



INAOE

**Predicción del Coeficiente de Esparcimiento en
Maniqués de Piel mediante una Red Neuronal
Convolutiva tipo U-Net**

Por:

Ing. Manuel Mora Estrada

Tesis como requisito parcial para obtener el grado de:

**Maestría en Ciencias en el área Ciencias y
Tecnologías Biomédicas**

En el:

**Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y
Electrónica**

Noviembre 2024

Tonantzintla, Puebla

Supervisada por:

**Dr. Julio César Ramírez San Juan, INAOE
Dr. Roger Chiu Zárate, UDG**

©INAOE 2024

Derechos Reservados

El autor otorga al INAOE el permiso de reproducir y distribuir copias de esta tesis en su totalidad o en partes mencionando la fuente.



AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por la beca y el apoyo brindado, así como al INAOE por facilitar los recursos necesarios. Extiendo mi gratitud al Laboratorio de Speckle por el apoyo y el poder computacional proporcionado, que fue fundamental en los primeros experimentos de inmersión.

Al M. en I. Roger Chiu Coutiño (UDG), por brindarme orientación en el diseño experimental y en el procesamiento de las imágenes obtenidas. Su experiencia fue fundamental para el desarrollo de la metodología y el análisis de datos de la red neuronal. Su apoyo técnico y sus recomendaciones, resultaron muy útiles en varias etapas del proceso.

Al Dr. Emiliano Teran (CICESE) por su valiosa ayuda durante este proceso. Su colaboración fue esencial para la caracterización de las muestras de geles, especialmente en lo que respecta a la medición de las propiedades ópticas.

Quiero expresar mi más sincero y profundo agradecimiento a mis asesores, el Dr. Julio César Ramírez San Juan, quien desde el primer día confió en mí, brindándome su apoyo incondicional, y el Dr. Roger Chiu Zárate por su orientación y respaldo continuo a lo largo de la realización de esta investigación. Su compromiso y constancia han sido imprescindibles.

DEDICATORIA

Esta tesis la dedico justo como Stephen K. lo hizo con su primer novela: “Para Tabby, que me metió en esto y luego me ayudó a salir”.

RESUMEN

El coeficiente de esparcimiento, el coeficiente de absorción y el factor de anisotropía en tejidos son parámetros fundamentales en las ciencias biomédicas. Sin embargo, la determinación precisa de estos coeficientes sigue siendo un desafío, ya que los métodos tradicionales dependen de equipos especializados, simulaciones computacionales intensivas o suponen condiciones ideales, como la homogeneidad de los tejidos, las cuales no siempre reflejan la realidad clínica. Ante estas limitaciones, se presentan los resultados obtenidos mediante la modificación de una red neuronal convolucional tipo U-Net, diseñada para predecir con precisión el coeficiente de esparcimiento.

Para entrenar el modelo, se creó una base de datos que contiene imágenes de diversos patrones de luz incoherente esparcida a través de maniqués con diversas concentraciones de TiO_2 y de TiO_2 mezclado con tinte café, simulando las variaciones ópticas presentes en los tejidos biológicos. Finalmente, se presentan los resultados de la predicción de los coeficientes de esparcimiento y de absorción, y se comparan con mediciones experimentales obtenidas mediante un método de espectrofotometría con esfera integradora y un método numérico basado en Monte Carlo para multicapas, conocido como Monte Carlo Multi-Layered(MCML). Además, se evaluó el desempeño de la U-Net modificada para la predicción de los coeficientes en comparación con otras arquitecturas y métodos de aprendizaje automático.

ABSTRACT

The scattering coefficient, the absorption coefficient, and the anisotropy factor in tissues are fundamental parameters in biomedical sciences. However, accurately determining these coefficients remains a challenge, as traditional methods rely on specialized equipment, computationally intensive simulations, or assume ideal conditions, such as tissue homogeneity, which do not always reflect clinical reality. To address these limitations, the results obtained using a modified U-Net convolutional neural network, designed to accurately predict the scattering coefficient, are presented.

To train the model, a database was created containing images of various incoherent light patterns scattered through phantoms with different concentrations of TiO_2 and TiO_2 mixed with brown dye, simulating the optical variations present in biological tissues. Finally, the results of the scattering and absorption coefficient predictions are presented and compared with experimental measurements obtained using an integrating sphere spectrophotometry method and a numerical method based on Monte Carlo for multilayers, known as Monte Carlo Multi-Layered (MCML). Additionally, the performance of the modified U-Net in predicting the coefficients was evaluated in comparison with other architectures and machine learning methods.

CONTENIDO

Lista de figuras.....	7
Lista de tablas.....	9
Capítulo 1.....	10
1.1 Introducción.....	10
1.2 Motivación.....	16
1.3 Justificación.....	17
1.4 Planteamiento del problema.....	18
1.4 Preguntas de investigación.....	19
1.5 Hipótesis.....	19
1.5.1 Objetivo general.....	20
1.5.2 Objetivos específicos.....	20
1.6 Alcance y limitaciones.....	20
1.7 Contribuciones esperadas.....	22
1.8 Organización del documento.....	23
Capítulo 2: Marco Teórico.....	25
2.1 Propiedades ópticas de la piel.....	25
2.1.1 Esparcimiento de Luz.....	26
2.1.2 Absorción.....	30
2.2 Maniquí de piel.....	32
2.3 Métodos experimentales, computacionales y combinados para la caracterización de los coeficientes ópticos de tejidos.....	34
2.4 Contexto y fundamento de las Redes Neuronales Artificiales.....	39
2.4.1 Tipos de Neuronas.....	39
Neurona biológica.....	39
Neurona Artificial.....	40
2.4.2 Tipos de redes neuronales.....	43
Redes Neuronales Feed-forward.....	43
Redes Neuronales Convolucionales (CNN).....	44

U-Net.....	47
Arquitectura y Descripción Detallada de la U-Net.....	48
2.4.3 Aplicaciones de U-Net en ciencias biomédicas.....	50
Capítulo 3: Metodología.....	52
3.1 Fabricación y caracterización de Maniqués de Piel.....	52
3.2 Diseño Experimental e Impresión del modelo 3D.....	55
3.2.1 Variables.....	55
3.2.2 Muestras.....	55
3.2.3 Configuración del equipo.....	56
3.2.4 Configuración del entorno.....	58
3.3 Programación del Raspberry Pi.....	58
3.4 Generación de Imágenes.....	60
3.5 Preprocesamiento de los Datos.....	62
3.6 Método para la predicción del coeficiente de esparcimiento y absorción.....	64
3.6.1 Arquitectura propuesta.....	64
3.6.2 Métricas de Evaluación.....	66
Error Cuadrático Medio.....	67
Raíz del error Cuadrático Medio.....	67
Discusión.....	68
Capítulo 4: Experimentos y Resultados.....	70
4.2 Predicción del coeficiente de esparcimiento y absorción.....	72
4.2.2 Desempeño de la U-Net para la predicción de coeficientes ópticos.....	72
4.2.3 Modelos comparativos para evaluar el desempeño de la U-Net.....	74
Perceptrón Multicapa.....	75
Red Neuronal Convolutiva.....	78
Random Forest y XG-Boost.....	80
Resultados finales del rendimiento de las cinco arquitecturas.....	83
4.2.4 Análisis de los resultados.....	84
4.3 Discusión.....	90
Capítulo 5: Conclusiones.....	93
Capítulo 6: Trabajo a Futuro.....	96
Referencias.....	97

