

Eduardo Xavier Silva Miqueles



**A Transformada Generalizada Atenuada
de Radon: Inversão Analítica,
Aproximações, Métodos Iterativos e
Aplicações em Tomografia por
Fluorescência.**

**Campinas
2010**

A Transformada Generalizada Atenuada de Radon: inversão analítica, aproximações, métodos iterativos e aplicações em tomografia por fluorescência

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por Eduardo Xavier Silva Miqueles e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 05 de Março de 2010



Prof. Dr.: Alvaro Rodolfo De Pierro
Orientador

Banca Examinadora:

- | | |
|---|---|
| 1 | Dr. Milton da Costa Lopes Filho (IMECC-UNICAMP) |
| 2 | Dr. Ricardo Tadeu Lopes (UFRJ) |
| 3 | Dr. Nir Cohen (UFRN) |
| 4 | Dr. Jorge Passamani Zubelli (IMPA) |

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de DOUTOR em Matemática Aplicada

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**
Bibliotecária: Miriam Cristina Alves – CRB8 / 5094

Miqueles, Eduardo Xavier S.

M669t A transformada generalizada atenuada de Radon: inversão analítica, aproximações, métodos iterativos e aplicações em tomografia por fluorescência/Eduardo Xavier Silva Miqueles -- Campinas, [S.P. : s.n.], 2010.

Orientador : Alvaro Rodolfo De Pierro

Tese (Doutorado)- Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Radon, Transformadas de. 2. Fluorescência de raio X. 3. Tomografia - Emissão. 4. Tomografia computadorizada. 5. Problemas inversos (Equações diferenciais). I. De Pierro, Alvaro Rodolfo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: The generalized attenuated Radon transform: analytic inversion, approximations, iterative methods and applications on fluorescence tomography.

Palavras-chave em inglês (Keywords): Radon transform. 2. Emission tomography. 3. X-ray fluorescence. 4. Computerized tomography. 5. Inverse problems (Differential equations).

Área de concentração: Problemas inversos

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora: Prof. Dr. Alvaro Rodolfo De Pierro (IMECC -UNICAMP)
Prof. Dr. Milton da Costa Lopes Filho (IMECC-UNICAMP)
Prof. Dr. Ricardo Tadeu Lopes (UFRJ)
Prof. Dr. Nir Cohen (UFRN)
Prof. Dr. Jorge Passamani Zubelli (IMPA)

Data da defesa: 05/03/2010

Programa de Pós-Graduação: Doutorado em Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 05 de março de 2010 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof(a). Dr(a). ALVARO RODOLFO DE PIERRO



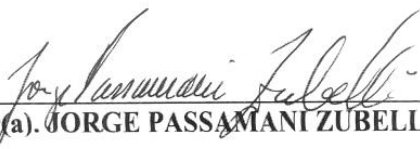
Prof(a). Dr(a). MILTON DA COSTA LOPES FILHO



Prof(a). Dr(a). RICARDO TADEU LOPES



Prof(a). Dr(a). NIR COHEN



Prof(a). Dr(a). JORGE PASSAMANI ZUBELLI

Agradecimentos

- À família: mãe Maria Cristina e irmãos Maria Esther e Máximo;
- Ao Prof. Alvaro pela orientação agradável e pelas discussões matemáticas sempre relevantes e instigantes;
- Ao grupo de problemas inversos (Labip) pelas discussões e seminários realizados durante a elaboração deste trabalho;
- Apoio financeiro da FAPESP, Proc. 2006/00356-6.

*I learned a long time ago, that one note
can go a long way if it's the right one ...
and it will probably whip the guy with 20
notes.*

Les Paul [1920 – 2009[†]]

Resumo

A Tomografia por Fluorescência de Raios X é uma nova técnica que combina a tomografia por transmissão de Raios X e a tomografia por emissão. Uma amostra de tecido (ou corpo) é bombardeada por Raios X de alta intensidade (gerados por um síncrotron) e, metais ou outros elementos a serem estudados, emitem fluorescência para uma faixa de energia típica de cada um. Trata-se de reconstruir a densidade desses elementos (Zinco, Cobre, Iodo,...) a partir das medições da emissão por detectores externos ao longo de retas definidas por cada detector. O modelo matemático para o problema é dado pela Transformada Atenuada Generalizada de Radon. A inversa analítica da Transformada Atenuada de Radon foi um problema matemático aberto durante muitos anos. Recentemente, Fokas e Novikov, usando ferramentas da análise complexa, conseguiram uma fórmula analítica de inversão. Neste trabalho damos um passo adicional e provamos que as idéias de Fokas podem ser estendidas para a obtenção de uma fórmula analítica da Transformada Generalizada Atenuada que aparece em tomografia por fluorescência. Deduzimos também fórmulas aproximadas e métodos iterativos, baseados na inversão da própria Transformada de Radon assim como da sua correspondente atenuada. Apresentamos uma extensa comparação entre os diferentes métodos usando dados reais e simulados.

Palavras-chave: *Transformada atenuada de Radon, Problemas inversos, Métodos iterativos, Fluorescência.*

Abstract

X-ray fluorescence computed tomography (xfct) is a synchrotron based imaging modality similar to stimulated emission tomography [37]. It aims at reconstructing the concentration distribution of a heavy metal (Copper, Zinc, Iron) or other elements like Iodine, inside a body or an object. In xfct a sample is irradiated with high intensity monochromatic synchrotron X-rays with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest. This stimulates fluorescence emission, at certain characteristic energies, isotropically distributed, which are detected by a detector placed parallel to the direction of the incident beam [49]. Part of the emission is absorbed by the sample, so, correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions has many important applications in medical imaging (malignancy analysis for example), and mineralogy (determination of rocks 3D structure)

It has been recently shown by Fokas [68, 69] and Novikov [30] that the spectral analysis of a particular partial differential equation yields the inversion formula for the problem of computerized emission tomography. In this thesis we show that a similar analysis can be made for the case of xfct. Also, we derive approximate and iterative methods to find the solution of the physical problem.

Keywords: *Attenuated Radon Transform, Inverse problems, Iterative methods, Fluorescence.*

Notações

$\mathcal{R}$	Transformada de Radon
$\mathcal{R}_\rho$	Transformada Generalizada de Radon com um peso ρ
$\mathcal{B}$	Operador retro-projeção
$\mathcal{B}_\rho$	Operador retro-projeção Generalizado com peso ρ
$\mathcal{H}$	Transformada de Hilbert
$\mathcal{F}$	Transformada de Fourier unidimensional: $p = p(t) \mapsto \hat{p} = \hat{p}(\nu), \hat{p} = \mathcal{F}p, \quad \nu \in \mathbb{R}$
$\mathcal{F}_2$	Transformada de Fourier bidimensional: $g = g(x) \mapsto \hat{g} = \hat{g}(\eta), \hat{g} = \mathcal{F}_2 g, \quad \eta \in \mathbb{R}^2$
$\mathcal{D}$	Transformada de raios divergentes
$\star, \star\star$	Operação de convolução unidimensional/bidimensional
$u, u^\perp$	Par de vetores ortogonais
$\xi_\theta, \xi_\theta^\perp$	$\xi = (\cos \theta, \sin \theta)^T, \xi^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)^T$
$L^\sharp$	Adjunto do operador L
∂_t	Derivada parcial na variável t
$\mathcal{Y}$	Operador $\mathcal{Y} = \mathcal{H} \partial_t$
$\ x\ _2$	Norma vetorial $\ x\ _2^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$
$\cdot$	Produto interno real, ou seja $x \cdot y = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n$
o_κ	$O(\kappa^{-k})$, para $k \geq 1$

Tabela 1: Principais notações usadas nesta tese.

Nota: Os principais operadores nesta tese tendem a seguir uma notação unificada, no entanto muitas váriaves aparecem em diferentes contextos ao longo dos capítulos. Isto não é proposital, mas inevitável dado o grande número de quantidades a serem definidas. Por exemplo, em um capítulo η pode representar as variáveis $\eta = (t, \theta)$ da Transformada de Radon, em outro representa o vetor direção de transporte de fótons em um meio material, enquanto noutro as variáveis no domínio de Fourier em duas dimensões. Sempre que possível, faremos a distinção e/ou relação entre notações ambíguas.

Sumário

1	Introdução	1
2	Preliminares	9
2.1	Métodos diretos de inversão	14
2.2	Soluções de norma mínima	17
2.2.1	<i>Ridge functions</i>	17
2.2.2	A pseudoinversa de Medoff	18
2.3	Métodos iterativos para inversão	20
2.3.1	Reconstruções algébricas	20
2.3.2	Máxima verossimilhança	21
2.4	A transformada divergente e o espaço dos pesos	22
3	A Transformada Generalizada de Radon	25
3.1	A Equação do transporte e a Transformada de Radon	28
3.2	Tomografia por emissão	29
3.3	Tomografia de raio-X por Fluorescência	31
4	Inversão	35
4.1	Metodologia de Fokas	36
4.2	Inversas Analíticas	42
4.2.1	Séries de Neumann em χ_{fct}	46
4.2.2	Fórmula fechada para χ_{fct}	50
4.2.3	Fórmula alternativa para ert	52
4.3	Métodos aproximados para inversão	54
4.3.1	Aproximação de Chang	55
4.3.2	<i>Ridge functions</i>	56
4.3.3	A inversa de Novikov aplicada a χ_{fct}	62

5	Métodos Iterativos	65
5.1	Resolução da parte linear	66
5.2	Resolução da parte não linear	74
5.2.1	Diferenciação de Fréchet	76
5.2.2	Método de Newton	80
5.3	Um Método Alternado	85
6	Simulações	89
6.1	Resultados numéricos	92
6.2	Phantoms	92
6.2.1	Sinogramas	95
6.2.2	Resultados triviais (sem peso)	95
6.3	Métodos iterativos	96
6.4	Inversão Analítica	97
6.5	Inversão Aproximada	97
6.6	<i>Ridge functions</i>	98
A	Provas	101
A.1	Lema 2.2, pág. 12	101
A.2	Lema 3.1, pág. 27	102
A.3	Lema 3.2, pág. 27	102
A.4	Proposição 4.1.1, pág. 40	103
A.5	Proposição 4.2.1, pág. 44	104
A.6	Teorema 5.2.2, pág. 82	105
A.7	Teorema 5.2.3, pág. 82	106
B	Artigo/Inversão Analítica	107
C	Artigo/Inversão Aproximada	129
D	Artigo/Método Alternado	149
E	Artigo/Método Iterativo	161
F	Artigo/Ridge Functions	167
G	Artigo/Implementações	173

Capítulo 1

Introdução

A base matemática para a teoria de reconstrução de imagens a partir de projeções remonta-se ao trabalho de Johann Radon de 1917. Em duas dimensões, e como o próprio nome diz, o objetivo é descobrir uma função a partir de todas suas integrais de linha em um domínio previamente determinado. Isto pode ser posto na forma de um sistema linear cujo operador que o define é dito *a transformada de Radon*. Este problema inverso teve sua solução proposta pelo próprio Radon em seu artigo original, através de uma fórmula fechada para a inversa de seu operador. Desde então, novas técnicas de reconstrução foram propostas, via fórmulas analíticas ou usando algum método numérico (iterativo por exemplo). É cedo para se dizer que tudo sobre a transformada de Radon foi feito, embora muitas ferramentas existam e seu estudo esteja bem difundido no âmbito da geometria integral. Em três dimensões, o princípio é o mesmo, mas sobre um volume pré-determinado e com uma estrutura matemática obviamente mais complicada. Nesta tese, concentraremos apenas em duas dimensões, sabendo que é sempre o primeiro passo para tratar o caso tridimensional.

A primeira objeção prática à idéia de Radon é que, simplesmente não podemos ter todas as integrais de linha da função, e sim apenas uma quantidade finita. Nestes casos, prova-se que a solução do problema não é mais única [43]. Não é difícil se convencer de que isto pode ser verdade. Veja a Figura 1.1 e considere duas funções $z = f_A(x)$ e $z = f_B(x)$ determinadas pela função indicadora nos retângulos A e B , com cotas $z = b$ e $z = a$ respectivamente. A integral de linha neste exemplo se resume à área de um quadrado na direção da reta indicada pela flecha. Portanto, para

as duas funções, uma mesma função d representa a *projeção* da função, embora suas geradoras sejam diferentes.

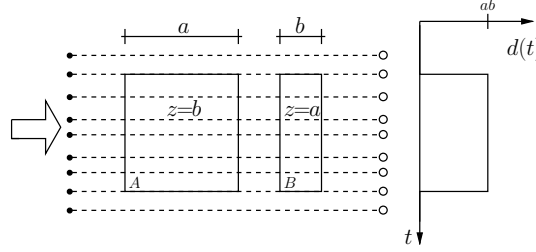


Figura 1.1: Exemplo básico da transformada de Radon

O exemplo da Figura 1.1 dá uma idéia de como é nosso problema. A grosso modo, para várias flechas que indiquem uma direção, cada uma sob um ângulo θ referenciado a um sistema padrão, uma coleção de medidas $\{d_\theta(t)\}$ é obtida, geralmente denominada de *sinograma*. O operador que associa uma função f ao sinograma $\{d_\theta\}$ é a transformada de Radon, e vamos denotá-lo por $\mathcal{R}$. Suas propriedades serão investigadas no Capítulo 2. Portanto, nosso problema pode ser escrito da forma $\mathcal{R}f(t, \theta) = d(t, \theta)$. A inviabilidade prática de ter todos os pontos (t, θ) variando sobre um determinado conjunto, gera uma quantidade grande de métodos numéricos para a resolução do problema inverso $f = \mathcal{R}^{-1}d$.

Neste trabalho, seguindo os mesmos princípios de Radon, e tendo em vista ao menos duas importantes aplicações mencionadas em breve, vamos estudar o caso em que as integrais de linha da função f são ponderadas por um peso previamente conhecido. Se este peso, digamos ω , é qualquer (e positivo) dizemos então que os dados resultantes são dados pela *transformada generalizada de Radon*. Vamos escrever este problema da forma $d = \mathcal{R}_\omega f$. A descrição completa das propriedades do operador $\mathcal{R}_\omega$ não é um trabalho fácil e para alguns casos é ainda um problema em aberto, como por exemplo a caracterização de seu espaço imagem. Nossas aplicações irão supor que este peso sempre depende exponencialmente de um fator μ , também dito *atenuação*. Nosso problema é então da forma

$$d = \mathcal{R}_{\omega_\mu} f \quad (1.1)$$

Obviamente, se $\omega_\mu = 1$ então o problema acima é reduzido ao caso clássico de Radon, já resolvido. Esta tese lida com os seguintes problemas:

Problema 1.1 *Dado μ , e portanto o peso ω_μ , encontrar uma fórmula analítica para $\mathcal{R}_{\omega_\mu}^{-1}$ no problema (1.1).*

Problema 1.2 *Dado $d = \mathcal{R}_{\omega_\mu} f$, encontrar μ e f*

A tomografia por emissão, *pet*¹ (emissão de pósitrons) e *spect*² (emissão de fóton único), enquadram-se no modelo (1.1) e a solução do Problema 1.1 para estes casos já existe. Para *pet* a inversão se reduz à inversa de Radon porque é possível tirar o termo exponencial de dentro da integral. No caso de *spect*, quando a atenuação é suposta uniforme, a primeira fórmula de inversão é de O.Tretiak & C.Metz em 1980 [35]. Para o caso da atenuação não uniforme, o problema ficou em aberto por mais de duas décadas até o resultado de R. Novikov em 2000 [30]. As implementações destas fórmulas de inversão estão detalhadas no trabalho de Kunyansky e Natterer [32, 31]. A resolução do Problema 1.2 para *pet* e *spect* é por exemplo, abordada nos trabalhos de F.Crepaldi & A.De Pierro [47] e A.V.Bronnikov [4] com bons resultados.

No entanto, aqui vamos nos preocupar com um tipo particular de peso, proveniente de um novo tipo de imageamento, a tomografia de raios-X por emissão de fluorescência, cujo acrônimo é *xfct*³. Esta técnica é atribuída a R.Cesareo & S.Mascarenhas em 1989 [37]. Neste trabalho encontramos soluções para 1.1 e 1.2 para este novo problema. Nesta procura, obtivemos resultados interessantes, com possíveis novas direções, que serão expostas nos Capítulos 4 e 5. Antes de definir o que é *xfct*, ressaltamos que os principais pontos que esta tese aborda são:

1. Solução do Problema 1.1 para *xfct*: É sabida a relação entre a transformada de Radon e uma equação diferencial parcial difusiva (no Capítulo 4 estabelecemos novamente este fato), veja por exemplo o livro de F.Natterer [25] e o trabalho de R.Novikov & A.Fokas em 1991 [67], trabalho este que é o ponto de partida para Novikov posteriormente descobrir a inversa em *spect*, usando a teoria de espalhamento inverso [30]. Fokas abordou um caminho diferente, e em 2005-2006 [68, 69], forneceu uma nova demonstração para a inversa de Novikov. Seu trabalho está baseado na análise espectral da EDP associada ao modelo físico de *spect*. Aqui, motivados pelos trabalhos de Fokas, propomos a inversão do operador

¹Positron emission tomography.

²Single-photon emission computed tomography.

³X-rays fluorescence computed tomography.

de xfct construindo uma EDP particular e fazendo sua análise espectral, apresentado na Seção 4.2. Esta análise envolve a transformação da equação diferencial em variáveis complexas e uma subsequente resolução de um problema de Riemman-Hilbert. Esta técnica foi proposta em 1994 por Fokas & I.Gelfand [71] para estabelecer uma relação entre equações de evolução e operadores, ditos *transformada generalizada de Fourier*. Veja [66, 73] para uma descrição sucinta da metodologia de Fokas.

2. Proposta de um algoritmo para resolução do Problema 1.2: Em 1978, L.T.Chang [29] propôs um método aproximado para a solução de (1.1). Sua idéia consiste em aplicar a inversa de $\mathcal{R}$ aos dados ponderados d e corrigi-los posteriormente usando as informações do peso ω , supostamente conhecido; sendo a correção uma espécie de média. Em xfct, J.P.Hogan em 1991 [28] mostrou que a aproximação de Chang pode ser obtida por outros argumentos. No entanto, L.Kunyansky em 1992 [32], pensando em spect, mostrou que, na verdade, a inversa de $\mathcal{R}_\omega$ pode ser escrita como uma série de Neumann, cujo primeiro termo corresponde à aproximação de Chang. Isto é feito transformando-se a equação (1.1) em uma equação de Fredholm do segundo tipo, com a subsequente procura do operador resolvente associado. Portanto, sendo equivalente a série de Neumann a uma seqüência de ponto fixo (e estabelecida a propriedade de contração), tem-se que a aproximação de Chang é corrigida substancialmente à medida que o número de somas parciais (ou iterações) cresce. Isto foi transportado para xfct, até então inexplorado neste sentido, com algo a mais: uma aceleração. Nossa proposta usa argumentos semelhantes aos encontrados em [53, 55]; podemos utilizar uma espécie de *busca linear* a cada iteração, algo comum em métodos de programação não linear. Esta busca fornece um parâmetro de relaxação que gera uma seqüência de ponto fixo com taxa de convergência maior que a de Kunyansky. Por outro lado, para encontrar μ , supondo f conhecido, podemos utilizar o método de Newton, tirando vantagem das interessantes propriedades das derivadas associadas. Isto gera um algoritmo que alterna na solução, ora procurando por f com uma estimativa de μ , ora procurando por μ com a recente aproximação de f encontrada. Tal estratégia está apresentada no Capítulo 5.

3. Proposta de solução aproximada ao Problema 1.1: Como veremos no Capítulo 3, existe uma grande semelhança entre os modelos matemáticos de spect e xfct. La Rivière em 2004 [50] tira vantagem desta relação

para inverter os dados em (1.1). No entanto, sua aproximação é muito restritiva do ponto de vista da física do problema; mesmo assim com bons resultados pois, a grosso modo, ele transforma o modelo de $xfct$ no modelo da transformada exponencial de Radon, cuja inversa já é conhecida por Tretiak & Metz [35], e cujos coeficientes de Fourier possuem relação ótima com os coeficientes do sinograma resultante e da transformada de Radon, conforme trabalho de C.Metz & X.Pan [34]. Nossa proposta não é fisicamente tão restritiva quanto a de La Rivière, e segue uma lógica semelhante: transformar o modelo de $xfct$ no modelo de $spect$, cuja inversa já é conhecida por Novikov [30], e com implementações eficientes [69, 33]. Esta estratégia está apresentada na Seção 4.3.3.

4. Extensão do Teorema de Shepp-Logan para a transformada generalizada: Pela natureza discreta do problema com poucos ângulos, L.Shepp & R.Logan em 1975 [22] propuseram encontrar a solução de norma mínima para $\mathcal{R}f = d$. A solução proposta por eles garante a existência de uma base, na qual a solução é escrita. Esta base satisfaz várias propriedades interessantes, recebendo o nome (cada uma) de *ridge functions*. Esta base não é única e existem vários métodos para sua construção, todos baseados em expansão dos dados em polinômios de Tchebyshev do segundo tipo [17, 27, 59]. Um dos trabalhos mais interessante é de Kazantsev em 1998 [21], que propõe um método analítico para encontrar a base, quando a malha de ângulos para a aquisição tomográfica é uniforme. Nossa proposta, é mostrar que existe uma única solução de norma mínima para o caso generalizado (1.1) e que ela também é uma combinação de *ridge functions* cuja construção pode ser feita de acordo com as idéias de Kazantsev, sob leve restrições no parâmetro μ . Isto está apresentado na Seção 4.3.2.

$xfct$

A tomografia de raios-X por fluorescência baseia-se no fato de que um feixe de raios-X incidente em um objeto, permite que os elementos químicos constituintes do objeto emitam raios-X ditos fluorescentes, em todas as direções. Para feixes incidentes de baixa energia, elementos como cobre e zinco são estimulados, enquanto para altas energias o tungstênio é um exemplo. Nesta tese, supomos que o feixe de energia incidente é baixo, digamos entre 3KeV e 10KeV. Esta suposição aparece apenas para que as aproximações do método iterativo façam sentido físico (isto é, supor $\mu \approx \lambda$, conforme explicado posteriormente no Capítulo 5), e sejam condizentes

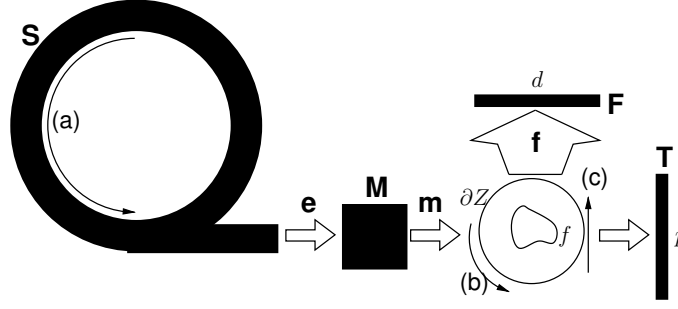


Figura 1.2: Experimento de xft com fonte de luz síncrotron. Veja texto para detalhes.

com os dados reais usados para simulação.

Uma fonte de luz síncrotron é capaz de produzir elétrons em quase todas as faixas de energia, razão pela qual é a fonte escolhida para emitir o feixe incidente na amostra, com energia nesta faixa. A figura 1.2 é uma representação mnemônica (e fora da real escala) do processo de xft usando um síncrotron como fonte. Primeiro, os elétrons ganham velocidade conforme o movimento (a) no dispositivo **S**, em um espectro grande de energia, e saem por uma porta através de um tubo em um feixe policromático **e**, que é transformado em raio-X. Em seguida um monocromador **M** filtra o feixe incidente transformando-o num feixe **m** com a faixa de energia desejada. Tal feixe, incide sobre o objeto tridimensional que, na seção transversal possui contornos descritos por uma função bidimensional f com suporte num cilindro Z . O feixe fluorescente estimulado **f** escapa da amostra e é detectado perpendicularmente em **F**, sendo devidamente atenuado pelas estruturas inerentes ao objeto neste caminho. O feixe incidente passa ainda pela amostra na direção incidente e também é atenuado, com o resultado p detectado em **T**.

Este processo é repetido rotacionando o cilindro, conforme o movimento em (b) e transladando-o conforme o movimento em (c). Os dados recebidos em **T** são descritos pela transformada de Radon de f , denotada de p . A inversão de p fornece a estrutura do objeto como uma tomografia de transmissão no sentido clássico, no entanto, não é esse o real interesse. Os dados d , detectados a partir do feixe emitido pela estrutura interna da amostra f , descrevem a distribuição de um determinado elemento químico, fluorescente à energia incidente previamente estabelecida. Tal distribuição é o real objetivo do experimento. O modelo matemático será

descrito na Seção 3.3.

Uma leitura simplificada desta tese pode ser encontrada nos artigos em anexo, nos Apêndices B, C, D, E e F.

Capítulo 2

Preliminares

O problema inverso que queremos resolver é descrito como um sistema linear, onde o operador que define o sistema é a transformada de Radon e os dados são provenientes de aquisições do sistema tomográfico. Portanto, vamos escrever o nosso problema da forma $\mathcal{R}f = d$, com d dado e $\mathcal{R}$ um operador bem definido. Para definir melhor o que são as variáveis nessa equação, precisamos primeiro definir o problema. Digamos que uma secção transversal de um objeto tridimensional será reconstruída. Esta secção, vista como uma imagem, representa os contornos de uma função escalar com domínio no plano. Ao traçarmos retas pelo seu domínio, e calcularmos sua integral de linha sobre cada reta, uma medida será obtida. Podemos interpretar estas retas como raios-X incidentes no objeto e portanto visualizar esta medida como a atenuação sofrida pelo raio ao longo do caminho. Logo, a função escalar, que é a distribuição de material atenuante dentro do objeto, é a nossa incógnita. Não há perda de generalidade em supor que esta função de atenuação, que denotaremos por f , está definida no disco unitário, caso contrário, basta efetuar uma mudança de variáveis. Isto é o mesmo que supor que o objeto tridimensional está contido dentro de um cilindro (que vamos denotar de Z), que é o mesmo também a assumir que f tem suporte compacto. A Figura 2.1 ilustra a geometria do problema. Ao fixar um sistema de coordenadas cartesiano, e denotar $x = (x_1, x_2)$ um ponto deste sistema, então cada medida da função f é obtida sobre a integral de linha ao longa da reta $\Omega(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2 : x \cdot \xi_\theta = t\}$ (veja Tabela 1 para notações). Variando o ângulo $\theta \in [0, 2\pi]$ e o raio $t \in [-1, 1]$, a família de retas $\Omega(t, \theta)$ cobre todo o interior do disco unitário e uma coleção de medidas é obtida. Vamos de-

notar esta medida de $d = d(t, \theta)$ e denominá-la a Transformada de Radon da função f , escrevendo

$$d(t, \theta) = \int_{\Omega} f(x) dx \doteq \mathcal{R}f(t, \theta), \quad (2.1)$$

onde omitimos a dependência de Ω nos parâmetros t e θ apenas para simplificar a notação. Note que podemos reescrever a equação (2.1) das seguintes maneiras, ambas equivalentes e obtidas apenas através de mudanças de variáveis,

$$\mathcal{R}f(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}} f(t\xi_{\theta} + s\xi_{\theta}^{\perp}) ds \quad (2.2)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} f(x) \delta(t - x \cdot \xi_{\theta}) dx. \quad (2.3)$$

O nosso objetivo é descobrir os contornos da função f dentro do quadrado $[-a, a] \times [-a, a]$ com $a = \sqrt{2}/2$, contido no disco. Ao plotar estes contornos obtemos a imagem que representa a função f , razão pela qual às vezes nos referimos a f como imagem. Vamos considerar U como sendo o espaço das imagens e V o espaço dos dados, isto é $f \in U$ e $d \in V$,

$$U = \{f: [-a, a] \times [-a, a] \rightarrow \mathbb{R}; f = f(x)\} \quad (2.4)$$

$$V = \{d: [-1, 1] \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}; d = d(t, \theta)\}$$

A caracterização dos espaços U e V aparecerá naturalmente no texto, quando necessário. Por ora, podemos pensar que U é o espaço das funções quadrado-integráveis por partes e de suporte compacto em $[-a, a] \times [-a, a]$ e V o espaço das funções quadrado-integráveis, 2π -periódicas em θ satisfazendo $d(t, \theta) = d(-t, \theta + \pi)$. Vamos munir U e V com o produto interno de L^2 e denotá-lo por $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2}$, com a norma associada $\|\cdot\|_{L^2}$, ou seja

$$\|f\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^2} |f(x)|^2 dx, \quad \|d\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} |d(t, \theta)|^2 dt d\theta \quad (2.5)$$

Nos próximos capítulos, vamos trocar o suporte de integração que define as normas acima, pelo disco unitário e $[-1, 1] \times [0, 2\pi]$ respectivamente. Isto está motivado pelo fato de as funções envolvidas terem suporte compacto. Resulta que

$$\|f\|_{L^p} = \left(\int_{\|x\| \leq 1} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \quad \|d\|_{L^p} = \left(\int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} |d(t, \theta)|^p dt d\theta \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.6)$$

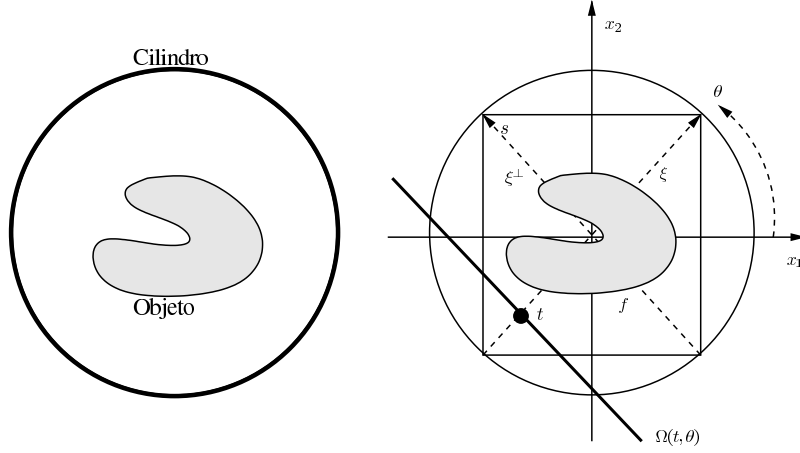


Figura 2.1: Geometria do problema para a transformada de Radon.

Ainda, pela hipótese de suporte compacto, podemos definir (2.2) equivalentemente por

$$\mathcal{R}f(t, \theta) = \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} f(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) ds. \quad (2.7)$$

A função $d = \mathcal{R}f$ é muitas vezes denominada de *sinograma* pelo simples fato que, se f é uma função pontual, isto é $f(x) = \delta(x - y)$, com $y \in \mathbb{R}^2$, então pelas propriedades de δ e pela definição (2.3)

$$d(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}^2} \delta(x - y) \delta(t - x \cdot \xi_\theta) dx = \delta(t - y \cdot \xi_\theta) \quad (2.8)$$

o que significa que d é nula em todos os pontos (t, θ) que não estão ao longo da senóide $t(\theta) = y_1 \cos \theta + y_2 \sin \theta$.

O seguinte Lema estabelece outra alternativa para a definição da transformada de Radon, especialmente útil para implementação pois integra a função ao longo de cada eixo cartesiano, separadamente.

Lema 2.1 *Se $d = \mathcal{R}f$ então, para $\theta \in [0, \pi]$ é válido*

$$d(t, \theta) = \begin{cases} \frac{1}{|\cos \theta|} \int_{\mathbb{R}} f(x, y) dy, & x = \frac{t}{\cos \theta} - y \tan \theta, \quad \theta \in [0, \frac{\pi}{2}) \\ \frac{1}{|\sin \theta|} \int_{\mathbb{R}} f(x, y) dx, & y = \frac{t}{\sin \theta} - \frac{x}{\tan \theta}, \quad \theta \in (\frac{\pi}{2}, \pi] \end{cases} \quad (2.9)$$

A demonstração do Lema 2.1 é trivial e considera a definição (2.2) e uma mudança de variável separada para cada coordenada (x_1, x_2) de f .

De fundamental importância para a teoria que segue, é o operador $\mathcal{B}$, que denominamos por retro-projeção e definimos por

$$\mathcal{B}p(x) = \int_0^\pi p(x \cdot \xi_\theta, \theta) d\theta \quad (2.10)$$

Geometricamente, $\mathcal{B}$ é a média das contribuições do sinograma p ao longo de todas as retas que passam pelo ponto x . O operador $\mathcal{B}: \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{U}$ é o adjunto de $\mathcal{R}$. Com efeito, a mudança de variáveis $x = t\xi + s\xi^\perp$ resulta

$$\langle \mathcal{B}p, f \rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{B}p(x) f(x) dx \quad (2.11)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} dx \int_0^{2\pi} d\theta p(x \cdot \xi, \theta) f(x) \quad (2.12)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds \int_0^{2\pi} d\theta p(t, \theta) f(t\xi + s\xi^\perp) \quad (2.13)$$

$$= \langle p, \mathcal{R}f \rangle_{L^2} \quad (2.14)$$

É natural tentar usar o operador adjunto $\mathcal{B}$ como aproximação da inversa de $\mathcal{R}$. Infelizmente isto não é uma boa opção, como garante o seguinte Lema, cuja demonstração encontra-se no Apêndice A.1.

Lema 2.2 *A ação de $\mathcal{B}$ sobre $\mathcal{R}$ é dada por*

$$\mathcal{B}\mathcal{R}f(x) = (f * h)(x), \quad h(x) = 1/\|x\|_2 \quad (2.15)$$

Sobre a discretização do problema

Usualmente, o retângulo $[-a, a]^2$ é discretizado em uma malha de pontos $\{x_{1,i}\} \times \{x_{2,j}\}$ com $x_{1,i} = -a + i\Delta x$ e portanto, nossa incógnita passa a ser uma matriz F que representa as amostras de f nesta malha. Um pixel k identifica um ponto $(x_{1,i}, x_{2,j})$ mediante a associação não única $k = \alpha i + \beta j$ com $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}$. Vamos adotar a forma canônica, $k = i + sj$, onde s determina o número de pontos escolhidos tanto na abscissa quanto nas ordenadas. Isso significa que nossas matrizes F serão sempre quadradas. Vamos admitir que $\mathbf{f} = \text{vec}\{F\} = (f_k)$ é a vetorização da matriz F , com $f_k = f(x_k)$ e $x_k = (x_{1,k}, x_{2,k})$. Definindo o k -ésimo pixel como o conjunto

$\mathcal{P}_k = \{x \in \mathbb{R}^2: \|x - x_k\|_\infty \leq \Delta x/2\}$ então vamos definir funções $\phi_k = \chi_{\mathcal{P}_k}$ de forma que f seja uma combinação linear da base $\{\phi_k\}$, isto é

$$f(x) = \sum_{k=0}^P \mathbf{f}_k \phi_k(x), \quad (2.16)$$

onde $P = s^2$ denota o número de pixels. Veja Figura 2.2 para notações.

Nestes casos, nossa incógnita passa a ser o vetor $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^P$. Como a transformada de Radon é uma transformação linear, segue da equação (2.16),

$$d(t_l, \theta_m) = \sum_{k=0}^P \mathbf{f}_k \mathcal{R} \phi_k(t_l, \theta_m)$$

onde $\{t_l\} \times \{\theta_m\}$ representa uma discretização das coordenadas polares onde os dados são coletados. Da mesma forma que fizemos para a função f , identificamos a matriz de dados $\mathbf{D}$ em sua forma vetorial $\mathbf{d} = \text{vec}\{\mathbf{D}\} = (\mathbf{d}_n)$ onde $\mathbf{d}_n = d(t_l, \theta_m)$ com $n = l + vm \in \{1, 2, \dots, D\}$, v o número de ângulos, r o número de raios e $D = vr$. Isto nos permite reescrever a equação acima por

$$\mathbf{d}_n = \sum_{k=0}^P \mathbf{f}_k \mathbf{a}_{nk}, \quad \mathbf{a}_{nk} = \mathcal{R} \phi_k(\Omega_n) \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A} \mathbf{f} = \mathbf{d} \quad (2.17)$$

Geometricamente, $\mathbf{a}_{nk}$ representa o comprimento do n -ésimo raio passando pelo pixel k . Na Figura 2.2, vemos que para o raios Ω_{n_1} e Ω_{n_2} tem-se $\mathbf{a}_{n_1,k} = 0$ enquanto $\mathbf{a}_{n_2,k} \neq 0$.

Sempre que for possível faremos a comparação do problema contínuo com sua discretização. Embora nossas aplicações prefiram a abordagem contínua, às vezes a formulação discreta permite ter uma noção diferente do problema que queremos resolver. Por exemplo, veremos no Capítulo 5 que a mesma discretização, para a transformada generalizada de Radon, resulta num sistema equivalente, onde a matriz obtida é dada por um produto de Hadamard¹.

¹Produto pontual de matrizes e/ou vetores [46].

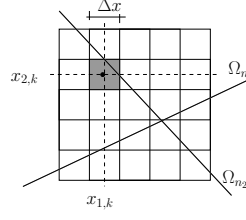


Figura 2.2: Malha uniforme de pontos para o cálculo da transformada de Radon.

2.1 Métodos diretos de inversão

Esta classe de métodos, nasce a partir do famoso Teorema da fatia central² (também conhecido como Teorema da Projeção), que relaciona a transformada de Fourier dos dados d , em um dado eixo polar de ângulo θ (veja a equação (2.1)), com a transformada bidimensional de Fourier da função f . Ele tem como consequência imediata o mais famoso método de inversão para a transformada de Radon. O seguinte Teorema contém estes dois resultados

Teorema 2.1.1 *Seja $d = \mathcal{R}f$, com $f \in \mathcal{U}$, então são equivalentes as seguintes proposições:*

(i) *Teorema da Projeção: Para $\nu \in \mathbb{R}$ tem-se*

$$\hat{d}(\nu, \theta) = \hat{f}(\nu \cos \theta, \nu \sin \theta) \quad (2.18)$$

(ii) *Retroprojeção filtrada: Para $\nu \in \mathbb{R}$ tem-se*

$$f(x) = \mathcal{B}q(x), \quad q(t, \theta) = (s * d)(t, \theta), \quad \hat{s}(\nu) = |\nu| \quad (2.19)$$

O Teorema 2.1.1.(ii) tornou-se a ferramenta básica mais importante na teoria de reconstrução a partir de projeções pois fornece um algoritmo de inversão para $\mathcal{R}$ que envolve somente cálculos considerados simples, mediante o uso da transformada de Fourier. Sua demonstração é também trivial e pode ser encontrada em [42, 43, 24].

Vale notar como a transformada de Hilbert aparece escondida na equação (2.19). Com efeito, observe pela equação (2.19) que podemos escrever f como

$$f = \mathcal{B}\mathcal{L}_{\text{fbp}}\mathcal{R}f, \quad \mathcal{L}_{\text{fbp}}d(t) = (d * s)(t), \quad (2.20)$$

²Ou do inglês, *Slice Theorem*.

com $\mathcal{L}_{\text{fbp}}$ satisfazendo³

$$\widehat{\mathcal{L}_{\text{fbp}}d}(\nu) = |\nu|\hat{d}(\nu, \theta) = \nu \text{sign}(\nu)\hat{d}(\nu, \theta) = (-i \text{sign}(\nu))(i\nu\hat{d}(\nu, \theta)) \quad (2.21)$$

ou seja,

$$\mathcal{L}_{\text{fbp}}d(t) = \mathcal{H}\partial_t d(t) \quad (2.22)$$

com $\mathcal{H}$ a transformada de Hilbert. Segue portanto, de (2.20) que a inversa de $\mathcal{R}$ (à esquerda) é descrita pelo operador

$$f(x) = \mathcal{B}\mathcal{H}\partial_t \mathcal{R}f(x) \Rightarrow \mathcal{R}^{-1} = \mathcal{B}\mathcal{L}_{\text{fbp}} = \mathcal{B}\mathcal{H}\partial_t \quad (2.23)$$

Isto significa que a transformada de Hilbert aparece implícita na inversão de $\mathcal{R}$, e o Teorema 2.1.1.(ii) se torna de grande importância prática, pois evita o cálculo da inversão usando os operadores ∂_t e $\mathcal{H}$.

Observe também, que pelo Lema 2.2

$$\widehat{\mathcal{B}\mathcal{R}f}(\eta) = \hat{h}(\eta)\hat{f}(\eta) \quad (2.24)$$

e, como $\hat{h}(\eta) = 1/\|\eta\|_2$ (veja [19]), temos da equação acima

$$\hat{f}(\eta) = \|\eta\|_2 \widehat{\mathcal{B}\mathcal{R}f} \Rightarrow f(x) = (g * \mathcal{B}\mathcal{R})f(x) \quad (2.25)$$

onde $g = g(x)$ é tal que $\hat{g}(\eta) = \|\eta\|_2$. Como antes, vamos denotar⁴ $\mathcal{L}_{\text{fob}}$ o operador em $\mathbf{U}$ que satisfaz $\mathcal{L}_{\text{fob}}u(x) = (g * u)(x)$ de tal forma que

$$f(x) = \mathcal{L}_{\text{fob}}\mathcal{B}\mathcal{R}f(x) \Rightarrow \mathcal{R}^{-1} = \mathcal{L}_{\text{fob}}\mathcal{B} \quad (2.26)$$

Este método de inversão é comumente denominado de filtro das retroprojeções por razões óbvias. Provamos assim o seguinte Teorema

Teorema 2.1.2 *Se $d = \mathcal{R}f$ então são válidas as seguinte igualdades*

(i) $f = \mathcal{B}\mathcal{L}_{\text{fbp}}d$

(ii) $f = \mathcal{L}_{\text{fob}}\mathcal{B}d$

(iii) $\langle f, f \rangle = \langle d, \mathcal{L}_{\text{fbp}}d \rangle = \langle f, \mathcal{L}_{\text{fob}}\mathcal{B}d \rangle$

(iv) $\langle d, d \rangle = \langle \mathcal{B}d, f \rangle$

³fbp: *filtered backprojection*.

⁴fob: *filter of backprojection*.

Prova: A prova de (i) e (ii) está contida na discussão das equações (2.23) e (2.26). A demonstração de (iii) e (iv) se dá pelo fato de $\mathcal{B}$ ser o ajunto de $\mathcal{R}$. De fato,

$$\langle f, f \rangle = \langle f, \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R} f \rangle = \langle f, \mathcal{B} \mathcal{L}_{\text{fbp}} \mathcal{R} f \rangle = \langle \mathcal{R} f, \mathcal{L}_{\text{fbp}} \mathcal{R} f \rangle = \langle d, \mathcal{L}_{\text{fbp}} d \rangle \quad (2.27)$$

e

$$\langle d, d \rangle = \langle \mathcal{R} \mathcal{R}^{-1} d, d \rangle = \langle f, \mathcal{B} d \rangle. \quad \square \quad (2.28)$$

Método 2.1.1 Cálculo de $\mathcal{R}^{-1}$, dado $d = \mathcal{R} f$

$\langle \text{fbp} \rangle$: *filtered backprojection*

- (a) Escolha um filtro $j: \nu \in \mathbb{R} \mapsto j(\nu) \in \mathbb{R}$.
- (b) Construa a função $\hat{s}(\nu) = j(\nu)|\nu|$ e calcule $\hat{d}(\nu, \theta)$, $\forall \theta$
- (c) Filtre as projeções com $s: q = \mathcal{F}^{-1}(\hat{d}\hat{s})$
- (d) Reconstrua f com a retroprojeção: $f = \mathcal{B}q$

$\langle \text{fob} \rangle$: *filter of the backprojection*

- (a) Escolha um filtro $j: \eta \in \mathbb{R}^2 \mapsto j(\eta) \in \mathbb{R}$
 - (b) Construa a função $\hat{g}(\eta) = j(\eta)\|\eta\|_2$
 - (d) Calcule a retroprojeção $q = \mathcal{B}d$
 - (e) Reconstrua f filtrando as retroprojeções com $g: f = \mathcal{F}_2^{-1}[\hat{g} \widehat{\mathcal{B}q}]$
-

Observe que $\mathcal{L}_{\text{fbp}}$ e $\mathcal{L}_{\text{fob}}$ são operadores que dependem das funções $s = s(t)$ e $g = g(x)$ respectivamente, e que estas funções não estão bem definidas em L^2 uma vez que $\hat{s}(\nu) = |\nu|$ e $\hat{g}(\eta) = \|\eta\|$ não são quadrado integráveis. Este problema, na prática, é sempre contornado com a introdução de um filtro $j = j(\nu)$.

Uma análise detalhada da introdução de filtros $j = j(\nu)$ no problema de tomografia é encontrada em [42, 57, 43, 24]. É comum, por exemplo, usar j como o filtro passa-baixa $j(\nu) = 1$ se $|\nu| \leq b$ e $j(\nu) = 0$ caso contrário, onde b é a banda da função projeção $d(\cdot, \theta)$ (para algum θ fixo). Vale ressaltar que o método acima é apenas mnemônico, e detalhes técnicos a respeito da implementação, principalmente do uso da transformada de Fourier para o cálculo de convoluções podem ser encontrados em [42, 20].

É possível estender a geometria de raios apresentada na Figura 2.1 para o caso onde os feixes são ditos divergentes, isto é os feixes partem de uma fonte situada fora da bola que contém o objeto sob investigação e o iluminam em um formato de leque. Isto pode ser encontrado com detalhes em [42]. Neste caso, o Teorema da Projeção 2.1.1 ainda é válido e uma fórmula diferente para a inversa pode ser obtida, e sua implementação também é denominada de retroprojeção filtrada. Prova-se em [58] que, este operador de retroprojeção filtrada pode ser escrito como uma série, cujo primeiro termo é o operador de retroprojeção. Isto imediatamente leva a pensar que, uma espécie de método iterativo pode ser construído, levando em conta que este último operador pode aproximar a inversa. No Capítulo 5 discutiremos isto em mais detalhes e veremos o comportamento desse tipo de filosofia para construir um algoritmo de inversão.

2.2 Soluções de norma mínima

Em experimentos reais, não dispomos obviamente de todas as integrais de linha do objeto, isto é, somente conhecemos um número finito de ângulos $\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$. É possível verificar através de exemplos, que nestes casos, a unicidade da solução do problema que queremos resolver não é mais garantida, pois podem existir duas funções cujas projeções coincidam em um número finito de vistas. Em geral, o algoritmo clássico de retroprojeção filtrada abre mão da unicidade, mas reconstrói a função desejada com uma qualidade satisfatória desde que n seja suficientemente grande. Portanto, outras abordagens podem ser feitas. Na seções seguintes apresentamos duas outras possibilidades pouco mencionadas na literatura e que possuem uma fácil extensão ao caso mais geral, abordado nesta tese, da transformada generalizada de Radon.

2.2.1 Ridge functions

Shepp & Logan em 1978 [22], propuseram encontrar a solução de norma-2 mínima do sistema linear $\mathcal{R}f = d$, e obtiveram a solução desse problema como uma combinação linear de funções bases (funções de uma única variável). O enunciado do principal resultado é devido a eles

Teorema 2.2.1 (Shepp-Logan) *Existem funções $\{h_1, \dots, h_n\}$ no espaço $L^2[-1, 1]$ tais que*

$$f_{sl}(x) = \sum_{i=1}^n h_i(x \cdot \xi_i), \quad \xi_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i) \quad (2.29)$$

é a única solução de norma-2 mínima consistente com os dados em $\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$.

As funções h_i são ditas *ridges*, constantes ao longo de retas. Um estudo analítico mais detalhado sobre tais funções pode ser encontrado em [18]. Recentemente encontrou-se uma maneira eficiente de construir cada função base h_i , através de expansões em polinômios de Chebyshev do segundo tipo [21], mas cuja estabilidade não foi garantida. É fácil verificar que a reconstrução por retroprojeção filtrada é da forma (2.29) para uma base h_i particular. Com efeito, discretizando a integral em (2.19)

$$f(x) = \int_0^\pi q(x \cdot \xi, \theta) d\theta \approx \frac{\pi}{n} \sum_{i=1}^n q(x \cdot \xi_i, \theta_i) \quad (2.30)$$

onde $q(t, \theta) = s(t) * d(t, \theta)$, com s um núcleo de convolução correspondente a uma versão regularizada de $\mathcal{F}_1^{-1}|\nu|$. A idéia de aproximações por polinômios ortogonais, embora antiga como no algoritmo circular [24, 40], recebeu destaque recentemente, abrindo caminho a novos métodos de reconstrução direta, como é o caso de [27].

Kazantsev [21] propôs um procedimento para a construção de *ridge functions*, sendo similar ao método de Xu [27] e Bortfeld [59]. Os principais passos deste procedimento estão esboçados no Método 2.2.1. Lembremos que sua generalização será refeita no Capítulo 3, com o devido rigor.

Um estudo completo sobre a matriz $A^{(k)}$, na equação (2.32), pode ser encontrado em [17]. Sendo (2.29) a solução de norma mínima consistente com os dados, ela representa o operador pseudoinversa para a transformada de Radon, com um número finito de ângulos; ou seja $f = \mathcal{R}^\dagger d$.

2.2.2 A pseudoinversa de Medoff

A análise dos valores singulares da transformada de Radon, considerando-a como uma transformação linear entre os espaços $U_2 = (U, \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$ e $V_2 = (V, \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2})$ não é trivial e pode ser encontrada em [24]. No entanto, se munirmos os espaços U e V com outros produtos internos, então a

pseudoinversa pode ser encontrada facilmente. De fato, vamos definir $\langle, \rangle_{\text{fbp}}$ em $\mathbf{V}$ por

$$\langle d_1, d_2 \rangle_{\text{fbp}} = \langle \mathcal{L}_{\text{fbp}} d_1, d_2 \rangle_{L^2}, \quad d_1, d_2 \in \mathbf{V} \quad (2.34)$$

onde $\mathcal{L}_{\text{fbp}}$ é definido em (2.20), e definimos $\langle, \rangle_{\text{fob}}$ em $\mathbf{U}$ por

$$\langle f_1, f_2 \rangle_{\text{fob}} = \langle \mathcal{C} f_1, f_2 \rangle_{L^2}, \quad f_1, f_2 \in \mathbf{U} \quad (2.35)$$

onde $\mathcal{C}$ é o operador de convolução $\mathcal{C} f_1 = f_1 \star h$ e $h = h(x) = 1/\|x\|_2$. É fácil provar com o uso da relação de Parseval que os operadores $\mathcal{L}_{\text{fbp}}$ e $\mathcal{C}$ são auto-adjuntos, e sendo lineares, é imediato verificar que $\langle, \rangle_{\text{fbp}}$ e $\langle, \rangle_{\text{fob}}$ são produtos internos bem definidos. Vamos denotar por $\mathbf{V}_{\text{fbp}}$ e $\mathbf{U}_{\text{fob}}$ os respectivos espaço resultantes.

Pela equação (2.23) e o fato de $\mathcal{B}$ ser o adjunto de $\mathcal{R}$ no produto $\langle, \rangle_{L^2}$, obtemos a seguinte relação

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \langle \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R} f, g \rangle_{L^2} = \langle \mathcal{B} \mathcal{L}_{\text{fbp}} \mathcal{R} f, g \rangle_{L^2} \quad (2.36)$$

$$= \langle \mathcal{L}_{\text{fbp}} \mathcal{R} f, \mathcal{R} g \rangle_{L^2} \quad (2.37)$$

$$= \langle \mathcal{R} f, \mathcal{R} g \rangle_{\text{fbp}} \quad (2.38)$$

Analogamente, pela equação (2.26) e pelo Lema 2.2 observamos que

$$\langle \mathcal{R} f, \mathcal{R} g \rangle_{L^2} = \langle f, \mathcal{B} \mathcal{R} g \rangle_{L^2} = \langle f, \mathcal{C} g \rangle_{L^2} = \langle f, g \rangle_{\text{fob}} \quad (2.39)$$

Resulta então que a transformada de Radon, vista como o operador $\mathcal{R}: \mathbf{U}_2 \rightarrow \mathbf{V}_{\text{fbp}}$ é uma isometria cujo adjunto é $\mathcal{R}^\sharp = \mathcal{B} \mathcal{L}_{\text{fbp}} = \mathcal{R}^{-1}$. De fato, para $d \in \mathbf{V}$

$$\langle \mathcal{R} f, d \rangle_{\text{fbp}} = \langle \mathcal{R} f, \mathcal{L}_{\text{fbp}} d \rangle_{L^2} = \langle f, \mathcal{B} \mathcal{L}_{\text{fbp}} d \rangle. \quad (2.40)$$

Por outro lado, vendo o operador de Radon como $\mathcal{R}: \mathbf{U}_{\text{fob}} \rightarrow \mathbf{V}_2$, temos uma isometria com operador adjunto definido por $\mathcal{R}^\sharp = \mathcal{L}_{\text{fob}} \mathcal{B} = \mathcal{R}^{-1}$. Daí, e da propriedade geral da pseudoinversa $\mathcal{R}^\dagger = (\mathcal{R}^\sharp \mathcal{R})^\dagger \mathcal{R}^\sharp$ temos que $\mathcal{R}^\sharp \mathcal{R} = \mathcal{I}$ (operador identidade) e portanto $\mathcal{R}^\dagger = \mathcal{R}^\sharp$. Finalmente,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}: \mathbf{U}_2 \rightarrow \mathbf{V}_{\text{fbp}} &\Rightarrow \mathcal{R}^\dagger = \mathcal{B} \mathcal{L}_{\text{fbp}} \\ \mathcal{R}: \mathbf{U}_{\text{fob}} \rightarrow \mathbf{V}_2 &\Rightarrow \mathcal{R}^\dagger = \mathcal{L}_{\text{fob}} \mathcal{B} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Vamos denominar os operadores resultantes em (2.41) de pseudoinversas de Medoff, em referência a Barry Medoff (Capítulo 9 de [16]). Sua importância aparece principalmente em métodos iterativos, onde o cálculo de projeções é especialmente útil e dependente da pseudoinversa. Segue, pelo desenvolvimento exposto aqui, que nestes casos, a pseudoinversa pode ser calculada rapidamente através do Método 2.1.1 (pag.16).

2.3 Métodos iterativos para inversão

Esta classe de métodos, é merecedora de um estudo completo e particular, mas que não é o objetivo principal desta tese. No entanto, no Capítulo de simulações faremos comparações que envolvem ao menos dois famosos métodos iterativos, a saber ART (*algebraic reconstruction technique*) e EM (*expectation maximization*). Vamos apresentar a discussão destes métodos sem a necessidade de entrar em discretizações das integrais envolvidas, algo bastante comum na literatura.

2.3.1 Reconstruções algébricas

Vamos começar denotando $\eta = (t, \theta)$ e admitir que este vetor seja contido no conjunto $\mathcal{N} = [-1, 1] \times [0, \pi]$. Lembramos que nosso problema é escrito da forma $d(\eta) = \mathcal{R}f(\eta)$. Tomando $\eta \in \mathcal{N}$ fixo e, sendo a transformada de Radon um operador linear e contínuo [24] entre $\mathbf{U}$ e $\mathbf{V}$, sabemos que o funcional linear $\mathcal{R}: f \in \mathbf{U} \rightarrow \mathcal{R}f(\eta) \in \mathbb{R}$ admite, pelo Teorema de Riesz [7], uma representação da forma

$$d(\eta) = \mathcal{R}f(\eta) = \langle f, a_\eta \rangle_{L^2} \quad (2.42)$$

Lema 2.3 Se $\psi_\eta(\beta) = \delta(\beta - \eta)$ então $a_\eta = \mathcal{B}\psi_\eta$.

Prova: De fato, com a definição de ψ_η temos $\langle \psi_\eta, d \rangle_{L^2} = \int_{\mathcal{N}} \delta(\beta - \eta) d(\beta) d\beta = d(\eta)$. Logo, sendo $\mathcal{B}$ o adjunto de $\mathcal{R}$ e $d = \mathcal{R}f$ resulta

$$\langle f, a_\eta \rangle_{L^2} = d(\eta) = \langle d, \psi_\eta \rangle_{L^2} = \langle \mathcal{R}f, \psi_\eta \rangle_{L^2} = \langle f, \mathcal{B}\psi_\eta \rangle_{L^2} \quad (2.43)$$

Como $f \in \mathbf{U}$ é arbitrário, segue a proposição. $\square$

Considere a variedade afim $h_\eta = \{f \in \mathbf{U}: \langle f, a_\eta \rangle_{L^2} = d(\eta)\}$. O método, originalmente descoberto por Kaczmarz em 1937, consiste em projetar ortogonalmente sobre a variedade h_η as estimativas de f . Ou seja

$$f^{(k+1)} = \text{proj}_{h_\eta} f^{(k)} \quad (2.44)$$

onde η é escolhido em função de k , isto é, à medida que a iteração prossegue, escolhemos uma determinada variedade para projetar. Isto resulta no famoso método ART

$$f^{(k+1)}(x) = f^{(k)}(x) + \frac{d(\eta) - \langle f^{(k)}, a_\eta \rangle_{L^2}}{\|a_\eta\|_{L^2}^2} a_\eta(x) \quad (2.45)$$

$$= f^{(k)}(x) + \frac{d(\eta) - \mathcal{R}f^{(k)}(\eta)}{\|a_\eta\|_{L^2}^2} a_\eta(x) \quad (2.46)$$

É importante notar que sendo a_η expresso pelo Lema 2.3, pode ser calculado pela retroprojeção, cuja implementação pode ser feita de maneira eficiente e robusta. A necessidade real de ter somente η em uma versão discreta $\tilde{\mathcal{N}}$ de $\mathcal{N}$ faz com que existam várias escolhas para $\eta = \eta(k)$ [8], sendo a mais famosa delas, a escolha cíclica, isto é, projeta-se em todas as variedades, uma a uma, repetindo o processo ao esgotar todos as equações.

Usaremos também a versão relaxada de ART, que consiste nas seguintes iterações

$$f^{(k+1)}(x) = f^{(k)}(x) + \alpha_k \frac{d(\eta) - \mathcal{R}f^{(k)}(\eta)}{\|a_\eta\|_{L^2}^2} a_\eta(x) \quad (2.47)$$

onde $\epsilon \leq \alpha_k \leq 2 - \epsilon$, com $\epsilon > 0$ dado. A convergência do método (2.45), bem como sua versão relaxada pode ser encontrada no Capítulo 2 de [16]. Se $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0$ então a seqüência gerada $\{f^{(k)}\}$ converge para a solução de quadrados mínimos [15].

2.3.2 Máxima verossimilhança

Métodos de tomografia têm natureza estatística pois a emissão e detecção dos fótons envolvidos, são descritos como processos de Poisson [23]. Vamos descrever sucintamente o processo envolvido, deixando os detalhes para [44]. Aqui, devemos abrir mão da continuidade do conjunto $\mathcal{N} = [-1, 1] \times [0, \pi]$ e assumir que apenas sua versão discreta $\tilde{\mathcal{N}}$ é disponível, o que é o mesmo a admitir que um número finito de raios, digamos D , passam através do objeto descrito pela função f . Portanto, seja $\tilde{\mathcal{N}} = \{\eta_j \in \mathcal{N} : j = 1 \dots, D\}$.

Se Y_j são variáveis aleatórias que descrevem a detecção de fótons pela fonte [44], então $Y_j \sim \text{Poisson}[-\mathcal{R}f(\eta_j)]$. Sejam $d_j = d(\eta_j)$ as medidas de fato obtidas experimentalmente. A probabilidade para Y_j assumir o valor d_j é dada por $\phi(d_j) = P(Y_j = d_j)$ onde ϕ é a função de densidade de probabilidade de Poisson com média $\lambda_j = \mathcal{R}f(\eta_j)$. A estimativa por máxima verossimilhança procura maximizar a probabilidade total das observações, que é dada por $\prod_{i=1}^D P(Y_j = d_j) = \prod_{i=1}^D \phi(d_j)$. Como a média λ_j é função de $f \in \mathcal{U}$, então procuramos resolver o problema

$$\max_{f \in \mathcal{U}} p(f) = \prod_{i=1}^D \phi(d_j(f)), \quad \phi(d_j(f)) = \frac{e^{-\lambda_j(f)} \lambda_j(f)^{d_j}}{d_j!} \quad (2.48)$$

Ou, como maximizar $p = p(f)$ equivale a maximizar $\ell(f) = \ln p(f)$ temos o seguinte problema, onde ℓ é dita função log-verossimilhança

$$\max_{f \in \mathcal{U}} \ell(f) = \sum_{i=1}^D d_j \ln \lambda_j(f) - \lambda_j(f), \quad \lambda_j(f) = \mathcal{R}f(\eta_j) \quad (2.49)$$

Em geral, pedimos que f satisfaça a uma restrição de positividade, isto é $f \geq 0$. O mais famoso método para resolver o problema acima é dito *expectation maximization*, ou EM em forma abreviada. Consiste em uma metodologia com fase de estimação e maximização. Uma família grande de métodos se encaixam nesta regra e muitos deles estão citados em [44]. Em [48] está desenvolvida a metodologia que obtém a fórmula para a resolução iterativa de (2.49), sem utilizar argumentos estatísticos, e é ela dada por

$$f^{(k+1)}(x) = \beta(x)f^{(k)}(x)\mathcal{B}d^{(k)}(x), \quad d^{(k)}(\eta) = \frac{d(\eta)}{\mathcal{R}f^{(k)}(\eta)}, \quad (2.50)$$

onde $\beta \in \mathcal{U}$ é usualmente escolhido como $\beta(x) = \mathcal{B}e(x)$, onde $e(\eta) = 1$, $\forall \eta \in \mathcal{N}$. A convergência da seqüência gerada em (2.50) está provada em [44, 48]. É fácil perceber que a mesma seqüência é obtida usando as condições de otimalidade do problema de otimização restrito.

2.4 A transformada divergente e o espaço dos pesos

Esta transformada é muito parecida com a transformada de Radon e aparece em futuras discussões, razão pela qual dedicamos apenas algumas linhas para sua definição e principal resultado. Uma maior discussão sobre este operador pode ser encontrada em [12].

Qualquer função positiva da forma $q = q(x, \theta)$ é, nesta tese, dita uma função *peso*. Nesta tese, acontecerá de tais funções serem estritamente positivas, limitadas e contínuas em L^2 , embora isto não seja uma regra válida para um caso mais geral. Vamos reunir todas as funções desta forma em um espaço denotado por $\mathcal{Q}$ e denominá-lo de espaço dos pesos. Eventualmente, uma função da forma $q = q(x, \eta)$, onde η é uma direção arbitrária em $\mathbb{C}^2$, é dita também *peso* e a inserimos em um espaço denotado por $\bar{\mathcal{Q}}$. Obviamente, $\mathcal{Q} \subset \bar{\mathcal{Q}}$

Definição 2.4.1 O operador $\mathcal{D}: \mathbf{U} \rightarrow \bar{\mathbf{Q}}$ definido por

$$\mathcal{D}f(x, \eta) = \int_0^\infty f(x + \tau \operatorname{Re}[\eta]) d\tau \quad (2.51)$$

é dito a transformada divergente geral de f . O operador $\mathcal{D}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ definido por $\mathcal{D}f(x, \theta) = \mathcal{D}f(x, \xi_\theta^\perp)$

$$\mathcal{D}f(x, \theta) = \int_0^\infty f(x + \tau \xi_\theta^\perp) d\tau \quad (2.52)$$

onde $\xi_\theta^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$, é dito a transformada divergente de f .

O operador $\mathcal{D}$ é inversível pois vale a seguinte relação trivial

$$\mathcal{D}f(x, \eta) + \mathcal{D}f(x, -\eta) = \mathcal{R}f(x \cdot \eta, \arg \eta) \quad (2.53)$$

Geometricamente, a transformada integra a função f na semi-reta $r_\eta = \{y + s\eta \in \mathbb{R}^2; s \geq 0\}$. Portanto, a soma das transformadas nas retas r_η e $r_{-\eta}$, como em (2.53), resulta na transformada de Radon, avaliada no raio $t = x \cdot \eta$ e no ângulo $\theta = \arg \eta$. Equivalentemente $\mathcal{D}f(x, \theta) + \mathcal{D}f(x, \theta + \pi) = \mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta)$ para $\theta \in [0, 2\pi]$. O seguinte Lema é útil quando conhecemos a função $\mathcal{L}(x, \theta) = \mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta)$ mas não necessariamente $\mathcal{R}f$, pois fornece uma forma de calcular $\mathcal{R}f$.

Lema 2.4 Se $\mathcal{R}b(x \cdot \xi, \theta) = \mathcal{L}(x, \theta)$ para todo x , então a transformada de Radon satisfaz $\mathcal{R}b(t, \theta) = k(t)\mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta)$ com $\mathcal{L}_\theta = \mathcal{L}(\cdot, \theta)$ e $k(t) = \frac{1}{2}(1 - t^2)^{-1/2}$.

Prova: Calculando a transformada de Radon de $\mathcal{L}_\theta$ dentro do disco unitário temos

$$\mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta) = \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}b((t\xi + s\xi^\perp) \cdot \xi, \theta) ds \quad (2.54)$$

$$= \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}b(t, \theta) ds \quad (2.55)$$

$$= \mathcal{R}b(t, \theta) 2\sqrt{1-t^2}. \quad \square \quad (2.56)$$

Método 2.2.1 Construção de *ridge functions*

Para cada ângulo θ_i fixo, a transformada de Radon leva $f \in U$ uma função $d_i \doteq d_{\theta_i} = d_{\theta_i}(t)$ contida em $L^2([-1, 1], w)$, com o peso $w(t) = (1 - t^2)^{\frac{1}{2}}$. Portanto, as considerações feitas em [21] e a combinação linear (2.29) levam a tomar a expansão de $h_i = h_i(t) \in L^2([-1, 1], w)$ em polinômios de Chebyshev do 2º tipo

$$h_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{(k)} U_{k-1}(t), \quad U_k(t) = \frac{\sin(k \arccos t)}{\sin(\arccos t)}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.31)$$

onde os coeficientes $c^{(k)}$ satisfazem ao sistema de equações $A^{(k)} c^{(k)} = b^{(k)}$, com $b_i^{(k)} = \frac{1}{\pi} \langle d_i, U_{k-1} \rangle_{L^2}$. A matriz $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida por

$$a_{ij}^{(k)} = \frac{\sin k(\theta_i - \theta_j)}{k \sin(\theta_i - \theta_j)}, \quad k \geq 1 \quad (2.32)$$

No caso em que os ângulos são uniformes, isto é $\theta_i - \theta_j = (j - i)\Delta\theta$ então prova-se em [21] que $A^{(k)}$ é singular, para $k < n$, e sua solução deve ser calculada no sentido de quadrados mínimos de norma mínima. Uma expressão fechada para a pseudoinversa é obtida nestes casos, sendo ela $(A^{(k)})^\dagger = \frac{k^2}{n^2} A^{(k)}$. Quando $k \geq n$, a matriz não é mais singular e sua inversa é da forma

$$[A^{(k)}]^{-1} = \begin{cases} \frac{k}{nm} \left(I - \frac{l}{n(m+1)} A^{(l)} \right), & m \in \{2, 4, 6, \dots\} \\ \frac{k}{n(m+l)} \left(I - \frac{n-l}{nm} A^{(n-l)} \right), & m \in \{1, 3, 5, \dots\} \end{cases} \quad (2.33)$$

com $k = mn + l$, $I \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a matriz identidade e $A^{(0)} = I$. No caso de ângulos não uniformes, a solução deve ser calculada numericamente.

Capítulo 3

A Transformada Generalizada de Radon

A transformada Generalizada de Radon aparece em várias aplicações na tomografia. Aqui, estamos interessados em um tipo particular, denominado xfct, que é acrônimo para *x-rays fluorescence tomography*, e será tratado em detalhes na Seção 3.3. Vamos denotar este operador generalizado por $\mathcal{R}_\omega: U \rightarrow V$, definindo-o da seguinte forma

$$\mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) \omega(x, \theta) dx \quad (3.1)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} f(x) \omega(x, \theta) \delta(x \cdot \xi - t) dx \quad (3.2)$$

$$= \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} f(t\xi + s\xi^\perp) \omega(t\xi + s\xi^\perp, \theta) ds \quad (3.3)$$

onde $\omega \in Q$ é uma função peso positiva e $(t, \theta) \in [-1, 1] \times [0, 2\pi]$ (diferente da Transformada de Radon do Capítulo anterior, onde $\theta \in [0, \pi]$). Alguns pesos típicos em tomografia estão representados na Tabela 3.1

Faremos uma breve revisão sobre spect, e suas variações pet e ert, na Seção 3.2. Observe que em todos os casos mencionados na Tabela acima, a função peso depende de um parâmetro μ , razão pela qual vamos usar as notações $\omega = \omega(\mu) = \omega_\mu$ quando necessário. Também, sempre que conveniente usaremos a notação ω_{xfct} , ω_{spect} e ω_{ert} para denotar os pesos relacionados. Matematicamente, tal como a transformada clássica, a transformada Generalizada de Radon integra a função sobre retas $\Omega(t, \theta)$ com um peso

Nome	Notação $\mathcal{R}_\omega$	Função peso $\omega(x, \theta)$	Dependências
ct	$\mathcal{R}$	1	—
ert	$\mathcal{R}_{\text{ert}}$	$e^{-\mu(x \cdot \xi^\perp)}$	$\mu \in \mathbb{R}_+$
pet	$\mathcal{R}_{\text{pet}}$	$e^{-\mathcal{R}\mu(x \cdot \xi, \theta)}$	$\mu \in \mathbf{U}$
spect	$\mathcal{R}_{\text{spect}}$	$e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta)}$	$\mu \in \mathbf{U}$
xfct	$\mathcal{R}_{\text{xfct}}$	$e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} d\gamma e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$	$\lambda, \mu \in \mathbf{U}, \Gamma \subset [0, \pi]$

Tabela 3.1: Pesos tradicionais em tomografia.

conhecido ω . Nesse sentido, o Lema 2.1 se aplica igualmente, a não ser pela inclusão de ω , ao operador $\mathcal{R}_\omega$.

O nosso objetivo é encontrar algoritmos que façam a inversão de $\mathcal{R}_\omega$ usando formas analíticas fechadas. Veremos que isso é possível no Capítulo 4 usando técnicas variadas. Observe que, para qualquer ângulo θ fixo a função $f\omega_\theta \in \mathbf{U}$, onde $\omega_\theta = \omega(\cdot, \theta)$, satisfaz $d(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \mathcal{R}(f\omega_\theta)(t, \theta)$. Logo, podemos usar o Teorema da projeção 2.1.1.i para $f\omega_\theta$ e obter um Teorema de projeção generalizado

$$\hat{d}(\nu, \theta) = \widehat{f\omega_\theta}(\nu \cos \theta, \nu \sin \theta) = (\hat{f} \star \widehat{\omega_\theta})(\nu \cos \theta, \nu \sin \theta) \quad (3.4)$$

Se existisse uma forma de resolver o problema de convolução acima, obteríamos uma inversão para f . Infelizmente isto não é possível pela dependência de ω em θ , e outras abordagens terão que ser feitas.

É trivial notar que $\mathcal{R}_\omega f$ é um operador linear não só em f , mas também no peso ω , isto é

$$\mathcal{R}_{\alpha\omega_1 + \omega_2} f = \alpha \mathcal{R}_{\omega_1} f + \mathcal{R}_{\omega_2} f. \quad (3.5)$$

para todo $f \in \mathbf{U}$ e $\alpha \in \mathbb{R}$. O operador $\mathcal{B}_\omega: \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{U}$ é denominado de retro-projeção generalizada, sendo definido por

$$\mathcal{B}_\omega d(x) = \int \omega(x, \theta) p(x \cdot \xi_\theta, \theta) d\theta \quad (3.6)$$

Tal como no caso da transformada de Radon, o operador $\mathcal{B}_\omega$ é o adjunto de $\mathcal{R}_\omega$. De fato, com a mudança de variáveis $x = t\xi + s\xi^\perp$ temos

$$\langle \mathcal{B}_\omega p, f \rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{B}_\omega p(x) f(x) dx \quad (3.7)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} dx \int_0^{2\pi} d\theta \omega(x, \theta) p(x \cdot \xi, \theta) f(x) \quad (3.8)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds \int_0^{2\pi} d\theta \omega(t\xi + s\xi^\perp, \theta) p(t, \theta) f(t\xi + s\xi^\perp) \quad (3.9)$$

$$= \langle p, \mathcal{R}_\omega f \rangle_{L^2} \quad (3.10)$$

para todo $p \in \mathbf{V}$. O seguinte Lema aparece como uma generalização do Lema 2.2 (veja pág. 12), dando indícios de que $\mathcal{B}_\omega$ também não é de fato uma aproximação razoável para a inversa de $\mathcal{R}_\omega$. A demonstração se encontra no Apêndice A.2.

Lema 3.1 *Para dois pesos positivos ω_1 e ω_2 , a ação de $\mathcal{B}_{\omega_1}$ sobre $\mathcal{R}_{\omega_2}$ é dada por*

$$\mathcal{B}_{\omega_1} \mathcal{R}_{\omega_2} f(x) = \int_{\mathbb{R}^2} f(u) p_x(u) h(u-x) du, \quad h(x) = 1/\|x\|_2 \quad (3.11)$$

onde

$$p_x(u) = \frac{1}{2} [\omega_1(x, \ell(u-x)) \omega_2(u, \ell(u-x)) + \omega_1(x, \ell(u-x) + \pi) \omega_2(u, \ell(u-x) + \pi)] \quad (3.12)$$

e ℓ definido por $\ell(v) = -\arctan \frac{v_1}{v_2}$, para $v \in \mathbf{U}$.

