

**Máster en Ingeniería Matemática**

**2012 – 2015**

**Trabajo Fin de Máster**

# **Optimización y regularización para relaxometría de baja resolución en Resonancia Magnética Nuclear**

**Juan María Candal Vilariño**

**Fecha presentación:** Julio de 2015  
**Tutor:** Andrés Prieto Aneiros  
**Empresa:** Mestrelab Research



MESTRELAB RESEARCH  
Chemistry Software Solutions



Esta es una obra de acceso libre sujeta a licencia Reconocimiento 4.0 Internacional de CREATIVE COMMONS, que no permite el uso comercial de la obra original ni la generación de obras derivadas. Para ver una copia de esta licencia, visite <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>.



El código referido en esta obra se encuentra en el repositorio público GITHUB en disponible <https://github.com/xancandal/lr-nmr-analysis> con licencia de software libre BSD (acrónimo en inglés de “Berkeley Software Distribution”) de 3 cláusulas. Para ver una copia de esta licencia, visite [https://directory.fsf.org/wiki/License:BSD\\_3Clause](https://directory.fsf.org/wiki/License:BSD_3Clause).



Copyright (c) 2014-2015, Juan María Candal Vilariño.



La realización de esta memoria ha sido posible gracias al inconmensurable trabajo en cuanto a disponibilidad, predisposición, motivación y entrega de mi tutor, Andrés Prieto Aneiros, a quién agradezco todo cuanto ha hecho para llevar a cabo este Trabajo Fin de Máster. Agradezco también a Santiago Ponte de la empresa MESTRELAB RESEARCH por todas las jornadas de trabajo, así como al Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) por permitirme el empleo de su infraestructura.



# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Relaxometría LR-NMR . . . . .	1
1.2	Análisis de la señal . . . . .	2
1.3	El problema inverso . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Inversión de Laplace de LR-NMR</b>	<b>5</b>
2.1	Problema inverso discreto . . . . .	5
2.2	Análisis de condicionamiento . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Algoritmo de optimización</b>	<b>9</b>
3.1	El problema de optimización convexa . . . . .	9
3.2	Problema dual de Lagrange . . . . .	13
3.3	Condición de complementariedad . . . . .	15
3.4	Condiciones Karush-Kuhn-Tucker . . . . .	15
3.5	Barrera logarítmica . . . . .	16
3.6	Camino central . . . . .	17
3.7	Variables de holgura . . . . .	19
3.8	Problema de optimización asociado al problema CO2 . . . . .	20
3.9	Ecuaciones KKT modificadas . . . . .	21
3.10	Método de Newton . . . . .	23
3.11	Algoritmo PDCO . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Cálculo de la ILT por optimización convexa</b>	<b>27</b>
4.1	Problema de optimización . . . . .	27
4.2	Escalado . . . . .	30
4.2.1	Escalado de la matriz del sistema . . . . .	30
4.2.2	Escalado de la señal (primera opción) . . . . .	30
4.2.3	Escalado de la señal (segunda opción) . . . . .	31

<b>5</b>	<b>Validación del algoritmo PDCO</b>	<b>33</b>
5.1	Parámetros admisibles . . . . .	33
5.2	Cálculo del valor SNR . . . . .	34
5.3	Test preliminar . . . . .	34
5.4	Delta de Dirac como ILT . . . . .	43
5.5	Combinación lineal de deltas de Dirac como ILT . . . . .	46
5.6	Funciones gaussianas . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Resultados numéricos y Conclusiones</b>	<b>53</b>
6.1	Resultados numéricos . . . . .	53
6.1.1	Precisión . . . . .	55
6.1.2	Rango dinámico . . . . .	56
6.1.3	Potencia de resolución . . . . .	59
6.1.4	Tiempos de ejecución . . . . .	63
6.2	Conclusiones . . . . .	66
	<b>Bibliografía</b>	<b>71</b>

# Índice de figuras

1.1	Representación gráfica de las intensidades de las contribuciones de la señal con respecto a las constantes de decaimiento $T$ . La línea vertical coronada por un círculo marca la posición del periodo de muestreo. . . . .	3
2.1	Representación gráfica de los valores singulares de la matriz $KC$ . . . . .	7
5.1	Representación de una señal sin ruido y la señal original con un ruido blanco gaussiano de $2 \times 10^{-1}$ (gráfica (a)). Filtrado de la señal original con ruido mediante la media móvil de ocho puntos (gráfica (b)). . . . .	35
5.2	Representación de los últimos 1024 puntos de la señal y su recta de regresión lineal (gráfica (a)). Resultado de la resta de los últimos 1024 puntos de la media móvil de ocho puntos de la señal con ruido y su recta de regresión lineal (gráfica (b)). . . . .	35
5.3	Test donde la solución es proporcional a una delta de Dirac. (a) Decaimiento exponencial de la señal. (b) Solución aproximada utilizando el algoritmo PDCO sin regularización. . . . .	45
5.4	(a) Resultados obtenidos en el problema de la delta de Dirac usando PDCO sin regularización $L_1$ y con distintos valores de $\lambda_2$ , 0, $10^{-2}$ , $10^{-4}$ y $10^{-6}$ , correspondientes a las soluciones 1, 2, 3 y 4, respectivamente. (b) Resultados obtenidos en problema de la delta de Dirac usando PDCO sin regularización $L_2$ y con distintos valores de $\lambda_1$ , 0, $10^{-2}$ , $10^{-4}$ y $10^{-6}$ , correspondientes a las soluciones 5, 6, 7 y 8, respectivamente. (c) Resultados obtenidos en problema de la delta de Dirac usando PDCO con regularización $\lambda_1$ y $\lambda_2$ con distintos pares de valores $(\lambda_1, \lambda_2)$ : $(10^{-2}, 10^{-8})$ , $(10^{-4}, 10^{-6})$ , $(10^{-6}, 10^{-4})$ y $(10^{-8}, 10^{-2})$ , correspondientes a las soluciones 9, 10, 11 y 12, respectivamente. . . . .	46

5.5	Resultados numéricos obtenidos en el problema de la delta de Dirac usando PDCO sin emplear regularización $L_1$ y $L_2$ y con distintos valores de $\Delta t$ , $(\Delta T)_j$ (y sus correspondientes valores de $m$ y $n$ ). . . . .	47
5.6	(a) Reconstrucción de la señal original a partir de la solución aproximada calculada. (b) Solución aproximada calculada por el algoritmo PDCO. . . . .	48
5.7	Solución aproximada (izquierda) y residuo representado frente al número de iteraciones (derecha) obtenidos en el test donde la solución es la combinación lineal de tres funciones gaussianas empleando PDCO con regularización $L_1$ y $L_2$ (CO), solo regularización $L_2$ (L2), y la señal simulada original (SG), utilizando un conjunto de puntos $(\Delta T)_j$ , $j = 1, \dots, n$ espaciados linealmente entre $10^{-4}$ y $10^0$ . . . . .	50
5.8	Resultados numéricos obtenidos en el test cuya solución exacta es la combinación lineal de tres funciones gaussianas, donde la discretización viene dada por un conjunto de puntos logarítmicamente espaciados, empleando PDCO con regularización $L_1$ y $L_2$ (CO), PDCO con solo regularización $L_2$ (L2), y la señal simulada original (SG). (a) Solución aproximada. (b) Señal exacta y señal reconstruida a partir de la aproximación numérica. (c) Residuo de la aproximación numérica y rango de iteraciones requeridas por el algoritmo PDCO. . . . .	51
6.1	Representación gráfica en el dominio del tiempo de la señal 1 (S1), la señal 2 (S2), la señal 3 (S3), la señal 4 (S4) y la señal 5 (S5) para un valor de SNR de 413, 308, 285, 298 y 308, respectivamente. . . . .	56
6.2	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR = 17395 y $n = 2^5$ . . . . .	57
6.3	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR = 17395 y $n = 2^6$ . . . . .	57
6.4	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR = 17395 y $n = 2^7$ . . . . .	58

6.5	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR = 17395 y $n = 2^8$ . . . . .	58
6.6	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 15183. . . . .	59
6.7	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 1973. . . . .	59
6.8	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 535. . . . .	60
6.9	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 413. . . . .	60
6.10	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 19617. . . . .	61
6.11	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 1722. . . . .	61
6.12	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 593. . . . .	62
6.13	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 298. . . . .	62
6.14	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 17395. . . . .	63

6.15	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 1722. . . . .	63
6.16	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 583. . . . .	64
6.17	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 285. . . . .	64
6.18	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 19617. . . . .	65
6.19	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 1722. . . . .	65
6.20	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 593. . . . .	66
6.21	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 298. . . . .	66
6.22	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 19617. . . . .	67
6.23	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 1722. . . . .	67
6.24	Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 593. . . . .	68

6.25 Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 298. . . . .	68
---	----



# Índice de tablas

5.1	Resultados obtenidos sin aplicar ningún tipo de escalado en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	37
5.2	Resultados obtenidos escalando la matriz del sistema (véase Sección 4.2.1) en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	38
5.3	Resultados obtenidos escalando el vector del sistema con la primera opción (véase Sección 4.2.2) en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	39
5.4	Resultados obtenidos escalando el vector del sistema con la segunda opción (véase Sección 4.2.3) en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	40
5.5	Resultados obtenidos escalando el vector con la primera opción y la matriz del sistema (véase Secciones 4.2.1 y 4.2.2) en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	41
5.6	Resultados obtenidos escalando el vector con la segunda opción y la matriz del sistema (véase Secciones 4.2.1 y 4.2.3) en la resolución del sistema lineal $Ax = b$ con el algoritmo PDCO, cuando $A$ y $x$ se generan de forma aleatoria. . . . .	42
5.7	Valores de $\Delta t$ , $(\Delta T)_j$ y los correspondientes valores de $m$ y $n$ asociados a las soluciones a-i que se presentan en la Figura 5.5. . . . .	45
6.1	Valores de $\mu_j$ para cada una de las tres contribuciones gaussianas de los cinco tipos de soluciones exactas. . . . .	54
6.2	Valores de SNR (Signal-to-Noise Ratio) usado para cada una de los cinco tipos de soluciones exactas. . . . .	54

6.3	Valores de $a$ y $b$ , que determinan el intervalo de discretización $T_j \in [10^a, 10^b]$ , empleados para cada una de las combinaciones señal-ruido analizadas. . . . .	55
6.4	Tiempos de ejecución para los distintos test en los tres entornos de cálculo del SVG. Cada uno de los tiempos de ejecución se corresponde con la media aritmética de diez ejecuciones. . . . .	69

# Capítulo 1

## Introducción

En este capítulo, se introduce el problema que aborda el presente Trabajo Fin de Máster, mediante una breve introducción a la Relaxometría de baja resolución en Resonancia Magnética Nuclear (en inglés “Low Resolution - Nuclear Magnetic Resonance” o LR-NMR), y de como el análisis de este tipo de señales involucra el cálculo de transformadas de Laplace inversas.

### 1.1 Relaxometría LR-NMR

La Resonancia Magnética Nuclear (NMR) involucra fenómenos físicos en los que los núcleos atómicos, cuando se les aplica un campo magnético, absorben y reemiten radiación electromagnética a frecuencias de resonancia específicas que dependen de la intensidad del campo magnético local y del momento magnético nuclear. Estas frecuencias de resonancia que exhiben los núcleos atómicos (formando parte de una molécula) son directamente proporcionales a la intensidad del campo magnético, de acuerdo con la ecuación de la frecuencia de precesión de Larmor [6].

La implementación experimental de la NMR generalmente implica los siguientes pasos secuenciales: (i) la alineación (polarización) de los momentos magnéticos de espín nucleares mediante un campo magnético homogéneo en intensidad y dirección espacial; (ii) la perturbación de esta alineación mediante el empleo de un tren de pulsos electromagnéticos, por ejemplo la secuencia de pulsos CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill) [8]. Al conjunto de procesos por los que la magnetización nuclear de los núcleos atómicos recupera el equilibrio se denomina relajación, y la disciplina que se encarga del estudio y la medida experimental de las variables de relajación (como son las constantes de decaimiento) se denomina Relaxometría. En concreto, la Relaxometría de baja resolución en Resonancia

Magnética Nuclear (LR-NMR) utiliza un rango de intensidades del campo magnético entre 10 mT y 1 T, que se corresponde a un rango de frecuencias Larmor entre 425 kHz y 42,5 MHz, para el caso de la oscilación de un protón [7].

En general la relaxometría LR-NMR es una herramienta muy útil para la caracterización de componentes de materiales complejos [1]. Así mismo, tiene aplicaciones diversas en investigaciones no destructivas como por ejemplo: la medida de la porosidad de materiales; la cuantificación de la relación de contenidos de metabolitos, en aceites, aceites-agua, o petróleo-agua; al calcular la permeabilidad de materiales o rocas, para detectar alimentos que se deterioran con el tiempo, o para comprobar si los alimentos desarrollan algún tipo de toxina con el paso del tiempo [7].

## 1.2 Análisis de la señal

La obtención de datos de relaxometría LR-NMR se realiza mediante el uso de espectrómetros. En los casos más simples, se mide un decaimiento exponencial que es descrito por la relación

$$s(t) = I \exp(-t/T),$$

donde  $s(t)$  es la señal medida,  $t$  es el tiempo de medida,  $T$  es la constante de decaimiento y  $I$  es la amplitud inicial de la fuerza electromotriz inducida en el espectrómetro.

Una vez obtenida la señal de una muestra mediante un espectrómetro NMR, el objetivo es hallar, mediante el análisis de la señal medida, una aproximación fiable de las contribuciones y las constantes de decaimiento asociadas a cada componente de la muestra. Estos cálculos se ven dificultados por la naturaleza de la señal medida ya que ésta, además de contener la suma de las contribuciones de cada componente, también posee ruido tanto experimental (de origen natural) como derivado del instrumento de medida.

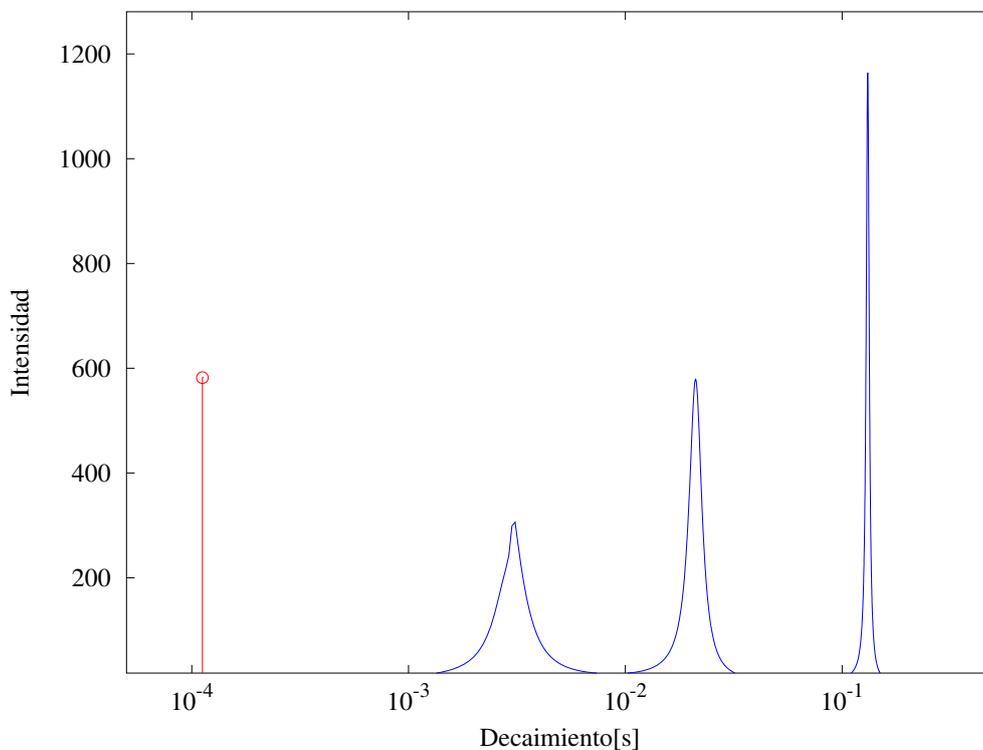
Si la muestra tiene sólo un tipo de especies entonces la señal medida obedece a un solo patrón de decaimiento exponencial. En cambio, si la muestra está compuesta por varias especies diferentes, la señal obtenida contiene información de todas las especies, siendo cada especie responsable de una contribución en la señal medida.

Un ejemplo de este análisis para una combinación de especies en una muestra se representa en la Figura 1.1. En esta figura se representa una aproximación de las

amplitudes (también denominadas intensidades) de las contribuciones de la señal con respecto a las constantes de decaimiento  $T$ . Esta figura incluye además una línea vertical coronada por un círculo con la que se señala el periodo de muestreo de la señal. Todas las intensidades obtenidas deben de ser positivas y estar a la derecha del periodo de muestreo para que sean validas, y según indicaciones de MESTRELAB RESEARCH, todas las intensidades positivas relevantes de la muestra deben ser entre 1.5 y 3 veces en escala logarítmica mayores que el periodo de muestreo. Esto es, la posición del pico  $T^*$  situado más a la izquierda en la Figura 1.1 debe satisfacer la relación

$$\log_{10}(\Delta t) \leq \log_{10}(T^*) - 1.5,$$

donde  $\Delta t$  denota el periodo de muestreo.



**Figura 1.1:** Representación gráfica de las intensidades de las contribuciones de la señal con respecto a las constantes de decaimiento  $T$ . La línea vertical coronada por un círculo marca la posición del periodo de muestreo.

Conceptualmente, la determinación de estas contribuciones sería equivalente a la aplicación de una transformada inversa de Laplace (en inglés “Inverse Laplace Transform” o ILT) a la señal recogida por el espectrómetro.

### 1.3 El problema inverso

Los problemas inversos y sus soluciones son de gran importancia en muchas disciplinas. Los campos de aplicación incluyen imágenes médicas y biológicas, radar, imágenes sísmicas, pruebas no destructivas, etc. [7]. Un problema inverso está típicamente relacionado con un sistema físico del que solo pueden tomarse mediciones indirectas  $s$  de alguna función  $f$  desconocida. La relación entre  $s$  y  $f$  se determina por las características del sistema de medición y el modelo matemático que se utiliza.

La configuración general de un problema inverso en el dominio de tiempo continuo es como sigue:

$$s(t) = K(f(t)) + \epsilon(t), \quad (1.1)$$

donde  $K$  es un operador que modela la acción del sistema de medición y  $\epsilon(t)$  es el término de error. En el caso de LR-NMR, la señal medida  $s(t)$ , además de contener la suma de las contribuciones de cada componente, contiene ruido experimental (de origen natural) y derivado del instrumento de medida (ruido instrumental).

La ecuación (1.1) se puede utilizar para calcular directamente la señal esperada  $s(t)$  a partir de una intensidad conocida  $f$ . Sin embargo, no proporciona un método directo para estimar la intensidad  $f$  a partir de una función de medición  $s(t)$ . Este último problema será al que nos referiremos como problema inverso y su solución requerirá herramientas de optimización convexa que revisaremos en el próximo capítulo.

# Capítulo 2

## Inversión de Laplace de LR-NMR

El cálculo de las intensidades discretas asociadas a las componentes de una señal de relajación es un problema mal condicionado, lo que significa que un pequeño error en los datos iniciales puede resultar en errores mucho mayores en la solución. El método numérico más comúnmente implementado para hacer frente a este tipo de problemas se basa en la regularización de Tikhonov (o regularización  $L_2$ ) [1]. El principal inconveniente de la regularización de Tikhonov es su tendencia a sobreesuavizar la solución, y por lo tanto, este método es incapaz de detectar los picos de baja intensidad o resolver entre dos o más picos vecinos en la constante de decaimiento. Es por este motivo por lo que, se empleará una herramienta de optimización convexa sofisticada, como es el caso del método interior primal-dual estudiado en el Capítulo 3.

### 2.1 Problema inverso discreto

La transformada inversa de Laplace es un problema mal condicionado, cuya inversión directa es inestable en presencia de ruido o errores espúreos (véase [1]). Más precisamente, las contribuciones  $f(T)$  satisfacen

$$s(t) = \int_0^{\infty} \exp(-t/T) f(T) dT + \epsilon(t), \quad (2.1)$$

siendo  $s(t)$  la señal de relajación medida en tiempo  $t$  (tiempo de adquisición de la señal),  $T$  denota la constante temporal de decaimiento y  $\epsilon(t)$  es el error de las mediciones (que se considerará ruido aleatorio Gaussiano e independiente en cada instante de tiempo).

De la integral (2.1) se deduce que la relación entre  $f$  y  $s$  sin ruido puede ser visto como una ecuación integral de Fredholm de primera clase [10],

$$s(t) = \int_0^{\infty} K(t, T) f(T) dT, \quad (2.2)$$

donde  $K(t, T) = \exp(-t/T)$  se denomina núcleo de la transformación, los cuales típicamente involucran problemas mal condicionados.

Introducimos los datos medidos en la señal por  $s_1 = s(t_1), \dots, s_m = s(t_m)$ , siendo  $t_1, \dots, t_m$  los tiempos de adquisición de la señal. De la misma forma, los valores discretos de la intensidad los denotamos por  $f_1 = f(T_1), \dots, f_n = f(T_n)$ , siendo  $T_1, \dots, T_n$  los tiempos de relajación discretos. Construimos así los vectores discretos  $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$  y  $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_m)^T$ .

A continuación, se aproxima la integral (2.2) mediante una suma de Riemann de partición  $0 = T_0 < T_1 < T_2 < \dots < T_n$ , para obtener la versión truncada discreta de la transformada de Laplace (2.2) dada por

$$s_l = \sum_{j=1}^n f(T_j) \exp(-t_l/T_j) (\Delta T)_j, \quad l = 1, \dots, m, \quad (2.3)$$

siendo  $(\Delta T)_j = T_j - T_{j-1}$  con  $j = 1, \dots, n$ , y  $t_l = l\Delta t$  con  $l = 1, \dots, m$ , donde se ha supuesto que los tiempos de adquisición de datos  $t_l, l = 1, \dots, m$  son equiespaciados en tiempo, con periodo  $\Delta t$ . Por tanto, se obtiene con esta discretización el sistema lineal de  $m$  ecuaciones con  $n$  incógnitas

$$\mathbf{s} = (KC)\mathbf{f}, \quad (2.4)$$

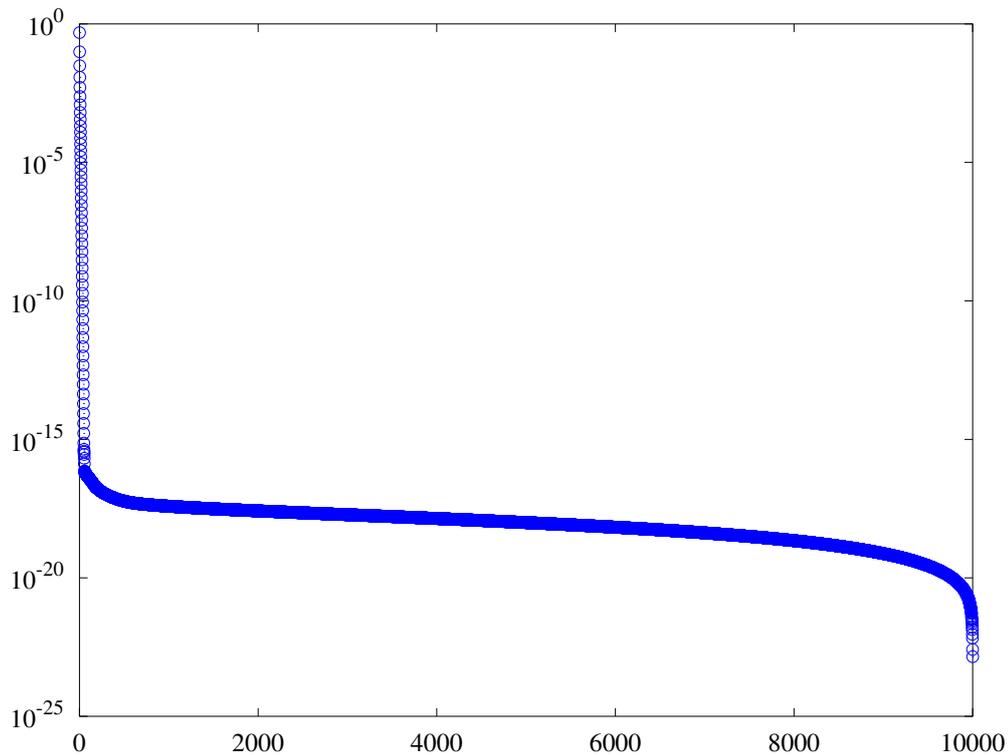
donde  $K$  es una matriz de tamaño  $m \times n$  tal que  $K_{lj} = \exp(-t_l/T_j)$  y la matriz  $C$  se define como la matriz diagonal definida positiva, tal que  $(C)_{jj} = (\Delta T)_j$  para  $j = 1, \dots, n$ .