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Ejemplo de un sistema de esfera integradora simple (Terán et al., 2019)	39
Figura 2.2: Estructura de una neurona biológica	41
Figura 2.3: Estructura básica de una neurona artificial	43
Figura 2.4: Estructura básica de las redes neuronales feed-forward	46
Figura 2.5: Estructura de una U-Net	50
Figura 3.1: Fabricación y caracterización de Maniqués de Piel	55
Figura 3.2: Maniqués de piel con diferentes concentrados de TiO_2	56
Figura 3.3: a) Planos de impresión 3D y simulación de componentes físicos b) Prototipo funcional del sistema de captura de imágenes	60
Figura 3.4: Diagrama de Flujo del código para la toma de imágenes mediante el Raspberry Pi	63
Figura 3.5: a) Imagen a través del maniquí de 0.060 g TiO_2 , b) Imagen a través del maniquí de 0.040g TiO_2 , c) Imagen a través del maniquí de 0.020 g TiO_2	64
Figura 3.6: Ejemplo de los cinco patrones utilizados para la creación del conjunto de datos	65
Figura 4.1: Dependencia del coeficiente de esparcimiento respecto al concentrado de TiO_2	74
Figura 4.2: Evolución de la función de pérdida durante el entrenamiento del modelo U-Net	76
Figura 4.3: Evolución de la función de pérdida durante el entrenamiento del Perceptrón Multicapa	81
Figura 4.4: Función de pérdida durante el entrenamiento del modelo CNN	83
Figura 4.5: Distribución de las predicciones del coeficiente de absorción y esparcimiento usando RandomForest	85

Figura 4.6: Distribución de las predicciones del coeficiente de absorción y 86
esparcimiento usando XG-Boost

Figura 4.7: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de 89
esparcimiento usando la U-Net.

Figura 4.8: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de absorción en 90
conjunto de datos usando la U-Net.

Figura 4.9: Gráfica de dispersión de la comparación de los promedios de las 93
predicciones del coeficiente de esparcimiento en conjunto de datos usando la U-Net
contra los coeficientes de esparcimiento reales agregando el concentrado de TiO_2
0.080

Figura 4.10: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de absorción 94
excluyendo las imágenes de maniqués de piel con datos atípicos.

LISTA DE TABLAS

Tabla 3.1: Propiedades ópticas de los maniqués de piel 1	53
Tabla 3.2: Propiedades ópticas de los maniqués de piel 2	54
Tabla 3.2: Estadísticas del conjunto de datos	62
Tabla 4.1: Resultados del modelo U-Net para la predicción del coeficiente de esparcimiento y absorción en el conjunto de prueba	74
Tabla 4.2: Descripción de los componente utilizados en la arquitectura de la CNN	78
Tabla 4.3: Comparativa de los diferentes modelos utilizados para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción. Los mejores resultados para cada métrica se destacan en negrita.	83

1.1 Introducción

Resulta esencial comprender la forma en que la luz se comporta al atravesar tejidos biológicos, ya que este conocimiento es clave para desarrollar diagnósticos y tratamientos médicos efectivos (Hohmann et al., 2020), como la terapia fotodinámica (TFD) (Jones et al., 2009). Esta interacción de luz también se ha utilizado en la detección de cáncer (Troy et al., 1996). Algunos estudios sugieren que, en ciertos intervalos de longitudes de onda, la piel sana y la afectada por cáncer muestran diferencias en su coeficiente de esparcimiento, lo cual podría servir como un indicador confiable para la detección patológica (Salomatina et al., 2006).

Las propiedades ópticas de la piel humana han sido investigadas a fondo en múltiples estudios (Edwards y Duntley, 1939; Anderson y Parrish, 1981; van Gemert et al., 1989; Graaff et al., 1993; Zonios et al., 2001). Su estimación es fundamental para evaluar cómo la luz se distribuye en el tejido. Esta distribución puede calcularse a partir del coeficiente de absorción (μA), el coeficiente de esparcimiento (μS) y el factor de anisotropía (g). Por lo tanto, la medición precisa de estos parámetros resulta esencial para comprender y modelar la propagación de la luz en tejidos (Hohmann et al., 2020) y

garantizar la precisión en aplicaciones clínicas. El saber cómo se distribuye la radiación a través de un medio esparcidor, como lo es el tejido biológico, es lo que en óptica biomédica se conoce como problema directo (Klose et al., 2002).

Además del estudio de la distribución de la luz en un medio determinado, se puede calcular con precisión los parámetros ópticos de dicho medio. Esto es lo que se conoce como problema inverso: Determinar sus características (Klose & Hielscher, 2002). Lo anterior es fundamental para el campo de la imagenología biomédica. Estudios previos han demostrado que la capacidad de estimar con precisión el coeficiente de esparcimiento y el de absorción en imágenes médicas puede mejorar la resolución y la calidad del diagnóstico, preservando los detalles críticos en la imagen analizada (Lustig, Donoho, & Pauly, 2007). Estas características son particularmente relevantes en modalidades de imagen de alta complejidad, donde la precisión en la visualización de estructuras internas es esencial para una interpretación médica adecuada, como lo es en la tomografía de coherencia óptica (TCO) (Ben-Yehud et al., 2024).

Existe una relación sustancial entre ambos coeficientes. Tanto la absorción como el esparcimiento están fuertemente interrelacionados, por ejemplo, para determinar la intensidad de la luz reemitida en la superficie del medio, lo que dificulta desacoplar el efecto de estos dos parámetros (Taroni, 2003). Para la predicción de estos coeficientes y para el estudio de la propagación de la luz en medios esparcidores se han desarrollado diferentes métodos, que incluyen modelos matemáticos y simulaciones.

Se mencionan someramente los métodos comunes para determinar cómo se distribuye la radiación a través de un medio esparcidor:

- **Método Monte Carlo:** Los métodos de Monte Carlo (MC) son una categoría de métodos computacionales que implican el muestreo aleatorio de una cantidad física

(Metropolis, 1949). En los últimos años, el método Monte Carlo se ha consolidado como una herramienta fundamental para simular el transporte de luz en tejidos, debido a su flexibilidad y rigor en el tratamiento de problemas relacionados con la propagación de luz en medios con estructuras complejas, como la piel. Este enfoque utiliza los trayectos aleatorios de cada paquete de fotones mientras atraviesan un modelo de tejido, simulando así el proceso general del modelado Monte Carlo. Varios estudios han utilizado el método de simulación de Monte Carlo para predecir los coeficientes de esparcimiento y absorción. Por ejemplo, en (Moreira, 2011), se optimizó este método para predecir estos coeficientes en tres tipos de polvo de TiO₂, concluyendo que su combinación con balances macroscópicos es eficaz en sistemas fotocatalíticos. En (Graaff, 1993), se explica cómo las simulaciones de Monte Carlo condensadas pueden calcular el coeficiente de esparcimiento mediante ajustes de parámetros y balances de energía.

En el ámbito biomédico, el trabajo (Yasuo Hasegawa, 1991) se enfoca en la estimación de estos coeficientes utilizando simulaciones de Monte Carlo para modelar la trayectoria de fotones en tejidos, considerando la heterogeneidad y variabilidad de los mismos, lo que permite obtener estimaciones significativas. De manera similar, (Sharma, 2010) muestra cómo este método modela la propagación de la luz en el tejido biológico, validando sus resultados mediante datos experimentales.

- **La Ecuación de la Transferencia Radiativa (ETR):** La ecuación de transferencia radiativa es fundamental en el estudio de la propagación de la radiación a través de medios turbios, como los tejidos biológicos en imágenes médicas (Carramiñana, 2018; Chandrasekhar, 1947). También existe la Ecuación de Difusión (ED) que es una aproximación simplificada de la ETR que asume que la luz se esparce mucho

más que lo que se absorbe. En (Taroni, 2003), se combina la ETR con el método de random walk, discutiendo las condiciones de aplicabilidad de la ETR y la importancia de ajustar cuidadosamente los parámetros del modelo para reflejar las características específicas del tejido. Por otro lado, en (Solouma, 2023), se compara la ETR con otros enfoques, como la teoría de Kubelka-Munk, resaltando su capacidad para manejar escenarios más complejos donde el esparcimiento y la absorción no son uniformes en el medio en que la luz se propaga.

