor de δ . Como se puede apreciar en ambas figuras, la gráfica de los datos \hat{v}_δ y la de la fuente $f_h^{n,\delta}$ presentan el mismo patrón: las mayores y menores desviaciones de ambas ocurren alrededor de las mismas zonas. Por lo tanto, el modelo de Lagrangiano aumentado y los algoritmos de solución empleados, permiten recuperar la fuente con un error proporcional al de las mediciones, lo cual muestra claramente sus propiedades de estabilización.

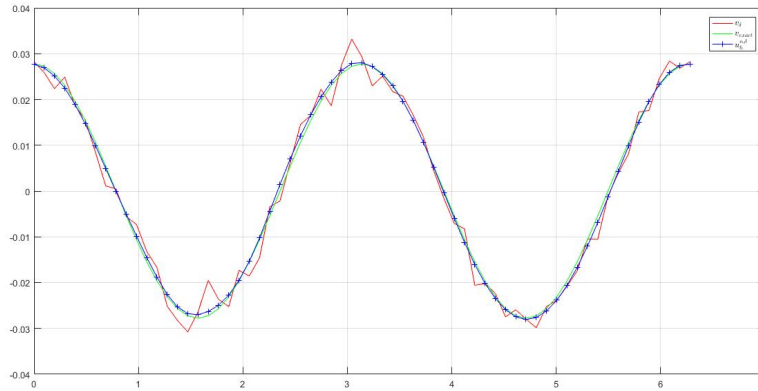


Figura 5.4: Gráfica de los datos \hat{v}_δ (línea roja), $u(\theta)$ (línea verde) y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}(\theta)$ en la frontera de la región circular Γ , con $\delta = 0.1$, $k = 10^2$, y $\epsilon = 10^{-3}$.

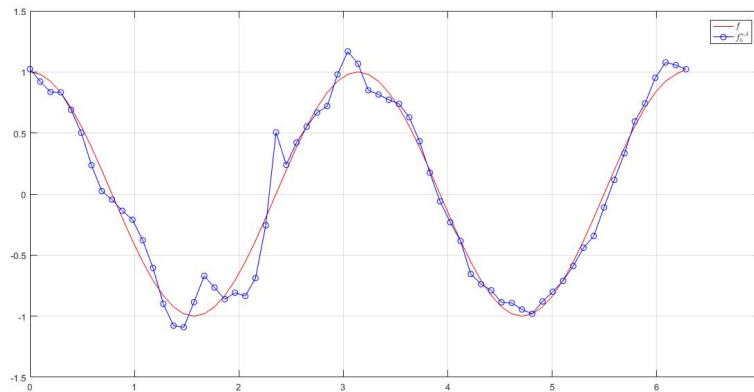


Figura 5.5: Gráficas de la fuente exacta $f(\theta)$ (línea continua) y la solución aproximada $f_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y círculo) en la frontera de la región circular Γ , con $\delta = 0.1$.

Ejemplo 2. En este ejemplo se expondrán los resultados numéricos obtenidos al resolver el PIE con el método de Lagrange aumentado pero aplicado al problema sobre una región compleja como aquella del ejemplo 3 de la sección 3.4. Para llevar acabo los experimentos numéricos se retomarán los datos, parámetros de discretización y mallas del mismo ejemplo.

En el cuadro 5.2 se muestran los errores relativos ya definidos en ejemplos anteriores para la fuente, así como el potencial y sus valores en la frontera para los mismos niveles de perturbación en los datos: $\delta = 0, 0.05, 0.1, 0.15$. Para el caso sin ruido en los datos que corresponde a $\delta = 0$, se aplicó el algoritmo iterativo de minimización y ascenso dual con un parámetro $k = 10^3$ y como criterio de paro una tolerancia de $\epsilon = 10^{-6}$ o bien un máximo de 100 iteraciones, asimismo para el GC se consideró la misma tolerancia y un máximo de 10 iteraciones. En los demás casos, se consideró una tolerancia de $\epsilon = 10^{-3}$ tanto para el algoritmo iterativo como para el gradiente conjugado, y un parámetro de $k = 10^2$. Se considera nuevamente n como un promedio de las iteraciones realizadas en el esquema iterativo. Se observa que, el mayor porcentaje de error cometido para la solución numérica de la fuente es del 13.3%, correspondiente al de mayor perturbación en los datos ($\delta = 0.15$), mientras que para el potencial se tiene un error del 3.5%. Como era de esperarse, al disminuir el porcentaje de ruido en los datos, también disminuye el error relativo para las soluciones. Observando el cuadro correspondiente a las soluciones obtenidas con el método de penalización (cuadro 3.3), los resultados obtenidos con el modelo de Lagrangiano aumentado son claramente mejores, tanto para el caso sin ruido en los datos como para los casos con ruido. Finalmente podemos decir que el método de Lagrangiano aumentado permite obtener soluciones estables con pocas iteraciones, lo que demuestra su eficacia.