## 2.2 Análisis de condicionamiento

Con el fin de estudiar el condicionamiento del sistema lineal (2.4) en un caso particular, se consideran los parámetros  $m = 16384$ ,  $n = 10000$ ,  $\Delta t = 10^{-4}$  y que se satisface  $T_j - T_{j-1} = \Delta t$  para todo  $j = 1, \dots, n$ . Al calcular el condicionamiento de la matriz  $KC$ , se obtiene un valor igual a  $1.7052 \times 10^{22}$ , lo que ilustra que se está ante un problema muy mal condicionado.

Para ilustrar gráficamente el condicionamiento del sistema matricial  $s = (KC)f$ , se puede utilizar también la descomposición en valores singulares de la matriz  $KC$ . En la Figura 2.1 se representan los valores singulares de  $KC$ , construida con los mismos parámetros considerados anteriormente. El condicionamiento de la matriz  $KC$  se puede calcular como el cociente entre el mayor y el menor valor singular de la matriz, de manera que se obtiene

$$\text{cond}(KC) = \frac{0.4858}{2.8489 \times 10^{-23}} = 1.7052 \times 10^{22}.$$



**Figura 2.1:** Representación gráfica de los valores singulares de la matriz  $KC$ .

La magnitud del valor del condicionamiento confirma que estamos ante un problema muy mal condicionado. Por lo tanto, si el método numérico utilizado para filtrar o suavizar el ruido provoca una mínima deformación en la forma de la señal medida se podría obtener resultados poco precisos. Hay que tener especial cuidado al tratar de resolver el sistema lineal (2.4), ya que métodos estándar pueden llevar a resultados erróneos ya que diferentes vectores  $f$  podría corresponderse a casi los mismos valores del vector  $s$ .

Para investigar la estrategia más idónea para resolver (2.4) se utilizará un método numérico que sea preciso a pesar de la presencia de errores en el vector  $\mathbf{s}$  y debe de tener una precisión mínima que permita determinar una aproximación correcta de  $\mathbf{f}$ .

Un enfoque típico es usar métodos de regularización, que obligan a la solución  $\mathbf{f}$  a ser solución de un problema de optimización. A menudo se emplea la regularización  $L_2$  o de Tikhonov [1], donde el sistema  $\mathbf{s} = (KC)\mathbf{f}$  es penalizado de acuerdo con el siguiente problema de optimización:

$$\mathbf{f} = \underset{\mathbf{u}_j \geq 0, j=1, \dots, n}{\arg \min} \|\mathbf{s} - (KC)\mathbf{u}\|_2^2 + \lambda_2 \|\mathbf{u}\|_2^2, \quad (2.5)$$

donde  $\lambda_2$  es el peso de la regularización en norma  $L_2$ . El principal inconveniente de la regularización de Tikhonov es su tendencia a sobresuavizar la solución y por lo tanto, la incapacidad para detectar rápidas fluctuaciones en los coeficientes en el vector  $\mathbf{f}$ .

Cabe señalar que la restricción de no negatividad en (2.5) hace que el problema sea más difícil de resolver. Sin esta limitación, un método de mínimos cuadrados podría ser aplicado. En ese caso, la solución  $\mathbf{f}$  obtenida satisfaría la siguiente ecuación (véase [1]):

$$((KC)^T(KC) + \lambda_2 I) \mathbf{f} = (KC)^T \mathbf{s}. \quad (2.6)$$

Sin embargo, procediendo de esa forma no hay garantía de que  $\mathbf{f}$  posea todos sus coeficientes positivos. En la práctica, con la solución de (2.6), no es posible truncar los valores negativos a cero de forma precisa [1]. Para resolver la ecuación (2.5) (con esta otra regularización) de manera óptima, necesitaremos herramientas de optimización más sofisticadas, como es el método interior primal-dual [2] estudiado en el Capítulo 3.

# Capítulo 3

## Algoritmo de optimización

En este capítulo describiremos el tipo de problemas que resuelve el algoritmo de optimización PDCO (acrónimo en inglés de “Primal-Dual interior method for Convex Objectives”), así como dar una visión general de los métodos de punto interior para problemas de optimización convexa con restricciones. Esta descripción se basa en los capítulos 2-5 y 11 de la monografía [2].

### 3.1 El problema de optimización convexa

El algoritmo de optimización convexa PDCO [9] está diseñado para resolver problemas de optimización convexa con restricciones de la forma

CO1	minimizar $\phi(\mathbf{x})$ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
	sujeta a $f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p,$ $(\mathbf{b} - A\mathbf{x})_j = 0, \quad j = 1, \dots, m,$

donde  $p$  y  $m$  son el número de restricciones de desigualdad e igualdad respectivamente,  $A$  una matriz de tamaño  $m \times n$  dada como dato y  $\mathbf{b}$  un vector de tamaño  $n$  dado también como dato. El problema CO1 describe el problema de encontrar el vector  $\mathbf{x}$  tal que minimice la función objetivo  $\phi(\mathbf{x})$  entre aquellos  $\mathbf{x}$  que satisfagan las restricciones del problema.

Denominaremos  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  como la variable de optimización, siendo  $n$  la dimensión del espacio del vector incógnita. Supondremos que la función objetivo  $\phi(\mathbf{x})$  es una función convexa y dos veces diferenciable. Las desigualdades  $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$  para  $i = 1, \dots, p$  son las restricciones de desigualdad y las funciones convexas correspondientes  $f_i$  son las funciones de las restricciones de desigualdad. Las igualdades  $\tilde{h}_j(\mathbf{x}) = (\mathbf{b} - A\mathbf{x})_j = 0$  para  $j = 1, \dots, m$ , siendo  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  con

rango  $A = m < n$  y  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ , son las restricciones de igualdad. Las funciones afines correspondientes  $\tilde{h}_j$  son las funciones de las restricciones de igualdad. Las hipótesis sobre el tamaño de  $A$  y su rango significan que hay menos restricciones de igualdad que variables, y que las restricciones de igualdad son linealmente independientes.

Además, puesto que se trata de un problema de optimización convexa, la utilización del algoritmo PDCO requiere:

- La función objetivo  $\phi(\mathbf{x})$  tiene que ser convexa.
- Las funciones de las restricciones de desigualdad  $f_i$ , con  $i = 1, \dots, p$ , tienen que ser convexas.
- Las funciones de las restricciones de igualdad  $\tilde{h}_j$ , con  $j = 1, \dots, m$ , deben ser afines.

Veamos en detalle la definición de cada uno de estos requisitos:

Las funciones afines escalares vienen dadas por expresiones de la forma (véase [3])

$$f(x_1, \dots, x_n) = A_1x_1 + \dots + A_nx_n + b, \quad (3.1)$$

donde  $A_k$ , con  $k = 1, \dots, n$  y  $b$  son constantes.

Para definir las funciones convexas debemos introducir antes lo que se entiende por conjunto convexo. Un conjunto  $\mathcal{C}$  es convexo si el segmento que une dos puntos cualesquiera de  $\mathcal{C}$  está contenido en  $\mathcal{C}$ , esto es, si para cualquier  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{C}$  se satisface  $\theta\mathbf{x}_1 + (1 - \theta)\mathbf{x}_2 \in \mathcal{C}$  para todo  $\theta \in [0, 1]$ .

Teniendo esto en cuenta, una función  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  es convexa si su dominio  $\text{Dom } f$ , es un conjunto convexo y si para todo  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{Dom } f$  y  $\theta$  tal que  $0 \leq \theta \leq 1$ , se cumple que

$$f(\theta\mathbf{x} + (1 - \theta)\mathbf{y}) \leq \theta f(\mathbf{x}) + (1 - \theta)f(\mathbf{y}). \quad (3.2)$$

Toda función afín (3.1) siempre cumplirá la anterior igualdad, por lo que toda función afín (y por lo tanto también las funciones lineales) serán también convexas.

Existen operaciones que preservan la convexidad de funciones, que nos permiten construir nuevas funciones convexas (véase [2]):

- (a) Si  $f$  es una función convexa y  $\alpha \geq 0$ , entonces el producto  $\alpha f$  es también una función convexa.
- (b) Si  $f_1$  y  $f_2$  son funciones convexas, entonces también lo es su suma  $f_1 + f_2$ . De manera que combinando ambas propiedades se tiene que una combinación lineal de funciones convexas de la forma

$$f = w_1 f_1 + \dots + w_m f_m, \quad (3.3)$$

con  $w_1, \dots, w_m$  constantes positivas también es convexa.

- (c) Toda norma en  $\mathbb{R}^n$  es convexa.

Si además  $f$  es diferenciable, es decir, su gradiente  $\nabla f$  existe en cada punto del interior de  $\text{Dom } f$ , entonces  $f$  es convexa si y solo si (véase [2])  $\text{Dom } f$  es convexo y se satisface

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}),$$

para todo  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{Dom } f$ .

Teniendo en cuenta esta caracterización de las funciones convexas diferenciables, si denotamos por  $\mathcal{X}$  al conjunto factible de CO1, esto es,

$$\mathcal{X} = \{ \mathbf{x} \mid f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m \},$$

entonces  $\mathbf{x}$  es óptimo si y sólo si (véase [2])  $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$  y

$$\nabla \phi(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq 0, \quad (3.4)$$

para todo  $\mathbf{y} \in \mathcal{X}$ .

Así mismo, de la definición (3.1) es inmediato deducir que  $\tilde{h}_j(\mathbf{x}) = (\mathbf{b} - A\mathbf{x})_j$  para  $j = 1, \dots, m$  es una función afín.

Con el fin de permitir problemas de mínimos cuadrados y tener más estabilidad en la resolución del problema, el algoritmo PDCO permite resolver el siguiente problema regularizado [9]:

CO2	minimizar $\phi(\mathbf{v}) + \frac{1}{2} \ D_2 \mathbf{v}\ _2^2 + \frac{1}{2} \ \mathbf{r}\ _2^2$ sobre $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^m$ sujeta a $f_i(\mathbf{v}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p,$ $(\mathbf{b} - A\mathbf{v} - D\mathbf{r})_j = 0, \quad j = 1, \dots, m,$
-----	---

siendo  $D_2$  y  $D$  matrices diagonales definidas positivas de tamaño  $n \times n$  y  $m \times m$ , respectivamente, y  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^m$  el vector residual.

Con el objetivo de simplificar la escritura del problema CO2 introducimos la siguiente notación:  $\mathbf{x} = (\mathbf{v}, \mathbf{r}) \in \mathbb{R}^{m+n}$

$$f_0(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{v}) + \frac{1}{2}\|D_2\mathbf{v}\|_2^2 + \frac{1}{2}\|\mathbf{r}\|_2^2,$$

$$h_j(\mathbf{x}) = \tilde{h}_j(\mathbf{v}) - (D\mathbf{r})_j = (\mathbf{b} - A\mathbf{v} - D\mathbf{r})_j = 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

y abusando de la notación, denotaremos por  $n$  al número de incógnitas en el vector solución  $\mathbf{x}$ . De este modo, sin pérdida de generalidad, podemos reescribir el problema CO2 en forma más simplificada como sigue:

CO3	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} && f_0(\mathbf{x}) \\ & \text{sujeta a} && f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ & && h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$
-----	--

donde  $p$  es el número de restricciones de desigualdad,  $m$  es el número de restricciones de igualdad y  $n$  es el número de incógnitas en el vector solución.

El conjunto de puntos para los cuales la función objetivo  $f_0(\mathbf{x})$  y todas las funciones de las restricciones de CO3 están definidas se denomina dominio del problema de optimización  $\mathcal{D}$ , dado por

$$\mathcal{D} = \bigcap_{i=1}^p \text{Dom } f_i \cap \bigcap_{j=1}^m \text{Dom } h_j.$$

Un punto  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$  es factible si este satisface todas las restricciones de CO3. Además, el problema CO3 se dice factible si existe al menos un punto factible, de lo contrario se dice no factible. El conjunto de todos los puntos factibles se llama conjunto factible (véase [2]).

El valor óptimo  $p^*$  del problema CO3 viene dado por:

$$p^* = \inf \{ f_0(\mathbf{x}) \mid f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m \}.$$

Permitimos a  $p^*$  tomar valores extendidos  $\pm\infty$ . Si el problema no es factible, entonces  $p^* = \infty$ . Si existe una sucesión de puntos factibles  $\{\mathbf{x}_k\}$  para  $k \in \mathbb{N}$  tal que  $f_0(\mathbf{x}_k) \rightarrow -\infty$  cuando  $k \rightarrow \infty$  entonces  $p^* = -\infty$ . En ese caso, se dice que el problema CO3 no tiene límites inferiores.

Se dice que  $\mathbf{x}^*$  es un punto óptimo, o soluciona el problema CO3 si  $\mathbf{x}^*$  es factible y  $f_0(\mathbf{x}^*) = p^*$ . El conjunto de puntos óptimos es el conjunto óptimo

$$X_{\text{op}} = \{f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad f_0(\mathbf{x}) = p^*\}.$$

Un punto factible  $\mathbf{x}$  es localmente óptimo si minimiza  $f_0$  sobre puntos cercanos en el conjunto factible, es decir, si existe  $R > 0$  tal que:

$$f_0(\mathbf{x}) = \inf \{f_0(\mathbf{w}) \mid f_i(\mathbf{w}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ h_j(\mathbf{w}) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \|\mathbf{w} - \mathbf{x}\|_2 \leq R\}.$$

El término globalmente se suele utilizar para *óptimo* para distinguir entre *localmente óptimo* y *óptimo*. De aquí en adelante, óptimo significará globalmente óptimo. Una propiedad fundamental de los problemas de optimización convexa es que cualquier óptimo local es también (globalmente) óptimo (véase [2]).

## 3.2 Problema dual de Lagrange

La idea básica en la dualidad de Lagrange es considerar las restricciones de CO3 aumentando la función objetivo con una suma ponderada de las funciones de las restricciones.

Se define el Lagrangiano  $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$  como

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m y_j h_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p z_i f_i(\mathbf{x}),$$

con  $\text{Dom } L = \mathcal{D} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$ , siendo los vectores  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)^T$  y  $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_p)^T$  las variables duales o vectores multiplicadores de Lagrange.

A continuación, se define la función dual de Lagrange (o solo función dual)  $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$  como el ínfimo de  $L$  sobre  $\mathbf{x}$ , para  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$  y  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^p$  fijados, esto es,

$$g(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \left( f_0(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m y_j h_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p z_i f_i(\mathbf{x}) \right).$$

La función dual  $g$  produce límites inferiores para el valor óptimo  $p^*$  de CO3. Es decir, para cualquier  $\mathbf{z}$  tal que  $z_i \geq 0$  para  $i = 1, \dots, p$  y cualquier  $\mathbf{y}$  fijados se tiene que  $g(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \leq p^*$ .

De hecho, para cada par  $(\mathbf{y}, \mathbf{z})$ , la función dual de Lagrange proporciona una cota inferior para  $p^*$ . De esta manera, la mejor cota inferior posible del problema CO3 se puede calcular a partir de la función dual mediante el denominado problema dual de Lagrange:

$\text{CO}_{\text{dual}}$	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^p}{\text{minimizar}} && -g(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \\ & \text{sujeta a} && z_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, p. \end{aligned}$
---------------------------	--

Con respecto a  $\text{CO}_{\text{dual}}$ , el problema CO3 suele llamarse problema primal. Así mismo,  $\text{CO}_{\text{dual}}$  es un problema de optimización convexa, ya que la función objetivo a maximizar es convexa y las restricciones son convexas, lo cual se cumplirá sea o no convexo el problema primal (véase [2]). Además, se verifica que el valor óptimo del problema dual de Lagrange  $d^*$  es tal que  $d^* \leq p^*$ , lo cual se cumple incluso si el problema original es no convexo. Este hecho se denomina dualidad débil entre los problemas CO3 y  $\text{CO}_{\text{dual}}$ . En cambio, si  $d^* = p^*$  se dice que se tiene una dualidad fuerte. Una condición que garantiza la dualidad fuerte entre CO y  $\text{CO}_{\text{dual}}$  es la condición de Slater [2]. Esta condición establece que existe un  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$  tal que

$$f_i(\mathbf{x}) < 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m.$$

Dicho punto  $\mathbf{x}$  se dice que es estrictamente factible. El Teorema de Slater (véase [2]) establece que la dualidad fuerte se cumple si se verifica la condición de Slater y el problema es convexo.

La condición de Slater se puede debilitar cuando algunas de las funciones de restricciones de desigualdad  $f_i$  son afines (véase [2]). De este modo, si las primeras  $k$  funciones de restricción  $f_1, \dots, f_k$  son afines, entonces la dualidad fuerte se satisface si y solo si la siguiente condición débil se cumple: existe  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$  tal que

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x}) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, k, & f_i(\mathbf{x}) &< 0, \quad i = k + 1, \dots, p, \\ h_j(\mathbf{x}) &= 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{3.5}$$

En otras palabras, las desigualdades afines no tienen que cumplir las desigualdades estrictamente  $f_i(\mathbf{x}) < 0$  para  $i = 1, \dots, k$ . La condición de Slater (3.5) no solo implica una dualidad fuerte entre el problema CO3 y  $\text{CO}_{\text{dual}}$  sino que también implica que existe un par  $(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  factible tal que  $g(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) = d^* = p^*$ . Nos referiremos a  $(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  como óptimos duales o multiplicadores duales de Lagrange óptimos.

### 3.3 Condición de complementariedad

Puesto que en el problema de optimización de interés del presente trabajo se verifica la condición de Slater (véase el problema CO10), los valores óptimos primal y dual se alcanzan y son iguales, es decir, se tiene dualidad fuerte, y por tanto, existe un óptimo primal  $\mathbf{x}^*$  y un óptimo dual  $(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  tal que

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}^*) &= p^* = d^* = g(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) \\ &= \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \left( f_0(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m y_j h_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p z_i f_i(\mathbf{x}) \right) \\ &\leq f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^m y_j^* h_j(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^p z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) \\ &\leq f_0(\mathbf{x}^*), \end{aligned}$$

donde la última desigualdad se deduce del hecho que  $h_j(\mathbf{x}^*) = 0$ ,  $z_i^* \geq 0$  y  $f_0(\mathbf{x}^*) \leq 0$ .

La anterior cadena de desigualdades implica que  $\mathbf{x}^*$  minimiza  $L(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  respecto al vector incógnita  $\mathbf{x}$ . Otra conclusión es que se cumple  $\sum_{i=1}^p z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0$ .

Dado que cada término de esta suma es negativo, se concluye que  $z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0$  para  $i = 1, \dots, p$ , la cual se denomina condición de complementariedad. Dicha condición se puede expresar también como  $z_i > 0 \Rightarrow f_i(\mathbf{x}^*) = 0$  ó  $f_i(\mathbf{x}^*) < 0 \Rightarrow z_i^* = 0$ .

### 3.4 Condiciones Karush-Kuhn-Tucker

Puesto que el problema primal CO3 es convexo, si las funciones  $f_0, \dots, f_m$  y  $h_1, \dots, h_p$  se suponen diferenciables, las siguientes condiciones son suficientes para que los puntos  $\mathbf{x}^*$  y  $(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  sean respectivamente óptimos primales y duales (véase [2]):

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x}^*) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ h_j(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad j = 1, \dots, m, \\ z_i^* &\geq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ \nabla f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^m y_j^* \nabla h_j(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^p z_i^* \nabla f_i(\mathbf{x}^*) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

siendo  $\nabla$  el operador diferencial gradiente con respecto a  $\mathbf{x}$ . Las condiciones (3.6) se llaman condiciones Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

Las dos primeras condiciones indican que  $\mathbf{x}^*$  es factible para el problema primal CO3. La última condición KKT indica que el gradiente de  $L(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  con respecto a  $\mathbf{x}$  se anula en  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ , por lo que se deduce que  $\mathbf{x}^*$  minimiza  $L(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  respecto al vector incógnita  $\mathbf{x}$ , ya que  $L(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  es una función convexa con respecto a  $\mathbf{x}$  (véase [2]). Por lo que se concluye que

$$g(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) = L(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) = f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^m y_j^* h_j(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^p z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = f_0(\mathbf{x}^*).$$

De la anterior igualdad se deduce que  $h_j(\mathbf{x}^*) = 0$  para  $j = 1, \dots, m$  y  $z_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0$  para  $i = 1, \dots, p$ . En conclusión, cualquier punto que satisfaga las condiciones KKT se corresponde con óptimos duales y primales con dualidad fuerte.

Si un problema de optimización convexa con funciones objetivo y restricciones diferenciables satisface la condición de Slater, entonces las condiciones KKT proporcionan condiciones necesarias y suficientes para obtener el óptimo, es decir, la condición de Slater implica que la dualidad es fuerte y la existencia del dual óptimo, de manera que  $\mathbf{x}^*$  es óptimo si y solo si hay un par  $(\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*)$  que junto con  $\mathbf{x}^*$  satisfacen las condiciones KKT (3.6).

### 3.5 Barrera logarítmica

El algoritmo de optimización convexa no resuelve directamente el problema CO3. Al contrario, aproxima el problema con restricciones de desigualdad CO3 como un nuevo problema con restricciones únicamente de igualdad.

El primer paso es reescribir el problema CO3 incluyendo las restricciones de desigualdad en la función objetivo:

CO4	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} && f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p I_-(f_i(\mathbf{x})) \\ & \text{sujeta a} && h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$
-----	---

donde  $I_- : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  es la función indicadora para valores reales positivos, es decir,

$$I_-(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } u \leq 0, \\ \infty & \text{si } u > 0. \end{cases}$$

Así, el problema CO4 no tiene restricciones de desigualdad, pero posee el inconveniente de que la función objetivo no es diferenciable. Este hecho puede evitarse si la función  $I_-$  se aproxima por  $\hat{I}_-(u) = -(1/t) \log(-u)$  para  $u \leq 0$  donde  $t > 0$  es un parámetro del que depende la precisión de la aproximación. Al igual que  $I_-$ , la función  $\hat{I}_-$  es convexa y se define que toma el valor  $\infty$  si  $u > 0$ . Sin embargo,  $\hat{I}_-$  es diferenciable. Si  $t$  se incrementa, la aproximación se hace más precisa (véase [2]). Efectivamente  $\hat{I}_-$  es convexa en tanto que es dos veces diferenciable y  $\frac{d^2 \hat{I}_-}{dt^2} = 1/(tu^2) > 0$  para todo  $t, u > 0$ .