- **La teoría de Kubelka-Munk:** La teoría de Kubelka-Munk es un modelo simplificado para analizar la interacción de la luz con materiales opacos, diseñado inicialmente para estudiar el cambio de color en recubrimientos sobre sustratos con propiedades ópticas conocidas (Kubelka & Munk, 1931). La teoría establece una relación entre la reflectancia (R) de un material y los coeficientes de absorción y esparcimiento, por lo que su uso simplificado, tiene aplicaciones directas en la optimización de la calidad de las imágenes obtenidas en técnicas como la tomografía computarizada (TC), la resonancia magnética (RM) y otros métodos de diagnóstico por imagen (ul Rehman, 2020). La simplicidad del modelo lo ha vuelto un método ampliamente utilizado. Sin embargo, las premisas en las que se fundamenta no se cumplen del todo en la interacción de la luz con los tejidos.

Para la obtención de las propiedades ópticas del medio esparcidor, se tiende a adaptar las técnicas anteriores como la teoría simplificada de Kubelka-Munk (que presenta problemas de precisión para medios complejos y no se explicará a detalle en este contexto.), el método Monte Carlo (MC) y la Ecuación de Transferencia Radiativa (ETR):

- **Monte Carlo inverso:** El método Monte Carlo inverso se implementó por primera vez en 2016 y se le denominó *Inverse Monte Carlo Simulation* (IMCS) y requiere

licencia para su uso (Roggan et al., 2006). El proceso de IMCS se basa en proponer un conjunto inicial de parámetros, que luego son evaluados mediante simulación Monte Carlo para comparar los resultados con mediciones previas hasta que la diferencia resultante está dentro de un intervalo aceptable. De no ser así, se ajustan los parámetros y se repite el cálculo.

- **Inverse Adding-Doubling:** El método *Inverse Adding-Doubling* (IDA) (Prahl et al., 1993), que se basa en el algoritmo analítico Adding-Doubling, «una técnica iterativa diseñada para resolver la Ecuación de Transferencia Radiativa (ETR) en medios planos y homogéneos» (Welch & van Gemert, 1995). Opera de la siguiente manera: primero se propone un conjunto inicial de propiedades ópticas del material en estudio. Luego, se calcula la reflectancia y transmitancia utilizando el método Adding-Doubling. Estos valores calculados se comparan con los valores experimentales, y el proceso se repite, ajustando los parámetros hasta que los valores coinciden adecuadamente.

Se observa que ambos métodos, para ser utilizados, necesitan mediciones experimentales de reflectancia y transmitancia como referencia. La diferencia clave radica en cómo cada uno realiza las simulaciones: IMCS usa simulaciones de Monte Carlo, mientras que IDA utiliza el método Adding-Doubling para resolver la ETR. Ambos son métodos iterativos de ajuste de parámetros y, aunque emplean enfoques distintos, su éxito depende de la comparación con datos experimentales para lograr una caracterización precisa del medio. Asimismo, estos métodos enfrentan desafíos significativos, como la suposición de homogeneidad en tejidos biológicos heterogéneos y consistencia de las condiciones de iluminación, además de la complejidad matemática que dificulta su aplicación en medios tridimensionales, sugiriendo que también debe ser complementada con métodos adicionales. Estas limitaciones subrayan la necesidad de explorar alternativas, como el

aprendizaje automático, para implementar modelos eficientes y precisos en la caracterización óptica de tejidos y obtener resultados similares a menor costo computacional y en tiempos más reducidos.

La aplicación de redes neuronales en la predicción de éstos coeficientes es un área emergente en el procesamiento de imágenes biomédicas. Las redes neuronales profundas, en especial, han demostrado ser herramientas eficaces para incrementar la precisión en diversas tareas de análisis de imágenes, gracias a su capacidad de aprender representaciones complejas de los datos. Estas redes pueden ser entrenadas para identificar patrones y características que no son fácilmente capturables mediante métodos tradicionales de procesamiento de imágenes (Archana & Jeevaraj, 2024).

En (Wang, Chen, & Hoi, 2020) se ha evidenciado que las redes neuronales convolucionales (CNN) pueden ser utilizadas para mejorar la reconstrucción de imágenes en sistemas de imagen médica, incrementando la precisión en la estimación del coeficiente de esparcimiento y la calidad final de la imagen. Estas redes también ofrecen un enfoque adaptativo para ajustar los parámetros de reconstrucción y reducir el ruido de manera más efectiva que los métodos tradicionales. (Yang et al., 2022) presentan una metodología innovadora basada en redes neuronales diseñada para compensar el esparcimiento de luz en imágenes de Tomografía de Coherencia Óptica en el Dominio Espectral (SD-OCT), logrando un rendimiento superior al de las técnicas convencionales. Este enfoque permite mejorar la calidad y precisión de las imágenes SD-OCT, facilitando un diagnóstico más confiable.

Para ilustrar más ejemplos de uso, en (Farrell et al., 1992) se explora la utilización de redes neuronales para extraer propiedades ópticas de tejidos a partir de mediciones de reflectancia difusa, mejorando la eficiencia del análisis. Por último, (Hokr, 2021) investiga el uso de

aprendizaje automático para estimar propiedades ópticas a partir de datos experimentales de imágenes, concluyendo que estos modelos superan a los métodos convencionales al ofrecer estimaciones precisas y robustas, reduciendo el impacto del ruido experimental y mejorando la adaptabilidad a diferentes tejidos.

Estos avances han sido significativos; sin embargo, hasta donde tenemos conocimiento, todos los estudios que emplean modelos de redes neuronales para predecir propiedades ópticas diversas se limitan a utilizar enfoques convencionales y simplificados de redes neuronales, sin explorar arquitecturas avanzadas de aprendizaje profundo, como la U-Net.

En este contexto, la presente investigación se enfoca en la aplicación de una versión modificada de la arquitectura U-Net para predecir el coeficiente de esparcimiento, utilizando imágenes obtenidas mediante la proyección de distintos patrones de luz incoherente sobre maniqués de piel con variados coeficientes de esparcimiento y absorción. Esta metodología representa un avance significativo en comparación con los estudios previos al ofrecer una solución más adaptativa a heterogeneidades y geometrías para la estimación de propiedades ópticas en tejidos biológicos y artificiales. La adecuada implementación de redes neuronales profundas podría proporcionar una herramienta avanzada para el análisis óptico.

1.2 Motivación

Uno de los mayores desafíos en la imagenología biomédica y el estudio de tejidos biológicos es lograr una caracterización precisa de sus propiedades ópticas. Lo relacionado con el coeficiente de esparcimiento dificulta la visualización de estructuras internas, mientras que lo relacionado el coeficiente de absorción influye en el contraste, afectando la diferenciación de las estructuras anatómicas y patológicas (Jacques, 2013; Razzak, 2018).

Sin embargo, los métodos convencionales, que a menudo requieren equipos costosos o licencias comerciales, no son completamente accesibles. Esto nos motivó a explorar nuevas técnicas que, sin comprometer la fiabilidad de los resultados, puedan ofrecer una alternativa más asequible para caracterizar las propiedades ópticas de los tejidos.

1.3 Justificación

El uso de redes neuronales para predecir y ajustar los coeficientes de esparcimiento y absorción representa un avance significativo en la mejora de la calidad de las imágenes biomédicas. Esta capacidad facilita una visualización interna más precisa, contribuyendo a diagnósticos más eficaces y a la detección temprana de enfermedades, lo que, a su vez, optimiza el manejo clínico (Jacques, 2000).