Note que se $\omega_1 = 1$, então resulta de (3.12),

$$p_x(u) = \frac{1}{2} [\omega_2(u, \ell(u-x)) + \omega_2(u, \ell(u-x) + \pi)] \quad (3.13)$$

e se $\omega_2 = 1$ então $p_x(u) = 1$. Ainda, note que podemos reescrever o Lema acima na forma de convolução

$$\mathcal{B}_{\omega_1} \mathcal{R}_{\omega_2} f(x) = (f p_x \star h)(x) \quad (3.14)$$

Ou ainda, como $p_x = 1 - (1 - p_x)$ segue

$$\mathcal{B}_{\omega_1} \mathcal{R}_{\omega_2} f(x) = (f \star h)(x) - (f[1 - p_x] \star h)(x) \quad (3.15)$$

$$= \mathcal{B} \mathcal{R} f(x) - (f[1 - p_x] \star h)(x) \quad (3.16)$$

onde a última igualdade acima segue pelo Lema (2.2), pois $f \star h = \mathcal{B} \mathcal{R} f$.

Finalizamos as propriedades relevantes da transformada generalizada com o seguinte Lema, particularmente útil no Capítulo 5, e demonstrado no Apêndice A.3.

Lema 3.2 *Para todo $x \in Z$, com Z o disco unitário, é válida a desigualdade $|\mathcal{B} \mathcal{R}_\omega f(x)| \leq 2\|f\|_\infty \mathbf{c}(\omega)$, onde*

$$\mathbf{c}(\omega) = \int_0^{2\pi} c(\theta) d\theta, \quad c(\theta) = \int_Z |\omega(x, \theta)| dx. \quad (3.17)$$

3.1 A Equação do transporte e a Transformada de Radon

Nas análises que seguem neste e no Capítulo 4, faremos com frequência menção a equações diferenciais parciais. Mostraremos para o caso clássico de Radon, isto é $\omega = 1$, que o problema que procuramos resolver de fato equivale a tais equações. Com efeito, o processo de reconstrução de imagens é descrito pelo movimento dos fótons. Isto é matematicamente representado pela equação do transporte, que modela o movimento de partículas em meios materiais. Esta equação é dada por

$$(\eta_1 \partial_{x_1} + \eta_2 \partial_{x_2}) u(x) = \eta \cdot \nabla u(x) = f(x) \quad (3.18)$$

onde $u = u(x)$ representa a intensidade da energia de transporte na posição x , determinada pela direção unitária $\eta \in \mathbb{R}^2$ constante. A função $-f = -f(x)$ denota o coeficiente de absorção do objeto no ponto x , também dito coeficiente de atenuação segundo a Lei de Beer-Lambert [42]. O problema inverso que se quer resolver aqui é de encontrar a *fonte* f a partir do campo de radiação u , conhecido nos contornos do cilindro Z que suporta a função f . Equivalentemente [67], pode-se escrever $u = \ln \psi$ e obter outra equação do transporte, a saber $\eta \cdot \nabla \psi(x) = f(x)\psi(x)$. Esta última equação está em concordância com as equações das próximas seções. No entanto, adotaremos (3.18) levando em conta apenas que o tipo de medida obtida no contorno ∂Z é diferente.

Podemos escrever, alternativamente a equação (3.18), da forma

$$F(x, p, u) = \eta \cdot p - f = 0 \quad (3.19)$$

onde $p = \nabla u$. Esta equação diferencial parcial de primeira ordem, pode ser resolvida pelo método das características [13, 14], que se propõe a encontrar curvas (ditas características) onde a solução u é determinada pela solução de uma equação diferencial ordinária. O sistema de equações ordinárias equivalente é dado por

$$\frac{dx}{ds} = \frac{\partial F}{\partial p}, \quad \frac{dp}{ds} = -\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{\partial F}{\partial u} p, \quad \frac{du}{ds} = \frac{\partial F}{\partial p} \cdot p \quad (3.20)$$

onde s é o parâmetro de integração da curva. Nestes casos é fácil perceber que as curvas características são retas com direção η , isto é $x(s) = y + s\eta$,

onde $y \in \mathbb{R}^2$ é qualquer ponto pertencente ao suporte de f (veja Figura 3.1). Portanto, a solução u , ao longo desta reta é dada por

$$\frac{du}{ds} = p \cdot \eta = f(x(s)) \Rightarrow u(y + s\eta) = \int_0^s f(y + \tau\eta) d\tau \quad (3.21)$$

Assumindo que $\|\eta\|_2 = 1$, e pelo fato de f ter suporte compacto é fácil verificar pela equação acima e pela Definição 2.4.1 que $\lim_{s \rightarrow \infty} u(y + s\eta) = \mathcal{D}f(y, \eta)$. Isto é o mesmo a assumir que existe um valor $s^+ > 0$ tal que $u(y + s^+\eta) = \mathcal{D}f(y, \eta)$, onde s^+ denota o valor do parâmetro de integração que faz o campo u atingir a fronteira do cilindro Z sobre a reta $x = x(s)$. Tomando $y = x^- \in \partial Z$ e admitindo que não há radiação interna ao cilindro, isto é $u(x^-) = 0$ (equivalente a $s = 0$), e que a radiação incidente $u(x^+)$ é mensurável, digamos igual a d (veja Figura 3.1). Então temos

$$d(\eta) = u(x^- + s^+\eta) = \mathcal{D}f(y, \eta) = \mathcal{R}f(y \cdot \eta, \arg y) \quad (3.22)$$

onde a última igualdade segue do fato de f ter suporte compacto.

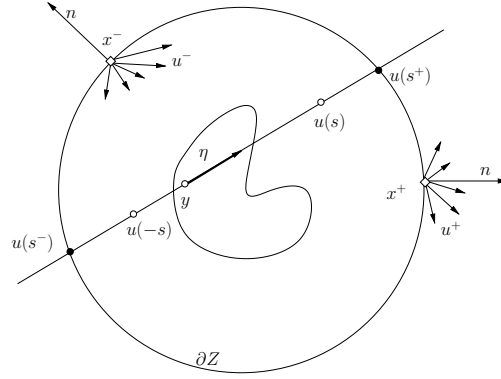


Figura 3.1: Propagação de fótons no interior do objeto, obedecendo à equação do transporte. Veja texto para detalhes.

Sendo d dependente da direção η , temos então o problema de transporte dos fótons posto da maneira clássica em tomografia, como no Capítulo anterior, isto é $d = \mathcal{R}f$.

3.2 Tomografia por emissão

Existem dois tipos clássicos de tomografia de emissão, chamados spect e pet [11, 9]. Nestes casos, a fonte emite fótons dentro do objeto. Alguns

destes fótons seguem trajetórias retas, outros são espalhados e mudam de direção devido às propriedades do meio. No entanto, nestes trajetos, existe uma atenuação segundo a Lei de Beer-Lambert [42], descrita por um coeficiente $a \in \mathcal{U}$. A equação que modela este transporte é semelhante a (3.18),

$$\eta \cdot \nabla u(x) + a(x)u(x) = f(x) \quad (3.23)$$

Tal como na Seção 3.1, denotando $F(x, p, u) = \eta \cdot p - au - f$ com $p = \nabla u$, o método das características fornece retas como curvas características $x(s) = y + s\eta$, onde a radiação u satisfaz a equação ordinária

$$u'(s) + a(s)u(s) = f(s) \quad (3.24)$$

onde $\{u(s), a(s), f(s)\}$ são notações para $\{u(x(s)), a(x(s)), f(x(s))\}$ respectivamente. A solução, da equação acima é facilmente obtida com a introdução de um fator integrante,

$$m(s)u(s) = \int_0^s f(\tau)m(\tau)d\tau, \quad m(s) = \exp \int_0^s a(q)dq \quad (3.25)$$

isto é

$$u(s) \doteq u(s; \eta) = \int_0^s f(y + \tau\eta) e^{-\int_\tau^s a(y+q\eta)dq} d\tau \quad (3.26)$$

Pelas mesmas razões da Seção 3.1, como f e μ são funções de suporte compacto, existem valores $s^\pm > 0$ tais que

$$u(s^\pm; \pm\eta) = \int_0^\infty f(y \pm \tau\eta) e^{-\int_\tau^\infty a(y \pm q\eta)dq} d\tau, \quad (3.27)$$

de tal maneira que

$$u(s^+; \eta) + u(s^-; -\eta) = \int_{\mathbb{R}} f(y + \tau\eta) e^{-\int_\tau^\infty a(y+q\eta)dq} d\tau \quad (3.28)$$

A equação (3.28) pode ser escrita com a notação introduzida no Capítulo anterior, da seguinte forma

$$d(y, \eta) = \int_{\mathbb{R}} f(y + \tau\eta) e^{-\mathcal{D}a(y+\tau\eta, \eta)} d\tau \quad (3.29)$$

onde $d(y, \eta) = u(s^+; \eta) + u(s^-; -\eta)$ é a soma das radiações externas ao cilindro Z (veja figura 3.1), valor que se supõe conhecido.

Admitindo que o transporte dos fótons se dá em todas as direções, isto é $\eta = \xi^\perp$ com $\theta \in [0, 2\pi]$, e que somos capazes de detectar a radiação externa d somente ao longo das retas, então a mudança de variáveis $y = t\xi + \tau\xi^\perp$ nos permite reescrever a igualdade acima por

$$d(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}} f(t\xi + \tau\xi^\perp) e^{-\mathcal{D}a(t\xi + \tau\xi^\perp, \theta)} d\tau = \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) e^{-\mathcal{D}a(x, \theta)} dx \quad (3.30)$$

onde $\Omega(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2: t = x \cdot \xi\}$. Com a notação $\omega(x, \theta) = \exp\{-\mathcal{D}a(x, \theta)\}$ a integral acima se transforma numa Transformada generalizada de Radon, como na equação (3.1). O modelo que representa é o usado em spect (veja Tabela 3.1) O caso de pet não será tratado aqui, mas pode ser obtido de maneira similiar, com outras condições de fronteira no cilindro Z (ver [9, 11]).

Considere o caso particular $a(x) = a\chi_A(x)$, onde $0 < a \in \mathbb{R}$ e A é um suporte bem definido e convexo. Neste caso, a transformada divergente de a é dada por

$$\mathcal{D}a(x, \theta) = \int_0^\infty a(x + q\xi^\perp) dq = as + ad(t, \theta), \quad (3.31)$$

onde

$$d(t, \theta) = \mathcal{D}\chi_A(x_{t,0}, \theta), \quad x_{t,s} = t\xi + s\xi^\perp, \quad (3.32)$$

veja Figura 3.2. Segue que a transformada de Radon em spect é dada por

$$\mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta) = e^{-ad(t, \theta)} \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) e^{-a(x \cdot \xi^\perp)} dx \equiv e^{-ad(t, \theta)} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) \quad (3.33)$$

onde

$$\mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) e^{-a(x \cdot \xi^\perp)} dx. \quad (3.34)$$

define o modelo da transformada exponencial de Radon [35].

3.3 Tomografia de raios-X por Fluorescência

A tomografia de raios-X por emissão de fluorescência (tradução livre de *xfct*, para *x-ray fluorescence computed tomography*) não difere muito das técnicas convencionais de tomografia em transmissão (*ct*) e em emissão

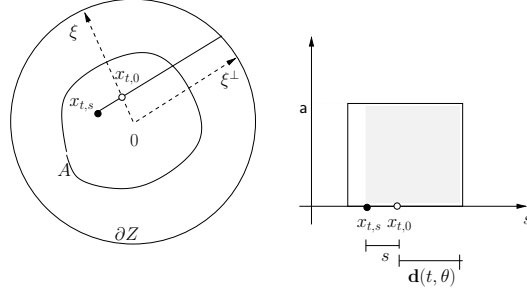


Figura 3.2: Geometria para o caso de atenuação constante em spect.

(spect), o que a torna diferente, nova e interessante é justamente a fusão destas duas técnicas e o tamanho do objeto que está sendo iluminado por raios, geralmente de proporções pequenas. Em palavras, xfct é como na tomografia de transmissão, onde raios passam pelo objeto, sendo atenuados e detectados da maneira clássica, mas pelo fato do feixe incidente ser monocromático e de baixa energia, uma emissão de energia fluorescente é estimulada em cada ponto do objeto gerando novos raios a partir do ponto. Estes raios passam novamente pela amostra, mas num caminho diferente, e por terem baixa energia, são atenuados também neste novo trajeto. Ao final, essa coleção de novas medidas, obtidas a partir de cada novo raio de emissão, a partir de cada ponto sobre um raio de transmissão, é a medida de fluorescência. O problema inverso a ser resolvido é o de descobrir a densidade de fluorescência em cada ponto do objeto, através das medidas colecionadas.

Para definir o problema matematicamente, precisamos primeiro definir operadores e variáveis comumente usadas no contexto do estudo. Vamos denotar a função de emissão de fluorescência por f e as funções de atenuação de transmissão e fluorescência (coeficientes de absorção) por λ e μ respectivamente. Como nas seções prévias, assumimos que a tripla de funções reais $\{f, \mu, \lambda\}$ está contida no cilindro Z . A geometria do problema em xfct está esboçada na Figura 3.3. Pela lei de Beer-lambert, a contribuição da atenuação de transmissão do raio incidente até um ponto x sobre o raio $\Omega(t, \theta)$ é dada por

$$\omega_\lambda(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \quad (3.35)$$

No nível de energia do raio incidente, e no ponto x , o objeto emite raios-X de fluorescência isotropicamente com uma intensidade dada por $f(x)\omega_\lambda(x, \theta)$, onde $f(x)$ é o número de emissões no ponto. Por outro lado, o fluxo de

raios fluorescentes emitidos no ponto e alcançando o detector, posicionado paralelamente ao raio incidente, é proporcional a $f(x)\omega_\lambda(x)\omega_\mu(x, \theta + \gamma)$ onde

$$\omega_\mu(x, \theta + \gamma) = e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} \quad (3.36)$$

onde μ descreve a absorção pelo raio fluorescente do ponto até o detector paralelo e $\gamma \in \Gamma$ denota uma direção de emissão. Finalmente, variando γ , a contribuição da atenuação de fluorescência é a superposição da atenuação de cada raio de emissão em particular, isto é

$$f(x)\omega_\lambda(x, \theta) \int_{\Gamma} d\gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma) \quad (3.37)$$

Variando o ponto x ao longo raio de transmissão $\Omega(t, \theta)$, e desprezando as constantes físicas que devem ser consideradas nas equações (3.36) e (3.37), a medida detectada é dada por

$$d(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} dx f(x)\omega_\lambda(x, \theta) \int_{\Gamma} d\gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma) \quad (3.38)$$

que é um modelo para a transformada generalizada de Radon, com peso como na Tabela 3.1. Em xfct, o raio de transmissão Ω é detectado, o que significa que o coeficiente de atenuação λ é sempre conhecido experimentalmente. O coeficiente μ não é conhecido e pode sempre ser aproximado por λ [49], embora não sejam iguais. É possível também estimar valores de μ , para determinado material, em função dos valores de energia do feixe incidente [10].

Vale perceber que, sendo uma tomografia de emissão estimulada, a equação diferencial que modela o transporte dos fótons é similar à equação (3.23), onde f é a fonte radioativa, representando a densidade de fótons e a a atenuação global sofrida no trajeto da fonte ao receptor. A função a deve incluir os coeficientes λ e μ de alguma forma. Na próxima seção mostraremos como é a função a , e que papel desempenha na procura de um algoritmo de inversão. Outro ponto importante a notar é que, sendo as funções envolvidas em (3.38) integráveis, o Teorema de Fubini nos garante que

$$d(t, \theta) = \int_{\Gamma} d\gamma \int_{\Omega(t, \theta)} f(x)\omega_\gamma(x, \theta) \quad (3.39)$$

com $\omega_\gamma(x, \theta) = \omega_\lambda(x, \theta)\omega_\mu(x, \theta + \gamma)$. Ou de maneira equivalente

$$d(t, \theta) = \int_{\Gamma} \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta), \quad \mathcal{R}_\gamma \doteq \mathcal{R}_{\omega_\gamma} \quad (3.40)$$



Capítulo 4

Inversão

O campo de radiação u , modelado pelas equações de transporte apresentadas nas Seções 3.1 e 3.2, sempre depende da direção de transporte, que denotamos por η . De uma maneira geral, podemos representar tais equações por

$$f(x) = \mathcal{P}_\eta u(x, \eta) = \eta \cdot \nabla u(x, \eta) + a(x)u(x, \eta) \quad (4.1)$$

Nosso objetivo nesta Seção é mostrar que existe um operador linear $\mathcal{L}_\eta$ tal que $u(x, \eta) = \mathcal{L}_\eta \mathcal{R}_W f(x)$, onde $W \in \mathbb{Q}$ é um peso que envolve a função a (já vimos nas seções precedentes que isso é verdade através do método das características). Assim sendo, a fonte de radiação f , pela equação acima, é da forma $f(x) = \mathcal{P}_\eta \mathcal{L}_\eta \mathcal{R}_W f(x)$. Ao impor uma condição de radiação $\lim_{\|\eta\| \rightarrow \infty} u(x, \eta) = 0$ podemos mostrar que $\lim_{\|\eta\| \rightarrow \infty} \mathcal{P}_\eta \mathcal{L}_\eta = \mathcal{I}$ sendo $\mathcal{I}$ o operador de inversão para $\mathcal{R}_W$. Esta metodologia foi apresentada por Fokas [70, 69, 68] para encontrar o operador de inversão em spect e representa uma simplificação considerável na demonstração original de Novikov [30]. Nossa proposta nesta tese, é usar uma modificação do operador $\mathcal{P}_\eta$, a saber

$$\mathcal{P}_\eta u(x, \eta) = \eta \cdot \nabla u(x, \eta) + a(x, \eta)u(x, \eta) \quad (4.2)$$

onde a função de atenuação a depende da direção η . Isto nos dará mais flexibilidade para usar a metodologia de Fokas e obter operadores de inversão mais gerais, como é o caso de ert e o interesse deste trabalho em xfct.

Por várias vezes neste Capítulo faremos menção ao problema escalar de Riemann-Hilbert (RH para simplificar). Todas as extensões e variações

do problema de RH podem ser encontradas em [72, 1]. De interesse nesta tese é o seguinte problema: se S é uma curva de Jordan que divide o plano complexo em duas partes $\mathbb{C}^\pm$ e $\kappa \in S$ é um ponto particular, queremos encontrar uma representação para a função Φ que é seccionalmente analítica (isto é, em $\mathbb{C}^\pm - S$) e que satisfaz a igualdade

$$\Phi^+(\kappa) - \Phi^-(\kappa) = \mathcal{J}(\kappa) \quad (4.3)$$

onde $\Phi^\pm(\kappa)$ são os limites laterais de Φ em κ por caminhos em $\mathbb{C}^\pm$. A função $\mathcal{J} = \mathcal{J}(\kappa)$ é dada e denota um *salto* que Φ possui na curva S . Este é um problema de RH e sua solução está intimamente relacionada com a fórmula de Plemelj, esboçada a seguir.

Teorema 4.1 (Plemelj) *Se $\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_S \frac{\mathcal{J}(\tau) d\tau}{\tau - z}$ então os limites laterais de Φ em $\kappa \in S$ são dados por*

$$\Phi^\pm(\kappa) = \pm \frac{1}{2} \mathcal{J}(\kappa) + \frac{1}{2\pi i} \text{pv.} \int_S \frac{\mathcal{J}(\tau)}{\tau - \kappa} d\tau, \quad \text{pv.} \int_S = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon} \quad (4.4)$$

onde S_ϵ é a intersecção (simétrica) da vizinhança de κ com a curva S e pv. denota o valor principal.

A Figura 4.1 ilustra a fórmula de Plemelj, cuja demonstração pode ser encontrada em [72]. Por outro lado, dados os limites laterais $\Phi^\pm$ e portanto um salto $\mathcal{J}$ na curva S , prova-se que a única solução do problema escalar de RH é a função Φ dada no Teorema 4.1, estando assim estabelecida a solução do nosso problema (4.3). O caso $S = \mathbb{R}$ para a fórmula de Plemelj resulta em

$$\Phi^\pm(\kappa) = \mathbf{P}^\pm \mathcal{J}(\kappa) \doteq \pm \frac{1}{2} \mathcal{J}(\kappa) + \frac{1}{2i} \mathcal{H} \mathcal{J}(\kappa) \quad (4.5)$$

onde $\mathcal{H}$ denota a transformada de Hilbert[72].

4.1 Metodologia de Fokas

Nesta seção vamos deduzir a fórmula de inversão analítica para a transformada de Radon,

$$f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t [\mathcal{H} \mathcal{R} f(x \cdot \xi, \theta)] d\theta \quad (4.6)$$

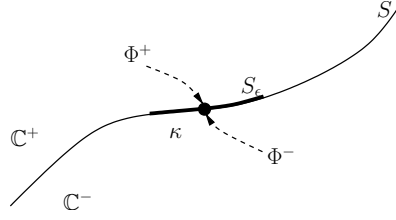


Figura 4.1: Curva S e limites laterais em κ para a fórmula de Plemelj.

para o caso em que a atenuação é nula, isto é $a = 0$ na equação (4.2) o que nos leva ao caso de ct da Seção 3.1, equação (3.18).

A proposta de Fokas para a resolução de (3.18) é levar o problema para o plano complexo, portanto vamos assumir sem perda de generalidade que $\eta \in \mathbb{C}^2$. Seja $v \in \mathbb{C}^2$ fixo e defina $z = v \cdot x$ de tal forma que¹

$$\begin{pmatrix} z \\ \bar{z} \end{pmatrix} = Gx, \quad G = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \\ \bar{v}_1 & \bar{v}_2 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Aqui, o ponto $\cdot$ significa produto interno real entre vetores, isto é $v \cdot x = v_1 x_1 + v_2 x_2$.

Com esta mudança de variáveis teremos $u = u(x) = u(x(z, \bar{z}))$ satisfazendo

$$\nabla u(x) = v \frac{\partial u}{\partial z} + \bar{v} \frac{\partial u}{\partial \bar{z}} \quad (4.8)$$

e portanto as equações abaixo são equivalentes

$$\eta \cdot \nabla u(x) = f(x) \Leftrightarrow (\eta \cdot v) \frac{\partial u}{\partial z} + (\eta \cdot \bar{v}) \frac{\partial u}{\partial \bar{z}} = f(x(z, \bar{z})). \quad (4.9)$$

se e somente se as seguintes condições são satisfeitas

$$\begin{cases} \eta \cdot v = 0, \\ \eta \cdot \bar{v} = \det G = v_1 \bar{v}_2 - \bar{v}_1 v_2 = v \cdot \mathbf{J} \bar{v}, \end{cases} \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Com estas condições a equação diferencial (4.9) se resume a

$$\frac{\partial u}{\partial \bar{z}} = \frac{f(x(z, \bar{z}))}{\eta \cdot \bar{v}} \quad (4.11)$$

restando apenas analisar o caso de singularidade $\eta \cdot \bar{v} = 0$. A solução de (4.10) é dada por $v = -\mathbf{J}\eta$ ou $\eta = \mathbf{J}v$. Note que se $\eta = (c, b)$ então $v = (b, -c)$

¹Observamos que a transformação linear $x \mapsto z = v \cdot x$ entre $\mathbb{R}^2$ e $\mathbb{C}$ é inversível.

com $c, b \in \mathbb{C}$, o que significa que $0 = \eta \cdot \bar{v} = c\bar{b} - b\bar{c} = 2i \operatorname{Im} \{c\bar{b}\}$ determina um conjunto de pontos de singularidade, isto é $S = \{(c, b) : \operatorname{Im} \{c\bar{b}\} = 0\}$. No entanto, isto significa que temos dois graus de liberdade para tal conjunto, o que é indesejável. É mais fácil portanto optar pelas escolhas $c = c(\kappa)$ e $b = b(\kappa)$ com $\kappa \in \mathbb{C}$ de tal forma que

$$S = \{\kappa \in \mathbb{C} : \operatorname{Im} \{c(\kappa)b(\bar{\kappa})\} = 0\} \quad (4.12)$$

seja o nosso conjunto de singularidades, com apenas um grau de liberdade, o parâmetro κ . Os pontos onde a curva $r(\kappa) = c(\kappa)b(\bar{\kappa})$ tem parte imaginária nula, são os pontos de S . Alguns exemplos triviais são

- $c(\kappa) = 1, b(\kappa) = \kappa$: $S = \{\kappa : \operatorname{Im} \{\kappa\} = 0\}$
- $c(\kappa) = \kappa + 1, b(\kappa) = \kappa - 1$: $S = \{\kappa : \operatorname{Im} \{\kappa\} = 0\}$
- $c(\kappa) = \kappa + 1, b(\kappa) = i(\kappa - 1)$: $S = \{\kappa : |\kappa| = 1\}$
- $c(\kappa) = \kappa, b(\kappa) = \kappa$: $S = \mathbb{C}$
- $c(\kappa) = \frac{1}{2} \left(\kappa + \frac{1}{\kappa} \right), b(\kappa) = \frac{1}{2i} \left(\kappa - \frac{1}{\kappa} \right)$: $S = \{\kappa : |\kappa| = 1\}$

Definida uma escolha do vetor $\eta \in \mathbb{C}^2$, ou seja, escolhidas as funções $c = c(\kappa)$ e $b = b(\kappa)$, nosso problema consiste em resolver a equação (4.11), dita *equação d-barra*. Vamos reescrevê-la, impondo uma condição de fronteira,

$$\partial_{\bar{z}} u = \frac{f(x)}{j(\kappa)}, \quad x = x(z, \bar{z}; \eta), \quad u = O\left(\frac{1}{z}\right), \quad z \rightarrow \infty \quad (4.13)$$

onde fazemos explícita a dependência de x no parâmetro η (pela eq.(4.7) e $v = -J\eta$). A função $j = j(\kappa)$ denota o Jacobiano da mudança de variáveis, conforme equação (4.10), isto é $j(\kappa) = \eta \cdot \bar{v} = 2i \operatorname{Im} \{a(\kappa)\bar{b}(\bar{\kappa})\}$. O seguinte Lema, dito o Teorema de Cauchy generalizado [72], ajuda na solução da equação diferencial (4.13).

Lema 4.1 *Se $\partial_{\bar{z}} u$ existe e é analítica em uma região limitada R com contorno C , e se u é contínua em C , então, em todo ponto interior z , é válida a relação*

$$u(z, \bar{z}) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{u(m)}{m - z} dm + \frac{1}{m} \int_R \frac{\partial u}{\partial \bar{m}} \frac{1}{z - m} dA(m). \quad (4.14)$$

Vamos supor que $\kappa \notin S$, i.e $j(\kappa) \neq 0$. Lembramos que, aqui, a função u não pode ser uma função analítica em z porque sua $d\text{-bar}$ não é nula [72]. Caso fosse analítica a segunda integral do Lema acima seria nula resultando no Teorema de Cauchy. Vamos tomar C como sendo o disco centrado na origem de raio δ , o nosso caso $\frac{\partial u}{\partial \bar{z}} = f(x)/j(\kappa)$ resulta pela equação (4.14) em

$$u(z, \bar{z}) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{u(m, \bar{m})}{m - z} dm + \frac{1}{\pi} \int_D \frac{f(m, \bar{m})}{z - m} \frac{dm_R dm_I}{j(\kappa)} \quad (4.15)$$

onde $m = m_R + im_I$. Tomando $\delta \rightarrow \infty$ temos

$$u(z, \bar{z}) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(m, \bar{m})}{z - m} \frac{dm_R dm_I}{j(\kappa)} \quad (4.16)$$

desde que u satisfaça a condição de radiação $u = O(1/z)$ com $z \rightarrow \infty$. Como $dm_R dm_I = |\det G| dy$ e $\det G = j(\kappa)$ então $dm_R dm_I / j(\kappa) = \text{sign}\{j(\kappa)\} dy$ pois $(z - m) = v(\kappa) \cdot (x - y)$ e então

$$u(x, \kappa) = \frac{1}{\pi} \text{sign}\{j(\kappa)\} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(y)}{v(\kappa) \cdot (x - y)} dy \quad (4.17)$$

$$= \frac{2i}{\pi} \text{sign}\{J(\kappa)\} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(y)}{v(\kappa) \cdot (x - y)} dy \quad (4.18)$$

$$= \frac{\alpha(\kappa)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(y)}{v(\kappa) \cdot (y - x)} dy \quad (4.19)$$

com $J(\kappa) = \text{Im}\{a(\kappa)\bar{b}(\kappa)\}$ e $\alpha(\kappa) = 4\text{sign}\{J(\kappa)\}$. Daqui se percebe que $u = O(1/\|v(\kappa)\|)$ onde $\|v\| = \|\eta\|$ pois J é ortogonal. Se $\|v\| = O(\kappa)$ então concluímos que $u = O(1/\kappa)$ com $\kappa \rightarrow \infty$.

A clássica mudança de variáveis em tomografia, com a introdução de um sistema de coordenadas (τ, p) obtido a partir do sistema cartesiano por uma rotação de um ângulo θ , é $y = \tau\xi + p\xi^\perp$, $x = t\xi + \rho\xi^\perp$ e $dy = d\tau dp$, resultando em

$$u(x, \kappa, \theta) = \frac{\alpha(\kappa)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(\tau\xi + p\xi^\perp)}{[v(\kappa) \cdot \xi](\tau - t) + [v(\kappa) \cdot \xi^\perp](p - \rho)} d\tau dp, \quad (4.20)$$

solução analítica para todo $\kappa \notin S$. A curva S corta o plano complexo em duas partes $\mathbb{C}^\pm$ e, para todo $\epsilon > 0$, sempre podemos encontrar $\kappa_\epsilon^\pm \in \mathbb{C}^\pm$ que satisfaçam

$$v(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi = 1, \quad v(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi^\perp = \mp i\epsilon, \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \kappa_\epsilon^\pm = \kappa \in S \quad (4.21)$$

ou equivalentemente $v(\kappa_\epsilon^\pm) \sim \xi + (\mp i\epsilon)\xi^\perp$. De $\eta = \mathbf{J}v$ e $j(\kappa) = \eta(\kappa) \cdot \overline{v(\kappa)}$ segue $\eta(\kappa_\epsilon^\pm) \sim \xi^\perp + (\pm i\epsilon)\xi$ ou,

$$\eta(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi = \pm i\epsilon, \quad \eta(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi^\perp = 1, \quad J(\kappa_\epsilon^\pm) = \pm\epsilon, \quad \alpha(\kappa_\epsilon^\pm) = \pm 1 \quad (4.22)$$

Avaliando u em κ_ϵ^+ na equação (4.20) temos

$$u(x, \kappa_\epsilon^+, \theta) = \frac{\alpha(\kappa_\epsilon^+)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(\tau\xi + p\xi^\perp)}{(\tau - t) + [-i\epsilon](p - \rho)} d\tau dp \quad (4.23)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau\xi + p\xi^\perp) d\tau}{\tau - [t + i\epsilon(p - \rho)]} \quad (4.24)$$

Analogamente,

$$u(x, \kappa_\epsilon^-, \theta) = \frac{\alpha(\kappa_\epsilon^-)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f(\tau\xi + p\xi^\perp)}{(\tau - t) + [i\epsilon](p - \rho)} d\tau dp \quad (4.25)$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau\xi + p\xi^\perp) d\tau}{\tau - [t - i\epsilon(p - \rho)]}. \quad (4.26)$$

Fazendo o limite de $\epsilon \rightarrow 0$, as equações (4.24) e (4.26) podem ser simplificadas usando a seguinte Proposição, cuja demonstração está feita no Apêndice A.4.

Proposição 4.1.1 *Se $u^\pm(x, \kappa, \theta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta)$ então*

$$u^\pm(x, \kappa, \theta) = -\mathcal{D}f(x, \theta) + \frac{1}{2}\mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta) \pm \frac{1}{2i}\mathcal{H}\mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta), \quad (4.27)$$

$$= -\mathcal{D}f(x, \theta) \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta) \quad (4.28)$$

onde $x = x(t, \rho) = t\xi + \rho\xi^\perp$ e $\mathbf{P}^\pm$ os operadores definidos em (4.5)

Note que o lado esquerdo da equação (4.27) não depende de κ e portanto vamos usar a notação $u^\pm(x, \theta) \doteq u^\pm(x, \kappa, \theta)$. Na variável κ , a função u é seccionalmente analítica em $\mathbb{C}$ com um salto na curva S dado por $\mathcal{J}(x, \kappa, \theta) = u^+(x, \kappa, \theta) - u^-(x, \kappa, \theta)$. Encontrar uma representação para u com estas características é um problema de RH, cuja solução já sabemos ser, pelo Teorema 4.1,

$$u(x, \kappa) = \frac{1}{2\pi i} \int_S \frac{\mathcal{J}(x, z, \theta)}{z - \kappa} dz, \quad \kappa \in \mathbb{C} - S \quad (4.29)$$

Como η está livre (e portanto $v = \mathbf{J}\eta$), podemos fazer escolhas que garantam que S é uma curva fechada. Nestes casos, a integral acima pode ser deformada, sem perda de generalidade, a um círculo de raio unitário

$$u(x, \kappa) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=1} \frac{\mathcal{J}(x, z, \theta)}{z - \kappa} dz \quad (4.30)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\mathcal{J}(x, \theta) e^{i\theta}}{e^{i\theta} - \kappa} d\theta \quad (4.31)$$

$$= -\frac{1}{2\pi\kappa} \int_0^{2\pi} \mathcal{J}(x, \theta) e^{i\theta} d\theta + o_\kappa \quad (4.32)$$

O salto de u em S , pela Proposição 4.1.1 é dado por

$$\mathcal{J}(x, \theta) = -i\mathcal{H}\mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta) \quad (4.33)$$

Finalmente, da expressão de u em (4.32) e da equação diferencial original (3.18), resulta o seguinte

$$f(x) = \eta \cdot \nabla u(x) \quad (4.34)$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{c}{\kappa} \partial_{x_1} + \frac{b}{\kappa} \partial_{x_2} \right) (\cos \theta + i \sin \theta) \mathcal{J}(x, \theta) d\theta + o_\kappa \quad (4.35)$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{O}(\eta, \xi) [\mathcal{J}(x, \theta)] d\theta + o_\kappa \quad (4.36)$$

onde $\mathbf{O}(\eta, \xi)$ é o operador de diferenciação

$$\mathbf{O}(\eta, \xi) = \left(\frac{c}{\kappa} \partial_{x_1} + \frac{b}{\kappa} \partial_{x_2} \right) (\cos \theta + i \sin \theta) = [\mathbf{D}(\eta)\xi] \cdot \nabla - [\mathbf{D}(\eta)\xi^\perp] \cdot \nabla \quad (4.37)$$

com $\mathbf{D}(\eta) = \text{diag}(c(\kappa)/\kappa, ib(\kappa)/\kappa)$. Por (4.33) e (4.36)

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} i\mathbf{O}(\eta, \xi) [\mathcal{H}\mathcal{R}f(x \cdot \xi, \theta)] d\theta + o_\kappa \quad (4.38)$$

Para as escolhas de $\eta = (c(\kappa), b(\kappa))$ que satisfaçam

$$\frac{c(\kappa)}{\kappa} = -\frac{1}{2} + O\left(\frac{1}{\kappa^k}\right), \quad \frac{b(\kappa)}{\kappa} = \frac{i}{2} + O\left(\frac{1}{\kappa^k}\right), \quad k \geq 1 \quad (4.39)$$

teremos, com $\mathbf{D}(\eta) = [o_\kappa - \frac{i}{2}]\mathbf{I}$ e

$$i\mathbf{O}(\eta, \xi) = \frac{1}{2}(\xi \cdot \nabla) + \frac{1}{2}(\xi^\perp \cdot \nabla) + o_\kappa = \frac{1}{2}\partial_t + \frac{i}{2}\partial_\rho + o_\kappa \quad (4.40)$$

onde (t, ρ) são as variáveis da mudança $x = t\xi + \rho\xi^\perp$. Finalmente, como $f = \text{Re } f$ podemos rescrever (4.38), com $\kappa \rightarrow \infty$

$$f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t [\mathcal{H} \mathcal{R} f(x \cdot \xi, \theta)] d\theta \quad (4.41)$$

que é a inversa da transformada de Radon. Esta fórmula aparece na Seção 2.1, na discussão feita para a equação (2.23), onde vale notar que a transformada de Hilbert comuta com o operador de diferenciação.

4.2 Inversas Analíticas

Na seção anterior vimos como obter o campo de radiação u que obedece à equação do transporte (3.18), e com uma condição de fronteira no infinito, recuperar a fonte f , associando a ela sua transformada de Radon e encontrando por fim sua transformada inversa. Agora, queremos obter de forma semelhante o campo u que satisfaz a equação (3.23), onde o coeficiente de absorção a (a atenuação) é dependente da direção de transporte η , isto é

$$\eta \cdot \nabla u(x) + a(x, \eta)u(x) = f(x). \quad (4.42)$$

Neste caso, a mesma mudança de variáveis em (4.7) e com as mesmas notações, resultam em $(\eta \cdot v)\partial_z u(x) + (\eta \cdot \bar{v})\partial_{\bar{z}} u(x) + a(x, \eta)u(x) = f(x)$, ou seja

$$\partial_{\bar{z}} u(x) + \frac{a(x, \eta)}{j(\kappa)} u(x) = \frac{f(x)}{j(\kappa)} \quad (4.43)$$

Podemos desacoplar a equação acima utilizando um fator integrante q e obter

$$\partial_{\bar{z}} (u(x)e^{q(x)}) = \frac{f(x)e^{q(x)}}{j(\lambda)}, \quad \partial_{\bar{z}} q(x) = \frac{a(x, \eta)}{j(\lambda)}. \quad (4.44)$$

onde $x = x(z, \bar{z}; \eta)$. Já sabemos, pela Seção anterior, como resolver cada d -barra acima. A única leve diferença na segunda d -barra é a inclusão de um fator η no argumento da função. O restante da metodologia de Fokas é inalterado, isto é, queremos encontrar funções q e u seccionalmente analíticas que satisfaçam as equações acima, e que tenham um salto conhecido na curva de singularidade S . Portanto, a grande dificuldade consiste apenas em encontrar este salto, para então obtermos um problema escalar de RH, cuja solução é dada pela Teorema 4.1.

Sejam $q^\pm$ e $u^\pm$ os limites laterais de q e u em $\kappa \in S$. Se $y^\pm = u^\pm e^{q^\pm}$ então o salto da função u , que denotamos por $\mathcal{J}$, é dado por $\mathcal{J} = u^+ - u^- = y^+ e^{-q^+} - y^- e^{-q^-}$. Falta portanto somente encontrar os limites $y^\pm$ e $q^\pm$, que estão separados em duas partes. apresentadas a seguir.

Cálculo dos limites laterais de q em κ : a solução da d -bar em q , para $\kappa \notin S$, é dada pela equação (4.19) e, tudo que foi feito na Seção anterior se aplica a esta d -bar, bastando apenas trocar $f(\tau\xi + p\xi^\perp)$ por $a(\tau\xi + p\xi^\perp, \eta)$ na equação (4.20). A análise dos limites laterais difere somente na análise de $\eta(\kappa_\epsilon^\pm)$ com $\epsilon \rightarrow 0$. De fato, tal como em (4.20), aqui temos

$$q(x, \kappa, \theta) = \frac{\alpha(\kappa)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{a(\tau\xi + p\xi^\perp, \eta(\kappa))}{[v(\kappa) \cdot \xi](\tau - t) + [v(\kappa) \cdot \xi^\perp](p - \rho)} d\tau dp \quad (4.45)$$

donde

$$q(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta) = \pm \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} \frac{a(\tau\xi + p\xi^\perp, \eta(\kappa_\epsilon^\pm)) d\tau}{\tau - [t \pm i\epsilon(p - \rho)]}. \quad (4.46)$$

Usando a mesma demonstração feita no Apêndice A.4 para a Proposição 4.1.1, impondo a condição de a ser uma função limitada, e levando em conta pela equação (4.22), que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} a(x, \eta(\kappa_\epsilon^\pm)) = a(x, \xi^\perp) \equiv a_\xi(x) \quad (4.47)$$

temos então os seguinte limites laterais para q , em $\kappa \in S$,

$$q^\pm(x, \kappa, \theta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} q(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta) \quad (4.48)$$

$$= -\mathcal{D}a_\xi(x, \theta) + \frac{1}{2} \mathcal{R}a_\xi(x \cdot \xi, \theta) \pm \frac{1}{2i} \mathcal{H} \mathcal{R}a_\xi(x \cdot \xi, \theta) \quad (4.49)$$

onde $\xi^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)^T$.

Cálculo dos limites laterais de ue^q em κ : a solução da d -bar (4.44) para ue^q também se enquadra na metodologia da Seção anterior. Em particular, seus limites laterais podem ser obtidos pela Proposição 4.1.1 substituindo f por $fe^{q^\pm}$. Portanto, de (4.49), e omitindo os argumentos para simplificar a notação

$$y^\pm(x, \kappa, \theta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta) e^{q(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta)} = \partial_{\bar{z}}^{-1} \left[\frac{f(x)}{j(\kappa)} e^{q^\pm(x, \kappa, \theta)} \right] \quad (4.50)$$

$$\stackrel{(4.49)}{=} -\mathcal{D} \left(fe^{-\mathcal{D}a_\xi \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \right) \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R} \left(fe^{-\mathcal{D}a_\xi \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \right) \quad (4.51)$$

$$= e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathcal{D} \left(fe^{-\mathcal{D}a_\xi} \right) \pm \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathcal{R} \left(fe^{-\mathcal{D}a_\xi} \right) \right] \quad (4.52)$$

Observe que $\mathcal{R}(fe^{-\mathcal{D}a_\xi}) = \mathcal{R}_\omega f$ é uma transformada generalizada de Radon com peso

$$\omega(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a_\xi(x, \theta)}, \quad a_\xi(x) = a(x, \xi^\perp) \quad (4.53)$$

Analogamente $\mathcal{D}(fe^{-\mathcal{D}a_\xi})$ é uma transformada divergente generalizada com peso ω que denotamos por $\mathcal{D}_\omega$. Portanto,

$$y^\pm(x, \kappa, \theta) = e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathcal{D}_\omega f \pm \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathcal{R}_\omega f \right]. \quad (4.54)$$

Por outro lado, de (4.49) temos

$$y^\pm = u^\pm e^{q^\pm} = u^\pm e^{-\mathcal{D}a_\xi \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} = u^\pm e^{-\mathcal{D}a_\xi} e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \quad (4.55)$$

Igualando (4.55) e (4.52) resta então

$$u^\pm e^{-\mathcal{D}a_\xi} = -\mathcal{D}_\omega f \pm e^{\mp \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a_\xi} \mathcal{R}_\omega f \right] \quad (4.56)$$

Finalmente o salto de u em $\kappa \in S$ é dado por

$$\mathcal{J}(x, \kappa, \theta) = u^+(x, \kappa, \theta) - u^-(x, \kappa, \theta) = -ie^{\mathcal{D}a_\xi(x, \theta)} \mathbf{M}\{\mathcal{R}a_\xi, \mathcal{R}_\omega f\}(x \cdot \xi, \theta) \quad (4.57)$$

onde o operador $\mathbf{M}: \mathbf{V} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$ é definido por

$$-i \mathbf{M}\{r, d\} = e^{-\mathbf{P}^+ r} \mathbf{P}^+ \left[e^{\mathbf{P}^+ r} d \right] + e^{\mathbf{P}^- r} \mathbf{P}^- \left[e^{-\mathbf{P}^- r} d \right], \quad r, d \in \mathbf{V} \quad (4.58)$$

É possível simplificar o operador $\mathbf{M}$ conforme a seguinte Proposição, cuja demonstração está feita no Apêndice A.5.

Proposição 4.2.1 *O operador $\mathbf{M}$ é linear no segundo argumento e definido por*

$$\mathbf{M}\{r, d\} = e^{-\frac{r}{2}} \left\{ h_c(r) \mathcal{H} \left(h_c(r) e^{\frac{r}{2}} d \right) + h_s(r) \mathcal{H} \left(h_s(r) e^{\frac{r}{2}} d \right) \right\} \quad (4.59)$$

com $h_c(r) = \cos(\frac{1}{2} \mathcal{H} r)$, $h_s(r) = \sin(\frac{1}{2} \mathcal{H} r)$ e os operadores $\{\mathcal{H}, \cos, \sin\}$ agindo apenas na primeira variável dos sinogramas r, d .

Com o salto $\mathcal{J}$ conhecido, a representação de u é dada por (4.32). De (4.42), e similar a (4.36), a fonte f pode ser escrita por

$$f(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{O}(\eta, \xi) [\mathcal{J}(x, \theta)] d\theta + a(x, \eta) u(x) + o_\kappa \quad (4.60)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} i \mathbf{O}(\eta, \xi) [\omega^{-1} \mathbf{M}\{\mathcal{R}a_\xi, \mathcal{R}_\omega f\}](x \cdot \xi, \theta) d\theta \quad (4.61)$$

onde usamos a condição de fronteira $u = o_\kappa$ com $\kappa \rightarrow \infty$ e a hipótese de a ser limitada em η . O peso ω é dado na equação (4.53). Para as escolhas de η em (4.39) obtemos a representação

$$f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t [\omega^{-1} M\{\mathcal{R}a_\xi, \mathcal{R}_\omega f\}] (x \cdot \xi, \theta) d\theta \quad (4.62)$$

que é a inversa da transformada generalizada de Radon com peso ω dado por (4.53). Observe que quando $a = a(x, \eta)$ não depende de η , digamos $a(x, \eta) = \mu(x)$, então o peso (4.53) define o peso em spect (veja Tabela 3.1, pág. 26) e a inversão em (4.62) é atribuída a Novikov [30], embora sua demonstração adote outra abordagem. O caso $a = 0$ fornece $\omega = 1$ e obtemos o caso de Radon da Seção anterior.

Notação compacta para a inversão: Seja $d \in V$ um sinograma e o operador $\mathcal{N}: Q \times V \rightarrow U$ definido por

$$\mathcal{N}(\omega, p)d(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \partial_t \omega^{-1}(x, \theta) M\{p, d\}(x \cdot \xi_\theta, \theta), \quad \omega \in Q, p \in V \quad (4.63)$$

com M definido em (4.59). Sendo $\partial_t = \xi \cdot \nabla$ podemos escrever alternativamente o operador $\mathcal{N}$ por

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\omega, p)d(x) &= \operatorname{div} B(x)/4\pi, \quad B(x) = (B_c(x), B_s(x)) \\ B_s(x) &= \int_0^{2\pi} \omega^{-1}(x, \theta) M\{p, d\}(x \cdot \xi, \theta) \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (4.64)$$

com B_c definido de forma similar (trocando seno por cosseno). Pela definição de M , $\mathcal{N}(\omega, p) \in L(V, U)$ (o espaço dos operadores lineares de V em U). Observe que B_c é a retroprojeção generalizada, com peso ω^{-1} , de $M\{\cdot\} \cos \theta$. De (4.53) e (4.62), resumimos o resultado desta Seção na seguinte Proposição.

Proposição 4.2.2 *Seja $a = a(x, \eta)$ uma função limitada e $a_\xi(x) = a(x, \xi^\perp)$. Se $p = \mathcal{R}a_\xi$ e $\omega(x, \theta) = e^{-D a_\xi(x, \theta)}$ então $\mathcal{N}(\omega, p)\mathcal{R}_\omega f(x) = f(x)$ isto é, $\mathcal{R}_\omega^{-1} = \mathcal{N}(\omega, p)$.*

As próximas Seções serão dedicadas à construção de funções adequadas $a = a(x, \eta)$ de maneira que o peso ω na Proposição 4.2.2 seja um peso de nosso interesse, como por exemplo ω_{fct} e ω_{ert} .

4.2.1 Séries de Neumann em xfct

Começamos lembrando que em xfct, o operador $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ é dado pela integral (3.3) que repetimos aqui por conveniência,

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}} = \int_{\Gamma} d\gamma \mathcal{R}_{\gamma}, \quad \mathcal{R}_{\gamma} = \mathcal{R}_{\omega_{\gamma}}, \quad \Gamma = [\gamma_1, \gamma_2] \quad (4.65)$$

onde $\omega_{\gamma}(x, \theta) = \omega_{\lambda}(x, \theta + \pi) \omega_{\mu}(x, \theta + \gamma)$ e $\omega_{\lambda}, \omega_{\mu}$ dados em (3.35) e (3.36) (veja pág. 32). Como função de γ , $\mathcal{R}_{\gamma}$ varia continuamente de sorte que podemos usar o Teorema do valor médio para integrais e escrever o operador $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ da forma

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}} = m(\Gamma) \mathcal{R}_{\beta}, \quad m \equiv m(\Gamma) = \gamma_2 - \gamma_1 \quad (4.66)$$

para algum $\beta \in \Gamma$. Sendo assim, a inversão de $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ será dada pela inversão de $\mathcal{R}_{\beta}$. Embora sendo desconhecido o valor de β , verificaremos experimentalmente no Capítulo 6 que existe uma abertura ótima Γ^* que faz com que o candidato ideal a β seja $\frac{\pi}{2}$. Isto está de acordo com as condições físicas em xfct, que afirmam que o espalhamento é mínimo em noventa graus.

Vamos assumir que o ângulo β que realiza (4.66) é conhecido. Nosso problema então é achar a fórmula de inversão para $\mathcal{R}_{\beta}$. A proposta para encontrar esta fórmula é fortemente influenciada pela Proposição 4.2.2 com uma escolha adequada da função $a = a(x, \eta)$.

Para construir a , consideramos as semi-retas que partem de um determinado ponto x e com direção η dadas por $\ell(x, \eta) = \{x + s\eta : s \geq 0\}$. A física do problema em xfct nos diz que a atenuação, em um ponto x fixo, ocorre nas retas $\ell(x, -\eta)$ e $\ell(x, G_{\beta}\eta)$ (veja Figura 4.2), onde G_{β} é a matriz de rotação 2×2 $G_{\beta}^T = (\xi_{\beta} \quad \xi_{\beta}^{\perp})$ com ângulo β . Como $\eta \in \mathbb{C}^2$, estamos considerando a imersão de $\mathbb{R}^2$ em $\mathbb{C}^2$ de maneira que $\ell(x, \eta) \subset \mathbb{C}^2$. É fácil notar que as funções

$$\phi_x(y) = 2x - y, \quad \psi_x(y) = G_{\beta}(y - x) + x \quad (4.67)$$

levam $y \in \ell(x, \eta)$ em $\phi_x(y) \in \ell(x, -\eta)$ e $\psi_x(y) \in \ell(x, G_{\beta}\eta)$ respectivamente. Como $y - x = s\eta$ para $s = (y - x) \cdot \eta / \|\eta\|^2$ então

$$\phi_{x,\eta}(y) = x - \frac{(y - x) \cdot \eta}{\|\eta\|^2} \eta, \quad \psi_{x,\eta}(y) = x + \frac{(y - x) \cdot \eta}{\|\eta\|^2} G_{\beta} \eta \quad (4.68)$$

Como x é ponto fixo de $\psi_{x,\eta}$ e $\phi_{x,\eta}$, então vamos construir nossa função da seguinte forma

$$a(x, \eta) = \lambda(x) + \mu(x) \quad (4.69)$$

$$= \lambda(\phi_{x,\eta}(x)) + \mu(\psi_{x,\eta}(x)) \quad (4.70)$$

onde λ e μ são os coeficientes de atenuação de transmissão e fluorescência respectivamente. Observe que com estas definições temos para $\eta = \xi^\perp$

$$a(x + sv, \xi^\perp) = \lambda(x - s(v \cdot \xi^\perp)\xi^\perp) + \lambda(x + s(v \cdot \xi^\perp)G_\beta \xi^\perp). \quad (4.71)$$

Tomando $v = \xi^\perp$ e integrando a igualdade acima em $\mathbb{R}_+$ obtemos então

$$\int_0^\infty ds a_\xi(x + s\xi^\perp) = \int_0^\infty ds \lambda(x - s\xi^\perp) + \int_0^\infty ds \mu(x + sG_\beta \xi^\perp) \quad (4.72)$$

onde $a_\xi = a(x, \xi^\perp)$. Como $-\xi_\theta^\perp = \xi_{\theta+\pi}^\perp$ e $G_\beta \xi^\perp = \xi_{\beta+\theta}^\perp$, a equação acima nada mais é que

$$\mathcal{D}a_\xi(x, \theta) = \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta) \quad (4.73)$$

implicando em

$$\omega(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a_\xi(x, \theta)} = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta)} = \omega_\beta(x, \theta) \quad (4.74)$$

Ainda, pela equação (2.53) (veja pág. 23) temos

$$\mathcal{R}a_\xi(x \cdot \xi, \theta) = \mathcal{D}a_\xi(x, \theta) + \mathcal{D}a_\xi(x, \theta + \pi) \quad (4.75)$$

$$= -\ln(e^{-\mathcal{D}a_\xi(x, \theta)} e^{-\mathcal{D}a_\xi(x, \theta + \pi)}) \quad (4.76)$$

$$\stackrel{(4.74)}{=} -\ln \omega_\beta(x, \theta) \omega_\beta(x, \theta + \pi) \equiv \mathcal{L}(x, \theta) \quad (4.77)$$

Se $p_\beta = \mathcal{R}a_\xi$ então o Lema 2.4 (veja pág. 23) mostra como calcular p a partir de $\mathcal{L}$ definido na equação acima.

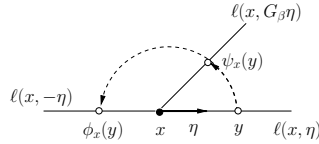


Figura 4.2: Semi-retas $\ell \subset \mathbb{C}^2$ para construção da inversão de $\mathcal{R}_\beta$.

Resumindo, com a escolha $a = a(x, \eta)$ em (4.70) conseguimos obter o peso ω da Proposição 4.2.2 igual ao peso de $\mathcal{R}_\beta$, isto é $\omega = \omega_\beta$ como em (4.74). Definido a transformada de Radon de $\mathcal{R}a_\xi$ através de (4.77), e denotando-a de p_β , a inversa de $\mathcal{R}_\beta$ é dada por

$$\mathcal{R}_\beta^{-1}d = \mathcal{N}(\omega_\beta, p_\beta)d, \quad d \in \mathbf{V} \quad (4.78)$$

onde $\mathcal{N}$ é o operador de inversão definido em (4.63). O Método 4.2.1 (veja pág. 50) resume os passos para a inversão de $\mathcal{R}_\beta$.

Como não temos o ângulo β que realiza a igualdade (4.66) vamos analisar o efeito de considerar $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ como $\mathcal{R}_\beta^{-1}$ com $\beta \in \Gamma$ arbitrário. De fato,

$$\mathcal{R}_\beta f(t, \theta) - \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} dx f(x) [\omega_\beta(x, \theta) - \omega_\gamma(x, \theta)] \quad (4.79)$$

e como

$$\omega_\beta(x, \theta) = \omega_\gamma(x, \theta) e^{\mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta) - \mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} \quad (4.80)$$

$$= \omega_\gamma(x, \theta) e^{-\partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta) \delta - o(\delta^2)}, \quad \delta = \gamma - \beta \quad (4.81)$$

$$\equiv \omega_\gamma(x, \theta) g(x, \theta, \gamma, \beta), \quad (4.82)$$

a equação (4.79) resulta em

$$\mathcal{R}_\beta f(t, \theta) - \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} dx f(x) \omega_\beta(x, \theta) [1 - g(x, \theta, \gamma, \beta)]. \quad (4.83)$$

Integrando a diferença acima para todos os valores de γ obtemos

$$(\mathbf{m}\mathcal{R}_\beta) f(t, \theta) - \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta) = \mathbf{m} \int_{\Omega} dx f(x) \omega_\beta(x, \theta) [1 - \alpha(x, \theta, \beta)] \quad (4.84)$$

$$\equiv \mathbf{m} y_\beta(t, \theta) \quad (4.85)$$

com α definido por

$$\alpha(x, \theta, \beta) = \frac{1}{\mathbf{m}} \int_{\Gamma} g(x, \theta, \gamma, \beta) d\gamma, \quad \theta \in [0, 2\pi]. \quad (4.86)$$

Segue de (4.84) que

$$(\mathbf{m}\mathcal{R}_\beta)^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(x) = f(x) - \mathcal{R}_\beta^{-1} y_\beta(x) \quad (4.87)$$

$$\equiv f(x) - \mathcal{B}_\beta f(x). \quad (4.88)$$

Seja $o(\delta^2) = \frac{1}{2} c_\theta(x) (\gamma - \beta)^2$ o resto na equação (4.81), com $c_\theta(x) = \partial_\theta^2 \mathcal{D}\mu(x, \theta + \tilde{\beta})$ para algum $\tilde{\beta}$ entre β e $\beta + \delta$. Para simplificar a notação vamos definir $h_\theta(x) = \partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta)$. Segue que

$$\alpha(x, \theta, \beta) = \frac{1}{\mathbf{m}} \int_{\Gamma} e^{-h_\theta(x)(\gamma - \beta)} e^{-\frac{1}{2} c_\theta(x)(\gamma - \beta)^2} d\gamma \quad (4.89)$$

$$= \frac{1}{\mathbf{m}} e^{-\frac{1}{2} c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta)^2} \int_{\Gamma} e^{-h_\theta(x)(\gamma - \beta)} d\gamma, \quad \bar{\beta} \in \Gamma \quad (4.90)$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2} c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta)^2}}{\mathbf{m} h_\theta(x)} [e^{h_\theta(x)(\beta - \gamma_1)} - e^{-h_\theta(x)(\gamma_2 - \beta)}]. \quad (4.91)$$

Com a escolha particular $\beta^* = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$ de sorte que $\beta^* - \gamma_1 = \gamma_2 - \beta^* = m/2$, a expressão acima é reduzida a uma função trigonométrica e portanto, α pode ser escrito por

$$\alpha(x, \theta, \beta^*) = \frac{2}{mh_\theta(x)} \sinh\left(\frac{m}{2}h_\theta(x)\right) e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta}-\beta^*)^2} \quad (4.92)$$

Se exigimos que μ satisfaça a seguinte propriedade

$$\partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*) < \frac{2\epsilon}{m}, \quad \forall \epsilon > 0 \quad (4.93)$$

então podemos verificar, usando uma expansão de MacLaurin de $\sinh$, que a função α é assintoticamente determinada por

$$\alpha(x, \theta, \beta^*) = [1 + o(\epsilon^2)] e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta}-\beta^*)^2} \quad (4.94)$$

$$\sim [1 + o(\epsilon^2)] o(e^{-\|c_\theta\|}) \equiv \hat{\alpha}. \quad (4.95)$$

De (4.84) isto implica que $y_{\beta^*} \sim [1 - \hat{\alpha}]\mathcal{R}_{\beta^*}$ e por (4.87) e (4.94),

$$\mathcal{B}_{\beta^*}f(x) \sim [1 - \hat{\alpha}]f(x). \quad (4.96)$$

Finalmente, assumindo que (4.93) é válido, temos $|1 - \hat{\alpha}| < 1$ e o operador $\mathcal{B}_{\beta^*}$ como uma contração. A equação (4.87) garante que $(m\mathcal{R}_{\beta^*})^{-1}$ é uma aproximação para a inversa de $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$. Provamos assim o seguinte teorema, que é uma consequência imediata da propriedade de contração aplicada à equação integral de Fredholm (4.87).

Teorema 4.2.1 *Se o coeficiente de atenuação para a fluorescência μ satisfaz (4.93) então a inversa $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ existe e é dada pela série de Neumann*

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{I} - \frac{1}{m} \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}} \right)^k \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1} \quad (4.97)$$

com $\mathcal{I}$ o operador identidade, $\beta^* = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$, $m = \gamma_2 - \gamma_1$ e $\mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$ dada por (4.78).

O cálculo de $\mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$ é obtido pelo Método 4.2.1. Em experimentos reais de xfct, a seção angular de raios fluorescentes Γ é escolhida de forma simétrica em $[0, \pi]$. Nestes casos o ângulo ótimo é $\beta^* = \frac{\pi}{2}$ e a condição (4.93) é sempre satisfeita uma vez que a quantidade de fótons espalhados neste ângulo é mínima [28].

Método 4.2.1 Inversão para $\mathcal{R}_\beta$ definido em (4.65) e $\beta \in \Gamma$

Dados $d = \mathcal{R}_\beta f$, $\mu, \lambda \in \mathbf{U}$, calcule os pesos ω_λ e ω_μ como em (3.35) e (3.36) respectivamente (veja pág. 32) e defina

$$\omega_\beta(x, \theta) = \omega_\lambda(x, \theta) \omega_\mu(x, \theta + \gamma). \quad (4.98)$$

Para todo x e θ defina a função $\mathcal{L}$ por $\mathcal{L}(x, \theta) = -\ln \omega_\beta(x, \theta) \omega_\beta(x, \theta + \pi)$. Calcule, para cada θ em $[0, 2\pi]$, o sinograma

$$p_\beta(t, \theta) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R} \mathcal{L}_\theta(t, \theta), & |t| < 1 \\ 0 & |t| = 1 \end{cases}, \quad \mathcal{L}_\theta = \mathcal{L}(\cdot, \theta) \in \mathbf{U} \quad (4.99)$$

Reconstrua a função f por

$$f(x) = \mathcal{N}(\omega_\beta, p_\beta) d(x) \quad (4.100)$$

e $\mathcal{N}$ o operador de inversão definido em (4.63).

4.2.2 Fórmula fechada para $\mathbf{x}_{\text{fct}}$

Vamos construir uma função $a = a(x, \eta)$ para usar a Proposição 4.2.2 no caso de $\mathcal{R}_{\mathbf{x}_{\text{fct}}}$. A contribuição total da atenuação de fluorescência, partindo do ponto x , é dada por

$$\omega_\mu^{\mathbf{t}}(x, \theta) = \int_{\Gamma} \omega_\mu(x, \theta + \gamma) d\gamma \quad (4.101)$$

Seja $b = b(x, \eta) = b_\eta(x)$ uma função que satisfaz a propriedade

$$\mathcal{D}b_\eta(x, \eta) = -\ln \frac{1}{m} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, G_\gamma \eta)} d\gamma, \quad (4.102)$$

onde $\mathcal{D}$ é o operador definido na Seção 2.4 (veja pág. 22) e $G_\gamma = \begin{pmatrix} \xi_\gamma & \xi_\gamma^\perp \end{pmatrix}$ uma matriz de rotação com ângulo γ . O logaritmo acima está bem definido uma vez que a integral acima é menor ou igual a m . A função b_η existe uma vez que

$$\mathcal{D}b_\eta(x, \eta) + \mathcal{D}b_\eta(x, -\eta) = -\ln \frac{1}{m^2} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, G_\gamma \eta)} d\gamma \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, -G_\gamma \eta)} d\gamma \quad (4.103)$$

é a transformada de Radon de b_η na direção η , inversível. Para $\eta = \xi_\theta^\perp$, e

das propriedades $G_\gamma \xi_\theta^\perp = \xi_{\theta+\gamma}^\perp$ e $\mathcal{D}\mu(x, \xi_\theta^\perp) = \mathcal{D}\mu(x, \theta)$, tem-se

$$\mathcal{D}b_\xi(x, \xi^\perp) = -\ln \frac{1}{m} \int_\Gamma e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta+\gamma)} d\gamma, \quad b_\xi = b(\cdot, \xi^\perp) \quad (4.104)$$

$$= -\ln \frac{1}{m} \omega_\mu^t(x, \theta) \quad (4.105)$$

de onde segue

$$\mathcal{D}b_\xi(x, \theta) + \mathcal{D}b_\xi(x, \theta + \pi) = -\ln \frac{1}{m^2} \omega_\mu^t(x, \theta) \omega_\mu^t(x, \theta + \pi) \quad (4.106)$$

$$= \mathcal{L}(x, \theta) \quad (4.107)$$

Pelo Lema 2.4 (pág. 23), a transformada de Radon de b_ξ pode ser calculada em termos de $\mathcal{L}$. Vamos denotar esta transformada de Radon por p_b , isto é $p_b(t, \theta) = \mathcal{R}b_\xi(t, \theta)$.

Usando ϕ definida em (4.68), a função a que procuramos é dada por

$$a(x, \eta) = \lambda(\phi_{x, \eta}(x)) + b(x, \eta). \quad (4.108)$$

De (4.71) sabemos que para $\eta = \xi_\theta^\perp$,

$$\mathcal{D}a_\xi(x, \theta) = \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \mathcal{D}b_\xi(x, \theta) \quad (4.109)$$

onde, por (4.105) segue

$$\omega(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a_\xi(x, \theta)} = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta+\pi)} e^{-\mathcal{D}b_\xi(x, \theta)} \quad (4.110)$$

$$= e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta+\pi)} e^{\ln \frac{1}{m} \omega_\mu^t(x, \theta)} \quad (4.111)$$

$$= \frac{1}{m} \omega_\lambda(x, \theta) \omega_\mu^t(x, \theta) \quad (4.112)$$

$$= \frac{1}{m} \omega_{\text{xfct}}(x, \theta) \quad (4.113)$$

A transformada de Radon de a_ξ é dada por $\mathcal{R}\lambda + \mathcal{R}b_\xi = \mathcal{R}\lambda + p_b$, vamos denotá-la de p_{xfct} . Assim, encontramos uma função $a = a(x, \eta)$ que gera um peso ω e sinograma p_{xfct} nas condições da Proposição 4.2.2, implicando em

$$\mathcal{R}_{\frac{1}{m}\omega_{\text{xfct}}}^{-1} = \mathcal{N}\left(\frac{1}{m}\omega_{\text{xfct}}, p_{\text{xfct}}\right) \Rightarrow \mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \mathcal{N}(\omega_{\text{xfct}}, p_{\text{xfct}}) \quad (4.114)$$

pois $\mathcal{R}_{\frac{1}{m}\omega_{\text{xfct}}} = \frac{1}{m}\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ pela linearidade da transformada de Radon e $\mathcal{N}\left(\frac{1}{m}\omega_{\text{xfct}}, \cdot\right) = m\mathcal{N}(\omega_{\text{xfct}}, \cdot)$ de (4.63). Resumimos a inversão do operador $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ no Método 4.2.2.

Método 4.2.2 Inversão para $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$

Dados $d = \mathcal{R}_{\text{xfct}} f$ e $\mu, \lambda \in \mathbf{U}$. Defina o peso ω_μ como em (3.36) (veja pág. 33) e $\omega_\mu^\dagger$ por

$$\omega_\mu^\dagger(x, \theta) = \int_{\Gamma} d\gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma). \quad (4.115)$$

Para todo x e θ , defina a função $\mathcal{L}$ por $\mathcal{L}(x, \theta) = \frac{1}{m^2} \omega_\mu^\dagger(x, \theta) \omega_\mu(x, \theta + \pi)$. Calcule, para cada θ em $[0, 2\pi]$, o sinograma

$$p_{\text{xfct}}(t, \theta) = \mathcal{R}\lambda(t, \theta) + \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta), & |t| < 1 \\ 0 & |t| = 1 \end{cases} \quad (4.116)$$

com $\mathcal{L}_\theta = \mathcal{L}(\cdot, \theta) \in \mathbf{U}$. Reconstrua a função f por

$$f(x) = \mathcal{N}(\omega_{\text{xfct}}, p_{\text{xfct}})d(x) \quad (4.117)$$

e $\mathcal{N}$ o operador de inversão definido em (4.63).

4.2.3 Fórmula alternativa para ert

A transformada exponencial de Radon (cujo acrônimo é ert) é um caso particular da transformada de Radon em spect, como vimos na equação (3.33) (veja pág. 31), onde o peso é constante e igual a μ dentro de um suporte convexo A . Vamos repeti-la novamente,

$$\mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta) = e^{-c(t, \theta)} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta), \quad c(t, \theta) = \mu d(t, \theta) \quad (4.118)$$

onde d é uma medida para a distância até a fronteira do objeto e

$$\mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) e^{-\mu(x \cdot \xi^\perp)} dx = \int_{\mathbb{R}} f(t\xi + s\xi^\perp) e^{-\mu s} ds. \quad (4.119)$$

A fórmula de inversão para (4.119) foi obtida por Tretiak-Metz [35]. No entanto, note que, se $d = \mathcal{R}_{\text{ert}} f$ então $e^{-c}d = e^{-c}\mathcal{R}_{\text{ert}} f$, ou seja $e^{-c}d = \mathcal{R}_{\text{spect}} f$, de onde resulta a fórmula de inversão

$$f = \mathcal{R}_{\text{spect}}^{-1} e^{-c} d \Rightarrow \mathcal{R}_{\text{ert}}^{-1} = \mathcal{R}_{\text{spect}}^{-1} e^{-c} \quad (4.120)$$

onde $\mathcal{R}_{\text{spect}}^{-1}$ é a inversa considerando o peso ω_{spect} com atenuação constante $\mu\chi_A$. Isto significa que para reconstruir os dados provenientes da transformada exponencial de Radon, basta usar a correção e^{-c} seguida

pela inversão tradicional, com o uso do operador $\mathcal{N}(\omega_{\text{spect}}, p)$, definido em (4.63), onde $p = \mathcal{R}\chi_A$. É comum considerar A como o disco unitário, de modo que $d(t, \theta) = \sqrt{1 - t^2}$ e $p = 2\mu\sqrt{1 - t^2}$. Prova-se em [33] que neste caso a avaliação do operador $\mathcal{N}$ é simplificada pelo fato de a transformada de Hilbert de p ter uma expressão analítica, e consequentemente a operação M (veja Proposição 4.2.1) ser consideravelmente reduzida, gerando assim a fórmula de Tretyak-Metz [35].

Vamos adotar outro caminho para a inversão de $\mathcal{R}_{\text{ert}}$, usando as idéias desenvolvidas neste Capítulo. Observe que a tomografia de emissão, com coeficiente de absorção constante e igual a μ , segue o modelo da equação do transporte (3.23) (veja pág. 30) com $a(x) = -\mu\chi_A(x)$. Neste caso, observe que podemos usar a metodologia de Fokas (veja Seção 4.1) e desacoplar a equação do transporte no plano complexo, em duas d -bar's, tal como em (4.44). Isto leva, inevitavelmente à mesma metodologia apresentada no começo desta subseção, onde os mesmos cálculos de [33] são obtidos. No entanto, se observamos que para $x \in A$

$$\eta \cdot \nabla u(x) - \mu u(x) = f(x) \Leftrightarrow \eta \cdot \nabla \left(u(x) e^{-\mu \frac{x \cdot \eta}{\|\eta\|^2}} \right) = f(x) e^{-\mu \frac{x \cdot \eta}{\|\eta\|^2}}, \quad (4.121)$$

então nosso problema é reduzido a

$$\eta \cdot \nabla q(x, \eta) = h(x, \eta), \quad q(x, \eta) = u(x) e^{-\mu x \cdot \eta / \|\eta\|^2} \quad (4.122)$$

com $h(x, \eta) = f(x) e^{-\mu x \cdot \eta / \|\eta\|^2}$. Já sabemos que (4.122), com a metodologia da Seção 4.1, conduz à d -bar $\partial_{\bar{z}} q(x, \eta) = \frac{h(x, \eta)}{j(\kappa)}$ onde $u(x) = q(x, \eta) e^{\mu(x \cdot \eta) / \|\eta\|^2}$. A solução u é descrita em termos de seu salto $\mathcal{J}$ no conjunto de singularidades $S = \{\kappa \in \mathbb{C} : j(\kappa) = 0\}$, como na equação (4.60), onde

$$\mathcal{J}(x, \kappa, \theta) = (u^+ - u^-)(x, \kappa, \theta) = e^{\mu(x \cdot \eta^*)} (q^+ - q^-)(x, \kappa, \theta) \quad (4.123)$$

com $\eta^* = \eta^\pm = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \eta_\epsilon^\pm = \xi^\perp$ (veja pág. 40, Eq.(4.22)). Resta apenas calcular o salto de q em S . Como h é limitada, os limites laterais de q são obtidos pelos mesmos motivos da equação (4.49) (veja pág. 43), com a_ξ substituído por $h_\xi = h(\cdot, \xi^\perp)$

$$q^\pm(x, \kappa, \theta) = -\mathcal{D}h_\xi(x, \theta) + \frac{1}{2}\mathcal{R}h_\xi(x \cdot \xi, \theta) \pm \frac{1}{2i}\mathcal{H}\mathcal{R}h_\xi(x \cdot \xi, \theta). \quad (4.124)$$

Como $h(x, \xi^\perp) = f(x) e^{-\mu(x \cdot \xi^\perp)}$ e $\mathcal{R}h_\xi = \mathcal{R}_{\text{ert}}f$ segue então que o salto de q é dado por

$$(q^+ - q^-)(x, \kappa, \theta) = -i\mathcal{H}\mathcal{R}_{\text{ert}}f(t, \theta), \quad t = x \cdot \xi. \quad (4.125)$$

Portanto, com as escolhas de η em (4.39) resulta, como em (4.41),

$$f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t \left[e^{\mu(x \cdot \xi^\perp)} \mathcal{H} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) \right] \Big|_{t=x \cdot \theta} d\theta \quad (4.126)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} e^{\mu(x \cdot \xi^\perp)} \partial_t \mathcal{H} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(\cdot, \theta) \Big|_{t=x \cdot \theta} d\theta \quad (4.127)$$

Já vimos no Capítulo 2 (veja Eq.(2.21), pág. 15) como calcular $\partial_t \mathcal{H} d$ no domínio de Fourier, isto é $\widehat{\partial_t \mathcal{H} d}(\nu) = |\nu| \hat{d}(\nu)$. No entanto, é fácil mostrar [24] que, se $d = \mathcal{R}_{\text{ert}} f$ então $\hat{d}(\nu, \theta) = \hat{f}(\nu \xi + i\mu \xi^\perp)/2\pi$. Segue então que

$$\widehat{\partial_t \mathcal{H} d}(\nu) = |\nu| \hat{d}(\nu) = |\nu| \hat{f}(\nu \xi + i\mu \xi^\perp) \quad (4.128)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} f(x) |\nu| e^{2\pi i \nu x \cdot (\xi + \frac{\mu}{\nu} \xi^\perp)} dx \quad (4.129)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} f\left(\frac{x}{\nu}\right) e^{2\pi i x \cdot (\xi + \frac{\mu}{\nu} \xi^\perp)} dx \quad (4.130)$$

$$= \hat{f}_1\left(\xi + i\frac{\mu}{\nu} \xi^\perp\right), \quad f_1(x) = f(x/\nu) \quad (4.131)$$

Como em [35], a integral acima converge apenas para $|\mu/\nu| < 1$, portanto, para que (4.127) faça sentido com f em L^1 , devemos calcular $\partial_t \mathcal{H} \mathcal{R}_{\text{ert}}$ com um filtro passa alta, isto é $\widehat{\partial_t \mathcal{H} d}(\nu) = w_\mu(\nu) |\nu| \hat{d}(\nu)$ com $w_\mu(\nu) = \chi_{[-\mu, \mu]^c}(\nu)$, gerando a seguinte fórmula de inversão

$$f(x) = \frac{1}{4\pi} \mathcal{B}_\mu \mathcal{L}_\mu \mathcal{R}_{\text{ert}} f(x) \Rightarrow \mathcal{R}_{\text{ert}}^{-1} = \frac{1}{4\pi} \mathcal{B}_\mu \mathcal{L}_\mu \quad (4.132)$$

onde $\mathcal{B}_\mu$ é a retroprojeção generalizada com peso ω_{ert}^{-1} (veja Eq.(3.6), pág. 26) e $\mathcal{L}_\mu$ definido por $\mathcal{L}d(t) = (g_\mu \star_1 d)(t)$, com $\hat{g}_\mu(\nu) = w_\mu(\nu) |\nu|$. Esta é exatamente a fórmula de inversão de Tretyak-Metz [35].