Sustituyendo  $I_-$  por  $\hat{I}_-$  en CO4 se obtiene el siguiente problema de optimización aproximado:

CO5	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} && f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p -(1/t) \log(-f_i(\mathbf{x})) \\ & \text{sujeta a} && h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$
-----	--

La función objetivo sigue siendo convexa y dos veces diferenciable, ya que  $\hat{I}_- = -(1/t) \log(-u)$  es convexa y diferenciable.

La función

$$\psi(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^p \log(-f_i(\mathbf{x})), \quad (3.7)$$

cuyo dominio viene dado por  $\text{Dom } \psi = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f_i(\mathbf{x}) < 0, \quad i = 1, \dots, p\}$ , se denomina barrera logarítmica para el problema CO3. Su dominio es un conjunto de puntos que satisfacen las restricciones de desigualdad de CO3 de forma estricta.

Debemos remarcar que el problema CO5 es una aproximación del problema CO4. Además, una solución de CO5 aproxima de forma precisa a una solución de CO4 si el parámetro  $t$  es suficientemente grande.

### 3.6 Camino central

Se puede simplificar la descripción del problema de optimización CO5, multiplicando la función objetivo  $f_0(\mathbf{x})$  por el parámetro  $t$ , de forma que se obtiene el siguiente problema equivalente a CO5:

CO6	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimizar}} && t f_0(\mathbf{x}) + \psi(\mathbf{x}) \\ & \text{sujeta a} && h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned}$
-----	--

para  $t > 0$ . Denotaremos por  $\mathbf{x}^*(t)$  a la solución de CO6. El camino central asociado con CO3 es el definido por el conjunto de puntos  $\mathbf{x}^*(t)$  para  $t > 0$ , los cuales se denominan puntos del camino central (véase [2]).

Los puntos del camino central se caracterizan por la siguiente condición suficiente:  $\mathbf{x}^*(t)$  es estrictamente factible, es decir, se satisface

$$h_j(\mathbf{x}^*(t)) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad f_i(\mathbf{x}^*(t)) < 0, \quad i = 1, \dots, p,$$

y existe un  $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^m$  tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= t\nabla f_0(\mathbf{x}^*(t)) + \sum_{j=1}^m \hat{y}_j \nabla h_j(\mathbf{x}^*(t)) + \nabla \psi(\mathbf{x}^*(t)) \\ &= t\nabla f_0(\mathbf{x}^*(t)) + \sum_{j=1}^m \hat{y}_j \nabla h_j(\mathbf{x}^*(t)) + \sum_{i=1}^p \frac{1}{-f_i(\mathbf{x}^*(t))} \nabla f_i(\mathbf{x}^*(t)), \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde se ha usado que el gradiente de la función barrera logarítmica viene dado por

$$\nabla \psi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p \frac{1}{-f_i(\mathbf{x})} \nabla f_i(\mathbf{x}).$$

De (3.8) se deduce la propiedad de que a partir de cada punto del camino central se obtiene un punto factible dual, y por lo tanto, una cota inferior en el valor óptimo  $p^*$ . Más específicamente, se define  $\mathbf{z}^*(t) = (\mathbf{z}_1^*(t), \dots, \mathbf{z}_p^*(t))$  y  $\mathbf{y}^*(t)$  como

$$z_i^*(t) = -\frac{1}{t f_i(\mathbf{x}^*(t))}, \quad i = 1, \dots, p, \quad \mathbf{y}^*(t) = \hat{\mathbf{y}}/t, \quad (3.9)$$

tal que el par  $\mathbf{y}^*(t)$  y  $\mathbf{z}^*(t)$  es un punto factible dual, ya que verifica las condiciones KKT del problema perturbado CO6. La ecuación (3.9) se denominan condición complementaria perturbada (véase [2]). Así mismo, se puede interpretar la condición de camino central (3.8) como una deformación continua de las condiciones KKT (3.6) para el problema CO3. Un punto  $\mathbf{x}$  es solución del problema de optimización CO6 si y solo si existen  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{z}$  tal es que

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x}) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ h_j(\mathbf{x}) &= 0, \quad j = 1, \dots, m, \\ z_i &\geq 0, \quad i = 1, \dots, p, \\ -z_i f_i(\mathbf{x}) &= 1/t, \quad i = 1, \dots, p, \\ \nabla f_0(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m y_j \nabla h_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p z_i \nabla f_i(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

La única diferencia entre las condiciones KKT (3.6) y la condición de camino central (3.10) es que la condición de complementariedad  $z_i f_i(\mathbf{x}) = 0$  es reemplazada por  $-z_i f_i(\mathbf{x}) = 1/t$ . En particular, para valores altos de  $t$ ,  $\mathbf{x}^*(t)$  y el punto dual asociado  $(\mathbf{y}^*(t), \mathbf{z}^*(t))$  satisfacen (salvo por un pequeño error que depende de  $1/t$ ) las condiciones KKT de CO3.

### 3.7 Variables de holgura

A continuación introducimos las variables de holgura o variables “slack”, sustituyendo cada restricción de desigualdad por una restricción de igualdad y una restricción de no negatividad. Este procedimiento es el seguido para tratar problemas con restricciones en la implementación del algoritmo PDCO (véase [9]).

Este procedimiento se basa en la observación de que  $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$  si y solo si existe  $s_i \leq 0$  que satisface  $f_i(\mathbf{x}) - s_i = 0$ . Empleando esta transformación se tiene

CO7	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^p}{\text{minimizar}} && f_0(\mathbf{x}) \\ & \text{sujeta a} && s_i \geq 0, && i = 1, \dots, p, \\ & && f_i(\mathbf{x}) + s_i = 0, && i = 1, \dots, p, \\ & && h_j(\mathbf{x}) = 0, && j = 1, \dots, m, \end{aligned}$
-----	--

donde las variables incógnita son  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  y  $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_p) \in \mathbb{R}^p$ . Este problema tiene ahora  $n + p$  variables,  $p$  restricciones de igualdad (de hecho, son restricciones de no negatividad) y  $m + p$  restricciones de igualdad. Las nuevas variables  $s_i$  se denominan variables de holgura asociadas a  $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$ , para  $i = 1, \dots, p$ .

El problema CO7 es equivalente al problema CO3. De hecho, si  $(\mathbf{x}_0, \mathbf{s}_0)$  es factible para CO7 entonces también  $\mathbf{x}_0$  lo es para CO3 ya que  $s_i = f_i(\mathbf{x}_0) \leq 0$ . Por el contrario, si  $\mathbf{x}_1$  es factible para CO3, entonces  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{s}_1)$  es factible para CO7, tomando  $s_i = f_i(\mathbf{x}_1)$ . De forma similar,  $\mathbf{x}^*$  es óptimo para CO3 si y solo si  $(\mathbf{x}^*, \mathbf{s}^*)$  es óptimo para CO7, cuando  $s_i^* = f_i(\mathbf{x}^*)$ .



### 3.9 Ecuaciones KKT modificadas

En lo que sigue, reescribimos las condiciones KKT perturbadas (3.10) para el problema de optimización descrito en la sección anterior. Partiendo de la expresión

$$\nabla f_0(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m y_j \nabla h_j(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^p z_i \nabla f_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

donde  $\nabla$  denota el gradiente con respecto a las incógnitas del problema y teniendo en cuenta (3.11) y que

$$h_i(\mathbf{x}) = (\mathbf{b} - A\mathbf{x} - D\mathbf{r})_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (3.13)$$

resulta

$$\nabla_x f_0(\mathbf{x}) + \nabla_x (\mathbf{y}^T (-A\mathbf{x} - D\mathbf{r} + \mathbf{b})) + \mathbf{z}_1^T \nabla_x (\mathbf{1} - \mathbf{x} + \mathbf{x}_1) + \mathbf{z}_2^T \nabla_x (\mathbf{x} - \mathbf{u} + \mathbf{x}_2) = \mathbf{0},$$

donde  $\nabla_x$  denota el gradiente con respecto al vector  $\mathbf{x}$ .

Puesto que

$$f_0(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \|D_2 \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{r}\|_2^2,$$

se tiene

$$\begin{aligned} \nabla_x \left( \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \|D_2 \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{r}\|_2^2 \right) + \nabla_x (\mathbf{y}^T A\mathbf{x} - \mathbf{y}^T D\mathbf{r} + \mathbf{y}^T \mathbf{b}) + \\ + \mathbf{z}_1^T \nabla_x (\mathbf{1} - \mathbf{x} + \mathbf{x}_1) + \mathbf{z}_2^T \nabla_x (\mathbf{x} - \mathbf{u} + \mathbf{x}_2) = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

A partir de (3.14), teniendo en cuenta que  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$ ,  $\mathbf{y}$  y  $\mathbf{r}$  no dependen de  $\mathbf{x}$ , resulta

$$\nabla_x \left( \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \|D_2 \mathbf{x}\|_2^2 \right) - \nabla_x (\mathbf{y}^T A\mathbf{x}) - \nabla_x (\mathbf{z}_1^T \mathbf{x}) + \nabla_x (\mathbf{z}_2^T \mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

y operando, se obtiene

$$\nabla_x \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \nabla_x (\|D_2 \mathbf{x}\|_2^2) - A^T \mathbf{y} - \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 = \mathbf{0}.$$

Teniendo en cuenta que la matriz  $D_2$  se había definido como una matriz diagonal,

$$\begin{aligned} \nabla_x \left( \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} D_2^2 \nabla_x (\|\mathbf{x}\|_2^2) \right) - A^T \mathbf{y} - \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 = \\ = \nabla_x \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} D_2^2 (2\mathbf{x}) - A^T \mathbf{y} - \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

De la misma forma a como se ha calculado el gradiente con respecto al vector  $\mathbf{x}$ , al calcular el gradiente con respecto a  $\mathbf{r}$ , resulta

$$\nabla_r \left( \frac{1}{2} \|\mathbf{r}\|_2^2 \right) - \nabla_r (\mathbf{y}^T D \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \nabla_r (\|\mathbf{r}\|_2^2) - D^T \mathbf{y} = \frac{1}{2} (2\mathbf{r}) - D^T \mathbf{y} = \mathbf{0},$$

y considerando (3.13), se obtiene  $\mathbf{r} - D^T \mathbf{y} = \mathbf{0}$ . Por tanto, a partir de las condiciones KKT perturbadas (3.10) se deduce

$$\nabla_x \phi(\mathbf{x}) + D_2^2 \mathbf{x} - A^T \mathbf{y} - \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

$$A \mathbf{x} + D \mathbf{r} = \mathbf{b}, \quad (3.16)$$

$$\mathbf{r} - D^T \mathbf{y} = \mathbf{0}. \quad (3.17)$$

Además, al considerar la condición complementaria perturbada (cuarta ecuación en (3.10)) se obtienen las ecuaciones

$$z_{1i} f_i(\mathbf{x}) = -1/t,$$

$$z_{2i} f_{i+n}(\mathbf{x}) = -1/t,$$

para  $i = 1, \dots, n$ . Se introducen, las matrices diagonales  $X_1$  y  $X_2$  dadas por  $(X_1)_{jj} = x_{1j}$  y  $(X_2)_{jj} = x_{2j}$  para  $j = 1, \dots, n$  (tal que los elementos de la diagonal principal de  $X_1$  y  $X_2$  se corresponden con los coeficientes de los vectores  $\mathbf{x}_1$  y  $\mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n$  respectivamente). De este modo, las condiciones de complementariedad se reescriben como

$$\begin{aligned} X_1 \mathbf{z}_1 &= \mu \mathbf{e}, \\ X_2 \mathbf{z}_2 &= \mu \mathbf{e}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde  $\mathbf{e} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$  y  $\mu = -1/t$ .

Reuniendo las ecuaciones (3.12), (3.15), (3.16), (3.17) y (3.18) se obtienen para CO8 las siguientes ecuaciones KKT modificadas, es decir, las condiciones de optimización con barrera logarítmica:

$$\begin{aligned} A \mathbf{x} + D \mathbf{r} &= \mathbf{b}, \\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_1 &= \mathbf{l}, \\ -\mathbf{x} - \mathbf{x}_2 &= -\mathbf{u}, \\ A^T \mathbf{y} + \mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2 &= \nabla_x \phi(\mathbf{x}) + D_2^2 \mathbf{x}, \\ D^T \mathbf{y} &= \mathbf{r}, \\ X_1 \mathbf{z}_1 &= \mu \mathbf{e}, \\ X_2 \mathbf{z}_2 &= \mu \mathbf{e}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

con todas las componentes de  $\mathbf{x}_1$  y  $\mathbf{x}_2$  positivas (y por tanto de  $\mathbf{z}_1$  y  $\mathbf{z}_2$  positivas también).

### 3.10 Método de Newton

A la vista de las ecuaciones KKT modificadas (3.19), obtener la solución del problema CO8 se reduce a calcular la solución de (3.19), esto es, resolver

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad (3.20)$$

donde  $\mathbf{u} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)^T$  y

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} - D^2\mathbf{y} \\ \nabla_x \phi(\mathbf{x}) + D_2^2 \mathbf{x} - A^T \mathbf{y} - \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 \\ \mathbf{l} - \mathbf{x} + \mathbf{x}_1 \\ -\mathbf{u} + \mathbf{x} + \mathbf{x}_2 \\ \mu \mathbf{e} - X_1 \mathbf{z}_1 \\ \mu \mathbf{e} - X_2 \mathbf{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_y \\ \mathbf{F}_x \\ \mathbf{F}_{x_1} \\ \mathbf{F}_{x_2} \\ \mathbf{F}_{z_1} \\ \mathbf{F}_{z_2} \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

Debemos hacer notar que en (3.20) no se incluye como incógnita a  $\mathbf{r}$ , ya que se calculará como un postproceso a partir de  $\mathbf{y}$ , puesto que  $\mathbf{r} = D^T \mathbf{y}$ .

Debido a que (3.20) no puede ser resuelto analíticamente, ya que se trata de un sistema no lineal de ecuaciones, su resolución se realizará mediante el uso del método de Newton, obteniendo así una aproximación de la solución de CO8 para cada valor de  $\mu > 0$ .

El método de Newton construye una sucesión de aproximaciones  $\mathbf{u}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1)}, \dots \in \text{Dom } \mathbf{F}$  de tal forma que  $\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(k)}) \rightarrow \mathbf{0}$  cuando  $k \rightarrow \infty$ . Además, para que este método converja es necesario tener un iterante inicial  $\mathbf{u}^{(0)} \in \text{Dom } \mathbf{F}$  próximo a la solución exacta buscada.

De esta forma, el algoritmo produce una secuencia  $\mathbf{u}^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  construida como

$$\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \Delta \mathbf{u}^{(k)},$$

con

$$D\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(k)})\Delta \mathbf{u}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(k)}), \quad (3.21)$$

siendo  $\Delta \mathbf{u}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  la diferencia entre dos iterantes consecutivos y  $k = 0, 1, \dots$  el número de la iteración del método de Newton.

Desde el punto de vista de la resolución del problema de optimización CO8, en los métodos interiores primal-dual, como es el caso del PDCO,  $\Delta \mathbf{u}^{(k)}$  puede ser interpretado como la dirección de búsqueda en el método de Newton para las ecuaciones KKT modificadas (3.19). De manera que cuando  $\mathbf{u}^{(k)}$  esté cerca del

valor óptimo  $\mathbf{u}^*$ , la actualización  $\mathbf{u}^{(k)} + \Delta\mathbf{u}^{(k)}$  será una mejor aproximación que la anterior.

De tal forma que si  $\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$  con  $\mathbf{u} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2)^T$  entonces  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*(t)$ ,  $\mathbf{y} = \mathbf{y}^*(t)$ ,  $\mathbf{z} = \mathbf{z}^*(t)$  serán la solución del problema de optimización aproximado CO8. El cálculo de  $\Delta\mathbf{u}^{(k)} = (\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{x}_1, \Delta\mathbf{x}_2, \Delta\mathbf{z}_1, \Delta\mathbf{z}_2)^T$  en (3.21) involucra resolver el siguiente sistema lineal de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \mathbf{DF}(\mathbf{u}^{(k)})\Delta\mathbf{u}^{(k)} &= \begin{pmatrix} -A & -D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_1 & -A^T & 0 & 0 & -I & I \\ -I & 0 & I & 0 & 0 & 0 \\ I & 0 & 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -Z_1 & 0 & -X_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -Z_2 & 0 & -X_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mathbf{x} \\ \Delta\mathbf{y} \\ \Delta\mathbf{x}_1 \\ \Delta\mathbf{x}_2 \\ \Delta\mathbf{z}_1 \\ \Delta\mathbf{z}_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -A\Delta\mathbf{x} - D^2\Delta\mathbf{y} \\ H_1\Delta\mathbf{x} - A^T\Delta\mathbf{y} - \Delta\mathbf{z}_1 + \Delta\mathbf{z}_2 \\ -\Delta\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_1 \\ \Delta\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_2 \\ -X_1\Delta\mathbf{z}_1 - Z_1\Delta\mathbf{x}_1 \\ -X_2\Delta\mathbf{z}_2 - Z_2\Delta\mathbf{x}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{F}_y \\ \mathbf{F}_x \\ \mathbf{F}_{x_1} \\ \mathbf{F}_{x_2} \\ \mathbf{F}_{z_1} \\ \mathbf{F}_{z_2} \end{pmatrix} = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(k)}), \end{aligned}$$

donde  $H_1 = \nabla_x^2\phi(\mathbf{x}) + D_2^2$ . Así mismo, las matrices  $Z_1$  y  $Z_2$  se definen como diagonales definidas positivas, donde  $(Z_1)_{jj} = (z_1)_j$  y  $(Z_2)_{jj} = (z_2)_j$  para  $j = 1, \dots, n$ . De esta forma, los elementos de la diagonal principal de  $Z_1$  y  $Z_2$  se corresponden con los coeficientes de los vectores  $\mathbf{z}_1$  y  $\mathbf{z}_2 \in \mathbb{R}^n$ , respectivamente.

### 3.11 Algoritmo PDCO

Si reescribimos el anterior sistema lineal de ecuaciones, se obtienen los siguientes sistemas lineales de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} \Delta\mathbf{x} - \Delta\mathbf{x}_1 \\ -\Delta\mathbf{x} - \Delta\mathbf{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{x_1} \\ \mathbf{F}_{x_2} \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

$$\begin{pmatrix} X_1\Delta\mathbf{z}_1 + Z_1\Delta\mathbf{x}_1 \\ X_2\Delta\mathbf{z}_2 + Z_2\Delta\mathbf{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{z_1} \\ \mathbf{F}_{z_2} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

$$\begin{pmatrix} A\Delta\mathbf{x} + D^2\Delta\mathbf{y} \\ -H_1\Delta\mathbf{x} + A^T\Delta\mathbf{y} + \Delta\mathbf{z}_1 - \Delta\mathbf{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_y \\ \mathbf{F}_x \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Si se despeja  $\Delta \mathbf{x}_1$  y  $\Delta \mathbf{x}_2$  de (3.22) resulta

$$\begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}_1 \\ \Delta \mathbf{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{F}_{x_1} + \Delta \mathbf{x} \\ -\mathbf{F}_{x_2} - \Delta \mathbf{x} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

y de la misma forma de (3.23), despejando los valores de  $\Delta \mathbf{x}_1$  y  $\Delta \mathbf{x}_2$ , y teniendo en cuenta (3.25), resulta

$$\begin{pmatrix} \Delta \mathbf{z}_1 \\ \Delta \mathbf{z}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1^{-1}(\mathbf{F}_{z_1} + Z_1 \mathbf{F}_{x_1}) - X_1^{-1} Z_1 \Delta \mathbf{x} \\ X_2^{-1}(\mathbf{F}_{z_2} + Z_2 \mathbf{F}_{x_2}) + X_2^{-1} Z_2 \Delta \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Al sustituir  $\Delta \mathbf{z}_1$  y  $\Delta \mathbf{z}_2$  en (3.24) y reordenar los términos se obtiene

$$\begin{aligned} A \Delta \mathbf{x} + D^2 \Delta \mathbf{y} &= \mathbf{F}_y, \\ (-H_1 - X_2^{-1} Z_2 - X_1^{-1} Z_1) \Delta \mathbf{x} + A^T \Delta \mathbf{y} &= \\ &= \mathbf{F}_x - X_1^{-1}(\mathbf{F}_{z_1} + Z_1 \mathbf{F}_{x_1}) + X_2^{-1}(\mathbf{F}_{z_2} + Z_2 \mathbf{F}_{x_2}). \end{aligned}$$

Si introducimos la siguiente notación:

$$\begin{aligned} H_2 &= H_1 + X_2^{-1} Z_2 + X_1^{-1} Z_1, \\ \mathbf{w} &= \mathbf{F}_x - X_1^{-1}(\mathbf{F}_{z_1} + Z_1 \mathbf{F}_{x_1}) + X_2^{-1}(\mathbf{F}_{z_2} + Z_2 \mathbf{F}_{x_2}), \end{aligned}$$

se tiene que (3.24) es equivalente al sistema lineal

$$\begin{pmatrix} -H_2 & A^T \\ A & D^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x} \\ \Delta \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{F}_y \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

A este sistema lineal de ecuaciones (3.27) se le denomina sistema KKT reducido (véase [2]).

En cada iteración del método de Newton se resuelve el sistema KKT reducido (3.27) obteniendo  $\Delta \mathbf{x}$ ,  $\Delta \mathbf{y}$  y posteriormente utilizando (3.25) y (3.26) se calcula  $\Delta \mathbf{x}_1$ ,  $\Delta \mathbf{x}_2$ ,  $\Delta \mathbf{z}_1$ ,  $\Delta \mathbf{z}_2$ . Luego se actualiza la variable primal  $\mathbf{x}$  y las variables duales  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$ ,  $\mathbf{z}_1$  y  $\mathbf{z}_2$ . Además, el algoritmo PDCO retiene el valor de  $\mu$  en cada iteración hasta cierto valor, de forma que  $\max(X_i \mathbf{z}_i) / \min(X_i \mathbf{z}_i) \leq 1000$ ,  $i = 1, 2$ ; para a continuación reducir el valor de  $\mu$ , mediante un factor  $(1 - \alpha)$  con  $\alpha \in (0, 1)$  (véase [9]).

El sistema lineal de ecuaciones (3.27) puede ser resuelto con métodos directos o iterativos. Si  $\phi(\mathbf{x})$  es una función separable<sup>1</sup> entonces  $H_1$  y  $H_2$  son matrices diagonales y por tanto (3.27) se puede resolver eliminando  $\Delta \mathbf{x}$  del sistema lineal de modo que resulta

$$(A H_2^{-1} A^T + D^2) \Delta \mathbf{y} = A H_2^{-1} \mathbf{w} + \mathbf{F}_y, \quad (3.28)$$

o bien teniendo en cuenta que  $D$  es diagonal y definida positiva con lo que se puede eliminar la fila correspondiente a  $\Delta y$  con lo que resulta

$$(A^T D^{-2} A + H_2) \Delta \mathbf{x} = A^T D^{-2} \mathbf{F}_y - \mathbf{w}.$$

Los métodos directos o iterativos recomendados por [9] e implementados en el algoritmo PDCO (véase [1]) son la factorización de Cholesky dispersa y el método de mínimos cuadrados de residuo mínimo LSMR (acrónimo en inglés de “Least Square Minimal Residual”). Se debe notar que si la matriz  $AH_2^{-1}A^T + D^2$  del sistema (3.28) se define de forma explícita ambos métodos son aplicables. En cambio, en el caso de que se defina como una función que implementa el producto matriz-vector, sólo el método LSMR puede ser aplicado. Para evitar posibles limitaciones de memoria en los métodos directos, a lo largo de esta memoria se ha utilizado únicamente el método LSMR.

---

<sup>1</sup> Se dice que una función  $\phi(\mathbf{x})$  con  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ , es separable si

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \phi_j(x_j), \quad (3.29)$$

es decir, es la suma de funciones que dependen de una sola variable (véase [4]).