Por otro lado, los maniqués de piel artificial, diseñados con concentraciones controladas de dióxido de titanio (TiO_2) y tinte, ofrecen una herramienta innovadora para simular los procesos de esparcimiento y absorción. Al replicar las propiedades ópticas de los tejidos biológicos, estos modelos permiten evaluar de manera confiable la eficacia de las redes neuronales en la predicción de propiedades ópticas, sirviendo como un entorno ideal para pruebas, ajustes y validaciones de los modelos de aprendizaje automático.

Al integrar enfoques innovadores basados en modelos predictivos, es posible ofrecer soluciones que, no solo sean accesibles, sino que también sean equiparables en la precisión de estimación de parámetros ópticos de los métodos tradicionales, lo cual tiene implicaciones directas en la optimización de tratamientos y diagnósticos. Esta investigación se justifica, por tanto, no solo por su potencial para avanzar en la caracterización óptica de los tejidos, sino también por su contribución a la democratización de tecnologías de

diagnóstico avanzadas, ampliando su disponibilidad y abriendo nuevas oportunidades para su aplicación clínica.

1.4 Planteamiento del problema

El análisis y diagnóstico de afecciones médicas depende en gran medida de la capacidad para obtener información precisa y detallada sobre los parámetros ópticos de los tejidos biológicos (Jacques, 2013). Los coeficientes de esparcimiento y absorción de la luz, son elementos clave en este proceso, ya que facilitan la identificación y caracterización de enfermedades como el cáncer, lesiones o cambios degenerativos en las células (Kaniyala Melanthota et al., 2022, Mourant et al., 1995). Además, permiten evaluar la severidad y extensión de las patologías a través de la información óptica obtenida, contribuyendo a diagnósticos más oportunos.

El tratamiento de afecciones médicas, especialmente aquellos basados en radiación luminosa, para que sea óptimo, también depende de la medición precisa de las propiedades ópticas de los tejidos. Los coeficientes de esparcimiento y absorción son esenciales para ajustar la intensidad de tratamientos como la fototerapia o la terapia fotodinámica (TFD) (Kim & Darafsheh, 2020) de manera más precisa y personalizada para cada paciente.

En conjunto, tanto el diagnóstico como el tratamiento de afecciones médicas requieren de información fidedigna de las propiedades ópticas de los tejidos para asegurar una evaluación adecuada. Sin embargo, cuantificar estos coeficientes de manera precisa presenta varios desafíos debido a la complejidad geométrica y heterogénea de los tejidos biológicos y a las limitaciones de las tecnologías actuales (Steelman et al., 2019).

Las técnicas tradicionales para medir las propiedades ópticas de los tejidos, como la espectroscopía y la tomografía de coherencia óptica (OCT), aunque efectivas, suelen ser

costosas y requieren manejo especializado (Chopra et al., 2021). Estas limitaciones dificultan su implementación en entornos con recursos económicos restringidos, lo que acota su accesibilidad a un amplio grupo poblacional que podría beneficiarse.

La falta de métodos simples y accesibles para caracterizar las propiedades ópticas de los tejidos biológicos es una limitación importante que impide su uso extendido en el diagnóstico médico. Ante este escenario, surge la necesidad urgente de explorar nuevas soluciones que puedan ofrecer resultados rápidos y confiables. Una solución potencial radica en el uso de redes neuronales profundas, como la U-Net (Ronneberger, 2015), que ha demostrado su efectividad en el análisis de imágenes biomédicas. La modificación de esta arquitectura, originalmente diseñada para segmentación, ofrece una oportunidad interesante para predecir los coeficientes de esparcimiento y absorción de los tejidos, superando algunas de las limitaciones de los métodos tradicionales.

1.4 Preguntas de investigación

En este punto es evidente que los coeficientes de esparcimiento y absorción son cruciales para identificar patrones característicos de los tejidos biológicos. La aplicación de la U-Net presenta una oportunidad única para predecir y analizar estos coeficientes. A partir de esto, surgen las siguientes preguntas clave de la investigación:

1. ¿Cómo se desempeña la U-Net modificada en la predicción del coeficiente de esparcimiento en imágenes de maniqués de piel con diferentes concentraciones de TiO₂ y tinte café, y cuál es su capacidad de generalización frente a variaciones en los parámetros experimentales?
2. ¿Cómo se compara el desempeño de la U-Net en la predicción del coeficiente de esparcimiento en imágenes capturadas de maniqués de piel frente a otros modelos de aprendizaje automático?

1.5 Hipótesis

Se plantea que la U-Net modificada permitirá predecir con precisión el coeficiente de esparcimiento en imágenes de maniqués de piel con diferentes concentraciones de TiO_2 y tinte café. Además, se espera que generalice sus predicciones a esparcidos no incluidos en el conjunto de entrenamiento, logrando un mejor desempeño en comparación con otros modelos de aprendizaje automático.

1.5.1 Objetivo general

Desarrollar y evaluar una arquitectura adaptada de la U-Net para la predicción del coeficiente de esparcimiento en maniqués de piel, incluso cuando se emplea un conjunto de datos limitado.

1.5.2 Objetivos específicos

1. Entrenar la arquitectura adaptada de la U-Net para que, además de predecir el coeficiente de esparcimiento, sea capaz de predecir el coeficiente de absorción en maniqués de piel.
2. Evaluar la capacidad de la U-Net modificada para generalizar predicciones de los coeficientes de esparcimiento y absorción a esparcidos no incluidos en el conjunto de entrenamiento.
3. Comparar la precisión de la U-Net adaptada en la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción frente a otros modelos de aprendizaje automático.
4. Comparar los resultados de las predicciones de los coeficientes de esparcimiento y absorción generados por la U-Net adaptada con las mediciones experimentales obtenidas mediante un método numérico de *Monte Carlo Multi-Layered* (MCML).

1.6 Alcance y limitaciones

Alcances: Este estudio se centra en la aplicación de la U-Net adaptada para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción en imágenes obtenidas mediante la proyección de patrones (como Hadamard, cebras, líneas, números y puntos) sobre maniqués de piel con concentraciones variables de TiO₂ y tinte café. El enfoque principal es la modificación y evaluación de la U-Net, especialmente en cuanto a su capacidad para realizar predicciones precisas en un contexto biomédico utilizando un conjunto de datos limitado. Como parte del análisis, se comparan los resultados obtenidos con los de otros modelos de aprendizaje automático y con las mediciones experimentales obtenidas mediante un método numérico de Monte Carlo, lo que permite evaluar la efectividad relativa de la U-Net frente a enfoques tradicionales.

Uno de los fines primarios del trabajo es ampliar la comprensión del uso de redes neuronales convolucionales en el análisis de imágenes biomédicas, abriendo la puerta a futuras investigaciones que puedan aplicarse a la caracterización óptica de tejidos biológicos reales y al desarrollo de sistemas más precisos para la predicción de propiedades ópticas en contextos clínicos.

Limitaciones: Las principales limitaciones de este estudio incluyen las restricciones del poder computacional disponible, que permitió entrenar la red con imágenes de dimensiones relativamente pequeñas (de 64 a 128 píxeles), lo que podría afectar la generalización de los resultados a imágenes de mayor resolución. Además, el estudio se limita al uso exclusivo de luz incoherente en los experimentos, lo que impide evaluar el desempeño de la U-Net en condiciones de luz coherente, como las que podrían encontrarse en aplicaciones con láseres.

Otra limitación importante es el número reducido de esparcidos disponibles para la experimentación, lo cual restringe la diversidad de datos de entrada para entrenar y evaluar

la red. Además, no se realizaron pruebas con tejidos biológicos reales, lo que podría afectar la aplicabilidad directa de los resultados a escenarios clínicos.

A pesar de estas limitaciones, el estudio contribuye a la investigación en el campo de la caracterización óptica de tejidos y el uso de redes neuronales en la predicción de propiedades de medios esparcidos, sentando las bases para investigaciones futuras que puedan superar estas restricciones y ampliar el uso de estas técnicas en el ámbito biomédico.