4.3 Métodos aproximados para inversão

Nesta Seção apresentamos métodos que permitem obter boas estimativas para a inversa do operador $\mathcal{R}_\omega$. Na Seção 4.3.1 apresentamos o Método de Chang [29], usado atualmente em experimentos práticos de xfct. A Seção 4.3.2 generaliza o procedimento matemático da Seção 2.2.1, com a prova da existência e construção de *ridge functions* consistentes com a transformada generalizada de Radon. Na Seção 4.3.3 mostramos como o operador de inversão de Novikov [30] pode ser usado em aproximações para xfct e comparado com técnicas relacionadas e existentes [50]

4.3.1 Aproximação de Chang

Chang trabalhando com problemas em combustão [29], similares à modelagem em spect, observou um notável fato; que ao considerar a função f , em (3.1), como uma fonte pontual, sua reconstrução poderia ser obtida de maneira aproximada. E mesmo quando a fonte não é pontual, tal estimativa de primeira ordem também foi obtida por Hogan [28], que após discretizar apropriadamente as integrais do operador $\mathcal{R}_\omega$, pôde afirmar que a função f em cada ponto, é aproximadamente uma contribuição de todas as possíveis projeções que passam pelo ponto em questão. Para amenizar essa aproximação, Hogan usa uma implementação da transformada de Radon inversa, com um filtro adequado, para tentar eliminar o resíduo, e a aproximação obtida é exatamente igual à de Chang.

Observe que, tal como na equação (2.3), podemos escrever (3.1) da forma

$$d(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}^2} f(x) \omega(x, \theta) \delta(x \cdot \xi - t) dx \quad (4.133)$$

Logo, ao supor que $f(x) = A\delta(x - x_0)$, a transformada generalizada resulta em

$$d(t, \theta) = A \int_{\mathbb{R}^2} \delta(x - x_0) \omega(x, \theta) \delta(x \cdot \xi - t) dx = A\omega(x_0, \theta) \delta(x_0 \cdot \xi - t). \quad (4.134)$$

Ao aplicar a transformada de Fourier nos dados acima, obtemos

$$\hat{d}(\nu, \theta) = A\omega(x_0) e^{-i2\pi\nu(x_0 \cdot \xi)}. \quad (4.135)$$

Vamos aplicar fbp (veja Método 2.1.1, pág. 16) aos dados d . Lembre que o filtro das projeções, que denotamos por q , é dado por $q(t, \theta) = (d(\cdot, \theta) * s)$, onde s é a versão aproximada da inversa de Fourier de $|\nu|$ com filtro passa-baixa $j(\nu) = \chi_{[-b, b]}(\nu)$ e b é a banda de d . Pela equação (4.135), q resulta ser

$$q(t) = \mathcal{F}^{-1}\{\hat{d}(\nu, \theta) |\nu| j(\nu)\}(t) \approx \int_{|\nu| \leq b} A\omega(x_0, \theta) |\nu| e^{i2\pi\nu(t - x_0 \cdot \xi)} d\nu. \quad (4.136)$$

Denotando de f_{rec} a função reconstruída, que é formada pela aplicação do operador retroprojeção $\mathcal{B}$ nas projeções filtradas q , temos

$$f_{rec}(x) = \mathcal{B}q(x) \approx \int_0^{2\pi} \int_{|\nu| \leq b} A\omega(x, \theta) |\nu| e^{i2\pi(x - x_0) \cdot \xi} d\nu d\theta, \quad (4.137)$$

que avaliada em x_0 resulta em

$$f_{rec}(x_0) \approx \int_0^{2\pi} A\omega(x_0, \theta) \int_{|\nu| \leq b} |\nu| d\nu d\theta = (2\pi Ab^2) \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(x_0, \theta) d\theta \right). \quad (4.138)$$

Finalmente, como $f(x_0) \approx 2\pi Ab^2$, vemos que fbp aproxima bem a função original, senão pela média dos pesos avaliada no ponto x_0 , representada entre os parênteses da direita na equação acima. Chang propõe que mesmo para fontes não pontuais, este tipo de estratégia vale como uma aproximação para a função f , corrigindo o efeito do peso na transformada generalizada. O método está resumido abaixo.

Método 4.3.1 Aproximação de Chang

Dados $\omega \in \mathbf{Q}$ e $d = \mathcal{R}_\omega f$, construa a média $a \in \mathbf{U}$ por

$$a(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(x, \theta) d\theta \quad (4.139)$$

Usando o método de inversão fbp, construa $\tilde{f} = \mathcal{R}^{-1}d$. A aproximação é dada por

$$f_{\text{chang}}(x) \approx \frac{\tilde{f}(x)}{a(x)}. \quad (4.140)$$

Como ω é um peso estritamente positivo, a divisão está bem definida. Obviamente, esta é uma boa aproximação à medida que $\omega \approx 1$.

Em xfct, este tipo de aproximação é usado na prática, como por exemplo em [28, 38]. Mostraremos no Capítulo 5 que esta técnica pode ser melhorada, mantendo uma abordagem semelhante.

4.3.2 Ridge functions

Nosso objetivo aqui é obter uma generalização do Teorema 2.2.1 (veja pág. 17) e do Método 2.2.1 (veja página 24) para o caso da transformada generalizada de Radon. Queremos obter uma função generalizada de Shepp-Logan, que denotaremos de f_{gsi} , e escrita como a combinação linear (2.29).

Vamos começar denotando $\mathcal{R}_{\omega, \theta} f(t) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta)$, $e \in \mathbf{U}$ a função característica no disco unitário C (o qual contém o suporte de f), $p(t) = \sqrt{1 - t^2}$ e

$I = [-1, 1]$. Se $w \in U$ é uma função que restrita a retas no domínio de f , iguala o peso ω , isto é

$$w(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) = \omega(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp, \theta), \quad |t| \leq 1, |s| \leq p(t), \theta \in [0, 2\pi], \quad (4.141)$$

então se integramos a igualdade acima em s obtemos $\mathcal{R}w(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega e(t, \theta)$, ou equivalentemente $w(x) = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega e(x)$.

Definindo $L_w^2 = L^2(C, w)$ com o produto interno

$$\langle f_1, f_2 \rangle_w = \int_C f_1(x)f_2(x)w(x)dx, \quad \|f\|_w^2 = \langle f, f \rangle_w \quad (4.142)$$

temos a propriedade $\mathcal{R}_{\omega, \theta}(L_w^2) \subseteq L^2(I, p^{-1})$. De fato, para todo $x \in C$ temos $|f(x)| \leq \|f\|_w$ e $\omega(x, \theta) \leq \|\omega_\theta\|_\infty$ com $\omega_\theta = \omega(\cdot, \theta)$, donde

$$|\mathcal{R}_{\omega, \theta}f(t)| = \left| \int_{|s| \leq p(t)} f(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) \omega(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp, \theta) ds \right| \quad (4.143)$$

$$\leq \|f\|_w \|\omega_\theta\|_\infty \int_{|s| \leq p(t)} ds \quad (4.144)$$

$$= 2p(t) \|f\|_w \|\omega_\theta\|_\infty \quad (4.145)$$

Segue $\|\mathcal{R}_{\omega, \theta}f\| \leq \sqrt{2\pi} \|\omega_\theta\|_\infty \|f\|_w$, onde $\|\cdot\|$ denota a norma em $L^2(I, p^{-1})$.

Como no artigo de Shepp-Logan, vamos procurar pela função f_{gsi} que possui a menor oscilação em relação a sua média $\bar{f}_{\text{gsi}}$ em C e que ainda é consistente com os dados. Portanto, queremos resolver o seguinte problema:

Problema 4.1 Encontrar $q \in L_w^2$ que minimize o funcional $\|q - \bar{q}\|_w$ sujeito a $\mathcal{R}_\omega q(t, \theta_i) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta_i) = d(t, \theta_i)$, para todo $t \in I$ e $i = 1, \dots, n$, onde $\bar{q} = \frac{1}{\pi} \langle q, e \rangle_w$

No resto desta seção vamos usar a notação $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$. Observe que $\bar{q}$ não depende de q pois, usando a mudança de variáveis $x = t\xi + s\xi^\perp$ e a propriedade da equação (4.141), temos

$$\bar{q} = \frac{1}{\pi} \int_C q(x)w(x)dx \quad (4.146)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds q(t\xi + s\xi^\perp) \omega(t\xi + s\xi^\perp, \theta) \quad (4.147)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_I dt \mathcal{R}_{\omega, \theta} q(t) = \frac{1}{\pi} \langle d_\theta, \chi_I \rangle_{L^2} \quad (4.148)$$

O mesmo argumento acima, aplicado a f , nos mostra que a média é preservada, isto é $\bar{f} = \bar{q}$. Assim sendo, podemos substituir a meta de minimizar $\|q - \bar{q}\|_w$ por apenas minimizar $\|q\|_w$. De fato,

$$\begin{aligned}\|q - \bar{q}\|_w^2 &= \|q\|_w^2 - 2\langle q, \bar{q}e \rangle_w + (\bar{q})^2 \|e\|_w^2 \\ &= \|q\|_w^2 + (\bar{q})^2 [\|e\|_w^2 - 2]\end{aligned}$$

Seja $h \in L^2(I)$ uma função arbitrária. Para cada $\theta \in \Theta$, vamos denotar $H_\theta(x) = h(x \cdot \xi_\theta)$, que por (4.141), satisfaz a propriedade

$$\begin{aligned}\langle f, H_\theta \rangle_w &= \int_C f(x) h(x \cdot \xi_\theta) w(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds f(t\xi + s\xi^\perp) w(t\xi + s\xi^\perp) h(t) \\ &= \int_I dt h(t) \mathcal{R}_{\omega, \theta} f(t) = \langle h, \mathcal{R}_{\omega, \theta} f \rangle_{L^2}\end{aligned}$$

Tomando $R_n = \text{span}\{H_{\theta_1}, \dots, H_{\theta_n}\}$ e $g = \text{proj}_{R_n} f$ temos $g - f \perp H_{\theta_j}$, para todo j , isto é $\langle g - f, H_{\theta_j} \rangle_w = 0$. Pelas equações acima, isto significa

$$0 = \langle g - f, H_{\theta_j} \rangle_w = \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta_j}(g - f), h \rangle, \quad \forall h \in L^2(I) \quad (4.149)$$

de onde segue que a projeção ortogonal é também consistente com os dados de f no subconjunto de vistas Θ . Se f_{gsI} é a solução do Problema 4.1 então $g = f_{\text{gsI}}$. Com efeito, para q arbitrária, e pelas equações (4.146-4.148)

$$\|q\|_w^2 = \int_C q(x)^2 w(x) dx \leq \|q\|_\infty \int_C q(x) w(x) dx = \|q\|_\infty \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta} q, \chi_I \rangle_{L^2} \quad (4.150)$$

com $\theta \in \Theta$. Segue, para $q = g - f_{\text{gsI}}$ que

$$\|g - f_{\text{gsI}}\| \leq \|g - f_{\text{gsI}}\|_\infty \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta}(g - f_{\text{gsI}}), \chi_I \rangle_{L^2} = 0 \Rightarrow g = f_{\text{gsI}}. \quad (4.151)$$

Qualquer outra função consistente com os dados tem sua norma reduzida pela projeção em R_n . Disto, e dos argumentos utilizados nas duas últimas equações, segue que f_{gsI} é a solução de norma mínima.

A demonstração acima não muda se escolhermos, ao invés de apenas uma, um conjunto $\{h_1, \dots, h_n\}$ de funções em $L^2(I)$, cada uma associada a

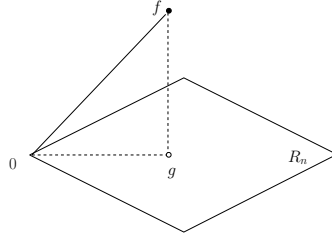


Figura 4.3: Projeção de f em $R_n = \text{span}\{H_{\theta_1}, \dots, H_{\theta_n}\}$, solução do Problema 4.1, $g = f_{\text{gsI}}$. Veja texto para detalhes.

um ângulo θ_i , e definindo $H_{\theta_i}(x) = h_i(x \cdot \xi)$. Assim sendo, a função $f_{\text{gsI}} \in R_n$ é escrita como combinação linear das H_{θ_i} 's, isto é

$$f_{\text{gsI}}(x) = \sum_{i=1}^n h_i(x \cdot \xi_i) \quad (4.152)$$

onde as constantes da combinação linear são absorvidas pelas h_i 's, que são arbitrárias. Provamos portanto a generalização do Teorema 2.2.1, para o caso da transformada generalizada de Radon.

Construção da base

Não sendo únicas as *ridge functions* h_i (e sim sua combinação linear), podemos usar a mesma estratégia de Kazantsev [21] para construí-las. Vamos supor que o peso ω é uma função suave na variável x . Embora isto não seja verdade na prática, sempre é possível usar um filtro adequado para tornar isto possível. Esta exigência é feita apenas para que possamos usar livremente o Teorema do valor médio para integrais. Vamos usar a notação $x_{t,s,\theta} = t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp$.

Seja $H_\beta(x) = h_\beta(x \cdot \beta)$. Temos,

$$\mathcal{R}_\omega H_\beta(t, \beta) = \int_{\Omega(t,\beta)} \omega(x, \theta) h_\beta(x \cdot \xi_\beta) dx = h(t) \mathcal{R}_\omega e(t, \beta) \quad (4.153)$$

Note que pelo Teorema do valor médio, existe $\tilde{s} = \tilde{s}(t, \beta)$, $|\tilde{s}| \leq p(t)$, tal que

$$\mathcal{R}_\omega e(t, \beta) = \int_{|s| \leq p(t)} \omega(x_{t,s,\beta}, \beta) ds = 2\omega(x_{t,\tilde{s},\beta}, \beta) p(t) \quad (4.154)$$

Por outro lado, e pela mesma razão, existe $\hat{s} = \hat{s}(t, \beta, \alpha)$ com

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_\omega H_\beta(t, \alpha) &= \int_{\Omega(t, \alpha)} \omega(x, \alpha) h_\beta(x \cdot \xi_\beta) dx \\
&= \int_{|s| \leq p(t)} \omega(x_{t,s,\alpha}, \alpha) h_\beta(t \cos(\beta - \alpha) + s \sin(\beta - \alpha)) ds \\
&= \omega(x_{t,\hat{s},\alpha}, \alpha) \int_{|s| \leq p(t)} h_\beta(t \cos(\beta - \alpha) + s \sin(\beta - \alpha)) ds \\
&= \frac{\omega(x_{t,\hat{s},\alpha}, \alpha)}{\sin(\beta - \alpha)} \int_{s^-(t)}^{s^+(t)} h_\beta(q) dq
\end{aligned}$$

onde $s^\pm(t) = t \cos(\beta - \alpha) \pm p(t) \sin(\beta - \alpha)$. Como f_{gsI} é dado por (4.152), temos

$$d(t, \theta_i) = \mathcal{R}_\omega f_{\text{gsI}}(t, \theta_i) = \mathcal{R}_\omega H_{\theta_i}(t, \theta_i) + \sum_{j \neq i}^n \mathcal{R}_\omega H_{\theta_j}(t, \theta_j) \quad (4.155)$$

de onde segue,

$$\frac{d(t, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} = h_i(t) + \frac{\omega(x_{t,\hat{s},\theta_i}, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} \sum_{j \neq i}^n \frac{1}{\sin(\theta_j - \theta_i)} \int_{s^-}^{s^+} h_j(q) dq \quad (4.156)$$

A função $v_i(t) = d(t, \theta_i) / \mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i) \in L^2(I, p^{-1}) \subseteq L^2(I) \subseteq L^2(I, p)$ está bem definida no aberto $(-1, 1)$ pela equação (4.154), valendo zero por definição nos valores $|t| = 1$. Como a família de polinômios de Tchebyshev do segundo tipo $\{U_k\}$ é ortonormal em $L^2(I, p)$, vamos expandir as funções h_i e v_i nesta base, isto é

$$h_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} b_i^{(k)} U_{k-1}(t), \quad v_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{(k)} U_{k-1}(t) \quad (4.157)$$

Ao substituir estas expansões em (4.156), e usando a Proposição 3 de [21] obtemos a seguinte igualdade

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_i^{(k)} U_{k-1}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{j=1}^n \ell_{ij}^{(k)}(t) b_i^{(k)} \right) U_{k-1}(t) \quad (4.158)$$

onde $c_i^{(k)} = \langle v_i, U_{k-1} \rangle_p / \|U_{k-1}\|_p$ e

$$\ell_{ij}^{(k)}(t) = \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} 2p(t) \frac{\sin k(\theta_i - \theta_j)}{k \sin(\theta_i - \theta_j)} \quad (4.159)$$

$$\stackrel{(4.154)}{=} \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i) \sin k(\theta_i - \theta_j)}{\omega(t\xi_i + \tilde{s}\xi_i^\perp, \theta_i) k \sin(\theta_i - \theta_j)} \quad (4.160)$$

$$\stackrel{(2.32)}{=} \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i)}{\omega(t\xi_i + \tilde{s}\xi_i^\perp, \theta_i)} a_{ij}^{(k)} \quad (4.161)$$

De (4.158) resulta o sistema linear

$$\sum_{j=1}^n \ell_{ij}^{(k)}(t) b_i^{(k)} = c_i^{(k)} \Rightarrow L^{(k)}(t) b^{(k)} = c^{(k)}, \quad \forall |t| \leq 1 \quad (4.162)$$

Seja $\hat{x} = t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp$ e $\tilde{x} = t\xi_i + \tilde{s}\xi_i^\perp$. Como $\tilde{s} \neq \hat{s}$ podemos simplificar a primeira divisão na equação (4.161) usando a seguinte aproximação linear,

$$\omega(\hat{x}, \theta_i) \approx \omega(\tilde{x}, \theta_i) + \partial_x \omega(\tilde{x}, \theta_i) \cdot (\Delta s_{ij} \xi_i^\perp) \quad (4.163)$$

onde $\Delta s_{ij} = \text{sign}(\hat{s}(i, j) - \tilde{s}(i)) |\hat{s}(i, j) - \tilde{s}(i)|$. Segue que os elementos da matriz $L^{(k)}$ são aproximados por

$$\ell_{ij}^{(k)} \approx [1 + e_{ij}(t)] a_{ij}^{(k)}, \quad e_{ij}(t) = \Delta s_{ij} \frac{\partial_x \omega(\tilde{x}, \theta_i) \cdot \xi_i^\perp}{\omega(\tilde{x}, \theta_i)} \quad (4.164)$$

Se o gradiente da função ω tiver baixa magnitude, digamos $\partial_x \omega(x, \theta) = O(\varepsilon)$ para todo θ , então a matriz $A^{(k)}$ aproxima $L^{(k)}$ e o Método 2.2.1 pouco muda. Observe que no caso de spect, admitindo que o coeficiente de atenuação μ é suave²

$$\partial_x \omega(x, \theta) = -[\partial_x \mathcal{D}\mu(x, \theta)] \omega(x, \theta) \Rightarrow |e_{ij}(t)| = |\Delta s_{ij}| |\partial_x \mathcal{D}\mu(\tilde{x}, \theta_i) \cdot \xi_i^\perp| \quad (4.165)$$

No caso de xfct temos, para $\beta^* \in \Gamma$ (veja Figura 3.3, pág 34)

$$\partial_x \omega(x, \theta) = -[\partial_x \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \partial_x \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*)] \omega(x, \theta) \quad (4.166)$$

Portanto, nas nossas aplicações, basta pedir que os coeficientes de atenuação tenham gradiente baixo para usar a estratégia analítica de inversão da matriz $A^{(k)}$ de Kazantsev, quando os ângulos são equiespaçados. Nossa estratégia generalizada está resumida no Método 4.3.2

Observe que se $\omega = 1$, então $r_i(t) = 1$ e o Método 4.3.2 é reduzido ao Método 2.2.1. Assumimos também que os coeficientes de atenuação que definem o peso ω garantam que este tenha um gradiente de baixa magnitude.

²Caso contrário, podemos introduzir um filtro.

Método 4.3.2 Construção de *ridge functions* generalizadas

Dados $d_i(t) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta_i)$, seja $v_i(t) = d_i(t)/\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)$ e $p(t) = \sqrt{1-t^2}$. Este método é similar ao Método 2.2.1, pág 24, com a única diferença que os coeficientes $c_i^{(k)}$ são calculados por

$$\begin{aligned} c_i^{(k)} &= \frac{\langle v_i, U_{k-1} \rangle_p}{\|U_{k-1}\|_p} = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 p(t) v_i(t) U_{k-1}(t) dt \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{p(t)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} d_i(t) U_{k-1}(t) dt \\ &= \frac{2}{\pi} \langle r_i d_i, U_{k-1} \rangle_{L^2}, \end{aligned}$$

onde

$$r_i(t) = \begin{cases} p(t)/\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i), & |t| < 1 \\ 0, & |t| = 1 \end{cases} \quad (4.167)$$

4.3.3 A inversa de Novikov aplicada a xfct

O último método aproximado para inversão que esta tese trata resulta em observar que o modelo matemático em xfct é de fato, muito parecido com spect. Esta idéia aparece primeiro em [50] sob fortes restrições de considerar coeficientes de atenuação constantes; algo indesejável na prática de xfct, e que pode ser melhorado.

Lembramos que $p(t) = \sqrt{1-t^2}$. Usando a notação em (3.35) e (4.101), a transformada de Radon em xfct é definida por

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} f(x) \omega_\lambda(x, \theta) \omega_\mu^\dagger(x, \theta) dx \quad (4.168)$$

$$= \int_{|s| \leq p(t)} f(x_{t, \theta}(s)) \omega_\lambda(x_{t, \theta}(s), \theta) \omega_\mu^\dagger(x_{t, \theta}(s), \theta) ds \quad (4.169)$$

onde $x_{t, \theta}(s) = t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp$. Nosso objetivo é tirar o peso ω_μ da integral acima. Isto pode ser feito com o primeiro termo da série de Fourier na variável s , que integra ao longo do raio. De fato, o primeiro termo gera a seguinte aproximação

$$\omega_\mu^\dagger(x_{t, \theta}(s), \theta) \approx \frac{1}{2p(t)} \int_{|\tau| \leq p(t)} \omega_\mu^\dagger(x_{t, \theta}(\tau)) d\tau \quad (4.170)$$

$$= \frac{1}{2p(t)} \int_{\Omega(t,\theta)} \omega_{\mu}^t(x, \theta) dx \quad (4.171)$$

$$= \frac{1}{2p(t)} \mathcal{R} \omega_{\mu,\theta}^t(t, \theta) \quad (4.172)$$

onde $\omega_{\mu,\theta}^t = \omega_{\mu}(\cdot, \theta)$. Com esta aproximação, a equação (4.169) resulta em

$$\frac{2p(t) \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta)}{\mathcal{R} \omega_{\mu,\theta}^t(t, \theta)} \approx \int_{\Omega(t,\theta)} f(x) \omega_{\lambda}(x, \theta) dx = \mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta) \quad (4.173)$$

Se $d = \mathcal{R}_{\text{xfct}} f$ então a aproximação acima resulta em

$$z(t, \theta) \equiv \frac{2p(t) d(t, \theta)}{\mathcal{R} \omega_{\mu,\theta}^t(t, \theta)} \approx \mathcal{R}_{\text{spect}} f \quad (4.174)$$

La Rivière, em [50] considera $\lambda(x) = \lambda$ uma função constante em um suporte convexo $A \supseteq \text{supp } f$. Neste caso, segue de (3.33) (veja pág. 31) que

$$\mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta) = e^{-\lambda d(t,\theta)} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) \quad (4.175)$$

com $\mathcal{R}_{\text{ert}}$ a transformada exponencial de Radon definida em (3.34) e d a distância definida em (3.32) (pág. 31). Logo, sua aproximação resulta

$$z(t, \theta) e^{\lambda d(t,\theta)} \approx \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta). \quad (4.176)$$

A inversão aproximada de La Rivière faz uso das relações entre os coeficientes de Fourier de $ze^{\lambda d}$, $\mathcal{R}_{\text{ert}} f$ e $\mathcal{R} f$, deduzidas em [34], para inverter o operador $\mathcal{R}_{\text{ert}}$. Não vamos expor aqui os detalhes, que podem ser encontrados no artigo referenciado e em [54].

Nossa estratégia em xfct, menos restritiva, pois não supõe que λ é constante em um suporte convexo, apóia-se na equação (4.174) e no fato de a inversa de $\mathcal{R}_{\text{spect}}$ ser conhecida, pela fórmula de Novikov. Pelas idéias desenvolvidas na Seção 4.2, usamos a seguinte aproximação

$$f \approx \mathcal{N}(\omega_{\lambda}, z), \quad \omega_{\lambda} = \omega_{\text{spect}}(\lambda) \quad (4.177)$$

com $\mathcal{N}$ o operador de inversão definido em (4.63).

Capítulo 5

Métodos Iterativos

Nos Capítulos 3 e 4 estivemos preocupados em resolver o problema linear de inversão da transformada generalizada atenuada de Radon para um peso conhecido. Vamos voltar à equação (3.1) (veja pág.25), onde o peso ω agora depende de um parâmetro μ , pertencente a U , o espaço das imagens. Veja a tabela de pesos 3.1 (pág 26). O problema que queremos resolver é definido a seguir

Problema 5.1 *Encontre $f, \mu \in U$ tais que $\mathcal{Y}(\mu, f) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}f - d = 0$.*

A dificuldade do problema acima reside no seu mal condicionamento e na não linearidade do operador $\mathcal{Y}$ como função de μ . Nossa estratégia de solução será iterativa. Neste capítulo, propomos que sua solução seja o ponto limite de um método alternado escrito da seguinte forma geral

$$f^{(k+1)} = \mathbf{L}(\mu^{(k)}, f^{(k)}, d), \quad \mu^{(k+1)} = \mathbf{N}(\mu^{(k)}, f^{(k+1)}, d), \quad k \in \mathbb{Z} \quad (5.1)$$

para $f^{(0)}$ e $\mu^{(0)}$ dados. Os algoritmos $\mathbf{L}$ e $\mathbf{N}$, serão propostos nas seções seguintes. O primeiro se propõe a resolver a parte linear, isto é com μ fixo, encontrando uma primeira estimativa para f . O segundo, para a parte não linear, corrige a estimativa de μ com o f obtido. Isto se repete até que um determinado critério de parada seja satisfeito.

Veremos que várias escolhas podem ser feitas para $\mathbf{L}$ e $\mathbf{N}$. Estes algoritmos estão separados nas Seções 5.1 e 5.2 respectivamente e são essencialmente métodos iterativos. Na Seção 5.3 está apresentado o algoritmo alternado da equação (5.1) e sua discussão em xfst. Antes desta discussão faremos uma breve nota sobre a discretização do problema, tal como no Capítulo 2 para o caso da transformada de Radon.

Nota sobre a discretização do problema

Antes de esboçar os métodos para a resolução do Problema 5.1 vamos entender a estrutura do problema discreto, que segue o mesmo raciocínio da equação (2.16) e da discussão restante na pág.13. Para uma malha de pontos $\{x_k\}$ onde as funções f e $\omega(\cdot, \theta)$ possuem valores a serem determinados, temos

$$f(x)\omega(x, \theta) = \sum_{k=1}^P \mathbf{f}_k \omega(x_k, \theta) \phi_k(x). \quad (5.2)$$

Para cada $\theta \in [0, 2\pi]$, a transformada generalizada de Radon satisfaz $\mathcal{R}_\omega f = \mathcal{R}(f\omega(\cdot, \theta))$, então se $\mathbf{d}_n = d(t_l, \theta_m)$ com $n = l + vm$, segue de (5.2)

$$\mathbf{d}_n = \sum_{k=1}^P \mathbf{f}_k \omega(x_k, \theta_l) \mathcal{R}_\omega \phi_k(\Omega_n) \equiv \sum_{k=1}^P \mathbf{a}_{nk} \mathbf{w}_{nk} \mathbf{f}_k \Rightarrow \mathbf{d} = (\mathbf{W} \odot \mathbf{A}) \mathbf{f} \quad (5.3)$$

onde $\mathbf{a}_{nk} = \mathcal{R} \phi_k(\Omega_n)$ e $\mathbf{w}_{nk} = \omega(x_k, \theta_{l(n)})$ com $l(n) = \text{rem}(n, v)$. A discretização então dá origem a um sistema linear com matriz dada por um produto de Hadamard [46]. Vamos denotar $\mathbf{A}_\omega = \mathbf{W} \odot \mathbf{A}$. Note que, se ω é o peso proveniente de spect (veja Tabela 3.1), então

$$\mathbf{w}_{nk} = \exp \left\{ - \sum_{j \in \mathcal{P}_{nk}} \mathbf{a}_{nj} \mu_j \right\} \quad (5.4)$$

onde $\mathcal{P}_{nk}$ denota o conjunto de pixels que passam pelo n -ésimo raio a partir do pixel k e $\mu_j = \mu(x_j)$. Para o caso de xfct temos

$$\mathbf{w}_{nk} = \exp \left\{ - \sum_{j \in \mathcal{P}_{nk}} \mathbf{a}_{nj} \lambda_j \right\} \sum_{g=0}^F \exp \left\{ - \sum_{j \in \mathcal{P}_{n+g,k}} \mathbf{a}_{n+g,j} \mu_j \right\} \quad (5.5)$$

com F o número de raios fluorescentes a partir do k -ésimo pixel. Nota-se facilmente que, para $\mu = 0 \in \mathbb{R}^P$ no caso de spect e $(\mu, \lambda) = (0, 0) \in \mathbb{R}^P \times \mathbb{R}^P$ no caso de xfct, a discretização acima resulta na matriz de coeficientes $\mathbf{W} \odot \mathbf{A} = \mathbf{A}$, obtida para o caso da transformada de Radon.

5.1 Resolução da parte linear

Todos os métodos analíticos discutidos no Capítulo 4 representam uma primeira escolha para o algoritmo L (veja Eq.(5.1)). A nossa abordagem

aqui, ainda será analítica no sentido de propor métodos iterativos que não abordem necessariamente a discretização dos operadores envolvidos. Por outro lado, Bronnikov [4] propõe, usando a forma discreta (5.3) que, se $d = (W \odot A)f$ então $f = (W \odot A)^\dagger d$, onde a pseudoinversa é calculada numericamente. Esta estratégia é computacionalmente cara pois envolve o cálculo prévio da matriz $W \odot A$, algo inviável e custoso. Ora, esta aproximação pode ser, por exemplo, calculada usando a aproximação por *ridge functions* generalizadas da Seção 4.3.2.

O primeiro método iterativo proposto para esta parte é a generalização do ART, apresentado na Seção 2.3.1. De fato, o análogo generalizado do Lema 2.3 gera, no caso generalizado $a_\eta = \mathcal{B}_\omega \psi_\eta$ para $\psi_\eta(\beta) = \delta(\beta - \eta)$ com $\eta, \beta \in [-1, 1] \times [0, \pi]$. Logo, o método de projeções ART toma a seguinte forma, que é uma generalização da equação (2.45) do Capítulo 2,

$$f^{(k+1)}(x) = f^{(k)}(x) + \frac{d(\eta) - \mathcal{R}_\omega f^{(k)}(\eta)}{\|a_\eta\|_{L^2}^2} a_\eta(x) \quad (5.6)$$

Também, o algoritmo EM da Seção 2.3.2, na equação (2.50), pode ser generalizado da seguinte forma

$$f^{(k+1)}(x) = \beta(x) f^{(k)}(x) \mathcal{B}_\omega d^{(k)}(x), \quad d^{(k)}(\eta) = \frac{d(\eta)}{\mathcal{R}_\omega f^{(k)}(\eta)}, \quad (5.7)$$

com $\beta(x) = \mathcal{B}_\omega e(x)$ e $e(\eta) = \chi_{[-1,1] \times [0,2\pi]}(\eta)$.

Os métodos que seguem estão fortemente baseados na construção de equações integrais de Fredholm do segundo tipo. Para construir tais métodos, usamos a propriedade de linearidade (3.5) (veja pág. 26), de onde segue

$$\mathcal{R}_\omega = \mathcal{R} - \mathcal{R}_{1-\omega} \Rightarrow d = \mathcal{R}_\omega f = \mathcal{R}f - \mathcal{R}_{1-\omega} f \quad (5.8)$$

Vamos denotar $\rho = 1 - \omega$. Se $\mathcal{R}^{-1}$ aproxima a inversa de $\mathcal{R}_\omega$ então a equação acima resulta na equação integral

$$\mathcal{R}^{-1}d = f - \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\rho f. \quad (5.9)$$

Por outro lado, e de forma mais geral, se $(\mathcal{R}\mathcal{H})^{-1}$ aproxima a inversa de $\mathcal{R}_\omega$ então obtemos de (5.8),

$$\mathcal{H}^{-1}\mathcal{R}^{-1}d = \mathcal{H}^{-1}f - \mathcal{H}^{-1}\mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\rho f \quad (5.10)$$

Denotando $\tilde{f} \equiv \mathcal{R}^{-1}d$ e $\mathcal{D} \equiv \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\rho$, a equação acima é equivalente a

$$f = \tilde{f} + \mathcal{B}f \quad (5.11)$$

onde

$$\bar{f} = \mathcal{H}^{-1}\tilde{f}, \quad \mathcal{B}f = \mathcal{H}^{-1}\mathcal{D}f + (\mathcal{I} - \mathcal{H}^{-1})f \quad (5.12)$$

A equação integral (5.11) é o protótipo de equação que queremos resolver aqui neste Capítulo. Note que, se $\mathcal{H} = I$ então $\mathcal{B} = \mathcal{D}$. No entanto, inspirado pela aproximação de Chang (veja Seção 4.3.1) sabemos que uma boa escolha para o operador $\mathcal{H}$ é $\mathcal{H} = a\mathcal{I}$, onde a é uma função que corrige o efeito do peso ω , isto é, a é a média proposta por Chang, apresentada na equação (4.139) (veja pág. 56). Neste caso, pela equação (5.12) temos

$$\bar{f} = \frac{\tilde{f}}{a}, \quad \mathcal{B}f = \frac{\mathcal{D}f}{a} - \frac{(1-a)}{a}f \quad (5.13)$$

Kunyansky [32] encontra este mesmo método usando uma expansão de Fourier na variável angular do peso $1 - \rho$. Da teoria de equações integrais, sabemos que se o operador $\mathcal{B}$ definido em (5.11) é uma contração forte, então o operador $\bar{f} + \mathcal{B}$ possui um único ponto fixo, limite da seqüência $f^{(k+1)} = \bar{f} + \mathcal{B}f^{(k)}$. Ainda, se escolhemos $f^{(0)} = \bar{f}$ então este limite é representado pela série de Neumann [7]

$$f = \bar{f} + \mathcal{B}\bar{f} + \mathcal{B}^2\bar{f} + \mathcal{B}^3\bar{f} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{B}^k \bar{f} \quad (5.14)$$

Nossa escolha de $\mathcal{B}$ em (5.11) será como em (5.13). O seguinte Teorema, de Kunyansky [32], mostra que para garantir que $\mathcal{B}$ é uma contração, basta provar que $\mathcal{D}$ o é.

Teorema 5.1.1 (L.Kunyansky) *Seja $\rho = 1 - \omega$. Se existe $A > 0$ tal que $\int_0^{2\pi} |\partial_\theta^2 \rho(x, \theta)|^2 \leq A^2$ para todo x , então existem constantes positivas $m_{\mathcal{D}}$ e $m_{\mathcal{B}}$ tais que $\|\mathcal{D}\|_{L^2} \leq m_{\mathcal{D}}$ e $\|\mathcal{B}\|_{L^2} \leq m_{\mathcal{B}}$. Neste caso, $m_{\mathcal{D}} \leq \|1 - a\|_{\infty} + \frac{\pi^2}{3}A$ e, se $m_{\mathcal{D}} < 1$ então $m_{\mathcal{B}} < m_{\mathcal{D}}$.*

Veremos no Capítulo 6 como ficam as estimativas de Kunyansky para a norma do operador $\mathcal{D}$, no Teorema 5.1.1, no caso de spect e xfct. Nossa estimativa segue outra linha de raciocínio e as comparações serão feitas no próximo capítulo. Começamos pelo Lema 3.1 e da discussão precedente na página 27. Temos válida, para $\rho = 1 - \omega$, a seguinte igualdade

$$\mathcal{BR}_\rho f(x) = \int_{\mathbb{R}^2} f(u)p_x(u)h(u-x)du = (fp_x \star h)(x) \quad (5.15)$$

com $p_x(u)$ dado por $p_x(u) = \rho(u, \ell(u - x))$. Como $\mathcal{D} = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\rho$ e $\mathcal{R}^{-1} = \mathcal{L}_{\text{fob}}\mathcal{B}$ (veja pág. 15) com $\mathcal{L}_{\text{fob}}b = g \star b$ e $\hat{g}(\eta) = \|\eta\|_2$, segue que

$$\mathcal{D}f(x) = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\rho f(x) \quad (5.16)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} dv g(v - x)(fp_v \star h)(v) \quad (5.17)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} dv g(v - x) \int_{\mathbb{R}^2} du f(u)p_v(u)h(u - v) \quad (5.18)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \int_{\mathbb{R}^2} dv g(v - x)h(u - v)p_v(u) \quad (5.19)$$

$$\equiv \int_{\mathbb{R}^2} du f(u)q(u, x) \quad (5.20)$$

onde na última igualdade usamos a definição do núcleo q a seguir,

$$q(u, x) = \int_{\mathbb{R}^2} dv g(v - x)h(u - v)p_v(u) \quad (5.21)$$

Como $p_v(u) \leq |p_v(u)| \leq \int_{\mathbb{R}^2} d\mathbf{v} |p_{\mathbf{v}}(u)|$ então q satisfaz

$$|q(u, x)| \leq \left(\int_{\mathbb{R}^2} d\mathbf{v} |p_{\mathbf{v}}(u)| \right) \left| \int_{\mathbb{R}^2} g(v - x)h(u - v)dv \right| \quad (5.22)$$

A segunda integral à direita acima, é avaliada pelo Teorema da convolução. De fato, uma vez que $\hat{h}(\eta) = 1/\|\eta\|_2$ e $\hat{g}(\eta) = \|\eta\|_2$ então

$$\int_{\mathbb{R}^2} g(v - x)h(u - v)dv = \mathcal{F}_2^{-1} \left[e^{-2\pi i(x \cdot \eta)} \hat{g}(\eta) \hat{h}(\eta) \right] = \delta(u - x) \quad (5.23)$$

Portanto, de (5.22) e (5.23), a equação (5.20) resulta em

$$|\mathcal{D}f(x)| \leq \int_{\mathbb{R}^2} |q(u, x)| |f(u)| du \quad (5.24)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} du |f(u)| \int_{\mathbb{R}^2} dv |p_v(u)| \delta(u - x) \quad (5.25)$$

$$= |f(x)| \int_{\mathbb{R}^2} dv |p_v(x)| \quad (5.26)$$

Lembre (veja pág.27) que $p_v(x) = \int_0^\pi \rho(v, \theta) \delta(\tau(\theta)) d\theta$ com $\tau(\theta) = (v - x) \cdot \xi$. Logo, (5.26) resulta em

$$|\mathcal{D}f(x)| \leq |f(x)| \int_{\mathbb{R}^2} dv \int_0^\pi |\rho(v, \theta)| \delta((v - x) \cdot \xi) d\theta \quad (5.27)$$

$$= |f(x)| \mathcal{B}\mathcal{R}_{|\rho|}e(x) \quad (5.28)$$

onde $e = e(x)$ é a função indicadora no disco unitário, que suporta a função f . Ainda, pelo Lema 3.2 (veja pág.27) com $f = e$, resulta

$$\mathcal{B}\mathcal{R}_{|\rho|}e(x) \leq 2\mathbf{c}(\rho), \quad \mathbf{c}(\rho) = \int_Z dx \int_0^{2\pi} d\theta |\rho(x, \theta)| \quad (5.29)$$

com Z o disco unitário. Finalmente, de (5.29) e (5.28), após integrar em x sobre Z , resulta

$$\|\mathcal{D}\|_{L^2} \leq 2\mathbf{c}(\rho) \quad (5.30)$$

Provamos assim o seguinte Teorema para o operador $\mathcal{D}$.

Teorema 5.1.2 *Seja Z o disco unitário e $c(\rho)$ definido por*

$$\mathbf{c}(\rho) = \int_Z dx \int_0^{2\pi} d\theta |\rho(x, \theta)|, \quad \rho = 1 - \omega \quad (5.31)$$

Se $\mathbf{c}(\rho) < \frac{1}{2}$ então $\mathcal{D}$ é uma contração, e possui um único ponto fixo, solução de $\mathcal{R}_\omega f = d$, limite da seqüência $f^{(k+1)} = \bar{f} + \mathcal{D}f^{(k)}$, onde $\bar{f} = \mathcal{R}^{-1}d$.

Corolário 5.1.1 *Se $\omega(x, \theta) < 1$ para todo $(x, \theta) \in Z \times [0, 2\pi]$, com Z o disco unitário, então $\mathcal{D}$ é uma contração somente se $\|1 - a\|_{L^1} \leq \frac{1}{4\pi}$, onde a é definida por*

$$a(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(x, \theta) d\theta \quad (5.32)$$

Prova: Basta notar que $1 - \omega > 0$ e portanto, $\mathbf{c}(\rho)$ definido em (5.31) satisfaz

$$\mathbf{c}(\rho) = \int_Z dx \int_0^{2\pi} d\theta [1 - \omega(x, \theta)] \quad (5.33)$$

$$= \int_Z dx 2\pi \left(1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(x, \theta) d\theta \right) \quad (5.34)$$

$$= 2\pi \int_Z dx [1 - a(x)] \quad (5.35)$$

$$= 2\pi \|1 - a\|_{L^1} \quad (5.36)$$

O resultado segue do Teorema 5.1.2 com a condição $\mathbf{c}(\omega) \leq \frac{1}{2}$. $\square$

Corolário 5.1.2 *Seja $\mathcal{B}$ definido em (5.13), com a definido em (5.32) e $d = \mathcal{R}_\omega f$. Se $\omega(x, \theta) < 1$ para todo $(x, \theta) \in Z \times [0, 2\pi]$ então o método iterativo de ponto fixo, decorrente da equação integral (5.11), dado por*

$$f^{(k+1)} = \bar{f} + \mathcal{B}f^{(k)}, \quad \bar{f} = \frac{\mathcal{R}^{-1}d}{a} \quad (5.37)$$

converge, se $\|1 - a\|_{L^1} < \min_{x \in Z} a(x)/4\pi$ com Z o disco unitário.

Prova: De fato, como $\omega < 1$ e $a(x) \leq 1$ para todo $x \in Z$, então $\mathcal{B}f(x) \leq \mathcal{D}f(x)/a(x)$. Basta portanto estimar a norma do operador $\mathcal{D}/a$. Uma vez que $a(x) \geq \min_{y \in Z} a(y)$ segue de (5.30) a estimativa $\|\mathcal{B}\|_{L^2} \leq 2c(\rho)/\min_{x \in Z} a(x)$. Pelo

Corolário 5.1.1, $c(\rho) = 2\pi\|1 - a\|_{L^1}$ e a convergência da sequência de ponto fixo será garantida desde que $c(\rho) < \min_{x \in Z} a(x)/2$, de onde segue o resultado.

□

Nossa proposta de método iterativo, para a resolução da parte linear $\mathcal{R}_\omega f = d$ com ω conhecido, será como no Corolário 5.1.2. Note que podemos escrever

$$f^{(k+1)} = \frac{\mathcal{R}^{-1}d}{a} + \frac{\mathcal{D}f^k}{a} - \frac{(1-a)}{a}f^{(k)} \quad (5.38)$$

$$= \frac{\mathcal{R}^{-1}d}{a} + \frac{f^k - \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega f^{(k)}}{a} - \frac{(1-a)}{a}f^{(k)} \quad (5.39)$$

$$= f^{(k)} + \frac{1}{a}\mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_\omega f^{(k)}) \quad (5.40)$$

$$\equiv f^{(k)} + e^{(k)} \quad (5.41)$$

com $e^{(k)} = \mathcal{E}f^{(k)}$ e o operador $\mathcal{E}$ definido por

$$\mathcal{E}f = \mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_\omega f)/a. \quad (5.42)$$

Vale notar que, nas hipóteses do Corolário 5.1.2, $\lim_{k \rightarrow \infty} f^{(k)} = f^*$ com $\mathcal{R}_\omega f^* = d$, e portanto $\lim_{k \rightarrow \infty} e^{(k)} = 0$. É fácil ver que a direção $e^{(k)}$ satisfaz

$$e^{(k)} = \mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_\omega f^{(k)}) = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega(f^* - f^{(k)}) = -\mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega r^{(k)} \quad (5.43)$$

e portanto o resíduo $r^{(k)} = f^{(k)} - f^*$ verifica igualdade

$$r^{(k+1)} = f^k + e^{(k)} - f^* \quad (5.44)$$

$$\stackrel{\text{Eq. (5.43)}}{=} r^{(k)} - \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega r^{(k)} \quad (5.45)$$

$$= \mathcal{R}^{-1}(\mathcal{R} - \mathcal{R}_\omega)r^{(k)} \quad (5.46)$$

$$= \mathcal{D}r^{(k)} \quad (5.47)$$

Por (5.13) segue,

$$\|r^{(k)}\|_{L^2} \leq 2c(\rho)\|r^{(k)}\|_{L^2} \quad (5.48)$$

com $c(\rho)$ definido em (5.31).

Estamos interessados em melhorar a taxa de convergência obtida em (5.48). Para isso, vamos nos apoiar no trabalho de Guy *et al.* [53], que propõe a introdução de parâmetros $\alpha = \alpha(f)$, $\beta = \beta(f)$ na equação integral (5.11) da seguinte forma

$$f = \beta(f)\bar{f} + \alpha(f)\mathcal{B}f \quad (5.49)$$

com a propriedade de β e α serem idênticos à unidade na solução f . Isto gera a seguinte sequência de ponto fixo

$$f^{(k)} = \beta_k \bar{f} + \alpha_k \mathcal{B}f^{(k)}, \quad \alpha_k = \alpha(f^{(k)}), \quad \beta_k = \beta(f^{(k)}) \quad (5.50)$$

Os parâmetros (β_k, α_k) são obtidos com uma estratégia de otimização adequada. Este trabalho foi generalizado em [55], em um contexto diferente. Nossa abordagem nesta tese seguirá uma estratégia semelhante. Com efeito, começando de (5.41), propomos a introdução de um parâmetro de relaxação α_k tal maneira que nosso método seja

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \alpha_k e^{(k)}, \quad e^{(k)} = \mathcal{E}f^{(k)} \quad (5.51)$$

Vamos escolher α_k como o parâmetro que minimiza a direção $e^{(k+1)} = \mathcal{E}f^{(k+1)}$, isto é, que torna consistente o ponto $f^{(k+1)}$ com a equação integral (5.11). Em termos de variação, procuramos um α que torna nula a variação do operador $f^{(k+1)} - \bar{f} - \mathcal{B}f$, ou seja

$$0 = \delta \|f^{(k+1)} - \bar{f} - \mathcal{B}f^{(k+1)}\|_{L^2}^2 \quad (5.52)$$

$$= \delta \|f^{(k)} + \alpha e^{(k)} - \bar{f} - \mathcal{B}(f^{(k)} + \alpha e^{(k)})\|_{L^2}^2 \quad (5.53)$$

$$= \delta \|\mathcal{V}f^{(k)} + \alpha(e^{(k)} - q^{(k)})\|_{L^2}^2 \quad (5.54)$$

onde δ é notação empregada para variação de funcionais (veja [55]), $q^{(k)} = \mathcal{B}e^{(k)}$ e $\mathcal{V}$ a notação para o operador variacional

$$\mathcal{V}f = f - \bar{f} - \mathcal{B}f \quad (5.55)$$

Segue então que o parâmetro que buscamos é

$$\alpha_k = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}} \|\mathcal{V}f^{(k)} + \beta(e^{(k)} - q^{(k)})\|_{L^2}^2 \quad (5.56)$$

É fácil ver, minimizando uma quadrática, que a solução do problema acima é dada por

$$\alpha_k = -\frac{\langle \mathcal{V}f^{(k)}, e^{(k)} - q^{(k)} \rangle_{L^2}}{\|e^{(k)} - q^{(k)}\|_{L^2}^2}, \quad (5.57)$$

Pela definição do operador $\mathcal{B}$ em (5.12) temos

$$q^{(k)} = \mathcal{B}e^{(k)} = e^{(k)} - a^{-1} \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R}_\omega e^{(k)} \equiv e^{(k)} - \mathcal{T}^{(k)} e^{(k)} \quad (5.58)$$

com $\mathcal{T}$ o operador definido por

$$\mathcal{T}f = \frac{1}{a} \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R}_\omega f. \quad (5.59)$$

É fácil ver também que $\mathcal{V}f^{(k)} = -e^{(k)}$, de onde segue

$$\alpha_k = \frac{\langle e^{(k)}, \mathcal{T}e^{(k)} \rangle_{L^2}}{\|\mathcal{T}e^{(k)}\|_{L^2}^2}. \quad (5.60)$$

A seqüência (α_k) verifica $\lim \alpha_k = 1$. Neste caso, o resíduo $r^{(k)} = f^{(k)} - f^*$ satisfaz

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} + \alpha_k e^{(k)} \quad (5.61)$$

$$\stackrel{\text{Eq. (5.43)}}{=} r^{(k)} - \alpha_k \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R}_\omega r^{(k)} \quad (5.62)$$

$$= \mathcal{R}^{-1} (\mathcal{R} - \alpha_k \mathcal{R}_\omega) r^{(k)} \quad (5.63)$$

$$\stackrel{\text{Eq. (3.5)}}{=} \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R}_{\rho_k} r^{(k)} \quad (5.64)$$

$$\equiv \mathcal{D}_k r^{(k)} \quad (5.65)$$

onde

$$\mathcal{D}_k = \mathcal{R}^{-1} \mathcal{R}_{\rho_k}, \quad \rho_k = 1 - \alpha_k \omega, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k = \rho \quad (5.66)$$

Pela mesma discussão feita entre as equações (5.16) e (5.30), obtemos a seguinte estimativa para o operador $\mathcal{D}_k$ definido acima, e para a taxa de convergência da seqüência $(f^{(k)})$ em (5.51)

$$\|\mathcal{D}_k\|_{L^2} \leq 2c(\rho_k) \quad \Rightarrow \quad \|r^{(k+1)}\|_{L^2} \leq 2c(\rho_k) \|r^{(k)}\|_{L^2} \quad (5.67)$$

com $c(\rho_k)$ definido em (5.31). Como $\rho_k = \rho + (1 - \alpha_k)\omega$, segue da definição de c que

$$c(\rho_k) = c(\rho) + |1 - \alpha_k|c(\omega) > c(\rho) \quad (5.68)$$

implicando em uma taxa de convergência maior para nossa seqüência relaxada (5.51). Note ainda que, se escolhermos $\alpha_k = 1$, nossa seqüência se reduz à seqüência não relaxada (5.41).

Nossa estratégia iterativa está resumida no Método 5.1.1. Vale notar que o ponto inicial $f^{(0)}$, para (5.51), pode ser qualquer. Para futuras comparações com o algoritmo EM da equação (5.7), que converge para um maximizador da verossimilhança somente se $f^{(0)} > 0$ [25], devemos considerar um ponto inicial uniforme $f^{(0)}(x) = \epsilon > 0$ para todo x . Uma vez que estes algoritmos são convergentes, o nosso na condição do Corolário 5.1.2, o critério de parada não é levado em conta, e sim substituído pelo número de iterações, que passa a ser um parâmetro.

Método 5.1.1 Método iterativo para resolução da parte linear

Considere $d = \mathcal{R}_\omega f$, com um peso conhecido $\omega(x, \theta) < 1$ para todo $(x, \theta) \in Z \times [0, 2\pi]$, com Z o disco unitário. Seja $N \in \mathbb{Z}$ um número de iterações e $\delta > 0$ uma constante arbitrariamente pequena.

- (1) Calcule o fator de correção a , descrito pela equação (5.32)
 - (2) Tome $f^{(0)}(x) = \delta$ para todo $x \in Z$
 - (3) Para $k = 1, 2, \dots, N$, faça
 - (a) Avalie a direção residual $e^{(k)} = \mathcal{E}f^{(k)}$, com $\mathcal{E}$ descrito em (5.42)
 - (b) Calcule o passo α_k dado por (5.57)
 - (c) Atualize a aproximação $f^{(k+1)}$ conforme (5.51)
-

5.2 Resolução da parte não linear

Para a resolução desta parte, voltamos ao Problema 5.1, considerando $f \in \mathcal{U}$ fixo. Aqui, o peso $\omega = \omega(\mu)$ já não será mais considerado qualquer e sim, levaremos em conta principalmente os casos exponenciais de spect e xfct. Assim sendo, para o caso de spect, uma das primeiras estratégias, e mais simples, é de Bronnikov [6] apresentada a seguir.

Considere o peso ω em spect. Assuma que exista $f_1 = f_1(x)$ tal que $f = e^{-f_1}$ (é o caso quando $f > 0$, onde $f_1 = -\ln f$). Neste caso, os dados em

spect satisfazem

$$d(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi(\theta)=t} e^{-f_1(x)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta)} dx \quad (5.69)$$

$$= \int_{x \cdot \xi(\theta)=t} [1 - f_1(x) - \mathcal{D}\mu(x, \theta)] dx + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.70)$$

onde ε é o resto da expansão da exponencial. Como $\xi(\theta + \pi) = -\xi(\theta)$, segue da equação acima que

$$d(-t, \theta + \pi) = \int_{x \cdot \xi(\theta)=t} [1 - f_1(x) - \mathcal{D}\mu(x, \theta + \pi)] dx + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.71)$$

Portanto, se $g(t, \theta) = d(t, \theta) - d(-t, \theta + \pi)$ então g satisfaz

$$g(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi=t} [\mathcal{D}\mu(x, \theta + \pi) - \mathcal{D}\mu(x, \theta)] dx + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.72)$$

$$\equiv \int_{x \cdot \xi=t} c_\mu(x, \theta) dx + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.73)$$

$$\equiv Q_{\text{spect}} \mu(t, \theta) + \varepsilon(t, \theta), \quad (5.74)$$

com

$$c_\mu(\cdot, \theta) = \mathcal{D}\mu(\cdot, \theta + \pi) - \mathcal{D}\mu(\cdot, \theta). \quad (5.75)$$

O operador Q_{spect} é linear em μ pois $\mathcal{D}$ o é. Desprezando o resíduo ε , resta o problema $g \approx Q_{\text{spect}} \mu$ a ser resolvido. Bronnikov usa uma estratégia de projeções ortogonais, como ART, para obter uma estimativa para μ a partir de g . A vantagem imediata desta estratégia é a independência do método em relação à função f , ao custo de supor que o resíduo ε é pequeno o suficiente para fazer valer a expansão em (5.70). Note que a existência da função f_1 não está garantida uma vez que f pode ser nula em alguns pontos de seu domínio Z . Isto pode ser contornado com a introdução de um parâmetro $\delta > \min_{x \in Z} f(x)$ tal que $f_1(x) = f(x) + \delta$. Se $f_2 = f_2(x)$ é tal que $f_1(x) = e^{-f_2(x)}$ então $d = \mathcal{R}_\omega f$ implica em $d_1 = \mathcal{R} f_1$ com $d_1 = d - \mathcal{R}_\omega \delta$, e o método acima pode ser aplicado para f_1 .

Podemos estender imediatamente a estratégia de Bronnikov acima, para o caso de xfct. De fato, note que, tal como em (5.70), em xfct temos

$$d(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi=t} dx \int_{\Gamma} d\gamma e^{-f_1(x)} e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} \quad (5.76)$$

$$= \int_{x \cdot \xi=t} dx \int_{\Gamma} d\gamma [1 - f_1(x) - \mathcal{D}\lambda(x, \theta) - \mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)] + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.77)$$

Portanto, a função $g(t, \theta) = d(t, \theta) - d(-t, \theta + \pi)$ satisfaz, com c_μ e c_λ definidos em (5.75),

$$g(t, \theta) = \int_{\Omega} dx \int_{\Gamma} d\gamma [c_\lambda(x, \theta) + c_\mu(x, \theta + \gamma)] + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.78)$$

$$\equiv Q_{\text{xfct}}\mu(t, \theta) + \varepsilon(t, \theta) \quad (5.79)$$

onde λ é conhecido previamente. Novamente, uma estratégia iterativa baseada em projeções pode ser usada para resolver $g \approx Q_{\text{xfct}}\mu$, tirando vantagem da linearidade de Q_{xfct} .

Bronnikov propôs ainda, em [4], que usando a solução de norma mínima $f = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}^\dagger d$ para μ supostamente conhecido, e usando o fato de $\mathcal{P}_\omega = \mathcal{R}_\omega \mathcal{R}_\omega^\dagger$ ser o projetor ortogonal na imagem de $\mathcal{R}_\omega$, então μ e f são consistentes com os dados d somente se $\mathcal{P}_\omega^\perp d = 0$, onde $\mathcal{P}_\omega^\perp = \mathcal{I} - \mathcal{P}_\omega$ é o projetor ortogonal no núcleo de $\mathcal{R}_\omega$. Isto gera um novo sistema de equações não lineares, a saber

$$\mathcal{P}_{\omega(\mu)}^\perp d = 0 \quad (5.80)$$

que é resolvido pelo método de Newton para μ . Como é bem sabido, o método de Newton precisa de derivadas para a construção da direção. Bronnikov, apenas para spect, usa a discretização (5.3) e a fórmula de Golub-Pereyra [45] para avaliar a derivada do projetor $\mathcal{P}_\omega^\perp = \mathcal{I} - \mathcal{A}_\omega \mathcal{A}_\omega^\dagger$ (versão discreta). Natterer, ainda em spect, em sem a necessidade de discretizações encontra uma condição de consistência que permite encontrar μ a partir dos dados, sem a necessidade de conhecer f ; discutido em [25].

5.2.1 Diferenciação de Fréchet

Nossa intenção nesta seção é avaliar as derivadas necessárias para aplicar o método de Newton em (5.80). Vamos considerar $L(\mathbf{U}, \mathbf{V})$ o espaço dos operadores lineares de $\mathbf{U}$ em $\mathbf{V}$, munindo-os com a norma euclidiana. Considere os operadores $\ell: \mathbf{U} \rightarrow L(\mathbf{U}, \mathbf{V})$ e $\ell_\dagger: \mathbf{U} \rightarrow L(\mathbf{V}, \mathbf{V})$ definidos por

$$\ell(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}, \quad \ell_\dagger(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}^\dagger \quad (5.81)$$

onde a pseudoinversa (veja [7]) é tomada em relação a μ fixo. Seja $\ell_p: \mathbf{U} \rightarrow L(\mathbf{V}, \mathbf{V})$ definido por

$$\ell_p(\mu) = \ell(\mu) \ell_\dagger(\mu). \quad (5.82)$$

Estamos interessados em definir a derivada de Fréchet de ℓ_p , no ponto μ , como sendo o operador linear $\partial\ell_p(\mu): \mathcal{U} \rightarrow L(\mathcal{V}, \mathcal{V})$ que satisfaz

$$\ell_p(\mu + h) - \ell_p(\mu) = \partial\ell_p(\mu)h + o(\|h\|^2), \quad \forall h \in \mathcal{U}. \quad (5.83)$$

A definição de ℓ_p , em relação a $\mu \in \mathcal{U}$ fixo, é tomada no sentido de produto de operadores lineares. A regra de diferenciação para o produto é de fato válida (veja [3]) sendo ela

$$\partial\ell_p(\mu)h = \ell(\mu)[\partial\ell_{\dagger}(\mu)h] + [\partial\ell(\mu)h]\ell_{\dagger}(\mu), \quad \forall h \in \mathcal{U}. \quad (5.84)$$

Segue então, para a definição de ℓ e $\ell_{\dagger}$ que

$$\partial\ell_p(\mu)h = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}[\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^{\dagger}h] + [\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}h]\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^{\dagger}, \quad \forall h \in \mathcal{U} \quad (5.85)$$

Sendo válida a propriedade $L_{\omega}\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger} = \mathcal{B}_{\omega}$ com $L_{\omega} = \mathcal{B}_{\omega}\mathcal{R}_{\omega}$ (pois $\mathcal{B}_{\omega}$ é o adjunto de $\mathcal{R}_{\omega}$), a regra do produto (5.84) gera, diferenciando em μ ,

$$L_{\omega(\mu)}[\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^{\dagger}h] + [\partial L_{\omega(\mu)}h]\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^{\dagger} = [\partial\mathcal{B}_{\omega(\mu)}h], \quad \forall h \in \mathcal{U} \quad (5.86)$$

Novamente, a regra do produto (5.84) para $L_{\omega(\mu)}$ implica

$$\partial L_{\omega(\mu)}h = \mathcal{B}_{\omega(\mu)}[\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}h] + [\partial\mathcal{B}_{\omega(\mu)}h]\mathcal{R}_{\omega(\mu)}, \quad \forall h \in \mathcal{U} \quad (5.87)$$

Juntando (5.86) e (5.87) obtemos

$$\mathcal{R}_{\omega(\mu)}[\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^{\dagger}h] = \mathcal{B}_{\omega}^{-1}(\partial\mathcal{B}_{\omega}h - \mathcal{B}_{\omega}[\partial\mathcal{R}_{\omega}h]\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger} - [\partial\mathcal{B}_{\omega}h]\mathcal{R}_{\omega}\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger}) \quad (5.88)$$

$$= \mathcal{B}_{\omega}^{-1}\{[\partial\mathcal{B}_{\omega}h](\mathcal{I} - \mathcal{R}_{\omega}\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger})\} + [\partial\mathcal{R}_{\omega}h]\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger} \quad (5.89)$$

$$= \mathcal{B}_{\omega}^{-1}\partial\mathcal{B}_{\omega(\mu)}h\mathcal{P}_{\omega(\mu)}^{\perp} + [\partial\mathcal{R}_{\omega}h]\mathcal{R}_{\omega}^{\dagger} \quad (5.90)$$

Assim, segue de (5.90) e (5.85) que

$$\partial\ell_p(\mu)h = \mathcal{B}_{\omega(\mu)}^{-1}[\partial\mathcal{B}_{\omega(\mu)}h]\mathcal{P}_{\omega(\mu)}^{\perp}, \quad \forall h \in \mathcal{U}. \quad (5.91)$$

Como $\mathcal{B}_{\omega} = \mathcal{R}_{\omega}^*$ e $\ell_p(\mu) = \mathcal{P}_{\omega(\mu)}$ então temos finalmente

$$\partial\mathcal{P}_{\omega(\mu)}h = \mathcal{B}_{\omega(\mu)}^{-1}[\partial\mathcal{R}_{\omega(\mu)}^*h]\mathcal{P}_{\omega(\mu)}^{\perp}. \quad (5.92)$$

Uma vez que

$$\partial(\mathcal{P}_{\omega(\mu)}d)(\mu)h = (\partial\mathcal{P}_{\omega(\mu)}h)d, \quad (5.93)$$

da equação (5.92) e da propriedade $\mathcal{B}_\omega \mathcal{P}_\omega = \mathcal{B}_\omega$, resulta que, para avaliar uma direção de Newton z , no método de Bronnikov satisfazendo $[\partial(\mathcal{P}_{\omega(\mu)}d)]z = \mathcal{P}_{\omega(\mu)}^\perp d$, devemos resolver o sistema

$$[\partial \mathcal{B}_{\omega(\mu)} z] \mathcal{P}_{\omega(\mu)}^\perp d = \mathcal{B}_\omega \mathcal{P}_\omega^\perp d = \mathcal{B}_\omega d - \mathcal{B}_\omega \mathcal{P}_\omega d = 0. \quad (5.94)$$

Tal sistema, para sua avaliação, precisa apenas da derivada da transformada de Radon $\mathcal{R}_\omega$ em relação a μ (ou de $\mathcal{B}_\omega$) e também da construção da pseudoinversa $\mathcal{R}_\omega^\dagger$ para a avaliação de $\mathcal{P}_\omega^\perp$. A seguir, concentraremos em encontrar a derivada de $\mathcal{R}_\omega$.

Vamos voltar novamente ao Problema 5.1 e considerar o operador $y(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)} f$ de sorte que $\mathcal{Y}(\mu) = y(\mu) - d$, com f fixo. Queremos agora avaliar a derivada de Fréchet de $y: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$, ou seja um operador linear $T_\mu: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$ satisfazendo

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{\|y(\mu + h) - y(\mu) - T_\mu h\|}{\|h\|} = 0, \quad h \in \mathbf{U} \quad (5.95)$$

onde as normas no nominador/denominador são referentes à norma dos espaços $\mathbf{U}$ e $\mathbf{V}$, denotadas por $\|\cdot\|_U$ e $\|\cdot\|_V$ respectivamente. O seguinte Teorema apresenta o formato do operador T_μ para os casos de spect e xfct.

Teorema 5.2.1 *Seja $y(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)} f$, com $f \in \mathbf{U}$ fixo. A derivada de Fréchet de y é dada por*

spect:

$$T_\mu h(t, \theta) = - \int_{x \cdot \xi = t} dx f(x) \omega_\mu(x, \theta) \mathcal{D}h(x, \theta) \quad (5.96)$$

xfct:

$$T_\mu h(t, \theta) = - \int_{x \cdot \xi = t} dx f(x) \omega_\lambda(x, \theta) \int_\Gamma d\gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma) \mathcal{D}h(x, \theta + \gamma) \quad (5.97)$$

onde $\omega_a = e^{-\mathcal{D}a}$ para $a \in \mathbf{U}$.

Prova: Vamos começar com o caso de spect, sendo o caso de xfct idêntico. Note que, sendo $\mathcal{D}$ um operador linear, $\omega = \omega(\mu)$ (como função de μ) satisfaz, para todo $h \in \mathbf{U}$

$$\omega_{\text{spect}}(\mu + h) - \omega_{\text{spect}}(\mu) = e^{-\mathcal{D}(\mu+h)} - e^{-\mathcal{D}\mu} = e^{-\mathcal{D}\mu} [e^{-\mathcal{D}h} - 1] \quad (5.98)$$

com os argumentos omitidos por simplicidade de notação¹. Como existe $\hat{z} \in Z \times [0, 2\pi]$ tal que

$$e^{-\mathcal{D}h(z)} = 1 - \mathcal{D}h(z) + \frac{1}{2}\mathcal{D}h(\hat{z})^2 \quad (5.99)$$

segue

$$\omega_{\text{spect}}(\mu + h) - \omega_{\text{spect}}(\mu) = e^{-\mathcal{D}\mu}[-\mathcal{D}h + r(h)], \quad (5.100)$$

com $r(h) = \frac{1}{2}\mathcal{D}h(\hat{z})^2 \in \mathbf{Q}$ o resto em $\hat{z}$. Portanto temos

$$y(\mu + h) - y(\mu) = \int_{\Omega} f [\omega_{\text{spect}}(\mu + h) - \omega_{\text{spect}}(\mu)] \quad (5.101)$$

$$= \int_{\Omega} f e^{-\mathcal{D}\mu}[-\mathcal{D}h + r(h)] \quad (5.102)$$

$$= - \int_{\Omega} f \omega_{\mu} \mathcal{D}h + \int_{\Omega} f r(h) \omega_{\mu} \quad (5.103)$$

$$\equiv T_{\mu}h + \tilde{y}(\mu) \quad (5.104)$$

Como $\mathcal{D}$ é limitada, existe uma constante positiva C_1 tal que $\|r(h)\|_Q \leq C_1\|h\|_U^2$ onde $\|\cdot\|_Q$ é uma norma no espaço dos pesos $\mathbf{Q}$ (veja Seção 2.4). Ainda, $\tilde{y}(\mu) \in \mathbf{V}$ satisfaz, para alguma constante C_2

$$|\tilde{y}(\mu)| \leq C_2\|r(h)\|_Q|y(\mu)| \Rightarrow \|\tilde{y}(\mu)\|_V \leq C_2\|r(h)\|_Q\|y(\mu)\|_V \quad (5.105)$$

de onde resulta

$$\|y(\mu + h) - y(\mu) - T_{\mu}h\|_V = \|\tilde{y}(\mu)\|_V \leq C_1C_2\|y(\mu)\|_V\|h\|_U^2 \quad (5.106)$$

Sendo $\|y(\mu)\|$ limitado, o limite de $h \rightarrow 0$ acima implica que T_{μ} é derivada de Fréchet.