# Capítulo 4

## Cálculo de la ILT por optimización convexa

En este capítulo, de entre los distintos métodos disponibles para abordar el cálculo de la transformada inversa de Laplace (en inglés “Inverse Laplace Transform” o ILT) en presencia de ruido, se plantea el uso del método de optimización convexa PDCO que incluye una regularización  $L_1$  y  $L_2$  (para estabilizar la solución) y restringido a valores positivos de la solución. El algoritmo de optimización convexa de propósito general PDCO, asume que el problema lineal original se ha escalado adecuadamente de tal forma que la norma de la matriz y del segundo miembro sean de orden uno. Sin embargo, los datos del problema lineal (véase (2.4) en el Capítulo 2) que aborda el presente Trabajo Fin de Máster no tienen porque cumplir estos requisitos. Es por ello que en este capítulo se plantean también distintos métodos para escalar el sistema lineal original.

### 4.1 Problema de optimización

Partiendo del problema regularizado CO8 sin perturbar, esto es, sin introducir la barrera logarítmica y sin las variables de holgura, se fijan los vectores  $\mathbf{l} = (l_1, \dots, l_n)$  y  $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n)$  como  $l_i = 0$  y  $u_i = +\infty$  para  $i = 1, \dots, n$ . Se tiene así que el problema regularizado que resuelve el algoritmo PDCO viene dado por

CO9	$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^m}{\text{minimizar}} && \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \ D_2 \mathbf{x}\ _2^2 + \frac{1}{2} \ \mathbf{r}\ _2^2 \\ & \text{sujeta a} && x_j \geq 0, && j = 1, \dots, n, \\ & && \mathbf{b} - A\mathbf{x} - D\mathbf{r} = 0. \end{aligned}$
-----	---

donde se han eliminado las variables de holgura  $\mathbf{x}_1$  y  $\mathbf{x}_2$  al no ser necesarias.

En el caso del sistema lineal (2.4) y una regularización de tipo  $L_1$  y  $L_2$ , las funciones, matrices y vectores asumidos como datos en el problema CO9 vienen dados por:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}) &= \|D_1 \mathbf{x}\|_1, & \mathbf{x} &= \mathbf{f}, & D &= I, \\ A &= KC, & \mathbf{b} &= \mathbf{s}, \end{aligned}$$

donde  $D$  es una matriz de tamaño  $n \times n$  y  $I$  es la matriz identidad.

Por tanto, la descripción del problema de optimización propuesto para resolver el sistema lineal (2.4) viene dado por

CO10	$\begin{aligned} &\text{minimizar}_{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^m} \quad \ D_1 \mathbf{f}\ _1 + \frac{1}{2} \ D_2 \mathbf{f}\ _2^2 + \frac{1}{2} \ \mathbf{r}\ _2^2 \\ &\text{sujeta a} \quad (KC)\mathbf{f} + \mathbf{r} = \mathbf{s}, \quad \mathbf{f} \geq 0, \end{aligned}$
------	--

donde  $D_1$  y  $D_2$  son dos matrices diagonales a fijar por el usuario. Este problema verifica los requisitos enunciados en el Capítulo 3 ya que es convexo y diferenciable. Además también se verifica que es separable (véase (3.29)).

La convexidad de la función objetivo se deduce de forma inmediata de la propiedad (3.3) y de que toda norma en  $\mathbb{R}^n$  es convexa (véase [2]).

Las matrices  $D_1$  y  $D_2$  se definen como diagonales definidas positivas, donde  $(D_1)_{jj} = (d_1)_j$  para  $j = 1, \dots, n$  y  $(D_2)_{jj} = (d_2)_j$  para  $j = 1, \dots, n$ . Los elementos de la diagonal principal de  $D_1$  y  $D_2$  se corresponden con los elementos de los vectores  $\mathbf{d}_1 \in \mathbb{R}^n$  y  $\mathbf{d}_2 \in \mathbb{R}^n$ , respectivamente. Estos vectores vienen dados por

$$\begin{aligned} (d_1)_j &= \lambda_1 \Delta T_j = \lambda_1 (T_j - T_{j-1}), \quad j = 1, \dots, n, \\ (d_2)_j &= \sqrt{\lambda_2} (\Delta T_j) = \sqrt{\lambda_2} (T_j - T_{j-1}), \quad j = 1, \dots, n, \end{aligned} \tag{4.1}$$

donde  $T_j$  son los puntos de la partición usados en la discretización integral introducida en la Sección 2.1. Se debe hacer notar que para evitar valores muy pequeños de  $(d_1)_j$  y  $(d_2)_j$ , estos se acotarán inferiormente por  $10^{-4}$ .

Los coeficientes de las matrices  $D_1$  y  $D_2$  usadas en la regularización de  $L_1$  y  $L_2$  son aquellos definidos en [1]. Vienen dados por

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \alpha_1 \|\mathbf{s}\|_\infty / \text{SNR}, \\ \lambda_2 &= \alpha_2 / \text{SNR}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

donde  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son parámetros a definir por el usuario, SNR es el ratio señal-ruido de los valores medidos almacenados en  $\mathbf{s}$ . Por otra parte, hay que destacar que al

tomar los valores de  $\alpha_1 = 10$  y  $\alpha_2 = 5$ , empleando (4.1) y (4.2) con los datos anteriores, habitualmente se obtiene  $(D_2)_{jj} > 10^{-4}$ . La división de los coeficientes de regularización  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  por SNR proporciona calibración con respecto a la intensidad de la señal, necesitándose menos regularización a mayor valor de SNR. Al hacer proporcional  $\lambda_1$  a  $\|s\|_\infty$  se obtiene robustez con respecto al escalado o normalización de las señales (véase [1]).

El uso del algoritmo PDCO requiere del cálculo del gradiente de la función objetivo  $\phi(\mathbf{x})$ . Más precisamente, puesto que

$$\phi(\mathbf{x}) = \|D_1\mathbf{x}\|_1 = \sum_{k=1}^n |(d_1)_k x_k|,$$

la componente  $j$ -ésima del gradiente de  $\phi(\mathbf{x})$  es

$$\begin{aligned} (\nabla\phi(\mathbf{x}))_j &= \frac{\partial}{\partial x_j}\phi(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{k=1}^n |(d_1)_k x_k| \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} (|(d_1)_j x_j|) = (d_1)_j \text{signo}(x_j), \end{aligned}$$

es decir, será  $\pm(d_1)_j$  dependiendo del signo de  $x_j$  para cada  $j = 1, \dots, n$ . De forma análoga, se puede calcular su hessiano, la cual será la matriz nula de tamaño  $n \times n$  para los valores positivos del vector  $\mathbf{x}$ .

Como se ha analizado de forma indirecta, el problema de optimización CO10 incluye en las matrices  $D_1$  y  $D_2$  dos parámetros de regularización,  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , que se corresponden con los términos que involucran normas  $L_1$  y  $L_2$  de la solución, respectivamente. El parámetro  $\lambda_2$  afecta al suavizado de la solución (este parámetro se puede aumentar para suavizar la solución y mitigar el ruido). En general,  $\lambda_1$  debe ser proporcional a  $\|s\|_\infty$  (véase [1]). Para un cierto nivel de ruido en la medida  $s$ : cuanto más elevado sea el nivel de ruido, más grande debe ser el parámetro de regularización  $\lambda_1$  para que el ruido pueda ser mitigado.

Siguiendo el trabajo [1], se denominan “coeficientes universales” a los valores de  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  iguales a 10 y 5 respectivamente, obtenidos con el fin de asegurar resultados precisos y estables para una amplia gama de señales y escenarios. Los valores más comunes en las calibraciones realizadas por [1] fueron  $\alpha_1 = 3$  y  $\alpha_2 = 0.5$ , estando los valores óptimos de ambos situados en un rango relativamente pequeño. Además, para demostrar la influencia de la componente de regularización  $L_1$  se analizaron las señales con  $\alpha_1 = 0$  y el valor universal de  $\alpha_2 = 5$  en el Capítulo 5.

## 4.2 Escalado

Considerando el problema de optimización convexa CO10 que resuelve el algoritmo PDCO, y tal y como se ha discutido anteriormente, el algoritmo PDCO requiere que la magnitud de las normas de  $KC$  y una estimación de la norma de la solución  $\mathbf{f}$ .

En el caso de que estas condiciones no se cumplan, el método PDCO podría no converger o incluso converger a una aproximación poco precisa. Por lo tanto, un escalado apropiado será necesario para garantizar la robustez del método y una solución precisa.

### 4.2.1 Escalado de la matriz del sistema

Puesto que originalmente  $\|KC\|_\infty \neq 1$  en el problema de optimización CO10, el sistema lineal  $(KC)\mathbf{f} = \mathbf{s}$  se puede escribir de forma equivalente como  $\tilde{K}\mathbf{f} = \tilde{\mathbf{s}}$  donde

$$\tilde{\mathbf{s}} = \frac{\mathbf{s}}{\|KC\|_\infty} \quad \text{y} \quad \tilde{K} = \frac{KC}{\|KC\|_\infty}.$$

Ahora es evidente que  $\|\tilde{K}\|_\infty = 1$ . Además puesto que  $\tilde{\mathbf{s}} = \tilde{K}\mathbf{f}$ , entonces  $\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty = \|\tilde{K}\mathbf{f}\|_\infty$ . Por tanto  $\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty \approx \|\tilde{K}\|_\infty \|\mathbf{f}\|_\infty$  y se tiene que

$$\|\mathbf{f}\|_\infty \approx \frac{\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty}{\|\tilde{K}\|_\infty} = \|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty.$$

En consecuencia, en la configuración del algoritmo PDCO, la estimación de  $\|\mathbf{f}\|_\infty$  será fijada aproximadamente igual a  $\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty$ .

### 4.2.2 Escalado de la señal (primera opción)

Si suponemos que originalmente  $\|\mathbf{s}\|_\infty \neq 1$ , el sistema lineal  $\tilde{K}\mathbf{f} = \tilde{\mathbf{s}}$  es equivalente a  $\hat{K}\mathbf{f} = \hat{\mathbf{s}}$  donde

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\tilde{\mathbf{s}}}{\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty} \quad \text{y} \quad \hat{K} = \frac{\tilde{K}}{\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty}.$$

De esta manera, se cumple  $\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty = 1$ .

Además puesto que  $\hat{\mathbf{s}} = \hat{K}\mathbf{f}$  entonces  $\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty = \|\hat{K}\mathbf{f}\|_\infty$  y aproximadamente se cumple  $\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty \approx \|\hat{K}\|_\infty \|\mathbf{f}\|_\infty$ . Por tanto, se obtiene la estimación

$$\|\mathbf{f}\|_\infty = \frac{\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty}{\|\hat{K}\|_\infty}.$$

Evidentemente, esta forma de escalado no verifica que  $\|\hat{K}\|_\infty = 1$ .

### 4.2.3 Escalado de la señal (segunda opción)

Si consideramos el problema escalado  $\tilde{K}\tilde{\mathbf{f}} = \tilde{\mathbf{s}}$  y si suponemos  $\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty \neq 1$ , se puede escribir un sistema lineal equivalente  $\tilde{K}\tilde{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{s}}$  como

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\tilde{\mathbf{s}}}{\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathbf{f}} = \frac{\mathbf{f}}{\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty}.$$

Ahora, es fácil comprobar que  $\|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty = 1$ . Puesto que  $\hat{\mathbf{s}} = \tilde{K}\tilde{\mathbf{f}}$  entonces  $\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty = \|\tilde{K}\tilde{\mathbf{f}}\|_\infty$  y por tanto  $\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty \approx \|\tilde{K}\|_\infty \|\tilde{\mathbf{f}}\|_\infty$  con lo que se tiene

$$\|\tilde{\mathbf{f}}\|_\infty \approx \frac{\|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty}{\|\tilde{K}\|_\infty} = \|\hat{\mathbf{s}}\|_\infty = 1$$

Una vez hecho este escalado el algoritmo PDCO calcula  $\tilde{\mathbf{f}}$ , por lo que, para obtener la solución original  $\mathbf{f}$  se deberá reescalar el vector incógnita como  $\mathbf{f} = \|\tilde{\mathbf{s}}\|_\infty \tilde{\mathbf{f}}$ . Como es evidente, esta forma de escalar conserva la propiedad  $\|\tilde{K}\|_\infty = 1$ .

Como se verá en el Capítulo 5, emplear la combinación de escalado de la matriz del sistema junto con esta segunda opción de escalado de la señal presenta los mejores resultados.



# Capítulo 5

## Validación del algoritmo PDCO

En este capítulo se describen los parámetros admisibles propios del algoritmo PDCO [9] y el método iterativo LSMR [5], así como, el procedimiento de cálculo del valor SNR [1]. Se presenta un test preliminar para determinar la elección del escalado que arroje resultados más precisos de entre todos los posibles. Con el objetivo de validar el código y estudiar el rango dinámico de los parámetros de regularización, se efectúan distintos test con un problema de relaxometría, donde la transformada inversa de Laplace es proporcional a una delta de Dirac, a una combinación lineal de deltas de Dirac o a una combinación lineal de tres funciones gaussianas.

### 5.1 Parámetros admisibles

Siguiendo las recomendaciones marcadas en [9], la diagonal de las matrices  $D_1$  y  $D_2$  son típicamente de tamaño  $10^{-3}$  o  $10^{-4}$  en computadoras con precisión de 15-16 dígitos de punto flotante y con los datos de entrada, es decir, tanto  $KC$  como  $s$  convenientemente escalados para que  $\|KC\|_\infty \approx 1$  y  $\|s\|_\infty \approx 1$ .

Además, los valores iniciales de  $\mathbf{x}$  y su dual serán los vectores de tamaño  $n$  tal que sus elementos son iguales a la estimación de  $\|f\|_\infty$  empleada en el escalado y uno, respectivamente. Así mismo, el valor inicial de  $\mathbf{y}$  será el vector de tamaño  $m$  con todos sus elementos nulos (véase [9]).

Para resolver el sistema lineal (3.28) los criterios de parada o convergencia para el método iterativo LSMR se basan en tres valores de tolerancias  $\delta$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  especificados por el usuario (véase [5]):

$$\mathbf{S1} \text{ Converge si } \|\mathbf{r}\| \leq \delta \|B\| \|\mathbf{u}\| + \beta \|\mathbf{b}\|,$$

**S2** Converge si  $\frac{\|B^T \mathbf{r}\|}{\|B\| \|\mathbf{r}\|} \leq \delta$ ,

**S3** Parada si  $\text{cond}(B) \geq \gamma$ ,

donde  $B$  es la matriz del sistema (3.28),  $\mathbf{u}$  es el vector solución,  $\mathbf{b}$  es el segundo miembro del sistema lineal a resolver y  $\mathbf{r}$  es el vector de residuos.

Los criterios **S1** y **S2** aseguran el tamaño de los errores admisibles en la solución. Por tanto, el usuario puede establecer  $\alpha$  y  $\beta$  de acuerdo con la precisión requerida. Por ejemplo, si ambos valores de  $\alpha$  y  $\beta$  son  $10^{-6}$ , la norma residual final debería tener una precisión aproximada de 6 dígitos [9]. El criterio de parada **S3** evita trabajar con sistemas lineales cuyo condicionamiento es muy elevado. Por ejemplo, el valor de la tolerancia de  $\gamma$  podría ser tan grande como  $10^{12}$ . Sin embargo, para problemas de mínimos cuadrados en cambio debe ser inferior a  $10^8$ .

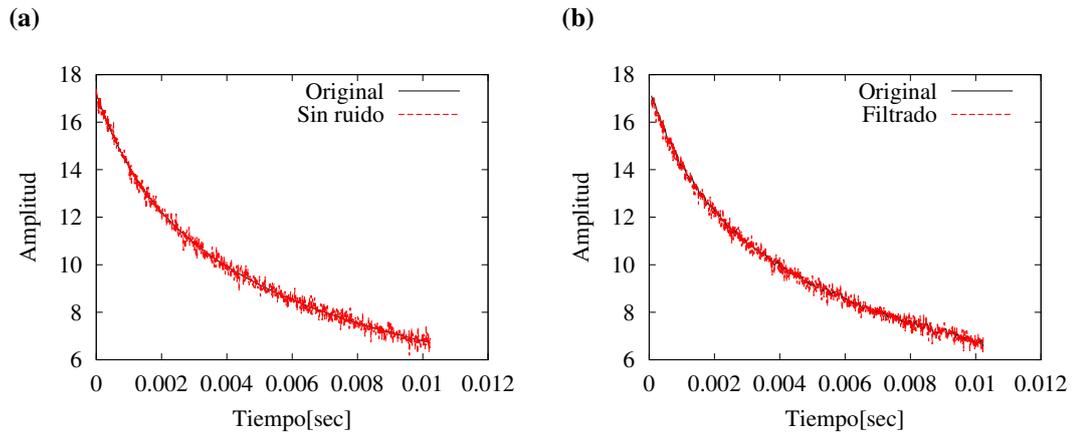
La convergencia del método LSMR depende de la magnitud los valores propios de  $B^T B$  (de hecho, de los valores singulares de  $B$ ). Por tanto, si la matriz  $B^T B$  está bien condicionada, el método LSMR convergerá más rápido cuanto más cerca estén entre si sus valores propios (véase [5]).

## 5.2 Cálculo del valor SNR

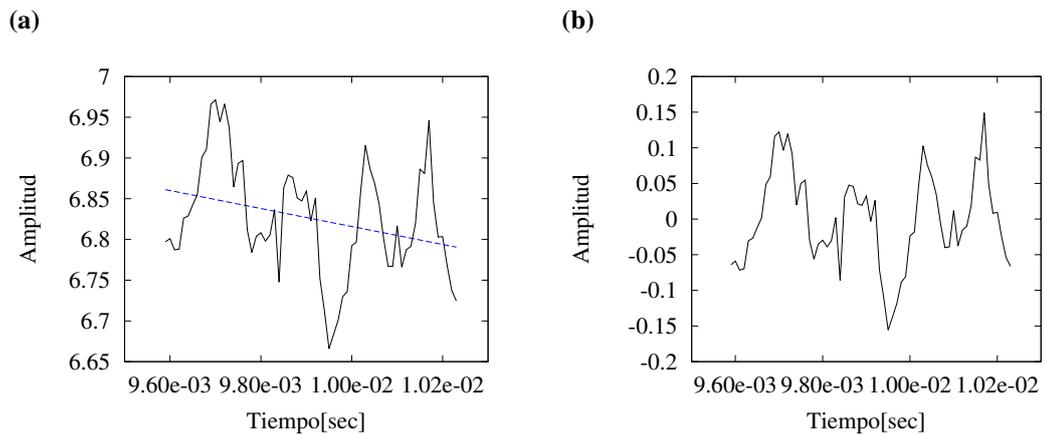
La adición de ruido a las señales de los ejemplos test que se consideran en el Capítulo 5 y 6 se implementa por medio de la adicción de ruido gaussiano blanco independiente en cada instante de tiempo, para obtener un valor prescrito de SNR. En concreto, el cálculo de SNR se obtiene como el cociente entre la media cuadrática de la señal con ruido (véase la Figura 5.1a) y la media cuadrática del ruido [1]. La media cuadrática del ruido se calcula usando la media móvil de ocho puntos de la señal con ruido, representada en la Figura 5.1b. El nivel de ruido se obtiene de la resta en los últimos 1024 puntos de dicha media móvil y su recta de regresión lineal (véase la Figura 5.2).

## 5.3 Test preliminar

Con el fin validar la implementación del algoritmo PDCO para resolver el problema CO10, se han empleado diferentes sistemas lineales construidos de forma aleatoria, sin presencia de ruido en los datos, con los que poder evaluar el efecto



**Figura 5.1:** Representación de una señal sin ruido y la señal original con un ruido blanco gaussiano de  $2 \times 10^{-1}$  (gráfica (a)). Filtrado de la señal original con ruido mediante la media móvil de ocho puntos (gráfica (b)).



**Figura 5.2:** Representación de los últimos 1024 puntos de la señal y su recta de regresión lineal (gráfica (a)). Resultado de la resta de los últimos 1024 puntos de la media móvil de ocho puntos de la señal con ruido y su recta de regresión lineal (gráfica (b)).

de la regularización  $L_2$ , y los escalados descritos en la Sección 4.2.

Se considera un sistema lineal  $Ax = b$ , donde la matriz  $A$  de tamaño  $m \times n$  y el vector solución  $x$  de tamaño  $n$ , donde todos sus coeficientes han sido generados aleatoriamente de manera uniforme entre 0 y 1. Una vez han sido así generados tanto la matriz  $A$  como el vector  $x$  se han multiplicado por factores constantes,

con lo que se obtienen matrices y vectores con diferentes normas  $\|A\|_\infty$  y  $\|\mathbf{x}\|_\infty$ . El vector  $\mathbf{b}$  se ha calculado como  $\mathbf{b} = A\mathbf{x}$ . De esta manera, se dispone de la solución exacta del sistema lineal para poder calcular el error con respecto a la solución calculada por el algoritmo PDCO.

Así mismo, se ha empleado el método iterativo LSMR para calcular las direcciones de búsqueda en el método de Newton. Siguiendo la configuración de [9], se considera un valor de  $\gamma$  igual a  $10^8$ . Además con el fin de no aumentar demasiado los recursos computacionales se considera que la norma residual final tenga una precisión aproximada de 6 dígitos, y por lo tanto se fijarán valores de  $\delta$  y  $\beta$  iguales a  $10^{-6}$  en el método LSMR.

Para evaluar el impacto de la regularización en la precisión aproximada, se ha variado el parámetro de regularización  $L_2$ , de manera que todos los coeficientes de la diagonal principal de la matriz  $D_2$  son iguales a  $10^{-3}$  o  $10^{-4}$  (valores recomendados en [9]). En los dos últimos casos, se cumple siempre que  $(D_2)_{jj} \gg \epsilon$  para  $j = 1, \dots, n$ , donde  $\epsilon$  es la precisión de punto flotante, típicamente  $2.2 \times 10^{-16}$ .

A modo de resumen, se muestran a continuación los parámetros empleados por el método PDCO y el algoritmo LSMR para este primer test preliminar:

$$\begin{array}{lll} \delta = 10^{-6}, & (D_2)_{jj} = 0, 10^{-3}, 10^{-4}, & m = 10^3, \\ \beta = 10^{-6}, & D = I, & n = 10, \\ \gamma = 10^8, & D_1 = 0, & \end{array}$$

Empleando distintas combinaciones de los parámetros anteriormente señalados se han obtenido los resultados de la norma infinita, norma euclidiana y el condicionamiento de la matriz del sistema  $A$ ; la norma infinita de los vectores  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{z}$ , el valor diagonal  $(D_2)_{jj}$ , el error relativo en norma infinito y el número de interacciones empleadas por el algoritmo PDCO. Todos estos resultados aparecen recogidos en las Tablas 5.1-5.6. Los resultados numéricos contenidos en estas tablas incluyen los diferentes escalados descritos en el Capítulo 4.

La aplicación de un escalado adecuado mejora la precisión de los resultados numéricos obtenidos con el algoritmo PDCO, tanto si se emplea regularización  $L_2$  como si se prescinde de ella.