1.7 Contribuciones esperadas

A través de esta investigación, se anticipan las siguientes contribuciones clave:

1. Desarrollo de un conjunto de datos especializado: Se generará un conjunto de datos con imágenes que representan diferentes valores de los coeficientes de esparcimiento y absorción, obtenidas de maniqués de piel. Este conjunto de datos no solo será esencial para el entrenamiento y evolución de modelos de redes neuronales profundas, sino que también servirá como una herramienta valiosa para futuras investigaciones en el ámbito del análisis óptico de tejidos biológicos, promoviendo el avance de la caracterización óptica mediante aprendizaje automático.
2. Comparación de modelos de aprendizaje automático: Se llevará a cabo un análisis exhaustivo entre la U-Net adaptada y otros modelos de aprendizaje automático, evaluando parámetros como precisión, facilidad de ajuste y rendimiento. Este estudio proporcionará una comprensión detallada de la efectividad relativa de cada enfoque en la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción, lo que contribuirá a la selección de modelos más adecuados para tareas específicas en el análisis de imágenes biomédicas.

3. Apertura de nuevas líneas de investigación: Los resultados obtenidos de este estudio sentarán las bases para explorar el uso de redes neuronales en la caracterización óptica de tejidos biológicos con luz incoherente. Además, se permitirá la predicción de otro parámetro óptico importante, el factor de anisotropía, lo que ampliará el campo de aplicación de las redes neuronales.

1.8 Organización del documento

El capítulo 2, denominado *Marco Teórico*, proporciona una base conceptual esencial para entender los coeficientes de esparcimiento y absorción, así como las propiedades ópticas de la piel y su análisis mediante imágenes. Además, se exploran los fundamentos de las redes neuronales artificiales, con especial énfasis en las redes neuronales convolucionales (CNN) y la arquitectura U-Net, destacando sus aplicaciones en las ciencias biomédicas.

El capítulo 3 se centra en la *Metodología*, donde se describe el diseño experimental y los arreglos utilizados para obtener las imágenes empleadas en la investigación. Además, se presenta la arquitectura propuesta de la red neuronal, se explican las métricas de evaluación seleccionadas y se detalla el procedimiento para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción.

En el capítulo 4, titulado *Experimentos y Resultados*, se exponen los resultados obtenidos en el análisis de las imágenes. Este capítulo también incluye el preprocesamiento de los datos, el desempeño de la U-Net en la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción, y una comparación con otros modelos de aprendizaje automático, como Perceptrón Multicapa, Redes Neuronales Convolucionales, Random Forest y XG-Boost. Finalmente, se realiza un análisis de los resultados.

El capítulo 5 presenta las *Conclusiones*, donde se resumen los hallazgos principales de la investigación, destacando las contribuciones más relevantes y las implicaciones de los resultados obtenidos.

Por último, el capítulo 6 ofrece las sugerencias de *Trabajo Futuro*, proponiendo mejoras a las técnicas empleadas en este trabajo, nuevas áreas de investigación que se derivan de los hallazgos obtenidos y recomendaciones para la escalabilidad del proyecto.

CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO

En este capítulo se abordan los conceptos fundamentales que sustentan esta investigación, incluyendo las propiedades ópticas de la piel, las características de los maniqués de piel utilizados en imágenes médicas, y las principales técnicas de análisis de imágenes.

2.1 Propiedades ópticas de la piel

Las propiedades ópticas de los tejidos biológicos determinan cómo la luz interactúa con el tejido, influenciando su penetración, esparcimiento y absorción. La capacidad de la luz para penetrar en un tejido, explorar sus componentes y luego salir de él para su detección es crucial en aplicaciones diagnósticas. Además, la capacidad del tejido para absorber la luz es fundamental en terapias basadas en energía luminosa. Por tanto, la caracterización precisa de las propiedades ópticas de un tejido es crucial para el diseño de dispositivos diagnósticos, la interpretación de mediciones y la planificación de tratamientos terapéuticos (Jacques, 2013).

Una vez determinadas estas propiedades, se pueden aplicar en modelos de transporte de luz para predecir la distribución y el depósito de energía dentro del tejido. Las propiedades ópticas son cruciales en aplicaciones biomédicas, ya que permiten anticipar el comportamiento de la luz en el interior de los tejidos durante procedimientos diagnósticos y terapéuticos.

El tejido biológico tiene varias características ópticas importantes, entre las cuales destacan la absorción, el esparcimiento, la atenuación efectiva, la penetración óptica y los coeficientes de albedo. En este estudio, nos centraremos específicamente en los coeficientes de esparcimiento y absorción.

2.1.1 Esparcimiento de Luz

El esparcimiento, en física, es una amplia gama de procesos físicos en los que partículas en movimiento o radiación de alguna forma, como luz o sonido, se ven obligadas a desviarse de una trayectoria recta debido a irregularidades localizadas (incluidas partículas y radiación) en el medio a través del cual pasan (Rutherford, 1911). Existen diferentes tipos de esparcimiento óptico dependiendo del tamaño de las partículas y la longitud de onda de luz, se mencionan los más relevantes para este estudio:

- Mie (Hergert & Wriedt, 2012): El esparcimiento de Mie ocurre cuando el tamaño de las partículas en un medio es comparable a la longitud de onda de la luz incidente. A diferencia del esparcimiento de Rayleigh, que es dominante en partículas significativamente más pequeñas, el esparcimiento de Mie es relevante cuando las partículas tienen un tamaño más grande. En el contexto dérmico, este fenómeno se manifiesta en la interacción de la luz con estructuras como las fibras colágenas y las fibras elásticas. Estas estructuras contribuyen al esparcimiento de ciertas longitudes de onda, afectando la percepción visual de la piel. Por ejemplo, el esparcimiento de Mie puede intensificar los tonos opalescentes en algunas áreas dérmicas, lo que influye en la textura visual y el tono general de la piel. Aunque el colágeno y las fibras dérmicas son los principales responsables del esparcimiento en este rango, la melanina juega un rol diferente. La melanina no es

un agente esparcidor significativo, sino que actúa predominantemente como un absorbente eficiente de luz, particularmente en el rango ultravioleta y visible. Este comportamiento permite a la melanina modular el color de la piel al absorber longitudes de onda específicas, además de proteger contra el daño de la radiación. En conjunto, la interacción entre el esparcimiento de Mie y la absorción de la melanina define la apariencia óptica y las propiedades protectoras de la piel. No depende fuertemente de la longitud de onda y produce un esparcimiento más uniforme, que puede ser hacia adelante o hacia atrás de la dirección de incidencia.

- Rayleigh (Bassani et al., 2005): El esparcimiento de Rayleigh describe la desviación de la luz o radiación electromagnética por partículas mucho más pequeñas que la longitud de onda incidente. Este tipo de esparcimiento es más efectivo para longitudes de onda cortas, debido a su relación inversa con la cuarta potencia de su longitud de onda. En el contexto biomédico, el esparcimiento de Rayleigh desempeña un papel crucial en la interacción de la luz con estructuras microscópicas de la piel, como las proteínas intracelulares y las pequeñas vesículas lipídicas.

Un aspecto relevante es su influencia en la imagenología biomédica, donde ayuda a interpretar propiedades ópticas de la piel y tejidos subyacentes. Por ejemplo, la sangre y sus componentes, como los glóbulos rojos, producen esparcimiento específico que puede ser analizado a detalle. Longitudes de onda más cortas (como el azul) se esparcen más que las largas (como el rojo).