Para o caso de xfct, usando a notação $\omega(a) = \omega_a = e^{-\mathcal{D}a}$, temos $\omega_{\text{xfct}}(\mu) = \omega(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \omega(\mu)$ e portanto, pelos mesmos motivos de (5.98)-(5.100)

$$\omega_{\text{xfct}}(\mu + h) - \omega_{\text{xfct}}(\mu) = \omega(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma [\omega(\mu + h) - \omega(\mu)] \quad (5.107)$$

$$= \omega(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \omega(\mu) [-\mathcal{D}h + r(h)] \quad (5.108)$$

¹Aqui usamos a propriedade válida para operadores: $e^{A+B} = e^A e^B$ desde que A e B comutem entre si. No nosso caso, A e B são o mesmo operador, representado por $\mathcal{D}$ (operador divergente). No entanto, para operadores gerais que não comutem, tem-se $e^{A+B} \neq e^A e^B$.

resultando em

$$y(\mu + h) - y(\mu) = \int_{\Omega} f [\omega_{\text{xfct}}(\mu + h) - \omega_{\text{xfct}}(\mu)] \quad (5.109)$$

$$= - \int_{\Omega} f \omega_{\lambda} \int_{\Gamma} d\gamma \omega_{\mu} \mathcal{D}h + \tilde{y}(\mu) \quad (5.110)$$

onde

$$\tilde{y}(\mu)(t, \theta) = \int_{\Omega} f(x) \omega_{\lambda}(x, \theta) \int_{\Gamma} d\gamma \omega_{\mu}(x, \theta + \gamma) r(h)(\hat{z}_{\gamma}) \quad (5.111)$$

com $\hat{z}_{\gamma} \in Z \times [0, 2\pi]$. Tal como em spect aqui temos $\|\tilde{y}(\mu)\|_V = o(\|h\|_U^2)$ e a equação (5.106) segue com T_{μ} definido em (5.110), como queríamos demonstrar. $\square$

O Teorema acima afirma que a derivada do operador $\mathcal{R}_{\omega}$ em μ é dada por

$$\partial \mathcal{R}_{\omega_{\text{spect}}(\mu)} = -\mathcal{R}_{S_{\mu}}, \quad (5.112)$$

agindo sobre $h \in \mathbf{U}$ da seguinte forma

$$\partial_{\mu} \mathcal{R}_{\omega(\mu)} h = -\mathcal{R}_{S_{\mu}h} \in L(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \quad (5.113)$$

onde $S_{\mu}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ é um operador, definido no caso de spect por

$$S_{\mu}h(x, \theta) = \omega_{\mu}(x, \theta) \mathcal{D}h(x, \theta), \quad h \in \mathbf{U} \quad (5.114)$$

e no caso de xfct

$$S_{\mu}h(x, \theta) = \omega_{\lambda}(x, \theta) \int_{\Gamma} d\gamma \omega_{\mu}(x, \theta + \gamma) \mathcal{D}h(x, \theta + \gamma), \quad h \in \mathbf{U}. \quad (5.115)$$

A linearidade de $\mathcal{D}$ implica na linearidade de S_{μ} e, da propriedade (3.5) (veja pág.26), na linearidade da derivada (5.112). Analogamente, a retro-projeção generalizada atenuada possui derivada de Fréchet dada por

$$\partial \mathcal{B}_{\omega(\mu)} = -\mathcal{B}_{S_{\mu}}: \mathbf{U} \rightarrow L(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \quad (5.116)$$

5.2.2 Método de Newton

A direção de Newton z , para o método de Bronnikov, satisfazendo (5.94), resulta por (5.112) e (5.116), na seguinte equação

$$\mathcal{B}_{S_{\mu}z} \mathcal{P}_{\omega}^{\perp} d = 0, \quad \mathcal{P}^{\perp} d \in \mathbf{V} \quad (5.117)$$

Método 5.2.1 Resolução da parte não linear segundo Bronnikov

(a) Dados $\mu^{(0)} \in \mathbf{U}$, $f \in \mathbf{U}$, $\epsilon > 0$ e $d = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}f$.

(b) Para $k = 0, 1, \dots$

(b.1) Avalie o peso $\omega_k \equiv \omega(\mu^{(k)})$

• Se $\|d - \mathcal{R}_{\omega_k}f\| < \epsilon$ então páre.

(b.2) Calcule a projeção ortogonal $p_k = \mathcal{P}_{\omega_k}^\perp d$

(b.3) Encontre $z^{(k)} \in \mathbf{U}$ tal que: $W_k = S_\mu z^{(k)} \in \mathbf{Q}$ e $\mathcal{B}_{W_k}p_k = 0$, com S_μ definido em (5.114)

(b.4) Atualize: $\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} + z^{(k)}$

Isto significa que o algoritmo de Bronnikov, para o caso de spect (embora não apresentado desta forma em seu artigo original), pode ser resumido como no Método 5.2.1.

Vale notar que este método pode igualmente ser aplicado ao caso de xfct, apenas mudando o operador S_μ em (5.115). Suas grandes dificuldades residem no cálculo da projeção ortogonal no passo b.2, e na resolução do sistema no passo b.3. Neste último, uma técnica de programação não linear deve ser empregada.

Nesta tese, nossa abordagem segue uma idéia semelhante à de Bronnikov, porém sem a construção de uma pseudoinversa, mas sim levando em conta as propriedades interessantes da derivada de $\mathcal{R}_{\omega(\mu)}$. De fato, se ao invés de usar a condição de consistência (5.80) optamos por aplicar o método de Newton no sistema

$$\mathcal{Y}(\mu) = y(\mu) - d = 0, \quad y(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)}f - d \quad (5.118)$$

então a direção de Newton z deve satisfazer

$$T_\mu z = d - y(\mu), \quad T_\mu = \partial y(\mu) = \partial \mathcal{R}_{\omega(\mu)}(\cdot)f \quad (5.119)$$

com T_μ o operador do Teorema 5.2.1 ou, por (5.112) (trocando o sinal negativo)

$$\mathcal{R}_{S_\mu}z = y(\mu) - d \quad (5.120)$$

Vamos explorar o lado esquerdo de (5.120) de modo que sua resolução em z seja fácil. Isto é feito de acordo com mudanças de variáveis no seguinte Teorema, cuja prova é deixada para o Apêndice A.6.

Teorema 5.2.2 *As derivadas de Fréchet em (5.96) e (5.97) (veja pág.78) são dadas por $T_\mu h = -\mathcal{R}_{W_\mu f} h$, onde $W_\mu: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ é um peso dado por*

spect:

$$W_\mu f(x, \theta) = \mathcal{D}\sigma_\theta(x, \theta + \theta), \quad \sigma_\theta(x) = f(x)\omega_\mu(x, \theta) \quad (5.121)$$

xfct:

$$W_\mu f(x, \theta) = \int_\Gamma \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta, \gamma}(x, \theta), \quad \sigma_{\theta, \gamma}(x) = f(x)\omega_\lambda(x, \theta)\omega_\mu(x, \theta) \quad (5.122)$$

onde $\omega_a(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a(x, \theta)}$ para $a \in \mathbf{U}$.

O sistema não linear (5.120) em z , resulta pelo Teorema 5.2.2, no seguinte sistema linear

$$\mathcal{R}_{W_\mu f} z = y(\mu) - d \quad (5.123)$$

Ora, o sistema linear acima pode ser resolvido por qualquer das técnicas aproximadas da Seção 4.3 e em particular pelo método iterativo apresentado na Seção 5.1

Podemos ir além e calcular a derivada de segunda ordem do operador $y(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)} f$. De fato, queremos $T_\mu^2: \mathbf{U} \rightarrow L(\mathbf{U}, \mathbf{V})$ tal que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|T_{\mu+h} - T_\mu - T_\mu^2 h\| / \|h\| = 0, \quad (5.124)$$

com $T_\mu^2 h \in L(\mathbf{U}, \mathbf{V})$, isto é, T_μ^2 é uma aplicação bilinear

$$\begin{array}{ccc} T_\mu^2: & \mathbf{U} \times \mathbf{U} & \rightarrow \mathbf{V} \\ & (h, z) & T_\mu^2(h, z) \end{array} \quad (5.125)$$

Mas, como $T_\mu = -\mathcal{R}_{W_\mu f}$ temos, para todo $z \in \mathbf{U}$

$$T_{\mu+h} z - T_\mu z = -(\mathcal{R}_{W_{\mu+h} f} z - \mathcal{R}_{W_\mu f} z) \quad (5.126)$$

$$= - \int_\Omega z [W_{\mu+h} f - W_\mu f] \quad (5.127)$$

Podemos tirar vantagem da definição de W_μ e obter o seguinte Teorema, cuja demonstração encontra-se no Apêndice A.7

Teorema 5.2.3 *A derivada de Fréchet de segunda ordem de $y(\mu) = \mathcal{R}_{\omega(\mu)} f$, em μ , é o operador bilinear T_μ^2 definido por $T_\mu^2(h, z) = \mathcal{R}_{L_\mu h} z$, onde $L_\mu: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ é definido por*

spect:

$$L_\mu h(x, \theta) = \mathcal{D}(\sigma_\theta \mathcal{D}h(\cdot, \theta))(x, \theta + \pi) \quad (5.128)$$

xfct:

$$L_\mu h(x, \theta) = \int_\Gamma \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}(\sigma_\theta \mathcal{D}h(\cdot, \theta + \gamma))(x, \theta) \quad (5.129)$$

com σ_θ definido no Teorema 5.2.2.

A consequência imediata do Teorema 5.2.3 é a aplicação de um método superior para encontrar a solução de $\mathcal{Y}(\mu) = 0$. De fato, pela expansão de Taylor de segunda ordem

$$\mathcal{Y}(\mu + z) \approx \mathcal{Y}(\mu) + \partial \mathcal{Y}(\mu)z + \frac{1}{2} \partial^2 \mathcal{Y}(\mu)(z, z) \quad (5.130)$$

$$= \mathcal{Y}(\mu) + \left[\partial \mathcal{Y}(\mu) + \frac{1}{2} \partial^2 \mathcal{Y}(\mu)z \right] z \quad (5.131)$$

Forçando a consistência em $\mu + z$, i.e $\mathcal{Y}(\mu + z) = 0$ teremos

$$\left[\partial \mathcal{Y}(\mu) + \frac{1}{2} \partial^2 \mathcal{Y}(\mu)z \right] z = -\mathcal{Y}(\mu) \quad (5.132)$$

Sem a inclusão da segunda derivada na equação acima, z seria a direção de Newton. Porém, considerando-a, (5.132) é um sistema não linear a ser resolvido em z . Uma estratégia para sua resolução consiste num método preditor-corretor da seguinte forma: considera z_{pred} uma estimativa da solução, sendo a direção clássica de Newton

$$\partial \mathcal{Y}(\mu) z_{\text{pred}} = -\mathcal{Y}(\mu) \quad (5.133)$$

Sua correção é feita, inserindo z_{pred} no operador do lado esquerdo de (5.132), para que tenhamos o seguinte sistema linear a ser resolvido

$$\left[\partial \mathcal{Y}(\mu) + \frac{1}{2} \partial^2 \mathcal{Y}(\mu) z_{\text{pred}} \right] z = -\mathcal{Y}(\mu) \quad (5.134)$$

É fácil ver que isto é equivalente ao sistema

$$\partial \mathcal{Y}(\mu) B_{\mathcal{Y}}(\mu) z = -\mathcal{Y}(\mu), \quad B_{\mathcal{Y}}(\mu) = \partial \mathcal{Y}(\mu)^{-1} \partial^2 \mathcal{Y}(\mu) \partial \mathcal{Y}(\mu)^{-1} \mathcal{Y}(\mu) \quad (5.135)$$

Esta estratégia é conhecida como método de Halley [2, 51]. No nosso caso onde $\mathcal{Y}(\mu) = y(\mu) - d$, podemos tirar vantagem das propriedades das derivadas de y nos Teoremas 5.2.2 e 5.2.3. Com efeito, (5.134) resulta em

$$-\mathcal{Y}(\mu) = \left[T_\mu + \frac{1}{2} T_\mu^2 z_{\text{pred}} \right] z \quad (5.136)$$

$$= \left[-\mathcal{R}_{W_\mu f} + \frac{1}{2} \mathcal{R}_{L_\mu z_{\text{pred}}} \right] z \quad (5.137)$$

$$= - \left[\mathcal{R}_{W_\mu f - \frac{1}{2} L_\mu z_{\text{pred}}} \right] z \quad (5.138)$$

isto é, z ainda satisfaz um sistema linear como o da Seção 5.1

$$\mathcal{R}_{\mathbb{W}_\mu} z = y(\mu) - d \quad (5.139)$$

com

$$\mathbb{W}_\mu(x, \theta) = W_\mu f(x, \theta) - \frac{1}{2} L_\mu z_{\text{pred}}(x, \theta) \quad (5.140)$$

e W_μ definido em (5.121)-(5.122) e L_μ definido em (5.128)-(5.129). O sistema (5.139) inclui o método clássico de Newton, bastando considerar $z_{\text{pred}} = 0$, isto é $\mathbb{W}_\mu = W_\mu f$.

Note que, se $\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} + z^{(k)}$ é a seqüência de iterados, então segue de (5.139) que $\mu^{(k+1)}$ pode ser encontrado resolvendo-se o sistema linear

$$\mathcal{R}_{\mathbb{W}(\mu^{(k)})} \mu^{(k+1)} = \mathcal{R}_{\mathbb{W}(\mu^{(k)})} \mu^{(k)} + y(\mu^{(k)}) - d \quad (5.141)$$

Vamos resumir nossa estratégia não linear no Método 5.2.2, inicialmente considerando $z_{\text{pred}} = 0$. Note que, a função f , sendo eventualmente nula em alguns pontos, faz com que não haja garantias de que o peso $\mathbb{W}_\mu f$ seja estritamente positivo. Portanto, para resolver o sistema (5.139), optamos pelo método de ponto fixo para a equação de Fredholm (5.11) (veja pág. 67), considerando $\mathcal{B} = \mathcal{D}$.

A inclusão do método de Halley no Método 5.2.2, não apresenta grande dificuldades, bastando apenas fazer z_{pred} ser solução do sistema linear

$$\mathcal{R}_{W_\mu^{(k)} f} z_{\text{pred}} = \mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})} - d \quad (5.142)$$

onde, novamente, um método aproximado ou iterativo como o da Seção 5.1 pode ser usado para encontrar z_{pred} .

Método 5.2.2 Método iterativo para a resolução da parte não linear

(a) Dados $\mu^{(0)} \in \mathbf{U}$, $f \in \mathbf{U}$, $\epsilon > 0$ e $d = \mathcal{R}_{\omega(\mu)} f$.

(b) Para $k = 0, 1, \dots$

(b.1) Avalie o peso $\omega_k \equiv \omega(\mu^{(k)})$

(b.2) Calcule o resíduo $\mathcal{Y}_k = \mathcal{R}_{\omega_k} f - d$

• Se $\|\mathcal{Y}_k\| < \epsilon$ então páre.

(b.3) Avalie o peso $\mathbb{W}_k \equiv W_{\mu^{(k)}} f$ conforme (5.121) ou (5.122)

(b.4) Calcule a transformada generalizada $p_k \equiv \mathcal{R}_{\mathbb{W}_k} \mu^{(k)}$

(b.5) Encontre $z^{(k)} \in \mathbf{U}$ tal que: $\mathcal{R}_{\mathbb{W}_k} z^{(k)} = p_k + \mathcal{Y}_k$

(b.6) Atualize: $\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} + z^{(k)}$

5.3 Um Método Alternado

Com os métodos desenvolvidos nas Seções 5.1 e 5.2, voltamos à equação (5.1) para definir os algoritmos L e N. Para o primeiro, lembramos que, tanto para spect quanto xfct temos válido

$$\mathbf{L}: \begin{cases} (a) \text{ Iterativa } \begin{cases} (1) \text{ ART: Eq. (5.6), pág. 67} \\ (2) \text{ EM: Eq. (5.7), pág. 67} \\ (3) \text{ Ponto fixo: Eq. (5.11), pág. 67} \\ (4) \text{ Norma mínima: } \mathcal{R}_{\omega(\mu)}^\dagger \end{cases} \\ (b) \text{ Analítica } \begin{cases} (1) \text{ Inversão exata: Seção 4.2, pág. 42} \\ (2) \text{ Eq. de Chang: Seção 4.3.1, pág. 55} \\ (3) \text{ Ridge functions: Seção 4.3.2, pág. 56} \end{cases} \end{cases}$$

e para o segundo,

$$\mathbf{N}: \begin{cases} (a) \text{ Bronnikov: Eq. (5.74)/pág. 75 ou (5.79)/pág. 76,} \\ (b) \text{ Newton: } \begin{cases} (1) \text{ Consistência 1: Eq.(5.80), pág. 76} \\ (2) \text{ Consistência 2: Eq.(5.118), pág. 81} \end{cases} \\ (c) \text{ EM: La Rivière em [49]} \end{cases}$$

Bronnikov, em spect [4], escolhe $\{\text{L.}(a.4), \text{N.}(b.1)\}$ para seu método alternado. La Rivière, em xfct, adota a estratégia de maximizar a verossimilhança, isto é $\{\text{L.}(a.2), \text{N.}(c)\}$, apoiando-se fortemente nos resultados de [48].

Embora as propostas de alternância possam ser muitas, vamos escolher $\{\text{L.}(a.3), \text{N.}(b.2)\}$ para nossa proposta alternada e detalhar seus passos a seguir, repetindo alguns passos dos Métodos 5.1.1 e 5.2.2 com o objetivo de não confundir notações referente aos índices. Lembramos ainda que nosso foco principal é xfct, embora o caso de spect possa ser igualmente abordado

Algoritmo alternado: xfct/spect

1. Dados $f^{(0)}, \mu^{(0)} \in \mathbf{U}$, $\lambda \in \mathbf{U}$ (em xfct), $\{I_a, I_\ell, I_n\} \in \mathbb{Z}$ e $d = \mathcal{R}_{\omega(\mu^*)} f^*$

2. Para $k = 0, 1, 2, \dots, I_a$

L: Use I_ℓ iterações do Método 5.1.1 para $\mu^{(k)}$ dado, e obtenha uma nova estimativa $f^{(k+1)}$. Ou seja:

- a.** Defina $f^{(k,0)} \equiv f^{(k)}$
- b.** Avalie $\omega_k \equiv \omega(\mu^{(k)})$
- c.** Calcule $a_k \equiv a_k(\omega_k)$, como em (5.32)
- d.** Para $j = 0, 1, \dots, I_\ell$
 - i)** Calcule $e^{(k,j)} = a_k^{-1} \mathcal{R}^{-1} (d - \mathcal{R}_{\omega_k} f^{(k,j)})$
 - ii)** Calcule $q^{(k,j)} = a_k^{-1} \mathcal{R}^{-1} (d - \mathcal{R}_{\omega_k} e^{(k,j)})$
 - iii)** Avalie $\alpha_{k,j} = -\langle e^{(k,j)}, q^{(k,j)} \rangle / \|q^{(k,j)}\|^2$
 - iv)** Defina $f^{(k+1,j+1)} = f^{(k,j)} + \alpha_{k,j} e^{(k,j)}$
- e.** Defina $f^{(k+1)} = f^{(k,I_\ell)}$

N: Use uma iteração do Método 5.2.2, para $f^{(k+1)}$ dado, e obtenha uma nova estimativa $\mu^{(k+1)}$. Ou seja:

- a.** Calcule $\mathbb{W}_k \equiv W_{\mu^{(k)}} f^{(k+1)}$ com W_μ definido em (5.122)/(5.121)
- b.** Avalie $p_k \equiv \mathcal{R}_{\mathbb{W}_k} \mu^{(k)} + \mathcal{R}_{\omega_k} f^{(k+1)} - d$
- c.** Defina $u^{(0)} = \lambda$
- d.** Para $j = 0, 1, \dots, I_n$
 - i)** Calcule $e^{(j)} = \mathcal{R}^{-1} (p_k - \mathcal{R}_{\mathbb{W}_k} u^{(j)})$
 - iv)** Defina $u^{(j+1)} = u^{(j)} + e^{(j)}$

- e. $\bar{\mu} = u^{(I_n)}$
- f. $\mu^{(k+1)} = F(\bar{\mu})$

3. Defina $\{f^{(I_a)}, \mu^{(I_a)}\}$ como aproximações de $\{f^*, \mu^*\}$

Em spect, a escolha do ponto inicial $\mu^{(0)}$ é de fato um problema pois não há uma referência para o modelo de atenuação. Uma estratégia é usar uma função uniforme com valor igual à média dos dados. Em xfct, sendo λ dado, e com propriedades físicas semelhantes às de μ , podemos tomar $\mu^{(0)} = \lambda$.

A convergência da sequência $f^{(k+1,j)} \rightarrow f^{(k+1)}$, com $j \rightarrow \infty$ é garantida desde que o peso $\omega(\mu^{(k)})$ esteja nas condições do Corolário 5.1.2, isto é, desde que a função peso a definida em (5.32) satisfaça

$$\|1 - a_k\|_{L^1} < \min_{x \in Z} a_k(x)/4\pi \quad (5.143)$$

O fator $\alpha_{k,j}$, acelerando a taxa de convergência, faz com que o número de iterações I_ℓ não precise ser tão grande na prática. Ainda, a inversa $\mathcal{R}^{-1}$ pode ser calculada usando o Método 2.1.1 ou um método iterativo superior caso tempo de execução do algoritmo não seja algo a ser levado em consideração.

Sobre a parte não linear, note que a estimativa $\mu^{(k+1)}$ é obtida através de $\mu^{(k+1)} = F(\bar{\mu})$, onde $F: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{U}$ é uma contração e $\bar{\mu}$ obtido resolvendo-se o passo (b.5) do Método 5.2.2. Por exemplo, em spect, Bronnikov usa $Fv(x) = \max\{v(x), 0\}$ e em xfct usaremos

$$Fv(x) = c \max\{\lambda(x)v(x), 0\} \quad (5.144)$$

com c uma constante positiva definida experimentalmente.

Capítulo 6

Simulações

As simulações apresentadas neste capítulo serão concentradas principalmente no caso de xfct, objetivo desta tese, utilizando a teoria desenvolvida nos Capítulos 3, 4 e 5. Vamos começar as ilustrações com um modelo sintético e discreto, para observar o comportamento da transformada generalizada atenuada de Radon e sua inversão com alguns métodos básicos. Para isso, vamos utilizar a discretização discutidas nas equações (5.3) (veja pág. 66), que afirmam que o modelo para a transformada generalizada $\mathcal{R}_\omega f = d$ é escrito como $\mathbf{A}_\omega \mathbf{f} = \mathbf{d}$, onde $\mathbf{A}_\omega$ é uma matriz dada por um produto de Hadamard [46] $\mathbf{A}_\omega = \mathbf{A} \odot \mathbf{W}$, e $\mathbf{W}$ uma matriz contendo informações sobre o peso ω . Considere o seguinte modelo em $\mathbb{R}^2$,

$$\mathbf{A}_\omega = \mathbf{A} \odot \mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ \frac{1}{2} & 3 \end{pmatrix} \odot \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{100}\mu} & e^{-2\mu} \\ e^{-\frac{\mu}{2}} & e^{-3\mu} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

Não há sentido físico no modelo acima nem tampouco uma representação para o caso de imagens; no entanto, a filosofia é a mesma, sendo $\mathbf{f}$ a imagem que queremos reconstruir, com $\mathbf{A}$ e $\mathbf{A}_\omega$ idealizações discretas de $\mathcal{R}$ e $\mathcal{R}_\omega$.

A solução que buscamos, tanto para o caso atenuado quanto não atenuado é $\mathbf{f}^* = (1, 1)^T$. A matriz $\mathbf{A}$ é inversível, no entanto, podemos observar que para um parâmetro μ grande, a matriz $\mathbf{A}_\omega$ se torna muito mal condicionada. É fácil notar que $\lim_{\mu \rightarrow \infty} \mathbf{W} = 0$ e $\lim_{\mu \rightarrow \infty} \mathbf{d}(\mu) = 0$, onde $\mathbf{d}(\mu) = \mathbf{A}_\omega \mathbf{f}$. Portanto, existe um μ_0 a partir do qual a matriz $\mathbf{A}_\omega$ se torna mal condicionada e a solução do sistema atenuado deve ser procurada no sentido de quadrados mínimos. O valor de μ_0 garante que $\mathbf{A}^{-1}$ aproxima a inversa de $\mathbf{A}_\omega$, isto é $\|\mathbf{I} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_\omega\| < 1$. A Figura 6.1 ilustra as retas determinadas pe-

los sistemas $Af = d$ (em linha cheia) e $A_\omega f = d$ para um μ suficientemente grande (em linha tracejada). Vamos variar o parâmetro μ entre $[0, 100]$ com um passo $\Delta\mu = 0.1$ e usar a inversa de A para determinar a solução do sistema atenuado. Isto gera a seqüência de pontos $\tilde{f}_\mu \equiv A^{-1}d(\mu)$ apresentada na figura, em quadrados e com a ordem crescente de μ indicada pelas flechas. Na parte (a) da figura, os valores de μ são menores que o valor crítico $\mu_0 = 0.6$, sendo o oposto na parte (b) onde a solução numérica do sistema atenuado é apresentada em círculos. O exemplo ilustra o comportamento da aproximação $\tilde{f}_\mu$ para o sistema atenuado. O preço em se aproximar a solução de $d = \mathcal{R}_\omega f$ por $\tilde{f}_\mu = \mathcal{R}^{-1}d$ é dado pela magnitude do parâmetro μ . Os valores altos de μ foram setados propositalmente; na prática de `xfct` (e mesmo em `spect`) estes valores não crescem tanto. Obviamente, quanto menor o parâmetro, melhor a aproximação $\tilde{f}_\mu$.

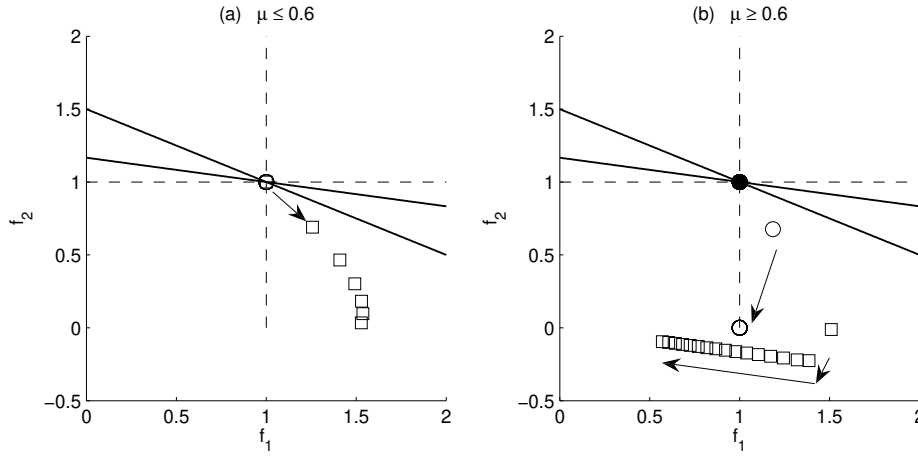


Figura 6.1: Inversa de A aplicada ao sistema atenuado $d(\mu) = A_\omega f$ gerando uma aproximação $\tilde{f}_\mu$. Em quadrados está a seqüência de aproximações $\tilde{f}_\mu$ com $0 \leq \mu \leq 0.6$ na parte (a) e $0.6 \leq \mu \leq 100$ na parte (b). A ordem de (f_μ) está indicada pelas flechas. Veja texto para mais detalhes.

Na figura 6.2 vemos uma comparação dos métodos iterativos discutidos no Capítulo 5 para o caso do sistema 2×2 (6.1), considerando $\mu = 0.4$. A parte (a) compara ART (veja Eq. (5.6)) com EM (veja Eq. (5.7)) após 6 iterações. Observam-se as principais características destes métodos, como o 'zig-zag' de ART e a convergência lenta de EM. Ambos consideram o ponto inicial $\tilde{f}_\mu = A^{-1}d(\mu)$, sendo que ART neste exemplo, consegue aproximar melhor seu último iterado (em quadrado) da solução f^* . No entanto, após

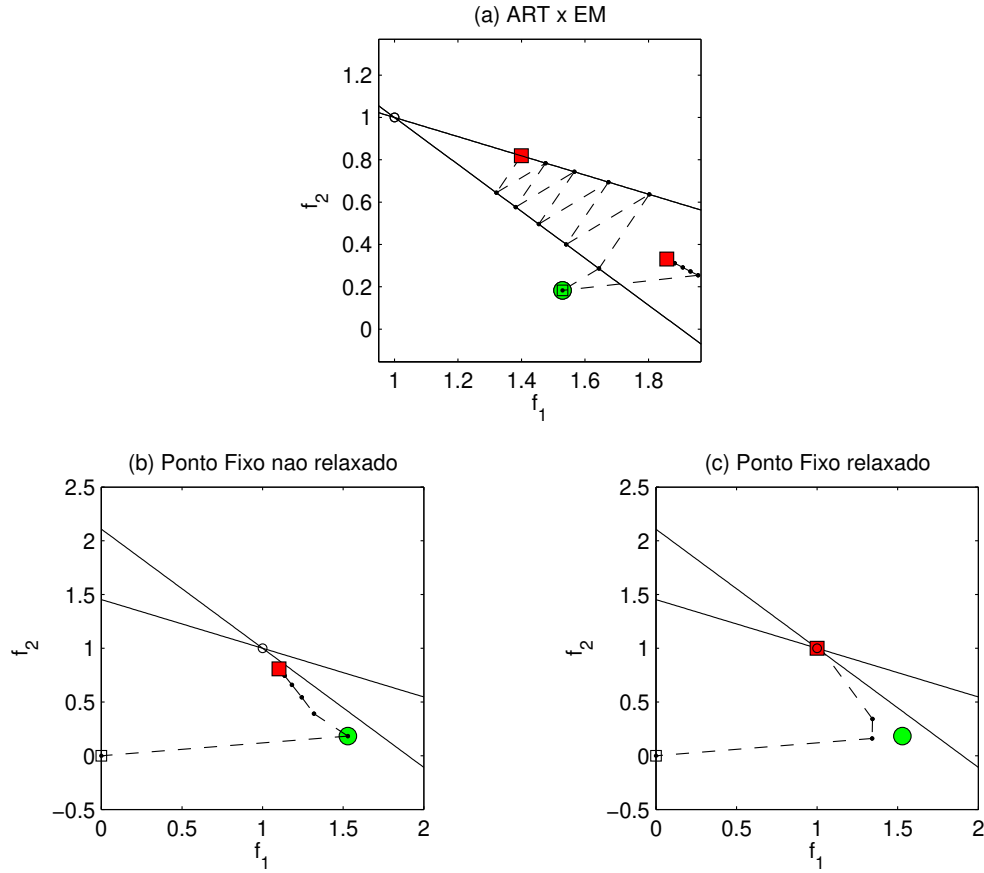


Figura 6.2: Comparação dos métodos iterativos para a parte linear, com $\mu = 0.4$ no sistema (6.1). Veja texto para detalhes.

o mesmo número de iterações, observa-se que a seqüência de ponto fixo não relaxada (veja Eq. (5.41)) apresentada na parte (b) é mais eficiente que ART e EM. Note que, considerando a origem como ponto inicial, a primeira iteração coincide com $\tilde{f}_\mu$ (em círculo). Para a parte (c) temos a seqüência de ponto fixo relaxada (veja Eq. (5.51)). Claramente, nota-se que após o terceiro iterado, a seqüência já se aproximou o suficiente da solução (para uma dada tolerância numérica).

6.1 Resultados numéricos

Os resultados numéricos, decorrentes da teoria apresentada, serão referenciados aos artigos em anexo, nos Apêndices B a F. Optamos por não repeti-los aqui para evitar redundância e pelo fato desta tese ser consequência imediata de tais artigos.

6.2 Phantoms

Para as simulações, vamos considerar quatro modelos sintéticos que representam as funções $\{f, \lambda, \mu\}$ no disco unitário, denotados de M1 a M4, e com algum significado prático intuitivo. Também mostraremos os resultados com dados reais denotando-o de M5. Vamos usar a denominação clássica na literatura e, para modelos pertencentes ao espaço U (como é o caso da tripla acima, veja pág.10), associaremos o nome *phantom*. Usaremos a seguinte notação no restante deste capítulo,

$$\begin{aligned} N: & \text{ número de ângulos (vistas)} \\ M: & \text{ número de raios, em cada ângulo } \theta_i, 1 \leq i \leq N \\ P: & \text{ número de pixels, em cada eixo de um determinado phantom} \end{aligned} \tag{6.2}$$

Idealmente, $P = M$, embora possamos considerá-los diferentes usando alguma técnica de interpolação para o sinograma e/ou o próprio phantom em sua reconstrução. Para cada modelo, de M1 a M5, vamos associar as notações $\{f_j, \lambda_j, \mu_j\}$ para $1 \leq j \leq 5$ respectivamente.

Modelo M1:

A função $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é definida da seguinte forma

$$\begin{aligned} f(x) &= 4.8\epsilon \Leftrightarrow \|x \pm ce\|_\infty < 0.16, \quad \|x \pm ce_\perp\|_2 < 0.16 \\ f(x) &= 3\epsilon \Leftrightarrow \|x + ce\|_2 < 0.14 \cos n\theta, \quad \|x - ce\| < 0.14 \cos(n+1)\theta \\ f(x) &= 10\epsilon \Leftrightarrow \|x + ce_\perp\|_2 < 0.14 \cos n\theta, \quad \|x - ce_\perp\| < 0.14 \cos(n+1)\theta \end{aligned} \tag{6.3}$$

onde $e = (1, 1)$, $e_\perp = (-1, 1)$, $\epsilon = 10^{-6}$, $\theta = \arctan(x_2/x_1)$ e $n = 2$. Os contornos da função f estão definidos na Figura 6.3 (direita). Vamos considerar as atenuações de transmissão e fluorescência, λ e μ como variações da função definida em (6.3); elas estão apresentados na Figura 6.3, ao meio e à direita respectivamente. Fisicamente, podemos imaginar que a amostra consiste de um pequeno quadrado de acrílico (com dimensões baixas)

com quatro cavidades perfuradas, sendo duas em formato cilíndrico e duas em formato quadrangular. Cada uma das cavidades possui um líquido particular em seu interior, fluorescente a uma certa energia, assim como amostras em formato de ‘pétalas’ também imersas, formadas de um determinado material como cobre, zinco ou ferro. O objetivo é obter a densidade de fluorescência no interior das cavidades, que determina a função f em (6.3) (veja Figura 6.3-esquerda). O coeficiente de atenuação λ determinada o corpo do objeto, obtido por tomografia de transmissão clássica, e possui uma atenuação de fluorescência (na energia do feixe incidente) determinada por μ .

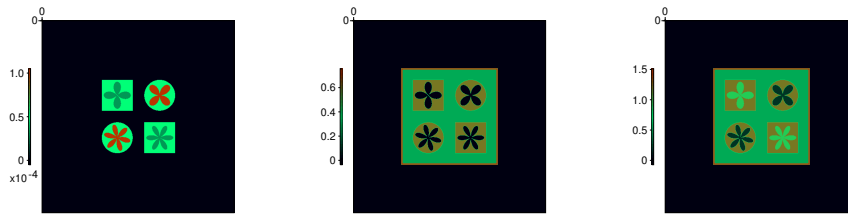


Figura 6.3: Phantoms para o modelo M1; da esquerda para direita: $\{f, \lambda, \mu\}$

Modelo M2:

Aqui, a tripla $\{f, \mu, \lambda\}$ é representada por funções suaves, formadas pela superposição de Gaussianas, ou seja

$$f(x) = \epsilon_f \left[\sum_{\pm} c_f^{\pm} e^{-\frac{r_f}{2\beta^2} \|x \pm a e_1\|^2} + \sum_{\pm} d_f^{\pm} e^{-\frac{r_f}{2\beta^2} \|x \pm a e_2\|^2} \right] \quad (6.4)$$

A mesma regra vale para μ e λ , com parâmetros definidos por $a = 0.27$, $(\epsilon_f, \epsilon_\mu, \epsilon_\lambda) = (10^{-6}, \frac{1}{5}, \frac{1}{9})$, $\beta = 0.15$, $(r_f, r_\mu, r_\lambda) = (1, 1.1, 1.1)$, $(c_f^+, c_f^-) = (5, 4)$, $(d_f^+, d_f^-) = (3.5, 2.5)$, $(c_\mu^+, c_\mu^-) = (3, 4)$, $(d_\mu^+, d_\mu^-) = (3, 3.5)$, $(c_\lambda^+, c_\lambda^-) = (5, 5)$, $(d_\lambda^+, d_\lambda^-) = (5, 5)$ e e_j o j -ésimo vetor canônico em $\mathbb{R}^2$. As funções estão apresentadas na Figura 6.4 pixeladas com $P = 80$.

Modelo M3:

Neste caso, f é representada pelo clássico phantom de Shepp-Logan. Sua geometria é amplamente conhecida na literatura e pode ser encontrada em [42, 57]. A atenuação de transmissão λ é constante na maior

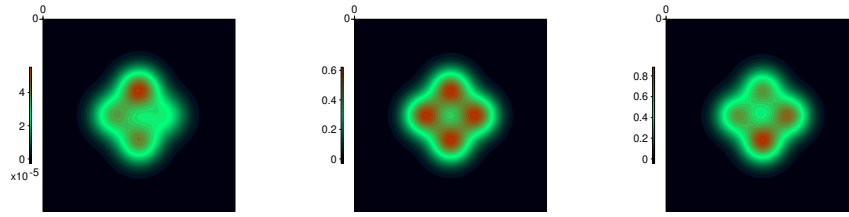


Figura 6.4: Phantom para o modelo M2; da esquerda para direita: $\{f, \lambda, \mu\}$

elipse determinada por f (seu suporte) e a atenuação de fluorescência é formada apenas por um subconjunto de elipses de f , com diferentes intensidades. As funções estão ilustradas na Figura 6.5, pixeladas com $P = 256$.

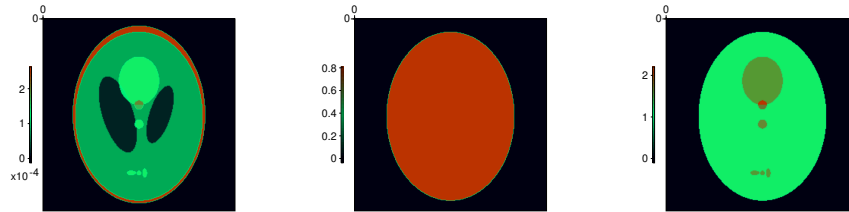


Figura 6.5: Phantoms para o modelo M3; da esquerda para direita: $\{f, \lambda, \mu\}$

Modelo M4:

Aqui, f é suave, determinada por funções sinc em duas dimensões¹, isto é

$$f(x) = \text{sinc } 4x + \text{sinc } 2(x - 0.35e) + \text{sinc } 2(x + 0.35e) \quad (6.5)$$

com $e = (1, 1)$. As funções de atenuação são escritas da forma $\lambda(x) = p(x)/100$ e $\mu(x) = [p(x) - 2]_+/60$, onde $p(x) = [w(x)]_+$ com a notação $y_+ = \max(0, y)$ e $w = w(x)$ a famosa função *peaks* do ©Matlab. As funções estão ilustradas na Figura 6.6, pixeladas com $P = 80$.

Modelo M5:

¹Usamos a notação $\text{sinc}(x) = \text{sinc}(x_1)\text{sinc}(x_2)$.

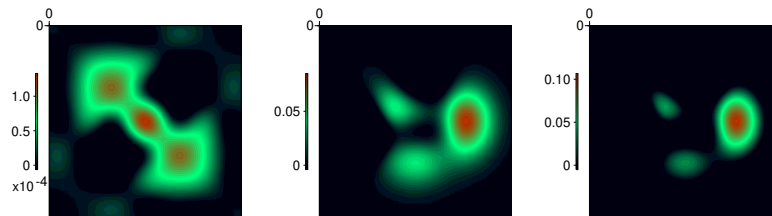


Figura 6.6: Phantoms para o modelo M4; da esquerda para direita: $\{f, \lambda, \mu\}$

Este é o modelo com dados reais, obtido na linha montada no laboratório de luz Síncrotron. Os dados foram gentilmente cedidos pelo grupo de Instrumentação Nuclear da Universidade Federal do Rio de Janeiro. O objeto sob investigação consistia em uma amostra de Zinco imersa num tubo de acrílico com dimensões similares à de um grão de arroz. O objetivo era validar os métodos de reconstrução existentes até então, para recuperar a concentração de Zinco previamente conhecida.

6.2.1 Sinogramas

A Figura 6.7 ilustra alguns sinogramas para os modelos propostos, todos obtidos em $[0, 2\pi]$. Em (a),(b), para o modelo M1 pixelado com $P = 80$, estão as transformada de Radon com $N = 360$ vistas e $M = 256$ raios. Em (c),(d), para o modelo M2 pixelado com $P = 80$, estão os sinogramas com $N = 360$ vistas e $M = 300$ raios. Em (e),(f) estão as transformadas para o modelo M3, pixelado com $P = 256$, considerando $N = 360$ vistas e $M = 300$ raios. Em (g),(h), estão os sinogramas para o modelo M4, pixelado com $P = 80$. Finalmente, em (i),(j) estão os sinogramas para o modelo real M5, com $N = 60$ e $M = 23$. Lembramos que o nosso objetivo é assumir sempre conhecida a dupla de funções $\{\mathcal{R}_{\text{fct}}f, \mathcal{R}\lambda\}$, com o objetivo de encontrar f e μ .

6.2.2 Resultados triviais (sem peso)

A Figura 6.8 mostra alguns resultados clássicos para o modelo M1, considerando apenas o caso de Radon (sem peso), Figura 6.3, com $(P, M, N) =$

(300, 500, 180). A parte (a) apresenta a retroprojeção filtrada segundo o Método 2.1.1 (veja pág. 16) usando um filtro passa-baixa retangular [42, 57]. A parte (b) ilustra o efeito da reconstrução com poucos ângulos, neste caso apenas $N = 10$. Finalmente, as partes (c) e (e) apresentam a reconstrução por *ridge functions* da Seção 2.2.1, usando respectivamente 50 e 400 termos da série em (2.31) com a construção pelo Método 2.2.1 de Kazantsev (veja pág.24).

Ainda para o modelo M1, a Figura 6.9 apresenta alguns dados simulados para a tripla de funções $\{f, \mu, \lambda\}$ considerando $(P, M, N) = (80, 256, 180)$. A parte (a) mostra a transformada divergente (veja Eq. (2.52)) para o ângulo θ_{60} pertencente a uma malha uniforme $\{\theta_j\}$. A parte (b) ilustra o peso em $\text{x}fct$ para θ_{120} considerado para a construção da função de correção $a = a(x)$ definida na equação (5.32), e ilustrada na parte (c) da figura. A parte (d) mostra o efeito do operador retroprojeção atenuado em $\text{x}fct$ (veja Eq. (3.6), pág.26) sobre o sinograma de $\text{x}fct$ sendo uma ilustração do Lema 3.1, isto é a retroprojeção é a convolução da função original com uma núcleo de espalhamento (também dito *psf*: *point spread function*).

6.3 Métodos iterativos

Considere o modelo M4 e a Figura 6.a/Ap.D. Admitindo que μ é desconhecido e portanto setando a aproximação de primeira ordem $\mu^{(0)} = \lambda$, a figura em questão ilustra o resultado das iterações propostas na Seção 5.1, com o uso do expectation-maximization (EM) (linha superior) e com o uso de nosso Método 5.1.1 (linha inferior). Com as iterações $\{1, 2, 3, 4, 20\}$, percebe-se claramente que a aproximação melhora com um número maior de iterações. Vale notar que, na linha inferior, para nosso método, a primeira imagem corresponde à aproximação de Chang descrita na Seção 4.3.1, através do Método 4.3.1 (pág. 56).

Portanto, enquanto o EM atinge um resultado desejável após um número alto de iterações, nossa estratégia já atinge um bom nível de aproximação da solução na terceira iteração. A Figura 6.b/Ap.D ilustra o mesmo resultado para o modelo real M5.

A escolha de uma das imagens mencionadas acima, resulta na primeira aproximação da função f , que denotamos $f^{(1)}$. Conforme o Método 5.2.2 ilustra, para obter uma estimativa melhor de μ , digamos $\mu^{(1)}$, usamos a recente estimativa $f^{(1)}$ junto com os dados $\{\mathcal{R}_{\text{x}fct}f, \lambda\}$. O resultado

está ilustrado na Figura 7/Ap.D, onde estão apresentados as duas primeiras iterações de μ , a inicial $\mu^{(0)}$ (igual a λ) e a segunda $\mu^{(1)}$ obtida com o nosso método. De cima para baixo (as duas primeiras imagens) estão os resultados para os modelos M4 e M5 respectivamente.

Esta estratégia determina o método alternado da Seção 5.3.

6.4 Inversão Analítica

Considerando os modelos M2, M4 e M1, os resultados sobre a inversão analítica discutida na Seção 4.2, estão apresentados no Apêndice B. A Figura (7.5) ilustra a inversão analítica para os modelos citados respectivamente. Os perfis de reconstrução estão apresentados nas Figuras (7.6.a), (7.6.b) e (7.6.c). A Figura (7.7) ilustra uma seqüência de somas parciais aplicadas aos dados reais do modelo M5, segundo o Teorema de inversão 4.2.1 (pág. 49), aplicável aqui uma vez que o coeficiente de atenuação μ apresenta baixa variação.

6.5 Inversão Aproximada

O objetivo aqui é ilustrar os resultados da Seção 4.3.3. Inicialmente, consideramos o modelo M3, ou seja, f é o phantom de Shepp-Logan (conforme Figura 6.5). A idéia é usar a inversa de Novikov como operador de inversão aproximado para $\text{x}fct$. Isto foi confrontado com as idéias de LaRivière, que supunha coeficientes de atenuação $\{\lambda, \mu\}$ constantes, dados por $\{\lambda_0, \mu_0\}$, da seguinte maneira:

- Tiramos μ , gradativamente, da uniformidade como a seqüência de funções $\mu^{(k)}$ em (32)/Ap.C. Isso é feito tendo como base os valores referência $\{\lambda_0, \mu_0\}$ de LaRivière. A seqüência $(\mu^{(k)})$ está ilustrada na figura 4.d/Ap.C;
- A seguir, a tripla $\{f, \lambda, \mu^{(k)}\}$ é usada para simular as reconstruções de LaRivière, de Novikov assim como aquela da Seção 4.3.3.

Sendo $\mathcal{A}$ um dos algoritmos acima, a seqüência (34)/Ap.C calcula o erro relativo da reconstrução associada, para os diferentes níveis de k , que representam a intensidade de μ . Os resultados estão apresentados nas

Figuras (9),(10)/Ap.C, onde I,F,N,L,H denotam respectivamente os algoritmos de reconstrução analítica, FBP, Novikov, LaRivière e Hogan (equivalente à aproximação de Chang).

As Figuras (11),(12)/Ap.C ilustram as reconstruções dos algoritmos citados, com suas respectivas seções transversais. A Figura (14)/Ap.C ilustra os resultados obtidos com o modelo real M5. Nota-se que a aproximação via Novikov produz resultados competitivos aos de LaRivière.

6.6 Ridge functions

Alguns resultados com o uso de *ridge functions*, segundo o método da seção 4.3.2 estão apresentados no Apêndice F. Considerando os modelos M2 e M5, a Figura 3, da esquerda para direita, ilustra o gradiente da transformada divergente para cada modelo respectivamente. Conforme discussão das equações (4.165) e (4.166), como o gradiente possui baixa magnitude, podemos aproximar a solução pelo método generalizado de Kazantsev. Os resultados para o modelo M2 e M5 estão ilustrados nas Figuras 5 e 6 respectivamente, onde são apresentadas somas parciais da série descrita na equação (2.31) com poucos e muitos termos.

Na prática, é razoável considerar parâmetros de atenuação $\{\lambda, \mu\}$ cuja transformada divergente possua gradiente com baixa magnitude, como é o caso do exemplo M5.

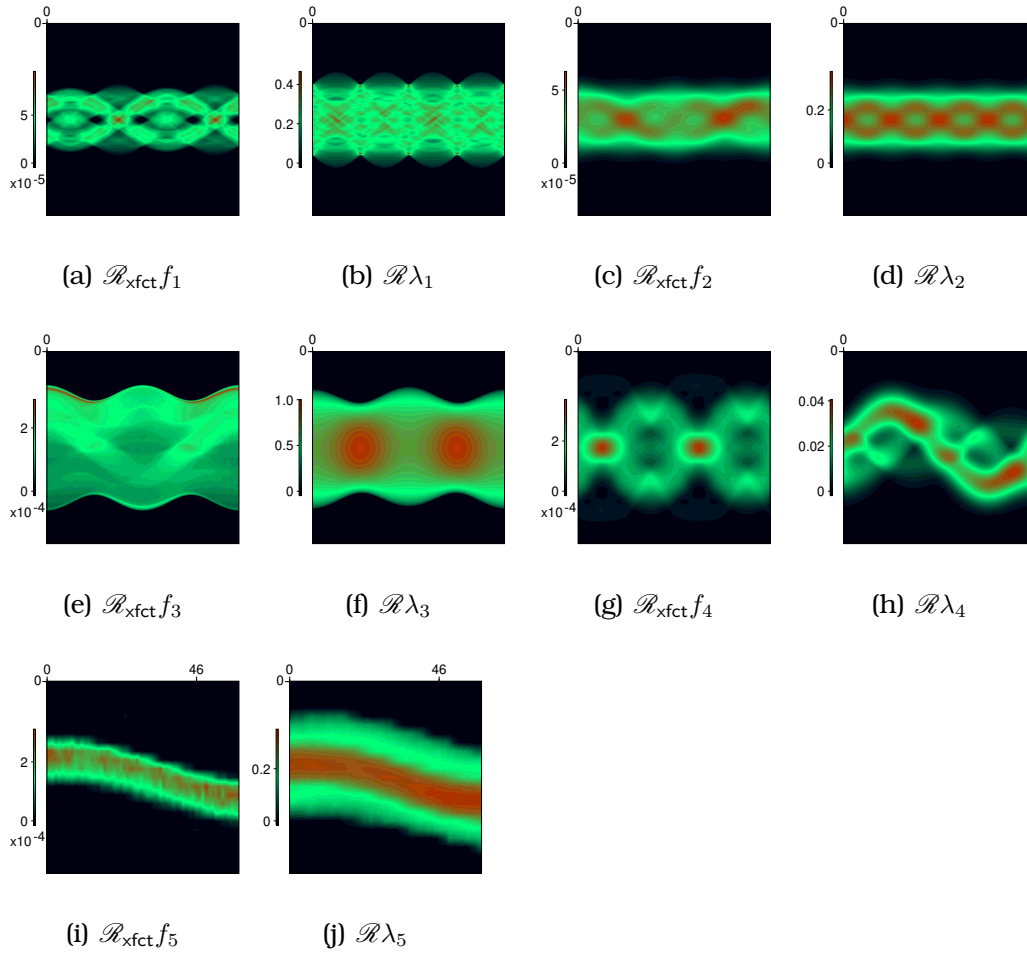


Figura 6.7: Sinogramas para os modelos M1 a M5. Veja texto para detalhes.

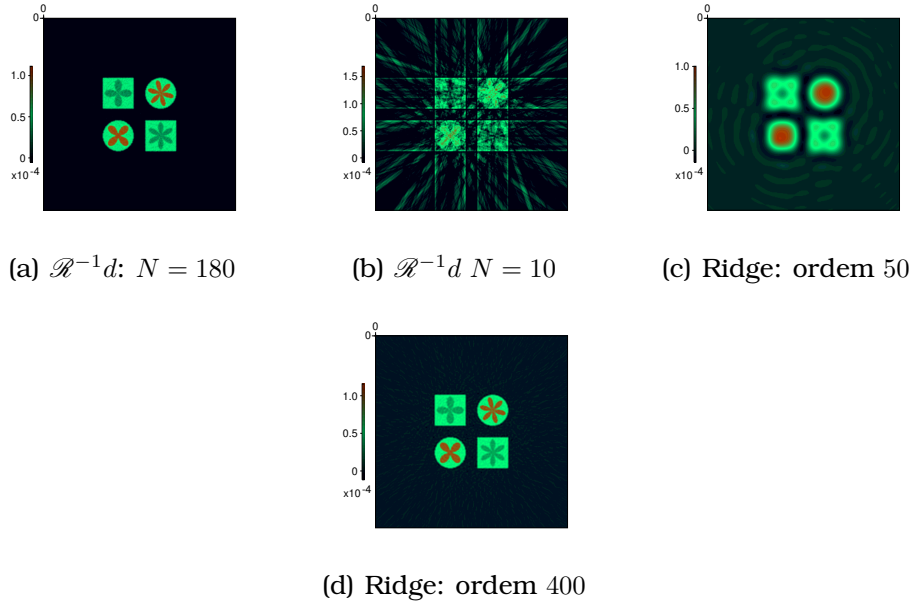


Figura 6.8: Resultados clássicos sobre $\mathcal{R}$ para o modelo M1, Figura 6.3. Veja texto para detalhes.

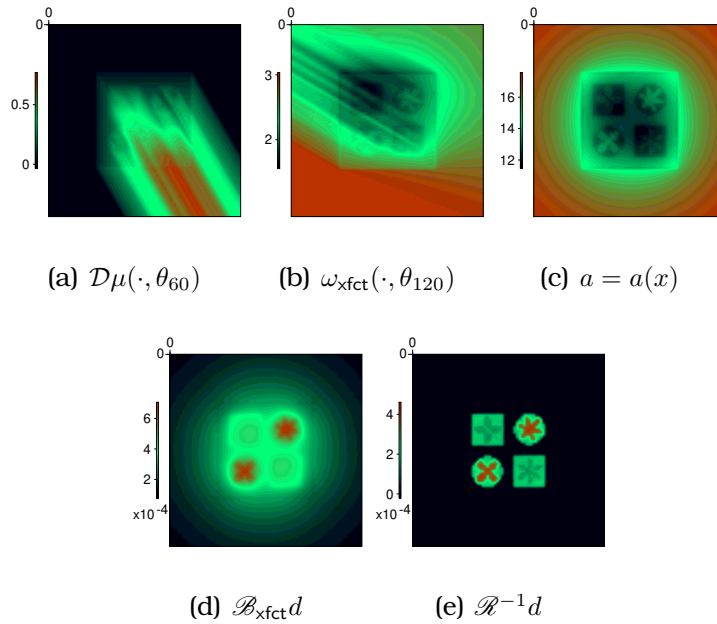


Figura 6.9: Dados simulados em xfct para o modelo M1, Figura 6.3.

Apêndice A

Provas

Todas as demonstrações apresentadas aqui estão baseadas fortemente no Teorema de Fubini, algo que é permitido uma vez que todas as funções envolvidas neste trabalho são integráveis.

A.1 Lema 2.2, pág. 12

De fato, pela definição (2.3) temos

$$\begin{aligned}\mathcal{B}\mathcal{R}f(x) &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \delta(u \cdot \xi - x \cdot \xi) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \int_0^{2\pi} d\theta \delta(\tau(\theta)),\end{aligned}$$

onde $\tau(\theta) = (u - x) \cdot \xi$. Usando a propriedade da δ (veja [19], Cap.5)

$$\delta(\tau(\theta)) = \sum_k \frac{1}{|\tau'(\theta_k)|} \delta(\theta - \theta_k), \quad \tau(\theta_k) = 0. \quad (\text{A.1})$$

No nosso caso, $\tau(\theta)$ tem somente uma raiz, $\theta_0 \equiv \ell(u - x)$ satisfazendo

$$\theta_0 = \ell(u - x) = -\arctan \frac{u_1 - x_1}{u_2 - x_2}, \quad \tau'(\theta_0) = -\|u - x\|_2, \quad (\text{A.2})$$

Portanto,

$$\mathcal{B}\mathcal{R}f(x) = \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\delta(\theta - \theta_0)}{|\tau'(\theta_0)|} \quad (\text{A.3})$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \|u - x\|_2^{-1} \int_0^{2\pi} d\theta \delta(\theta - \theta_0) \quad (\text{A.4})$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \|u - x\|_2^{-1}. \quad (\text{A.5})$$

A.2 Lema 3.1, pág. 27

Pelas definições (3.1) e (3.6) temos

$$\mathcal{B}_{\omega_1} \mathcal{R}_{\omega_2} f(x) = \int_0^{2\pi} d\theta \omega_1(x, \theta) \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \omega_2(u, \theta) \delta((u - x) \cdot \xi) \quad (\text{A.6})$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) \int_0^{2\pi} d\theta \omega_1(x, \theta) \omega_2(u, \theta) \delta(\tau(\theta)) \quad (\text{A.7})$$

com $\tau(\theta) = (u - x) \cdot \xi_\theta$. Levando em conta que $\theta \in [0, 2\pi]$, temos duas raízes para τ , a saber $\{\theta_0, \theta_1\}$, onde θ_0 é dada por (A.2) e $\theta_1 = \theta_0 + \pi$, com $\tau'(\theta_0) = \tau'(\theta_1)$. Segue da propriedade (A.1), com $\tau'(\theta_0) = -\|u - x\|_2$,

$$\mathcal{B}_{\omega_1} \mathcal{R}_{\omega_2} f(x) = \int_{\mathbb{R}^2} du f(u) h(u - x) \frac{[\omega_1(x, \theta_0) \omega_2(u, \theta_0) + \omega_1(x, \theta_1) \omega_2(u, \theta_1)]}{2} \quad (\text{A.8})$$

como queríamos demonstrar.

A.3 Lema 3.2, pág. 27

Como $|\omega(x, \theta)| \leq c(\theta)$, segue de (3.3) para todo θ e $|t| \leq 1$,

$$|\mathcal{R}_\omega f(t, \theta)| \leq \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} |\omega(x(t, s), \theta)| |f(x(t, s))| ds \quad (\text{A.9})$$

$$\leq c(\theta) \|f\|_\infty [2\sqrt{1-t^2}] \quad (\text{A.10})$$

$$\leq 2 c(\theta) \|f\|_\infty \quad (\text{A.11})$$

Disto, e da definição de $\mathcal{B}$ (veja Eq.(2.10)), resulta

$$|\mathcal{B} \mathcal{R}_\omega f(x)| \leq \int_0^\pi |\mathcal{R}_\omega f(x \cdot \xi, \theta)| d\theta \quad (\text{A.12})$$

$$\leq 2 \|f\|_\infty \int_0^\pi c(\theta) d\theta \quad (\text{A.13})$$

$$\leq 2 \|f\|_\infty \mathbf{c}(\omega). \quad (\text{A.14})$$

A última desigualdade segue de $\int_0^\pi c \leq \int_0^{2\pi} c$ pois $c \geq 0$.

A.4 Proposição 4.1.1, pág. 40

Vamos começar pela equação (4.24). Temos

$$2\pi i \, u(x, \kappa^+, \theta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau \xi + p \xi^\perp) d\tau}{\tau - [t + i\epsilon(p - \rho)]} \quad (\text{A.15})$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\rho} dp + \int_{\rho}^{\infty} dp \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau \xi + p \xi^\perp) d\tau}{\tau - [t + i\epsilon(p - \rho)]} \right\} \quad (\text{A.16})$$

O Teorema de Plemelj 4.1 (veja pág. 36) garante que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} \frac{g(\tau) d\tau}{\tau - [t \pm i\epsilon]} = \pm \frac{g(t)}{2} + \frac{1}{2\pi i} \text{pv.} \int_{\mathbb{R}} \frac{g(\tau) d\tau}{\tau - t} \quad (\text{A.17})$$

$$= \pm \frac{g(t)}{2} + \frac{1}{2i} \mathcal{H} g(t) \quad (\text{A.18})$$

onde $\mathcal{H}$ denota a transformada de Hilbert. Fazendo $p - \rho = -|p - \rho|$, a primeira integral em (A.16) muda o sinal de ϵ e o resultado é

$$\begin{aligned} u(x, \kappa^+, \theta) &= \int_{-\infty}^{\rho} dp \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau \xi + p \xi^\perp) d\tau}{\tau - [t - i\epsilon|p - \rho|]} \\ &\quad + \int_{\rho}^{\infty} dp \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\tau \xi + p \xi^\perp) d\tau}{\tau - [t + i\epsilon(p - \rho)]} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Usando $g_p(\tau) = f(\tau \xi + p \xi^\perp)$ e os mesmos motivos da equação (A.18), a equação (A.19) resulta em

$$u(x, \kappa^+, \theta) = \int_{-\infty}^{\rho} dp \left\{ -\frac{g_p(t)}{2} + \frac{\mathcal{H} g_p(t)}{2i} \right\} + \int_{\rho}^{\infty} dp \left\{ \frac{g_p(t)}{2} + \frac{\mathcal{H} g_p(t)}{2i} \right\} \quad (\text{A.20})$$

$$= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\rho} dp \, g_p(t) + \frac{1}{2} \int_{\rho}^{\infty} dp \, g_p(t) + \frac{1}{2i} \int_{\mathbb{R}} dp \, \mathcal{H} g_p(t) \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} dp \, g_p(t) - \int_{-\infty}^{\rho} dp \, g_p(t) + \frac{1}{2i} \mathcal{H} \left(\int_{\mathbb{R}} dp \, g_p(t) \right) \quad (\text{A.22})$$

Na equação (A.22) usamos a hipótese de g ser limitada para que a transformada de Hilbert comute com o sinal da integral. Pela equação (2.2) (veja pág. 10) e pela definição da transformada divergente (veja Seção 2.4) temos

$$\int_{\mathbb{R}} dp \, g_p(t) = \mathcal{R} f(t, \theta), \quad \int_{-\infty}^{\rho} dp \, g_p(t) = \mathcal{D} f(x, \theta) \quad (\text{A.23})$$

de onde segue o resultado, com $t = x \cdot \xi$ e $x = x(t, \rho) = t\xi + \rho\xi^\perp$, isto é

$$u(x, \kappa^+, \theta) = -\mathcal{D}f(x, \theta) + \frac{1}{2}\mathcal{R}f(t, \theta) + \frac{1}{2i}\mathcal{H}\mathcal{R}f(t, \theta) \quad (\text{A.24})$$

A demonstração para o caso de $u(x, \kappa^-, \theta)$ é idêntica, com leves mudanças de sinal. Não vamos expor a demonstração para que o texto não fique redundante.

A.5 Proposição 4.2.1, pág. 44

A linearidade de M é imediata uma vez que o operador $P^\pm$ é linear. Seja $A^\pm = e^{\mp P^\pm r} P^\pm [e^{P^\pm r} d]$ de tal maneira que $-iM = A^+ + A^-$. Vamos denotar $h_1 = \frac{1}{2}r$ e $h_2 = \frac{1}{2}\mathcal{H}r$ de tal maneira que $P^\pm r = \pm h_1 - ih_2$. Se $h_c = \cos h_2$ e $h_s = \sin h_2$ então,

$$A^+ = e^{-P^+} P^+ [e^{P^+ r} d] \quad (\text{A.25})$$

$$= e^{-h_1 + ih_2} \left\{ \frac{1}{2} e^{P^+ r} d - \frac{i}{2} \mathcal{H} (e^{P^+ r} d) \right\} \quad (\text{A.26})$$

$$= e^{-h_1} e^{\frac{i}{2}h_2} \left\{ \frac{1}{2} e^{h_1} e^{-\frac{i}{2}h_2} d - \frac{i}{2} \mathcal{H} (e^{P^+ r} d) \right\} \quad (\text{A.27})$$

$$= \frac{d}{2} - \frac{i}{2} e^{-h_1} e^{ih_2} \mathcal{H} (e^{h_1} e^{-ih_2} d) \quad (\text{A.28})$$

$$= \frac{d}{2} - \frac{i}{2} e^{-h_1} e^{ih_2} \mathcal{H} (e^{h_1} h_c d - i e^{h_1} h_s d) \quad (\text{A.29})$$

$$= \frac{d}{2} - \frac{i}{2} e^{-h_1} e^{ih_2} \{ \mathcal{H} (e^{h_1} h_c d) - i \mathcal{H} (e^{h_1} h_s d) \} \quad (\text{A.30})$$

Analogamente, com as devidas mudanças de sinais obtemos para A^- ,

$$A^- = -\frac{d}{2} - \frac{i}{2} e^{-h_1} e^{-ih_2} \{ \mathcal{H} (e^{h_1} h_c d) + i \mathcal{H} (e^{h_1} h_s d) \} \quad (\text{A.31})$$

e portanto

$$\begin{aligned} -iM = A^+ + A^- &= -\frac{i}{2} \mathcal{H} (e^{h_1} d h_c) e^{-h_1} [e^{ih_2} + e^{-ih_2}] \\ &\quad - \frac{i}{2} \mathcal{H} (e^{h_1} d h_s) e^{-h_1} [-ie^{ih_2} + ie^{-ih_2}] \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

de onde segue o resultado

$$-iM = -ie^{-h_1} [\cos h_2 \mathcal{H} (e^{h_1} d h_c) + \sin h_2 \mathcal{H} (e^{h_1} d h_s)]. \quad (\text{A.33})$$

A.6 Teorema 5.2.2, pág. 82

Vamos provar primeiro para o caso de spect. De (5.96) (veja pág. 78) e, definindo $\sigma_\theta(x) = f(x)\omega_\mu(x, \theta)$, segue

$$-T_\mu h(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} dx f(x)\omega_\mu(x, \theta) \mathcal{D}h(x, \theta) \quad (\text{A.34})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} ds \sigma_\theta(t\xi + s\xi^\perp) \int_0^\infty dq h(t\xi + s\xi^\perp + q\xi^\perp) \quad (\text{A.35})$$

$$= \int_0^\infty dq \int_{\mathbb{R}} ds \sigma_\theta(t\xi + s\xi^\perp) h(t\xi + s\xi^\perp + q\xi^\perp) \quad (\text{A.36})$$

$$= \int_0^\infty dq \int_{\mathbb{R}} dv \sigma_\theta(t\xi + (v - q)\xi^\perp) h(t\xi + v\xi^\perp) \quad (\text{A.37})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dv h(t\xi + v\xi^\perp) \int_0^\infty dq \sigma_\theta(t\xi + v\xi^\perp - q\xi^\perp) \quad (\text{A.38})$$

$$= \int_{x \cdot \xi = t} dx h(x) \int_0^\infty dq \sigma_\theta(x + q\xi^\perp(\theta + \pi)) \quad (\text{A.39})$$

$$= \int_{x \cdot \xi = t} dx h(x) \mathcal{D}\sigma_\theta(x, \theta + \pi) \quad (\text{A.40})$$

$$= \mathcal{R}_{W_\mu f} h(t, \theta), \quad W_\mu f(x, \theta) = \mathcal{D}\sigma_\theta(x, \theta + \pi). \quad (\text{A.41})$$

A igualdade (A.37) segue de (A.36) usando a mudança de variáveis $v = s + q$. Equação (A.39) segue de (A.38) pois $\xi^\perp(\theta + \pi) = -\xi^\perp(\theta)$.

No caso de xfct temos, definindo $\sigma_{\theta, \gamma}(x) = f(x)\omega_\lambda(x, \theta + \pi)\omega_\mu(x, \theta + \gamma)$

$$-T_\mu h(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} f(x)\omega_\lambda(x, \theta + \pi) \int_{\Gamma} d\gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma) \mathcal{D}h(x, \theta + \gamma) \quad (\text{A.42})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} ds \int_{\Gamma} d\gamma \sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) \int_0^\infty dq h(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp + q\xi_{\theta+\gamma}^\perp) \quad (\text{A.43})$$

Colocando $v\xi_\theta^\perp = s\xi_\theta^\perp + q\xi_{\theta+\gamma}^\perp$ temos $v = s + q\beta$ com $\beta = \xi_\theta \cdot \xi_{\theta+\gamma}^\perp$. Segue $dv = ds$ (com $q > 0$) e portanto

$$-T_\mu h(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}} dv \int_{\Gamma} d\gamma \int_0^\infty dq \sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + (v - q\beta)\xi_\theta^\perp) h(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp) \quad (\text{A.44})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dv h(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp) \int_{\Gamma} d\gamma \int_0^\infty dq \sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + (v - q\beta)\xi_\theta^\perp) \quad (\text{A.45})$$

Sendo $\beta = -\sin \gamma$ e $\Gamma \subseteq [0, \pi]$ temos $\sin \gamma > 0$ e

$$-T_\mu h(t, \theta) = \int_{\mathbb{R}} dv h(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp) \int_{\Gamma} d\gamma \int_0^\infty dq \sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp + q\xi_\theta^\perp \sin \gamma) \quad (\text{A.46})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dv h(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp) \int_{\Gamma} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^\infty dq \sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp + q\xi_\theta^\perp) \quad (\text{A.47})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dv h(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp) \int_{\Gamma} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta, \gamma}(t\xi_\theta + v\xi_\theta^\perp, \theta) \quad (\text{A.48})$$

$$= \int_{x \cdot \xi = t} h(x) \int_{\Gamma} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta, \gamma}(x, \theta) \quad (\text{A.49})$$

$$= \int_{x \cdot \xi = t} h(x) W_\mu f(x, \theta). \quad \square \quad (\text{A.50})$$

A.7 Teorema 5.2.3, pág. 82

Começaremos com spect. Seja $\Delta(\mu) = W_{\mu+h}f(x, \theta) - W_\mu f(x, \theta)$ e $p = x + q\xi^\perp$. De (5.121) (veja pág.82) temos

$$\Delta(\mu) = \int_0^\infty dq f(p) [\omega_{\mu+h}(p, \theta) - \omega_\mu(p, \theta)] \quad (\text{A.51})$$

$$\stackrel{\text{Eq. (5.98)}}{=} \int_0^\infty dq f(p) e^{-\mathcal{D}\mu(p, \theta)} [-\mathcal{D}h(p, \theta) + r(h)] \quad (\text{A.52})$$

$$= - \int_0^\infty dq f(p) \omega_\mu(p) \mathcal{D}h(p, \theta) + r(h) \omega_\mu(x, \theta) \quad (\text{A.53})$$

$$= - \int_0^\infty dq \sigma_\theta(p) \mathcal{D}h(p, \theta) + r(h) \omega_\mu(x, \theta) \quad (\text{A.54})$$

$$= -\mathcal{D}(\sigma_\theta \mathcal{D}h(\cdot, \theta))(x, \theta + \pi) + r(h) \omega_\mu(x, \theta) \quad (\text{A.55})$$

$$= -L_\mu h(x, \theta) + r(h) \omega_\mu(x, \theta) \quad (\text{A.56})$$

Segue de (5.127) que

$$T_{\mu+h}z - T_\mu z = - \int_{\Omega} z [W_{\mu+h}f - W_\mu f] \quad (\text{A.57})$$

$$= \int_{\Omega} z L_\mu h - \int_{\Omega} z r(h) \omega_\mu \quad (\text{A.58})$$

Como a segunda integral acima é da ordem de $\|h\|^2$ segue o resultado para spect. Em xfct a demonstração segue a mesma linha de raciocínio e não será exposta para evitar redundância. $\square$

Apêndice B

Artigo/Inversão Analítica

A Teoria de inversão desenvolvida no Capítulo 4, Seção 4.2, com as idéias de A.S.Fokas aplicadas ao caso de x_{fct} , estão apresentadas no artigo à seguir, submetido ao *Journal on Applied Mathematics*, SIAM. Atualmente encontra-se na segunda rodada de revisões, com pareceres favoráveis dos revisores associados.

As idéias deste artigo foram apresentadas no *International Conference on Applied Analysis and Scientific Computing* em Shanghai, China, durante Junho de 2009. Ainda em forma de divulgação, o mesmo foi apresentado pessoalmente para Fokas durante o Colóquio realizado no Instituto de Matemática Pura e Aplicada no Rio de Janeiro em Julho de 2009. Com o aval de Fokas, o artigo foi citado no recente *Topical Review* do periódico *Inverse Problems* (veja [65]) como a segunda aplicação da teoria desenvolvida por Fokas, a primeira sendo *spect* (imageamento médico semelhante a x_{fct}).

Possíveis consequências deste artigo

- Análise de inversão para outros modelos da transformada generalizada de Radon. Acredita-se que modelos, com peso exponencial, possam ter inversa analítica encontrada de maneira similar à esta tese;
- A implementação da inversa de Novikov, tal como a inversa desta tese, são implementadas da maneira *força-bruta*, calculando todas as transformadas de Hilbert envolvidas, assim como a derivada associada. Acredita-se que, tal como no caso da transformada clássica

de Radon, deva haver uma espécie de Teorema de Projeção generalizado que simplifique a inversão e que permita encontrar os mesmos resultados de Novikov e Fokas.

ON THE INVERSION OF THE XFCT RADON TRANSFORM *

EDUARDO X. MIQUELES[†] AND ÁLVARO RODOLFO DE PIERRO[‡]

Abstract. It has been recently shown by Fokas [4, 5] and Novikov [13] that the spectral analysis of a particular partial differential equation yields the inversion formula for the problem of computerized emission tomography. In this article we show that a similar analysis can be made for the case of X-ray fluorescence tomography.

1. Introduction. X-Ray fluorescence computed tomography (xfct) is a synchrotron based imaging modality similar to stimulated emission tomography [22]. It aims at reconstructing the concentration distribution of a heavy metal (Copper, Zinc, Iron) or other elements like Iodine, inside a body or an object. In xfct a sample is irradiated with high intensity monochromatic synchrotron X-rays with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest. This stimulates fluorescence emission, at certain characteristic energies, isotropically distributed, which are detected by a detector placed parallel to the direction of the incident beam [9]. Part of the emission is absorbed by the sample, so, correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions has many important applications in medical imaging (malignancy analysis [21] for example), and mineralogy (determination of rocks 3D structure [23]) .

A continuous mathematical model for xfct is given by the generalized attenuated Radon Transform

$$(1.1) \quad \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta) = \int_{\tau(t, \theta)} dx f(x) e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} d\gamma e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$$

where f is the density, λ is a fixed transmission attenuation map, μ is the fluorescence attenuation map and Γ is the angle section for stimulated fluorescence rays starting from each point over the line $\tau(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2 : x \cdot \xi_{\theta} = t\}$. The operator $\mathcal{D}$ is the divergent beam transform defined below, where we have used the notation $\xi_{\theta} = (\cos \theta, \sin \theta)$

$$(1.2) \quad \mathcal{D}a(x, \theta) = \int_0^{\infty} a(x + s\xi_{\theta}^{\perp}) ds$$

The next Section is dedicated to a brief description of the xfct problem and the corresponding mathematical model. Section 3 describes the mathematical tools for the derivation of our inverse, which is based on the Fokas transform [3]. Section 4 shows that under mild conditions on the xfct function μ , the inverse operator $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ exists and can be computed as a Neumann series, using the analytic expression for the inverse of an appropriate operator $\mathcal{R}_{\beta}$, for a given angle $\beta \in \Gamma$. Section 5 presents an analytic inversion formula for the xfct Radon transform. In Section 6 we present a summary of notation for the inverses of the different attenuated operators. Finally, in Section 7 we compare both inversion formulae, the approximate one, derived from the Neumann series, and the “exact” one, for simulated and real xfct data. In Section 8 we present some conclusions and future research directions.