Escalar solo la matriz del sistema mejora los resultados con respecto a la opción de no aplicar escalado alguno (véase la Tabla 5.1). Si se escala solo el vector del sistema (empleando cualquiera de las dos opciones) no es suficiente para obtener resultados precisos si  $\|A\|_\infty > 1$ . Al contrario, el error relativo se reduce

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	$\text{cond}(A)$	$\ b\ _\infty$	$(D_2)_{jj}$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.40E+05	5.06E+06	5.80E+00	4.91E+10	0.00E+00	5.09E+03	9.90E-01	9.90E-01	50
7.55E+05	5.04E+06	6.06E+00	3.73E+10	1.00E-04	3.25E+04	8.83E-01	8.64E-01	50
7.56E+05	5.11E+06	6.04E+00	4.34E+10	1.00E-03	8.99E+04	7.12E-06	3.85E-03	50
7.52E+05	5.14E+06	6.19E+00	4.93E+05	0.00E+00	9.07E-01	2.13E-01	9.18E-03	50
7.67E+05	5.15E+06	6.01E+00	4.37E+05	1.00E-04	8.11E-01	3.62E-01	3.86E-02	50
8.31E+05	5.11E+06	5.97E+00	4.51E+05	1.00E-03	9.48E-01	6.54E-01	2.50E-02	50
7.98E+05	5.11E+06	6.02E+00	3.25E+00	0.00E+00	8.97E-06	5.65E+00	3.86E-07	18
7.77E+05	5.06E+06	6.25E+00	4.22E+00	1.00E-04	9.77E-06	2.09E-01	1.12E-08	14
7.84E+05	5.08E+06	5.87E+00	4.88E+00	1.00E-03	9.95E-06	1.53E-01	5.19E-09	12
7.72E+00	5.05E+01	5.85E+00	3.75E+05	0.00E+00	1.09E+05	8.17E-01	2.18E-01	50
7.91E+00	5.07E+01	6.12E+00	4.20E+05	1.00E-04	9.59E+04	1.16E-07	2.22E-09	50
8.09E+00	5.12E+01	6.00E+00	3.69E+05	1.00E-03	8.86E+04	1.74E-10	6.97E-09	29
7.74E+00	5.07E+01	6.00E+00	4.52E+00	0.00E+00	9.92E-01	1.68E-06	9.38E-09	6
7.61E+00	5.09E+01	6.00E+00	3.82E+00	1.00E-04	9.58E-01	4.54E-06	2.81E-08	5
7.64E+00	5.09E+01	6.04E+00	3.55E+00	1.00E-03	8.37E-01	4.20E-06	3.45E-08	5
8.01E+00	5.04E+01	6.06E+00	5.00E-05	0.00E+00	1.65E-05	2.61E-02	1.59E+00	9
7.74E+00	5.08E+01	6.25E+00	4.03E-05	1.00E-04	1.73E-05	2.87E-02	2.00E+00	9
7.91E+00	5.08E+01	6.00E+00	3.99E-05	1.00E-03	1.58E-05	2.85E-02	2.00E+00	9
8.06E-05	5.04E-04	5.97E+00	4.36E+00	0.00E+00	9.18E+04	3.97E-11	2.33E-08	31
7.95E-05	5.02E-04	5.91E+00	4.03E+00	1.00E-04	6.95E+04	3.10E-12	2.55E-01	35
7.57E-05	5.12E-04	6.03E+00	4.19E+00	1.00E-03	1.16E+04	9.66E-12	8.45E-01	26
7.63E-05	5.07E-04	5.96E+00	3.51E-05	0.00E+00	1.97E+00	3.93E-07	2.81E+00	8
7.78E-05	5.13E-04	6.04E+00	3.56E-05	1.00E-04	1.87E+00	3.93E-07	2.73E+00	8
7.94E-05	5.12E-04	6.15E+00	3.87E-05	1.00E-03	6.61E-01	7.07E-07	5.47E-01	8
7.88E-05	5.07E-04	5.96E+00	5.01E-10	0.00E+00	1.71E+00	4.40E-07	2.53E+05	8
8.35E-05	5.04E-04	5.96E+00	3.21E-10	1.00E-04	1.69E+00	4.41E-07	3.29E+05	8
7.80E-05	5.08E-04	5.97E+00	3.74E-10	1.00E-03	6.11E-01	7.69E-07	1.05E+05	8

**Tabla 5.1:** Resultados obtenidos sin aplicar ningún tipo de escalado en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	cond(A)	$\ b\ _\infty$	$(D_2)_{jj}$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.84E+05	5.09E+06	6.01E+00	6.44E+04	0.00E+00	9.96E+04	2.96E-06	7.56E-12	5
8.10E+05	5.02E+06	6.01E+00	4.45E+04	1.00E-04	9.70E+04	4.31E+01	4.02E-09	6
7.87E+05	5.11E+06	6.05E+00	5.09E+04	1.00E-03	9.34E+04	4.75E+03	3.83E-07	6
7.45E+05	5.05E+06	5.97E+00	6.36E-01	0.00E+00	9.44E-01	2.61E-07	6.15E-08	7
7.52E+05	5.06E+06	6.11E+00	5.57E-01	1.00E-04	9.39E-01	3.39E-05	1.21E-05	10
7.71E+05	5.09E+06	6.03E+00	5.64E-01	1.00E-03	8.17E-01	3.51E-06	1.48E-06	9
8.01E+05	5.11E+06	6.06E+00	3.50E-06	0.00E+00	7.64E-06	1.07E-06	6.90E-02	10
7.66E+05	5.11E+06	6.04E+00	4.06E-06	1.00E-04	6.88E-06	1.46E-06	6.95E-02	9
7.71E+05	5.06E+06	5.97E+00	5.32E-06	1.00E-03	8.83E-06	2.28E-06	9.81E-02	8
7.97E+00	5.09E+01	5.98E+00	4.05E+04	0.00E+00	9.00E+04	1.04E-06	5.34E-12	6
7.87E+00	5.09E+01	6.01E+00	5.95E+04	1.00E-04	9.70E+04	5.78E+01	3.48E-09	6
8.01E+00	5.03E+01	6.02E+00	6.32E+04	1.00E-03	9.73E+04	6.15E+03	2.64E-07	5
7.96E+00	5.08E+01	6.06E+00	4.43E-01	0.00E+00	8.67E-01	1.22E-06	4.90E-07	9
8.22E+00	5.08E+01	6.17E+00	5.43E-01	1.00E-04	9.20E-01	3.78E-06	1.52E-06	10
7.42E+00	5.10E+01	6.10E+00	6.40E-01	1.00E-03	9.16E-01	3.48E-05	9.94E-06	10
7.52E+00	5.08E+01	6.04E+00	5.18E-06	0.00E+00	9.09E-06	1.95E-06	6.98E-02	8
8.19E+00	5.10E+01	6.08E+00	5.33E-06	1.00E-04	7.86E-06	2.47E-06	1.14E-01	8
7.79E+00	5.08E+01	6.07E+00	4.57E-06	1.00E-03	9.46E-06	1.22E-06	5.70E-02	9
7.90E-05	5.03E-04	5.86E+00	5.46E+04	0.00E+00	9.05E+04	1.91E-05	7.01E-11	5
8.04E-05	5.13E-04	6.03E+00	5.46E+04	1.00E-04	9.82E+04	5.37E+01	5.10E-09	5
8.19E-05	5.10E-04	5.95E+00	5.33E+04	1.00E-03	8.87E+04	4.73E+03	3.20E-07	5
8.43E-05	5.12E-04	6.02E+00	4.55E-01	0.00E+00	7.64E-01	3.52E-07	1.86E-07	7
7.60E-05	5.09E-04	5.94E+00	5.21E-01	1.00E-04	9.65E-01	1.46E-05	4.87E-06	9
7.97E-05	5.08E-04	6.04E+00	5.76E-01	1.00E-03	9.67E-01	1.37E-06	7.56E-07	7
7.59E-05	5.06E-04	6.20E+00	4.03E-06	0.00E+00	9.78E-06	1.06E-06	4.45E-02	10
7.98E-05	5.07E-04	6.11E+00	3.60E-06	1.00E-04	8.25E-06	7.19E-07	3.54E-02	10
8.22E-05	5.10E-04	6.14E+00	5.45E-06	1.00E-03	8.93E-06	1.85E-06	8.18E-02	8

**Tabla 5.2:** Resultados obtenidos escalando la matriz del sistema (véase Sección 4.2.1) en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	$\text{cond}(A)$	$\ b\ _\infty$	$(D_{2,ij})$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.76E+05	5.09E+06	5.99E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.61E+04	2.55E-11	3.04E-07	29
7.65E+05	5.10E+06	6.22E+00	1.00E+00	1.00E-04	3.40E+04	1.11E-11	5.54E-01	26
8.08E+05	5.06E+06	6.09E+00	1.00E+00	1.00E-03	6.59E+02	2.26E-10	9.92E-01	12
8.20E+05	5.10E+06	6.00E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.35E-01	9.73E-07	9.33E-08	7
7.36E+05	5.07E+06	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.16E-01	2.90E-06	2.67E-07	6
7.60E+05	5.06E+06	5.93E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.97E-01	7.20E-07	1.18E-07	6
7.80E+05	5.08E+06	5.99E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.72E-06	3.69E-01	5.26E-07	11
7.98E+05	5.05E+06	6.06E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.79E-06	2.49E-01	2.02E-07	11
7.50E+05	5.07E+06	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.36E-06	1.30E-01	1.06E-07	12
8.18E+00	5.11E+01	6.05E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.67E+04	3.54E-10	3.31E-06	30
7.96E+00	5.12E+01	6.13E+00	1.00E+00	1.00E-04	3.20E+04	4.12E-12	5.81E-01	29
8.24E+00	5.07E+01	5.89E+00	1.00E+00	1.00E-03	7.28E+02	4.80E-10	9.90E-01	12
8.28E+00	5.07E+01	6.13E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.37E-01	9.91E-06	9.56E-07	8
7.75E+00	5.12E+01	6.08E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.07E-01	2.70E-06	2.56E-07	8
7.73E+00	5.10E+01	6.07E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.15E-01	4.93E-07	1.03E-07	6
7.92E+00	5.08E+01	6.08E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.26E-06	1.75E+00	1.06E-06	15
7.80E+00	5.13E+01	6.10E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.50E-06	3.90E-01	3.71E-07	13
8.09E+00	5.08E+01	6.08E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.63E-06	5.13E+01	5.70E-05	16
7.73E-05	5.08E-04	5.97E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.78E+04	6.67E-11	8.42E-07	30
7.61E-05	5.13E-04	5.96E+00	1.00E+00	1.00E-04	3.06E+04	4.28E-12	5.49E-01	31
7.72E-05	5.05E-04	6.24E+00	1.00E+00	1.00E-03	7.19E+02	8.60E-10	9.89E-01	11
8.23E-05	5.10E-04	6.07E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.56E-01	2.15E-05	1.54E-06	7
7.80E-05	5.11E-04	6.05E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.49E-01	3.14E-04	2.54E-05	10
7.89E-05	5.02E-04	5.86E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.36E-01	2.49E-05	2.15E-06	8
8.55E-05	5.11E-04	6.01E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.86E-06	9.71E-01	1.18E-06	13
7.99E-05	5.08E-04	6.13E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.57E-06	1.35E-01	1.31E-07	12
7.66E-05	5.06E-04	5.91E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.06E-06	2.08E-01	1.68E-07	13

**Tabla 5.3:** Resultados obtenidos escalando el vector del sistema con la primera opción (véase Sección 4.2.2) en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	cond(A)	$\ b\ _\infty$	$(D_2)_{ji}$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.83E+05	5.06E+06	6.05E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.98E+04	6.86E-01	1.70E-07	14
7.76E+05	5.06E+06	6.00E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.79E+04	9.54E+00	2.35E-06	16
7.71E+05	5.06E+06	5.95E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.89E+04	1.67E+00	3.52E-07	15
7.77E+05	5.09E+06	6.09E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.35E-01	9.50E-01	1.71E-07	13
7.69E+05	5.04E+06	5.85E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.48E-01	1.01E+02	2.71E-05	17
7.33E+05	5.10E+06	6.18E+00	1.00E+00	1.00E-03	5.64E-01	5.45E-01	1.23E-07	15
7.94E+05	5.08E+06	6.04E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.05E-06	7.62E-01	1.88E-07	15
7.62E+05	5.11E+06	6.23E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.80E-06	4.21E+00	1.06E-06	16
7.48E+05	5.04E+06	6.07E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.48E-06	1.13E+01	2.40E-06	15
8.20E+00	5.16E+01	6.15E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.04E+04	4.51E-06	1.33E-07	6
7.75E+00	5.08E+01	5.99E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.22E+04	1.68E-05	4.52E-07	5
8.18E+00	5.10E+01	6.14E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.17E+04	5.38E-06	1.33E-07	6
7.84E+00	5.08E+01	6.04E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.03E-01	1.09E-05	2.27E-07	5
7.80E+00	5.05E+01	5.97E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.85E-01	5.21E-06	1.44E-07	6
8.39E+00	5.09E+01	6.29E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.81E-01	2.64E-06	6.73E-08	5
7.95E+00	5.10E+01	6.04E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.91E-06	1.04E-05	2.63E-07	6
7.62E+00	5.07E+01	5.90E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.32E-06	1.19E-05	2.75E-07	7
7.79E+00	5.08E+01	6.10E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.07E-06	2.25E-03	5.25E-05	9
7.43E-05	5.08E-04	6.00E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.81E+04	2.84E-11	5.98E-08	24
7.77E-05	5.09E-04	6.04E+00	1.00E+00	1.00E-04	7.79E+04	8.40E-11	2.05E-01	28
7.95E-05	5.05E-04	5.93E+00	1.00E+00	1.00E-03	1.07E+04	4.35E-11	8.50E-01	16
7.67E-05	5.07E-04	5.96E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.31E-01	2.03E-11	4.11E-08	25
7.28E-05	5.06E-04	6.05E+00	1.00E+00	1.00E-04	6.15E-01	1.62E-11	3.46E-01	26
7.54E-05	5.04E-04	5.93E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.73E-02	4.02E-10	8.52E-01	16
7.52E-05	5.06E-04	5.92E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.50E-06	3.16E-11	7.49E-08	24
7.93E-05	5.12E-04	6.11E+00	1.00E+00	1.00E-04	7.82E-06	1.39E-11	2.08E-01	25
7.75E-05	5.12E-04	6.09E+00	1.00E+00	1.00E-03	1.35E-06	4.09E-11	8.30E-01	17

**Tabla 5.4:** Resultados obtenidos escalando el vector del sistema con la segunda opción (véase Sección 4.2.3) en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	$\text{cond}(A)$	$\ b\ _\infty$	$(D_{2,ij})$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.53E+05	5.05E+06	5.98E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.40E+04	2.75E-11	2.16E-07	26
8.04E+05	5.07E+06	5.96E+00	1.00E+00	1.00E-04	3.24E+04	4.12E-12	6.54E-01	27
7.29E+05	5.05E+06	6.10E+00	1.00E+00	1.00E-03	6.89E+02	1.03E-09	9.91E-01	11
7.61E+05	5.09E+06	6.10E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.71E-01	6.19E-06	4.94E-07	7
7.39E+05	5.09E+06	6.03E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.86E-01	2.49E-06	2.49E-07	6
8.37E+05	5.06E+06	6.15E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.30E-01	1.06E-06	2.11E-07	7
7.95E+05	5.09E+06	6.01E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.77E-06	1.42E-01	1.34E-07	14
7.74E+05	5.11E+06	6.10E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.10E-06	1.10E-01	1.50E-07	14
7.71E+05	5.07E+06	5.95E+00	1.00E+00	1.00E-03	6.34E-06	1.75E-01	1.52E-07	13
8.24E+00	5.10E+01	6.13E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.65E+04	4.31E-11	4.59E-07	29
7.85E+00	5.07E+01	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-04	3.15E+04	3.78E-12	5.93E-01	29
7.56E+00	5.08E+01	6.03E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.04E+02	1.22E-10	9.87E-01	13
7.96E+00	5.12E+01	6.07E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.76E-01	5.10E-06	3.26E-07	7
7.59E+00	5.09E+01	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.13E-01	2.48E-06	2.39E-07	7
7.95E+00	5.05E+01	6.18E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.73E-01	9.63E-07	2.17E-07	7
8.71E+00	5.07E+01	6.11E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.67E-06	2.96E-01	2.68E-07	13
7.91E+00	5.12E+01	6.05E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.69E-06	2.10E+00	2.41E-06	13
7.39E+00	5.07E+01	5.92E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.52E-06	8.65E-02	6.97E-08	12
7.75E-05	5.12E-04	6.16E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.90E+04	2.14E-10	3.00E-06	32
7.85E-05	5.05E-04	5.96E+00	1.00E+00	1.00E-04	2.96E+04	6.81E-12	5.88E-01	28
7.53E-05	5.05E-04	5.94E+00	1.00E+00	1.00E-03	6.42E+02	1.64E-10	9.92E-01	11
7.89E-05	5.11E-04	5.97E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.41E-01	1.92E-05	1.86E-06	7
8.27E-05	5.05E-04	6.03E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.93E-01	2.08E-06	2.52E-07	8
7.81E-05	5.12E-04	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.10E-01	2.83E-06	4.27E-07	8
7.49E-05	5.10E-04	6.03E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.78E-06	7.26E-02	6.32E-08	13
7.69E-05	5.11E-04	5.94E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.94E-06	1.73E-01	1.55E-07	14
7.61E-05	5.07E-04	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.80E-06	1.07E+00	1.31E-06	12

**Tabla 5.5:** Resultados obtenidos escalando el vector con la primera opción y la matriz del sistema (véase Secciones 4.2.1 y 4.2.2) en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

$\ A\ _\infty$	$\ A\ _2$	cond(A)	$\ b\ _\infty$	$(D_2)_{jj}$	$\ x\ _\infty$	$\ z\ _\infty$	error	# iter.
7.96E+05	5.08E+06	6.20E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.04E+04	1.34E-06	2.63E-07	9
8.39E+05	5.07E+06	5.89E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.45E+04	9.39E-07	2.26E-07	6
7.86E+05	5.01E+06	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-03	7.97E+04	1.07E-06	6.83E-07	9
7.64E+05	5.13E+06	6.04E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.01E-01	1.03E-06	1.81E-07	9
8.29E+05	5.06E+06	6.09E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.71E-01	1.06E-05	2.39E-06	11
8.17E+05	5.11E+06	5.92E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.03E-01	1.25E-06	6.92E-07	9
7.68E+05	5.08E+06	6.13E+00	1.00E+00	0.00E+00	7.60E-06	3.55E-07	5.34E-08	7
7.34E+05	5.05E+06	5.98E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.91E-06	1.57E-06	2.78E-07	9
7.75E+05	5.07E+06	6.02E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.93E-06	7.28E-07	5.00E-07	8
7.55E+00	5.06E+01	5.94E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.01E+04	1.13E-06	1.55E-07	6
7.88E+00	5.10E+01	5.92E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.43E+04	1.61E-06	3.17E-07	9
7.70E+00	5.05E+01	5.92E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.27E+04	9.86E-06	1.87E-06	11
7.47E+00	5.04E+01	6.03E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.84E-01	1.01E-05	1.99E-06	9
8.03E+00	5.04E+01	6.09E+00	1.00E+00	1.00E-04	8.79E-01	3.29E-06	7.65E-07	10
7.83E+00	5.09E+01	6.09E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.97E-01	1.72E-06	7.72E-07	9
7.67E+00	5.06E+01	5.88E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.19E-06	4.38E-07	7.71E-08	8
8.26E+00	5.10E+01	5.95E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.51E-06	9.44E-07	2.01E-07	7
7.90E+00	5.07E+01	5.99E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.98E-06	2.44E-05	4.59E-06	9
7.94E-05	5.11E-04	6.02E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.81E+04	9.94E-06	2.30E-06	8
7.66E-05	5.09E-04	6.01E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.87E+04	3.13E-07	6.74E-08	7
7.82E-05	5.04E-04	5.91E+00	1.00E+00	1.00E-03	8.46E+04	1.26E-06	6.24E-07	8
8.07E-05	5.05E-04	6.02E+00	1.00E+00	0.00E+00	9.78E-01	1.55E-06	2.85E-07	9
8.04E-05	5.08E-04	6.00E+00	1.00E+00	1.00E-04	9.31E-01	5.54E-07	1.11E-07	8
7.64E-05	5.08E-04	5.99E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.58E-01	5.17E-07	4.10E-07	8
7.77E-05	5.09E-04	6.08E+00	1.00E+00	0.00E+00	8.82E-06	7.86E-05	1.49E-05	12
7.96E-05	5.11E-04	6.11E+00	1.00E+00	1.00E-04	5.38E-06	9.10E-07	1.71E-07	9
8.01E-05	5.01E-04	5.87E+00	1.00E+00	1.00E-03	9.12E-06	6.85E-07	4.60E-07	8

**Tabla 5.6:** Resultados obtenidos escalando el vector con la segunda opción y la matriz del sistema (véase Secciones 4.2.1 y 4.2.3) en la resolución del sistema lineal  $Ax = b$  con el algoritmo PDCO, cuando  $A$  y  $x$  se generan de forma aleatoria.

cuando se emplea el escalado en la matriz y cualquiera de los escalados del segundo miembro (véanse las Tablas 5.5-5.6).

Más precisamente, si se combina el escalado de la matriz y el segundo miembro del sistema, claramente, de entre todas las combinaciones posibles, la opción que presenta un menor número de iteraciones para converger con el método LSMR, así como un menor error relativo, se tiene al emplear la segunda opción de escalado del vector junto con el escalado de la matriz del sistema (véase la Tabla 5.6). De esta forma, en lo que resta del presente trabajo, se empleará el segundo escalado del vector conjuntamente con el escalado de la matriz del sistema.

## 5.4 Delta de Dirac como ILT

Con el objetivo de validar el código en un caso donde la solución del problema se simple, se ha considerado un problema de relaxometría donde la transformada inversa de Laplace sea proporcional a una delta de Dirac.

Más precisamente, se ha considerado  $f(T) = 2\delta(T - 1)$  en el problema continuo (2.1), siendo  $\delta$  la delta de Dirac centrada en cero.

De esta forma, se construye una señal sintética  $s(t)$  sin considerar ruido alguno, de la forma

$$s(t) = \int_0^{\infty} \exp(-t/T)f(T)dT = 2 \exp(-t), \quad (5.1)$$

y por tanto los valores discretos de la señal  $s_j = s(t_j) = 2 \exp(-t_j)$ , donde  $t_j$ , para  $j = 1, \dots, m$ , son los tiempos de adquisición de la señal (véase la Figura 5.3a).

Con el fin de aplicar el algoritmo PDCO al problema del cálculo de la transformada de Laplace inversa, se discretiza dicha señal construida aproximando la ecuación (5.1). Recordemos que esta discretización viene dada por (2.3), esto es,

$$s_l = \sum_{j=1}^n f(T_j) \exp(-t_l/T_j)(\Delta T)_j, \quad l = 1, \dots, m,$$

donde  $(\Delta T)_j = T_j - T_{j-1}$  con  $j = 1, \dots, n$  y  $t_l = l\Delta t$  con  $l = 1, \dots, m$ . Para ello se considera un valor  $m$  (tamaño del vector señal) igual a 100, que se corresponde a  $\Delta t = 0.1$  segundos, cuando el tiempo total de muestreo de la señal es igual a 10 segundos.

Se considerarán todos los coeficientes de  $(\Delta T)_j$  iguales a  $\Delta t$  para  $j = 1, \dots, n$ . Además,  $n$  será igual a 20 puntos de discretización para los tiempos de relajación, de manera que  $T \in [0, 2]$ . De esta forma, la matriz  $KC$  discreta resultante (véase (2.4)) tendrá un tamaño  $100 \times 20$ . Así mismo, es de esperar que según  $(\Delta T)_j$  tienda a cero,  $\sum_{j=1}^n f(T_j)(\Delta T)_j \rightarrow 2$  debido a las propiedades de la delta de Dirac.

Recordemos que con el fin de no utilizar elevados recursos computacionales, se ha empleado el método iterativo LSMR con los mismos parámetros que en el test anterior.