- Raman (Pilot et al., 2019): El esparcimiento Raman, también conocido como efecto Raman, es un fenómeno óptico que ocurre cuando la luz interactúa con una molécula y su energía cambia ligeramente debido a vibraciones moleculares. Cuando un haz de láser de frecuencia única incide sobre una muestra, provoca una

distorsión temporal en la nube de electrones de las moléculas, generando un estado virtual de mayor energía. Este estado es extremadamente breve, y cuando la molécula regresa a su estado base o a un estado vibracional diferente, emite luz esparcida con una frecuencia distinta a la incidente.

Este fenómeno es clave para el análisis de propiedades moleculares y vibracionales y se emplea en la técnica conocida como espectroscopía Raman. En el caso de tejidos biológicos, el esparcimiento Raman permite analizar su composición química y estructura. Al impactar un tejido con radiación láser, la espectroscopía Raman detecta cambios en la frecuencia de la luz esparcida, los cuales corresponden a resonancias específicas que revelan información sobre la presencia de biomoléculas, su entorno químico y cómo están organizados los tejidos (Movasaghi et al., 2007).

- Esparcimiento Brillouin (Olmo & Nave, 2005): El esparcimiento Brillouin es un fenómeno óptico que ocurre cuando las ondas acústicas o las vibraciones en un material interactúan con la luz incidente, causando un cambio en la frecuencia de la luz esparcida. A diferencia del efecto Raman, que involucra cambios en la frecuencia debido a las vibraciones moleculares, el esparcimiento Brillouin está relacionado con las ondas sonoras o acústicas en el medio, lo que lo convierte en un fenómeno que está más asociado con la estructura a nivel macroscópico del material.

Este tipo de esparcimiento es comúnmente observado en materiales sólidos y líquidos, ya que las ondas acústicas pueden propagarse en estos medios, pero es menos frecuente en gases. En particular, el esparcimiento Brillouin se utiliza en la caracterización de la densidad y la rigidez de materiales, ya que la frecuencia de las ondas acústicas depende de las propiedades mecánicas del material. Esto permite,

por ejemplo, estudiar cómo se comportan materiales ante tensiones o deformaciones y también tiene aplicaciones en la medición de propiedades de fibras ópticas.

El esparcimiento en el tejido biológico se refiere al fenómeno físico en donde cualquier tipo de radiación electromagnética es esparcida al pasar por los tejidos biológicos, esto se debe a que la radiación incidente interactúa con diferentes estructuras dentro de los tejidos (Steven L. Jacques, 2000). El coeficiente de esparcimiento es un parámetro que cuantifica la probabilidad de esparcimiento de la luz por unidad de longitud en un medio específico, permitiendo caracterizar la interacción de la radiación electromagnética con partículas o estructuras presentes en dicho medio. Esta métrica mide la intensidad del esparcimiento y está dada por la siguiente ecuación.

$$\mu_s = -\frac{1}{I_0 L} \ln\left(\frac{I}{I_0}\right) \quad (1)$$

Donde:

- I_0 es la intensidad de la luz incidente.
- I es la intensidad de la luz esparcida.
- L es la longitud de paso, es decir, la distancia que recorre la luz a través del medio esparcidor.

2.1.2 Absorción

La absorción es el proceso en que la energía se transfiere a un medio (Born, 1999). El medio puede ser líquido, sólido o gaseoso. Este proceso es crítico en diversas aplicaciones médicas, donde el coeficiente de absorción se convierte en un parámetro esencial para evaluar la interacción y seguridad de la radiación con los tejidos biológicos.

Cuando la luz con una determinada frecuencia incide sobre un objeto cuyos electrones tienen la misma frecuencia, los electrones absorben la energía de la onda de luz y la convierten en movimiento vibratorio. A medida que los electrones interactúan con los átomos circundantes, la energía vibratoria se convierte en energía térmica. Una vez que esto ocurre, la onda de luz es absorbida por el objeto y nunca más será liberada en forma de luz (Hecht, 2002). En el ámbito biomédico, la absorción en la piel es un proceso clave que involucra componentes como la melanina y la hemoglobina, los cuales interactúan con la luz de maneras específicas. La melanina, el principal pigmento responsable de la coloración de la piel, absorbe eficientemente la luz en el espectro ultravioleta y visible, especialmente en las longitudes de onda más cortas (UVB y UVA). Esta capacidad de absorción protege las células de la piel al filtrar la radiación dañina, reduciendo el riesgo de quemaduras solares y cáncer de piel, especialmente en individuos con mayor concentración de melanina.

Además, la hemoglobina, presente en los glóbulos rojos, es fundamental para el transporte de oxígeno y también juega un papel importante en la absorción de luz en la piel. Absorbe luz en el rango del infrarrojo cercano y visible, lo que puede influir en la apariencia de la piel, como enrojecimiento en áreas con mayor flujo sanguíneo. Técnicas como la fotopleetismografía utilizan esta propiedad para evaluar la oxigenación y la salud vascular de la piel. Así, tanto la melanina como la hemoglobina son esenciales no solo para la protección y la coloración, sino también para el diagnóstico y el monitoreo de condiciones cutáneas y circulatorias.

Adicionalmente, el uso de colorantes en aplicaciones biomédicas también se basa en principios de absorción. Los colorantes utilizados en técnicas de diagnóstico, como la fluorescencia, dependen del coeficiente de absorción de los tejidos a diferentes longitudes

de onda. Por ejemplo, colorantes específicos pueden ser diseñados para resaltar estructuras celulares o tejidos, facilitando así la visualización y el análisis en estudios histológicos.

Por otro lado, el coeficiente de absorción describe hasta qué punto una onda penetra en un material de un espesor específico antes de ser absorbida. El coeficiente de absorción (μ_a) se define como la fracción de la intensidad de la radiación que es absorbida por una unidad de longitud al atravesar un material (Fox, 2010). Se expresa generalmente en unidades de inversa de longitud, como cm^{-1} y se puede despejar de la siguiente fórmula:

$$\mu_a = \frac{1}{L} \ln\left(\frac{I_0}{I}\right) \quad (2)$$

Donde:

- L es el espesor del medio.
- I_0 es la intensidad de la luz incidente.
- I es la intensidad de la luz transmitida.

2.2 Maniquí de piel

Un maniquí de piel, se refiere a un modelo que imita el tejido biológico y sus propiedades, del cual se pueden escanear o tomar imágenes para evaluar, analizar y ajustar el rendimiento de una técnica o dispositivo de diagnóstico o tratamiento. Estos maniqués proporcionan resultados consistentes, lo que garantiza que los sistemas y métodos para obtener imágenes del cuerpo humano funcionen correctamente y brinden información confiable (Jaszczak, 2024). Así mismo, un maniquí de piel no solo imita el tejido biológico en general, sino que también emula sus propiedades en el contexto médico. Dada esta definición podemos clasificar en dos grandes grupos a los maniqués de piel:

- **Maniqués de piel que emulan las propiedades ópticas (Prahl, 2018):** Los maniqués de piel que simulan las características ópticas de los tejidos se utilizan habitualmente para imitar las distribuciones de luz en los tejidos vivos. Estos maniqués de piel a menudo se diseñan y utilizan para tres propósitos:(1) simular distribuciones de luz con una geometría de tejido físico, (2) para calibrar dispositivos ópticos y (3) para registrar una medición de referencia con un dispositivo de medición óptico.

Para los tres usos, las propiedades de absorción y esparcimiento en los maniqués de piel son el factor de diseño principal (Prahl, 2018). En la literatura se han descrito varios tipos de maniqués para imitar la óptica del tejido humano, incluidos:

- Leche homogeneizada
- Crema no láctea
- Cera
- Suspensión de sangre y levadura
- Suspensiones de aceites/grasas en solución acuosa, como:
 - Intralipid
 - Tinta india (India ink)
- Suspensiones de Intralipid y tinta india en agar, gelatina, agarosa y poliacrilamida (para crear estructuras en capas e inhomogeneidades)

La elección de agentes esparcidos en sólidos suele limitarse a microesferas de óxido de aluminio, dióxido de titanio y dióxido de silicio, poliéster, poliestireno o látex (Prahl, 2018).