*First author supported by FAPESP grant No 06/00356-6 and second author by FAPESP grant No 2002/07153-2 and CNPq grants No 476825/2006-0 and 304820/2006-7

[†]Applied Mathematics Department, University of Campinas (miqueles@ime.unicamp.br)

[‡]Applied Mathematics Department, University of Campinas (alvaro@ime.unicamp.br).

2. A Mathematical Model for xfct. In this section, we briefly describe a mathematical model for X-ray fluorescence and its physical aspects. For more details see [25, 24].

Throughout this article we will use $\mathbf{U} = \{f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}; f = f(x)\}$ as the feature space, $\mathbf{V} = \{d: [-1, 1] \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}; d = d(t, \theta)\}$ as the Radon space and $\mathbf{Q} = \{\omega: \mathbb{R}^2 \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}; \omega = \omega(x, \theta)\}$ as the weight space. Here, as before, $\xi = \xi_\theta$ is a direction vector defined by an angle θ , $\xi_\theta = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\xi_\theta^\perp$ is such that $\xi_\theta \cdot \xi_\theta^\perp = 0$ (see Figure 2.1 (a)). We define $\mathcal{D}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ as the divergent beam transform as in (1.2).

It is assumed, without loss of generality, that every function in the feature space $\mathbf{U}$ is defined on the unit disk $\Omega \in \mathbb{R}^2$, otherwise we can make a simple change of variables. Further properties on each of the above spaces are beyond the scope of this paper and can be found in [17, 18, 16].

The geometry of a fluorescence tomography experiment is shown in Figure 2.1, which is very similar to the scanning geometry of transmission tomography except that measurements are gathered by two surface detectors, the conventional one and the fluorescence one, that is placed parallel to the incident transmission beam. A pair (t, θ) defines a direction vector $\xi^\perp$ and a transmission ray $\tau(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2: x \cdot \xi_\theta = t\}$ rotating in a counterclockwise direction around the sample.

Let $\lambda \in \mathbf{U}$ be the linear attenuation coefficient for the energy of the incident X-ray (roughly speaking, $\lambda(x)$ is the attenuation at x). The flux rate from the source to a point $x \in \tau$ inside the object is proportional to $\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$ (as in X-ray Transmission Computed Tomography).

At the energy level of the incident beam, the sample emits X-rays fluorescence isotropically with an intensity proportional to $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$, where $f(x)$ is the number of emissions at x . On the other hand, the flux rate of the fluorescent X-ray emitted from x and reaching the detector is proportional to the yield of the fluorescent X-ray and the solid angle at which the point x is viewed by the detector. That is, the flux rate reaching the detector, for a given angle $\gamma \in \Gamma$, is proportional to $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\} \exp\{-\mathcal{D}\mu(x + \theta + \gamma)\}$ where now $\mu \in \mathbf{U}$ is the linear attenuation coefficient for the emitted fluorescence. Finally, the total rate of fluorescence X-rays detected by the detector is obtained varying $\gamma \in \Gamma$ and $x \in \tau$ obtaining the following relation

$$(2.1) \quad d(t, \theta) \propto \int_{\tau(t, \theta)} dx f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\} \int_{\Gamma} \exp\{-\mathcal{D}\mu(x + \theta + \gamma)\}$$

Neglecting physical constants that must be considered in equation (2.1), we can restate the expression above as the equation

$$(2.2) \quad d(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} f(x) \omega(x, \theta) dx,$$

where $\mathcal{R}_\omega$ stands for the Generalized Attenuated Radon Transform with weight function $\omega \in \mathbf{Q}$ defined by

$$(2.3) \quad \omega(x, \theta) = \omega_\lambda(x, \theta) \omega_\mu(x, \theta)$$

where

$$(2.4) \quad \omega_\mu(x, \theta) = \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma, \quad \omega_\lambda(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)}$$

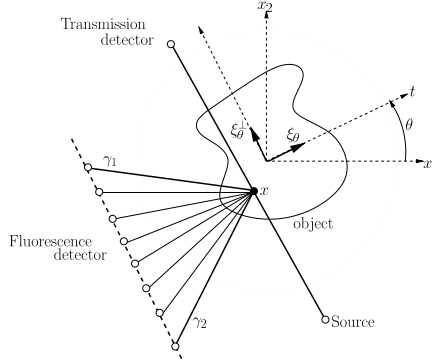


Fig. 2.1: Scanning geometry for data gathering in xfct

and $(t, \theta) \in [-1, 1] \times (0, 2\pi)$. Throughout the article, we simply denote $\mathcal{R}_\omega = \mathcal{R}_{\text{xfct}}$ as the xfct Radon transform.

So, we are searching for a function $f \in \mathbf{U}$ satisfying the linear equation (2.2) where $d \in \mathbf{V}$ is called the attenuated projection function, defined by the scanning geometry. The incident X-rays attenuation λ can be easily retrieved from measured data collected by the transmission detector, applying, for example, a standard method like filtered backprojection (FBP) [17]. μ is usually unknown, but sometimes λ could be used as a reasonable estimate.

Remark: Ideally, the angle section $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ for the fluorescence emission on equation (2.1), depends on the point x varying along the transmission ray. This is illustrated in Figure 2.2.a for points $x_a, x_b \in \tau$ where clearly $\Gamma(x_a) \neq \Gamma(x_b)$ for a fixed-size detector $\mathbf{F}$. However, because of the fact that fluorescence is emitted isotropically in all directions, we can assume that $\mathbf{F}$ is large enough to ensure that all the fluorescence emissions are detected. Therefore, Γ is considered constant for all points along the ray τ , as illustrated in Figure 2.2.b. It follows that $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ in (1.1) could be alternatively written as a superposition of attenuated Radon transforms, for each angle within the fluorescence fan of rays,

$$(2.5) \quad \mathcal{R}_{\text{xfct}} = \int_{\Gamma} d\gamma \mathcal{R}_\gamma, \quad \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\tau(t, \theta)} dx f(x) \omega_\gamma(x, \theta)$$

with

$$(2.6) \quad \omega_\gamma(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$$

and $\mathcal{D}$ defined in (1.2). In practice, the detector $\mathbf{F}$ is considered at least three times bigger than the sample, so that we can assume the constant section Γ as shown in Figure 2.2.b. As a matter of fact, in current applications, the sample is very small if compared to the detector; therefore, considering an infinite detector yields a reasonable approximate model. This hypothesis will be assumed in Section 4.

The main results in this paper are:

- a) For a constant angle section Γ , we show that the xfct Radon transform considering only the mid angle β^* (see Figure 2.2.b) can be used as an approximation for the

inverse of $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$, where $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$ takes into account the complete angle section Γ . This approximation is presented in Section 4, where mild conditions on the parameter μ are required.

b) A general inversion formula for $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$, presented in Section 5.

c) Numerical experiments demonstrating the application of our new formulas to simulated and real data presented in Section 7.

Sections 6 and 8 are devoted respectively to summarize the different existing formulas for the inversion of the Generalized Radon transform and some concluding remarks.

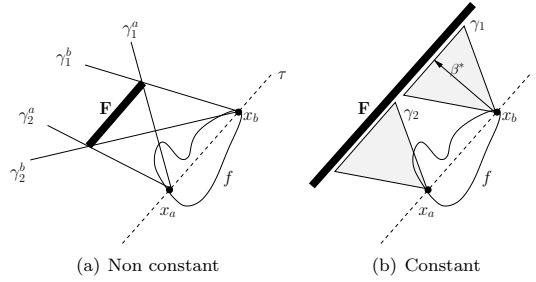


Fig. 2.2: Solid angle $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2] \subset [0, \pi]$ for fluorescence emission

3. Mathematical Background. This section describes the main aspects of Fokas approach for the inversion of the attenuated Radon transform needed for the description of our own results.

Throughout the article, we denote $\cdot$ as the real dot product, that is $\eta \cdot v = \eta_1 v_1 + \eta_2 v_2$ for all $\eta, v \in \mathbb{C}^2$, and $(\cdot)^T$ as the transpose. Fokas and co-authors [3, 4] have shown that the spectral analysis of the following partial differential equation

$$(3.1) \quad \eta(\kappa) \cdot \nabla u(x) + a(x)u(x) = f(x), \quad \eta(\kappa) \in \mathbb{C}^2, \quad \kappa \in \mathbb{C}$$

allows us to write the solution u in terms of the attenuated Radon transform of f . $\eta = \eta(\kappa)$ is a curve in $\mathbb{C}^2$ parametrized by κ , satisfying some properties needed for the calculation. For the sake of simplicity we will consider that the curve is the same as the one used in [5], that is,

$$(3.2) \quad \eta(\kappa) = \left[\frac{1}{2i} \left(\frac{1}{\kappa} + \kappa \right), \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \kappa \right) \right].$$

it is easy to see that $\|\eta\| = o(\kappa)$ and that each component of η is analytic in κ with a pole in zero.

Because u depends on the attenuated Radon transform of f , equation (3.1) implies that the function f is written as an operator also depending on the attenuated Radon transform, yielding a left inverse operator. This operator depends on the choice of vector η . In what follows, we will briefly describe the steps to derive such an inverse operator. Since the derivation involves many calculations, we present only the necessary ones, leaving the specific details for references [5, 4, 3].

We set a change of variables $x \mapsto (z, \bar{z})$, with $z \in \mathbb{C}$, defined by $z = v \cdot x$ and $v(\kappa) \in \mathbb{C}^2$ (as for η , $v(\kappa)$ denotes a curve in $\mathbb{C}^2$ parametrized by $\kappa \in \mathbb{C}$). This can be written as

$$(3.3) \quad \begin{pmatrix} z \\ \bar{z} \end{pmatrix} = Gx, \quad G = \begin{pmatrix} v^T \\ \bar{v}^T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Let $j(\kappa) = \det G = -v \cdot \mathbf{J} \bar{v}$ be the Jacobian of the above change of variables. It follows that equation (3.1) can be rewritten as

$$(3.4) \quad (\eta \cdot v) \partial_z u + (\eta \cdot \bar{v}) \partial_{\bar{z}} u + a(x) u(x) = f(x).$$

We choose vector $\{\eta, v\} \in \mathbb{C}^2$ such that $\eta \cdot v = 0$ and $\eta \cdot \bar{v} = j(\kappa)$ in order to have equation (3.4) equivalent to (3.1). This means that, with η fixed $v = -\mathbf{J}\eta$ or, equivalently, $\eta = \mathbf{J}v$. Denoting $\eta(\kappa) = (\eta_1(\kappa), \eta_2(\kappa))^T$ it is easy to compute $j(\kappa)$

$$(3.5) \quad j(\kappa) = \eta_1(\kappa) \overline{\eta_2(\kappa)} - \eta_2(\kappa) \overline{\eta_1(\kappa)} = 2iJ(\kappa), \quad J(\kappa) = \text{Imag} \left[\eta_1(\kappa) \overline{\eta_2(\kappa)} \right].$$

Now define the singularity set $S = \{\kappa \in \mathbb{C} : J(\kappa) = 0\}$. It is worth noting that $b \neq c$, otherwise $J(\kappa) = 0$ and $S = \mathbb{C}$.

Hence, equation (3.4) is reduced to

$$(3.6) \quad \partial_{\bar{z}} u(x) + \frac{a(x)}{j(\kappa)} u(x) = \frac{f(x)}{j(\kappa)},$$

which is a d -bar equation with analytic solution for all $\kappa \notin S$. Multiplying equation (3.6) by an Euler factor $e^{q(x)}$ we decouple equation (3.6) on two other d -bar equations

$$(3.7) \quad \partial_{\bar{z}} \left(u(x) e^{q(x)} \right) = \frac{f(x)}{j(\kappa)} e^{q(x)}, \quad \partial_{\bar{z}} q(x) = \frac{a(x)}{j(\kappa)}$$

The solution of the above d -bar equations can be found using the generalized Cauchy Theorem [2]. The following Lemma holds for our change of variables and the proof can be found in [5].

LEMMA 3.1. *For all $\kappa \notin S$, the solution of the $\partial_{\bar{z}} \hat{u}(x) = g(x)/j(\kappa)$ is given by*

$$(3.8) \quad \hat{u}(x; \kappa) \doteq \partial_{\bar{z}}^{-1} \left(\frac{g(x)}{j(\kappa)} \right) = \frac{\alpha(\kappa)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{g(y) dy}{v(\kappa) \cdot (y - x)}.$$

with $\alpha(\kappa) = \text{sign } J(\kappa)$

Now we observe that the set S determines a curve, dividing the complex plane into two regions R^+ and R^- . d -bar equations, like the one proposed in Lemma 3.1, have a well known solution $u^\pm$ for $\kappa \in R^\pm$. The solution for all κ is determined by the jump $\mathcal{J}(x) = u^+(x) - u^-(x)$ on the curve S (it is worth noting that $\mathcal{J}(x)$ also depends on κ , but this will not be made explicit for the sake of simplicity). Since u is an analytic function of $\kappa \notin S$, there exist $z_0 \in \mathbb{C}$ and $\delta > 0$ such that S is homotopic to a circle centered at z_0 and radius δ . Assuming without loss of generality that $\delta = 1$, the solution of the corresponding Riemann-Hilbert problem is given by ([2, 1])

$$(3.9) \quad u(x; \kappa) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|z-z_0|=1} \frac{\mathcal{J}(x)}{z - \kappa} dz$$

$$(3.10) \quad = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{\mathcal{J}(x) i e^{i\theta}}{z_0 + e^{i\theta} - \kappa} d\theta$$

$$(3.11) \quad = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{J}(x) e^{i\theta} \left\{ \frac{-1}{\kappa} + O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right) \right\} d\theta$$

$$(3.12) \quad = \frac{1}{\kappa} h(x) + O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right), \quad h(x) = \frac{-1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{J}(x) e^{i\theta} d\theta$$

Therefore, from equation (3.1), and with the boundary condition $u(x) = O(\kappa^{-1})$ as $\kappa \rightarrow \infty$, we have

$$(3.13) \quad f(x) = \frac{1}{\kappa} \eta(\kappa) \cdot \nabla h(x) + a(x) O\left(\frac{1}{\kappa}\right) + O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right), \quad \kappa \rightarrow \infty$$

It only remains to compute the jump function $\mathcal{J} = \mathcal{J}(x)$ in order to evaluate h in equation (3.12). We divide the computation of $\mathcal{J}$ and the derivation of the inversion operator in four steps.

Step 1 : The classical change of variables in tomography, $x = t\xi_\theta + \rho\xi_\theta^\perp$ and $y = \tau\xi_\theta + p\xi_\theta^\perp$, applied to the d -bar equation of Lemma 3.1, gives us the solution (see Eq.(3.8))

$$(3.14) \quad u(x; \kappa, \theta) = \frac{\alpha(\kappa)}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{g(\tau\xi_\theta + p\xi_\theta^\perp)}{[v(\kappa) \cdot \xi_\theta](\tau - t) + [v(\kappa) \cdot \xi_\theta^\perp](p - \rho)} d\tau dp$$

There exist $\kappa_\epsilon^\pm \in R^\pm$ such that $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \kappa_\epsilon^\pm = \kappa$ and obeying the equations

$$(3.15) \quad v(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi_\theta \sim 1, \quad v(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \xi_\theta^\perp \sim \mp i\epsilon$$

or equivalently $v(\kappa_\epsilon^\pm) \sim \xi + (\mp i\epsilon)\xi^\perp$. This is the case for vector η defined in (3.2), where the singularity set S is given by the unit disk.

Since $\eta(\kappa) = \mathbf{J}v(\kappa)$ it follows from (3.15) that

$$(3.16) \quad \eta(\kappa_\epsilon^\pm) = \mathbf{J}v(\kappa_\epsilon^\pm) \sim \xi_\theta^\perp + (\pm i\epsilon)\xi_\theta^\perp$$

and

$$(3.17) \quad j(\kappa_\epsilon^\pm) = \eta(\kappa_\epsilon^\pm) \cdot \overline{v(\kappa_\epsilon^\pm)} \sim \pm 2i\epsilon$$

implying that

$$(3.18) \quad J(\kappa_\epsilon^\pm) = \pm\epsilon \Rightarrow \alpha(\kappa_\epsilon^\pm) = \mp 1$$

Step 2 : The computation of $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(x; \kappa_\epsilon^\pm, \theta)$ using equation (3.14) is not straightforward. It involves an appropriate splitting of the integral in order to get the Radon and Hilbert transforms. For the details we refer to [5]; we present only the resulting equation, which is

$$(3.19) \quad u(x; \kappa^\pm, \theta) \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(x; \kappa_\epsilon^\pm, \theta)$$

$$(3.20) \quad = -\mathcal{D}g(x, \theta) + \frac{1}{2} \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta) \pm \frac{1}{2i} \mathcal{H} \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta)$$

$$(3.21) \quad = -\mathcal{D}g(x, \theta) \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta)$$

with $\mathcal{H}$ denoting the Hilbert transform, $\mathcal{R}$ the Radon transform and

$$(3.22) \quad \mathbf{P}^\pm s(t) = \pm \frac{1}{2} s(t) + \frac{1}{2i} \mathcal{H} s(t).$$

Step 3 : The solution of the d -bar equation in (3.7) is given by Lemma 3.1 replacing $g(x)$ by $f(x)e^{q(x)}$ and $a(x)$ respectively. By Step 2 and equation (3.7) we have

$$(3.23) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(x; \kappa_\epsilon^\pm, \theta) e^{q(x; \kappa_\epsilon^\pm, \theta)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \partial_{\bar{z}}^{-1} \left[\frac{f(x)}{j(\kappa_\epsilon^\pm)} e^{q(x, \kappa_\epsilon^\pm, \theta)} \right]$$

Omitting the arguments for simplicity, we have for the right-hand side (r.h.s) of equation (3.23)

$$(3.24) \quad \text{r.h.s} = -\mathcal{D} \left(f e^{-\mathcal{D}a \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \right) \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R} \left(f e^{-\mathcal{D}a \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \right)$$

$$(3.25) \quad = e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathcal{D} (f e^{-\mathcal{D}a}) \pm \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathcal{R} (f e^{-\mathcal{D}a}) \right]$$

$$(3.26) \quad = e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathcal{D} (f e^{-\mathcal{D}a}) \pm \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathcal{R}_W f \right]$$

where $W(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a(x, \theta)}$, $\mathcal{R}a$ is the Radon Transform of a and $\mathcal{R}_W$ is the generalized attenuated Radon transform, that is,

$$(3.27) \quad \mathcal{R}_W f(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} W(x, \theta) f(x) dx.$$

Similarly, for the left-hand side (l.h.s) of equation (3.23)

$$(3.28) \quad \text{l.h.s} = u(x; \kappa^\pm, \theta) e^{-\mathcal{D}a \pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} = u(x; \kappa^\pm, \theta) e^{-\mathcal{D}a} e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a}.$$

Hence,

$$(3.29) \quad u(x; \kappa^\pm, \theta) e^{-\mathcal{D}a} = -\mathcal{D} (f e^{-\mathcal{D}a}) \pm e^{\mp \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathbf{P}^\pm \left[e^{\pm \mathbf{P}^\pm \mathcal{R}a} \mathcal{R}_W f \right]$$

and finally

$$(3.30) \quad \mathcal{J}(x, \theta) = u(x; \kappa^+, \theta) - u(x; \kappa^-, \theta)$$

$$(3.31) \quad = -i e^{\mathcal{D}a(x, \theta)} m\{\mathcal{R}a, \mathcal{R}_W f\}(x \cdot \xi_\theta, \theta)$$

where m is an operator depending on $\{\mathcal{R}a, \mathcal{R}_W f\}$ defined by

$$(3.32) \quad m\{r, d\} = e^{-\mathbf{P}^+ r} \mathbf{P}^+ \left[e^{\mathbf{P}^+ r} d \right] + e^{\mathbf{P}^- r} \mathbf{P}^- \left[e^{-\mathbf{P}^- r} d \right] \in \mathbf{V}, \quad r, d \in \mathbf{V}$$

Note that m is linear in the second argument because $\mathbf{P}^\pm$ is a linear operator. After several algebraic simplifications [12] we find an expression for $m\{r, d\}$ which is

$$(3.33) \quad m\{r, d\} = e^{-\frac{r}{2}} \left\{ h_c(r) \mathcal{H} (h_c(r) e^{\frac{r}{2}} d) + h_s(r) \mathcal{H} (h_s(r) e^{\frac{r}{2}} d) \right\}$$

where $h_c(r) = \cos(\frac{1}{2} \mathcal{H} r)$ and $h_s(r) = \sin(\frac{1}{2} \mathcal{H} r)$.

Step 4 : Now we compute the inversion operator. From equations (3.12) and (3.13) it follows that

$$(3.34) \quad f(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{\eta_1}{\kappa} \partial_{x_1} + \frac{\eta_2}{\kappa} \partial_{x_2} \right) (\cos \theta + i \sin \theta) \mathcal{J}(x, \theta) d\theta$$

$$(3.35) \quad = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{O}(\eta, \xi_\theta) [\mathcal{J}(x, \theta)] d\theta$$

with $\mathbf{O}(\eta, \xi_\theta)$ the derivative operator defined by

$$(3.36) \quad \mathbf{O}(\eta, \xi_\theta) = [\mathbf{D}(\eta) \xi_\theta] \cdot \nabla - i[\mathbf{D}(\eta) \xi_\theta^\perp] \cdot \nabla$$

and matrix $\mathbf{D}(\eta) = \text{diag}(\eta_1(\kappa)/\kappa, i\eta_2(\kappa)/\kappa)$. Using equation (3.31), this implies

$$(3.37) \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} i\mathbf{O}(\eta, \xi_\theta) \left[e^{\mathcal{D}a(x, \theta)} m\{\mathcal{R}a, \mathcal{R}_W f\}(x \cdot \xi_\theta, \theta) \right] d\theta$$

$$(3.38) \quad \doteq \mathcal{I}_\eta \mathcal{R}_W f(x)$$

giving rise to the inverse operator $\mathcal{I}_\eta$.

The Curve η : Our inversion formula in equation (3.37) can be defined with $\eta(\kappa)$ given by equation (3.2). In general, if we need η_1, η_2 to satisfy

$$(3.39) \quad \frac{\eta_1(\kappa)}{\kappa} = \frac{1}{2i} + O\left(\frac{1}{\kappa^k}\right), \quad \frac{\eta_2(\kappa)}{\kappa} = -\frac{1}{2} + O\left(\frac{1}{\kappa^k}\right), \quad k \geq 1$$

then $\mathbf{D}(\eta) = [O(\kappa^{-k}) - \frac{i}{2}]\mathbf{I}$ and

$$(3.40) \quad i\mathbf{O}(\eta, \xi_\theta) = \frac{1}{2}(\xi_\theta \cdot \nabla) + \frac{i}{2}(\xi_\theta^\perp \cdot \nabla) + O(\kappa^{-k})$$

$$(3.41) \quad = \frac{1}{2}\partial_t + \frac{i}{2}\partial_\rho + O(\kappa^{-k})$$

where (t, ρ) are the change of variables in $x = t\xi_\theta + \rho\xi_\theta^\perp$. Finally, since $f = \text{Re } f$ we can write

$$(3.42) \quad f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t \left[e^{\mathcal{D}a(x, \theta)} m\{\mathcal{R}a, \mathcal{R}_W f\} \right] (x \cdot \xi_\theta, \theta) d\theta$$

or equivalently

$$(3.43) \quad \begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{4\pi} \text{div} \mathbf{B}(x), \quad \mathbf{B}(x) = (B_c(x), B_s(x))^T \\ B_c(x) &= \int_0^{2\pi} e^{\mathcal{D}a(x, \theta)} m\{\mathcal{R}a, \mathcal{R}_W f\}(x \cdot \xi_\theta, \theta) \cos \theta \, d\theta, \end{aligned}$$

where B_s is the same as B_c with $\cos \theta$ replaced by $\sin \theta$ and m is defined in (3.32).

4. Aproximating the inverse. In this section we suppose that the offset between the fluorescence detector and the sample goes to infinity. This implies that the solid angle Γ collapses into a single point γ . Hence, our aim at this section is to obtain the inverse operator of $\mathcal{R}_\gamma$ in equation (2.5), for a fixed $\gamma \in \Gamma$.

To obtain the inverse of $\mathcal{R}_\gamma$ we only need to change the function a in the differential equation (3.1). In fact, since x is fixed, the line $\ell(x, v) = \{x + sv : s \geq 0\}$ can be rotated to another line $\ell(x, w)$ through translation and rotation of v to w . In our case, we substitute a in equation (3.1) by

$$(4.1) \quad a_\gamma(x) = \lambda(\phi_x(x)) + b_\gamma(x)$$

with b_γ a function defined by

$$(4.2) \quad b_\gamma(x) = \mu(\psi_{\gamma,x}(x)),$$

where ϕ_x and $\psi_{\gamma,x}$ map any line $\ell(x, v)$ to $\ell(x, -v)$ and $\ell(x, v)$ to $\ell(x, G_\gamma v)$, respectively, with $G_\gamma^T = (\xi_\gamma, \xi_\gamma^\perp)$ a Givens rotation with angle γ , i.e.

$$(4.3) \quad \phi_x(y) = 2x - y, \quad \psi_{\gamma,x}(y) = G_\gamma(y - x) + x$$

Equation (4.1) must be interpreted as $a_\gamma(x) = \lambda(x) + \mu(x)$ because x is fixed, but whenever we compute $a_\gamma(x + sv)$ we get $\lambda(x - sv) + \mu(x + sG_\gamma v)$ for any direction vector v .

DEFINITION 4.1. *For a given point x and an angle θ , the x-ray transform of a function g is defined by $\mathcal{L}g(x, \theta) = \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta)$, that is,*

$$(4.4) \quad \mathcal{L}g(x, \theta) = \int_{\mathbb{R}} g(x + q\xi_\theta^\perp) dq.$$

satisfying the properties: $\mathcal{L}g(x, \theta) = \mathcal{D}g(x, \theta) + \mathcal{D}g(x, \theta + \pi)$, $\mathcal{L}g(x, \theta) = \mathcal{L}g(x, \theta + \pi)$ and $\mathcal{L}g(x, \theta) = \mathcal{L}g(x', \theta)$ whenever $x \cdot \xi_\theta = x' \cdot \xi_\theta$.

From the definition in (4.1), it follows that the divergent beam transform of a_γ should satisfy that

$$(4.5) \quad \mathcal{D}a_\gamma(x, \theta) = \int_0^\infty ds \, a_\gamma(x + s\xi_\theta^\perp)$$

$$(4.6) \quad = \int_0^\infty ds \, \lambda(x - s\xi_\theta^\perp) + \mu(x + sG_\gamma\xi_\theta^\perp)$$

$$(4.7) \quad = \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma).$$

Similar calculations lead to

$$(4.8) \quad \mathcal{L}a_\gamma(x, \theta) = \mathcal{L}\lambda(x, \theta) + \mathcal{L}\mu(x, \theta + \gamma).$$

Hence, for any $x' \in \ell(x, \xi_\theta^\perp)$ (say $x' = x + s\xi_\theta^\perp$ for some $s \in \mathbb{R}$), it is true that

$$(4.9) \quad \mathcal{L}a_\gamma(x', \theta) = \mathcal{L}\lambda(x', \theta) + \int_{\mathbb{R}} \mu(\psi_{\gamma,x}(x' + q\xi_\theta^\perp)) dq$$

$$(4.10) \quad = \mathcal{L}\lambda(x', \theta) + \int_{\mathbb{R}} \mu(x + rG_\gamma\xi_\theta^\perp) dr$$

$$(4.11) \quad = \mathcal{L}\lambda(x', \theta) + \mathcal{L}\mu(x, \theta + \gamma).$$

so that $\mathcal{L}a_\gamma(x, \theta) = \mathcal{L}a_\gamma(x', \theta)$ and therefore, a_γ is well defined.

For the computation of the Radon transform of a_γ , note that

$$(4.12) \quad \mathcal{L}a_\gamma(x, \theta) = \mathcal{D}a_\gamma(x, \theta) + \mathcal{D}a_\gamma(x, \theta + \pi)$$

$$(4.13) \quad = -\ln \left(e^{-\mathcal{D}a_\gamma(x, \theta)} e^{-\mathcal{D}a_\gamma(x, \theta + \pi)} \right)$$

$$(4.14) \quad = -\ln \omega_\gamma(x, \theta) \omega_\gamma(x, \theta + \pi)$$

where ω_γ is defined in equation (2.6). The main advantage of (4.14) is that we can compute the Radon transform of a_γ using the previously known weight function ω_γ . We use the following Lemma to establish the connection between the Radon transform of a_γ and its x-ray transform $\mathcal{L}a_\gamma$.

LEMMA 4.1. *If $\mathcal{R}b(x \cdot \xi, \theta) = \mathcal{L}b(x, \theta)$ for all x , then $\mathcal{R}b(t, \theta) = k(t)\mathcal{R}\mathcal{L}_\theta b(t, \theta)$ with $\mathcal{L}_\theta b = \mathcal{L}b(\cdot, \theta)$ and $k(t) = \frac{1}{2}(1 - t^2)^{-1/2}$.*

Proof: Computing the Radon transform within the unit disk leads to

$$(4.15) \quad \mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta) = \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} \mathcal{L}_\theta(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) ds$$

$$(4.16) \quad = \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}b((t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) \cdot \xi_\theta, \theta) ds$$

$$(4.17) \quad = \int_{-\sqrt{1-t^2}}^{\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}b(t, \theta) ds$$

$$(4.18) \quad = \mathcal{R}b(t, \theta) 2\sqrt{1-t^2}. \quad \square$$

Denoting $p = \mathcal{R}a_\gamma$ it follows from the above Lemma that

$$(4.19) \quad p_\gamma(t, \theta) \triangleq k(t)\mathcal{R}\mathcal{L}_\theta a_\gamma(t, \theta)$$

with $\mathcal{L}a_\gamma$ defined in equation (4.14). The same analysis of the previous section for the partial differential equation (3.1) with a_γ leads to the inverse of $\mathcal{R}_{\omega_\gamma}$ which in our case will be the inverse of $\mathcal{R}_\gamma$, because both transforms are the same after the change of variables given by (4.3). So we have that

$$(4.20) \quad \mathcal{R}_\gamma^{-1} \mathcal{R}_\gamma f(x) = \text{div} \mathbf{B}_\gamma(x) / 4\pi, \quad \mathbf{B}_\gamma(x) = (B_{c,\gamma}(x), B_{s,\gamma}(x))$$

with $B_{c,\gamma}$ (and $B_{s,\gamma}$ obtained by replacing cosine by sine) given by

$$(4.21) \quad B_{c,\gamma}(x) = \int_0^{2\pi} \omega_\gamma^{-1}(x, \theta) m\{p_\gamma, \mathcal{R}_\gamma f\}(x \cdot \xi_\theta, \theta) \cos \theta \, d\theta$$

where we have used the same notation of equation (3.43), p_γ as in equation (4.19) and ω_γ as in equation (2.6).

Assuming a constant solid angle Γ , as shown in Figure 2.2.b, we have by the Mean Value Theorem for integrals, and since $\mathcal{R}_\gamma$ is continuous for γ , that there exists an angle $\beta \in \Gamma$ such that

$$(4.22) \quad \mathcal{R}_{\text{xfct}} = m(\Gamma)\mathcal{R}_\beta \Rightarrow \mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \frac{1}{m(\Gamma)}\mathcal{R}_\beta^{-1}$$

with $m = m(\Gamma)$ denoting the aperture of the fluorescence fan of rays. Since we do not have the exact angle β we analyse the effect of considering $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ taken from the above equation (4.22), with an arbitrary β . In fact,

$$(4.23) \quad \mathcal{R}_\beta f(t, \theta) - \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\tau(t, \theta)} dx \, f(x) [\omega_\beta(x, \theta) - \omega_\gamma(x, \theta)]$$

and since

$$(4.24) \quad \omega_\beta(x, \theta) = \omega_\gamma(x, \theta) e^{\mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta) - \mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$$

$$(4.25) \quad = \omega_\gamma(x, \theta) e^{-\partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta) \delta - o(\delta^2)}, \quad \delta = \gamma - \beta$$

$$(4.26) \quad \triangleq \omega_\gamma(x, \theta) g(x, \theta, \gamma, \beta)$$

equation (4.23) results in

$$(4.27) \quad \mathcal{R}_\beta f(t, \theta) - \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\tau(t, \theta)} dx f(x) \omega_\beta(x, \theta) [1 - g(x, \theta, \gamma, \beta)].$$

Integrating the above difference for all values of γ , we obtain

$$(4.28) \quad (\mathbf{m}\mathcal{R}_\beta)f(t, \theta) - \mathcal{R}_{\text{xfct}}f(t, \theta) = \mathbf{m} \int_{\Omega} dx f(x) \omega_\beta(x, \theta) [1 - \alpha(x, \theta, \beta)]$$

$$(4.29) \quad \triangleq \mathbf{m}y_\beta(t, \theta)$$

whith α defined by

$$(4.30) \quad \alpha(x, \theta, \beta) = \frac{1}{\mathbf{m}} \int_{\Gamma} g(x, \theta, \gamma, \beta) d\gamma, \quad \theta \in [0, 2\pi].$$

It follows from equation (4.28) that

$$(4.31) \quad (\mathbf{m}\mathcal{R}_\beta)^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}}f(x) = f(x) - \mathcal{R}_\beta^{-1}y_\beta(x)$$

$$(4.32) \quad \triangleq f(x) - \mathcal{B}_\beta f(x).$$

Let $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ and $o(\delta^2) = \frac{1}{2}c_\theta(x)(\gamma - \beta)^2$ the remainder in equation (4.25), with $c_\theta(x) = \partial_\theta^2 \mathcal{D}\mu(x, \theta + \tilde{\beta})$ for some $\tilde{\beta}$ between β and $\beta + \delta$. To simplify the notation let us define $h_\theta(x) = \partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta)$. It follows that,

$$(4.33) \quad \alpha(x, \theta, \beta) = \frac{1}{\mathbf{m}} \int_{\Gamma} e^{-h_\theta(x)(\gamma - \beta)} e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\gamma - \beta)^2} d\gamma$$

$$(4.34) \quad = \frac{1}{\mathbf{m}} e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta)^2} \int_{\Gamma} e^{-h_\theta(x)(\gamma - \beta)} d\gamma, \quad \bar{\beta} \in \Gamma$$

$$(4.35) \quad = \frac{e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta)^2}}{\mathbf{m}h_\theta(x)} \left[e^{h_\theta(x)(\beta - \gamma_1)} - e^{-h_\theta(x)(\gamma_2 - \beta)} \right].$$

Choosing the particular case of $\beta^* = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$ so that $\beta^* - \gamma_1 = \gamma_2 - \beta^* = \mathbf{m}/2$, the above expression reduces to a trigonometric function and therefore, α can be written as

$$(4.36) \quad \alpha(x, \theta, \beta^*) = \frac{2}{\mathbf{m}h_\theta(x)} \sinh\left(\frac{\mathbf{m}}{2}h_\theta(x)\right) e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta^*)^2}$$

If there exists an $\epsilon > 0$, such that μ satisfies

$$(4.37) \quad |\partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*)| < \frac{2\epsilon}{\mathbf{m}},$$

then we could verify, using a McLaurin expansion of $\sinh$, that the function α is asymptotically determined by

$$(4.38) \quad \alpha(x, \theta, \beta^*) = [1 + o(\epsilon^2)] e^{-\frac{1}{2}c_\theta(x)(\bar{\beta} - \beta^*)^2}$$

$$(4.39) \quad \sim [1 + o(\epsilon^2)] o(e^{-\|c_\theta\|}) \triangleq \hat{\alpha}.$$

By equation (4.28) this implies that $y_{\beta^*} \sim [1 - \hat{\alpha}]\mathcal{R}_{\beta^*}$ and by (4.31) and (4.38) it follows that

$$(4.40) \quad \mathcal{B}_{\beta^*}f(x) \sim [1 - \hat{\alpha}]f(x).$$

Finally assuming (4.37) true we have $|1 - \hat{\alpha}| < 1$ and the operator $\mathcal{B}_{\beta^*}$ is a contraction. Equation (4.31) ensures that $(\mathbf{m}\mathcal{R}_{\beta^*})^{-1}$ is an approximation to the inverse of $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$.

We have proved the following theorem, which is an immediate consequence of the contraction property applied to the Fredholm integral equation (4.31).

THEOREM 4.1. *If the fluorescence attenuation map μ satisfies equation (4.37) for a sufficiently small $\epsilon > 0$, the inverse operator $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ is given by the Neumann series*

$$(4.41) \quad \mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \frac{1}{\mathbf{m}} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{I} - \frac{1}{\mathbf{m}} \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}} \right)^k \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$$

with $\mathcal{I}$ the identity operator, $\beta^* = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$, $\mathbf{m} = \gamma_2 - \gamma_1$ and $\mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$ given by equation (4.20)

In practical experiments of xfct, the angle section of fluorescence rays, Γ , is symmetrically choosen to verify $\Gamma \subseteq [0, \pi]$, as shown in Figure 2.2.b. In this case, the optimal angle β^* is $\frac{\pi}{2}$ and the condition of equation (4.37) is always satisfied since there is a minimum in the amount of scattered photons at $\frac{\pi}{2}$ (see [10]) and therefore the total fluorescence attenuation (the divergent beam transform of μ) is stationary at this angle.

5. Analytic inverse for the xfct transform. To obtain the “exact” inverse of operator $\mathcal{R}_{\text{xfct}}$, we analyse a slightly different version of the differential equation (3.1) which is

$$(5.1) \quad \eta(\kappa) \cdot \nabla u(x) + a(x, \eta)u(x) = f(x)$$

with a a function still to be determined and $\eta(\kappa) \in \mathbb{C}^2$, $\kappa \in \mathbb{C}$. We assume that $a = a(\cdot, \eta(\kappa))$ is an analytic function outside the singularity set S (see Section 3).

Following the derivation presented in Section 3, the change of variables of equation (3.3) leads to an equation similar to (3.4) with $a(x)$ replaced by $a(x, \eta)$. The remaining steps to derive an inversion operator outlined in Section 3 are similar. We arrive at the decouple d -bar equations

$$(5.2) \quad \partial_{\bar{z}} \left(u(x) e^{q(x)} \right) = \frac{f(x)}{j(\kappa)} e^{q(x)}, \quad \partial_{\bar{z}} q(x) = \frac{a(x, \eta)}{j(\kappa)}.$$

The solution of the second d -bar equation above is given by Lemma 3.1. To determine the solution u it only remains to compute the jump $q(x; \kappa^+) - q(x; \kappa^-)$. By equation (3.16) and since a is continuous in κ

$$(5.3) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} a(x, \eta_{\epsilon}^{\pm}) = a(x, \xi_{\theta}^{\perp}) \doteq a_{\xi_{\theta}}(x)$$

and the first step outlined in Section 3 give us

$$(5.4) \quad q(x; \kappa^{\pm}, \theta) = -\mathcal{D}a_{\xi_{\theta}}(x, \theta) \pm \mathbf{P}^{\pm} \mathcal{R}a_{\xi_{\theta}}(x \cdot \xi, \theta)$$

Steps 3 to 4 are the same as in Section 3 and we find that

$$(5.5) \quad f(x) = \mathcal{I}_{\eta} \mathcal{R}_{\omega} f(x), \quad \omega(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}a_{\xi_{\theta}}(x, \theta)}$$

with $\mathcal{I}_{\eta}$ defined in (3.37).

To establish the connection between equation (5.5) and the xfct Radon transform, it only remains to define the function $a = a(x, \eta)$ in our differential equation (5.1) in such a way that

$$(5.6) \quad \omega(x, \theta) = \int_{\Gamma} d\gamma \omega_{\gamma}(x, \theta) \doteq \omega_{\text{xfct}}(x, \theta).$$

In order to do this we consider x in the complex space $\mathbb{C}^2$ so that $a(\cdot, \eta): \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ for all values of η . Now, let $\mathcal{D}$ be the generalized divergent beam transform, defined by

$$(5.7) \quad \mathcal{D}g(x, y) = \int_0^{\infty} g(x + sy^{\perp}) ds, \quad \|y\| = 1, y \in \mathbb{C}^2.$$

Note that $\mathcal{D}g(x, \xi_{\theta}) = \mathcal{D}g(x, \theta)$ for real x and ξ_{θ} , with $\mathcal{D}$ an invertible operator because of

$$(5.8) \quad \mathcal{D}g(x, y) + \mathcal{D}g(x, -y) = \mathcal{R}g(x \cdot y, y^{\perp}).$$

Now, using the same change of variables of equation (4.3), we define the function a , for fixed but arbitrary values of x , by

$$(5.9) \quad a(x, \eta) = \lambda(\phi_x(x)) + b(x, \eta), \quad x = \phi_x(x)$$

and $b = b(x, \eta)$ is such that

$$(5.10) \quad \mathcal{D}b_{\eta}(x, \eta) = -\ln \frac{1}{\mathfrak{m}} \int_{\Gamma(x)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, G_{\gamma}\eta)} d\gamma,$$

where $b_{\eta} = b(\cdot, \eta)$. Since $\mathcal{D}\mu$ is a positive function and $\int_{\Gamma} d\gamma e^{-\mathcal{D}\mu} < \mathfrak{m}$, the above logarithm is well defined, so that $\mathcal{D}b > 0$.

Remark: It is worth noting that here we allow the solid angle Γ to be non-constant, as in Figure 2.2.a.

Using the Mean Value Theorem for the inner integral in (5.10) we obtain

$$(5.11) \quad \mathcal{D}b_{\eta}(x, \eta) = \mathcal{D}\mu(x, G_{\gamma_x}\eta), \quad \gamma_x \in \Gamma(x)$$

and, from Section 4, we already know that b can be written as

$$(5.12) \quad b(x, \eta) = \mu(\psi_{\gamma_x, \eta}(x)), \quad \psi_{\gamma_x, \eta}(y) = x + \frac{(y - x) \cdot \eta}{\|\eta\|^2} G_{\gamma_x} \eta$$

We can differentiate μ in the distributions sense, and it follows by (5.12) that b is differentiable for $\eta \neq 0$. Using the chain rule, and since η is analytic in κ , the derivative of a with respect to $\bar{\kappa}$ is given by

$$(5.13) \quad \partial_{\bar{\kappa}} a(x, \eta(\kappa)) = \partial_{\eta} b(x, \eta(\kappa)) \cdot \partial_{\bar{\kappa}} \eta(\kappa).$$

It follows that a is analytic in κ since the d -bar of η is zero (each component) and therefore $\partial_{\bar{\kappa}} a(x, \eta(\kappa)) = 0$ for all x . Therefore, the solution of (5.1) can be expressed through its jump over the set S , which is computed using equation (3.14) in *Step 1*, with $g(\cdot)$ replaced by $a(\cdot, \eta)$.

Hence, with our choice of a in (5.9), we have

$$(5.14) \quad \mathcal{D}a_{\xi_{\theta}}(x, \xi_{\theta}) = \mathcal{D}\lambda(x, \xi_{\theta+\pi}) - \ln \frac{1}{\mathfrak{m}} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \xi_{\theta+\gamma})} d\gamma$$

and by (5.5)

$$(5.15) \quad \omega(x, \theta) = \frac{1}{m} e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \xi_{\theta} + \gamma)} d\gamma = \frac{1}{m} \omega_{\text{xfct}}(x, \theta).$$

Since equation (5.5) depends on the Radon transform of $a_{\xi_{\theta}}$, it follows by (5.14) and (5.8) that

$$(5.16) \quad \mathcal{L}a_{\xi_{\theta}}(x, \theta) = \mathcal{L}\lambda(x, \theta) + \mathcal{L}b_{\xi_{\theta}}(x, \theta)$$

with $\mathcal{L}b_{\xi_{\theta}}(x, \theta) = \mathcal{R}b_{\xi_{\theta}}(x \cdot \xi_{\theta}, \theta)$ equals to

$$(5.17) \quad \mathcal{L}b_{\xi_{\theta}}(x, \theta) = -\ln \left[\frac{1}{m^2} \left(\int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma + \pi)} d\gamma \right) \left(\int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma \right) \right].$$

By (5.12) and the discussion from (4.9) to (4.11), function $a_{\xi_{\theta}}$ is well defined in the following sense

$$(5.18) \quad \begin{cases} \mathcal{L}a_{\xi_{\theta}}(x, \theta) = \mathcal{L}\lambda(x, \theta) + \mathcal{L}\mu(x, \theta + \gamma_x), \\ \mathcal{L}a_{\xi_{\theta}}(x', \theta) = \mathcal{L}\lambda(x', \theta) + \mathcal{L}\mu(x, \theta + \gamma_x) \end{cases}$$

for some $\gamma_x \in \Gamma(x)$ and $x' \in \ell(x, \xi_{\theta}^{\perp})$.

The Radon transform of $b_{\xi_{\theta}}$ follows from Lemma 4.1. Picking η , in equation (5.5), satisfying (3.39), we find that (see Eq.(3.42))

$$(5.19) \quad f(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t \left[m \omega_{\text{xfct}}^{-1}(x, \theta) m \left\{ p, \frac{1}{m} \mathcal{R}_{\text{xfct}} f \right\} \right] (x \cdot \xi_{\theta}, \theta) d\theta$$

$$(5.20) \quad = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t [\omega_{\text{xfct}}^{-1}(x, \theta) m \{p, \mathcal{R}_{\text{xfct}} f\}] (x \cdot \xi_{\theta}, \theta) d\theta$$

$$(5.21) \quad = \mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(x)$$

where $p(t, \theta) = \mathcal{R}\lambda(t, \theta) + \mathcal{R}b_{\theta}(t, \theta)$ and $\mathcal{R}b_{\theta}$ defined through (5.17).

Sinogram $p(t, \theta)$	Weight $\omega(x, \theta)$	$\mathcal{R}_{\omega}^{-1}$
$\mathcal{R}\lambda(t, \theta)$	$e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta)}$	Eq.(3.42)
$k(t) \mathcal{R}\mathcal{L}_{\theta} a_{\gamma}(t, \theta)$	$e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$	Eq.(4.20)
$\mathcal{R}\lambda(t, \theta) + k(t) \mathcal{R}\mathcal{L}_{\theta} b_{\xi_{\theta}}(t, \theta)$	$e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} d\gamma e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)}$	Eq.(5.20)

Table 5.1: Summarized notation for inversion with $\mathcal{L}_{\theta}g = \mathcal{L}g(\cdot, \theta)$, for $g \in \mathbf{U}$, and k defined in Lemma 4.1.

6. A compact notation for inversion. Let $d \in \mathbf{V}$ and $\mathcal{N}: \mathbf{Q} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{U}$ be the following operator

$$(6.1) \quad \begin{aligned} \mathcal{N}(\omega, p)d(x) &= \text{div} \mathbf{B}(x)/4\pi, \quad \mathbf{B}(x) = (B_c(x), B_s(x)) \\ B_s(x) &= \int_0^{2\pi} \omega^{-1}(x, \theta) m \{p, d\} (x \cdot \xi, \theta) \sin \theta d\theta, \end{aligned}$$

with B_c defined similarly (replacing sine by cosine), $\omega \in \mathbf{Q}$, $p, d \in \mathbf{V}$ and operator m defined by equation (3.32). By the definition of m , $\mathcal{N}(\omega, p) \in L(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ (the space of linear operators from $\mathbf{V}$ to $\mathbf{U}$) is defined equivalently by

$$(6.2) \quad \mathcal{N}(\omega, p)d(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \partial_t [\omega^{-1}(x, \theta) m \{p, d\}] (x \cdot \xi_{\theta}, \theta)$$

with $\partial_t = \xi_\theta \cdot \nabla$. Writing $d = \mathcal{R}_\omega f$ with $\mathcal{R}_\omega$ standing for the generalized attenuated Radon transform with weight function ω , equations (3.42), (4.20) and (5.20) are reduced to

$$(6.3) \quad \mathcal{N}(\omega, p) \mathcal{R}_\omega f(x) = f(x) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{R}_\omega^{-1} = \mathcal{N}(\omega, p)$$

where ω and p are defined in Table 5.1, and for a class of parameters $\{a, \lambda, \mu\} \in \mathbf{U}$ and $\gamma \in \Gamma$.

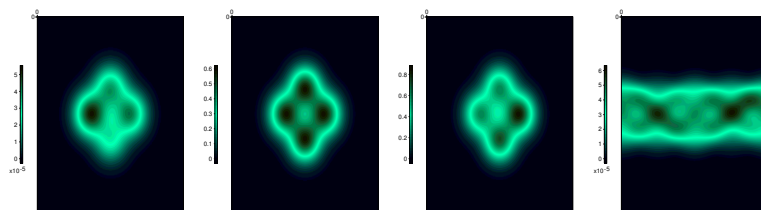


Fig. 7.1: Smooth phantom and data: $\{f_0, \lambda_0, \mu_0, \mathcal{R}_{\text{xfct}} f_0\}$.

7. Numerical results. We show in this Section results of four experiments: three with simulated and one with real data obtained from a diffraction beam system located at the Brazilian Synchrotron Light Source (LNLS). $\{f_i, \lambda_i, \mu_i\}$ denotes the i -th phantom for the fluorescence emission f_i , the X-rays attenuation λ_i and the fluorescence attenuation μ_i .

$\{f_0, \lambda_0, \mu_0\}$ (256x256) is a smooth phantom shown in Figure 7.1 built with smooth functions (four Gaussians) in order to experimentally test the validity of the inversion formula.

Figure 7.2 shows phantoms $\{f_1, \lambda_1, \mu_1\}$ (256x256) and $\{f_2, \lambda_2, \mu_2\}$ (80x80) with their associated xfct Radon transforms computed with $M = 360$ views and $N = 400$ rays per view.

The real data experiment consists of a microscopic sample with a distribution of Copper inside where the available data is the xfct Radon transform $\mathcal{R}_{\text{xfct}} f_3$, computed with $M = 60$ views and $N = 23$ rays per view, and the linear attenuation coefficient λ_3 (60x60 and μ_3 unknown), shown in Figure 7.3.

The numerical implementations of the xfct inversion, either by the approximation of Section 4 or the “exact” inversion of Section 5, are similar to the implementation of Novikov’s formula in [12] for the operator $\mathcal{N}$ of equation (6.2). The Hilbert transform, for the evaluation of m in equation (3.32), was computed as in [17] using the approximation.

$$(7.1) \quad \widehat{\mathcal{H}g}(\sigma) \approx w(\sigma) \hat{g}(\sigma), \quad w(\sigma) = \begin{cases} -i \text{sign}(\sigma), & |\sigma| \leq \sigma_c \\ 0, & |\sigma| > \sigma_c \end{cases}$$

with σ_c a bandwidth. The derivative ∂_t in equation (6.2) was computed using a forward finite difference. Also, sinogram p of Table 5.1 for equation (6.2) depends on the Radon transforms $\mathcal{R}\lambda$ and $\mathcal{R}b$ that are represented in Figure 7.4 for the examples of Figures 7.2 and 7.3.

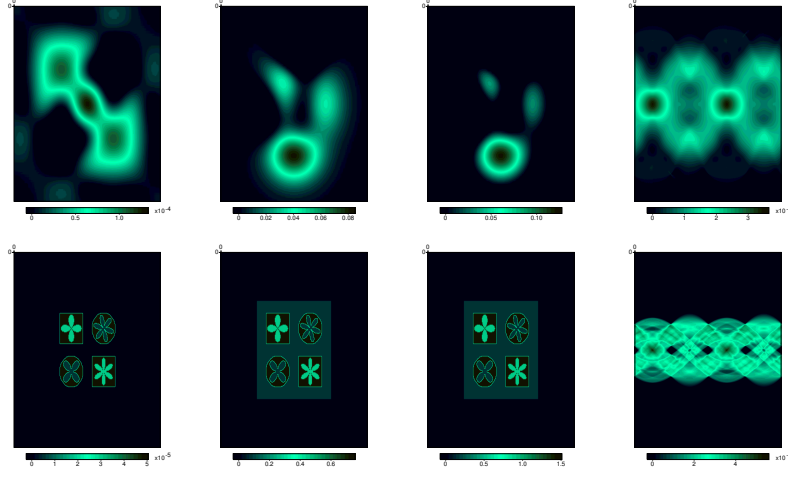


Fig. 7.2: Simulated data: $\{f_1, \lambda_1, \mu_1, \mathcal{R}_{\text{xft}} f_1\}$ above (256×256) and $\{f_2, \lambda_2, \mu_2, \mathcal{R}_{\text{xft}} f_2\}$ below (80×80) . The sinograms were obtained with $M = 360$ views and $N = 400$ rays per view.

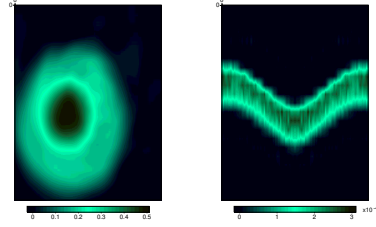


Fig. 7.3: Real xft data. On the left the transmission linear attenuation coefficient λ_3 . On the right the Radon transform $\mathcal{R}_{\text{xft}} f_3$.

We have used the fluorescence angle section as $\Gamma = [n\Delta\theta, \pi - n\Delta\theta]$ with $n > 0$ an integer representing the aperture of Γ and $\Delta\theta$ the uniform sampling of views, i.e $\Delta\theta = 2\pi/M$. Whenever $n = M/4$ the xft Radon transform reduces to $\mathcal{R}_{\beta^*}$ with $\beta^* = \pi/2$. Our simulations were carried out using $n = 5$. The inversion results are shown in Figure 7.5 for the simulated experiments 1 and 2, using $\mathcal{R}_{\text{xft}}^{-1}$ and $(m\mathcal{R}_{\beta^*})^{-1}$ ($m = \pi - 2n$, see Eq.(4.22)) as the inverse operator.

For the experiment with real data, the fluorescence linear coefficient μ is unknown and setting $\mu = \lambda$ could be an alternative [8, 9], and sometimes a reasonable approximation. Figure 7.6 shows the results using the analytic inversion formula comparing the cross-sections of the reconstructions, for the functions f_1 and f_2 , using $\lambda \neq \mu$ (true μ) and $\lambda = \mu$. These profiles are a clear confirmation of the validity of the inversion

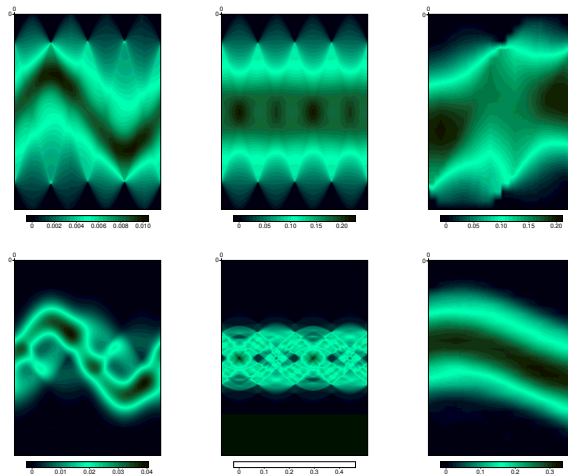


Fig. 7.4: Above the sinogram $\mathcal{R}b_{\xi_\theta}(t, \theta)$ and below the $\mathcal{R}\lambda(t, \theta)$ for experiment 1, 2 and 3 respectively (from left to right).

formulas.

Also we applied the Neumann series for the inversion of $\mathcal{R}_{\text{xft}}$ in the real data, using $\mu = \lambda$ and $\{1, 2, 4, 10\}$ as the number of partial sums. The result is the sequence shown in Figure 7.7, where the convergence of the series is clearly observed with an increasing number of partial sums.

8. Concluding remarks. We have presented in this article a formula for the analytic inversion of the xft attenuated Radon transform as well as an approximated formula when only one angle for the fluorescence data collection is used. Our results in Section 4 confirm, mathematically, the choice made in practice using this angle as $\frac{\pi}{2}$ based on physical arguments. It is worth noting here, that the results obtained with our formulas for inversion are clearly much better than those obtained in the existing xft literature that use crude approximations for the inverse. Also, these results are similar (from the point of view of quality) to those obtained in SPECT when using an analytic inversion of the attenuated Radon transform [12]. In our opinion this implementation could be improved and we are working on that. Another important issue that we will address in the near future is the use of the new formula in iterative schemes trying to retrieve simultaneously the unknown fluorescence emission densities and the attenuation coefficient, as in [8].

9. Acknowledgments. We are very grateful for the support of the researchers of the Nuclear Instrumentation Laboratory (Federal University of Rio de Janeiro), Brazil, and the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS). Also we are very much grateful to two SIAP reviewers, and their strong criticisms of the first version of the paper, making possible a much better and publishable version.

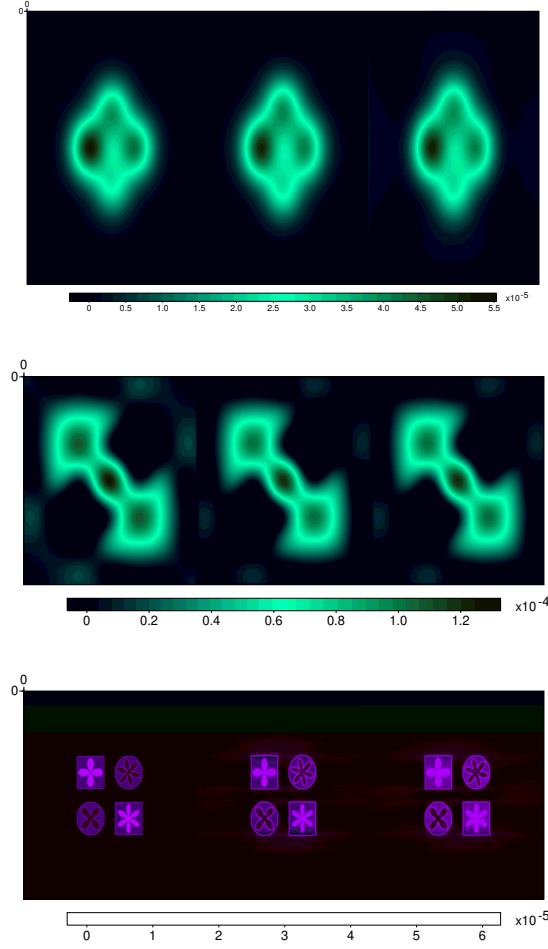


Fig. 7.5: xfact inversion. From left to right: true density map, $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}d$ and $(m\mathcal{R}_{\beta^*})^{-1}d$. Above the results for $d = \mathcal{R}_{\text{xfct}}f_0$, for $d = \mathcal{R}_{\text{xfct}}f_1$ in the center and below for $d = \mathcal{R}_{\text{xfct}}f_2$ (f_0, f_1, f_2 defined in Figures 7.1 and 7.2).

REFERENCES

- [1] G. Dassios, *What non linear methods offered to linear problems ?*, International Journal of Non-linear mechanics, 42, 146-156, 2007.
- [2] M.J.Ablowitz, A.S.Fokas, *Complex Variables*, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [3] A.S.Fokas, *A unified approach to Boundary Value Problems*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 2008.

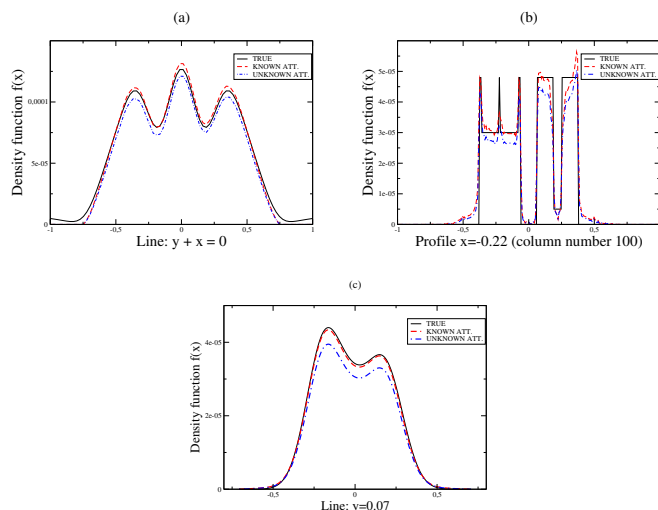


Fig. 7.6: Cross-section reconstruction using analytic inverse with $\lambda \neq \mu$ and $\lambda = \mu$ for (a) function f_1 (b) function f_2 (c) function f_0 .

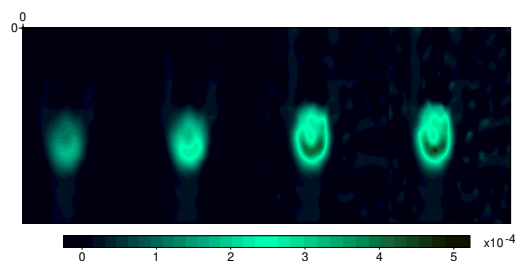


Fig. 7.7: Sequence of partial sums of Eq.(4.41) for the real data of Figure 7.3 using $\mu = \lambda$.

- [4] A.S.Fokas, L.Sung, *Generalized Fourier transforms, their nonlinearization and the imaging of the brain*, Notices of the AMS, Vol.52, No. 10, 2005.
- [5] A.S.Fokas, A.Iserles, V.Marinakis, *Reconstruction algorithm for single photon emission computed tomography and its numerical implementation*, J.R.Soc.Interface, 3, 45-54, 2006.
- [6] A.S.Fokas, A.R.Novikov, *Discrete analogues of ∂ -equations and of Radon Transform*, C.R.Acad.Sci. Paris Ser. I Math., 313, 75, 1991.
- [7] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Fluorescence Tomography: reconstruction by iterative methods*, ISBI 2008, 760-763.
- [8] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion*, Submitted, 2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [9] P.La Rivière, P.Vargas, *Monotonic Penalized-likelihood image reconstruction for X-ray fluores-*

- cence computed tomography*, IEEE Trans. Med. Imaging, vol.25, No.9, 2006.
- [10] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.
 - [11] L.A.Kunyansky, *Generalized and attenuated Radon transforms: restorative approach to the numerical inversion*, Inverse Problems, 8, pp. 809-819, 1992.
 - [12] L.A.Kunyansky, *A new SPECT reconstruction algorithm based on the Novikov's explicit inversion formula*, Inverse Problems, 17, pp 293-306, 2001.
 - [13] R.G.Novikov, *An inversion formula for the attenuated x-ray transform*, Ark. Mat., 40, pp 145-167, (Rapport de Recherche 00/05-3, Université de Nantes, Laboratoire de Mathématiques), 2002.
 - [14] D.E.Cullen, M.H.Chen, J.H.Hubbel, S.T.Perkins, E.F.Plechaty, *Tables and graphs of photon-interaction cross sections from 10eV to 100GeV derived from the LLNL evaluated photon data library*, Lawrence Livermore National Laboratory Tech. Information 6, UCRL-50400, CA, 1989.
 - [15] K.T.Smith, D.C.Solmon, S.L.Wagner, C.Hamaker, *Mathematical aspects of divergent beam radiography*, Proc.Natl.Acad.Sci. USA, Vol. 75, No.5, pp.2055-2058, 1978.
 - [16] S.R.Deans, *The Radon transform and some of its applications*, New York, J.Wiley, 1983.
 - [17] F.Natterer, *The mathematics of computerized tomography*, John Wiley & Sons, 1986.
 - [18] F.Natterer and F. Wubbeling, *Mathematical Methods in Image Reconstruction*, SIAM, 2001.
 - [19] F.Natterer, *Inversion of the attenuated Radon Transform*, Inverse Problems, 17, pp 113-119, 2001.
 - [20] U.Niesen, D.Shah, G.Wornell, *Adaptive alternating minimization algorithms*, CoRR, 2007.
 - [21] H.S.Rocha, G.R.Pereira, M.J.Anjos, P.Faria, G.Kellerman, C.A.Pérez, G.Tirao, I.Mazzaro, C.Giles, R.T.Lopes, *Diffraction enhanced imaging and x-ray fluorescence microtomography for analysing biological samples*, X-Ray Spectrometry, vol.36, pp.247-253, 2007.
 - [22] R.Cesareo, S.Mascarenhas, *A new tomographic device based on the detection of fluorescent x-rays*, Nucl. Instrum. Methods A, 277, pp. 667-672, 1989.
 - [23] Chukalina, M., Simionovici, A., Snigirev, A., and Jeffries, T. *Quantitative characterization of microsamples by X-ray fluorescence tomography*. X-Ray Spectrometry, 31, 448450, 2002.
 - [24] T. Yuasa, M. Akiba, T. Takeda, M. Kazama, A. Hoshino, Y. Watanabe, K. Hyodo, F.A. Dilmanian, T. Akatsuka and Y. Itai, *Reconstruction method for fluorescent X-ray computed tomography by least-squares method using singular value decomposition* IEEE Trans. Nuclear Science, 44, 1, 54-62, 1997.
 - [25] G.Friedmann Rust, J.Weigelt, *X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.45, No. 1, 1998.

Apêndice C

Artigo/Inversão Aproximada

A teoria de inversão aproximada desenvolvida no Capítulo 4, Seção 4.3.3, está apresentada no artigo à seguir, submetido e aceito no periódico *Physics in Medicine and Biology*. Também com o aval de Fokas, foi citado no *Topical Review* do periódico *Inverse Problems*, veja [65].

Inicialmente concebido como um artigo de divulgação da inversa encontrada em xfct, sua idéia original era comparar a inversa analítica com outros métodos existentes e aproximados em xfct. Porém, com a descoberta do trabalho de La Rivière [50], resultou em um trabalho maior e comparativo com o mesmo. A idéia proposta é mais geral que a apresentada em [50] mas sofre do mesmo problema do artigo no Apêndice B: a implementação.

Possíveis consequências deste artigo

- Análise, prática e experimental em dispositivos reais de xfct, da distância do objeto em relação ao detector de fluorescência. Provamos que o erro entre a transformada de Radon em xfct, considerando apenas o raio de 90 graus, e considerando todos os raios emergentes da amostra dentro de um cone, há um mínimo para um determinado cone. Isto significa que é possível setar uma distância ótima de tal forma que se tenha este cone, melhorando a relação sinal-ruído.
- Efetivar a inversão aproximada em mais dados reais, com possível aplicação em três dimensões.

Exact analytic reconstruction in x-ray fluorescence CT and approximated versions

Eduardo X Miqueles and Alvaro R De Pierro

Department of Applied Mathematics, University of Campinas (UNICAMP), Campinas, Brazil

E-mail: miqueles@ime.unicamp.br and alvaro@ime.unicamp.br

Received 24 September 2009, in final form 11 December 2009

Published 20 January 2010

Online at stacks.iop.org/PMB/55/1007

Abstract

X-ray fluorescence computed tomography (XFCT) is a relatively new synchrotron-based imaging modality aiming at reconstructing the distribution of nonradiative elements within a sample irradiated with high-intensity monochromatic x-rays. In a recent paper La Rivière (2004 *Phys. Med. Biol.* **49** 2391–405) presented an approximated inversion method based on reducing the problem to the inversion of the exponential radon transform. In this paper we compare La Rivière's results with recently derived 'exact' analytic formulae for the generalized attenuated radon transform. We present numerical experiments with real and simulated data.

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

1. Introduction

X-ray fluorescence computed tomography (XFCT) is a relatively new synchrotron-based imaging modality that is like a combination of x-ray computed tomography (CT) and single-photon emission computed tomography (SPECT) (Cesareo and Mascarenhas 1989), but more related to the latter, where correction for attenuation is essential. High-intensity monochromatic synchrotron x-rays, with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest, stimulate fluorescence emissions, isotropically distributed, which are detected by a detector placed with its face parallel to the direction of the incident beam (Friedmann Rust and Weigelt 1998). Part of the emission is absorbed by the sample, so correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions could have many important biomedical applications, including iodine distributions in thyroid tissue (Yuasa *et al* 1997), platinum distribution in clusters of cancer cells treated with cisplatin (Cholewa *et al* 2001), trace element distribution in excised vascular plaques (Cichocki *et al* 1985), among others.

A continuous mathematical model for XFCT is given by the generalized attenuated radon transform (GART) (Miqueles and De Pierro 2009b). Until very recently, there was

no analytic formula for its inversion. Approximate inversions in the continuous setting have been obtained by means of iterations using the inverse radon transform as an approximate inverse (Miqueles and De Pierro 2008), as it was done for the attenuated transform for SPECT imaging (Kunyansky 1992). Recently, pioneering the application of analytic inversion in XFCT, La Rivière (2004), assuming constant transmission attenuation, approximated the emission attenuation by an average, and applied the formalism of Metz and Pan (1995) to approximate the inverse. In 2000, Novikov (2002) was able to find an analytic inverse for the attenuated radon transform; latter it was found that Novikov's formula was a consequence of new theories for solving boundary value problems, originally developed by Fokas and co-authors (Fokas 2008). In Miqueles and De Pierro (2009b), extending the Fokas approach, we developed an analytic formula for the inversion of the XFCT transform. In this paper we present a computational implementation of the analytic inverse in Miqueles and De Pierro (2009b) and we compare its performance with two other different possible approximations in the continuous setting: the one proposed by La Rivière (2004), averaging the emission attenuation and inverting via Metz–Pan formula (Metz and Pan 1995, Shinohara *et al* 1999, Inouye *et al* 1989), assuming constant transmission attenuation and an improvement of La Rivière's approach that uses Novikov's inversion for the attenuated radon transform.

Because of the close connection of the approximations that will be used for XFCT with SPECT, in section 2 we describe the single-photon emission tomography model. Section 3 contains a description of the geometry of the data collection and the derived model for x-ray fluorescence tomography, respectively, that leads to the generalized attenuated radon transform of section 4. In section 5 we describe the first approximate approach suggested by La Rivière (2004). In section 6 the basics of the general approach that leads to Novikov's inversion formula for the attenuated radon transform are presented. Section 7 contains a brief description of the equations necessary to obtain the analytic inversion formula of the XFCT operator. In section 8 we show the experiments comparing the approaches of the previous sections for simulated and real data. Finally section 8 presents some concluding remarks.

2. Emission tomography

In emission tomography (SPECT), a radiopharmaceutical is injected in the patient, and the emissions are detected by a gamma camera that uses collimators in order to determine lines, that is, the projections from which emission densities will be reconstructed. Part of the emission is absorbed by the body, and this attenuation should be introduced in the form of an exponential factor that depends on the line integral determined by the emission point and the detector (Natterer and Wübbeling 2001) (as in (1)).

Let $f(x)$ be the mean number of photon emissions at x (f is a compactly supported function within a cylinder Z with boundary ∂Z), $a(x)$ the attenuation (linear attenuation coefficient) and $d(t, \theta)$ the number of photons detected along the line defined by the equation $x \cdot \xi = t$ with $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$. Then, mathematically, the equation modelling SPECT is given by

$$\int_{x \cdot \xi = t} f(x) e^{-\int_0^\infty a(x + q\xi^\perp) dq} dx = d(t, \theta). \quad (1)$$

To simplify our notation, we introduce an operator $\mathcal{D}$ to identify the attenuation appearing on the exponential above. Let $\mathcal{D}$ be the *divergent beam transform* defined by

$$\mathcal{D}h(x, \theta) = \int_0^\infty h(x + q\xi^\perp) dq. \quad (2)$$

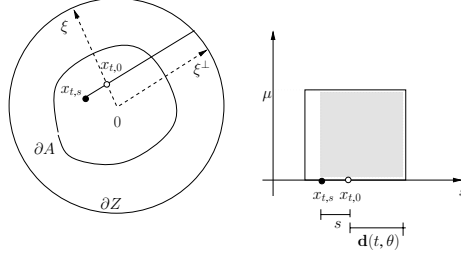


Figure 1. Uniform attenuation.

With the above notation, our problem in (1) becomes

$$d(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} f(x) e^{-\mathcal{D}a(x, \theta)} dx \equiv \mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta). \quad (3)$$

The first analytic inversion formula for $\mathcal{R}_{\text{spect}}$ is due to Novikov (2002). If the attenuation is constant equal to λ , we obtain the so-called exponential radon transform. That is, if $a(x) = \lambda \chi_A(x)$ with χ_A the indicator function for a convex set A , where $\text{supp } f \subseteq A$, the divergent beam transform of a becomes

$$\mathcal{D}a(x, \theta) = \lambda[s + \mathbf{d}(t, \theta)], \quad x = x_{t,s} = t\xi + s\xi^\perp, \quad (4)$$

with $\mathbf{d}(t, \theta)$ standing for the distance from point $t\xi = x_{t,0}$ to the boundary ∂A in the direction given by $\xi^\perp$. This is illustrated in figure 1. It follows that $\mathbf{d}(t, \theta) = \mathcal{D}\chi_A(t\xi, \theta)$ and therefore

$$\mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta) = e^{-\lambda \mathbf{d}(t, \theta)} \int_{x \cdot \xi = t} f(x) e^{-\lambda(x \cdot \xi^\perp)} dx. \quad (5)$$

The integral on the right-hand side in equation (5) defines the exponential radon transform, ERT for short,

$$\mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) \equiv \int_{x \cdot \xi = t} f(x) e^{-\lambda(x \cdot \xi^\perp)} dx. \quad (6)$$

The first analytic inversion formula of $\mathcal{R}_{\text{ert}}$ is due to Tretiak and Metz (1980), and it is worth noting that since $\mathcal{R}_{\text{spect}} = e^{-\lambda \mathbf{d}} \mathcal{R}_{\text{ert}}$, the inversion can be written equivalently by $\mathcal{R}_{\text{ert}}^{-1} = \mathcal{R}_{\text{spect}}^{-1} e^{-\lambda \mathbf{d}}$. There is a proof of such equivalence in Kunyansky (2001).