Resolvemos con el algoritmo PDCO sin regulación  $L_1$  y  $L_2$ , esto es, fijamos los coeficientes de regularización en (4.2) como  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ . La solución aproximada obtenida se ha representado en la Figura 5.3b.

A modo de resumen, se muestran a continuación los parámetros empleados por el método PDCO y el algoritmo LSMR para el test con la delta de Dirac como solución:

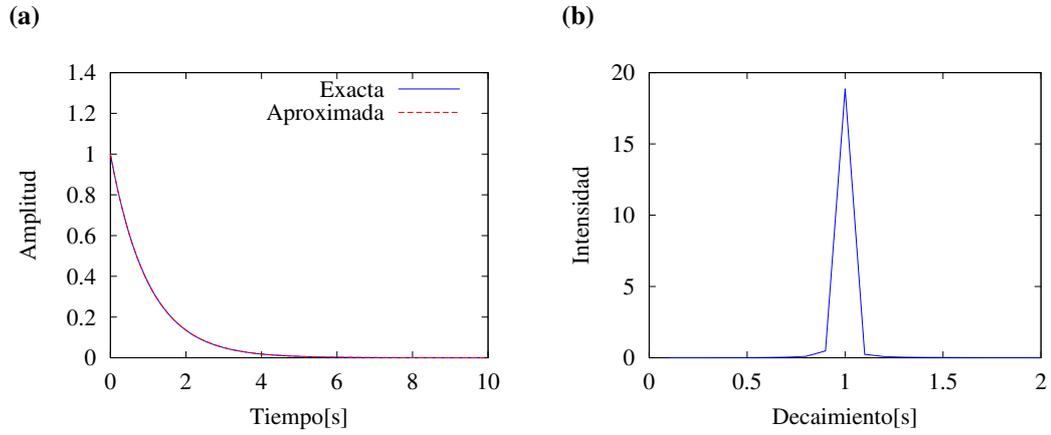
$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, & \delta &= 10^{-6}, & m &= 100, \\ \lambda_2 &= 0, & \beta &= 10^{-6}, & n &= 20, \\ D &= I, & \gamma &= 10^8, & (\Delta T)_j &= \Delta t = 0.1, \quad j = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Se observa en la Figura 5.3b que el valor máximo alcanzado en el pico de la gráfica es aproximadamente  $2/(\Delta T)_j \approx 2/0.1 = 20$ , el cual es cualitativamente el valor esperado debido a las propiedades de la delta de Dirac en el problema continuo.

En las gráficas de la Figura 5.4 se muestran los resultados numéricos obtenidos al aplicar distintas combinaciones de regularización, es decir, para distintos valores de  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ .

Tal y como se observa en la Figura 5.4b empleando solo regularización  $L_1$  y empleando distintos valores de  $\lambda_2$  se obtienen soluciones idénticas, por lo que, se concluye que la regulación  $L_1$  no afecta substancialmente la solución de este test sino está acompañada de la regularización  $L_2$ . Así mismo, la Figura 5.4a muestra además que la solución es muy sensible a los valores elegidos para la regularización  $L_2$ , observándose que únicamente las soluciones con valores más bajos de  $\lambda_2$  capturan bien la singularidad producida por la delta de Dirac en el punto  $T = 1$ .

En las gráficas de las Figura 5.5 se muestran distintas soluciones aproximadas calculadas por el algoritmo PDCO al variar los valores de  $\Delta t$  y  $(\Delta T)_j$  para

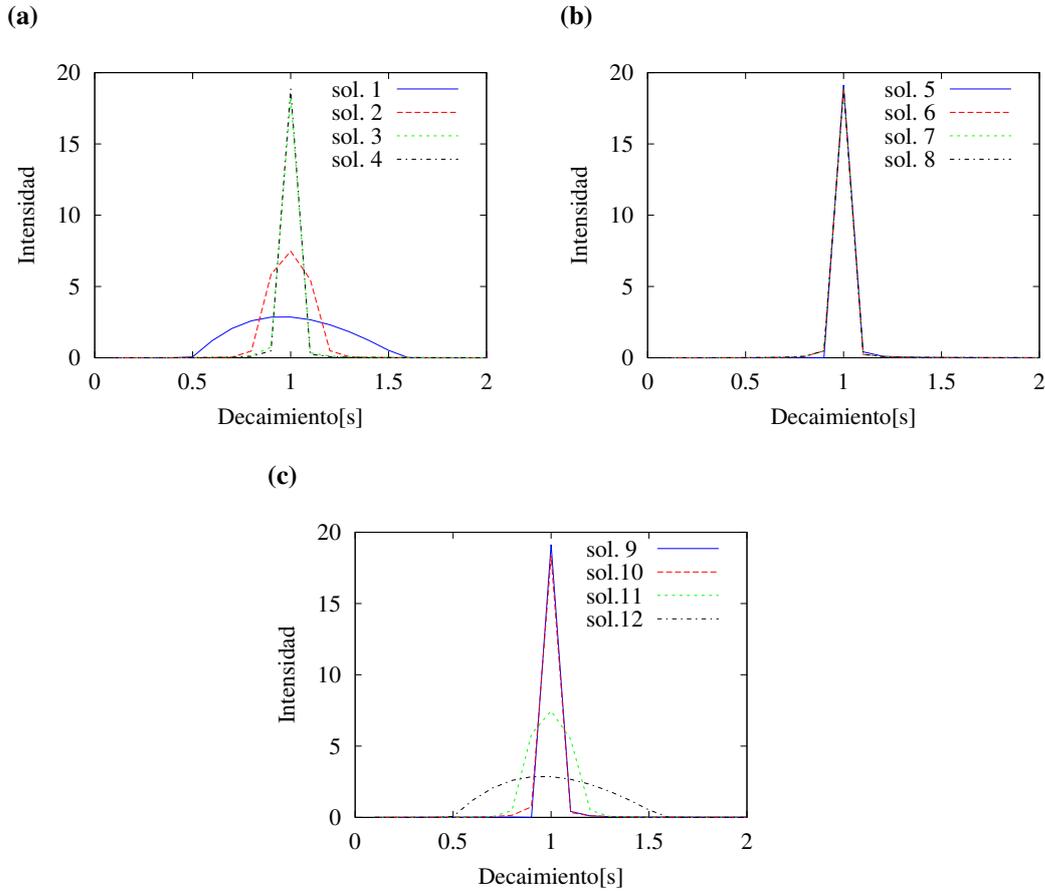


**Figura 5.3:** Test donde la solución es proporcional a una delta de Dirac. (a) Decaimiento exponencial de la señal. (b) Solución aproximada utilizando el algoritmo PDCO sin regularización.

$j = 1, \dots, n$  empleados según se refleja en la Tabla 5.7. Debemos hacer notar que al variar  $\Delta t$  y  $(\Delta T)_j$ , también se modifican los valores de  $m$  y  $n$  con el fin de mantener constante el tiempo total de muestreo de la señal y los límites del intervalo de la constante de decaimiento,  $T \in [0, 2]$ . Se observa que para obtener resultados precisos hay que disminuir tanto  $\Delta t$  como  $(\Delta T)_j$ , de manera que los resultados solamente son cualitativamente correctos en los casos en los que  $\Delta t$  y  $(\Delta T)_j$  son iguales entre si y con valores de  $10^{-2}$  y  $10^{-3}$ .

	$\Delta t$	$(\Delta T)_j$	$m$	$n$
Sol. a	$10^{-1}$	$10^{-1}$	$10^2$	20
Sol. b	$10^{-2}$	$10^{-2}$	$10^3$	200
Sol. c	$10^{-3}$	$10^{-3}$	$10^4$	2000
Sol. d	$10^{-1}$	$10^{-3}$	$10^2$	2000
Sol. e	$10^{-2}$	$10^{-2}$	$10^3$	200
Sol. f	$10^{-3}$	$10^{-1}$	$10^4$	20
Sol. g	$10^{-3}$	$10^{-1}$	$10^4$	20
Sol. h	$10^{-2}$	$10^{-2}$	$10^3$	200
Sol. i	$10^{-1}$	$10^{-3}$	$10^2$	2000

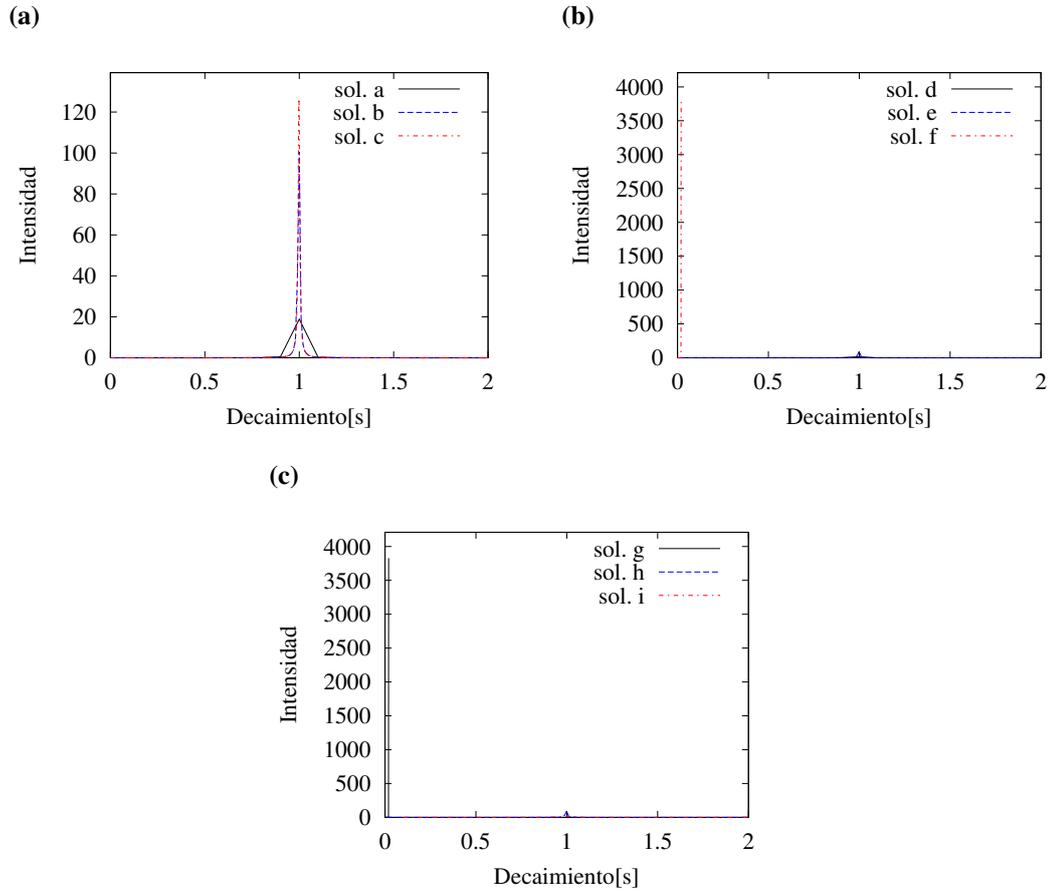
**Tabla 5.7:** Valores de  $\Delta t$ ,  $(\Delta T)_j$  y los correspondientes valores de  $m$  y  $n$  asociados a las soluciones a-i que se presentan en la Figura 5.5.



**Figura 5.4:** (a) Resultados obtenidos en el problema de la delta de Dirac usando PDCO sin regularización  $L_1$  y con distintos valores de  $\lambda_2$ , 0,  $10^{-2}$ ,  $10^{-4}$  y  $10^{-6}$ , correspondientes a las soluciones 1, 2, 3 y 4, respectivamente. (b) Resultados obtenidos en problema de la delta de Dirac usando PDCO sin regularización  $L_2$  y con distintos valores de  $\lambda_1$ , 0,  $10^{-2}$ ,  $10^{-4}$  y  $10^{-6}$ , correspondientes a las soluciones 5, 6, 7 y 8, respectivamente. (c) Resultados obtenidos en problema de la delta de Dirac usando PDCO con regularización  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  con distintos pares de valores  $(\lambda_1, \lambda_2)$ :  $(10^{-2}, 10^{-8})$ ,  $(10^{-4}, 10^{-6})$ ,  $(10^{-6}, 10^{-4})$  y  $(10^{-8}, 10^{-2})$ , correspondientes a las soluciones 9, 10, 11 y 12, respectivamente.

## 5.5 Combinación lineal de deltas de Dirac como ILT

Procediendo de forma análoga al test anterior, se consideran los datos sintéticos correspondientes a la señal n°. 3 empleada en [1] con SNR igual a 17395. A saber, valores de  $T$  iguales a  $T_1 = 3.54 \times 10^{-3}$ ,  $T_2 = 21.54 \times 10^{-3}$  y  $T_3 =$



**Figura 5.5:** Resultados numéricos obtenidos en el problema de la delta de Dirac usando PDCO sin emplear regularización  $L_1$  y  $L_2$  y con distintos valores de  $\Delta t$ ,  $(\Delta T)_j$  (y sus correspondientes valores de  $m$  y  $n$ ).

$131.11 \times 10^{-3}$  segundos, con amplitudes de 400, 400 y 200 respectivamente; esto es,

$$f(T) = 400\delta(T - T_1) + 400\delta(T - T_2) + 200\delta(T - T_3),$$

Para reproducir la configuración usada en la referencia [1], se ha usado  $\Delta t = 10^{-4}$  y  $m = 16384$ . Como consecuencia el tiempo de muestreo es de 1.6384 segundos.

En este test, se consideran todas las componentes de  $(\Delta T)_j$  para  $j = 1, \dots, n$  iguales a  $\Delta t$ , y el tamaño de discretización de las amplitudes  $n$  igual a  $10^4$ , de manera que, los valores discretos para  $T$  estén comprendidos entre  $10^{-4}$  y  $10^0$ , de forma análoga a los resultados numéricos analizados en [1].

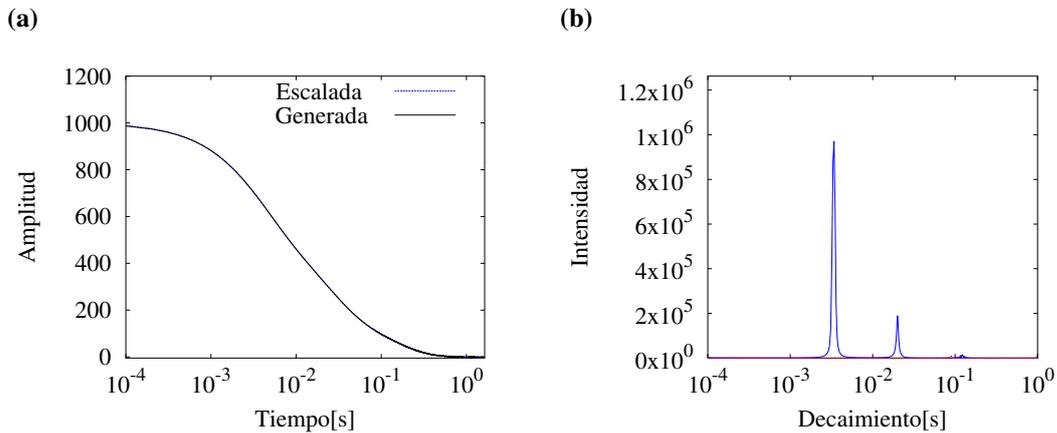
Para determinar los valores adecuados de la matriz diagonal  $D_2$  se han ensayado los valores recomendados en [9] con el objetivo de obtener los resultados numéricos precisos. Con la elección de  $(D_2)_{jj} = 10^{-2}$  o  $10^{-3}$ , el algoritmo PDCO no converge. Al contrario con valores de la diagonal iguales a  $10^{-4}$ , el algoritmo converge en 36 iteraciones.

A modo de resumen, a continuación se muestran los parámetros empleados por el método PDCO y el algoritmo LSMR para el test de la combinación lineal de deltas de Dirac:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 10, & \delta &= 10^{-6}, & m &= 16384, \\ \alpha_2 &= 5, & \beta &= 10^{-6}, & n &= 10^4, \\ (\Delta T)_j &= \Delta t = 10^{-4}, \quad j = 1, \dots, n, & \gamma &= 10^8, & & \end{aligned}$$

Finalmente los resultados obtenidos se muestran en la Figura 5.6. Se observa, tal y como se esperaba, que cada uno de los picos está localizado sobre el soporte de las deltas de Dirac que forman la combinación lineal (véase la Figura 5.6b).

A pesar de que los picos no capturan puntualmente el valor de las amplitudes de las deltas de Dirac, la reconstrucción temporal de la señal recupera de forma bastante precisa la señal exacta (véase la Figura 5.6a).



**Figura 5.6:** (a) Reconstrucción de la señal original a partir de la solución aproximada calculada. (b) Solución aproximada calculada por el algoritmo PDCO.

## 5.6 Funciones gaussianas

Con el objetivo de reproducir los resultados numéricos que aparecen en el trabajo [1], se ha utilizado como solución exacta una combinación lineal de funciones gaussianas, esto es,

$$f(T) = \sum_{j=1}^3 \frac{A_j}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(T - \mu_j)^2}{2\sigma_j^2}\right), \quad (5.2)$$

donde  $\mu_j$  representa la posición de los máximos locales de  $f(T)$ ,  $\sigma_j$  modela la dispersión de cada una de las contribuciones de  $f(T)$ , y  $A_j$  es la amplitud de cada contribución.

Para la señal n.º. 3 con SNR igual a 17395 empleada en la referencia [1], se ha usado valores de  $\mu_j$  iguales a  $\mu_1 = 3.54 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_2 = 21.54 \times 10^{-3}$  y  $\mu_3 = 131.11 \times 10^{-3}$  segundos, con amplitudes  $A_1 = 400$ ,  $A_2 = 400$  y  $A_3 = 200$ .

Con el fin de poder determinar las desviaciones típicas  $\sigma_j$  de la manera más parecida a como se han utilizado en [1], cada pico escalará logarítmicamente su dispersión. Concretamente, la dispersión  $\sigma_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  asociada a cada contribución gaussiana de la solución exacta se ha fijado a  $\sigma_1 = 3 \times 10^{-4}$ ,  $\sigma_2 = 3 \times 10^{-3}$  y  $\sigma_3 = 3 \times 10^{-2}$ .

Señalar que en [1] se menciona que emplea funciones gaussianas con desviaciones típicas escaladas logarítmicamente por un factor 2, 3, 4, y 5, pero sin indicar que valor concreto utiliza para cada una de las señales estudiadas. Después de construir todas las señales con todas las desviaciones típicas indicadas, se ha determinado que el valor de la desviación típica igual a 3 es el que produce las soluciones exactas cualitativamente más próximas a las que aparecen en [1].

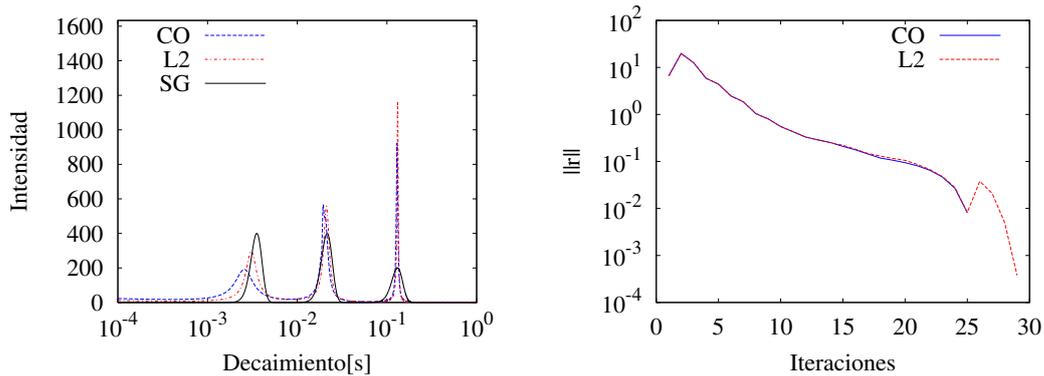
A modo de resumen, a continuación se muestran los parámetros empleados por el método PDCO y el algoritmo LSMR para el test de la combinación lineal de tres funciones gaussianas:

$$\begin{array}{llll} \alpha_1 = 10, & \sigma_1 = 3 \times 10^{-4}, & \delta = 10^{-6}, & m = 16384, \\ \alpha_2 = 5, & \sigma_2 = 3 \times 10^{-3}, & \beta = 10^{-6}, & n = 10^4. \\ \Delta t = 10^{-4}, & \sigma_3 = 3 \times 10^{-2}, & \gamma = 10^8, & \end{array}$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 5.7, donde se observa que no son del todo precisos, ya que los puntos de discretización  $(\Delta T)_j$  están linealmente espaciados. Para evitar el uso de esta discretización se ha modificado el vector de

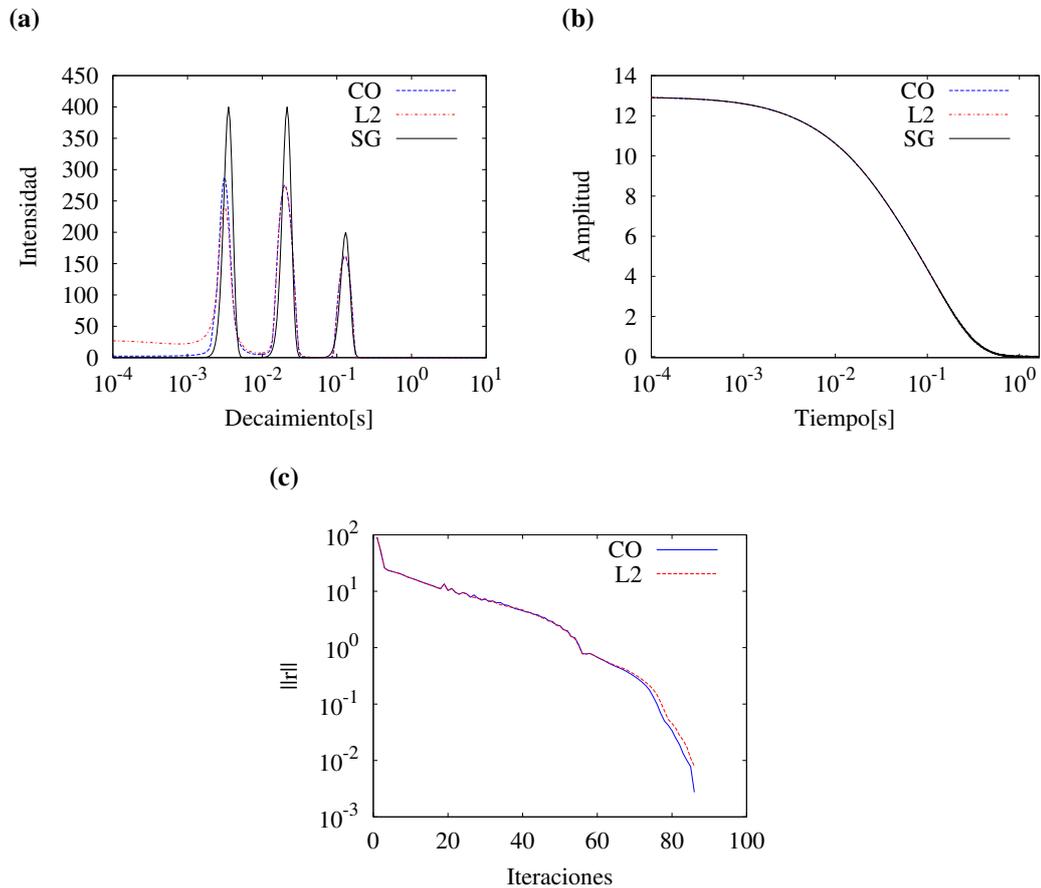
puntos  $(\Delta T)_j$  para  $j = 1, \dots, n$  de manera que ahora se genere con 256 valores espaciados logarítmicamente entre  $10^{-4}$  y  $10^1$ , es decir,  $(\Delta T)_j = T_j - T_{j-1}$  con  $j = 1, \dots, n$ , donde

$$T_j = 10^{-4 + \frac{5(j-1)}{n-1}}, \quad j = 1, \dots, n.$$



**Figura 5.7:** Solución aproximada (izquierda) y residuo representado frente al número de iteraciones (derecha) obtenidos en el test donde la solución es la combinación lineal de tres funciones gaussianas empleando PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  (CO), solo regularización  $L_2$  (L2), y la señal simulada original (SG), utilizando un conjunto de puntos  $(\Delta T)_j$ ,  $j = 1, \dots, n$  espaciados linealmente entre  $10^{-4}$  y  $10^0$ .