δ	0	0.05	0.1	0.15
$Er(\hat{v}_\delta, \hat{v})$	0	8.228999e-02	1.563781e-01	2.130831e-01
n	6	15	16	16
$Er(u_h^{n,\delta}, u)$	7.1150e-04	2.0334e-02	1.7428e-02	3.5632e-02
$Er(u _\Gamma^{n,\delta}, \hat{v})$	4.3122e-04	2.2564e-02	2.0755e-02	3.7245e-02
$Er(f_h^{n,\delta}, f)$	4.8475e-03	8.2532e-02	1.2392e-01	1.3342e-01

Cuadro 5.2: Errores relativos para las aproximaciones numéricas sobre la malla irregular i2 con fuente $f(x, y) = \exp(x)\text{sen}(y)$ y datos perturbados \hat{v}_δ .

En la figura 5.6 se muestran las gráficas de los potenciales recuperados sobre la frontera Γ , así como el potencial exacto $u_h^{n,\delta}|_\Gamma$ cuando los datos presentan perturbaciones. Se puede observar que los resultados se ajustan muy bien a la solución exacta.

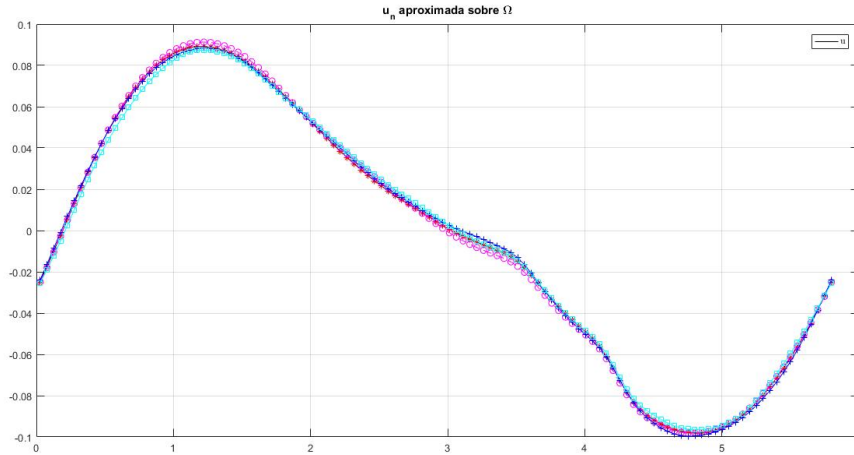


Figura 5.6: Gráficas del potencial exacto $u(\theta)$ (línea continua) y de las soluciones aproximadas $u_h^{n,\delta}(\theta)$ en la frontera de la región irregular Γ , con $\delta = 0(-.*)$, $\delta = 0.05(- - o)$, $\delta = 0.1(- +)$, $\delta = 0.15(- s)$.

Como caso particular se muestran los resultados obtenidos con la metodología propuesta para el caso $\delta = 0.1$. En la figura 5.7 se muestra las gráficas del potencial ‘exacto’ u y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}$ sobre la malla i2, mientras que en la figura 5.8 se muestran las gráficas de la fuente exacta f y la aproximación $f_h^{n,\delta}$ sobre la misma malla.