We have recently found (Miqueles and De Pierro 2009b) that if the linear coefficient a depends also on the direction of emission η , an inversion procedure to find f can be constructed. It is strongly based on the work of Fokas and co-authors (Fokas *et al* 2006, Fokas and Sung 2005, Fokas 2008). Such a procedure allows us to find the inversion of the XFCT radon transform, defined in the next section, the SPECT radon transform and also the ert.

3. A model for XFCT

X-ray fluorescence tomography is also an emission-type tomography. The difference is that the emission in this case is stimulated by a low-energy (but high intensity, if produced by a cyclotron) incident beam, emitted from outside the sample. The geometry of a fluorescence tomography experiment is shown in figure 2, which is very similar to the scanning geometry

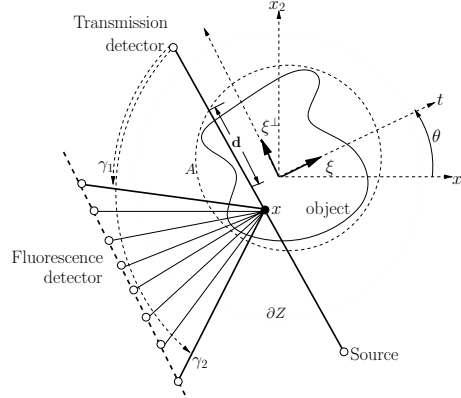


Figure 2. Scanning geometry for XFCT. We assume that the fluorescence detector is not position sensitive.

of transmission tomography except that measurements are collected by two detectors: the conventional one and the fluorescence one, that is placed with its face parallel to the direction of the incident beam.

The source emits x-rays, along the line defined by $\xi^\perp$, that stimulates fluorescence emission at the given point x . This emission is detected by an arc of detectors defined in figure 2 by the angle section $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$. Part of the photons corresponding to this emitted fluorescence are attenuated by the body; the same happens with the x-rays, but with a different attenuation coefficient (different energy levels).

If λ is the linear attenuation coefficient describing the absorption of the excitation beam of x-rays, the flux rate from the source to a point $x \in \tau$ inside the object is proportionally given by $\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$.

At the energy level of the incident beam, the fluorescence emission of rays within the angle section $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ towards the parallel detector comes out with an initial flux rate proportional to $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$. Hence, the flux rate reaching the detector, for a given angle $\gamma \in \Gamma$, is proportionally given by $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\} \exp\{-\mathcal{D}\mu(x + \theta + \gamma)\}$ where μ is the linear attenuation coefficient that describes the absorption of the emission fluorescence ray. Finally, the total rate of fluorescence x-rays detected by the detector is obtained varying $\gamma \in \Gamma$ and x over the transmission ray, that is,

$$d(t, \theta) \propto \int_{x: \xi=t} dx f(x) e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma. \quad (7)$$

Neglecting physical constants that must be considered in (7), our problem reduces to solving the equation

$$d(t, \theta) = \int_{x: \xi=t} dx f(x) e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma \equiv \mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta). \quad (8)$$

More details on the deduction of the above models can be found in Yuasa *et al* (1997).

In principle, Γ depends on the point x varying along the transmission ray; but since the emission of fluorescence rays is isotropic, we consider in this paper an approximate version

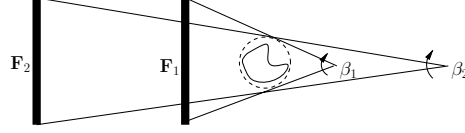


Figure 3. Distance from a fluorescence detector to the sample, determining the solid angle: $\beta_1 > \beta_2$.

for the solid angle, assuming that Γ is constant independently of the point. In practice, Γ should be determined taking into account the size of the fluorescence detector and its distance to the sample, as described in figure 3. The closer the fluorescence detector $\mathbf{F}$ is to the beam, the larger the solid angle β and therefore there is a higher sensitivity to fluorescence.

The noise, due to scattering, also increases with a larger solid angle Γ and, for synchrotron radiation, the scatter is minimized at 90° . Hence, in practice, the solid angle is not too large in such a way that there should be a balance between the increased scatter background and the increased sensitivity to fluorescence. In section 8, taking into account the mathematical model (8), we present simulated experiments for the angle section Γ proving the following: there exists an optimal Γ which gives almost the same XFCT radon data as the one computed only with $\gamma = \pi/2$. This analysis gives a clue for detector placement as well as for the solid angle to be used in practice.

4. The generalized attenuated radon transform

In this section we describe a generalization of the previous transforms in order to better explain the approximations that could be used by means of the different existing analytic inversions.

We define the generalized attenuated radon transform as the operator $\mathcal{R}_\omega$, such that

$$\mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_\tau f(x) \omega(x, \theta) dx, \quad (9)$$

where $\tau = \{x \in \mathbb{R}^2 : x \cdot \xi = t\}$ and ω is a given positive weight function. When $\omega(x, \theta) = 1$, we get the standard radon transform with a very fast and easy inversion formula deduced via the Fourier slice theorem (Deans 1983).

When

$$\omega(x, \theta) \doteq \omega_{\text{spect}}(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta)}, \quad (10)$$

we get the attenuated radon transform (Natterer 2001) arising in SPECT. An analytic inversion formula for this transform remained an open problem for many years until Novikov's paper (Novikov 2002). Recently (Fokas *et al* 2006), Novikov's inversion formula was deduced by means of a new theory for boundary value problems, mainly developed by Fokas.

In the meantime, before Novikov–Fokas discoveries, inversion formulae for particular cases of the attenuated radon transform were developed. For uniform attenuation, that is, $\omega(x, \theta) = e^{-\mu(x \cdot \xi^\perp)}$, we get the exponential radon transform. An inversion formula for this transform was first given by Tretiak and Metz (1980), and further improved by Metz and Pan (1995).

Finally, for

$$\omega(x, \theta) \doteq \omega_{\text{xfct}}(x, \theta) = \omega_\lambda(x, \theta) \omega_\mu(x, \theta) \quad (11)$$

with

$$\omega_\mu(x, \theta) = \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma \quad \text{and} \quad \omega_\lambda(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \quad (12)$$

we retrieve the XFCT radon transform. With the change of variables $x = t\xi + s\xi^\perp$, and since we are assuming compactly supported functions, it is easy to see that (9) is alternatively given by

$$\mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{-p(t)}^{p(t)} f(t\xi + s\xi^\perp) \omega(t\xi + s\xi^\perp, \theta) ds \quad (13)$$

with $p(t) = \sqrt{1 - t^2}$.

As a reference for the inversion procedures described in the following sections, we will also compare the results obtained with a method commonly used in the literature. This is the approximation for the inverse of $\mathcal{R}_\omega$, due to Hogan (Hogan *et al* 1991, Brunetti and Golosio 2001), and given by

$$\mathcal{R}_\omega^{-1}d \approx \mathbf{H}d \equiv \frac{\mathcal{R}^{-1}d(x)}{a(x)}, \quad a(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(x, \theta) d\theta. \quad (14)$$

Hogan's method is equivalent to a reconstruction using the filtered backprojection algorithm on the XFCT data d (for the calculation of $\mathcal{R}^{-1}$), followed by a scaling at each point (pixel). The scaling is determined by the factor a , which is an average attenuation experienced by all the emissions from the point.

The mathematical problem that we want to solve in XFCT is described as follows, for ω defined as in (11).

Problem: Given d , λ and μ , find f such that

$$\mathcal{R}_{\omega(\mu)} f - d = 0. \quad (15)$$

In Miqueles and De Pierro (2009b), using Fokas transforms theory, we presented an analytic inversion formula for (13). In the following sections, we present the different possibilities for approximate inversion using the existing analytic inverse formulae for the exponential (as suggested by La Rivière) and the attenuated radon transform, comparing the results with our whole analytic inversion. In general λ is computed via inversion of the radon transform of known data, collected by the transmission detectors and μ could be estimated, either by considering $\mu = \lambda$ or by an iterative refinement procedure like in Miqueles and De Pierro (2009a). Throughout the paper, we denote ω_μ or $\omega(\mu)$ as the weight function depending on the attenuation map μ .

5. La Rivière's approximate approach

In La Rivière (2004), La Rivière suggested an approximate inversion for the XFCT transform using an average of the weight function ω_μ in equation (12). Indeed, from (13) with ω defined as in (11)

$$d(t, \theta) = \int_{-p(t)}^{p(t)} f(x_{t,\theta}(s)) \omega_\lambda(x_{t,\theta}(s), \theta) \omega_\mu(x_{t,\theta}(s), \theta) ds \quad (16)$$

where we use the notation $x_{t,\theta}(s) = t\xi + s\xi^\perp$. Now, as for the weight ω_μ , we use the first-order Fourier expansion for the variable s , keeping θ fixed,

$$\omega_\mu(x_{t,\theta}(s), \theta) \approx \frac{1}{2p(t)} \int_{-p(t)}^{p(t)} \omega_\mu(x_{t,\theta}(s)) ds \stackrel{\text{eq. (13)}}{=} \frac{1}{2p(t)} \mathcal{R}\omega_{\mu,\theta}(t, \theta) \quad (17)$$

with $\omega_{\mu,\theta} = \omega_{\mu}(\cdot, \theta)$. The equation for d becomes

$$\frac{2p(t) d(t, \theta)}{\mathcal{R}\omega_{\mu,\theta}(t, \theta)} \approx \int_{\tau} f(x) \omega_{\lambda}(x, \theta) dx. \quad (18)$$

Note that the right-hand side, in the above equation, is the attenuated radon transform that models SPECT data. Using a more compact notation, we will have

$$z(t, \theta) \equiv \frac{2p(t) d(t, \theta)}{\mathcal{R}\omega_{\mu,\theta}(t, \theta)} \approx \mathcal{R}_{\text{spect}} f(t, \theta). \quad (19)$$

Since ω_{μ} is a strictly positive function (see equation (12)), the left-hand side sinogram for the above equation is well defined and is only zero when d is zero.

In La Rivière (2004) La Rivière considers $\lambda(x) = \lambda$ as a constant function within the convex cross-section A supporting f (see figure 2), i.e. $\lambda(x) = \lambda \chi_A(x)$. With this assumption, it follows from equations (5) and (19) that

$$z(t, \theta) \approx e^{-\lambda d(t, \theta)} \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta) \Rightarrow z(t, \theta) e^{\lambda d(t, \theta)} \approx \mathcal{R}_{\text{ert}} f(t, \theta). \quad (20)$$

Finally, La Rivière's algorithm uses the Metz–Pan formula to invert $\mathcal{R}_{\text{ert}}$ in the approximate equation (20) with data given by $z e^{\lambda d}$. Details can be found in Metz and Pan (1995), Shinohara *et al* (1999), Inouye *et al* (1989).

Note that the function $r_1(t, \theta) \equiv \mathcal{R}\omega_{\mu,\theta}(t, \theta)/2p(t)$ denotes the average of the emissions along the transmission ray $\{x \in \mathbb{R}^2 : t = x \cdot \xi_{\theta}\}$ determined by the parameters (t, θ) . Hence, La Rivière's method can be interpreted as follows: first, the XFCT sinogram d is scaled by the correction factor r_1 yielding function z ; second, z is multiplied by $e^{\lambda d}$ which is a new sinogram, say r_2 ; finally, r_2 is used for the inversion of $\mathcal{R}_{\text{ert}}$ using the Metz–Pan formula.

6. Novikov's inversion and a better approximation

Instead of the Metz–Pan inversion, that assumes a uniform attenuation, a more accurate approximation could be achieved substituting the ERT inverse in (19) (that assumes a constant attenuation $\lambda = \lambda(x)$) by the analytic inversion formula of Novikov (Novikov 2002), that allows the use of the true attenuation. That is, instead of assuming a constant λ , we use the value $\lambda(x)$ retrieved from the data and the only approximation left is the one in (17). In (19) the exact inversion is used.

For the sake of completeness we briefly describe Novikov's formula.

For a given weight ω and a sinogram p , let us define the linear operator $\mathcal{N}(\omega, p)$, acting on a sinogram d , by

$$\mathcal{N}(\omega, p)d(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t [\omega_{\lambda}^{-1} m\{p, d\}](x \cdot \xi, \theta) d\theta \quad (21)$$

with $m = m\{p, d\}$ and the following operation (see Miqueles and De Pierro (2009b) and Kunyansky (2001)) on sinograms p, d

$$m\{p, d\} = e^{-\frac{t}{2}} \{h_c(p) \mathcal{H}(h_c(p) e^{\frac{t}{2}} d) + h_s(p) \mathcal{H}(h_s(p) e^{\frac{t}{2}} d)\} \quad (22)$$

where $h_c(p) = \cos(\frac{1}{2}\mathcal{H}p)$ and $h_s(p) = \sin(\frac{1}{2}\mathcal{H}p)$, $\mathcal{H}$ being the Hilbert transform. See Fokas (2008), Kunyansky (2001), Miqueles and De Pierro (2009b) for more details on the deduction of the above formula. The linearity of $\mathcal{N}$ comes from the linearity of $\mathcal{H}$.

Substituting ω by ω_{spect} and p by $\mathcal{R}\lambda$ in (21) we obtain Novikov's inversion formula $\mathcal{N}(\omega_{\text{spect}}, \mathcal{R}\lambda) = \mathcal{R}_{\text{spect}}^{-1}$. Therefore, our second approximate inversion takes advantage of equation (19), yielding

$$f(x) \approx \mathcal{N}(\omega_{\lambda}, \mathcal{R}\lambda)z(x) \quad (23)$$

with z defined in (19). This approach can be seen as a generalized filtered-backprojection. Indeed, the integral in (21) is the classical backprojection, although its integrand does not have a nice and helpful decomposition into convolution-type formulae, as is the case of radon ($\omega = 1$).

7. An analytic inverse

In order to find an analytic inverse of the XFCT transform, in Miqueles and De Pierro (2009b) we followed Fokas's approach (Fokas 2008), and we extended it for XFCT. Next we give a brief description of the rationale. Details could be found in Miqueles and De Pierro (2009b).

The departure point is the analysis of the differential equation:

$$\eta \cdot \nabla u(x) + a(x, \eta)u(x) = f(x) \quad (24)$$

where a is a function related to the attenuation, and $\eta = \eta(\lambda) \in \mathbb{C}^2$, $\lambda \in \mathbb{C}$ is a curve in the complex plane. An appropriate change of variables leads to the complex equation $(\eta \cdot v)\partial_z u + (\eta \cdot \bar{v})\partial_{\bar{z}} u + a(x)u(x) = f(x)$. Next, a choice of $\{\eta, v\}$ such that $\eta \cdot \bar{v} = 0$ defines a curve $j(\lambda)$, that leads to a Riemann–Hilbert problem, that can be easily solved. After long calculations (Miqueles and De Pierro 2009b), we arrived to the formulae described next.

Let $\mathcal{L} = \mathcal{L}(x, \theta)$ be defined by

$$\mathcal{L}(x, \theta) = -\ln \left[\frac{1}{m^2} \omega_\mu(x, \theta) \omega_\mu(x, \theta + \pi) \right], \quad (25)$$

also $\mathcal{L}_\theta(x) = \mathcal{L}(x, \theta)$, and let $p(t) = \sqrt{1-t^2}$ and $\ell = \ell(x)$ be a function with the radon transform given by

$$\mathcal{R}\ell(t, \theta) = \begin{cases} \frac{1}{2p(t)} \mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta) & |t| < 1 \\ 0, & |t| = 1. \end{cases} \quad (26)$$

We then obtain the inversion formula

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \mathcal{N}(\omega_{\text{xfct}}, \mathcal{R}\lambda + \mathcal{R}\ell) \quad (27)$$

with the operator $\mathcal{N}$ defined in equation (21) and $\mathcal{R}\ell$ by (26). It is worth noting that the rationale above leads, for $a(x, \eta) = 0$, to the inverse of the radon transform, and for $a(x)$ equal to the attenuation λ , Novikov's formula is retrieved. In order to get $a(x, \eta)$ for the deduction of the $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$ formula, an appropriate change of variables is needed (Miqueles and De Pierro 2009b).

It is also possible to use only one angle for the inversion. In fact, by (12) and (9), we use Fubini's theorem to obtain

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}} f(t, \theta) = \int_{\Gamma} d\gamma \int_{\tau} dx f(x) \omega_\lambda(x, \theta) \bar{\omega}_\mu(x, \theta + \gamma) \quad (28)$$

$$\equiv \int_{\Gamma} d\gamma \mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) \quad (29)$$

with

$$\mathcal{R}_\gamma f(t, \theta) = \int_{\tau} f(x) \omega_\lambda(x, \theta) \bar{\omega}_\mu(x, \theta + \gamma) dx \quad (30)$$

and $\bar{\omega}_\mu(x, \theta) = \exp[-\mathcal{D}\mu(x, \theta)]$. It was proven in Miqueles and De Pierro (2009b) that if the fluorescence attenuation map μ satisfies the condition

$$|\partial_\theta \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*)| < \frac{2\epsilon}{m},$$

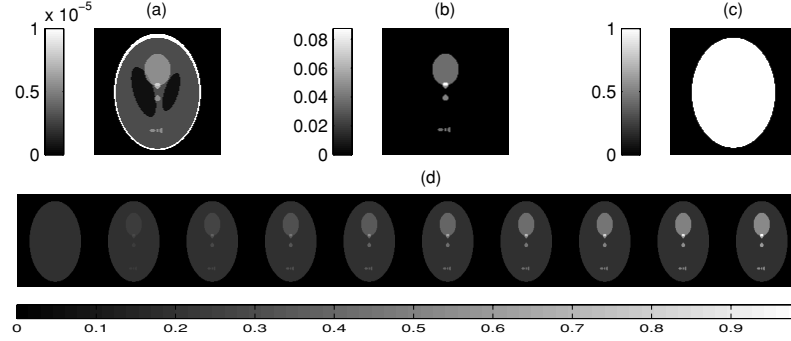


Figure 4. Phantoms used for simulation: (a) density function f , (b) function g , equation (32), (c) convex cross-section b and (d) sequence of functions $\mu^{(k)}$.

for some $\epsilon > 0$ (sufficiently small), the inverse of $\mathcal{R}_{\beta^*}$, with $\beta^* = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$, is a good approximation to $\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1}$. As a consequence, we obtain a Neumann series to represent the inverse operator

$$\mathcal{R}_{\text{xfct}}^{-1} = \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{I} - \frac{1}{m} \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1} \mathcal{R}_{\text{xfct}} \right)^k \mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$$

with $\mathcal{I}$ being the identity operator, $m = \gamma_2 - \gamma_1$ and $\mathcal{R}_{\beta^*}^{-1}$ being the inverse obtained just for the angle β^* :

$$\mathcal{R}_{\beta^*}^{-1} = \mathcal{N}(\omega_{\beta^*}, p_{\beta^*}), \quad p_{\beta^*}(t, \theta) = \mathcal{R}\lambda(t, \theta) + \mathcal{R}\mu(t, \theta + \beta^*) \quad (31)$$

with $\omega_{\beta^*}(x, \theta) = \omega_{\lambda}(x, \theta)\bar{\omega}_{\mu}(x, \theta + \beta^*)$ and $\mathcal{N}$ defined in (21).

Remark: It is worth noting here that Fokas theory is heavily founded on complex analysis concepts, making its extension to 3D, using the same approach, very unlikely. However, we hope that asymptotic approaches could be possible (Ablowitz and Fokas 2003).

8. Numerical experiments

8.1. Simulated data

The simulated experiments were carried out with $f = f(x)$ as a modified scaled version of the Shepp-Logan phantom (see figure 4(a)). The function $g = g(x)$ has been chosen in order to produce higher attenuation effects in high emission areas (high values of f , see figure 4(b)), and the function $b = b(x)$ defines the convex cross-section of f , that is, mathematically, $b(x) = \chi_E(x)$ where E is the largest ellipsoid of the Shepp-Logan phantom (see figure 4(c)) and χ_E is its characteristic function. In order to test the algorithms, we consider λ as a constant transmission attenuation within E and a varying fluorescence attenuation μ defined by

$$\mu^{(k)}(x) = s_k g(x) + \mu_0 b(x), \quad \lambda(x) = \lambda_0 b(x) \quad (32)$$

where $s_k = k$, $\mu_0 \in \{0.20, 1.20\}$ and $\lambda_0 \in \{0.13, 0.77\}$ as in La Rivière (2004), and $0 \leq k \leq 10$. So, increasing k means increasing the attenuation values of the main features in

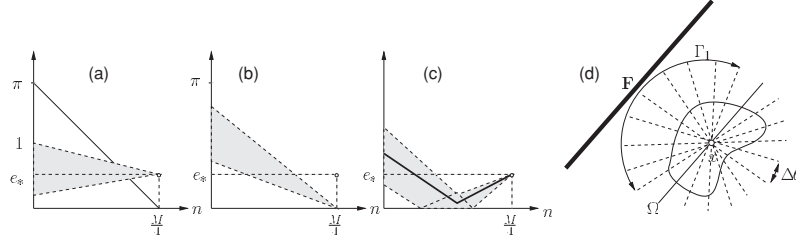


Figure 5. (a)–(c) Analysis for the error $\mathcal{R}_{xct(n)} f - \mathcal{R}_{xct(M/4)} f$, see the text for details. (d) Example of the solid angle Γ taking advantage of the transmission rays.

the phantom. Figure 4(d) shows the sequence of images $\mu^{(k)}$ for $\mu_0 = 0.20$. All phantoms (figure 4) are discretized on a $P \times P$ grid, with $P = 128$.

In figure 5, M denotes the number of views and $\Delta\theta = 2\pi/M$ the view sampling area. Also, in this section, N denotes the number of rays (per view) for the simulated experiments.

Remark: In order to simplify the discretization of the mathematical model (8), we use the transmission rays to build the solid angle of the fluorescence emission rays. That is, for a given point x , we select a subset of those rays going through x to determine also the solid angle Γ . Figure 5(d) shows an illustrative example, with 20 transmission rays (in $[0, 2\pi]$) through a given point. For a particular ray Ω (belonging to a full projection set), the solid angle is determined by the remaining nine rays. We denote this solid angle by Γ_1 since the first ray (in a counterclockwise direction) has an offset of $\Delta\theta$ from the ray Ω .

In general, let the fluorescence angle section be $\Gamma_n = [n\Delta\theta, \pi - n\Delta\theta]$ with n being a positive integer representing the aperture of Γ_n (that is, the offset index from the current transmission ray). Setting $n = 0$ means that all rays starting from the point x are considered, including the current transmission ray. It is easy to see that $0 \leq n \leq \frac{M}{4}$. For $n = \frac{M}{4}$, the XFCT radon transform reduces to $\mathcal{R}_{\beta^*}$ (γ replaced by β^* in equation (30)) with $\beta^* = \pi/2$ (see figure 6). $\mathcal{R}_{xct(n)}$ will denote the transform in (9) with the weight function ω_μ as in (12) and Γ replaced by Γ_n .

From equation (8), taking $\mathcal{R}_{\beta^*}$ as a reference, we can easily verify (due to the linearity of the transforms) that the error $\mathcal{R}_{xct(n)} f(t, \theta) - \mathcal{R}_{\beta^*} f(t, \theta)$ is influenced mainly by the error weight function

$$\int_{\Gamma_n} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma - e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*)} = m(\Gamma_n) e_n - e_s. \quad (33)$$

Applying the mean value theorem for integrals in the first term of the left-hand side equality in (33), we obtain $e_n = e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta_n)}$ for some β_n in the interval Γ_n , with length $m(\Gamma_n) = \pi - 2n\Delta\theta$ (the same definition for e_s with β^*). Figure 5(a) shows the sequence $m_n \doteq m(\Gamma_n)$ (full line), the reference value e_s and the feasible set (shaded area) for the values of the sequence e_n . The sequence $m_n e_n$ lies within the shaded area of figure 5(b) and hence, the weight in (33) as a function of n , lies in the shaded area of figure 5(c), having a minimum value (bold line). Therefore, there must be some value of n_0 such that the error $\mathcal{R}_{xct(n_0)} f - \mathcal{R}_{\beta^*} f$ is minimum.

In order to select an aperture for the comparisons and to find the value of n_0 discussed above, we performed experiments with different values of n , having the aperture for $\pi/2$ as a reference. For $(P, M, N) = (128, 128, 128)$, $\mu^{(10)}$, $\lambda_0 = 0.13$ and $\mu_0 = 0.20$, figure 7

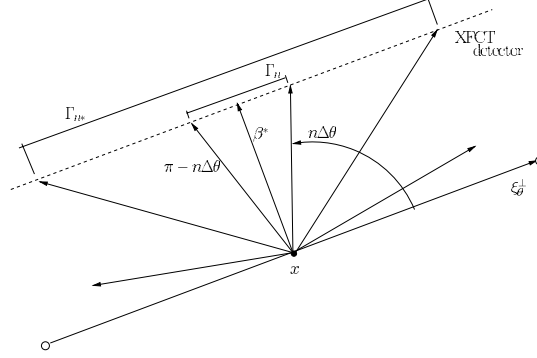
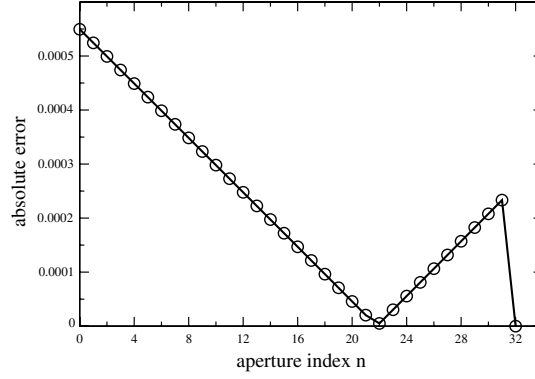


Figure 6. XFCT aperture angle section.

Figure 7. $E_n = \|\mathcal{R}_{\text{xfct}(n)} f - \mathcal{R}_{\text{xfct}(\frac{M}{4})} f\|_2$.

shows the sequence of absolute errors $E_n = \|\mathcal{R}_{\text{xfct}(n)} f - \mathcal{R}_{\text{xfct}(\frac{M}{4})} f\|_2$. By simple inspection, we can see that the minimum of the sequence (E_n) is obtained with $n_0 \approx \frac{7M}{40}$, meaning that this will be the best angle section in the sense that $\mathcal{R}_{\text{xfct}(n_0)} \approx \mathcal{R}_{\beta^*}$. To confirm this estimate, figure 8 shows the sequence of plots of $\mathcal{R}_{\text{xfct}(n)} f(t, \pi)$ for $n \in \{4, 15, 19, 21, 23, 25, 28, 32\}$ (from left to right), where we can see that our assertion about $\mathcal{R}_{\text{xfct}(n_0)}$ is true with $n_0 = 21$ (fourth plot). In degrees, this is equivalent to consider the approximate apertures $\{157^\circ, 95^\circ, 73^\circ, 61^\circ, 50^\circ, 39^\circ, 22^\circ, 0^\circ\}$.

8.2. Simulated experiments

Let us denote $\mathcal{A} = \mathcal{A}(\lambda, \mu)$ any approximate inversion algorithm for (15) for given attenuation parameters λ and μ . $\mathcal{A} = \mathcal{I}$ will be the analytic inversion algorithm of section 7, $\mathcal{A} = \mathcal{N}$ the one in section 6 and $\mathcal{A} = \mathcal{L}$, La Rivière's approach of section 5 (using Metz–Pan

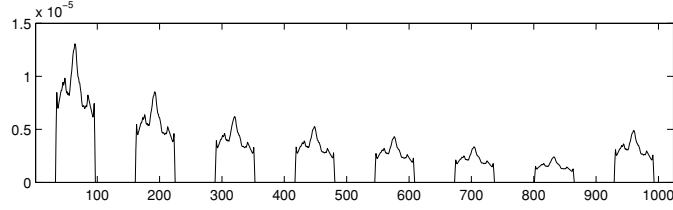


Figure 8. Sequence of projections $\mathcal{R}_{\text{det}(n)}f(t, \pi)$ for $n \in \{4, 15, 19, 21, 23, 25, 28, 32\}$, from left to right, i.e. using aperture angles $\{157^\circ, 95^\circ, 73^\circ, 61^\circ, 50^\circ, 39^\circ, 22^\circ, 0^\circ\}$.

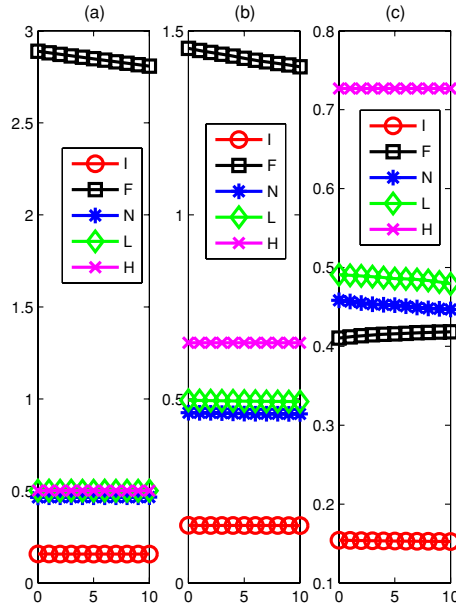


Figure 9. Sequences $q_k(\mathcal{I}, n)$, $q_k(\mathcal{F}, n)$, $q_k(\mathcal{N}, n)$, $q_k(\mathcal{L}, n)$ and $q_k(\mathcal{H}, n)$ with a low attenuation pair $(\lambda_0, \mu_0) = (0.13, 0.20)$. (a) $n = 5$, (b) $n = 15$ and (c) $n = 28$.

(Metz and Pan 1995) implementation for the exponential Transform inversion). $\mathcal{A} = \mathcal{F}$ will be the inversion using just filtered backprojection and $\mathcal{A} = \mathcal{H}$ the approximate inversion of Hogan (Hogan *et al* 1991) (see equation (14)). Let (q_k) be the sequence of relative errors for the corresponding algorithms $\mathcal{A}$, given attenuations $\mu^{(k)}$,

$$q_k(\mathcal{A}, n) = \frac{\|\mathcal{A}(\lambda, \mu^{(k)})d - f\|_2}{\|f\|_2}, \quad k = 0, 1, \dots, 10, \quad (34)$$

where $\mathcal{R}_{\text{det}(n)}f = d$.

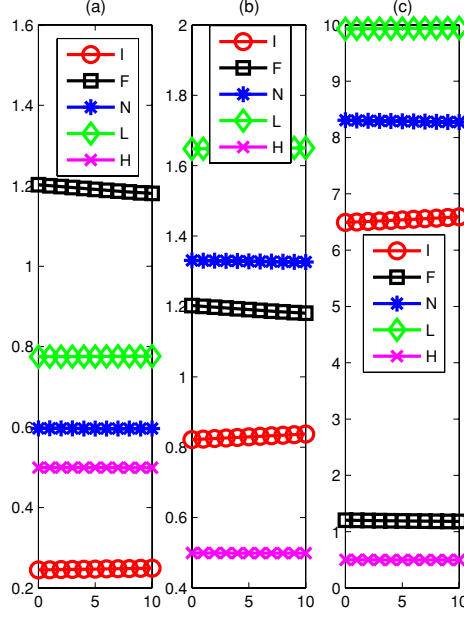


Figure 10. Sequences $q_k(\mathcal{I}, n)$, $q_k(\mathcal{F}, n)$, $q_k(\mathcal{N}, n)$, $q_k(\mathcal{L}, n)$ and $q_k(\mathcal{H}, n)$ with a high attenuation pair $(\lambda_0, \mu_0) = (0.77, 1.20)$. (a) $n = 5$, (b) $n = 15$ and (c) $n = 28$.

We show the experiments for $n \in \{5, 15, 28\}$. $n = 5$ represents a large solid angle, which is equivalent to a far distance fluorescence detector, whereas $n = 28$ relates to a small solid angle geometry, which is equivalent to a near detector (see figures 5(d) and 6). The choice $n = 15$ does not have a physical motivation, but allows us to analyse the behaviour of the reconstruction between extreme cases. We remember that, in degrees, this is the same as considering the angle aperture $(1 - 4\frac{n}{M})180$, or since $M = 128$, the approximate angles $\{121^\circ, 95^\circ, 22^\circ\}$, respectively.

Using $P = 128$, plots in figure 9 show the sequences $q_k(\mathcal{I}, n)$, $q_k(\mathcal{F}, n)$, $q_k(\mathcal{N}, n)$, $q_k(\mathcal{L}, n)$ and $q_k(\mathcal{H}, n)$, respectively, for increasing values of k , with a given aperture index n (first column $n = 5$, second column $n = 15$ and third column $n = 28$) and with low attenuation parameters $\lambda_0 = 0.13$ and $\mu_0 = 0.20$. As expected, the relative errors for the ‘exact’ analytic reconstruction $\mathcal{I}$ are consistently (much) lower than those in other methods, this difference increasing with aperture. Also, the relative error is higher for $\mathcal{F}$, except for the largest aperture, where it outperforms the approximated inversions.

Figure 10 shows the same sequences but with the higher attenuation parameters $\lambda_0 = 0.77$ and $\mu_0 = 1.20$. Once again the same pattern as before is observed (smaller error for $\mathcal{I}$) when the aperture is not too high (first column), but with large apertures, FBP becomes better than the approximated inversions (second column) and it generates the smallest error for the highest attenuation cases (third column). It seems that, in these extreme cases, FBP not considering attenuation is more stable.

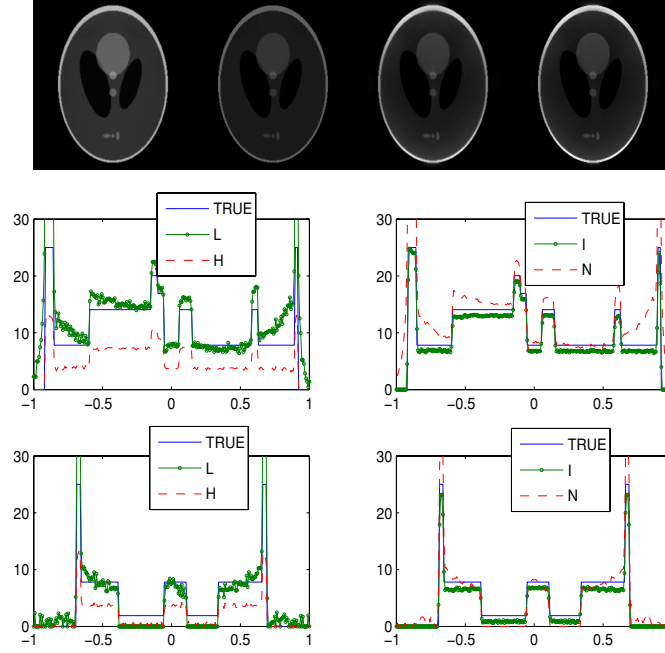


Figure 11. Reconstruction using a low attenuation pair $(\lambda_0, \mu_0) = (0.13, 0.20)$, $n = 15$ and $k = 10$. First row is the results for algorithms $\mathcal{I}$, $\mathcal{H}$, $\mathcal{N}$ and $\mathcal{L}$, respectively. Second row is the cross-sections for $x = 0$ for the same inversion procedures of the first row. Third row is the cross-sections for $y = 0$.

Using $(P, M, N) = (256, 500, 360)$, figure 11 shows the reconstructions for the particular case of $n = 15$ and $k = 10$ (non-constant fluorescence linear attenuation μ), using the low attenuation parameters $(\lambda_0, \mu_0) = (0.13, 0.20)$ and algorithms $\mathcal{I}$, $\mathcal{H}$, $\mathcal{N}$ and $\mathcal{L}$. Plots of the reconstruction of the cross-section $x = 0$ are also presented. The same applies to figure 12. We only present the case of strong μ ($k = 10$) instead of the weaker one ($k = 0$) because the results are very similar. As expected there is a general improvement with more data, but still the analytic inversion remains the best visually.

8.3. Real data

We test the reconstruction algorithms presented in this paper, using real data, obtained from a system that was set up in a high-resolution diffraction beam line at the Brazilian synchrotron light source (LNLS) (Rocha *et al* 2007). They consist of a microscopic sample with a distribution of copper. Each projection, in a total of $M = 60$, had $N = 23$ rays. The experiment was made with a small solid angle Γ_n . Although we do not have the precise information about the aperture index n , we perform our reconstructions with the optimal aperture angle $n_0 = \frac{7M}{40} \approx 10$. Figure 13 (from left to right) shows functions λ , b and $\mathcal{R}_{\text{ref},f}$,

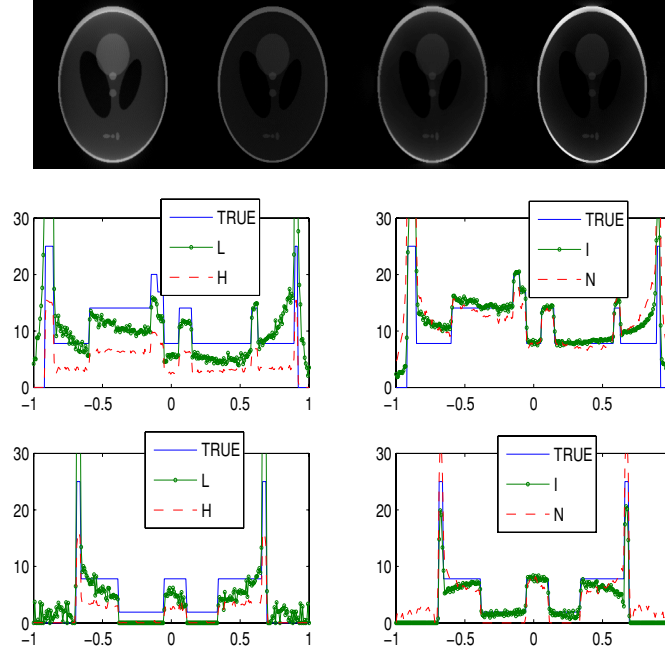


Figure 12. Reconstruction using high attenuation pair $(\lambda_0, \mu_0) = (0.77, 1.20)$, $n = 15$ and $k = 10$. First row is the results for algorithms $\mathcal{I}$, $\mathcal{H}$, $\mathcal{N}$ and $\mathcal{L}$, respectively. Second row is the cross-sections for $x = 0$ for the same inversion procedures of the first row. Third row is the cross-sections for $y = 0$.

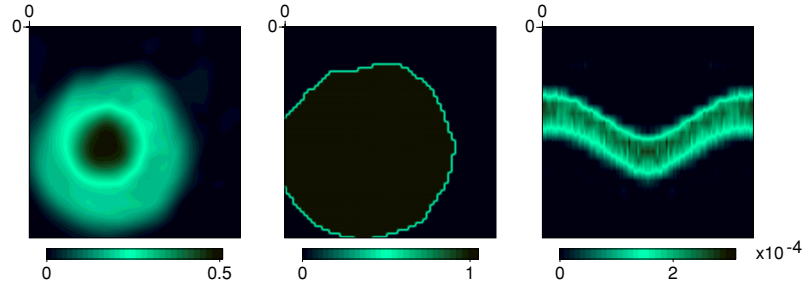


Figure 13. Real data from a synchrotron light source. From left to right, functions λ , b and $\mathcal{R}_{\text{det}} f$, i.e. the transmission linear coefficient attenuation, convex cross-section boundary of λ and experimental data, respectively.

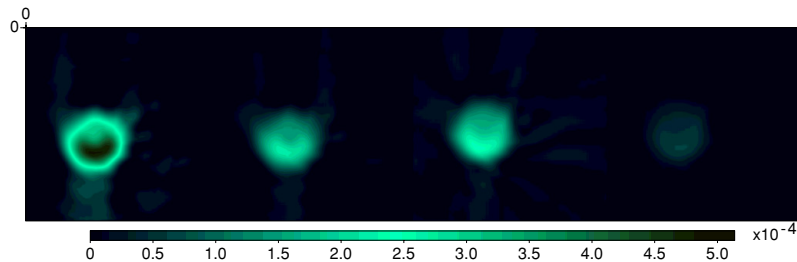


Figure 14. Reconstructions using $\mathcal{I}$, $\mathcal{N}$, $\mathcal{L}$ and $\mathbf{H}$ (from left to right, respectively) on the real data presented in figure 13.

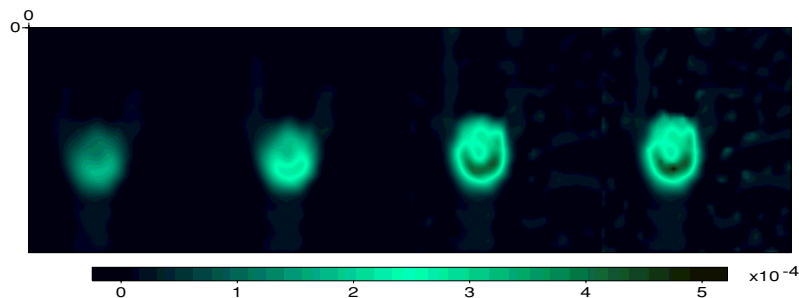


Figure 15. Sequence of partial sums of equation (7) for the real data of figure 13 using $\mu = \lambda$.

where b is the characteristic function defined by the contours of λ (the transmission linear attenuation coefficient, previously reconstructed by a filtered backprojection algorithm from the transmission data). Figure 14 (from left to right) shows the reconstruction algorithms $\mathcal{I}$, $\mathcal{N}$ and $\mathcal{L}$ applied to the noisy experimental data. Finally, the fourth partial sums of the Neumann series (7), for this real sample, are presented in figure 15, where we can see the convergence with an increasing number of partial sums. For this particular experiment, μ is unknown and $\mu = \lambda$ is used as a first-order approximation.

9. Concluding remarks

In this paper, following La Rivière (2004), we extended the application of approximate and ‘exact’ analytic formulae for the inversion of the XFCT attenuated radon transform. We showed, experimentally, that our analytic inversion outperforms other approximations from the point of view of image quality. However, there is a computational price to be paid for the calculations of the analytical approach, as well as the Novikov approach of section 6, since there are many Hilbert transforms to be computed as well as a derivative (see equation (21)). Even using the fast Fourier transform to simplify calculations, the amount of memory needed for the simulations is still high. In that sense, our approaches are indeed more computationally intensive than the one of La Rivière (section 5), which is simpler to implement. Better

implementations of our analytic inverse are possible and we are working on that. Also, inspired by the Fourier expansion in equation (17), it is possible to derive an iterative algorithm for the inversion of the XFCT radon transform, taking Novikov's inversion in SPECT as the approximation of the XFCT inverse, yielding similar ideas as in Miqueles and De Pierro (2009a). As a matter of fact, one of our main goals is to provide researchers in XFCT with a wider range of alternatives for inversion showing their advantages and disadvantages.

Acknowledgments

The authors are very grateful to the Nuclear Instrumentation Laboratory Group (Federal University of Rio de Janeiro), Brazil, and the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS) for their kind support, providing the real data, and to the referees for their useful comments. EXM is supported by FAPESP grant no 06/00356-6 and ARP by CNPq grant no 304820/2006-7.

References

- Ablowitz M J and Fokas A S 2003 *Complex Variables* 2nd edn (Cambridge: Cambridge University Press)
- Brunetti A and Golosio B 2001 Software for x-ray fluorescence and scattering tomographic reconstruction *Comput. Phys. Commun.* **141** 412–25
- Cholewa M, Dillon C, Lay P, Phillips D, Talarico T and Lai B 2001 High resolution nuclear and x-ray microprobes and their applications in single cell analysis *Nucl. Instrum. Methods B* **181** 715–22
- Cichocki T, Heck D, Jarczyk L, Rokita E, Strzalkowski A and Sych M 1985 Elemental composition of the human atherosclerotic artery wall *Histochemistry* **83** 87–92
- Cesareo R and Mascarenhas S 1989 A new tomographic device based on the detection of fluorescent x-rays *Nucl. Instrum. Methods A* **277** 667–72
- Deans S R 1983 *The Radon Transform and Some of Its Applications* (New York: Wiley)
- Fokas A S 2008 *A Unified Approach to Boundary Value Problems (CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics)* (Philadelphia, PA: SIAM)
- Fokas A S and Sung L 2005 Generalized Fourier transforms, their nonlinearization and the imaging of the brain *Not. AMS* **52** 1178–92
- Fokas A S, Iserles A and Marinakis V 2006 Reconstruction algorithm for single photon emission computed tomography and its numerical implementation *J. R. Soc. Interface* **3** 45–54
- Friedmann Rust G and Weigelt J 1998 X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **45** 75–88
- Hogan J P, Gonsalves R A and Krieger A S 1991 Fluorescent computer tomography: a model for correction of x-ray absorption *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **38** 1721–7
- Inouye T, Kose K and Hasegawa A 1989 Image reconstruction algorithm for single-photon emission computed tomography with uniform attenuation *Phys. Med. Biol.* **34** 299–304
- Kunyansky L A 1992 Generalized and attenuated radon transforms: restorative approach to the numerical inversion *Inverse Problems* **8** 809–19
- Kunyansky L A 2001 A new SPECT reconstruction algorithm based on the Novikov's explicit inversion formula *Inverse Problems* **17** 293–306
- La Rivière P 2004 Approximate analytic reconstruction in x-ray fluorescence computed tomography *Phys. Med. Biol.* **49** 2391–405
- Miqueles E X and De Pierro A R 2008 Fluorescence tomography: reconstruction by iterative methods *Proc. 2008 IEEE Int. Symp. Biomedical Engineering* pp 760–3
- Miqueles E X and De Pierro A R 2009a Iterative reconstruction in x-ray fluorescence tomography based on radon inversion, preprint (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- Miqueles E X and De Pierro A R 2009b On the inversion of the XFCT radon transform, preprint (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- Natterer F and Wübbeling F 2001 *Mathematical Methods in Image Reconstruction* (Philadelphia, PA: SIAM)
- Natterer F 2001 Inversion of the attenuated radon transform *Inverse Problems* **17** 113–9
- Novikov R G 2002 An inversion formula for the attenuated x-ray transform *Ark. Mat.* **40** 145–67 (Rapport de Recherche 00/05-3, Université de Nantes, Laboratoire de Mathématiques)

- Rocha H S, Pereira G R, Anjos M J, Faria P, Kellerman G, Pérez C A, Tirao G, Mazzaro I, Giles C and Lopes R T 2007 Diffraction enhanced imaging and x-ray fluorescence microtomography for analysing biological samples *X-Ray Spectrom.* **36** 247–53
- Tretiak O and Metz C E 1980 The exponential radon transform *SIAM J. Appl. Math.* **39** 341–54
- Metz C and Pan X 1995 A unified analysis of exact methods of inverting the 2D exponential radon transform, with implications for noise control in SPECT *IEEE Trans. Med. Imaging* **14** 643–58
- Shinohara H, Yamamoto T, Kuniyasu Y, Hashimoto T and Yokoi T 1999 Implementation and quantitative evaluation of analytical methods for attenuation correction in SPECT: a phantom study *Phys. Med. Biol.* **44** 2643–55
- Yuasa T, Akiba M, Takeda T, Kazama M, Hoshino A, Watanabe Y, Hyodo K, Dilmanian F A, Akatsuka T and Itai Y 1997 Reconstruction method for fluorescent x-ray computed tomography by least-squares method using singular value decomposition *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **44** 54–62

Apêndice D

Artigo/Método Alternado

O método iterativo desenvolvido no Capítulo 5, está apresentado no artigo à seguir, submetido ao periódico *Transactions on Medical Imaging*, IEEE. Atualmente encontra-se na segunda rodada de revisões, com pareceres favoráveis dos revisores associados.

Possíveis consequências deste artigo

- O método iterativo que resolve a parte linear, fortemente baseado em Kunyansky [32], possui um teorema de convergência apresentado pelo mesmo. Acreditamos que um novo teorema possa ser elaborado, levando em conta a aceleração proposta nesta tese. A condição imposta no peso é facilmente verificada, razão pela qual o método se comporta tão bem nos exemplos práticos e simulados. Estes fatos não foram expostos no artigo anexo, e acredita-se que isto valha por si só como outra publicação;
- Existe uma intrínseca relação do método alternado desta tese com o de Bronnikov [4, 5] em spect, embora não sejam conceitualmente iguais. Será interessante uma possível comparação entre ambos num futuro próximo; Ainda, o comportamento do presente método alternado não foi testado em spect. Acredita-se que com uma boa estimativa inicial para o mapa de atenuação o método deva se comportar satisfatoriamente.
- Embora seja uma consequência ambiciosa, espera-se que, para a comunidade de pesquisadores em xfct, o método iterativo desenvol-

vido nesta tese, seja adotado como principal método para estimativas iniciais da densidade de fluorescência, melhorando a estimativa de Hogan (ou Chang) ou mesmo a retroprojeção filtrada, comumente usada até hoje.

Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion

Eduardo X. Miqueles, *Member, IEEE*, and Alvaro R. De Pierro, *Member, IEEE*

Abstract—We describe a new approach for the inversion of the attenuated Radon transform in X-ray fluorescence computed tomography (XFCT). The approach consists of using the Radon inverse as an approximation for the actual one, followed by an iterative refinement. Also, we analyse the problem of retrieving the attenuation map directly from the emission data, giving rise to a novel alternating method for the solution. We applied our approach to real and simulated XFCT data demonstrating an improvement relative to previous inversion algorithms.

Index Terms—XFCT, generalized Radon transform, iterative methods, alternate methods, inversion.

I. INTRODUCTION

X-RAY fluorescence computed tomography (XFCT) is a relatively new synchrotron based imaging modality that can be seen as a stimulated emission tomography [5]. In XFCT a sample is irradiated with high intensity monochromatic synchrotron X-rays with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest. This stimulates fluorescence emission, at certain characteristic energies, isotropically distributed, which are detected by a detector placed parallel to the direction of the incident beam [15]. Part of the emission is absorbed by the sample, so, correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions has many important applications in medical imaging (malignancy analysis [23] for example).

A continuous mathematical model for XFCT is given by the Generalized Attenuated Radon Transform [13]. In this paper, following a similar scheme by Kunyansky's [13] for SPECT, we present a new approach for XFCT inversion, that essentially consists of using the inverse of the Radon Transform as an approximate inverse followed by an iterative refinement. We also present an iterative method aiming at retrieving simultaneously both, the attenuation and the activity functions from the XFCT data.

The next section is dedicated to a brief description of the XFCT problem and the corresponding mathematical model. Section 3 is devoted to describe the iterative method for the emission reconstruction from known attenuation. Section 4

presents a methodology for retrieving the attenuation given the emission activity function, that gives rise to the alternating method described in Section 5, where the algorithm that combines the previous methods is described in detail. Section 6 is devoted to numerical experiments with simulated and real data. We end up in Section 7 with some concluding remarks.

II. A MATHEMATICAL MODEL FOR XFCT

In this section, we briefly describe a mathematical model for X-ray fluorescence and its physical aspects. For more details see [10], [25].

In what follows, we use $\mathbf{U} = \{f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}; f = f(x)\}$ as the feature space, $\mathbf{V} = \{d: [-1, 1] \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}; d = d(t, \theta)\}$ as the Radon space and $\mathbf{Q} = \{\omega: \mathbb{R}^2 \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}; \omega = \omega(x, \theta)\}$ as the weight space. Here, $\xi = \xi(\theta)$ is a direction vector defined by an angle θ , $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\xi^\perp$ is such that $\xi \cdot \xi^\perp = 0$ (see Figure 1). We define $\mathcal{D}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ as the divergent beam transform

$$\mathcal{D}h(x, \theta) = \int_0^\infty h(x + q\xi^\perp) dq. \quad (1)$$

It is assumed, without loss of generality, that every function in the feature space $\mathbf{U}$ is defined on the unit disk $\Omega \in \mathbb{R}^2$, otherwise we can make a simple change of variables. Further properties on each of the above spaces are beyond the scope of this paper and can be found in [19], [8].

The geometry of a fluorescence tomography experiment is shown in Figure 1, which is very similar to the scanning geometry of transmission tomography except that measurements are gathered by two surface detectors, the conventional one and the fluorescence one, that is placed parallel to the incident transmission beam. A pair (t, θ) defines a direction vector $\xi^\perp$ and a transmission ray $\tau = \{x \in \mathbb{R}^2: x \cdot \xi = t\}$ rotating in a counterclockwise direction through the sample.

Let $\lambda \in \mathbf{U}$ be the linear attenuation coefficient for the energy of the incident X-ray (roughly speaking, $\lambda(x)$ is the attenuation at x). The flux rate from the source to a point $x \in \tau$ inside the object is proportional to $\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$ (as in X-ray Transmission Computed Tomography).

At the energy level of the incident beam, the sample emits X-rays fluorescence isotropically with an intensity proportional to $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$, where $f(x)$ is the number of emissions at x . On the other hand, the flux rate of the fluorescent X-ray emitted from x and reaching the detector is proportional to the yield of the fluorescent X-ray and the solid angle at which the point x is viewed by the detector. That is, the flux rate reaching the detector, for a given angle $\gamma \in \Gamma$, is proportional to $f(x) \exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\} \exp\{-\mathcal{D}\mu(x, \theta +$

This work was supported by FAPESP under grant No 06/00356-6. Eduardo X. Miqueles and Alvaro R. De Pierro are with the Department of Applied Mathematics, State University of Campinas (UNICAMP), Campinas, Brazil (e-mails: miqueles@ime.unicamp.br, alvaro@ime.unicamp.br).

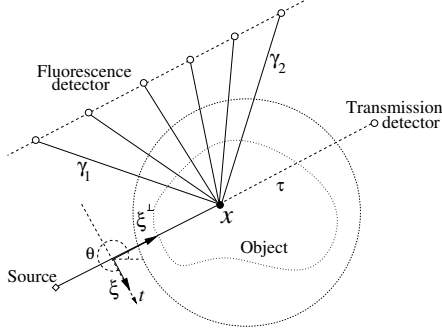


Fig. 1: Scanning geometry for XFCT

$\gamma)\}$ where now $\mu \in \mathbf{U}$ is the linear attenuation coefficient for the emitted fluorescence. Finally, the total rate of fluorescence X-rays detected by the detector is obtained varying $\gamma \in \Gamma$ and $x \in \tau$ obtaining the following relation

$$d(t, \theta) \propto \int_{\tau} dx f(x) e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x + \theta + \gamma)} d\gamma \quad (2)$$

Neglecting physical constants that must be considered in (2), we can restate the expression above as the equation

$$d(t, \theta) = \mathcal{R}_W f(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} f(x) W(x, \theta) dx, \quad (3)$$

where $\mathcal{R}_W$ stands for the Generalized Attenuated Radon Transform with weight function $W \in \mathbf{Q}$ defined by

$$W(x, \theta) = \omega_{\lambda}(x, \theta) \omega_{\mu}(x, \theta) \quad (4)$$

where

$$\omega_{\mu}(x, \theta) = \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma, \quad \omega_{\lambda}(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)}. \quad (5)$$

and $(t, \theta) \in [-1, 1] \times (0, 2\pi)$. It is worth noting that for a weight function defined by

$$W(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta)}. \quad (6)$$

we get the Attenuated Radon Transform, that is a continuous model for SPECT [20].

A. Mathematical Problems

The incident X-rays attenuation λ can be easily retrieved from measured data collected by the transmission detector, applying, for example, a standard method like filtered backprojection (FBP) [19]. Taking this into account we have two mathematical problems that could be solved for the fluorescence emission density reconstruction. The first one assumes known fluorescence attenuation μ , that could be estimated from λ (one option is to consider just $\mu = \lambda$) and the more realistic (and difficult) problem that assumes an unknown μ . That is:

Problem 1: Given $d \in \mathbf{V}$ and an estimate of μ , find $f \in \mathbf{U}$ such that

$$\mathcal{R}_{W(\mu)} f = d \quad (7)$$

Problem 2: Given $d \in \mathbf{V}$, find $\{f, \mu\} \in \mathbf{U}$ such that

$$\mathcal{Y}(f, \mu) = \mathcal{R}_{W(\mu)} f - d = 0 \in \mathbf{V}. \quad (8)$$

In the next section we deal with the algorithm for solving iteratively problem (7) of approximating the unknown f given the attenuation values for μ . This is a linear problem. Section 4 describes an algorithm to retrieve μ from known f , needed for the alternating approach for solving problem (8) of Section 5.

Remark 1: It is worth noting that, mathematically, as for SPECT (case $\lambda = 0$), the solution of the general problem (8) cannot be unique. However, uniqueness strongly depends on the data and the functions to be reconstructed. This may be possible, in the particular case of emission tomography, to obtain reasonable reconstructions, using data fitting techniques (see [2], [6]), that are similar to our alternate approach.

Remark 2: It is very easy to prove that the adjoint operator $\mathcal{R}_W^*: \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{U}$, that we denote by $\mathcal{B}_W$, is given by

$$\mathcal{B}_W d(x) = \int_0^{2\pi} W(x, \theta) d(x \cdot \xi, \theta) d\theta \quad (9)$$

and called the attenuated backprojection. The particular case $W(x, \theta) = 1$ gives us the classic backprojection operator $\mathcal{B}$. Throughout the paper, we denote W_{μ} or $W(\mu)$ as the weight function depending on the attenuation map μ .

III. ITERATIVE RECONSTRUCTION FOR KNOWN ATTENUATION

We assume in this section that the weight function $W \in \mathbf{Q}$ can be previously determined. So, considering λ and μ known, we present an iterative method based on the inversion of the Radon Transform, as well as an accelerated version. We complete the Section with a description of two classic reconstruction methods, that have already been applied in XFCT: Expectation Maximization [15] and Algebraic Reconstruction Techniques [10] that will be used in the experimental Section for the sake of comparison.

A. The Iteration

Our point of departure is a splitting of the operator $\mathcal{R}_W$. Indeed, let $\mathcal{R}_W = \mathcal{R} - \mathcal{R}_{\rho}$, be such that

$$\mathcal{R}_W f = d \Rightarrow \tilde{f} = f - \mathcal{D}f \quad (10)$$

with $\tilde{f} = \mathcal{R}^{-1}d$ and $\mathcal{D}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{U}$ the distortion operator defined by $\mathcal{D}f = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_{\rho}f = \mathcal{R}^{-1}(\mathcal{R} - \mathcal{R}_W)f$. The above equation is also obtained using $\mathcal{R}^{-1}$ as an approximation of $\mathcal{R}_W^{-1}$.

On the other hand, if we get $(\mathcal{R}\mathcal{H})^{-1}$ as another approximation of $\mathcal{R}_W^{-1}$ we obtain

$$f = \mathcal{H}^{-1}\tilde{f} + \mathcal{H}^{-1}\mathcal{D}f + (\mathcal{I} - \mathcal{H}^{-1})f, \quad (11)$$

or, as a Fredholm integral equation of the second type

$$f = \tilde{f} + \mathcal{B}f, \quad \begin{cases} \tilde{f} = \mathcal{H}^{-1}\tilde{f}, \\ \mathcal{B}f = \mathcal{H}^{-1}\mathcal{D}f + (\mathcal{I} - \mathcal{H}^{-1})f. \end{cases} \quad (12)$$

Whenever the operator $\mathcal{B}$ is a contraction in the feature space $\mathbf{U}$, the solution can be obtained as the limit point of the

iterative method

$$f^{(k+1)} = \bar{f} + \mathcal{B}f^{(k)}. \quad (13)$$

For SPECT, Kunyansky's [13] choice for the operator $\mathcal{H}$ takes into account the strong attenuation effect on the reconstructed function f so that $\mathcal{H} = a\mathcal{I}$ is a reasonable choice, for a suitable function $a \in \mathbf{U}$. As in [4], the function a is an average function defined by

$$a(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} W(x, \theta) d\theta. \quad (14)$$

Note that putting $a = 1$, $\mathcal{B} = \mathcal{D}$ and we obtain (10). With a as in (14) have $\bar{f} = \tilde{f}/a$ and

$$\begin{aligned} \mathcal{B}f &= \frac{1}{a} (\mathcal{D}f - (1-a)f) \\ &= \frac{1}{a} (\mathcal{R}^{-1}(\mathcal{R} - \mathcal{R}_W)f - (1-a)f) \end{aligned} \quad (15)$$

Combining (13) and (15), we can rewrite the iterations in a more familiar manner, like many other standard iterative methods,

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + e^{(k)}, \quad e^{(k)} = \frac{\mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_W f^{(k)})}{a} \quad (16)$$

and the first iteration is like the well known Chang's algorithm [4], extended to the XFCT problem.

B. Acceleration

In order to get faster convergence, we applied to the proposed method (13) the following acceleration scheme. We built a sequence (β_k) such that, for the particular case of $\mathcal{H} = a\mathcal{I}$ we have $\mathcal{B}f = f - \tilde{f} + \mathcal{E}f$ with $\mathcal{E}f = \mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_W f)/a$ and the new iterations are

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \beta_k e^{(k)}, \quad e^{(k)} = \mathcal{E}f^{(k)}, \quad (17)$$

with β_k a relaxation factor, minimizing the residual at the next iterate, i.e

$$\beta_k = \arg \min_{\beta} \|e^{(k+1)}\|_{L^2} = \arg \min_{\beta} \left\| \mathcal{E} \left(f^{(k)} + \beta e^{(k)} \right) \right\|_{L^2}, \quad (18)$$

yielding

$$\beta_k = \frac{\langle e^{(k)}, q^{(k)} \rangle}{\|q^{(k)}\|_{L^2}^2}, \quad q^{(k)} = \frac{1}{a} \mathcal{E}e^{(k)}. \quad (19)$$

The above acceleration gave the same results as the one suggested by Guy, Salès, Bami-Dépaux and Joly-cabaret, see [11], [17].

C. Classical methods

Algebraic Reconstruction Techniques (ART) and the Expectation Maximization (EM) algorithm can also be applied to the linear part of our problem, assuming known attenuation values. For the sake of completeness, we write the equations for both algorithms here. The EM for maximization of the Poisson likelihood is defined by the following iteration presented in

a continuous version ([20] 5.3.2),

$$f^{(k+1)}(x) = f^{(k)}(x) \frac{\mathcal{B}_W d^{(k)}(x)}{\mathcal{B}_W e(x)}, \quad (20)$$

with

$$d^{(k)}(t, \theta) = d(t, \theta) / \mathcal{R}_W f^{(k)}(t, \theta) \quad (21)$$

and $e = 1$ in $\mathbf{V}$. The ART iteration ([20] 5.3.1) is defined by

$$f^{(k+1)}(x) = f^{(k)}(x) + \alpha \frac{d(\eta) - \mathcal{R}_W f^{(k)}(\eta)}{\|a_\eta\|_{L^2}^2} a_\eta(x) \quad (22)$$

with $a_\eta = \mathcal{B}_W \psi_\eta$ and $\psi_\eta \in \mathbf{V}$ defined by $\psi_\eta(\beta) = 1$ for $\beta = \eta$ and zero otherwise. Here, $(t, \theta) = \eta = \eta(k)$ and the relaxation parameter α can be properly chosen to accelerate the convergence.

IV. RECONSTRUCTION: THE NONLINEAR PART (GIVEN THE EMISSION DENSITY)

Solving the problem in (8) for given $f \in \mathbf{U}$ is much more complicated because of the nonlinearity. La Rivière [15] has recently proposed a new strategy based on the construction of properly surrogate functions using De Pierro's convexity argument [9], obtaining good results. Here, our approach to the solution is based on a simple idea in a continuous setting, using Taylor series up to second order of the attenuated Radon transform so as to use Newton-type algorithms, taking advantage of the relevant properties of the Fréchet derivative.

A. Fréchet derivatives

Regarding (8) and assuming that $f \in \mathbf{U}$ is fixed (also $\lambda \in \mathbf{U}$ in the case of XFCT), we will refer to $y: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$ as the function $y(\mu) = \mathcal{R}_{W(\mu)} f$. Let $T_\mu: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$ the Fréchet derivative of y at $\mu \in \mathbf{U}$, i.e $T_\mu = y'(\mu)$ in the following sense (see [16])

$$\|y(\mu + h) - y(\mu) - T_\mu h\|_{\mathbf{V}} / \|h\|_{\mathbf{U}} \rightarrow 0, \quad \|h\|_{\mathbf{U}} \rightarrow 0. \quad (23)$$

We are using $\|\cdot\|_{\mathbf{V}}$ and $\|\cdot\|_{\mathbf{U}}$ to denote the L^2 -norm in space $\mathbf{V}$ and $\mathbf{U}$ respectively. Let $z := (x, \theta)$ and $W = W(\mu) \in \mathbf{Q}$ the weight function.

As a reference, we consider the case of SPECT in (6). The weight function in (6) satisfies the following rule

$$W(\mu + h) - W(\mu) = e^{-\mathcal{D}(\mu+h)} - e^{-\mathcal{D}\mu} = e^{-\mathcal{D}\mu} [e^{-\mathcal{D}h} - 1] \quad (24)$$

for all $h \in \mathbf{U}$. Since there exists a $\hat{z} \in \Omega \times [0, 2\pi]$ such that

$$e^{-\mathcal{D}h(z)} = 1 - \mathcal{D}h(z) + \frac{1}{2} [\mathcal{D}h(\hat{z})]^2$$

we have

$$W(\mu + h) - W(\mu) = e^{-\mathcal{D}\mu} [-\mathcal{D}h + r(h)] \quad (25)$$

with $r(h) = \frac{1}{2} [\mathcal{D}h]^2 \in \mathbf{Q}$ the remainder function at $\hat{z}$. Since the divergent beam transform $\mathcal{D}$ is a linear transformation,

there is a constant α so that $\|r(h)\|_Q \leq \alpha\|h\|_U^2$. Hence,

$$\begin{aligned} y(\mu + h) - y(\mu) &= \int_{\tau} f [W(\mu + h) - W(\mu)] \\ &= \int_{\tau} f e^{-\mathcal{D}\mu} [-\mathcal{D}h + r(h)] \\ &= - \int_{\tau} f W(\mu) \mathcal{D}h + \int_{\tau} r(h) f W(\mu) \\ &:= T_{\mu}h + \bar{y}(\mu). \end{aligned}$$

Finally, since $\|\bar{y}(\mu)\| \leq C\|r(h)\|_Q\|y(\mu)\|$ for some positive constant C we get $\|\bar{y}(\mu)\|_V \leq C\|r(h)\|_Q\|y(\mu)\|_V$ and

$$\|y(\mu + h) - y(\mu) - T_{\mu}h\|_V = \|\bar{y}(\mu)\|_V \leq \alpha C\|y(\mu)\|_V\|h\|_U^2,$$

from which it follows that

$$T_{\mu}h(t, \theta) = - \int_{x, \xi=t} f(x) W(x, \theta) \mathcal{D}h(x, \theta), \quad h \in \mathbf{U} \quad (26)$$

is the Fréchet derivative of the attenuated Radon transform for the SPECT projection data. T_{μ} is linear since $\mathcal{D}$ is a linear transformation.

In the XFCT case, the computation is similar to the previous one. In (4), let $\bar{\omega}(\mu) = \exp\{-\mathcal{D}\mu\}$ so that $W(\mu) = \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}(\mu)$. It follows that

$$W(\mu + h) - W(\mu) = \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma [\bar{\omega}(\mu + h) - \bar{\omega}(\mu)] \quad (27)$$

and, as for (25) we arrive at

$$W(\mu + h) - W(\mu) = \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}(\mu) [-\mathcal{D}h + r(h)]. \quad (28)$$

Hence,

$$\begin{aligned} y(\mu + h) - y(\mu) &= \int_{\tau} f \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}(\mu) [-\mathcal{D}h + r(h)] \\ &= - \int_{\tau} f \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}(\mu) \mathcal{D}h + \int_{\tau} r(h) f \bar{\omega}(\lambda) \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}(\mu) \\ &:= T_{\mu}h + \bar{y}(\mu) \end{aligned} \quad (29)$$

and, as for SPECT, since $\|\bar{y}(\mu)\| = o(\|h\|)$ we have the Fréchet derivative of the fluorescence case given by the following equation,

$$\begin{aligned} T_{\mu}h(t, \theta) &= - \int_{x, \xi=t} f(x) \bar{\omega}_{\lambda}(x, \theta + \pi) \times \\ &\times \int_{\Gamma} d\gamma \bar{\omega}_{\mu}(x, \theta + \gamma) \mathcal{D}h(x, \theta + \gamma). \end{aligned} \quad (30)$$

In order to have practical algorithms to evaluate the Fréchet derivatives for the case of XFCT, we use the following Theorem and leave its proof, which is based only on Fubini's theorem, to the appendices. The same Theorem applies for SPECT, but with different notations.

Theorem 4.1: The Fréchet derivatives given in (30) can be written as $T_{\mu}h = -\mathcal{R}_{\omega}h$ where

$$\begin{aligned} \omega(x, \theta) &= \int_{\Gamma} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta, \gamma}(x, \theta), \\ \sigma_{\theta, \gamma}(x) &= f(x) \bar{\omega}_{\lambda}(x, \theta + \pi) \bar{\omega}_{\mu}(x, \theta + \gamma) \end{aligned} \quad (31)$$

and $\bar{\omega}_a(x, \theta) = \exp\{-\mathcal{D}a(x, \theta)\}$ for all $a \in \mathbf{U}$.

We can continue the calculations for the second Fréchet derivatives $T_{\mu}^2: \mathbf{U} \times \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$ using Theorem 4.1. Indeed, by

$$\begin{aligned} T_{\mu+h}z - T_{\mu}z &= -[\mathcal{R}_{\omega(\mu+h)}z - \mathcal{R}_{\omega(\mu)}z] \\ &= - \int_{\tau} [\omega(\mu + h) - \omega(\mu)]z \end{aligned} \quad (32)$$

and (31) we can prove the following theorem (Proof also left for the appendices).

Theorem 4.2: The second Fréchet derivative $T_{\mu}^2: \mathbf{U} \times \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{V}$ of the attenuated Radon transform can be written as the bilinear form $T_{\mu}^2(h, z) = -\mathcal{R}_{L_{\mu}h}z$ where $L_{\mu}: \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ is a linear transformation defined by

$$L_{\mu}h = - \int_{\Gamma} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}(\sigma_{\theta, \gamma} \mathcal{D}h)(x, \theta) \quad (33)$$

with function $\sigma_{\theta, \gamma}$ given by (31).

B. Newton's method

As a consequence of Theorems 4.1 and 4.2 we can write the second order approximation of the attenuated Radon transform as,

$$y(\mu + h) \approx y(\mu) + T_{\mu}h + \frac{1}{2}T_{\mu}^2(h, h) \quad (34)$$

$$= y(\mu) - \mathcal{R}_{\omega(\mu)}h - \frac{1}{2}\mathcal{R}_{L_{\mu}h}h \quad (35)$$

$$= y(\mu) - \mathcal{R}_{\rho(\mu, h)}h \quad (36)$$

with ω and L_{μ} given by Theorems of the previous section and

$$\rho(\mu, h) = \omega(\mu) + \frac{1}{2}L_{\mu}h. \quad (37)$$

A typical Newton iteration (see [16]) for the problem $\mathcal{Y}(\mu) = y(\mu) - d = 0$, using (36) is given by

$$\begin{cases} \mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} + h^{(k)} \\ \mathcal{R}_{\rho(\mu^{(k)}, h^{(k)})}h^{(k)} = \mathcal{Y}(\mu^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (38)$$

enforcing the consistency of the quadratic expansion. To compute the direction $h^{(k)}$ at each iteration, we need to solve a nonlinear problem similar to the one of Section III. Note that whenever we choose $\rho(\mu, h) = \omega(\mu)$ (linear approximation of y) in (38) we have the classical Newton method, otherwise a quadratic equation has to be solved.

Observation: A fast option for our implementation above, is the family of iterative methods based on predictor-corrector ideas, like those presented in [24].

V. ALTERNATING ALGORITHM

Now we are ready to describe the whole procedure, when the activity f and the attenuation μ are unknown (although, we have a good starting approximation for μ , given by λ).