- **Maniqués de piel que emulan las propiedades mecánicas (Prahl, 2018):** Los maniqués diseñados para emular las propiedades mecánicas de los tejidos imitan características como la elasticidad, rigidez y capacidad de deformación bajo presión.

Son fundamentales para simular la respuesta de los tejidos a fuerzas externas y se usan a menudo en pruebas de dispositivos médicos, como prótesis o implantes. Los materiales más comunes para este tipo de maniqués son (McGarry et al., 2020):

- Silicona
- Poliéster
- Criogeles de alcohol polivinílico (PVAc)
- Poliuretano
- Resina epóxica

2.3 Métodos experimentales, computacionales y combinados para la caracterización de los coeficientes ópticos de tejidos

El análisis del coeficiente de esparcimiento y absorción en imágenes se enfoca en el estudio de cómo la luz u otras formas de radiación se esparcen y son absorbidas en un medio, como son los tejidos biológicos o materiales artificiales como los maniqués de piel (Keiser, 2022) (Boudoux, 2017) . A continuación, se describen algunos de los principales métodos experimentales utilizados para determinar estos coeficientes, detallando sus principios, ventajas y desventajas:

- **Espectrofotometría UV-VIS** (Díaz et al., 2010): La espectrofotometría UV-visible es un método analítico utilizado para cuantificar la concentración de un compuesto en una solución. Se fundamenta en el principio de que las moléculas absorben radiación electromagnética, y que la cantidad de luz absorbida varía de manera lineal con la concentración del compuesto. Para realizar estas mediciones, se utiliza un espectrofotómetro, que permite seleccionar la longitud de onda de la luz que atraviesa la solución y medir la cantidad de luz absorbida por ella. La principal ventaja de esta técnica, yace en que es una técnica sencilla, no destructiva, económica y de fácil aprendizaje, que permite medir rápidamente concentraciones

en una amplia variedad de soluciones. Además de ello, no requiere equipos complejos y se puede utilizar en muchos laboratorios. Sin embargo, tiene limitaciones, ya que solo es útil para analizar sustancias que absorben luz en las regiones ultravioleta y visible del espectro, y solo puede medir concentraciones si la sustancia tiene un coeficiente de extinción molar conocido. Además, no es adecuada para muestras sólidas o gaseosas, y es sensible a cambios en temperatura y presión, por lo que es necesario mantener condiciones constantes para obtener resultados precisos (Cromtek, 2022).

- **SFDI (Spatial Frequency Domain Imaging)** (Tank et al., 2022): Es un método de obtención de imágenes ópticas no invasivas que utiliza luz modulada espacialmente para extraer información cuantitativa sobre las propiedades del tejido. Su amplio campo de visión, junto con su enfoque cuantitativo de las imágenes, la ha convertido en una modalidad de imágenes novedosa, con muchos casos de uso en ensayos preclínicos murinos. Su relevancia clínica en la práctica médica humana hasta ahora ha sido limitada, pero actualmente existen ensayos clínicos pendientes en su fase de reclutamiento para el uso de la tecnología. La principal ventaja de la SFDI es su enfoque cuantitativo del análisis de propiedades ópticas, que favorece los conocimientos numéricos sobre los cualitativos. Como ocurre con muchas tecnologías de imágenes ópticas, no es invasiva y no supone ningún riesgo significativo para el paciente (Applegate et al., 2020). Por otro lado, algunas de las limitaciones del SFDI incluye su profundidad limitada, que es un problema persistente en las imágenes ópticas. Las técnicas de procesamiento de imágenes de este método pueden resultar costosas y laboriosas en determinadas circunstancias, lo que reduce la gama factible de aplicaciones.
- **Tomografía Óptica Coherente (OCT)** (Huang et al., 1991): Esta técnica de imagenología óptica utiliza interferometría para obtener imágenes tridimensionales

de tejidos biológicos con resolución micrométrica. El análisis del contraste y la intensidad de las imágenes de OCT puede proporcionar información indirecta sobre el coeficiente de esparcimiento en tejidos. La OCT proporciona imágenes tridimensionales de alta resolución y es no destructiva, permitiendo estudiar la estructura interna de los tejidos sin dañarlos. Sin embargo, su medición indirecta de los coeficientes ópticos, basada en el análisis de contraste e intensidad, puede introducir incertidumbre, y su penetración en tejidos es limitada, especialmente en estructuras profundas.

- **Microscopía Confocal o de Campo Cercano** (Pawley, 2010): En la microscopía confocal o de campo cercano, se utilizan técnicas de imagen de alta resolución para estudiar la estructura y las propiedades ópticas de tejidos y materiales. Mediante el análisis del esparcimiento de la luz en diferentes partes de la muestra, se pueden derivar estimaciones del coeficiente de esparcimiento local. La microscopía óptica ofrece una resolución espacial muy alta, permitiendo un estudio detallado de las propiedades ópticas a nivel celular, especialmente para estimar el coeficiente de esparcimiento local. No obstante, se limita a muestras superficiales o delgadas y puede requerir preparación de la muestra, lo que podría alterar las propiedades ópticas.
- **Modelado Computacional** (Asllanaj et al., 2019): Se utilizan modelos matemáticos y simulaciones numéricas para predecir cómo la luz se esparce en medios complejos. Estos modelos pueden integrar información sobre la estructura del tejido y las propiedades ópticas conocidas para estimar el coeficiente de esparcimiento y compararlo con datos experimentales de imágenes. Dentro de estos modelos también se encuentran las redes neuronales para el análisis de diversas tareas. El modelado computacional tiene la ventaja de permitir una simulación flexible de diversos escenarios. No obstante, los resultados varían según los datos de entrada, y

una alta complejidad computacional, que requiere recursos y conocimientos avanzados para obtener resultados precisos.

- **Técnicas Combinadas: Medición Experimental y Modelado Numérico** (Roggan et al., 2006): Las técnicas combinadas integran un enfoque experimental detallado con modelado numérico, utilizando herramientas como *Monte Carlo Multi-Layered* (MCML), métodos de diferencias finitas (FDTD), métodos de elementos finitos (FEM), y redes neuronales. Esta combinación se emplea para caracterizar las propiedades ópticas de geles y tejidos biológicos. El proceso se divide en dos fases principales: en la primera, se obtienen datos experimentales a partir de mediciones ópticas, tales como reflectancia especular y difusa, así como transmitancia coherente y difusa. En la segunda fase, se utilizan simulaciones computacionales para interpretar estos datos y calcular los coeficientes ópticos fundamentales, como el coeficiente de absorción, el coeficiente de esparcimiento y el parámetro de anisotropía.

1. Obtención de Datos Experimentales. En la fase experimental, se emplean cuatro tipos clave de mediciones ópticas:

- ❖ **Reflectancia especular (R_{sp}):** Esta medición se obtiene al iluminar la muestra con luz coherente (como la luz de un láser) y medir la intensidad de la luz reflejada de manera especular, es decir, en el mismo ángulo de incidencia. La reflectancia especular proporciona información sobre la interacción superficial de la luz con el medio, y se usa para estimar la superficie del material y su comportamiento ante la luz incidente.
- ❖ **Reflectancia difusa (R_{cd}):** Se mide la luz que se refleja de manera difusa tras interactuar con la muestra. Esta medición es crucial para evaluar cómo

el medio esparce la luz a través de su estructura interna, proporcionando datos sobre su heterogeneidad y composición.