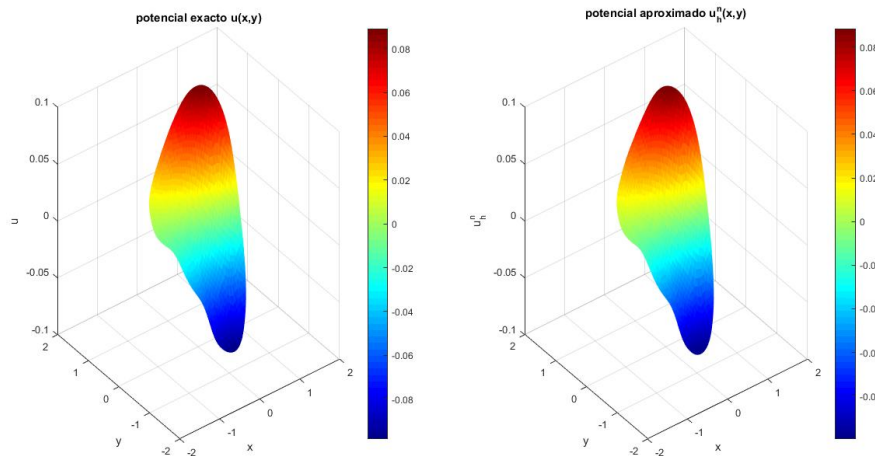


Figura 5.7: Comparación entre el potencial exacto u y la solución numérica $u_h^{n,\delta}$ en la región irregular con la malla i2, $\delta = 0.1$, $k = 10^2$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

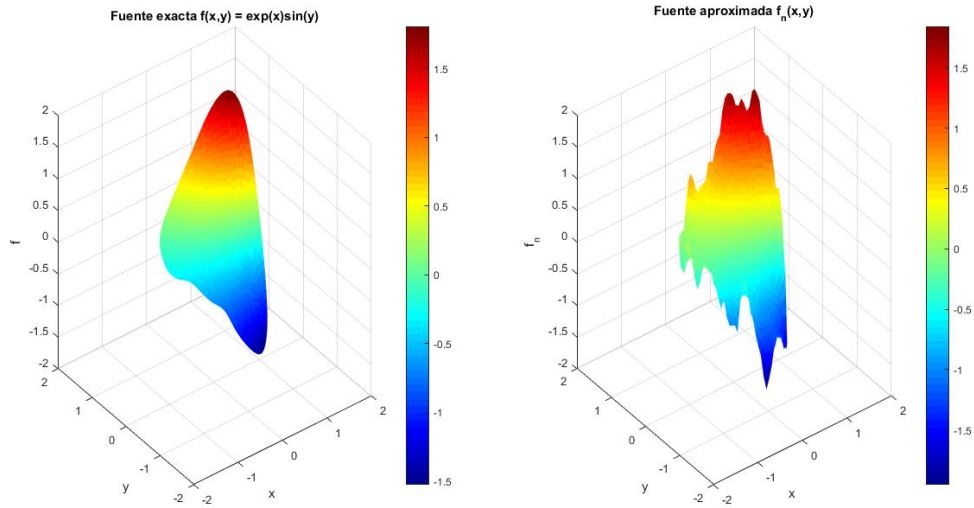


Figura 5.8: Comparación entre la fuente exacta f y la solución numérica $f_h^{n,\delta}$ en la región irregular con la malla i2, $\delta = 0.1$, $k = 10^2$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

En la figura 5.9 se muestran las gráficas del potencial ‘exacto’ u y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}$ sobre la frontera Γ , con $\delta = 0.1$. Como se observa hay una gran similitud entre el potencial ‘exacto’ y el recuperado con el algoritmo de gradiente conjugado. Asimismo, en la figura 5.10 se muestran las gráficas de la aproximación numérica de la fuente sobre la frontera Γ y la fuente ‘exacta’ f . De nuevo, la distribución del error en la fuente es similar a la distribución de los errores en la medición de los datos, de hecho es proporcional, lo cual muestra que soluciones se han obtenido en forma estable.