Let $\mathcal{Y}$ be the function in (8), i.e $\mathcal{Y}(\mu, f) = y(\mu, f) - d$ and let $\mathcal{S}_f = \{\mu \in \mathbf{U}: \mathcal{Y}(\mu, f) = 0\}$ and $\mathcal{S}_{\mu} = \{f \in \mathbf{U}: \mathcal{Y}(\mu, f) = 0\}$ nonempty feasible sets. Assuming that an arbitrary initial point $\mu^{(0)}$ is given, the alternate algorithm is based on the

following iterations (see [22] for an alternating minimization algorithm)

$$f^{(k+1)} \in \mathcal{S}_{\mu^{(k)}}, \quad \mu^{(k+1)} \in \mathcal{S}_{f^{(k+1)}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (39)$$

The problem of computing an element of $\mathcal{S}_{\mu}$ with μ fixed can be approximated using the linear techniques presented in Section III, while to search for an element of $\mathcal{S}_f$ we use the nonlinear approximation of Section IV, resulting in the following alternating algorithm

$$f^{(k+1)} = \mathbf{L} \left(d, f^{(k)}, \mu^{(k)} \right), \quad \mu^{(k+1)} = \mathbf{N} \left(d, f^{(k+1)}, \mu^{(k)} \right). \quad (40)$$

To write the equations, we will choose for $\mathbf{L}$ the accelerated method proposed in section (III), $\mathbf{N}$ will be Newton's method, $\omega = \omega(\mu) \in \mathbf{Q}$ the weight function of Theorem 4.1, $W = W(\mu) \in \mathbf{Q}$ the original weight function and $a = a(\omega) \in \mathbf{U}$ the average function defined by (14) (with weight ω).

At each iteration, the approximation $\mu^{(k+1)}$ is defined by

$$\mu^{(k+1)} = F(\bar{\mu}) \quad (41)$$

for an operator F on $\mathbf{U}$ defined by

$$Fv(x) = c \max\{\lambda(x)v(x), 0\} / \|\lambda\|_{\infty}, \quad (42)$$

where the constant $c > 0$ will be defined in the next section. We compute $\bar{\mu}$ using only one Newton step,

$$\mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})}(\bar{\mu} - \mu^{(k)}) = y(\mu^{(k)}) - d \quad (43)$$

or

$$\mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})}\bar{\mu} = z^{(k)}, \quad z^{(k)} = \mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})}\mu^{(k)} + y(\mu^{(k)}) - d. \quad (44)$$

Finally, $\bar{\mu}$ is obtained as the first approximation of our iterative algorithm for known attenuation, using $0 \neq \lambda \in \mathbf{U}$ as the constant initial point (otherwise $\bar{\mu}$ would be Chang's approximation). Also, the conditioning of $\mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})}$ using the operator $\mathcal{H} = a\mathcal{I}$ may be necessary, whenever $\|\omega\|_{\infty}$ is to small.

Algorithm:

- Given $0 \neq \lambda \in \mathbf{U}$, $d \in \mathbf{V}$, $c > 0$, $\{I_A, I_L, I_N\} \in \mathbb{N}$
- 1. Set $\mu^{(0)} = \lambda$ and $f^{(0)} = 0$
- 2. For $k = 0, 1, 2, \dots, I_A$

- (a) Set $f^{(k,0)} = f^{(k)}$
- (b) Using (4), (5) and (14) to compute:

$$W_k = W(\mu^{(k)}), \quad a_k = a(W_k)$$

- (c) For $j = 0, 1, 2, \dots, I_L$

- Residual:

$$e^{(k,j)} = a_k^{-1} \mathcal{R}^{-1} \left(d - \mathcal{R}_{W_k} f^{(k,j)} \right)$$

- Acceleration factor with (19):

$$\beta_j = \arg \min_{\beta} \left\| \mathcal{E} \left(f^{(k,j)} + \beta e^{(k,j)} \right) \right\|_{L^2}$$

- Update:

$$f^{(k,j+1)} = f^{(k,j)} + \beta_j e^{(k,j)}$$

- (d) Set $f^{(k+1)} = f^{(k, I_L)}$

- (e) Using (31) to compute:

$$\omega_k = \omega(\mu^{(k)}), \quad a_k = a(\omega_k)$$

- (f) Set $z^{(k)} = \mathcal{R}_{\omega(\mu^{(k)})}\mu^{(k)} + y(\mu^{(k)}) - d$

- (g) Set $u^{(0)} = \lambda$

- (h) For $j = 0, 1, 2, \dots, I_N$

- Residual:

$$e^{(j)} = a_k^{-1} \mathcal{R}^{-1} \left(z^{(k)} - \mathcal{R}_{\omega_k} u^{(j)} \right)$$

- Update:

$$u^{(j+1)} = u^{(j)} + e^{(j)}$$

- (i) $\bar{\mu} = u^{(I_N)}$

- (j) Set $\mu^{(k+1)} = F(\bar{\mu})$ using (42).

- 3. Set $\{f^{(I_A)}, \mu^{(I_A)}\}$ as an approximation to $\{f, \mu\}$

VI. NUMERICAL EXPERIMENTS

In order to test the methodologies presented in previous sections, several experiments were performed with simulated and real data. The results of three of these experiments are shown in this section. For the simulated data we considered analytic expressions for functions $\{f, \mu, \lambda\}$ given by

$$\begin{aligned} f(x) &= \epsilon (\alpha_1 h(x) + \alpha_2 [g(x - c e) + g(x + c e)] - b)_+ \\ \lambda(x) &= (\beta_1 h(x) + \beta_2 [g(x - c e) + g(x + c e)] - b)_+ \\ \mu(x) &= (\gamma_1 h(x) + \gamma_2 [g(x - c e) + g(x + c e)] - b)_+ \end{aligned} \quad (45)$$

with $\epsilon = 10^{-4}$, $\alpha = (0.8, 0.25)$, $\beta = (0.4, 0.4)$, $\gamma = (0.8, 0.5)$, $c = 0.35$, $b = 0.1$, $e = (1, 1)$ and $h(x) = s(4x)$, $g(x) = s(2x)$, $s(x) = \text{sinc}(x_1)\text{sinc}(x_2)$ where $(x)_+ = \max\{x, 0\}$. Figure 2 shows a 32x32 representation of functions $\{f, \mu, \lambda\}$ and the simulated attenuated Radon transform with 80 projections views and 60 rays per view.

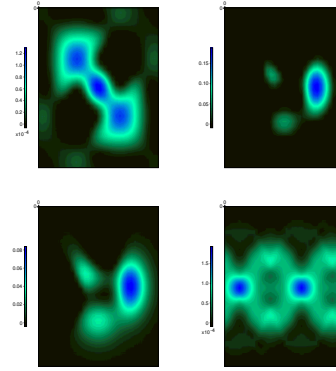


Fig. 2: Simulated data for XFCT. From left to right: density function f , fluorescence attenuation μ , transmission attenuation λ and attenuated Radon transform.

The second and third experiments shown in this article, are based on real data, obtained from a system that was set up in a high-resolution diffraction beam line at the Brazilian Synchrotron Light Source (LNLS). They consist of a microscopic

sample with a distribution of Copper and Zinc inside. For the Copper sample, each projection view had 23 rays, while 20 rays for the Zinc sample. The total number of views was 60 for both samples. Figure 3 shows functions $\{\mathcal{R}\mu, \mathcal{R}_W f\}$.

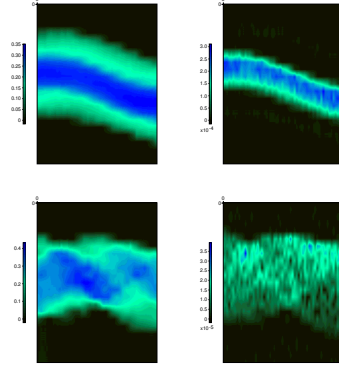


Fig. 3: Real data. From left to right: transmission data for Cu sample, XFCT data for Cu sample, transmission data for Zn sample and XFCT data for Zn sample.

In what follows we call our algorithm for known attenuation AKT (Accelerated Kunyansky Type). Our alternating version for unknown attenuation will be called AV.

Figure 4 shows a comparison between AKT and the same algorithm without acceleration, for the third iteration (simulated data, corresponding images and diagonal profiles, $\{x \in \mathbb{R}^2: x_1 + x_2 = 0\}$). AKT is clearly much faster (observe that the profile for the accelerated version coincides with the true one; this is also clear visually).

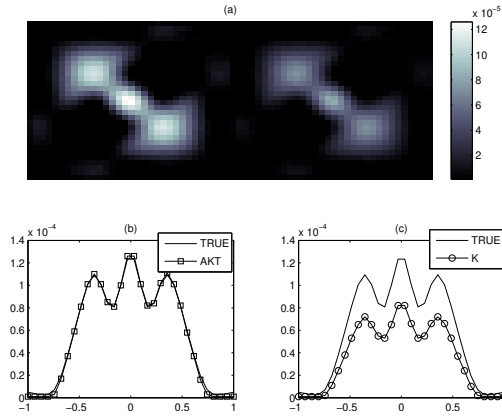


Fig. 4: Third iteration of AKT and AKT without acceleration (known attenuation maps). (a) AKT reconstruction on the left and without acceleration on the right. Reconstructed profile of $\{x \in \mathbb{R}^2: x_1 + x_2 = 0\}$ is shown for (b) AKT and (c) Without acceleration.

Figure 5 shows the profiles, corresponding to $\{x \in \mathbb{R}^2: x_1 +$

$x_2 = 0\}$ of the reconstructed emission density from simulated data, obtained by AKT and the EM algorithm for an increasing number of iterations $K = \{1, 2, 3, 20\}$ (circles, squares, diamonds and triangles respectively), using the approximation $\mu = \lambda$. AKT's third iteration already coincides with the true values. Convergence is clearly observed.

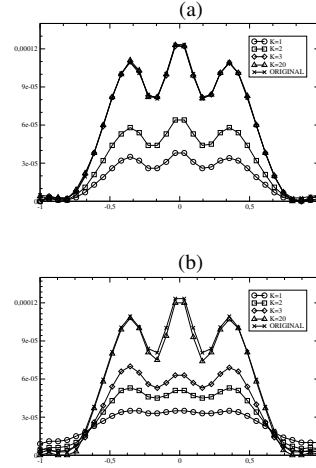


Fig. 5: AKT $\times$ EM with $\mu = \lambda$ for the simulated data. Plot along profile $x_1 + x_2 = 0$ for (a) AKT and (b) EM with an increasing number of iterations.

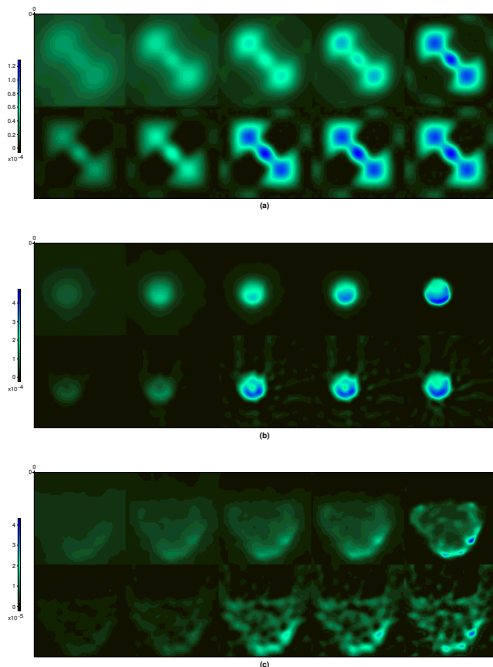
Figure 6 shows the images obtained when the emission density is reconstructed using the attenuation λ as an estimate for the fluorescence attenuation μ , using the EM algorithm (first row) and AKT (second row) for the simulated data, Cu and Zn data (from top to bottom). A first conclusion, already drawn from Figure 5, is that AKT is much faster, but the EM seems to deal better with noise (as expected).

Choosing as $f^{(1)}$ the AKT's reconstructed image with 20 iterations, the first approximation $\mu^{(1)}$ obtained by the alternate approach using equation (44) is shown in Figure 7. Since the weight functions have low magnitude (because of equation (31) and usually $f(x) = o(\epsilon)$ with $\epsilon \approx 10^{-4}$ for XFCT), we have used a preconditioned strategy with $\mathcal{H} = I$ due to the strong ill-conditioning of system (44). Finally, we use operator F , in equation (42), with $c > 0$ a parameter whose choice depends on the sample, e.g the fluorescence attenuation for the material being investigated at the incident beam energy, see [7].

Figure 8 shows the Poisson log-likelihood function for the ten first iterations of AKT and of the EM algorithm, illustrating the fact that for a reasonable number of transmission rays, these values are very similar for both methods, which is not verified for our real data (small number of transmission rays).

Figure 9 shows an ART reconstruction with 10 iterations on a 23x23 grid (the small grid size was due to the few data available). It is easy to deduce from the Figure, that, in spite of the fact that ART has been proposed in XFCT [10], it is

Fig. 6: AKT $\times$ EM with $\mu = \lambda$ for iterations $\{1, 2, 3, 4, 20\}$ (left to right). For each block, the EM reconstruction is shown in the first row and the AKT reconstruction in the second. (a) simulated case (32x32) (b) Cu sample (60x60) and (c) Zn sample (60x60).



not a reasonable alternative. for the emission reconstruction (slow, noisy).

Finally, Figure 10 shows the weight functions for a given angle θ and also the average function a used by algorithm in Section III.

VII. CONCLUDING REMARKS

In XFCT reconstruction, several methods have been proposed to retrieve the fluorescence emission density from the data. One of the most popular ones is equivalent to one iteration of our proposed method without acceleration [3], also, the discrete version of ART [10] has been used as well as regularized versions of the EM algorithm [15]. We have presented a fast variant of an iterative Radon based method for the inversion of the XFCT transform that improves many of the previous methods. Also we presented an alternating method for retrieving simultaneously the intensity and the fluorescence attenuation functions. Our results for XFCT data have been very encouraging, suggesting the application of the same approach to other inverse problems related to the Generalized Attenuated Radon Transform.

Our numerical experiments show that the proposed method is able to obtain very good reconstructions at a very fast rate.

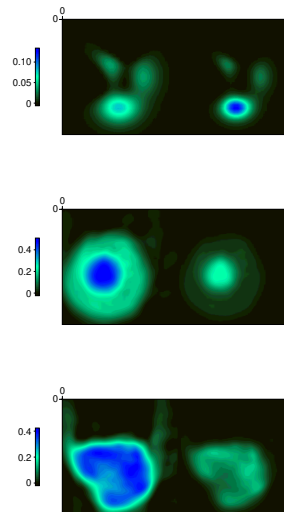


Fig. 7: Iterates $\{\mu^{(0)}, \mu^{(1)}\}$ (left, right), for AV, using equation (44) and $f^{(1)}$ of Figure 6 (5th image). Results obtained with $c = 10$. Initial guess $\mu^{(0)}$ was obtained using FBP of transmission data of Figure 3.

The EM algorithm for the fluorescence emission reconstruction tends to handle noise better, but it is extremely slow. This suggests that a mixed strategy using our iterative reconstruction followed by an EM filtering could be a reasonable choice in practice.

VIII. ACKNOWLEDGMENTS

We are grateful for the support of the researchers of the Nuclear Instrumentation Laboratory (Federal University of Rio de Janeiro), Brazil, and the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS).

APPENDIX

The following proofs are based only on Fubini's theorem and a change of variables. Also, it is worth noting that the Radon transform (the same applies for the generalized Radon transform) can be written as

$$\mathcal{R}f(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi = t} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} f(t\xi + s\xi^\perp) ds$$

with $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\xi^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$.

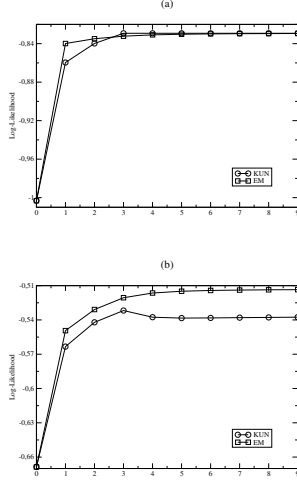


Fig. 8: Poisson log-likelihood function for the ten first iterations of AKT and EM algorithm. (a) Simulated data (b) Copper sample.

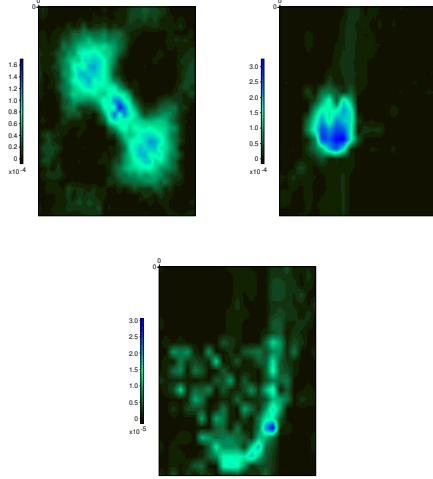


Fig. 9: ART 23x23 reconstruction with $\mu = \lambda$ after 10 iterations, using relaxation factor $\alpha = \frac{1}{2}$ (see equation (22)) for our simulated samples.

Proof of (31): From (30), using $\sigma_{\theta,\gamma}(x) = f(x)\bar{\omega}_\lambda(x, \theta + \pi)\bar{\omega}_\mu(x, \theta + \gamma)$

$$\begin{aligned}
 & -T_\mu h(t, \theta) \\
 &= \int_{x=\xi=t} dx f(x) \bar{\omega}_\lambda(x, \theta + \pi) \int_\Gamma d\gamma \bar{\omega}_\mu(x, \theta + \gamma) \mathcal{D}h(x, \theta + \gamma) \\
 &= \int_\Gamma d\gamma \int_0^\infty dq \int_\mathbb{R} ds \sigma_{\theta,\gamma}(t\xi + s\xi^\perp) h(t\xi + s\xi^\perp + q\xi^\perp(\theta + \gamma))
 \end{aligned}$$

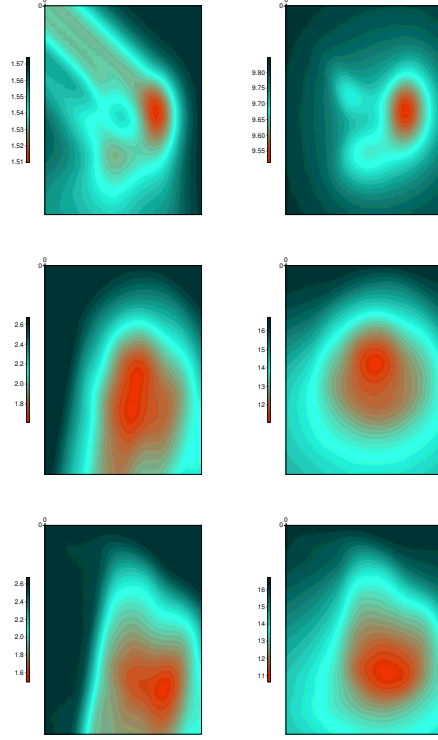


Fig. 10: From up to down. Left: weight functions $W(\cdot, \theta_4)$ for simulated sample, Cu sample and Zn sample. Right: average function a (see (14)) for our examples.

Let $v\xi^\perp = s\xi^\perp + q\xi^\perp(\theta + \gamma)$ so that $v = s + q\beta$ with $\beta = \xi(\theta) \cdot \xi^\perp(\theta + \gamma) = -\sin \gamma$, where $\sin \gamma > 0$ because $\Gamma \subset [0, \pi]$. It follows that

$$\begin{aligned}
 & -T_\mu h(t, \theta) \\
 &= \int_\Gamma d\gamma \int_0^\infty dq \int_\mathbb{R} dv \sigma_{\theta,\gamma}(t\xi + (v - q\beta)\xi^\perp) h(t\xi + v\xi^\perp) \\
 &= \int_\mathbb{R} dv h(t\xi + v\xi^\perp) \int_\Gamma d\gamma \int_0^\infty dq \sigma_{\theta,\gamma}(t\xi + v\xi^\perp + \sin \gamma q\xi^\perp) \\
 &= \int_\mathbb{R} dv h(t\xi + v\xi^\perp) \int_\Gamma \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^\infty dq \sigma_{\theta,\gamma}(t\xi + v\xi^\perp + q\xi^\perp) \\
 &= \int_{x=\xi=t} dx h(x) \int_\Gamma \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta,\gamma}(x, \theta) \\
 &= \mathcal{R}_\omega h(t, \theta), \quad \omega(x, \theta) = \int_\Gamma \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}\sigma_{\theta,\gamma}(x, \theta). \quad \square
 \end{aligned}$$

Proof of (33): From (32), using weight function (31), denoting $p = q\xi^\perp(\theta + \pi) + x$ and using the same arguments

of (25) we have

$$\begin{aligned}
& \omega_{\mu+h}(x, \theta) - \omega_{\mu}(x, \theta) \\
&= \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^{\infty} dq f(p) \bar{\omega}_{\lambda}(p, \theta + \pi) [\bar{\omega}_{\mu+h}(p, \theta) - \bar{\omega}_{\mu}(p, \theta)] \\
&= \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^{\infty} dq f(p) \bar{\omega}_{\lambda}(p, \theta + \pi) e^{-\mathcal{D}\mu(p)} [-\mathcal{D}h(p) + r(h)(\hat{p})] \\
&= - \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^{\infty} dq f(p) \bar{\omega}_{\lambda}(p, \theta + \pi) \bar{\omega}_{\mu}(p) \mathcal{D}h(p) + r(h)(\hat{p}) \bar{\omega}_{\mu} \\
&= - \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \int_0^{\infty} dq \sigma_{\theta, \gamma}(p, \theta) \mathcal{D}h(p) + r(h)(\hat{p}) \bar{\omega}_{\mu}(x, \theta) \\
&= - \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \frac{d\gamma}{\sin \gamma} \mathcal{D}(\sigma_{\theta, \gamma} \mathcal{D}h)(x, \theta) + r(h)(\hat{p}) \bar{\omega}_{\mu}(x, \theta). \quad \square
\end{aligned}$$

REFERENCES

- [1] R. Bracewell, *The Fourier Transform and its Applications*, 3rd edition, New York, McGraw Hill, 2000.
- [2] A.V.Bronnikov, *Numerical solution of the identification problem for the attenuated Radon transform*, Inverse Problems 15, pp. 1315-1324, 1999.
- [3] A. Brunetti, B. Golosio, *Software for X-ray fluorescence and scattering tomographic reconstruction*, Computer Physics Communications, vol.141, pp.412-425, 2001.
- [4] L.T.Chang, *A Method for Attenuation Correction in Radionuclide Computed Tomography*, IEEE Trans. Nucl. Science, NS-25, No.1, pp.638-648, 1978.
- [5] R.Cesareo, S.Mascarenhas, *A new tomographic device based on the detection of fluorescent x-rays*, Nucl. Instrum. Methods A, 277, pp. 667-672, 1989.
- [6] F. Crepaldi and A.R. De Pierro, *Activity and attenuation reconstruction for Positron Emission Tomography using emission data only via maximum likelihood and iterative data refinement*, IEEE Trans. Nuclear science, 54, 1, 100-106, 2007.
- [7] D.E.Cullen, M.H.Chen, J.H.Hubbel, S.T.Perkins, E.F.Plechaty, *Tables and graphs of photon-interaction cross sections from 10eV to 100GeV derived from the LLNL evaluated photon data library*, Lawrence Livermore National Laboratory Tech. Information 6, UCRL-50400, CA, 1989.
- [8] S.R.Deans, *The Radon transform and some of its applications*, New York, J.Wiley, 1983.
- [9] De Pierro A., *A modified expectation maximization algorithm for penalized likelihood estimation in emission tomography*, IEEE Trans. Med. Imag., vol 14, no 1, pp 132-137, 1995.
- [10] G.Friedmann Rust, J.Weigelt, *X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.45, No. 1, 1998.
- [11] Guy J., Mangeot B., Salès A., *Solutions for Fredholm equations through nonlinear iterative processes*, J.Phys.A, Math. Gen. 17, 1403-1413, 1984.
- [12] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.
- [13] L.A.Kunyansky, *Generalized and attenuated Radon transforms: restorative approach to the numerical inversion*, Inverse Problems, 8, pp. 809-819, 1992.
- [14] L.A.Kunyansky, *A new SPECT reconstruction algorithm based on the Novikov's explicit inversion formula*, Inverse Problems, 17, pp 293-306, 2001.
- [15] P.La Rivière, P.Vargas, *Monotonic Penalized-likelihood image reconstruction for X-ray fluorescence computed tomography*, IEEE Trans. Med. Imaging, vol.25, No.9, 2006.
- [16] D.G.Luenberger, *Optimization by vector space methods*, New York, J.Wiley, 1969.
- [17] M.McClendon, H.Rabitz, *Variational methods for approximating solutions of $\nabla^2 u = f + ku$ and generalizations*, SIAM, Vol. 46, No.4, 1986.
- [18] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Fluorescence Tomography: reconstruction by iterative methods*, ISBI 2008, 760-763.
- [19] F.Natterer, *The mathematics of computerized tomography*, John Wiley & Sons, 1986.
- [20] F.Natterer and F. Wubbeling, *Mathematical Methods in Image Reconstruction*, SIAM, 2001.
- [21] F.Natterer, *Inversion of the attenuated Radon Transform*, Inverse Problems, 17, pp 113-119, 2001.
- [22] U.Niesen, D.Shah, G.Wornell, *Adaptive alternating minimization algorithms*, CoRR, 2007.
- [23] H.S.Rocha, G.R.Pereira, M.J.Anjos, P.Faria, G.Kellerman, C.A.Pérez, G.Tirao, I.Mazzaro, C.Giles, R.T.Lopes, *Diffraction enhanced imaging and x-ray fluorescence microtomography for analysing biological samples*, X-Ray Spectrometry, vol.36, pp.247-253, 2007.
- [24] Ye X., Li C., Shen W., *Convergence of the variants of the Chebyshev-Halley iteration family under the Holder condition of the first derivative*, Journal of Computational and Applied Mathematics, pp.279-288, 203, 2007.
- [25] T. Yuasa, M. Akiba, T. Takeda, M. Kazama, A. Hoshino, Y. Watanabe, K. Hyodo, F.A. Dilmanian, T. Akatsuka and Y. Itai, *Reconstruction method for fluorescent X-ray computed tomography by least-squares method using singular value decomposition* IEEE Trans. Nuclear Science, 44, 1, 54-62, 1997.

Apêndice E

Artigo/Método Iterativo

Como divulgação do artigo apresentado no Apêndice D, o seguinte artigo foi apresentado no *International Symposium on Biomedical Imaging*, Paris/França, durante Maio de 2008. Foi a primeira vez que um método iterativo baseado na inversão de Radon foi introduzido em xfct.

FLUORESCENCE TOMOGRAPHY: RECONSTRUCTION BY ITERATIVE METHODS

Eduardo X. Miqueles and Alvaro R. De Pierro

Applied Mathematics Department, State University of Campinas, Brazil

ABSTRACT

X-Ray fluorescence computed tomography (XFCT) aims at reconstructing fluorescence density from emission data given the measured X-Ray attenuation. In this paper, inspired by emission tomography (ECT) reconstruction literature, we propose and compare different reconstruction methods for XFCT, based on iteratively inverting the generalized attenuated Radon transform. We compare the different approaches using simulated and real data as well.

Index Terms— fluorescence tomography, emission tomography, attenuation, generalized Radon transform

1. INTRODUCTION

X-Ray fluorescence computed tomography (XFCT) is a relatively new synchrotron based imaging modality that can be seen as a stimulated emission tomography [2]. In XFCT a sample is irradiated with high intensity monochromatic synchrotron X-rays with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest. This stimulates fluorescence emission, at certain characteristic energies, isotropically distributed, which are detected by a detector placed parallel to the direction of the incident beam [7]. Part of the emission is absorbed by the sample, so, correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions could have many important biomedical applications [9].

A continuous mathematical model for XFCT is given by the generalized attenuated Radon Transform [6]; that is, if $\theta \in [0, 2\pi]$ and $t \in [-1, 1]$ are the parameters defining the line where emission occurred, and $d(t, \theta)$ is the number of detected emissions coming from some point on that line, we have that, for the emission density f , defined in the unit disc Ω :

$$d(t, \theta) = \mathcal{R}_W f(t, \theta) = \int_{\mathbf{x} \cdot \xi = t} W(\mathbf{x}, \theta) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

where $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$, $\xi^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$ and

$$W(\mathbf{x}, \theta) = e^{-D\lambda(\mathbf{x}, \theta + \pi)} \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} e^{-D\mu(\mathbf{x}, \theta + \gamma)} d\gamma,$$

First author supported by FAPESP grant No 06/00356-6 and second author by FAPESP grant No 2002/07153-2 and CNPq grants No 476825/2006-0 and 304820/2006-7

is the weight function and the operator D is defined by

$$D\mu(\mathbf{x}, \theta) = \int_0^\infty \mu(\mathbf{x} + q\xi^\perp) dq,$$

also known as the *divergent beam transform*. The fluorescence radiation leaves the object within the angle range $[\gamma_1, \gamma_2]$ at each emission point. Here, μ stands for the fluorescence attenuation and λ for the transmission one. Therefore, in a continuous setting, the mathematical problem consists of approximately inverting the operator $\mathcal{R}_W$, for known λ and estimated μ .

It is easy to prove that the adjoint operator of $\mathcal{R}_W$ is defined by

$$\mathcal{B}_W d(\mathbf{x}) = \int_0^{2\pi} W(\mathbf{x}, \theta) d(\mathbf{x} \cdot \xi, \theta) d\theta$$

with $d = d(t, \theta)$. We call $\mathcal{B}_W$ the attenuated backprojection operator. If $\mu = \lambda = 0$, then $\mathcal{R}_W = \mathcal{R}$ is the classic Radon Transform and $\mathcal{B}_W = \mathcal{B}$ the standard backprojection operator.

In the next two Sections we present the methods. Section 4 describes the numerical experiments comparing them with simulated and real data and Section 5 presents some conclusions.

2. ITERATIVE INVERSION OF THE ATTENUATED TRANSFORM

For given λ and $\mu = 0$, working in emission tomography, Chang [3] suggested the approximation

$$f_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathcal{R}^{-1}\{d\}(\mathbf{x})}{a(\mathbf{x})}$$

as an estimate of the density f , where $a = a(\mathbf{x})$ corresponds to the correction

$$a(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} W(\mathbf{x}, \theta) d\theta.$$

Independently, Hogan *et al* [5], after an appropriate discretization, obtained the same formula as Chang, that is the one currently being used in fluorescence tomography, when fluorescence attenuation is known.

Inspired by work by Kunyansky [6] we observed that Chang-Hogan's method is nothing but the first iteration of

an iterative method. Each iteration consists of considering the inverse Radon Transform $\mathcal{R}^{-1}$, weighted by the factor $\frac{1}{a}$, very easy to calculate, as an approximation of the inverse of the attenuated Radon Transform, $\mathcal{R}_W^{-1}$; then a correction by the residual gives the next iterate. That is, the sequence is defined by

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \alpha_k e^{(k)} \quad (1)$$

where we have introduced the positive relaxation factor α_k and

$$e^{(k)} = \frac{\mathcal{R}^{-1}(d - \mathcal{R}_W f^{(k)})}{a}$$

So, the first iteration, with $f^{(0)} = 0$ and $\alpha_k = 1 \forall k$ gives Chang-Hogan's correction. α_k is a relaxation factor that for high attenuation values could be used to accelerate the method when greater than one.

3. THE EM ALGORITHM

Together with the “continuous” inversion, and following [4] we will compare the results with the standard EM algorithm for the problem. The EM algorithm is defined by the iteration (for known $\{\mu, \lambda\}$):

$$f^{(k+1)}(\mathbf{x}) = f^{(k)}(\mathbf{x}) \frac{\mathcal{B}_W d^{(k)}(\mathbf{x})}{\mathcal{B}_W e(\mathbf{x})} \quad (2)$$

where $e(t, \theta) = 1, \forall(t, \theta) \in [0, 2\pi] \times [-1, 1]$, and

$$d^{(k)}(t, \theta) = \frac{d(t, \theta)}{\mathcal{R}_W f^{(k)}(t, \theta)}.$$

4. NUMERICAL EXPERIMENTS

We performed several numerical experiments with simulated and real data, that are summarized next. In order to compare algorithms (1) and (2), $f^{(0)}|_{\Omega} = \epsilon$ was chosen as the initial point, since the EM algorithm cannot converge starting from the null image. For fluorescence experiments applied in soft tissues, the density function f usually has a very low order of magnitude, say $f(\mathbf{x}) \approx 10^{-6}$, so, for our numerical experiments, we used $\epsilon = 10^{-7}$.

Simulated Data

The phantom for these simulations follows Brunetti *et al*'s [1], but with a modified geometry, in order to test the algorithms performance for borders identification. The 512x512 pixels images of f and λ are shown in figure 1. In this example, $\mu = 2\lambda$. 150 views (uniform angles in $[0, 2\pi]$) and 150 rays for each view were used. Figure 2 shows the reconstructions by both algorithms using $\mu \neq \lambda$, first and fourth iterations. Figures 3 and 4 are the reconstructions for the line $x = -0.30$ using $\mu \neq \lambda$ and $\mu = \lambda$. Figure 5 shows the

reconstructions with $\mu = \lambda$ for each algorithm after 100 iterations. It is clear the improvement obtained when increasing the number of iterations. A higher likelihood value is attained very fast by Alg (1).

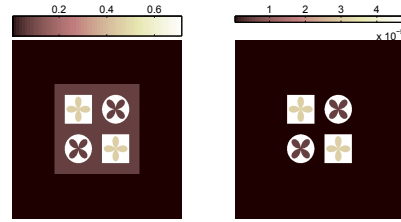


Fig. 1. Phantom, 512x512 pixels. Left: Transmission attenuation. Right: Density emission.

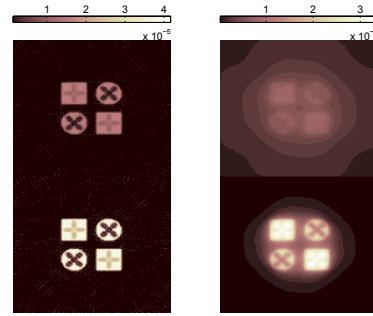


Fig. 2. Reconstructions with $\mu \neq \lambda$. Left (top): one iteration of 1. Left (bottom): four iterations of 1. Right: same for algorithm 2.

Real Data

We performed reconstructions from experimental data from samples of breast tissue to observe details of ductal carcinoma structures. This was done by reconstructing the distributions of Fe, Cu and Zn. The data was obtained from a system that was set up in a high-resolution diffraction beam line at the Brazilian Synchrotron Light Source (LNLS) in Campinas, São Paulo. The fluorescence attenuation map μ was not available a priori, so $\mu = \lambda$ was used as an approximation. The results are shown in Figures 6,7 and 8. As for the simulated data, that is, with known geometry, contrast clearly increases with the number of iterations.

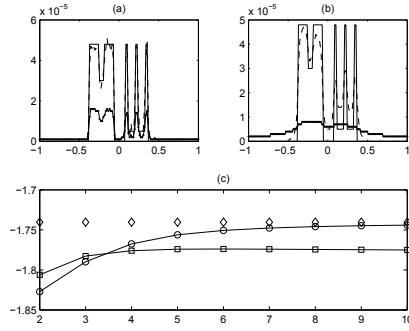


Fig. 3. Graphics along the line $x = -0.30$ for $\mu \neq \lambda$ for the phantom. The continuous line represents the phantom, the dotted line ten iterations, the pointed line one iteration. (a) For Alg (1) (b) For Alg (2) (c) Loglikelihood function for the ten first iterations. Alg (1); circles, Alg (2): squares, Ideal values: diamonds.

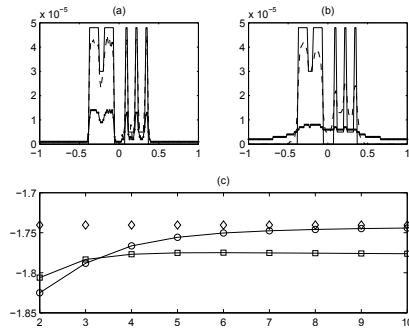


Fig. 4. Same as Figure 3 for $\mu = \lambda$.

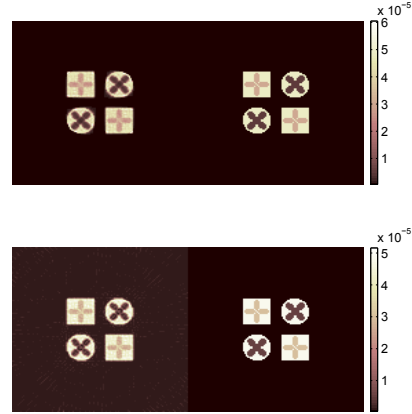


Fig. 5. Reconstructions for $\mu = \lambda$ after 100 iterations for the discontinuous phantom. Top: Alg (2) vs. original; bottom: Alg (1) vs original.

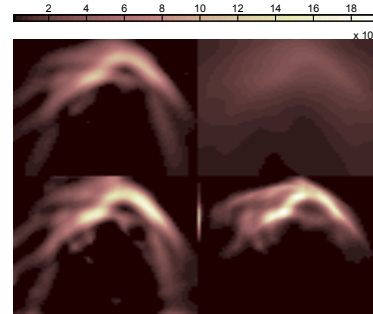


Fig. 6. Reconstruction of Fe density using $\mu = \lambda$. The first column represents iterations one and fifty for Alg(1), the second for Alg(2).

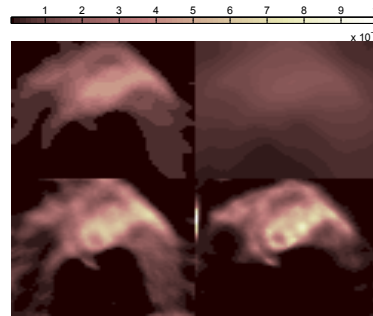


Fig. 7. Same as Figure 6 for Cu.

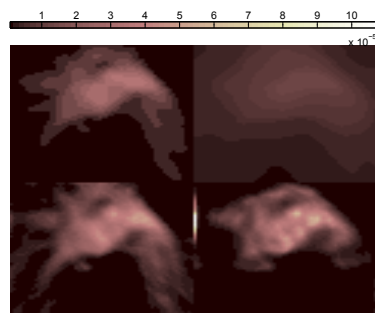


Fig. 8. Same as Figure 6 for Zn.

5. CONCLUSIONS

In the current XFCT literature the main inversion method has been Hogan *et al.*'s. In this article we show that the method is just the first iterate of a more general iterative method based on the weighted inversion of the Radon Transform. Our experiments show that the quality of the images could be very much improved when several iterations are used. From our simulations and experiments with real data, we can see that this improvement is also valid when the unknown fluorescence attenuation is estimated by the transmission attenuation map. We are working now in two directions: the fast retrieval of the fluorescence attenuation from the emission data only and the reconstruction from smaller data sets, aiming at reducing the experimental time. Also, we are comparing our approach with the one proposed in [7], using a phantom with known geometry to verify the reconstruction accuracy.

6. ACKNOWLEDGMENTS

We are very grateful for the support of the researchers of the Nuclear Instrumentation Laboratory (Federal University of Rio de Janeiro), Brazil, and the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS).

7. REFERENCES

- [1] A.Brunetti, B.Golosio, *Software for X-ray fluorescence and scattering tomographic reconstruction*, Computer Physics Communications, vol.141, pp.412-425, 2001.
- [2] R.Cesareo, S.Mascarenhas, *A new tomographic device based on the detection of fluorescent x-rays*, Nucl. Instrum. Methods A, 277, pp. 667-672, 1989.
- [3] L.T.Chang, *A Method for Attenuation Correction in Radionuclide Computed Tomography*, IEEE Trans. Nucl. Science, NS-25, No.1, pp.638-648, 1978.
- [4] G.Friedmann Rust, J.Weigelt, *X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.45, No. 1, 1998.
- [5] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.
- [6] L.A.Kunyansky, *Generalized and attenuated Radon transforms: restorative approach to the numerical inversion*, Inverse Problems, 8, pp. 809-819, 1992.
- [7] P.La Rivière, P.Vargas, *Monotonic Penalized-likelihood image reconstruction for X-ray fluorescence computed tomography*, IEEE Trans. Med. Imaging, vol.25, No.9, 2006.
- [8] P.La Rivière, *Approximate analytic reconstruction in X-ray fluorescence computed tomography*, Phys.Med.Biol., 49, pp.2391-2406, 2004.
- [9] H.S.Rocha, G.R.Pereira, M.J.Anjos, P.Faria, G.Kellerman, C.A.Pérez, G.Tirao, I.Mazzaro, C.Giles, R.T.Lopes, *Diffraction enhanced imaging and x-ray fluorescence microtomography for analysing biological samples*, X-Ray Spectrometry, vol.36, pp.247-253, 2007.

Apêndice F

Artigo/Ridge Functions

Aproximação por *ridge functions* proposta no Capítulo 4, Seção 4.3.2 foi submetida e aceita ao *IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro*, realizado em Abril de 2010, Rotterdam, Holanda. É o primeiro trabalho de divulgação do uso de tais funções para a inversão da transformada generalizada de Radon, com aplicações em xfct. O artigo está apresentado no anexo a seguir.

XFCT INVERSION BY GENERALIZED RIDGE FUNCTIONS

Eduardo X. Miqueles and Alvaro R. De Pierro

Applied Mathematics Department, State University of Campinas, Brazil

ABSTRACT

X-Ray fluorescence computed tomography (xfct) aims at reconstructing fluorescence density from emission data given the measured x-ray attenuation. In this paper, inspired by the classical results from Logan & Shepp [3], we briefly discuss the existence of generalized ridge functions providing the minimal norm solution of the inverse problem. An algorithm to construct such functions is presented, based on results from Kazantsev [4]. Numerical results are also shown, with real and simulated data.

Index Terms— fluorescence tomography, ridge functions, emission tomography, attenuation, generalized Radon transform

1. INTRODUCTION

X-ray fluorescence computed tomography (xfct) is a relatively new synchrotron based imaging modality that can be seen as a stimulated emission tomography. In xfct a sample is irradiated with high intensity monochromatic synchrotron X-rays with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest. This stimulates fluorescence emission, at certain characteristic energies, isotropically distributed, which are detected by a detector placed parallel to the direction of the incident beam. Mapping fluorescence emission density distributions have many important biomedical applications.

The mathematical model for xfct is given by the generalized attenuated Radon transform, that is if $\theta \in [0, 2\pi]$ and $t \in [-1, 1]$ are the parameters defining the line where transmission occurred, and $d(t, \theta)$ is the number of detected emissions coming from some point on that line, we have that, for the emission density f , defined in the unit disk C :

$$d(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{\Omega(t, \theta)} \omega(x, \theta) f(x) dx \quad (1)$$

$$\omega(x, \theta) = e^{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)} \int_{\Gamma} e^{-\mathcal{D}\mu(x, \theta + \gamma)} d\gamma \quad (2)$$

$$\mathcal{D}\mu(x, \theta) = \int_0^\infty \mu(x + q\xi_\theta^\perp) dq \quad (3)$$

First author supported by FAPESP grant No 06/00356-6 and second author by FAPESP grant No 2002/07153-2 and CNPq grants No 476825/2006-0 and 304820/2006-7

where $\Omega(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2 : x \cdot \xi_\theta = t\}$, $\xi_\theta = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\xi_\theta^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$. Function ω is the xfct weight function describing the attenuation from source to detector. Interval $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ describe the fluorescence radiation leaving the object at each emission point x . The operator $\mathcal{D}$ is known as the *divergent beam transform*. Figure 1 shows the geometry for a xfct experiment. Function $\mu = \mu(x)$ describe the attenuation for the fluorescence and $\lambda = \lambda(x)$ the attenuation for the standard transmission ray.

In a continuous setting, the mathematical problem consists of inverting the operator $\mathcal{R}_\omega$, for known λ and μ . The inversion formula for xfct was found recently and is given in [7]. Also, other related approximations are given in [5, 6, 8]. The paper of Logan & Shepp [3], considering the case $\omega = 1$, provide the existence and uniqueness for the minimal norm solution of (1) with a discrete range of angles $\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ and for all $t \in [-1, 1]$. In this case, their solution can be written as a linear combination of *ridge* functions which are not unique (although their linear combination is), and a method for constructing each one of them is presented in [4]. This paper deals with a generalization of both results, with immediate application in xfct, where mild conditions on functions μ, λ are required.

Throughout the paper, we use notations $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$, $I = [-1, 1]$ for the range of rays at each θ_i , $p(t) = \sqrt{1 - t^2}$ and $e = e(x)$ the indicator function at the unit disk C . Also, for a fixed $\theta \in [0, 2\pi]$, $\mathcal{R}_{\omega, \theta}$ denote the generalized Radon transform acting with a fixed angle, $\mathcal{R}_{\omega, \theta} : f \mapsto \mathcal{R}_\omega f(t, \theta)$, $d_\theta = d(\cdot, \theta)$ and $\omega_\theta = \omega(\cdot, \theta)$.

2. RIDGE FUNCTIONS

Our aim is to obtain a function f_{gsf} (gsf standing for the generalized Logan-Shepp function) with least oscillation about its mean value, and also consistent with the data $d = d(t, \theta_i)$, $i = 1, \dots, n$. That is, f_{gsf} is the solution of the following problem:

Problem: Find a function $q \in \mathcal{L}^2(C)$ minimizing the functional $\|q - \bar{q}\|_{\mathcal{L}^2}$ subject to $\mathcal{R}_\omega q(t, \theta_i) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta_i) = d(t, \theta_i)$ for all $i = 1, \dots, n$ and $t \in I$, where $\bar{q} = \frac{1}{\pi} \langle q, e \rangle_{\mathcal{L}^2}$

Since $\mathcal{L}^2(C) \subseteq \mathcal{L}^2(C, w) \equiv \mathcal{L}_w^2$ for a bounded and positive weight function $w = w(x)$, we can restate the above problem, replacing space $\mathcal{L}^2$ by $\mathcal{L}_w^2$. Needless to say, that

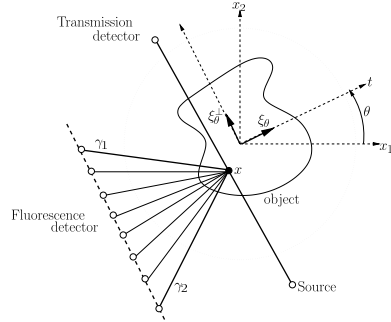


Fig. 1. Geometry for xfct

$f \in \mathcal{L}_w^2$ iff $\|f\|_w < \infty$ where $\|\cdot\|_w^2 = \langle \cdot, \cdot \rangle_w$ with $\langle f_1, f_2 \rangle_w = \int_C f_1(x)f_2(x)w(x)dx$. Let us choose the weight function w in such a way that, for all θ , the following property holds

$$w(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) = \omega(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp, \theta), \quad |t| \leq 1, |s| < p(t) \quad (4)$$

If there exist w satisfying (4), it follows after integration in $|s| \leq p(t)$ and the definition of the Radon transform that $\mathcal{R}w(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega e(t, \theta)$. Since $\mathcal{R}$ has an inverse transform, this implies $w(x) = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{R}_\omega e(x)$.

Some remarkable properties assured by the weight function w are:

- It is easy to prove that $\mathcal{R}_{\omega, \theta}(L_w^2) \subseteq L^2(I, p^{-1})$ since $|\mathcal{R}_{\omega, \theta} f(t)| \leq 2p(t)\|\omega_\theta\|_\infty\|f\|_w$, for all θ .
- The average $\bar{q}$ does not depend on q . Indeed, by (4) and a change of variables $x = x_{t,s,\theta} = t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp$

$$\bar{q} = \pi^{-1} \int_C q(x)w(x)dx \quad (5)$$

$$= \pi^{-1} \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds q(x_{t,s,\theta})\omega(x_{t,s,\theta}, \theta) \quad (6)$$

$$= \pi^{-1} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{R}_{\omega, \theta} q(t) = \pi^{-1} \langle d_\theta, \chi_I \rangle_{\mathcal{L}^2} \quad (7)$$

- The average is preserved, $\bar{f} = \bar{g}$. This can be proved using the same calculations of the previous item;
- Minimizing $\|q - \bar{q}\|_w$ is equivalent to minimize $\|q\|_w$. In fact, since $\bar{q}$ does not depend on q , it follows

$$\|q - \bar{q}\|_w^2 = \|q\|_w^2 - 2\langle q, \bar{q}e \rangle_w + (\bar{q})^2 \|e\|_w^2 \quad (8)$$

$$= \|q\|_w^2 + (\bar{q})^2 [\|e\|_w^2 - 2] \quad (9)$$

- For an arbitrary q and $\theta \in \Theta$:

$$\|q\|_w^2 = \int_C |q(x)|^2 w(x)dx \quad (10)$$

$$\leq \|q\|_\infty \int_C |q(x)|w(x)dx \quad (11)$$

$$\stackrel{(4)}{=} \|q\|_\infty \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta} q, \chi_I \rangle_{\mathcal{L}^2} \quad (12)$$

Let $h \in \mathcal{L}^2(I)$ be an arbitrary function. For each $\theta \in \Theta$, let us denote $H_\theta(x) = h(x \cdot \xi_\theta)$, usually called *ridge* function. After the change of variables $x_{t,s,\theta} = t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp$ and (4), function H_θ satisfies the following rule

$$\langle f, H_\theta \rangle_w = \int_C f(x)h(x \cdot \xi_\theta)w(x)dx \quad (13)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dt \int_{\mathbb{R}} ds f(x_{t,s,\theta})w(x_{t,s,\theta})h(t) \quad (14)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dt h(t)\mathcal{R}_{\omega, \theta} f(t) = \langle h, \mathcal{R}_{\omega, \theta} f \rangle_{\mathcal{L}^2} \quad (15)$$

Denoting $R_n = \text{span}\{H_{\theta_1}, \dots, H_{\theta_n}\} \subseteq L_w^2$ and $g = \text{proj}_{R_n} f$ the orthogonal projection of f onto R_n , we have $g - f \perp H_{\theta_j}$ for all j , i.e. $\langle g - f, H_{\theta_j} \rangle_w = 0$. By (15) it follows that

$$0 = \langle g - f, H_{\theta_j} \rangle_w = \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta_j}(g - f), h \rangle_{\mathcal{L}^2}, \quad (16)$$

$\forall h \in \mathcal{L}^2(I)$. Therefore, the orthogonal projection g is also consistent with the data d_{θ_j} at the view set Θ . We assert that $f_{\text{gsi}} = g$. Indeed, replacing q by $g - f_{\text{gsi}}$ in (10),

$$\|g - f_{\text{gsi}}\|_w \leq \|g - f_{\text{gsi}}\|_\infty \langle \mathcal{R}_{\omega, \theta}(g - f_{\text{gsi}}), \chi_I \rangle_{\mathcal{L}^2} \quad (17)$$

and since f_{gsi} is also consistent (because is the solution of our **Problem**) it follows that $\|g - f_{\text{gsi}}\|_w \leq 0$, hence $g = f_{\text{gsi}}$. Quoting [3], *any function with the same projections will have its norm reduced by projection onto R_n* , from what follows that f_{gsi} is the unique minimum norm solution.

We get almost the same proof if we choose a set of functions $\{h_1, \dots, h_n\} \subset \mathcal{L}^2(I)$, each one associated with an angle θ_i , and setting $H_{\theta_j} = h_j(x \cdot \xi_{\theta_j})$. Hence, the generalized Logan-Shepp function f_{gsi} , solution of our **problem**, is given by the following linear combination

$$f_{\text{gsi}}(x) = \sum_{i=1}^n h_i(x \cdot \xi_i) \quad (18)$$

3. INVERSION ALGORITHM

In order to construct the minimal norm solution (18), we need to set the ridge functions $\{h_1, \dots, h_n\}$. Our approach assume some smoothness degree on the given weight function $\omega(\cdot, \theta)$ in (2). If this is not true, an ideal filter could be applied to ω . In what follows, we use the notation $x_{t,s,\theta} = t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp$.

Let $H_\beta(x) = h_\beta(x \cdot \xi_\beta)$. The generalized Radon transform of H_β , with parameters (t, β) , is given by

$$\mathcal{R}_\omega H_\beta(t, \beta) = h(t)\mathcal{R}_\omega e(t, \beta) \quad (19)$$

By the mean value theorem for integrals, there is a $\bar{s}$ in $[-p(t), p(t)]$, such that

$$\mathcal{R}_\omega e(t, \beta) = \int_{-p(t)}^{p(t)} \omega(x_{t,s,\beta}, \beta)ds = 2\omega(x_{t,\bar{s},\beta}, \beta)p(t) \quad (20)$$

On the other hand, the generalized Radon transform of H_β , with parameters (t, α) , is given by

$$\mathcal{R}_\omega H_\beta(t, \alpha) = \int_{\Omega(t, \alpha)} \omega(x, \alpha) h_\beta(x \cdot \xi_\beta) dx \quad (21)$$

$$= \int_{-p(t)}^{p(t)} \omega(x_{t, s, \alpha}, \alpha) h_\beta(a(t, s)) ds \quad (22)$$

$$= \frac{\omega(x_{t, \hat{s}, \alpha}, \alpha)}{\sin(\beta - \alpha)} \int_{s^-(t)}^{s^+(t)} h_\beta(q) dq \quad (23)$$

for some $\hat{s}$ in $[-p(t), p(t)]$, with $a(t, s) = t \cos(\beta - \alpha) + s \sin(\beta - \alpha)$ and $s^\pm(t) = t \cos(\beta - \alpha) \pm p(t) \sin(\beta - \alpha)$.

From (18), $d(t, \theta_i) = \mathcal{R}_\omega f_{\text{gsi}}(t, \theta)$, and by (19) and (23)

$$\frac{d(t, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} = h_i(t) + \frac{\omega(x_{t, \hat{s}, \theta_i}, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} \sum_{j \neq i}^n \frac{\int_{s^-(t)}^{s^+(t)} h_j(q) dq}{\sin(\theta_j - \theta_i)} \quad (24)$$

Let $v_i(t) \equiv d(t, \theta_i) / \mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)$. Since $\mathcal{L}^2(I) \subseteq \mathcal{L}^2(I, p)$, we expand h_i and v_i in Tchebyshev polynomials of the second kind $\{U_k\}$, which are orthonormal in $\mathcal{L}^2(I, p)$,

$$h_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} b_i^{(k)} U_{k-1}(t), \quad v_i(t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_i^{(k)} U_{k-1}(t) \quad (25)$$

Putting (25) into (24), and using *Proposition 3* from [4] to simplify the integral on the right-hand side of (24), we arrive at

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_i^{(k)} U_{k-1}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\sum_{j=1}^n \ell_{ij}^{(k)}(t) b_j^{(k)} \right) U_{k-1}(t) \quad (26)$$

where $c_i^{(k)} = \langle v_i, U_{k-1} \rangle_p / \|U_{k-1}\|_p$ and

$$\ell_{ij}^{(k)}(t) = \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i)}{\mathcal{R}_\omega e(t, \theta_i)} 2p(t) \frac{\sin k(\theta_i - \theta_j)}{k \sin(\theta_i - \theta_j)} \quad (27)$$

$$\stackrel{(20)}{=} \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i)}{\omega(t\xi_i + \bar{s}\xi_i^\perp, \theta_i)} \frac{\sin k(\theta_i - \theta_j)}{k \sin(\theta_i - \theta_j)} \quad (28)$$

$$\equiv \frac{\omega(t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp, \theta_i)}{\omega(t\xi_i + \bar{s}\xi_i^\perp, \theta_i)} a_{ij}^{(k)} \quad (29)$$

with $a_{ij}^{(k)} = \sin k(\theta_i - \theta_j) / k \sin(\theta_i - \theta_j)$. From (26) we get the following linear system

$$\sum_{j=1}^n \ell_{ij}^{(k)}(t) b_j^{(k)} = c_i^{(k)} \Rightarrow L^{(k)}(t) b^{(k)} = c^{(k)}, \quad \forall |t| \leq 1 \quad (30)$$

Let $\hat{x} = t\xi_i + \hat{s}\xi_i^\perp$ e $\bar{x} = t\xi_i + \bar{s}\xi_i^\perp$. Since $\bar{s} \neq \hat{s}$, we can simplify (29) using the linear approximation

$$\omega(\hat{x}, \theta_i) \approx \omega(\bar{x}, \theta_i) + \partial_x \omega(\bar{x}, \theta_i) \cdot (\Delta s \xi_i^\perp) \quad (31)$$

with $\Delta s = \text{sign}(\hat{s} - \bar{s})|\hat{s} - \bar{s}|$. Therefore

$$\ell_{ij}^{(k)} \approx [1 + e_{ij}(t)] a_{ij}^{(k)}, \quad e_{ij}(t) = \Delta s \frac{\partial_x \omega(\bar{x}, \theta_i) \cdot \xi_i^\perp}{\omega(\bar{x}, \theta_i)} \quad (32)$$

For xfct, the gradient $\partial_x \omega(x, \theta)$ is given below, for some $\beta^* \in \Gamma$:

$$\frac{\partial_x \omega(x, \theta)}{\omega(x, \theta)} = -[\partial_x \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \partial_x \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta^*)] \quad (33)$$

Proposition 3.1 *If the attenuation coefficients λ, μ satisfy $\|\partial_x \mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi) + \partial_x \mathcal{D}\mu(x, \theta + \beta)\|_2 = o(\epsilon)$, for a small ϵ and for all $x \in C$ and $\beta \in [0, 2\pi]$, the minimal norm solution is given by (18), with h_i given by (25) and $b^{(k)}$ solution of the linear system $A^{(k)} b^{(k)} = c^{(k)}$, within tolerance ϵ .*

The solution of $A^{(k)} b^{(k)} = c^{(k)}$ for the above Proposition, is given in [4], where an analytical inversion for $b^{(k)}$ is possible, whenever the views $\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ are equally spaced.

4. NUMERICAL EXPERIMENTS

We present two experiments, a simulated and a real one. The simulated considers smooth phantoms $\{f, \lambda, \mu\}$ described by Gaussian functions, shown in Figure 2. The real experiment takes samples of breast tissue to observe details of ductal carcinoma structures. This was done by reconstructing the distributions of Gallium inside the sample. The data was obtained from a system that was set up in a high-resolution diffraction beam line at the Brazilian Synchrotron Light Source (LNLS) in Campinas, São Paulo.

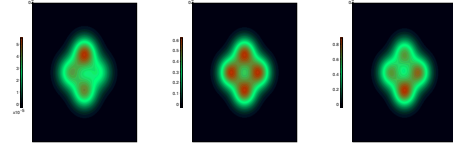


Fig. 2. Phantoms $\{f, \lambda, \mu\}$ used for simulation (left/right).

For the real simulations, the fluorescence attenuation map μ was not available a priori, so we set the first order approximation $\mu = \lambda$. Figure 4 presents the low-magnitude gradient $\partial_x \mathcal{D}\lambda(\cdot, \theta_5)$ for the simulated and real data. Figure 5 shows minimal norm solution for the simulated data using 50 and 300 partial sums defining the Tchebyshev expansion (25). The same applies for Figure 6 with 20 and 50 partial sums.

5. CONCLUSIONS

In the current xfct literature the main inversion method has been Hogan *et al's* [9], in which a filtered backprojection algorithm is applied to the data, followed by a compensation

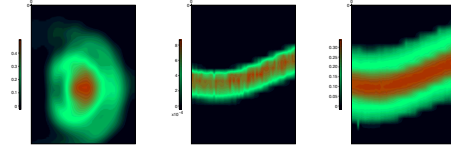


Fig. 3. Real data $\{\lambda, \mathcal{R}_\omega f, \mathcal{R}\lambda\}$ (left/right).

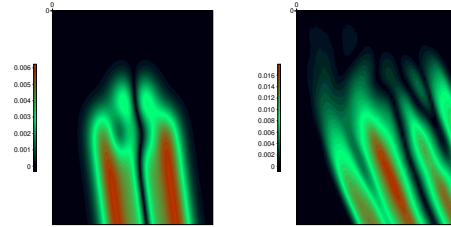


Fig. 4. Gradient $\partial_x \mathcal{D}\lambda(\cdot, \theta)$: simulated/real (left/right).

with an average function. In this article we show that for a given attenuation λ with low-magnitude gradient, the minimal norm solution can be written as a linear combination of ridge functions, each one computed by an algorithm similar to the one proposed by Kazantsev, using Tchebyshev expansion in $\mathcal{L}^2$. Our experiments show that the quality of the images could be very much improved with an increasing number of partial sums for the expansion. From our simulations and experiments with real data, we can see that this improvement is also valid when the unknown fluorescence attenuation is estimated by the transmission attenuation map. We are working now in two directions: comparing the ridge functions of Logan & Shepp with the more general approach of Madych [2] and the singular value decomposition of Caponnetto *et al*'s [1], with possible applications in spect.

We are very grateful for the support of the researchers of the Nuclear Instrumentation Laboratory (Federal University of Rio de Janeiro), Brazil, and the Brazilian Synchrotron Light Laboratory (LNLS).

6. REFERENCES

- [1] A.Caponnetto, M.Bertero, *Tomography with a finite set of projections: singular value decomposition and resolution*, Inverse Problems, 13, 1191-1205, 1997.
- [2] W.R.Madych, *Summability and Approximate Reconstruction from Radon Transform Data*, Contemporary Mathematics, Vol. 113 (1990), 189-219.

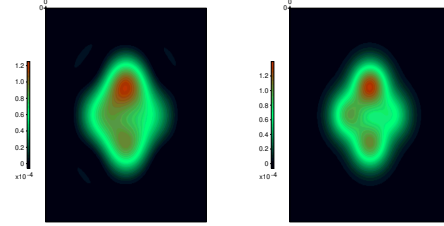


Fig. 5. Partial sum of order: 50/300 (left/right).

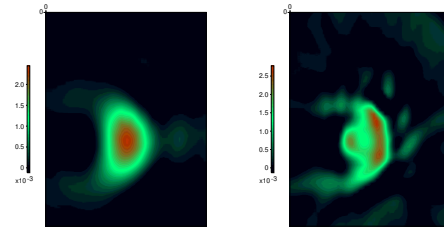


Fig. 6. Partial sum of order: 20/50 (left/right).

- [3] B.F.Logan, L.A.Shepp, *Optimal reconstruction of a function from its projections*, Duke Mathematical Journal, Vol 42, No 4, 1975.
- [4] I.G.Kazantsev, *Tomographic reconstruction from arbitrary directions using ridge functions*, Inverse Problems, No 14, pg 635-645, 1998.
- [5] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Fluorescence Tomography: reconstruction by iterative methods*, International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), France/Paris, 2008, 760-763.
- [6] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion*, Trans.Med.Imaging, Submitted March/2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [7] E.X.Miqueles,A.R.De Pierro, *On the Inversion of the xfct Radon Transform*, SIAM Applied Math., Submitted March/2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [8] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Exact analytic reconstruction in x-ray fluorescence CT and approximate versions*, Phys.Med.Biol., Submitted March/2009, (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [9] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.

Apêndice G

Artigo/Implementações

Os algoritmos expostos neste tese foram implementados em linguagem de programação C e dispostos em formato de biblioteca livre. Foi batizada de `raft`, acrônimo para *reconstruction algorithms for tomography*. Trata-se de um projeto em constante expansão e com o objetivo de fornecer ferramentas básicas para aqueles envolvidos com reconstrução de imagens na área de tomografia. Neste apêndice vamos ilustrar brevemente seu conteúdo e algumas aplicações. O software foi submetido ao jornal *Computer Physics Communications* e está apresentado a seguir.

A biblioteca em si é um aglomerado de códigos, ou seja, funções que desempenham uma determinada tarefa. Por exemplo, a mais trivial das tarefas desempenhadas por `raft` é o cálculo do sinograma (a transformada de Radon) nas modalidades `pet`, `ert`, `spect` e `xfct`. Tal como outras bibliotecas já consolidadas em computação científica, uma série de parâmetros é passada como entrada e um retorno é fornecido. Depende de duas bibliotecas já estabelecidas, a `GSL` (GNU Scientific Library) para manipulação de vetores e matrizes e `Confuse` para *parse* de arquivos.

Para esta tese, foram desenvolvidos programas com finalidades específicas, segundo a sintaxe de `raft`. O fluxograma apresentado na Figura G.1 ilustra o desenvolvimento de aplicações computacionais. Primeiro, `{GSL, Confuse}` dão suporte aos códigos em C de `raft`. Segundo, com a sintaxe de `raft` é possível desenvolver uma aplicação particular em um código `main.c` (por exemplo a retroprojeção filtrada). Terceiro, com auxílio de `gengetopt` (parse na linha comando) uma executável `fun` é gerado a partir de `main.c`, que age segundo a sintaxe de `gengetopt` com parâmetros de entrada e saída. Variando a aplicação contida em `main.c`

(sinograma, retroprojeção, inversas analíticas, etc), uma coleção de funções `fun` é gerada e determina um pacote também livre e distribuído com `raft`, denominado `raft-fun`.

Usuários que se sintam encorajados a não usar os programas distribuídos em `raft-fun` podem escrever seus próprios códigos `main.c`, sem ajuda obrigatória de `gengetopt`, seguindo a sintaxe de `raft`. A idéia de `raft-fun` é apenas fornecer ao usuário uma cortesia, com programas simples e suficientemente básicos, úteis para tarefas mais sofisticadas.

Download & Documentação

`raft` é até então, um trabalho em desenvolvimento. Ainda faltam vários algoritmos a serem implementados, e como se sabe, isto nos dias atuais requer um grande esforço dado o crescente número de publicações com métodos e algoritmos. Mesmo com os métodos clássicos, `raft` ainda está longe de estar “pronta”.

A documentação e o download estão disponíveis no endereço www.labip.ime.unica

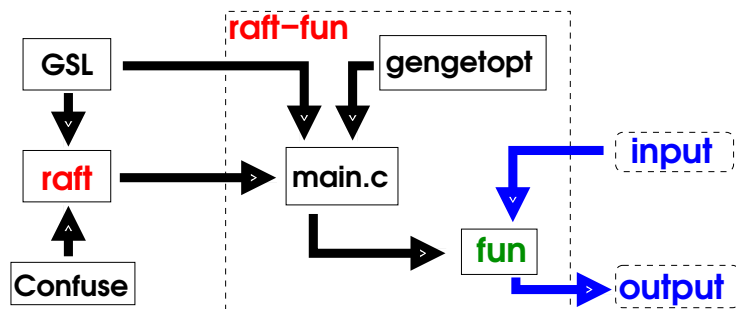


Figura G.1: Fluxograma para `raft`.

C-library **raft**: reconstruction algorithms for tomography. Applications to X-ray Fluorescence Tomography[☆]

Eduardo X. Miqueles^{a,1,*}, Alvaro R. De Pierro^{b,2}

^a*Department of Applied Mathematics, University of Campinas, SP, Brazil*

^b*Department of Applied Mathematics, University of Campinas, SP, Brazil*

Abstract

There are many reconstruction algorithms for tomography, **raft** for short, and some of them are considered “classic” by researchers. The so-called **raft** library, provide a set of useful and basic tools, usually needed in many inverse problems that are related to medical imaging. The subroutines in **raft** are free software and written in C language; portable to any system with a working C compiler. This paper presents source codes written according to **raft** routines, applied to a new imaging modality called X-ray fluorescence tomography.

Keywords: Fluorescence, Tomography, C-library, XFCT, Reconstruction

1. Introduction

Researchers who face physical/mathematical challenges, usually implement their own methods to find the exact or approximate solution. Although this approach has the advantage of learning, sometimes it is necessary to verify a numerical result quickly, making the implementation a hard task. Keeping that in mind, we have written a free C-library called **raft** that covers the imaging modalities: CT (Computed Tomography), PET (Positron Emission Tomography), SPECT (Single-photon Emission Computed Tomography) and XFCT (X-ray Fluorescence Computed Tomography).

Until the present date, we have implemented the standard mathematical algorithms commonly known in medical inverse problem like the filtered backprojection, the expectation maximization algorithm, the computation of attenuated Radon transforms, the algebraic reconstruction techniques, among others. Our

[☆]Download source codes at www.labip.ime.unicamp.br/raft/repository/

*Corresponding author.

Email addresses: miqueles@ime.unicamp.br (Eduardo X. Miqueles), alvaro@ime.unicamp.br (Alvaro R. De Pierro)

¹Supported by FAPESP grant No 06/00356-6.

²Supported by CNPq grant No 304820/2006-7.

aim is that, in a near future the library expand itself, including other imaging modalities, as well as more sophisticated mathematical procedures for reconstruction.

The purpose of this paper is to demonstrate some simulations on XFCT, using the implemented mathematical formulas within **raft**. Section 2 presents the mathematical formulation of XFCT considered in the library. Section 3 presents the applications of the library with simulated data. Appendix A presents supplementary materials, further reading on XFCT, as well as links for download and documentation of **raft**

2. XFCT: The Mathematical Model

X-Ray fluorescence computed tomography (XFCT) is a relatively new synchrotron based imaging modality that is like a combination of X-rays Computed Tomography (CT) and Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT), but more related to the latter, where correction for attenuation is essential. High intensity monochromatic synchrotron X-rays, with energy greater than the K-shell binding energy of the elements of interest, stimulate fluorescence emissions, isotropically distributed, which are detected by a detector placed with its face parallel to the direction of the incident beam [19]. Part of the emission is absorbed by the sample, so, correction for attenuation is essential to obtain qualitative better results. Mapping fluorescence emission density distributions could have many important biomedical applications, including iodine distributions in thyroid tissue [18], platinum distribution in clusters of cancer cells treated with cisplatin [17], trace element distribution in excised vascular plaques [7], among others.

2.1. Sinogram: Radon Transforms

A continuous mathematical model for XFCT is given by the Generalized Attenuated Radon Transform given by

$$d(t, \theta) = \mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \int_{x \cdot \xi_\theta = t} f(x) \omega(x, \theta) dx \quad (1)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} f(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp) \omega(t\xi_\theta + s\xi_\theta^\perp, \theta) ds \quad (2)$$

with $\xi_\theta = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\xi_\theta^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$. Operator $\mathcal{R}_\omega$ compute the integral of the function f , weighted by ω , on the line $\Omega(t, \theta) = \{x \in \mathbb{R}^2 : x \cdot \xi_\theta = t\}$. The classical Radon transform is retrieved with $\omega = 1$. For weight functions related to ERT (Exponential Radon transform) and SPECT, see [11, 10, 12]. Here, we focus on the XFCT Radon transform, which is obtained with the following weight function

$$\omega(x, \theta) = \omega_\lambda(x, \theta) \int_{\Gamma} \omega_\mu(x, \theta + \gamma), \quad \omega_g(x, \theta) \doteq e^{-\mathcal{D}g(x, \theta)} \quad (3)$$

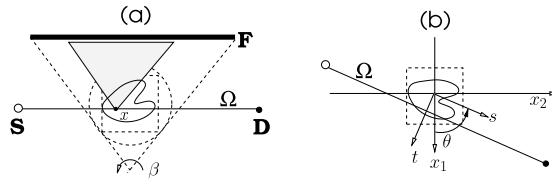


Figure 1: Geometry for XFCT experiments.

where $\mathcal{D}$ is called the *divergent beam transform* (DBT), defined by

$$\mathcal{D}g(x, \theta) = \int_0^\infty g(x + q\xi_\theta^\perp) dq \quad (4)$$

A *projection view* is the function $d_\theta = d(\cdot, \theta)$, for a fixed angle θ .

A XFCT experiment is shown in Figure 1.a, which is very similar to the scanning geometry of CT except that measurements are collected by two detectors, the conventional one and the fluorescence one, that is placed with its face parallel to the direction of the incident beam. The source emits X-Rays, along the line defined by $\xi^\perp$, that stimulates isotropic fluorescence emission at the given point x , detected by an arc of detectors (defined in the Figure 1.a) within the angle section $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$. Part of the photons corresponding to this emitted fluorescence are attenuated by the body, the same happens with the X-rays, but with a different attenuation coefficient (different energy levels).

Here, f denotes the mean number of photon emissions at position x . Function λ is the linear attenuation coefficient describing the absorption of the excitation beam of X-rays. The flux rate from the source to a point $x \in \tau$ inside the object is proportionally given by $\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$. At the energy level of the incident beam, the fluorescence emission of rays within the angle section $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ towards the parallel detector comes out with an initial flux rate proportional to $f(x)\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}$. Hence, the flux rate reaching the detector, for a given angle $\gamma \in \Gamma$, is proportionally given by $f(x)\exp\{-\mathcal{D}\lambda(x, \theta + \pi)\}\exp\{-\mathcal{D}\mu(x + \theta + \gamma)\}$ where μ is the linear attenuation coefficient that describes the absorption of the emission fluorescence ray. Finally, the total rate of fluorescence X-rays detected by the detector is obtained varying $\gamma \in \Gamma$ and x over the transmission ray, yielding the model in (1)

Nomenclature: Functions depending on variables (t, θ) are usually called a *sinogram* or *projection*, and functions depending on the position x are referred as *phantom*. Therefore, the generalized Radon transform $\mathcal{R}_\omega$ associate a set of phantoms $\{f, \lambda, \mu\}$ to a sinogram d by the rule defined in (1). It is worth noting that the weight function $\omega = \omega(x, \theta)$, for a fixed angle θ , it is also a phantom, as well as the divergent beam transform.