En la Figura 5.8 se muestran los resultados numéricos obtenidos para la discretización con puntos logarítmicamente espaciados entre  $10^{-4}$  y  $10^1$ . En la Figura 5.8a se observa como empleando regularización  $L_1$  y  $L_2$  se recupera cualitativamente la señal sintética generada de forma análoga a la que aparece reflejada en [1]. Sin embargo, empleando únicamente regularización  $L_2$  no se ha podido reproducir los resultados con la misma precisión. Así mismo, según se observa en la Figura 5.8c, no se aprecian diferencias significativas en el residuo calculado y en el rango de iteraciones requeridas por el algoritmo PDCO. Además, tal y como se muestra en la Figura 5.8b, la señal original y la reconstruida a partir de la aproximación numérica concuerda de forma precisa.



**Figura 5.8:** Resultados numéricos obtenidos en el test cuya solución exacta es la combinación lineal de tres funciones gaussianas, donde la discretización viene dada por un conjunto de puntos logarítmicamente espaciados, empleando PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  (CO), PDCO con solo regularización  $L_2$  (L2), y la señal simulada original (SG). (a) Solución aproximada. (b) Señal exacta y señal reconstruida a partir de la aproximación numérica. (c) Residuo de la aproximación numérica y rango de iteraciones requeridas por el algoritmo PDCO.



# Capítulo 6

## Resultados numéricos y Conclusiones

El código del algoritmo obtenido de la referencia [9] fue probado y validado con señales sintéticas en GNU OCTAVE 3.8.2. El objetivo de las simulaciones incluidas en este capítulo es determinar la precisión y la potencia de resolución de las señales analizadas en el trabajo [1] para distintos niveles de ruido. Además, estas simulaciones se han utilizado para determinar el rango dinámico en el que los resultados numéricos del cálculo de la transformada inversa de Laplace mediante el algoritmo PDCO son fiables.

En todos los casos, los parámetros del método LSMR y de la regularización  $L_1$  y  $L_2$  han sido fijados como

$$\begin{aligned} \delta &= 10^{-6}, & \alpha_1 &= 10, \\ \beta &= 10^{-6}, & \alpha_2 &= 5. \\ \gamma &= 10^8, \end{aligned}$$

En todas las señales se ha considerado que el periodo de muestreo  $\Delta t = 10^{-4}$  y el tamaño del vector de datos igual a  $m = 16384$ . Además, en todas las señales que son contribución de tres funciones gaussianas (veáse (5.2)) la dispersión de cada una de ellas viene dado por  $\sigma_1 = 3 \times 10^{-4}$ ,  $\sigma_2 = 3 \times 10^{-3}$  y  $\sigma_3 = 3 \times 10^{-2}$ .

### 6.1 Resultados numéricos

Siguiendo los test numéricos propuestos en [1], las señales empleadas a lo largo de esta sección se generan como la transformada inversa de Laplace de una combinación lineal de funciones gaussianas tal y como aparece descrito en la

Sección 5.6. En todos los casos, se han considerado diferentes niveles de ruido. Cinco tipos de señales han sido empleados: en la Tabla 6.1 se muestran los valores de  $\mu_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  que se han utilizado con cada una de las de señales. Para cada una de estas señales se han fijado los valores de  $A_1$ ,  $A_2$  y  $A_3$  iguales a 400, 400 y 200, respectivamente. En la Tabla 6.2 se muestran también los valores de SNR empleados para el análisis de las distintas señales en presencia de ruido.

	$\mu_1 (A_1 = 400)$	$\mu_2 (A_2 = 400)$	$\mu_3 (A_3 = 400)$
Señal 1	$1.44 \times 10^{-3}$	$21.54 \times 10^{-3}$	$323.45 \times 10^{-3}$
Señal 2	$2.25 \times 10^{-3}$	$21.54 \times 10^{-3}$	$205.93 \times 10^{-3}$
Señal 3	$3.54 \times 10^{-3}$	$21.54 \times 10^{-3}$	$131.11 \times 10^{-3}$
Señal 4	$5.56 \times 10^{-3}$	$21.54 \times 10^{-3}$	$83.48 \times 10^{-3}$
Señal 5	$8.73 \times 10^{-3}$	$21.54 \times 10^{-3}$	$53.15 \times 10^{-3}$

**Tabla 6.1:** Valores de  $\mu_j$  para cada una de las tres contribuciones gaussianas de los cinco tipos de soluciones exactas.

	SNR 1	SNR 2	SNR 3	SNR 4
Señal 1	15183	1973	535	413
Señal 2	18829	1869	592	308
Señal 3	17395	1722	583	285
Señal 4	19617	1752	593	298
Señal 5	18829	1869	592	308

**Tabla 6.2:** Valores de SNR (Signal-to-Noise Ratio) usado para cada una de los cinco tipos de soluciones exactas.

Recordemos que como se ha concluido en el Capítulo 5, los puntos de discretización  $(\Delta T)_j = T_j - T_{j-1}$ ,  $j = 1, \dots, n$  están espaciados logarítmicamente entre  $10^a$  y  $10^b$ .

$$T_j = 10^{a + \frac{(b-a)(j-1)}{n-1}}, \quad j = 1, \dots, n.$$

En la Tabla 6.3 se muestran, para cada una de las combinaciones señal-ruido, los valores de  $a$  y  $b$  empleados de manera que los resultados obtenidos sean lo más precisos posible.

La representación gráfica en el dominio del tiempo de las señales 1, 2, 3, 4 y 5 para un valor de SNR de 413, 308, 285, 298 y 308, respectivamente, se muestra

Señal 1			Señal 2			Señal 3		
SNR	$a$	$b$	SNR	$a$	$b$	SNR	$a$	$b$
15183	-4	1	18829	-4	1	17395	-4	1
1973	-4	1	1869	-4	1	1722	-4	0.5
535	-4	1	592	-4	1	583	-4	0
413	-4	1	308	-4	1	285	-4	0

Señal 4			Señal 5		
SNR	$a$	$b$	SNR	$a$	$b$
19617	-4	0.5	18829	-4	0
1752	-4	0.5	1869	-4	0
593	-4	0	592	-4	0
298	-4	0	308	-4	0

**Tabla 6.3:** Valores de  $a$  y  $b$ , que determinan el intervalo de discretización  $T_j \in [10^a, 10^b]$ , empleados para cada una de las combinaciones señal-ruido analizadas.

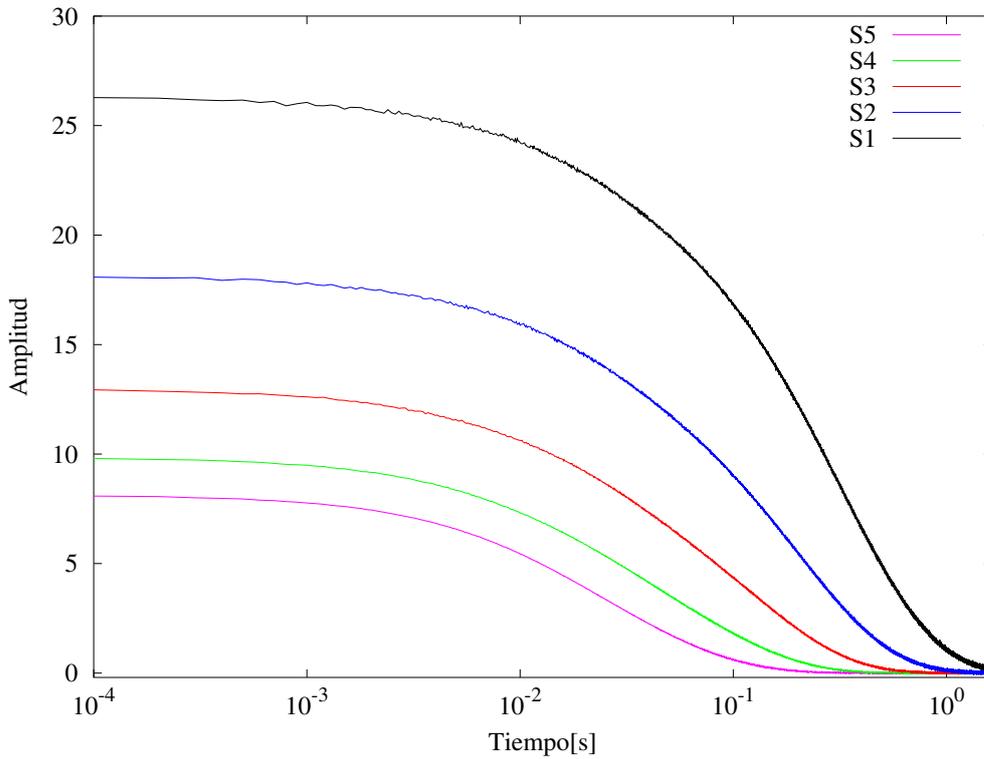
en la Figura 6.1.

Para un valor relativamente reducido de SNR se puede apreciar el rizado de las curvas debido a la presencia del ruido en la señal.

### 6.1.1 Precisión

Tal y como se indicó en el Capítulo 5, los puntos de discretización  $(\Delta T)_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , ha sido generado con distintos valores de  $n$  pero siempre equiespaciados logarítmicamente. Por lo que, con el fin de estudiar cómo se comporta el método numérico para distintos valores de  $n$ , se simula una señal con un único nivel de ruido fijo, concretamente la Señal 3 con SNR igual a 17395.

En las Figuras 6.2-6.5 se muestran los resultados obtenidos para valores de  $n$  iguales a  $2^5$ ,  $2^6$ ,  $2^7$  y  $2^8$ , utilizando el algoritmo PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  (etiquetada como CO en la leyenda de las gráficas), utilizando solo regularización  $L_2$  (solución etiquetada como L2), y la solución exacta (con etiqueta SG). Se observa que, tanto empleando regularización  $L_1$  y  $L_2$  como con solo regularización  $L_2$ , al aumentar el valor de  $n$ , aumenta también la precisión de los resultados, de manera que se ajustan mejor los resultados obtenidos a la solución exacta. Además, según lo esperado, se observa que al aumentar el valor de  $n$ , también aumenta



**Figura 6.1:** Representación gráfica en el dominio del tiempo de la señal 1 (S1), la señal 2 (S2), la señal 3 (S3), la señal 4 (S4) y la señal 5 (S5) para un valor de SNR de 413, 308, 285, 298 y 308, respectivamente.

el número de iteraciones empleadas por el algoritmo PDCO.

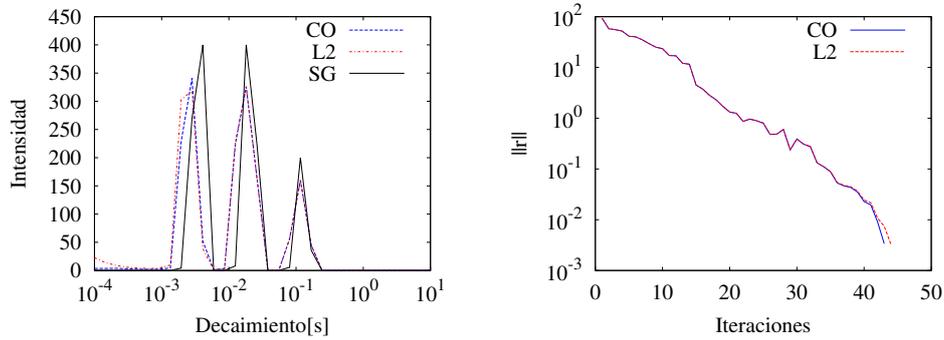
### 6.1.2 Rango dinámico

En el Capítulo 5 las contribuciones no nulas de la señal con respecto a las constantes de decaimiento  $T$  se sitúan siempre a la derecha del periodo de muestreo (que en estos casos se considera igual a  $\Delta t = 10^{-4}$ ), respetando lo indicado por MESTRELAB RESEARCH: con una separación mínima de 1.5 intervalos en escala logarítmica entre el periodo de muestreo y el pico situado más a la izquierda, es decir,

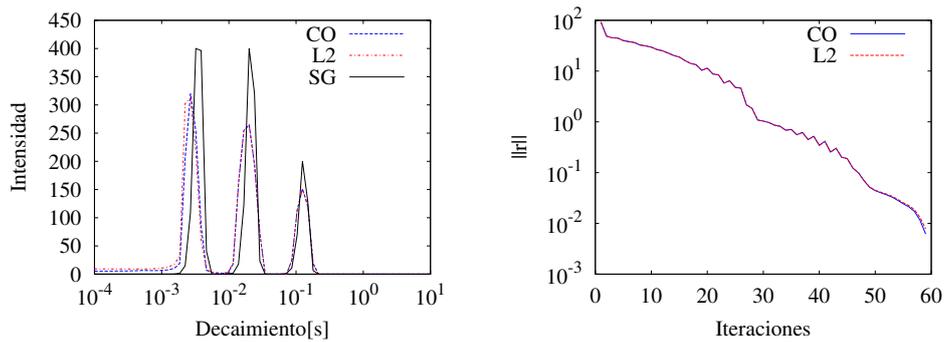
$$\log_{10}(\Delta t) \leq \log_{10}(T^*) - 1.5, \quad (6.1)$$

siendo  $T^*$  la posición del pico más a la izquierda.

Con el fin de estudiar como se comporta el método numérico cuando no se respeta dicha separación, se han considerado las señales 1 y 2 con distintos niveles



**Figura 6.2:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con  $\text{SNR} = 17395$  y  $n = 2^5$ .

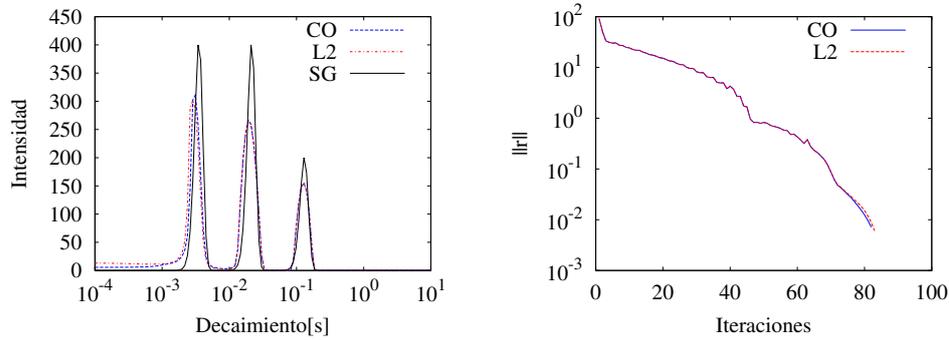


**Figura 6.3:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con  $\text{SNR} = 17395$  y  $n = 2^6$ .

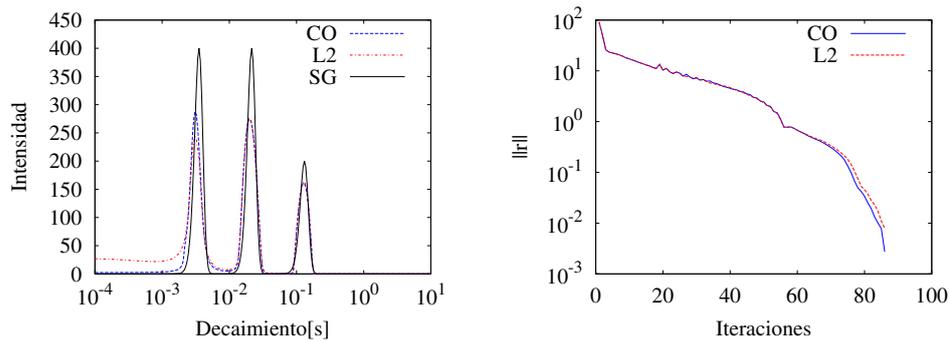
de ruido, cuyos picos progresivamente se fueron separando entre ellos, de manera que el situado más a la izquierda no respetará la condición (6.1).

En la Sección 6.1.1, los resultados más precisos se han obtenido para  $n = 2^8$  por lo que en todas las simulaciones numéricas que se muestran en las secciones siguientes se ha utilizado este tamaño de discretización.

En las Figuras 6.6-6.9 (para la señal 1) y 6.10-6.13 (para la señal 2) se muestran los resultados numéricos obtenidos en las simulaciones utilizando el algoritmo

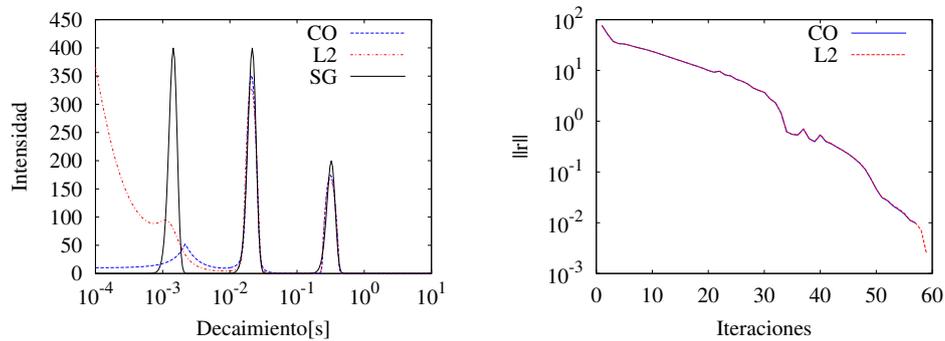


**Figura 6.4:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con  $\text{SNR} = 17395$  y  $n = 2^7$ .

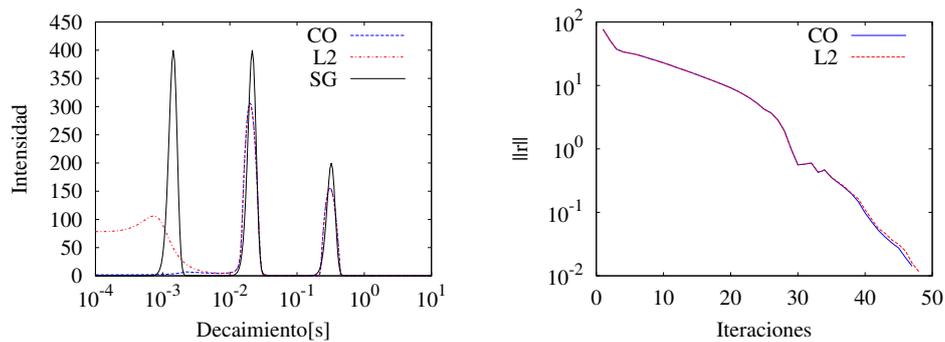


**Figura 6.5:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con  $\text{SNR} = 17395$  y  $n = 2^8$ .

mo PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  (CO), con solo regularización  $L_2$  (L2), y la solución exacta (SG). Para cada una de las señales, las figuras se han ordenado según los valores de SNR empleados (de mayor a menor). A la vista de los resultados numéricos obtenidos, donde se observa que el método no es capaz de recuperar el pico situado a la izquierda, se concluye el requisito (6.1) es esencial para obtener una solución aproximada precisa.



**Figura 6.6:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 15183.

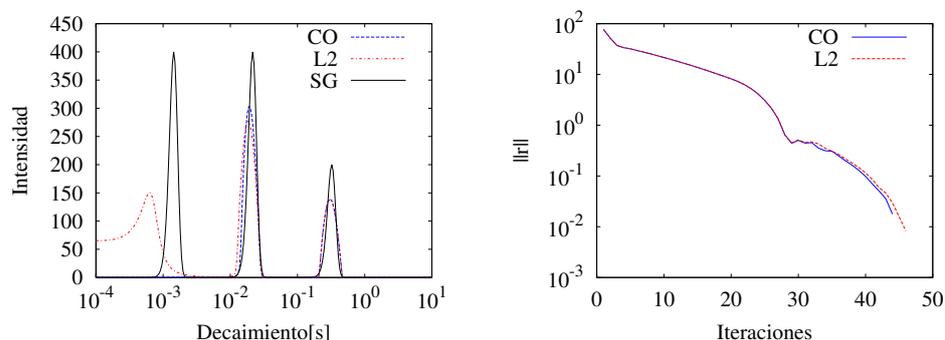


**Figura 6.7:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 1973.

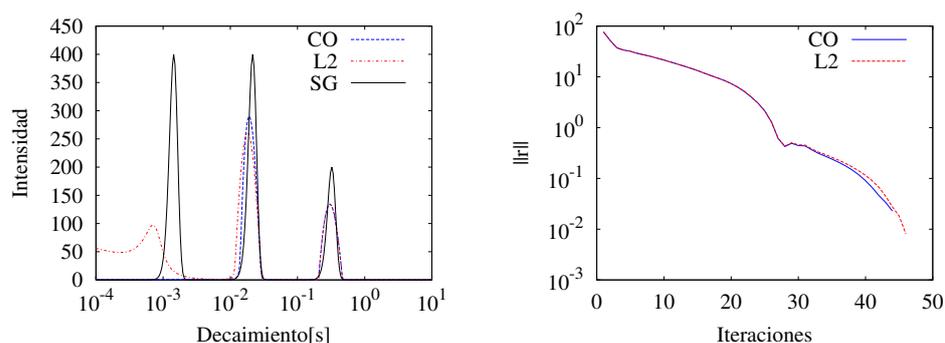
### 6.1.3 Potencia de resolución

Para estudiar la potencia de resolución del método numérico, se han considerado las señales 3, 4 y 5, con distintos niveles de ruido, donde los picos de la solución exacta progresivamente se acercan entre ellos.

Además, señalar que, a pesar de que en la Sección 5.6, ya se habían mostrado los resultados numéricos correspondientes a la Señal 3 con SNR igual a 17395, se ha considerado convenientemente volver a presentarlos una vez más en conjunto con los demás valores de SNR empleados para una mejor comprensión de la po-



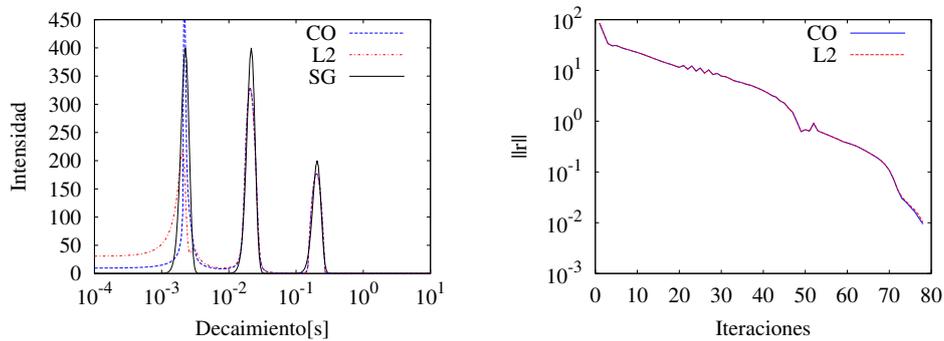
**Figura 6.8:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 535.