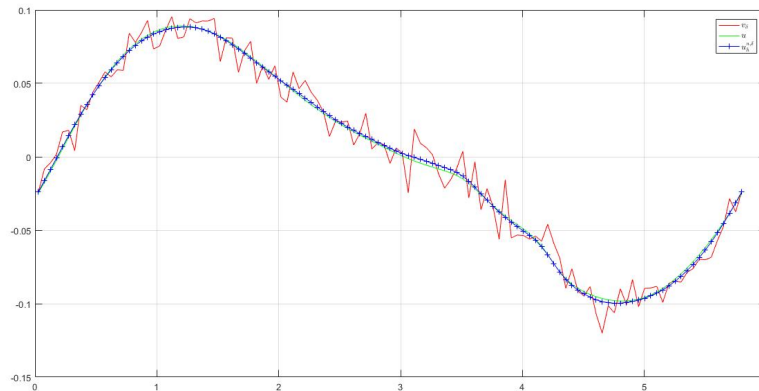


Figura 5.9: Gráfica de los datos \hat{v}_δ (línea roja), $u(\theta)$ (línea verde) y la aproximación numérica $u_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y cruz) en la frontera de la región irregular, con $\delta = 0.1$, $k = 10^2$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

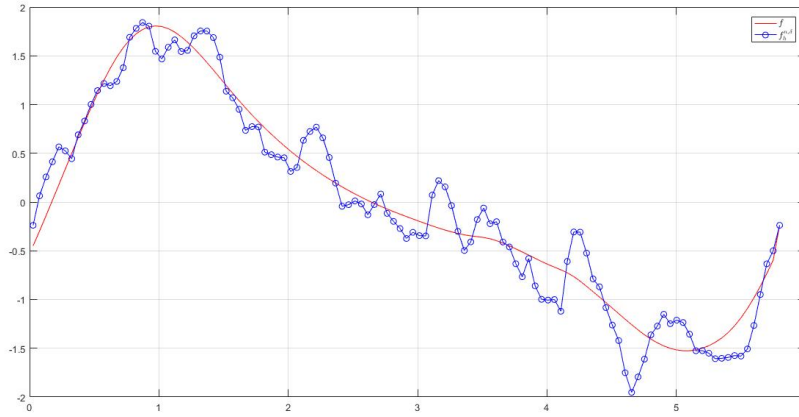


Figura 5.10: Comparación entre la fuente exacta $f(\theta)$ (línea continua) y la solución numérica $f_h^{n,\delta}(\theta)$ (línea y círculo) en la frontera de la región irregular Γ , con $\delta = 0.1$, $k = 10^2$ y $\epsilon = 10^{-3}$.

Hemos presentado el método de Lagrangiano aumentado para resolver el PIE, a partir de los resultados obtenidos con la metodología propuesta, se han podido obtener soluciones estables con pocas iteraciones aun cuando hay presencia de errores en los datos de entrada, esto demuestra la eficacia del método.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se consideró el problema inverso electroencefalográfico (PIE) como un problema de control óptimo; con este enfoque es posible recuperar soluciones estables y convergentes con métodos de regularización y algoritmos clásicos de optimización. En particular, nos basamos en el estudio de tres métodos: regularización/penalización, multiplicadores de Lagrange y Lagrangiano aumentado. El comportamiento de los métodos fue ilustrado con algunos ejemplos numéricos donde la fuente era conocida sobre dos tipos de regiones: una circular y otra irregular. El análisis de convergencia y estabilidad para cada modelo se llevó a cabo a partir de los errores relativos de las aproximaciones numéricas con respecto a las soluciones exactas. Cabe destacar que en todos los métodos se analizaron dos situaciones: la primera, donde se tienen los valores ‘exactos’ del EEG, es decir del potencial \hat{v} sobre Γ ; la segunda, cuando hay pequeñas perturbaciones en dichos valores, es decir para \hat{v}_δ con distintos valores de la perturbación δ .

Como ya se sabía [7], el método de penalización permite recuperar soluciones convergentes y es un método estable ante perturbaciones en los datos de entrada: las soluciones numéricas se obtienen con un error proporcional al ‘ruido’ introducido en los datos. El método de penalización en realidad es equivalente a un método de regularización, como se demostró en el desarrollo del trabajo de tesis.