2.2. Ray sums

Assuming that the object being iluminated by x-rays lies within the square shown in Figure 1.a, contained in the unit disk, we have $|x_j| \leq \frac{\sqrt{2}}{2}$ for $j = 1, 2$, $|t| \leq 1$ and $\theta \in [0, 2\pi]$. We are looking for values of the function f on a grid of points $\{x_{1,i}\} \times \{x_{2,j}\}$ with $x_{1,j} = -a + j\Delta x$, $0 \leq j \leq s-1$, which is a matrix $\mathbf{F}$ representing the values of f on the grid. A *pixel* k may be associated to a point $(x_{1,i}, x_{2,j})$ through the index relation $k = \alpha i + \ell j$, $\alpha, \ell \in \mathbb{Z}$. In this paper (as in **raft**), we choose the standard form for α, ℓ which is $\alpha = 1$ and $\ell = s$; that is a columnwise vectorization of the matrix, represented by the operation $\text{vec}\{\cdot\}$ (see [28]).

We consider the case of $\omega = 1$ in (1). Let $\mathbf{f} = \text{vec}\{\mathbf{F}\} = (\mathbf{f}_k)$, with $\mathbf{f}_k = f(x_k)$ and $x_k = (x_{1,k}, x_{2,k})$, and also let the k th pixel be defined as the set $\mathcal{P}_k = \{x \in \mathbb{R}^2: \|x - x_k\|_\infty \leq \Delta x/2\}$. As in [27], defining the basis functions $\phi_k = \chi_{\mathcal{P}_k}$ (χ standing for the indicator function³), we can write f as a linear combination on the basis $\{\phi_k\}$ and verify that

$$f(x) = \sum_{k=0}^{P-1} \mathbf{f}_k \phi_k(x) \Leftrightarrow d(t_l, \theta_m) = \sum_{k=0}^{P-1} \mathbf{f}_k \mathcal{R} \phi_k(t_l, \theta_m) \quad (5)$$

with $P = s^2$ and (t_l, θ_m) a grid for $(t, \theta) \in [-1, 1] \times [0, 2\pi]$, $0 \leq l \leq N-1$ and $0 \leq m \leq M-1$. Figure 2.a presents a pixel associated to the sampling grid for f .

Denoting $\mathbf{D}$ as the matrix representation for the values of function d on the grid (t_l, θ_m) , and putting $\mathbf{d} = \text{vec}\{\mathbf{D}\} = (\mathbf{d}_n)$ with $n = l + Nm \in \{0, 1, 2, \dots, NM-1\}$, we have

$$\mathbf{d}_n = \sum_{k=0}^P \mathbf{f}_k \mathbf{a}_{nk}, \quad \mathbf{a}_{nk} = \mathcal{R} \phi_k(\Omega_n) \Leftrightarrow \mathbf{A} \mathbf{f} = \mathbf{d} \quad (6)$$

Each entry of the matrix $\mathbf{A}$ represents the length of the intersection between the n th ray and the k th pixel. Figure 2.a presents two rays, Ω_{n_1} and Ω_{n_2} , such that $\mathbf{a}_{n_1,k} = 0$ and $\mathbf{a}_{n_2,k} \neq 0$ respectively.

For the case of $\omega \neq 1$, the discrete analysis is quite similar. Indeed, we can write $f(x)\omega(x, \theta)$ (for a fixed angle θ) as the linear combination in (5) and use the property $\mathcal{R}_\omega f(t, \theta) = \mathcal{R}(f\omega(\cdot, \theta))(t, \theta)$ to find that

$$\mathbf{d}_n = \sum_{k=1}^P \mathbf{f}_k \omega(x_k, \theta_l) \mathcal{R} \phi_k(\Omega_n) \equiv \sum_{k=1}^P \mathbf{a}_{nk} \mathbf{w}_{nk} \mathbf{f}_k \Rightarrow \mathbf{d} = (\mathbf{W} \odot \mathbf{A}) \mathbf{f} \quad (7)$$

with $\mathbf{d}_n = d(t_l, \theta_m)$, $\mathbf{w}_{nk} = \omega(x_k, \theta_{l(n)})$, $l(n) = \text{rem}(n, N)$ (the remainder function) and $\odot$ the Hadamard product between matrices [28].

It is straightforward to see that, in the case of $\omega = 1$, we have $\mathbf{W}$ a matrix

³ $\chi_A(x) = 1$ if $x \in A$ and $\chi_A(x) = 0$ otherwise.

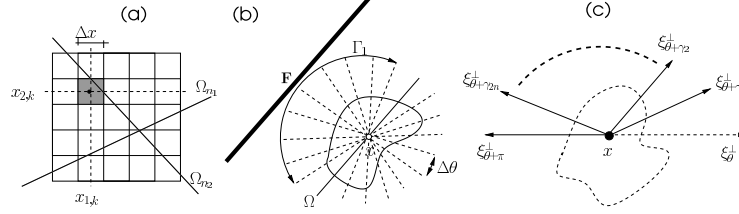


Figure 2: (a) Pixel x Grid comparison for phantom in **raft**. (b) Rays through a point defining the angle section Γ . (c) Rays emitted from point x .

filled with ones, so that (7) reduces to (6). Matrix $\mathbf{A}$ is usually called the *Radon matrix* and $\mathbf{A}_\omega \doteq \mathbf{A} \odot \mathbf{W}$ the *Attenuated Radon matrix*.

Nomenclature: A *ray* is represented by letter t and a *view* by letter θ . The geometry for a ray is shown in Figure 1.b. A *ray sum* is the matrix product in (7) or (6), that is $\mathbf{d}_n = \mathbf{a}(\omega)_n^T \mathbf{f}$, with $\mathbf{a}(\omega)_n$ the n th row of $\mathbf{A}_\omega$. The ray sum is indicated by the *data number* n , varying between 0 and $NM - 1$.

2.3. Weight Function and solid angle Γ

The weight function in XFCT is given by (3). For a fixed view θ and a fixed point x within the domain of λ and μ , the computation of ω_λ and ω_μ (defined in equation (3)) takes into account the rays starting at x with direction $\xi_{\theta+\pi}^\perp$ and $\xi_{\theta+\gamma}^\perp$, $\gamma \in \Gamma$. Ideally, Γ depends on the point x lying over the transmission ray determined by $\xi_\theta^\perp$. Nevertheless, we consider a simplified version, taking a symmetric and constant Γ for all points, as shown in Figure 1.a

In practice, the solid angle $\Gamma = [\gamma_1, \gamma_2]$ could be determined by the angle β (Figure 1.a) so that $\gamma_1 = \frac{\pi-\beta}{2}$ and $\gamma_2 = \frac{\pi+\beta}{2}$. The angle β depends on the distance between the fluorescence detector $\mathbf{F}$ and the sample. For synchrotron radiation, there is a minimum in the scattering noise as β tends to zero (closed solid angle), although there is a lower sensitivity to fluorescence. On the other hand, as β tends to π (open solid angle), there is a higher fluorescence sensitivity. Hence, in practice, the solid angle is not too large in such a way that there should be a balance between the increased scatter background and the sensitivity.

In order to simplify the discretization of the mathematical model, avoiding excessive CPU time, we use the transmission rays to build the solid angle of the fluorescence emission rays. That is, the fluorescence rays within the solid angle Γ are obtained by using the transmission rays passing through each point. This implies that the fan of fluorescence rays has the same sampling interval as the views illuminating the object, which is $\Delta\theta = 2\pi/M$. This is illustrated in Figure 2.b. Simulations can be more accurate using different mesh dimensions for transmission and emission, but this also brings another parameter to the discrete model together with unnecessary complications.

In our implementation we use the transmission rays going through each point, to define Γ , as shown in Figure 2.b. This avoids using different meshes

(discretizations) for transmission and for fluorescence emission. The aperture depends on how many rays we pick for Γ . As a convention, our aperture is described by $\beta = \pi - 2n\Delta\theta$, where n indicates the offset number from the current transmission ray. Therefore, Γ depends on n and, the smaller is n , the wider is the solid angle Γ . For example, in degrees, our aperture is defined by $(1 - \frac{4n}{M})180$, which gives for $M = 128$ and $n \in \{5, 15, 28\}$ the approximate angles $\{151^\circ, 95^\circ, 22^\circ\}$ respectively.

Figure 2.b shows an illustrative example, with 20 transmission rays (in $[0, 2\pi]$) through a given point. For a particular ray Ω (belonging to a full projection set), the solid angle is determined by the remaining 9 rays. We denote this solid angle by Γ_1 since the first ray (in a counterclockwise direction) has an offset of $\Delta\theta$ from ray Ω . It is worth noting that the same applies for a non-uniform mesh view $\{\theta_0, \dots, \theta_{M-1}\}$.

In general, let the fluorescence angle section be $\Gamma_n = [n\Delta\theta, \pi - n\Delta\theta]$ with n a positive integer representing the aperture of Γ_n (that is, the offset index from the current transmission ray). Setting $n = 0$ means that all rays starting from the point x are considered, including the current transmission ray. It is easy to see that $0 \leq n \leq \frac{M}{4}$. For $n = \frac{M}{4}$, the weight (3) reduces to $\omega_\lambda(x, \theta + \pi)\omega_\mu(x, \theta + \gamma^*)$, with $\gamma^* = \frac{\pi}{2}$ for a uniform mesh view $\{\theta_i\}$. For non-uniform views, γ^* is the mid-point angle of Γ .

2.4. Backprojection

The attenuated Backprojection matrix is defined by the transpose of the attenuated Radon matrix $\mathbf{A}_\omega$. In a continuous sense, it can be shown [16] that $\mathbf{A}_\omega^T$ is described the the following operator

$$\mathcal{R}_\omega^* d(x) = \int_0^{2\pi} \omega(x, \theta) d(x \cdot \xi_\theta, \theta) d\theta \quad (8)$$

Since the rows of $\mathbf{A}_\omega$ are given by $\mathbf{a}(\omega)_n^T$ (see equation (6)), we have $\mathbf{A}_\omega^T = [\mathbf{a}(\omega)_1 \dots \mathbf{a}(\omega)_{NM}]$. Hence, it is straightforward to see that $\mathbf{a}_n = \mathbf{A}_\omega \mathbf{e}_n$, with $\mathbf{e}_n$ the n th canonical vector, i.e. $\mathbf{e}_{n,j} = \delta_{nj}$ (the Kronecker' delta symbol). This means that, with an efficient implementation of $\mathbf{A}_\omega$ (the Radon transform), the vectors $\mathbf{a}_n$ can be easily retrieved.

It can be shown [16] that $\mathcal{R}_\omega^*$ is the convolution of f with an appropriate smooth kernel, making the backprojection a smoothing operator, and the first order approximation to a solution.

2.5. Analytic Inversion Formulas

As it is widely known in inverse problems, the first tomographic inversion formula was discovered by Radon. The implementation of his formula is given by the filtered backprojection algorithm (FBP). That is, if $\mathcal{R}f(t, \theta) = d(t, \theta)$, then f can be recovered by

$$f(x) = \mathcal{R}^*(d \star g), \quad g = g(t), \quad \mathcal{F}_1 g(\nu) = |\nu| \ell(\nu) \quad (9)$$

with $\star$ being the convolution symbol in the ray variable t and $\mathcal{F}_1$ the one-dimensional Fourier transform. Function g is a filter and ℓ a window function (low-pass filter). Among possible choices for ℓ , we have ramp, ramlak and cosine; see [26] for more filters.

On the other hand, it can be show [25] that f is given by the filter of the backprojections (FOB), that is,

$$f(x) = (g \star \star \mathcal{B}d)(x), \quad g = g(x), \quad \mathcal{F}_2 g(\rho) = \|\rho\|_2 \ell(\rho) \quad (10)$$

with $\star \star$ denoting the two-dimensional convolution and $\mathcal{F}_2$ the two-dimensional Fourier transform. As in the one dimensional case, ℓ is a 2D low-pass filter window, e.g. ramp, ramlak or cosine.

The inversion formula for XFCT was recently found [10]. It has the same pattern as the one found by Novikov for SPECT [8]. The formula reads

$$f(x) = \mathcal{N}(\omega, p)d(x) \doteq \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \partial_t \omega^{-1}(x, \theta) \mathbf{M}\{p, d\}(x \cdot \xi_\theta, \theta) \quad (11)$$

with $p(t, \theta) = \mathcal{R}\lambda(t, \theta) + \frac{\chi(-1, 1)(t)}{2\sqrt{1-t^2}} \mathcal{R}\mathcal{L}_\theta(t, \theta)$ and $\mathcal{L}$ defined by $\mathcal{L}(x, \theta) = -\ln \frac{1}{\beta} \omega_\mu^\dagger(x, \theta) \omega_\mu^\dagger(x, \theta + \pi)$ where $\omega_\mu^\dagger(x, \theta) = \int_\Gamma \omega_\mu(x, \theta + \gamma) d\gamma$. The operation $\mathbf{M}$, acting between sinograms p and d , is given by

$$\mathbf{M}\{p, d\} = e^{-\frac{\beta}{2}} \left\{ h_c(p) \mathcal{H} \left(h_c(p) e^{\frac{\beta}{2}} d \right) + h_s(p) \mathcal{H} \left(h_s(p) e^{\frac{\beta}{2}} d \right) \right\} \quad (12)$$

with $h_c(r) = \cos(\frac{1}{2} \mathcal{H}r)$ and $h_s(r) = \sin(\frac{1}{2} \mathcal{H}r)$. Also, $\mathcal{L}_\theta = \mathcal{L}(\cdot, \theta)$, $\beta = \gamma_2 - \gamma_1$ (see Figure 1.a) and $\mathcal{H}$ the Hilbert transform acting on t .

Novikov's formula is retrieved with $\mu = 0$ in (11) and Radon's inversion with $\lambda = \mu = 0$, see [6, 12, 13].

2.6. Iterative Methods

We have experienced three types of iterative methods to compute the approximate solution of $\mathcal{R}_\omega f = d$ in XFCT. Since the discretization of the integrals in (1) are reduced to the linear system (6), the first attempt for this type of methods is ART (acronym for algebraic reconstruction technique), which is a classic algorithm belonging to a wide class of projection methods onto convex sets. Further informations on ART can be found on [14], and for an application on XFCT, see [19]. The equations for ART are

$$\mathbf{f}_k^{(i+1)} = \mathbf{f}_k^{(i)} + \alpha \frac{\mathbf{d}_n - (\mathbf{A}_\omega \mathbf{f}^{(i)})_n}{\|(\mathbf{a}_\omega)_n\|_{L^2}^2} (\mathbf{a}_\omega)_n \quad (13)$$

with $\epsilon \leq \alpha_k \leq 2 - \epsilon$, $\epsilon > 0$, α being a relaxation parameter.

The second classic iterative approach for the solution is given the EM algorithm (acronym for expectation maximization), which takes into account the

statistical nature of the data. It reads

$$\mathbf{f}_k^{(i+1)} = \mathbf{f}_k^{(i)} \frac{(\mathbf{A}_\omega \mathbf{d}^{(i)})_k}{(\mathbf{A}_\omega \mathbf{e})_k}, \quad \mathbf{d}_n^{(i)} = \frac{\mathbf{d}_n}{(\mathbf{A}_\omega \mathbf{f}^{(i)})_n} \quad (14)$$

with $\mathbf{e} = (1) \in \mathbb{R}^{NM}$. The convergence properties of the above sequence can be found in [27, 15]. For instance, if $\mathbf{f}_k^{(0)} > 0$ for all k , the sequence converges to a solution $\mathbf{f}^*$, see [16].

The third approach, using iterative ideas, is based on Kunyansky's fixed point algorithm [5]. A scope of the method in XFCT can be found at [9, 11], where a relaxation parameter is introduced, increasing the convergent rate of the iterative sequence. The iterations are given by

$$\mathbf{f}_k^{(i+1)} = \mathbf{f}_k^{(i)} + \alpha_i \mathbf{e}_k^{(i)}, \quad \mathbf{A}(\mathbf{c}^{(i)}) = \mathbf{d} - \mathbf{A}_\omega \mathbf{f}^{(i)}, \quad \mathbf{c}_k = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=0}^{M-1} \omega(x_k, \theta_j) \Delta \theta_j \quad (15)$$

Since the Radon matrix $\mathbf{A}$ has a well known inversion formula, given by the filtered back-projection algorithm, the direction vector $\mathbf{e}^{(i)}$ is easily computed. Also, with some constraints on the weight function ω , the sequence $\mathbf{f}^{(i)}$ converges to a fixed point $\mathbf{f}^*$, solution of $\mathbf{A}_\omega \mathbf{f} = \mathbf{d}$. The case $\alpha_i = 1$ was considered by Kunyansky in emission tomography [5]. In our case, sequece α_i is constructed following similar ideas as the one suggested by Guy, Salès, Brami-Dépaux and Joly-cabaret, see [20, 21].

3. Using `raft-fun/`

Together with C-library `raft`, it is distributed a directory called `raft-fun/` containing C codes written accordingly to the library syntax. Compiling that codes give us a set of programs that can be executed on the command line. This allows the easy linkage of `raft-fun/` programs with other known command lines. Directory `raft-fun/` contains a `README` file that helps the compilation.

It is worth noting that `raft-fun/` programs are not optimized functions since were written for a specific purpose, an example of this sentence is given in Section 4. Nevertheless, `raft-fun/` programs can be used for a first contact with the library. More optimized functions can be written in C language using `raft` functions, although this demands an additional effort which includes: learning the documentation for `raft`, writing a C code, properly linkage of libraries for compilation and finally execution.

We remark that not all the functions implemented in `raft` are described within `raft-fun/`, although future versions of the latter may include a specific example program for each `raft` function.

3.1. Functions

So far, the functions distributed within `raft-fun/` are listed below.

	<code>raft-art-spect</code>	<code>raft-back-spect</code>	<code>raft-em-xfct</code>	<code>raft-inv-fob</code>
<code>raft-ridge-ct</code>	<code>raft-art-xfct</code>	<code>raft-back-xfct</code>	<code>raft-fixp-spect</code>	<code>raft-inv-spect</code>
<code>raft-phamt</code>	<code>raft-back-ct</code>	<code>raft-dbt</code>	<code>raft-fixp-xfct</code>	<code>raft-inv-xfct</code>
<code>raft-art-ct</code>	<code>raft-back-ert</code>	<code>raft-em-pet</code>	<code>raft-inv-ert</code>	<code>raft-inv-xfct90</code>
<code>raft-art-pet</code>	<code>raft-back-pet</code>	<code>raft-em-spect</code>	<code>raft-inv-fbp</code>	<code>raft-rsum-xfct</code>
<code>raft-view-ct</code>	<code>raft-sino-ert</code>	<code>raft-view-pet</code>	<code>raft-weight-xfct</code>	<code>raft-weight-spect</code>
<code>raft-sino-pet</code>	<code>raft-view-spect</code>	<code>raft-sino-spect</code>	<code>raft-view-xfct</code>	<code>raft-weight-pet</code>
<code>raft-sino-ct</code>	<code>raft-rsum-ct</code>	<code>raft-rsum-pet</code>	<code>raft-rsum-spect</code>	<code>raft-sino-xfct</code>

To see the usage of each one, type `raft-name-of-function -h`, on the command line, for a brief help guide. This paper deals mainly with programs having the suffix `xfct`. For completeness, the program functions are detailed in Table 1, where `*` is replaced by the scanning modalities `ct`, `pet`, `spect` or `xfct`.

<code>raft-sino-*</code>	Sinogram	<code>raft-rsum-*</code>	Ray sum
<code>raft-fixp-*</code>	Fixed point algorithm (see [9])	<code>raft-view-*</code>	Projection view
<code>raft-art-*</code>	ART algorithm (see [14])	<code>raft-back-*</code>	Backprojection
<code>raft-inv-*</code>	Analytical inversion formulas	<code>raft-weight-*</code>	Weight computation
<code>raft-em-*</code>	EM algorithm (see [15])	<code>raft-dbt</code>	DBT computation
<code>raft-phamt</code>	Phantom creation		

Table 1: Program functions distributed in `raft-fun/`.

3.2. Input & Output: simple examples

The input of a typical `raft-*` program is given by a description file and the associated phantoms (or sinograms), plus additional parameters. `raft` description files (or configuration file) are presented in Appendix B.

For example, let `f.dat` be defined by a 64x64 phantom with a 32x32 Sylvester matrix centered at position (32,32). The command for generating `f.dat`, using Octave syntax [24] is given below,

```
f=zeros(64); f(16:47,16:47)=max(0,sylvester_matrix(5)); save -ascii.dat f.dat f;
```

The command lines for computing the sinogram between $[0, \pi]$ using $N = 500$ rays and $M = 180$ views, and reconstructing using filtered backprojection are:

```
$ raft-sino-ct -m f.dat -s scan.cfg > sino.dat
$ raft-inv-fbp -p sino.dat -s scan.cfg > fbp.dat
```

(16)

All programs in Section 3.1 apply as the same way in (16) to the input data. The generated output matrix can be plotted using any software for image processing, see Appendix C for more informations.

As another example, let us compute the XFCT Radon transform (1) using $N = 500$ rays and $M = 360$ views, for 64x64 `raft` phantoms `{f, lambda, mu}.dat`. We choose the aperture index, see Section 2.3, as $n = 20$, which relates to an aperture angle $\beta = 140^\circ$. The command lines are presented below.

```
$ raft-phamt -t 10 -s 64 > f.dat
$ raft-phamt -t 11 -s 64 > mu.dat
$ raft-phamt -t 12 -s 64 > lambda.dat
$ raft-sino-xfct -t lambda.dat -f mu.dat -d f.dat -s scan.cfg -a 20 > sino.dat
```

4. Practical Examples

In this section we present more sophisticated examples with `raft-fun/`, using Bashes scripts, the program functions of Section 3.1, and Octave syntax for matrix operations. We assume some basic knowledge with scripts as with Octave, see [24] for more informations. The simulations were carried out with phantoms defined in Figure 3. Golosio's phantom is described by phantom 3.a, where the composition of the sample phases are described in [3, 4]. The phantom 3.b is described in [12] and is used to compare the results with Golosio's phantom.

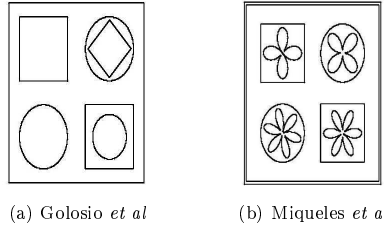


Figure 3: Physical shapes used for simulation, see [3, 4, 12] for further informations.

4.1. Computing the XFCT correction factor

Many researchers may want to compute the correction factor $\mathbf{c}$ described in equation (15). The most simple form to get matrix $\mathbf{c}$ is using program function `raft-weight-xfct`, that takes the corresponding phantoms $\{\lambda, \mu\}$, the description file `scan.cfg` and the corresponding view index j (varying from 0 to $M - 1$) as input, generating the phantom $\omega(\cdot, \theta_j)$ as in (3).

If the angles are uniform, with sampling rate $\Delta\theta = 2\pi/M$, it follows by (15) that $\mathbf{c} = \mathbf{C}_j$ where $\mathbf{C}_j$ are matrices (phantoms) given by the following recurrence relation

$$\mathbf{C}_{j,k} = \frac{j-1}{j} \mathbf{C}_{j,k} + \frac{1}{j} \omega(x_k, \theta_{j-1}), \quad k = 1, \dots, P = s^2. \quad (17)$$

with $\mathbf{C}_0 = 0 \in \mathbb{R}^{s \times s}$ and $j = 1, \dots, N$.

For given 64x64 phantoms `{lambda,mu}.dat` and a description file `scan.cfg` with $M = 80$ (views) and $N = 64$ (rays) (see Appendix B), Script 1 runs with the following command line

$$\text{\$ average 80 lambda.dat mu.dat scan.cfg} \quad (18)$$

generating a sequence of phantoms `{C1, ..., C80}.dat` in the current path. In this example, $\mathbf{c}$ is given by file `C80.dat`. Figure 4 shows some elements of the sequence $\mathbf{C}_j$. As we can clearly see from the figures, the first phantom takes into account only the emission at $\theta_0 = 0$ and the 'triangle' for fluorescence

Script 1 average: Computation of the average factor $\mathbf{c}$ in Eq.(15).

```

1  #!/bin/bash
2  #
3  # $1: Mapping lambda.dat
4  # $2: Mapping mu.dat
5  # $3: Description file scan.cfg
6
7  M=$(grep "views" $3 | awk '{print $3}');
8
9  for ((j=0; j < $M; j++)); do
10     raft-weight-xfct -t $1 -f $2 -s $3 -v $j > Weight${j}.dat;
11  done
12  \octave -q --eval "C=0; \
13     for j=1:$M,
14         str=cat(2,'Weight',num2str(j-1),'.dat'); \
15         W=load(str); C=((j-1)/j)*C+W/j; \
16         str=cat(2,'C',num2str(j),'.dat'); \
17         save('-ascii',str,'C'); \
18     end";
19  \rm Weight*.dat;
20  \echo "XFCT correction: done!";

```

emission. As the angle θ increases and illuminates the whole phantom, the average emission gets higher and the compensation factor $\mathbf{c}$ tends to be more uniform, preserving the contours of $\{\lambda, \mu\}$ at a certain degree.

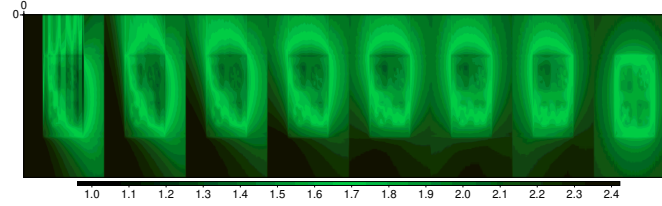


Figure 4: Sequence of phantoms $\mathbf{C}_j$ in Eq.(17) for XFCT correction, using index aperture $n = 5$. The last phantom on the bottom row is $\mathbf{C}_{80} = \mathbf{c}$, with $\mathbf{c}$ in Eq.(15).

By default, weight functions in Script 1 were computed using index aperture $n = 5$ (see Section 2.3). There is a command flag `-apert` that allow the user to change the index, using function `raft_scan_set_xfctAperture(...)` from `raft`. Therefore, adding “-a 18” to command line of program `raft-xfct-weight` of Script 1, (18) yields the sequence of Figure 5.

It is interesting to note the influence of the solid angle Γ , represented by the index n , on Figures 4 and 5. The greater n (between 0 and $\frac{M}{4}$), the more closed is the solid angle and hence, the lower is the average emission. In this example, with $M = 80$, $n = 5$ stands for an aperture of $\beta = 135^\circ$ and $n = 18$ stands for $\beta = 18^\circ$ (see Figure 1.a).

4.2. Hogan’s approach for XFCT

As first noted by Chang [1], the generalized Radon transform (1) can be approximated by the inverse Radon transform of the attenuated data, scaled by

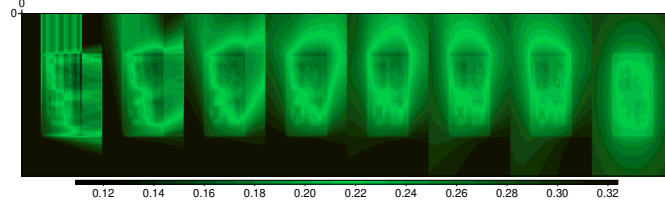


Figure 5: Sequence of phantoms C_j in Eq.(17) for XFCT correction, using index aperture $n = 18$. The last phantom on the bottom row is $C_{80} = \mathbf{c}$, with $\mathbf{c}$ in Eq.(15).

the average weight at each pixel, which is the phantom $\mathbf{c}$ in equation (15), this was noticed by Hogan *et al* [2]. Their approximation can be written by

$$\mathbf{f}_H = \text{FBP}(\mathbf{d})/\mathbf{c} \quad (19)$$

So, for the computation of Hogan's approximation, all we need is the script file `average`, defined in Script 1, to obtain $\mathbf{c}$. To compute the FBP algorithm, we use program function `raft-inv-fbp` included in `raft-fun/`. The command lines to get the phantom matrix $\mathbf{f}_H$ are give below

```
$ average 80 lambda.dat mu.dat scan.cfg
$ raft-inv-fbp -p proj.dat -s scan.cfg > fbp.dat
$ octave -q --eval "load C80.dat; load fbp.dat; H=fbp./C80;
save -ascii H.dat H;"
```

(20)

Where `proj.dat` is the XFCT sinogram for phantoms $\{f, \lambda, \mu\}$ and `H.dat` the output file for the approximation (19).

As noticed in [9, 11], it is important to note that Hogan's approach in XFCT, is the first iterate of the fixed point sequence $(\mathbf{f}^{(i)})$ in equation (15). In fact, there is a program function within `raft-fun/`, called `raft-fixp-xfct`, that compute this sequence for a given number of iterations. Hence, to obtain the same result, the following command line can be used

```
$ raft-fixp-xfct -p proj.dat -t lambda.dat
-f mu.dat -s scan.cfg -i 1 > H.dat
```

(21)

Command line (21) presents significant savings with respect to (20), although the latter allow us to see the correction factor $\mathbf{c}$.

4.3. Divergent beam, X-ray transforms $\mathcal{L}$ Views

The divergent beam transform of a phantom g , defined in (4), satisfies the property $\mathcal{D}g(x, \theta) + \mathcal{D}g(x, \theta + \pi) = \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta)$ for all points x and angles θ . The operator $\mathcal{L}$ defined by $\mathcal{L}g(x, \theta) = \mathcal{R}g(x \cdot \xi_\theta, \theta)$ is called the X-ray transform of g .

Let f be a phantom described by the file `f.dat`. The X-ray transform for a given angle θ_j can be computed with the help of `xrayt`, defined in Script 2,

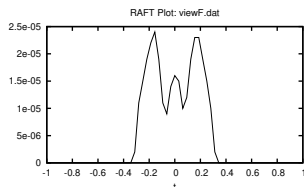


Figure 6: View function $\mathcal{R}f(\cdot, \theta_{45})$ generated with program function `raft-view-ct` for function f .

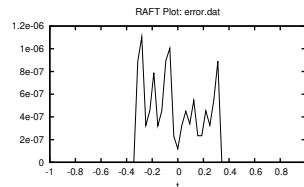


Figure 7: Error function $e(\cdot, \theta_{45}) = \mathcal{R}\mathcal{L}_{\theta_{45}}g(\cdot, \theta_{45}) - \mathcal{R}g(\cdot, \theta_{45})\mathcal{R}o(\cdot, \theta_{45})$ generated with command lines (23).

using the following command line

$$\text{\$ xrayt j f.dat scan.cfg L.dat} \quad (22)$$

Furthermore, it can be easily shown that operator $\mathcal{L}$ relates to $\mathcal{R}g$ by the formula $\mathcal{R}\mathcal{L}_{\theta}g(t, \theta) = \mathcal{R}g(t, \theta)\mathcal{R}o(t, \theta)$ where $o = \chi_S$ is the indicator function (with $S = [-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}]^2$ the square of Figure 1.a). To confirm this estimate, we use program function `raft-view-ct` and the following command lines (with index view 45)

```
\$ j=45;
\$ octave -q --eval "0=ones(s); save -ascii 0.dat 0;"
\$ raft-view-ct -s scan.cfg -p f.dat -v \$j > viewF.dat
\$ raft-view-ct -s scan.cfg -p 0.dat -v \$j > view0.dat
\$ raft-view-ct -s scan.cfg -p L.dat -v \$j > viewL.dat
\$ octave -q --eval "load viewF.dat; load view0.dat; load viewL.dat
    e(:,2) = abs(viewL(:,2)-view0(:,2).*viewF(:,2));
    e(:,1)=viewF(:,1); save -ascii error.dat e;"
\$ plotview \$j errorFile.ps
\$ plotview \$j viewF.dat viewFile.ps
```

(23)

The output file `errorFile.ps` for the sequence of commands in (23) is presented in Figure 7 and file `viewFile.ps` at Figure 6.

Divergent beam transforms play a central role in emission tomography since allow the calculation of the ray sum along a direction vector $\xi_{\theta}^{\perp}$ starting at a certain point x .

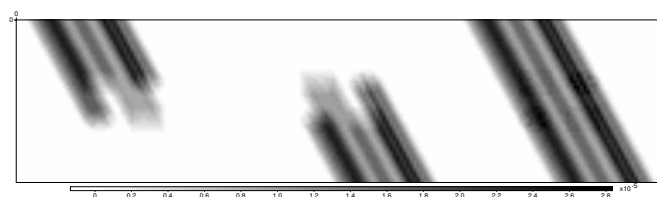


Figure 8: DBT versus X-ray transform of phantom Fig.3.b, computed with Script 2. From left to right, phantoms $\{\mathcal{D}f(\cdot, \theta_{45}), \mathcal{D}f(\cdot, \theta_{85}), \mathcal{L}f(\cdot, \theta_{45})\}$ respectively,

Script 2 xrayt: Computation of the X-ray transform

```

1  #!/bin/bash
2  # $1: View number
3  # $2: Phantom.dat
4  # $3: Description file scan.cfg
5  # $4: Output file
6
7  M=$(grep "views" $3 | awk '{print $3}');
8  V=$(echo "scale=0; $1*$M/2" | bc);
9
10 if [ $1 -lt 0 ]; then
11   echo "Wrong view index!"
12 else
13   raft-dbt -s $3 -p $2 -v $1 > dbtA.dat; \
14   raft-dbt -s $3 -p $2 -v $V > dbtS.dat; \
15   \octave -q --eval "load dbtA.dat; load dbtS.dat;
16                     L=dbtA+dbtS; save -ascii $4 L;";
17
18   rm dbtA.dat dbtS.dat;
19 fi;

```

4.4. Attenuated Radon matrices

As pointed out in Section 2.2, the Radon transform for a fixed data (t_l, θ_m) , with properly grids $\{t_l\} \times \{\theta_m\}$ for $[-1, 1] \times [0, 2\pi]$, is given by the matrix product in (7). Letting $i = l + Mm$ be the number of the data, which is called the *ray sum*, we already know that holds $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_i(\omega)^T \mathbf{f}$.

Although **raft** compute ray sums using a different strategy, based on slant stack formulas for the Radon transform (as well as attenuated transforms), an approximation of $\mathbf{a}_i(\omega)$ is also computed. Note that $\mathbf{a}_i(\omega)$ is the columnwise vectorization of a matrix $\tilde{\mathbf{a}}_i(\omega)$ that represents the values of a two-dimensional function $a_{i,\omega} = a_{i,\omega}(x)$ in the pixel grid $\{x_k\}$.

Program function **raft-rsum-xfct** compute the ray sum for given i and phantoms $\{f, \lambda, \mu\}$, returning the approximate phantom $a_{i,\omega}$ described by the matrix $\tilde{\mathbf{a}}_{i,\omega} \in \mathbb{R}^{s \times s}$. The typical command lines for this task are

```

$ raft-rsum-xfct -t lambda.dat -f mu.dat -d f.dat
                  -s scan.cfg -r 345 > aiw.dat
$ raft-rsum-ct -m f.dat -s scan.cfg -r 345 > ai.dat

```

(24)

with output (on standard error output) given respectively by

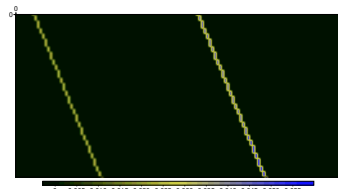
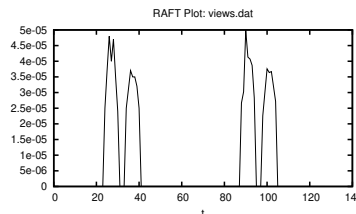
index 345	index 345
rsum 0.000034	rsum 0.000019
dprod 0.000031	dprod 0.000017
norm 0.390464	norm 0.194379

(25)

The attenuated case provides a vector $\mathbf{a}_{i,\omega}$ with greater norm than the non-attenuated case $\mathbf{a}_i$ (i.e., $\omega = 1$). As can be noticed from the above output, the dot product $\mathbf{a}_i(\omega)^T \mathbf{f}$ given by **dprod** is not equal to the ray sum **rsum** provided by **raft**, although quite close. The difference occurs due to linear interpolations on the implementation of the slant stack Radon transform.

Matrices $\tilde{\mathbf{a}}_i$ and $\tilde{\mathbf{a}}_{i,\omega}$ are represented by files **ai.dat** and **aiw.dat** respectively. Their plots are shown in Figure 9. In this case, with $i = 345$, $(N, M) = (64, 80)$ we have $(l, m) = (25, 4)$, and for uniform views, this represents $(t_l, \theta_m) = (-0.23810, 0.31416)$ (or 18°).

Let us analyse the behavior of the first N rows of the attenuated Radon matrix $\mathbf{A}_\omega$ acting on the vector $\mathbf{f}$, that is the vector $\mathbf{d}(1 : N) = \{\mathbf{a}_1(\omega)^T \mathbf{f}, \dots, \mathbf{a}_N(\omega)^T \mathbf{f}\}$.

Figure 9: Images $\tilde{\mathbf{a}}_{345}$ and $\tilde{\mathbf{a}}_{345,\omega}$.Figure 10: **raft** projection view at $\theta = 0$ (left) $\times \mathbf{d}(1 : N)$ with $\mathbf{d} = \mathbf{A}\mathbf{f}$ (right).

Vector $\mathbf{d}(1 : N)$ should be approximately equal to the vector obtained from program function **raft-view-xfct** for the view angle $\theta_0 = 0$ (i.e., $j = 0$). To compute $\mathbf{d}(1 : N)$ we use **atradm** defined in Script 3 and the sequence of command lines in (26).

```
$ atradm f.dat lambda.dat mu.dat scan.cfg A.dat
$ raft-view-xfct -s scan.cfg -t lambda.dat -f mu.dat -d f.dat -v 0 > raftView.dat
$ octave -q --eval "load A.dat; load f.dat; load raftView.dat;
    p=[raftView(:,2); A*vec(f')]; save -ascii views.dat p";
$ plotview views.dat comparison.eps
```

(26)

File **raftView.dat** contains the projection view computed within **raft** using the Slant stack version of the XFCT Radon transform. File **views.dat** concatenate data from **raftView.dat** with $\mathbf{A}*\text{vec}(\mathbf{f}')$, where the latter describes the vector $\mathbf{d}(1 : N)$. Figure 10 shows the comparison between the Slant stack version of **raft** with the matrix product approach.

Script 3 atradm: Attenuated Radon matrix, only for the first N lines.

```
1  #!/bin/bash
2  #
3  # $1: Mapping f.dat
4  # $2: Mapping lambda.dat
5  # $3: Mapping mu.dat
6  # $4: Description file scan.cfg
7  # $5: Output file: Attenuated Radon Matrix
8
9  N=$(grep "rays" $4 | awk '{print $3}');
10
11  \echo "Rays sums..."
12  for ((j=0; j < $N; j++)); do
13      raft-rnm-xfct -s $4 -d $1 -t $2 -f $3 -r $j \
14          > row$j.dat 2> /dev/null;
15  done;
16  \echo "... done!";
17  \echo "Stacking ...";
18  \octave -q --eval "A=[]; \
19      for j=0:${N-1}),
20          str=cats(2,'row',num2str(j),'.dat'); \
21          row=load(str); A=[A;vec(row')]; \
22      end;
23      save -ascii $5 A;";
24  \echo "... done!";
25  \rm row*.dat;
```

Computing the attenuated Radon matrix is usually a prohibitive task for most programs related to Radon-type transforms. This is also the case of **raft**,

although program function `raft-rsum-xfct` returns a prescribed row of matrix $\mathbf{A}_\omega$.

4.5. Iterative Methods

The iterations pointed out in Section 2.6 can be used to obtain approximate solutions of the XFCT inverse problem. As noticed in (21), the first iterate of the sequence (15) results in Chang's approximation. Letting $f^{(0)} = \epsilon$ (with $\epsilon = o(10^{-4})$), the sequence of iterates $F \equiv \{f^{(1)}, f^{(2)}, f^{(3)}, f^{(10)}, f^{(20)}\}$, obtained with the fixed point iterative scheme (15), also with the EM algorithm (14), are presented in Figures 11 and 12 respectively. The command lines to obtain the concatenated matrix F is given by `iterXfct` described in Script 4.

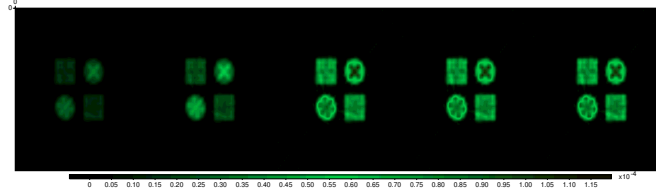


Figure 11: Fixed point algorithm (15): iterates $F \equiv \{f^{(1)}, f^{(2)}, f^{(3)}, f^{(10)}, f^{(20)}\}$

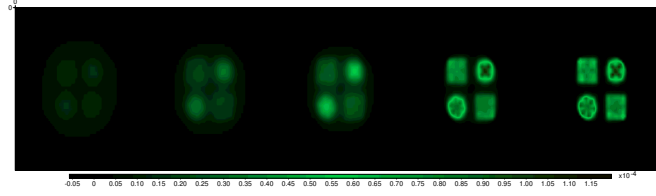


Figure 12: EM algorithm (14): iterates $F \equiv \{f^{(1)}, f^{(2)}, f^{(3)}, f^{(10)}, f^{(20)}\}$

Script 4 `iterXfct`: Iterative methods defined by Eqs. (14) and (15)

```

1  #!/bin/bash
2  #
3  # $1: Mapping lambda.dat
4  # $2: Mapping mu.dat
5  # $3: XFCT Projection.dat
6  # $4: Description file scan.cfg
7
8  \echo "" > fixp.dat
9  \echo "" > em.dat
10 for j in 1 2 3 10 20; do
11     raft-fixp-xfct -p $3 -t $1 -f $2 -s $4 -i $j >> fixp.dat
12     raft-em-xfct   -p $3 -t $1 -f $2 -s $4 -i $j >> em.dat
13 done
14
```

4.6. Computing an alternative XFCT weight function

Let us assume that is possible to detect the fluorescence emission on both sides of the sample. This is the same of assuming a mathematical model described by the generalized Radon transform with weight function given by

$$\omega_{\sharp}(x, \theta) = \omega_{\lambda}(x, \theta) \int_{\Gamma} d\gamma e^{-\mathcal{L}\mu(x, \theta + \gamma)} \quad (27)$$

with $\mathcal{L}$ the X-ray transform operator defined in Section 4.3. Equivalently, the exponential of the X-ray transform can be written as the pointwise product of the weight functions $\omega_{\mu}(x, \theta + \gamma)$ and $\omega_{\mu}(x, \theta + \gamma + \pi)$ (see Eq.(3) for the definition of ω_{μ} and ω_{λ}).

The computation of $\omega_{\sharp}$ is given by program `totalXfct` outlined in Script 5. Since ω_{λ} and ω_{μ} are the weights given by SPECT, the program function `raft-weight-spect` is used to compute each one. Assuming the same discrete pattern of Section 2.3, the index aperture plays an essential role in computing the integral over the angle section Γ . The following sequence of command lines compute the alternative XFCT weight $\omega_{\sharp}$, for $\theta = 0$ (view number 0), considering aperture index $n = 5$ and $n = 18$ respectively,

```
$ totalXfct lambda.dat mu.dat scan.cfg 0 5 weight5.dat
$ totalXfct lambda.dat mu.dat scan.cfg 0 18 weight18.dat
```

(28)

Using $\{\lambda, \mu\}$ from Figure 3.b, the resulting phantoms `weight5.dat` and `weight18.dat` are depicted in Figure 13. We remember that, the greater is n , the more closed is the solid angle Γ . This can be noticed in Figure 13.

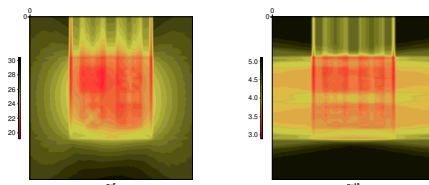


Figure 13: Alternative XFCT weight function $\omega_{\sharp}(\cdot, 0)$ for index apertures $n = 5$ and $n = 18$.

4.7. A complete example

We present a full example, using a $S \times S$ discretized version of Golosio's phantom (see Fig.3.a), with some useful `raft-fun/` program functions. The resulting images are presented in Figure 14, plotted with the help of Script 6 (See Appendix C). For this example, we set $S = 100$, $N = 360$ for the number of views, and $M = 500$ for the number of rays at each view. See File 1 at Appendix B for a description file containing (M, S, N) .

- (a) Functions $\{f, \mu, \lambda\}$ are represented by output files `{f,m,l}.dat` and are presented at Figures 14.a, 14.b and 14.c respectively.

Script 5 totalXfct: Alternative computation of XFCT weight function (27)

```

1  #!/bin/bash
2  #
3  # $1: Mapping lambda.dat
4  # $2: Mapping mu.dat
5  # $3: Description file scan.cfg
6  # $4: View index
7  # $5: Aperture index
8  # $6: Output File
9
10 M=$(grep "views" $3 | awk '{print $3}');
11 N=$(echo "scale=0; $R/2" | bc);
12 A=$5;
13
14 if [ $4 -lt 0 ]; then
15     echo "Wrong view index!"
16 else
17     raft-weight-spect -a $1 -s $3 -v $((($4+$N)) > Aweight.dat;
18     Vmin=$(($1+$N));
19     Vmax=$(($1+$N-$A));
20     for ((m=$Vmin; m <= $Vmax; m++)); do
21         raft-weight-spect -a $2 -s $3 -v $m > Bweight$m.dat;
22         raft-weight-spect -a $2 -s $3 -v $((($m+$N)) > Cweight$m.dat;
23     done;
24     \octave -q --eval "load Aweight.dat; W=0;\
25     for m=$Vmin:$Vmax, \
26         str=cat(2,'Bweight',num2str(m),'.dat'); \
27         strC=cat(2,'Cweight',num2str(m),'.dat'); \
28         W = W + load(strB) .* load(strC); \
29     end; \
30     W = W ./ Aweight; \
31     save -ascii $6 W";
32     rm Aweight.dat Bweight*.dat Cweight*.dat;
33 fi;
34
35
36

```

```

S=$(grep "size" scan.cfg | awk '{print $3}');
raft-phant -t 13 -s $S > f.dat;
raft-phant -t 14 -s $S > m.dat;
raft-phant -t 15 -s $S > l.dat;

```

- (b) The fluorescence sinograms are obtained with the following sequence. The noisy projections are given by the output file `nproj.dat`, while `proj.dat` denotes the unnoised projections. We choose $n = 5$ as the aperture index. The sinogram is shown in Figure 14.d.

```

raft-sino-xfct -t l.dat -f m.dat -d f.dat -s scan.cfg -a 5 > proj.dat;
octave -q --eval "p=load proj.dat; r=randp(p*1e3); r=r/1e3;
save -ascii nproj.dat r";

```

- (c) The attenuated backprojection (see Eq.(8)) applied to the noisy projections `nproj.dat` yields the output file `nback.dat`, with the following command line. The result is given in Figure 14.e.

```

raft-back-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -s scan.cfg > nback.dat;

```

- (d) The filtered backprojection algorithm at projections `{proj,nproj}.dat` yield output files `{fbp,nfbp}.dat` respectively. Also, the XFCT inversion algorithm of Section 2.5 for both projections yields the output files `{inv,ninv}.dat`. The results are presented in Figures 14.f, 14.g, 14.h, 14.i respectively.

```

raft-inv-fbp -p proj.dat -s scan.cfg > fbp.dat
raft-inv-fbp -p nproj.dat -s scan.cfg > nfbp.dat
raft-inv-xfct -p proj.dat -t l.dat -f m.dat -a 5 -s scan.cfg > inv.dat
raft-inv-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -a 5 -s scan.cfg > ninv.dat

```


- (e) Hogan's approach (see Eq.(19)) for unnoised and noised projections are computed with the following command lines, with `{hogan,nhogan}.dat` as output files. The resulting approximations are shown in Figures 14.j and 14.k respectively.

```
raft-fixp-xfct -p proj.dat -t l.dat -f m.dat -i 1 -s scan.cfg > hogan.dat
raft-fixp-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -i 1 -s scan.cfg > nhogan.dat
```

- (f) The first three iterations of the fixed point algorithm (15), for unnoised and noised projections are computed below. The resulting output files `{fixp,nfixp}.dat` are presented in Figures 14.l and 14.m respectively.

```
raft-fixp-xfct -p proj.dat -t l.dat -f m.dat -i 3 -s scan.cfg > fixp.dat
raft-fixp-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -i 3 -s scan.cfg > nfixp.dat
```

- (g) For the noisy projections, the EM algorithm (14) with starting point $f^{(0)} = 1$ yields the output files `{nem10,nem20}.dat` after 10 and 20 iterations respectively. The results are shown in Figures 14.n and 14.o respectively. Also, the ART algorithm (13) for the unnoised projections is presented in Figure 14.p.

```
raft-em-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -i 10 -s scan.cfg > nem10.dat
raft-em-xfct -p nproj.dat -t l.dat -f m.dat -i 20 -s scan.cfg > nem20.dat
raft-art-xfct -p proj.dat -t l.dat -f m.dat -i 2 -s scan.cfg > art.dat
```

- (i) Some weight functions are computed with the following command lines. The first, for the 10th view ($\approx 10^\circ$) and aperture index $n = 5$, the second for the same view and with aperture index $n = 80$. The last one, for the 160th view ($\approx 160^\circ$) with index $n = 90$. Note that $n \in \{80, 90\}$ indicates a small solid angle Γ (see Section 2.3). The results are presented in Figures 14.q, 14.r, 14.s respectively.

```
raft-weight-xfct -t l.dat -f m.dat -s scan.cfg -v 10 -a 5 > weight5.dat
raft-weight-xfct -t l.dat -f m.dat -s scan.cfg -v 10 -a 80 > weight80.dat
raft-weight-xfct -t l.dat -f m.dat -s scan.cfg -v 160 -a 90 > weight90.dat
```

- (j) The average $\mathbf{c}$ for Hogan's approximation (see Eq.(19)) is computed with Script 1. The resulting output file `c.dat` is shown in Figure 14.t.

```
average 360 l.dat m.dat scan.cfg
cp C359.dat c.dat
rm -f C*.dat W*.dat
```

Appendix A. Supplementary Materials

The `raft` library is licensed under the terms of the GNU General Public License and is available online at

www.labip.ime.unicamp.br/raft/repository/
www.labip.ime.unicamp.br/raft/documentation.html

Further informations of `raft` applied to fluorescence computed tomography can be found in [9, 11, 10, 12].

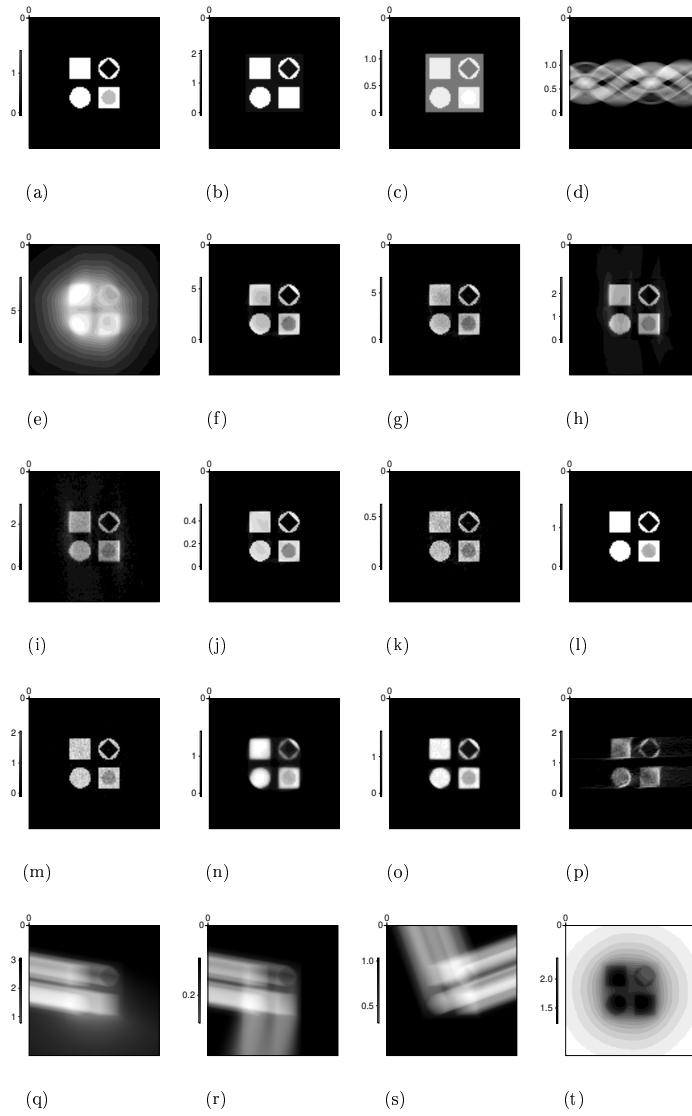


Figure 14: Complete example. See text for more details.

Appendix B. Description Files

A **raft** description file is shown in File 1. The **geometry** section describes the typical mesh dimensions, where

size = s	Dimension of the phantom matrices.
rays = N	Number of rays at each view
views = M	Number of views in the interval $[0, 2\pi]$

The number of pixels of the phantom is given by $P = s^2$. The macro **RAFT_XFCT** describe an x-ray fluorescence simulation. Other macros are available in **raft**⁴, e.g. **RAFT_CT** describe a standard computed tomography simulation with view angles varying over $[0, \pi]$.

The **mesh** section allows **raft** to use non-uniform grids for the rays and/or views. If not described in File 1, it is assumed by default that uniform meshes are being considered. Macro **RAFT_NREG** indicates the use of nonregular grids. If user's grid is given, under the location path, but **id** is empty, an error will be reported. Other macros for **id** are **RAFT_REG** and **RAFT_CHEB**, identifying a regular grid and the one given by the roots of the Chebyshev polynomial of the first kind and degree M (or N).

```

1  geometry{
2    size = s
3    rays = N
4    views = M
5    type = RAFT_XFCT
6  }
7
8  mesh{
9    views{
10     file = /path/for/my/views/views.dat
11     id = RAFT_NREG
12   }
13
14   rays{
15     file = /path/for/my/rays/rays.dat
16     id = RAFT_NREG
17   }
18 }
```

File 1: Description file **scan.cfg** used for simulations.

Appendix C. Plotting the Results

Since **raft** compute matrices, we can use any software capable to plot uniformly-sampled two-dimensional functions. We have used **ximage** and **psimage** as our main plotting programs, which are contained on the Seismic Unix project [22]. Also, to plot one-dimensional functions we have used Gnuplot [23].

Each directory within **raft-fun/codes/** contains a Makefile that can be used to compile the source code by just typing **make**. There is also an example associated to each application, that can be executed typing **make test**, yielding an output **out.dat**. For those who have the **ximage** program installed, type **make testX** to execute a test and to plot the corresponding images.

⁴See the documentation of **raft**.

As an example, the command lines for saving a postscript 256x256 image using `psimage` follows Script 6. All figures in this paper were generated using the Script 6. See [22] for more informations on commands `psimage` and `a2b`. One

Script 6 `imagesc`: Plotting results with `psimage`.

```

1  #!/bin/bash
2  #
3  # $1: Phantom size
4  # $2: Phantom file.dat
5  # $3: Output postscript
6
7  a2b n1=$1 < $2 > temp
8
9  psimage n1=$1 < temp dis=0.095 d2=0.095 \
10         brgb=0.1,0.1,0 grgb=0.8,0.8,0.3 wrgb=1,0.1,0.2 \
11         legend=1 lstyle=horibottom labels=30 d1num=$1 d2num=$1 \
12         height=10 width=10 > $3
13
14  rm -f temp

```

dimensional functions, e.g. the Radon transform for a particular view index, can be printed with Gnuplot using `plotview` presented in Script 7.

Script 7 `plotview`: Plotting 1D functions with `gnuplot`.

```

1  # $1: RAFT View data
2  # $2: Output file (postscript)
3
4  echo "set out '$2'" > print.gnuplot
5  echo "set size 1.0, 0.4" >> print.gnuplot
6  echo "set terminal postscript portrait enhanced mono lw 2" >> print.gnuplot
7  echo "set xrange []" >> print.gnuplot
8  echo "set yrange []" >> print.gnuplot
9  echo "set xlabel 't'" >> print.gnuplot
10 echo "set title 'RAFT Plot: $1'" >> print.gnuplot
11 echo "unset key" >> print.gnuplot
12 echo "plot VIEW with lines" >> print.gnuplot
13 sed "s/VIEW/\"$1\"/" print.gnuplot > temp;
14 mv temp print.gnuplot
15
16 gnuplot print.gnuplot
17 rm print.gnuplot

```

- [1] L.T.Chang, *A Method for Attenuation Correction in Radionuclide Computed Tomography*, IEEE Trans. Nucl. Science, NS-25, No.1, pp.638-648, 1978.
- [2] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.
- [3] B.Golosio, A.Simionovic, A.Somogyi, *Internal elemental microanalysis combining x-ray fluorescence, Compton and transmission tomography*, Journal of Applied Physics, Vol.94, No.1, 145-156, 2003.
- [4] A.Brunetti, B.Golosio, *Software for X-ray fluorescence and scattering tomographic reconstruction*, Computer Physics Communications, vol.141, pp.412-425, 2001.
- [5] L.A.Kunyansky, *Generalized and attenuated Radon transforms: restorative approach to the numerical inversion*, Inverse Problems, 8, pp. 809-819, 1992.

- [6] L.A.Kunyansky, *A new SPECT reconstruction algorithm based on the Novikov's explicit inversion formula*, Inverse Problems, 17, pp 293-306, 2001.
- [7] T. Cichocki, D. Heck, L. Jarczyk, E. Rokita, A. Strzalkowski and M. Sych *Elemental composition of the human atherosclerotic artery wall*, Histochemistry, 83, 87-92, 1985.
- [8] R.G.Novikov, *An inversion formula for the attenuated x-ray transform*, Ark. Mat., 40, pp 145-167, (Rapport de Recherche 00/05-3, Université de Nantes, Laboratoire de Mathématiques), 2002.
- [9] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Fluorescence Tomography: reconstruction by iterative methods*, ISBI 2008, 760-763.
- [10] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Exact analytic reconstruction in x-ray fluorescence CT and approximate versions*, Phys. Med. Biol., Vol.55, 1007-1024, 2010.
- [11] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion*, Submitted, IEEE Trans.Med.Imaging, 2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [12] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *On the Inversion of the XFCT Radon Transform*, Submitted, SIAM Journal Applied Mathematics, 2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [13] A.S.Fokas, *A unified approach to Boundary Value Problems*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, Philadelphia, SIAM, 2008.
- [14] G.T.Herman, *Image Reconstruction from Projections: The fundamentals of Computerized tomography*, Academic Press, New York, 1980.
- [15] A.R. De Pierro, *A modified expectation maximization algorithm for penalized likelihood estimation in emission tomography*, IEEE Trans. Med. Imag., vol 14, no 1, pp 132-137, 1995.
- [16] F.Natterer and F. Wubbeling, *Mathematical Methods in Image Reconstruction*, SIAM, 2001.
- [17] M. Cholewa, C. Dillon, P. Lay, D. Phillips, T. Talarico and B. Lai, *High resolution nuclear and x-ray microprobes and their applications in single cell analysis*, Nucl. Inst. Methods B, 181, 715-22, 2001.
- [18] T. Yuasa, M. Akiba, T. Takeda, M. Kazama, A. Hoshino, Y. Watanabe, K. Hyodo, F.A. Dilmanian, T. Akatsuka and Y. Itai, *Reconstruction method for fluorescent X-ray computed tomography by least-squares method using singular value decomposition* IEEE Trans. Nuclear Science, 44, 1, 54-62, 1997.

- [19] G.Friedmann Rust, J.Weigelt, *X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.45, No. 1, 1998.
- [20] Guy J., Mangeot B., Salès A., *Solutions for Fredholm equations through nonlinear iterative processes*, J.Phys.A, Math. Gen. 17, 1403-1413, 1984.
- [21] M.McClendon, H.Rabitz, *Variational methods for approximating solutions of $\nabla^2 u = f + ku$ and generalizations*, SIAM, Vol. 46, No.4, 1986.
- [22] Seismic Unix, <http://www.cwp.mines.edu/cwpcodes/>
- [23] GNUPlot, <http://www.gnuplot.info/>
- [24] Octave, www.gnu.org/software/octave
- [25] S.Deans, *The Radon Transform and Some of Its Applications* Deans, New York, John Wiley & Sons, 1983.
- [26] A.K.Jain, *Fundamentals of Digital Image Processing*, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1989.
- [27] Fessler J.A, *Statistical image reconstruction methods for transmission tomography*, in *Handbook of Medical Imaging*, J.M.Fitzpatrick, M.Sonka, Ed Bellingham, WA: SPIE Press, vol 2, pp1-70, 2000.
- [28] Horn R.A., Johnson C.R., *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, New York, 1985.

Referências Bibliográficas

- [1] A.R.Its, *The Riemann-Hilbert problem and Integrable systems*, Notices of the AMS, 1389-1400, Vol.50, No.11, 2003.
- [2] X.Ye, C.Li, W.Shen, *Convergence of the variants of the Chebyshev-Halley iteration family under the Hölder condition of the first derivative*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 203, 279-288, 2007.
- [3] E.G.Velasco, *The product rule for Frechet derivatives*, International Journal of Mathematical Education in Science and Technology, 17, 1, 79-83, 1986.
- [4] A.V.Bronnikov, *Numerical Solution of the identification problem for the Attenuated Radon Transform*, Inverse Problems, 15, 1315-1324, 1999.
- [5] A.V.Bronnikov, *Reconstruction of Attenuation Map Using Discrete Consistency Conditions*, IEEE Trans.Medical Imaging, Vol.19, No.5, 451-462, 2000.
- [6] A.V.Bronnikov, *Approximate Reconstruction of Attenuation Map in SPECT Imaging*, IEEE Trans.Nuclear Science, Vol.42, No.5, 1483-1488, 1995.
- [7] E.Kreyszig, *Introductory Functional Analysis with Applications*, John Wiley & Sons, 1978.
- [8] Gabor, *Algebraic reconstruction techniques can be made computationally efficient*, IEEE Trans. Medical Imaging, Vol.12, No.3, 1993.
- [9] D.Gourion, D.Noll, *The inverse problem of emission tomography*, Inverse Problems, 18, 1435-1460, 2002.

- [10] D.E.Cullen, M.H.Chen,J.H.Hubbel,S.T.Perkins,E.F.Plechaty, *Tables and graphs of photon-interaction cross sections from 10eV to 100GeV derived from the LLNL evaluated photon data library*, Lawrence Livermore National Laboratory Tech. Information 6, UCRL-50400, CA, 1989.
- [11] G. Bal, A.Tamasan, *Inverse source problems in transport equations*, Submitted, <http://www.math.toronto.edu/tamasan/>.
- [12] K.T.Smith, D.C.Solmon, S.L.Wagner, C.Hamaker, *Mathematical aspects of Divergent Beam Transform*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 75, No.5, 2055-2058, 1978.
- [13] N.Bleistein, *Mathematical Methods for Wave propagation*, Academic Press, 1984.
- [14] R.Courant, D.Hilbert, *Methods of Mathematical Physics, Vol.II, Partial Differential Equations*, Interscience Cambridge, 1962.
- [15] Y.Censor, P.P.B.Eggermont, D.Gordon, *Strong underrelaxation in Kaczmarz's method for inconsistent solutions*, Numer.Math., 41:83-92,1983.
- [16] H.Stark, *Image Recovery: Theory and Applications*, Academic Press, 1987.
- [17] A.Caponnetto, M.Bertero, *Tomography with a finite set of projections: singular value decomposition and resolution*, Inverse Problems, 13, 1191-1205, 1997.
- [18] W.R.Madych, *Summability and Approximate Reconstruction from Radon Transform Data*, Contemporary Mathematics, Vol.113, 1990.
- [19] R.Bracewell, *Fourier Transform and its Applications 3rd. Ed.*, New York: McGraw-Hill, 1999.
- [20] P.Toft, *The Radon Transform - Theory and Implementation*, Department of Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, June 1996.

- [21] I.G.Kazantsev, *Tomographic reconstruction from arbitrary directions using ridge functions*, Inverse Problems, No 14, pg 635-645, 1998.
- [22] B.F.Logan, L.A.Shepp, *Optimal reconstruction of a function from its projections*, Duke Mathematical Journal, Vol 42, No 4, 1975.
- [23] K.Lange, R.Carson, *EM reconstruction algorithms for emission and transmission tomography*, J. Comput. Assist. Tomography No 8, No 2, 1984.
- [24] F.Natterer, *The mathematics of computerized tomography*, John Wiley & Sons, 1986.
- [25] F.Natterer, F.Wubbeling, *Mathematical Methods in Image Reconstruction*, SIAM, Philadelphia, 2001.
- [26] J.A.Sullivan, J.Benac, *Alternating minimization algorithms for transmission tomography*, IEEE Trans. Med. Imag, Vol 26, pg 283-297, 2007.
- [27] Y. Xu, *A new approach for reconstruction of images from Radon Projections*, Adv. in Applied Math., 36, pg 388-420, 2006.
- [28] J.P.Hogan, R.A.Gonsalves, A.S.Krieger, *Fluorescent Computer tomography: a model for correction of X-Ray absorption*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol 38, No.6, 1991.
- [29] L.T.Chang, *A Method for Attenuation Correction in Radionuclide Computed Tomography*, IEEE Trans. Nucl. Science, NS-25, No.1, pp.638-648, 1978.
- [30] R. G. Novikov, *An inversion formula for the attenuated x-ray transform*, Ark. Mat., 40, pp 145-167, (Rapport de Recherche 00/05-3, Université de Nantes, Laboratoire de Mathématiques), 2002.
- [31] Natterer, *Inversion of the attenuated Radon Transform*, Inverse Problems, 17, pp 113-119, 2001.
- [32] L.A.Kunyansky, *Generalized and attenuated Radon transforms: restorative approach to the numerical inversion*, Inverse Problems, 8, pp. 809-819, 1992.

- [33] L.A.Kunyansky, *A new SPECT reconstruction algorithm based on the Novikov's explicit inversion formula*, Inverse Problems, 17, pp 293-306, 2001.
- [34] C.E.Metz, X. Pan, *A Unified Analysis of Exact Methods of Inverting the 2-D Exponential Radon Transform, with implications for Noise Control in SPECT*, IEEE Trans.Medical Imaging, Vol.14, No.4, 643-658, 1995.
- [35] Tretiak O., Metz C.E., *The exponential Radon Transform*, SIAM J. Appl. Math., vol 39, pp 341-354, 1980.
- [36] H.S.Rocha, G.R.Pereira, M.J.Anjos, P.Faria, G.Kellerman, C.A.Pérez, G.Tirao, I.Mazzaro, C.Giles, R.T.Lopes, *Diffraction enhanced imaging and x-ray fluorescence microtomography for analysing biological samples*, X-Ray Spectrometry, vol.36, pp.247-253, 2007.
- [37] R.Cesareo, S.Mascarenhas, *A new tomographic device based on the detection of fluorescent x-rays*, Nucl. Instrum. Methods A, 277, pp. 667-672, 1989.
- [38] A.Brunetti, B.Golosio, *Software for X-ray fluorescence and scattering tomographic reconstruction*, Computer Physics Communications, vol.141, pp.412-425, 2001.
- [39] G.Friedmann Rust, J.Weigelt, *X-ray fluorescent computer tomography with synchrotron radiation*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.45, No. 1, 1998.
- [40] S.Deans, *The Radon Transform and Some of Its Applications* Deans, New York, John Wiley & Sons, 1983.
- [41] C.E.Metz, X.Pan, *A unified analysis of exact methods of inverting the 2-D exponential Radon Transform, with implications for noise control in SPECT*, IEEE Trans. Med. Imaging, 14, pp 643-658.
- [42] A.Kak, M.Slaney, *Principles of computerized tomographic imaging*, SIAM press 1988.
- [43] G.T.Herman, *Image Reconstruction from Projections: The fundamentals of Computerized tomography*, Academic Press, New York, 1980.

- [44] Fessler J.A, *Statistical image reconstruction methods for transmission tomography*, in *Handbook of Medical Imaging*, J.M.Fitzpatrick, M.Sonka, Ed Bellingham, WA: SPIE Press, vol 2, pp1-70, 2000.
- [45] G.H.Golub, V.Pereyra, *The Differentiation of Pseudo-inverses and Non-linear Least Squares Problems Whose Variables Separate*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.10, No.2, 413-432, 1973.
- [46] Horn R.A., Johnson C.R., *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, New York, 1985.
- [47] A.R.De Pierro, F.Crepaldi, *Activity and Attenuation recovery from activity data only in Emission Computed Tomography*, Computational & Applied Mathematics, Vol.25, No.23, 205-227, 2006.
- [48] A.R. De Pierro, *A modified expectation maximization algorithm for penalized likelihood estimation in emission tomography*, IEEE Trans. Med. Imag., vol 14, no 1, pp 132-137, 1995.
- [49] P.La Rivière, P.Vargas, *Monotonic Penalized-likelihood image reconstruction for X-ray fluorescence computed tomography*, IEEE Trans. Med. Imaging, vol.25, No.9, 2006.
- [50] P.La Rivière, *Approximate analytic reconstruction in X-ray fluorescence computed tomography*, Phys.Med.Biol., 49, pp.2391-2406, 2004.
- [51] Scavo T.R, Thoo J.B., *On the Geometry of Halley's Method*, The American Mathematical Monthly, Vol. 102, No.5, pp.417-426, 1995.
- [52] Ye X., Li C., Shen W., *Convergence of the variants of the Chebyshev-Halley iteration family under the Holder condition of the first derivative*, Journal of Computational and Applied Mathematics, pp.279-288, 203, 2007.
- [53] Guy J., Mangeot B., Salès A., *Solutions for Fredholm equations through nonlinear iterative processes*, J.Phys.A, Math. Gen. 17, 1403-1413, 1984.
- [54] T.Inouye, K.Kose, A.Hasegawa, *Image reconstruction algorithm for single-photon emission computed tomography with uniform attenuation*, Phys.Med.Biology, Vo.34, No.3, 299-204, 1989.

- [55] *Variational Methods for Approximating Solutions of $\nabla^2 u(x) = f(x) + k(x)u(x)$ and Generalizations*, SIAM Journal Applied Mathematics, Vol.46, No.4, 525-544, 1986.
- [56] T.Yuasa, M.Akiba, T.Takeda, M.Kazama, A.Hoshino, Y.Watanabe, K.Hyodo, F.A.Dilmanian, T.Akatsuka, Y.Itai, *Reconstruction method for fluorescent X-ray computed tomography by Least-Squares method using singular value decomposition*, IEEE Trans. Nucl. Science, vol.44, No.1, 1997.
- [57] A.K.Jain, *Fundamentals of Digital Image Processing*, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1989.
- [58] Y.Wei, G.Wang, J.Hsieh, *Relation between the filtered backprojection algorithm and the backprojection algorithm in CT*, IEEE Signal Processing Letters, Vol.12, No.9, 2005.
- [59] T.Bortfeld, U.Oelfke, *Fast and exact 2D image reconstruction by means of Chebyshev decomposition and backprojection*, Phys.Med.Biol. 44, 1105-1120, 1999.
- [60] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *On the Inversion of the x-ray Radon Transform*, "Em revisão", SIAM Journal on Applied Mathematics, Submetido Março/2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [61] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion*, "Em revisão", IEEE Trans.Med.Imaging, Submetido Março/2009. (<http://www.labip.ime.unicamp.br/>)
- [62] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Exact analytic reconstruction in x-ray fluorescence CT and approximate versions*, Phys.Med.Biology, 55, 1007-1024, 2010.
- [63] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Fluorescence Tomography: reconstruction by iterative methods*, International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), France/Paris, 2008, 760-763.
- [64] E.X.Miqueles, A.R.De Pierro, *Analytical inversion for x-ray Fluorescence Computed Tomography*, International Conference on Applied Analysis and Scientific Computing (ICAASC), China/Shanghai, 2009.

- [65] A.S.Fokas, *Lax Pairs: a novel type of separability*, Inverse Problems, 25, Topical Review, 123007, 2009.
- [66] A.S.Fokas. *A Unified Transform Method for Solving Linear and certain Nonlinear PDE's*, Proc. R. Soc. London Ser. A 453, 1411-1443, 1997.
- [67] A.S.Fokas, R.G.Novikov, *Discrete analogues of $\bar{\partial}$ -equations and of Radon Transform*, C.R.Acad.Sci. Paris Ser. I Math., 313, 75, 1991.
- [68] A.S.Fokas, L.Y.Sung, *Generalized Fourier Transforms, their nonlinearization and the Imaging of the Brain*, Notices AMS 52, 1178-1192, 2005.
- [69] A.S.Fokas, A.Iserles, V.Marinakis, *Reconstruction algorithm for Single Photon Emission Computed Tomography and its Numerical Implementation*, J.R.Soc.Interface, 3,45-54, 2006.
- [70] A.S.Fokas, *A unified approach to Boundary Value Problems*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, Philadelphia, SIAM, 2008.
- [71] A.S.Fokas, I.M.Gelfand, *Integrability of Linear and Nonlinear Evolution Equations and the Associated Fourier Transforms*, Lett.Math.Phys. 32, 189-210, 1994.
- [72] M.J.Ablowitz, A.S.Fokas, *Complex variables*, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [73] G.Dassios, *What non linear methods offered to linear problems? The Fokas transform method*. International Journal of Non-Linear Mechanics, 42, 146-156, 2007.