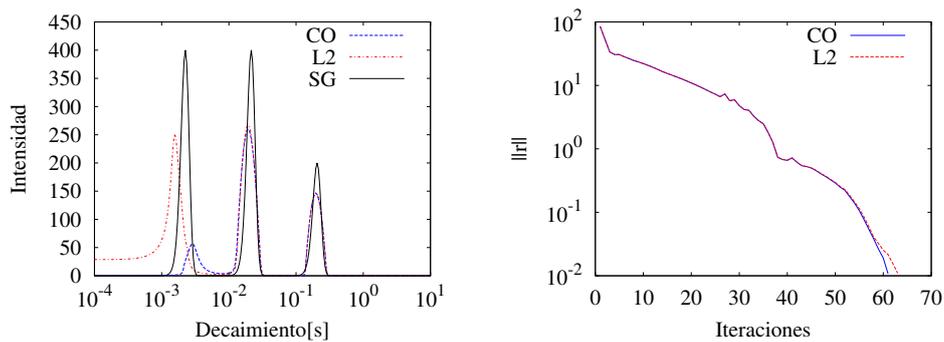
**Figura 6.9:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 1 con SNR 413.

tencia de resolución del método numérico.

En las Figuras 6.14-6.17 (para la señal 3), 6.18-6.21 (para la señal 4) y 6.22, -6.25 (para la señal 4) se muestran los resultados numéricos obtenidos en las simulaciones utilizando el algoritmo PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  (CO), PDCO con solo regularización  $L_2$  (L2), y la solución exacta (SG). Para cada una de las señales, las figuras se han ordenado según los valores de SNR empleados (de mayor a menor).



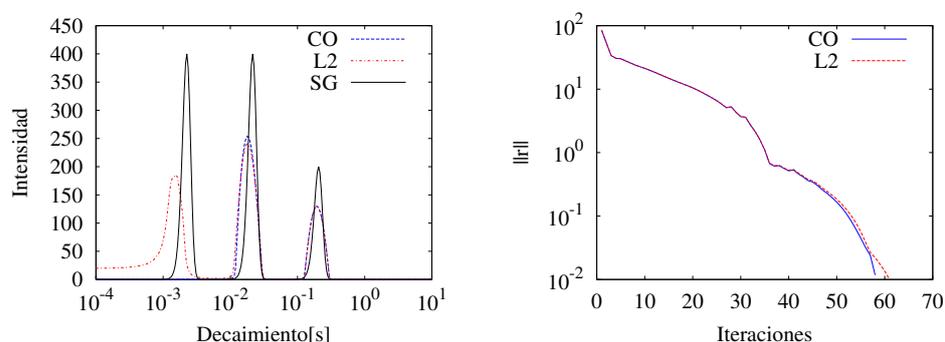
**Figura 6.10:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 19617.



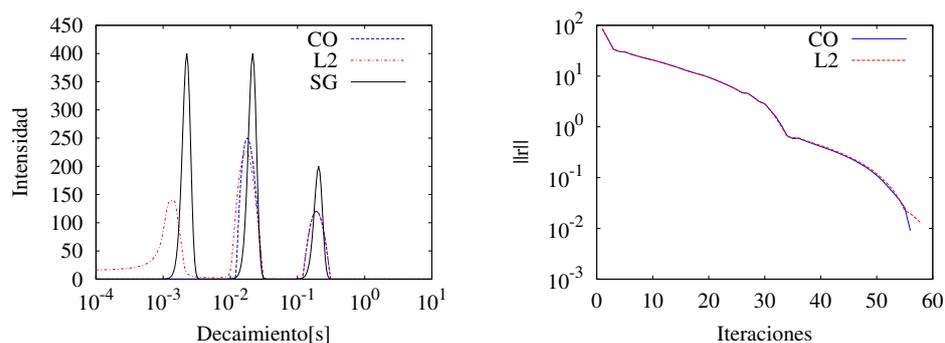
**Figura 6.11:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 1722.

Atendiendo a los datos mostrados en la Tabla 6.3 se observa como, en las señales con los picos más separados, según se aumenta el ruido, es decir, se disminuye el valor de SNR, se hace necesario que el límite superior de los puntos de discretización  $T_j$ , con  $j = 1, \dots, n$  estén más próximos a la posición del pico más a la derecha de la solución exacta.

En los resultados obtenidos se puede apreciar como la precisión con la que el algoritmo PDCO es capaz de recuperar la solución exacta, disminuye a medida que los picos de las señales se encuentran más próximos entre si, y aumenta a medida



**Figura 6.12:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 593.

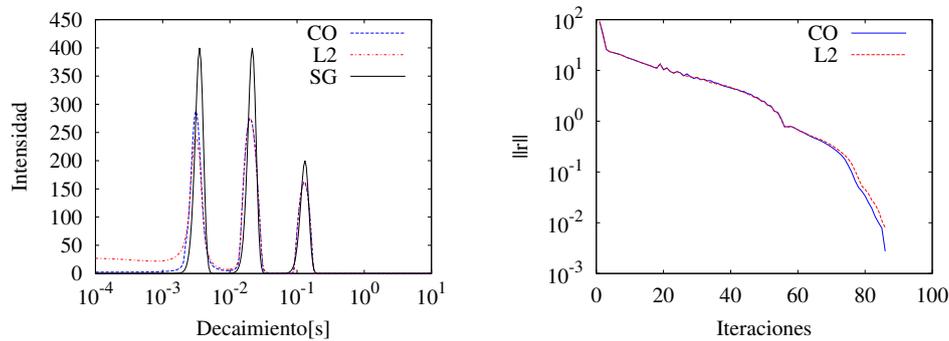


**Figura 6.13:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 2 con SNR 298.

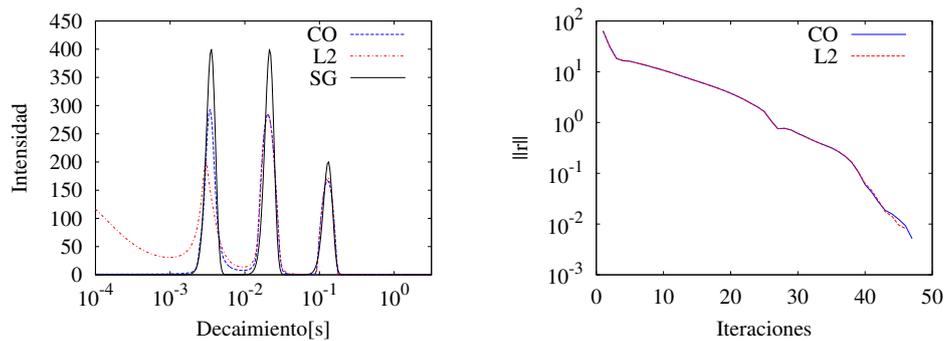
que el ruido es más bajo (valor de SNR más alto).

Cabe señalar que empleando regulación  $L_1$  y  $L_2$ , los resultados obtenidos son casi idénticos a los que aparecen en [1]. Sin embargo, empleado únicamente regularización  $L_2$  ha sido imposible reproducir los resultados con la misma precisión.

Para las señales analizadas, el rango de iteraciones requeridas por el método PDCO se mueve en valores de entre 25 y 90 iteraciones, aumentado su valor al disminuir el nivel de ruido. Puesto que el número de iteraciones es directamen-



**Figura 6.14:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 17395.

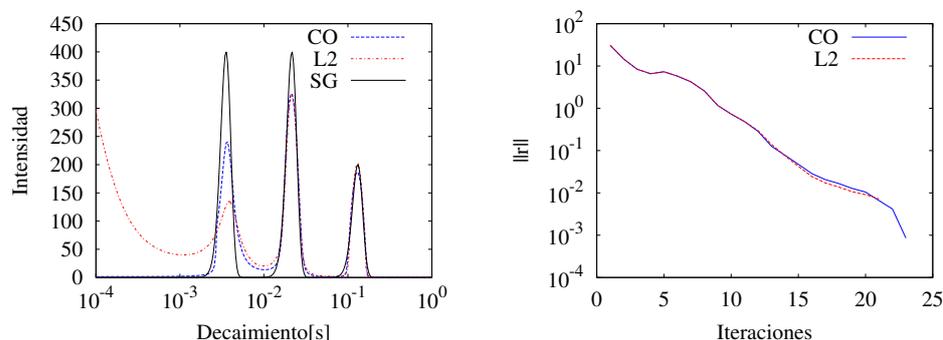


**Figura 6.15:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 1722.

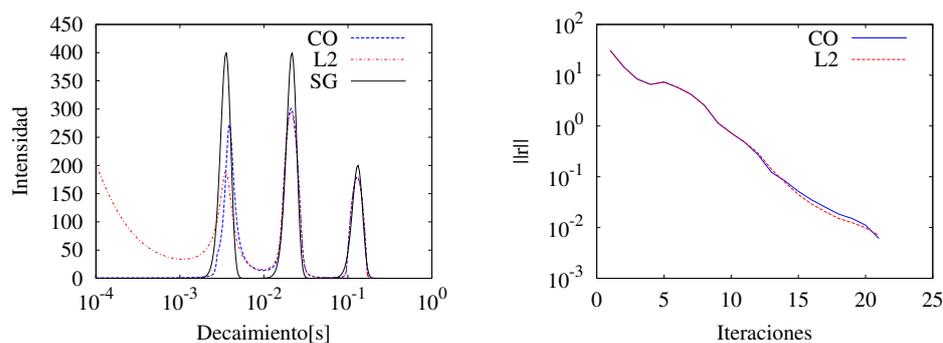
te proporcional al tiempo de cómputo, se concluye que el tiempo de ejecución aumenta cuando disminuye el nivel de ruido.

#### 6.1.4 Tiempos de ejecución

Con el fin de analizar, en distintos entornos de cómputo, el tiempo de ejecución requerido por cada una de las simulaciones realizadas en la Sección 6.1.3, en la Tabla 6.4 se muestran los tiempos de ejecución de distintos test utilizados en este capítulo. Para este análisis se han utilizado las siguientes máquinas del Su-



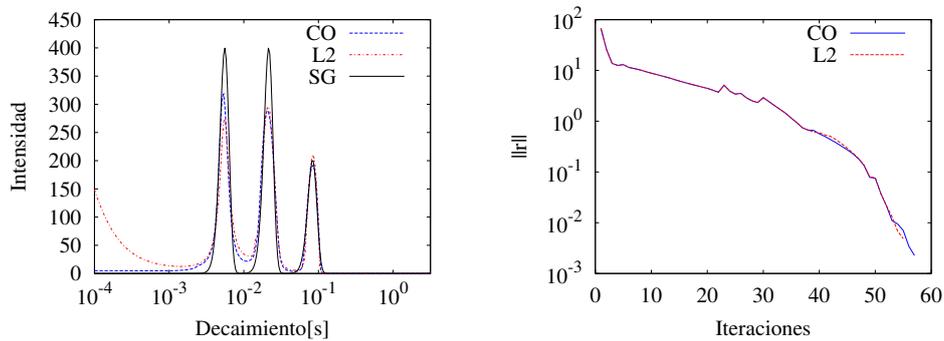
**Figura 6.16:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 583.



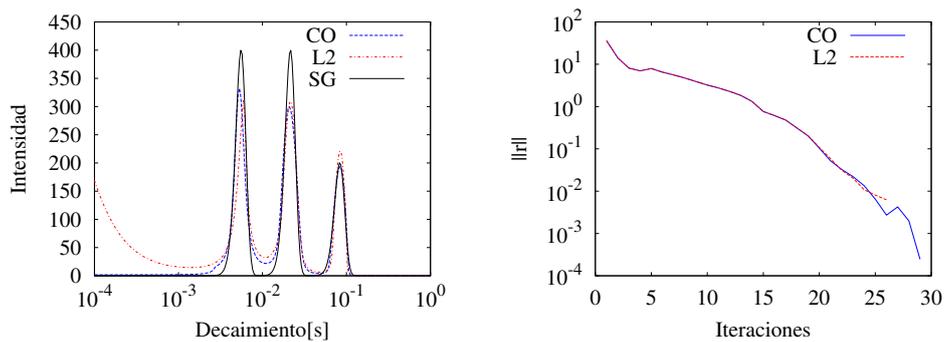
**Figura 6.17:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 3 con SNR 285.

percomputador Virtual Gallego (SVG) del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) ejecutándose en secuencial:

- Bi-procesador INTEL Haswell E5-1240 (2.5 GHz, 30MB Level 3 Cache) con 24 cores por procesador y 4GB de memoria compartida.
- Bi-procesador INTEL Intel Sandy Bridge E5-2670 (2.6 GHz, 20MB Level 3 Cache) con 8 cores por procesador y 4GB de memoria compartida.
- Bi-procesador AMD Opteron 6174 (2.2 GHz, 12MB Level 3 Cache) con 12 cores por procesador y 4GB de memoria compartida.



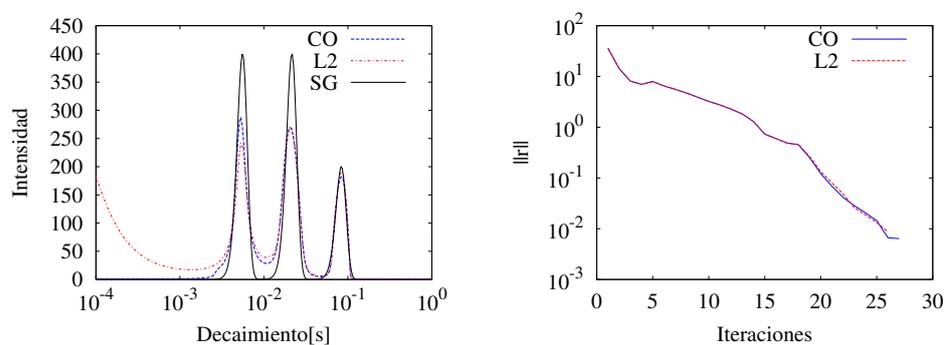
**Figura 6.18:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 19617.



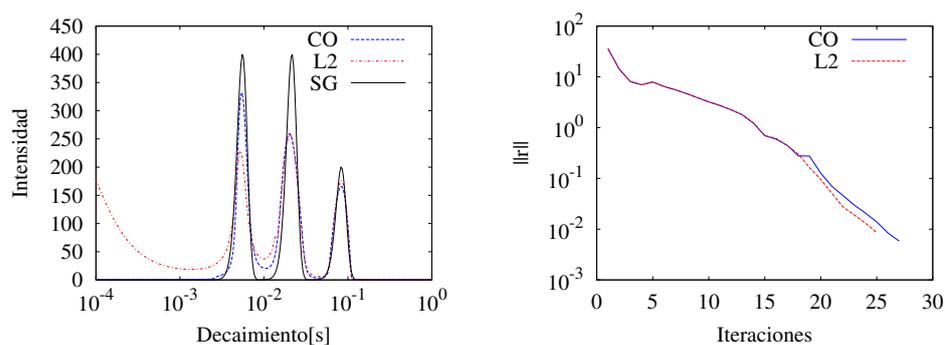
**Figura 6.19:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 1722.

Señalar que para obtener cada uno de los tiempos de ejecución se ha calculado la media aritmética de diez medidas.

De entre las máquinas empleadas en, la que cuenta con ciclo de reloj más alto (Opteron), el tiempo de cómputo obtenido más alto no superó los 2 minutos, siendo un tiempo de ejecución típico de alrededor de 40 segundos. En cambio, en la máquina con ciclo de reloj más bajo (Haswell), el tiempo de computo más desfavorable no superó los 30 segundos, estando entorno a los 10 segundos el valor típico más frecuente.



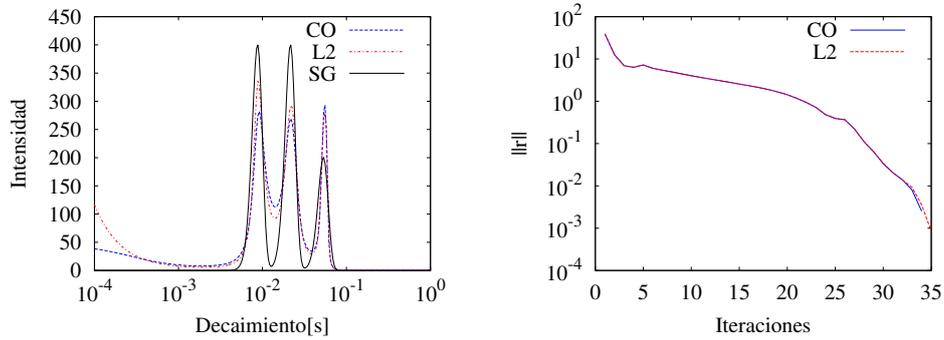
**Figura 6.20:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 593.



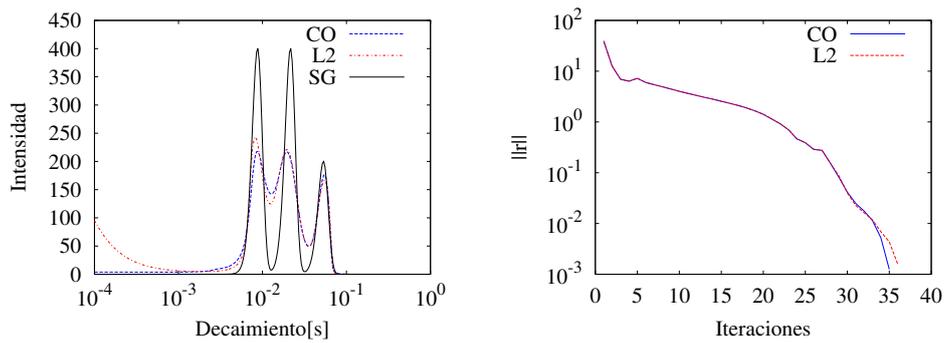
**Figura 6.21:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 4 con SNR 298.

## 6.2 Conclusiones

Atendiendo a los resultados mostrados en la Sección 6.1.3, empleando únicamente regularización  $L_2$  ha sido imposible reproducir las gráficas mostradas en [1] con la misma precisión que utilizando regularización  $L_1$  y  $L_2$ . Este hecho puede ser debido a la omisión o incorrección de alguno de los parámetros considerados en el presente Trabajo Fin de Máster, y cuya revisión se propone como un trabajo futuro.

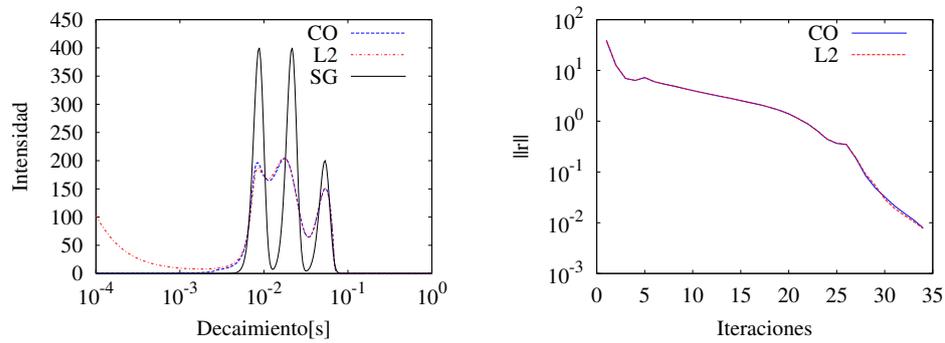


**Figura 6.22:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 19617.

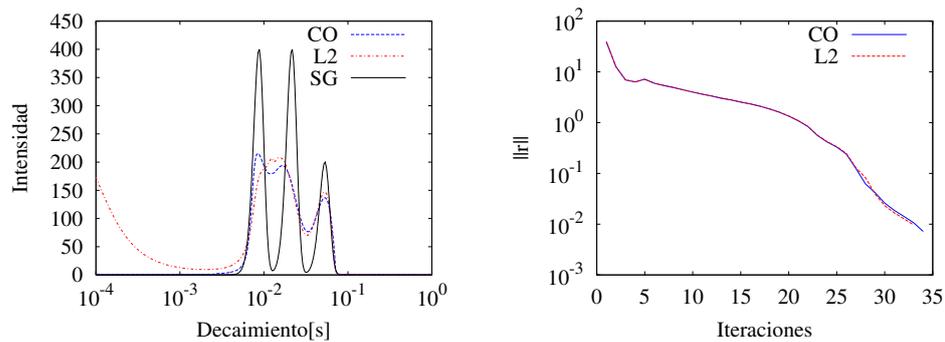


**Figura 6.23:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 1722.

Como conclusión general obtenida a partir de las simulaciones numéricas propuestas en [1], el algoritmo PDCO con regularización  $L_1$  y  $L_2$  representa una herramienta útil para el análisis de datos de relaxometría LR-NMR. Sin embargo, su uso requiere de una elección de parámetros de calibración en base a simulaciones numéricas, y esta configuración de parámetros puede variar al considerar diferentes tipos de señales y valores de ruido o incluso dependen de los parámetros de discretización o de la configuración del resolvidor lineal LSMR. De hecho, los considerables tiempos de computo obtenidos pueden llegar a dificultar la determinación de los parámetros de calibración cuando se pretende que el cálculo sea



**Figura 6.24:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 593.



**Figura 6.25:** Soluciones aproximadas y solución exacta (izquierda) y representación gráfica del residuo con respecto al número de iteraciones del algoritmo PDCO (derecha) para el test de la Señal 5 con SNR 298.

valido para amplios rangos dinámicos.

	SNR	$t_{\text{Haswell}}[\text{s}]$	$t_{\text{SandyBridge}}[\text{s}]$	$t_{\text{Opteron}}[\text{s}]$
Señal 3	17395	25.75	36.07	74.62
	1722	14.58	18.60	60.85
	583	9.41	12.01	33.12
	285	8.10	10.00	30.89
Señal 4	19617	16.26	21.58	68.67
	1752	9.84	13.30	51.53
	593	9.33	10.41	44.34
	298	7.93	9.30	31.87
Señal 5	18829	11.37	14.60	59.64
	1869	10.61	11.40	34.21
	592	10.27	10.76	35.97
	308	9.03	9.98	41.45

**Tabla 6.4:** Tiempos de ejecución para los distintos test en los tres entornos de cálculo del SVG. Cada uno de los tiempos de ejecución se corresponde con la media aritmética de diez ejecuciones.



# Bibliografía

- [1] Berman, P., O. Levi, Y. Parnet, M. Saunders y Z. Wiesmann: *Laplace Inversion of Low-Resolution NMR Relaxometry Data Using Sparse Representation Methods*. En Traficante, D. (editor): *Concepts in Magnetic Resonance Part A*, volumen 42A, páginas 72 – 88. Wiley Periodicals Inc, New York, 2013.
- [2] Boyd, S. y L. Vandenberghe: *Convex Optimization*. Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [3] de Burgos, J.: *Algebra lineal y geometría cartesiana*. McGraw-Hill, New York, 2000.
- [4] Floudas, C.A. y P.M. Pardalos: *Encyclopedia of Optimization*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.
- [5] Fong, D. y M. Saunders: *LSMR: An iterative algorithm for Sparse Least-Squares problems*. *Journal on Scientific Computing*, 33(5):2950 – 2971, 2011.
- [6] Levitt, M. H.: *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance*. John Wiley & Sons, New York, 2001.
- [7] Mitchell, J., L. F. Gladden, T. C. Chandrasekera y E. J. Fordham: *Low-field permanent magnets for industrial process and quality control*. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, (76):1 – 60, 2014.
- [8] Roberts, G. C. K.: *Encyclopedia of Biophysics*. Springer, Berlin, 2013.
- [9] Saunders, M., K. Bunggyoo, M. Chris y A. Santiago: PDCO: primal-dual interior method for convex objectives. <http://web.stanford.edu/group/SOL/software/pdco/>. [Online; último acceso el 13-Diciembre-2014].
- [10] Wing, G. M.: *A Primer on Integral Equations of the First Kind*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1991.