Con el objeto de explorar nuevos métodos de solución, se propuso un método de multiplicadores de Lagrange, el cual da origen a un problema de punto-silla, el cual es resuelto en forma iterativa mediante un algoritmo de gradiente conjugado, en donde los subproblemas elípticos en cada iteración se resolvieron numéricamente mediante el método de los elementos finitos. El procedimiento resultante proporciona soluciones convergentes, pero no es estable ante perturbaciones en los datos de entrada (el EEG), por lo que es necesario utilizar alguna técnica de estabilización.

Para estabilizar el método de multiplicadores de Lagrange se propuso agregar un término de penalización, obteniendo el método de Lagrangiano aumentado, el cual se puede ver como una combinación de los dos métodos anteriores. El nue-

vo método efectivamente produce soluciones numéricas convergentes, además de que es estable ante perturbaciones en los datos de entrada. Cabe aclarar que el método de Lagrangiano aumentado no es propiamente un método de penalización, pues no es necesario un valor muy grande del parámetro k , debido a que restricción presente en el problema de control es forzada de antemano con la introducción del multiplicador de Lagrange. Es decir, una 'buena' solución numérica depende también del cálculo correcto del multiplicador λ y ya no es tan crítico el valor del parámetro k .

Contrastando los tres métodos, de entrada podemos descartar el método de multiplicadores de Lagrange debido a que no proporciona soluciones estables respecto a perturbaciones en los datos. Por el contrario el método de penalización y el método de Lagrangiano aumentado son adecuados para resolver el problema inverso electroencefalográfico, debido que ambos generan métodos numéricos convergentes y también son estables respecto a perturbaciones en los datos. De acuerdo a los resultados numéricos para los ejemplos presentados en este trabajo, cada uno tiene sus ventajas y desventajas, por lo que se recomienda utilizar cualquiera de los dos, dependiendo de si se está interesado en la eficiencia computacional o bien en la precisión de los resultados numéricos. Ambos métodos están relacionados ya que resuelven dos subproblemas elípticos del mismo tipo en cada iteración del proceso iterativo, siendo el método de multiplicadores de Lagrange un método más elaborado en donde también debe calcularse el multiplicador asociado a las restricciones. Sin embargo, en este caso no es necesario un procedimiento especial para escoger el parámetro k cómo si lo es en el caso del método de penalización, además de que produce mejores soluciones numéricas a costa de un mayor costo de cómputo ya que requiere mayor número de iteraciones y más memoria cuando éste se programan en forma secuencial (sin el empleo de paralización o procedimientos de aceleración).

En resumen, las aportaciones de este trabajo son básicamente las siguientes:

1. Empleo de técnicas de modelación matemática para el estudio y solución de un problema de interés práctico mediante la combinación de ecuaciones diferenciales parciales, análisis funcional, análisis numérico, optimización y cómputo. Ilustración de las técnicas de control en EDP y regularización de problemas inversos.
2. Estudio exhaustivo sobre el método de penalización/regularización para resolver el problema inverso electroencefalográfico (PIE). En particular, se logró establecer una mejor formulación matemática y justificación de los métodos variacionales para resolver el PIE.
3. Exploración de una nueva metodología basada en multiplicadores de Lagrange para el PIE, la cual finalmente concluyó en el método de Lagrangiano aumentado, más preciso pero con mayor costo computacional.

4. Elaboración de códigos computacionales para cada una de los métodos propuestos que servirán como base para trabajos futuros en el tema.

Finalmente mencionaremos varios aspectos que pensamos son una continuación natural del presente trabajo:

1. Aplicación de la metodología a casos en que la región ω donde actúa la fuente sea un subconjunto propio de la región completa Ω .
4. Introducción de un método para proyectar funciones cuadrado integrales sobre funciones armónicas definidas sobre el subdominio ω . Aplicación a casos en los que el subdominio ω es casi puntual o formado por varias regiones semi-puntuales.
3. Incorporación de los métodos estadísticos (Bayesianos primordialmente) para cuantificar la incertidumbre asociada a los errores en las mediciones de los datos. En particular, cuantificación de incertidumbre inversa para estimar la discrepancia entre el experimento y el modelo matemático, así como estimar los parámetros en el modelo (conductividad, por ejemplo).
4. Generar y estudiar modelos de más de dos capas para representar la región de estudio: cuero cabelludo, cráneo, cerebro, etc. Mejorar los modelos en general tomando en cuenta éste y los anteriores aspectos.
5. Explorar otros métodos de discretización que permitan soluciones en tiempo real, principalmente para el caso tridimensional. Asimismo, explorar variantes de las técnicas de optimización que permitan acelerar el cálculo en el caso tridimensional e incorporar técnicas de super cómputo en las simulaciones (multigrid, paralelización, GPUs, etc).
6. Aplicación de los métodos y algoritmos al problema en dominios tridimensionales. Adaptación y aplicación de las técnicas y métodos a problemas reales para la detección de anomalías en el cerebro.

Bibliografía

- [1] Hass L. (2003), Hans Berger (1873?1941), Richard Caton (1842?1926), and electroencephalography, *Journal of Neurology Neurosurgery and Psychiatry*, 74(1): 9.
- [2] Lorent de Nó R. (1947). *A study of nerve physiology*. Studies from the Rockefeller Institute. New York: Rockefeller Institute, vol. 123. Ch 16.
- [3] Plonsey R. (1982). *The nature of the source of bioelectric and biomagnetic fields*. *Biophys J.* 39(3): 309-312.
- [4] Conde M. J. (2013). *El problema inverso electroencefalográfico para fuentes volumétricas y su desarrollo numérico en geometrías simples*. Tesis de Doctorado en Ciencias Matemáticas. Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la Benemerita Universidad Autónoma de Puebla, Junio del 2013.
- [5] Morin M., Oliveros J., Fraguera A., Gutiérrez M., Flores E. (2013). *Simplificación del problema inverso electroencefalográfico a una sola región homogénea con condición de Neumann nula*. *Revista Mexicana de Ingeniería Biomédica*, 34 (1), 41-51.
- [6] León-Velasco A., Glowinski R., Juárez-Valencia L. H. (2015). *On the Controllability of Diffusion Processes on the Surface of a Torus: A Computational Approach*. *Pacific Journal of Optimization*, vol. 11(4), 763–790.
- [7] Rojas Ramírez Belem I. (2015). *Problema inverso electroencefalográfico: estudio numérico del subproblema de detección de fuentes volumétricos*. Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana, Ciudad de México, México.
- [8] Glowinski R., Lions J. L. and He J. W. (2008). *Exact and approximate controllability for distributed parameter systems: A numerical approach*. Cambridge University Press, New York.
- [9] Glowinski R. (2003). *Finite element methods for incompressible viscous flow*. *Handbook of Numerical Analysis*, P. G. Ciarlet and J. L. Lions (Editors), North-Holland, Amsterdam, vol. 9, 3-1176
- [10] Brenner S., Ridgway S. (2008). *The mathematical theory of finite element methods*. Springer-Verlag, New York.

- [11] Mizohata S. (1973). *The Theory of Partial Differential Equations*. Cambridge University Press.
- [12] Ekeland I., Temam R. (1974). *Analyse Convexe et Problèmes Variationnels*. Paris, Dunod.
- [13] Fletcher R., Reeves C. M. (1964). *Function minimization by conjugate gradients*. *Comput. J.* 7, 149–154
- [14] Nocedal J., Wright S. J. (2006). *Numerical Optimization*. 2nd edition, Springer, New York.
- [15] Rockafellar R. T. (1970). *Convex Analysis*. Princeton, NJ: Princeton University Press.
- [16] Fletcher R. (1986). *Practical methods of optimization*. 2nd edition, John Wiley and Sons, New York.
- [17] Birkhoff G and Lynch R.E. (1989). *Numerical solution of elliptic problems*. SIAM Publications, Philadelphia, PA.
- [18] Hestenes M. (1969). *Multiplier and gradient methods*. *Optimization theory and Applications*, 4, 303–329.
- [19] Powell M. J. D. (1969). *A method for nonlinear constraints in minimization problems*, in R. Fletcher, Ed., Academic Press, London, U. K.