- ❖ **Transmitancia coherente (Tc):** Esta medición se refiere a la cantidad de luz que atraviesa el material o tejido sin que su fase se vea alterada significativamente. Es crucial para caracterizar la propagación de la luz a través del medio, ya que proporciona información directa sobre la atenuación de la luz en el material.
- ❖ **Transmitancia difusa (Tcd):** Mide la luz que atraviesa el medio, pero que se ha esparcido a lo largo de su recorrido. Esta medición es especialmente útil para estudiar el paso de la luz en medios turbios, como los tejidos biológicos, donde se produce un esparcimiento considerable.

Estas mediciones experimentales se realizan utilizando técnicas ópticas avanzadas, como espectrofotometría, esferas integradoras, sistemas de iluminación láser modulados y cámaras especializadas que captan tanto la luz transmitida como la reflejada. Estas técnicas permiten obtener datos precisos sobre cómo la luz interactúa con los materiales, cruciales para la estimación de los coeficientes ópticos.

2. Modelado Numérico: El modelado numérico es un paso crucial para interpretar los datos experimentales y simular cómo la luz interactúa con materiales biológicos complejos. Uno de los métodos más utilizados para esta simulación es el Método de Monte Carlo en Medios de Luz (MCML), el cual permite modelar la propagación de la luz a través de un medio esparcidor-absorbente, calculando las interacciones fotón-material.

Una vez obtenidos los datos experimentales de reflectancia y transmitancia, el MCML se emplea para simular cómo la luz se propaga a través del material bajo estudio. Estos datos

experimentales, que se obtienen mediante mediciones de reflectancia especular, reflectancia difusa, transmitancia coherente y transmitancia difusa, sirven como parámetros de entrada para la simulación. Aunque el MCML no predice directamente los coeficientes ópticos (como el coeficiente de absorción, el coeficiente de esparcimiento y el parámetro de anisotropía), permite estimarlos a partir de los datos experimentales mediante un proceso iterativo. Esto se logra ajustando los valores de los coeficientes ópticos simulados hasta que los resultados de la simulación coinciden con las mediciones experimentales. En otras palabras, el MCML ajusta y optimiza los coeficientes ópticos a través de un algoritmo de minimización de error, de modo que las simulaciones se alineen lo más posible con los datos experimentales obtenidos.

Aunque el MCML es ampliamente utilizado para este tipo de caracterización, existen otros métodos que pueden ser aplicados dependiendo de las características específicas del material. Sin embargo, el MCML se destaca en la simulación de tejidos biológicos y materiales con propiedades ópticas complejas, lo que lo hace especialmente útil para la caracterización de maniqués y tejidos simulados. Este es el método con el que inicialmente se caracterizaron los maniqués de piel de este estudio.

2.4 Método de sistema de esfera integradora simple

En (Terán et al., 2019) se presenta un método para determinar la reflectancia y transmitancia de medios turbios, utilizando un sistema de esfera integradora simple. Este enfoque no requiere el cálculo directo de los coeficientes de esparcimiento y absorción, sino que se enfoca en la medición directa de la reflectancia y transmitancia bajo diversas configuraciones de iluminación y detección. Al centrarse en la medición directa, este

método simplifica el proceso experimental y reduce la propagación de la incertidumbre, lo que resulta en mediciones más precisas.

El método distingue entre tres tipos de reflectancia y transmitancia, cada uno con una configuración de medición específica. La reflectancia difusa-difusa (R_d) se obtiene iluminando la muestra con luz difusa proveniente de las paredes de la esfera integradora y midiendo la luz reflejada de manera difusa. En el caso de la reflectancia direccional-difusa (R_{cd}), la muestra se ilumina directamente con un haz de luz colimado y se mide la luz reflejada de manera difusa. Finalmente, la transmitancia direccional-difusa (T_{cd}) se mide de manera similar a la reflectancia direccional-difusa, pero en este caso se registra la luz que atraviesa la muestra de forma difusa.

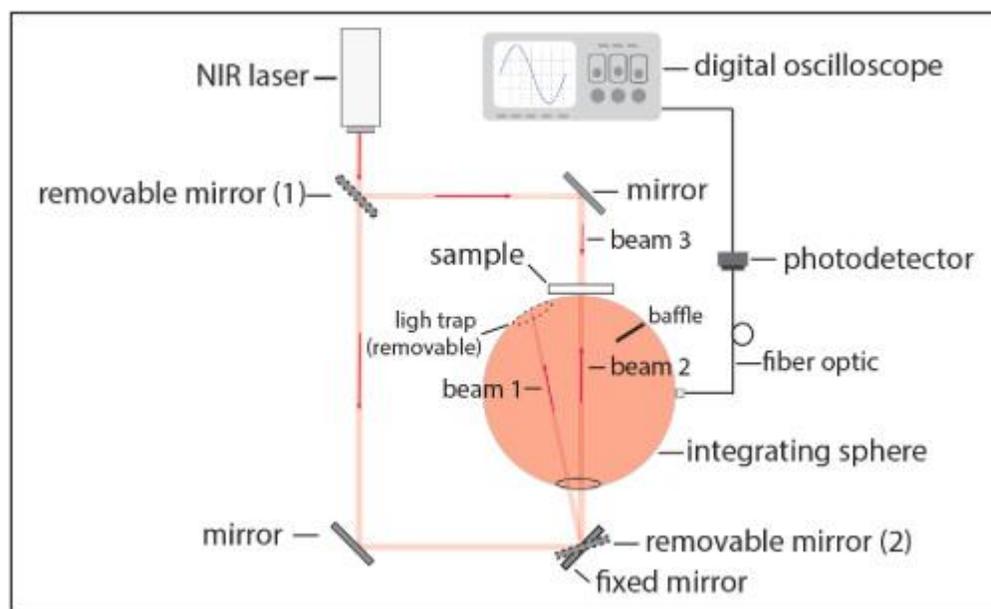


Figura 2.1: Ejemplo de un sistema de esfera integradora simple (Terán et al., 2019)

El método se basa en el uso de relaciones de potencia para calcular la reflectancia y la transmitancia. Estas relaciones aprovechan las mediciones de la potencia detectada en

distintas configuraciones de iluminación, lo que minimiza la propagación de la incertidumbre en los resultados. Por ejemplo, para la reflectancia difusa-difusa (R_d), el procedimiento incluye tres pasos:

1. Primero, se realiza una medición sin muestra, registrando la potencia detectada $P_d^{(\sigma)}$ cuando no hay ninguna muestra presente en el puerto de la esfera.
2. Luego, se coloca un estándar de reflectancia difusa conocida $R_d^{(std)}$ en el puerto de la esfera, y se mide la potencia detectada $P_d^{(std)}$ con este estándar.
3. Finalmente, se coloca la muestra en el puerto de la esfera y se registra la potencia detectada (P_d).

Con estas tres mediciones, es posible calcular la reflectancia difusa-difusa (R_d) de la muestra mediante una fórmula que solo involucra las relaciones entre las potencias detectadas y la reflectancia del estándar. Este mismo principio se aplica para calcular la reflectancia direccional-difusa (R_{cd}) y la transmitancia direccional-difusa (T_{cd}), utilizando las respectivas configuraciones de iluminación y los valores de potencia medidos.

En este trabajo, también se emplea el método Monte Carlo como una herramienta complementaria para validar los resultados experimentales obtenidos con el sistema de esfera integradora simple. El método Monte Carlo se utiliza para proporcionar valores de referencia para la reflectancia y la transmitancia direccional-difusa. Estas simulaciones teóricas permiten una comparación entre los resultados obtenidos experimentalmente y los valores calculados, asegurando la precisión de las mediciones realizadas con el sistema de esfera integradora.

2.4 Contexto y fundamento de las Redes Neuronales Artificiales

Las redes neuronales artificiales, en ciencias computacionales, son modelos de aprendizaje automático que intentan simular la forma en que las neuronas biológicas trabajan de forma conjunta para identificar fenómenos, situaciones, etc., con el fin de llegar a conclusiones y tomar decisiones.

2.4.1 Tipos de Neuronas

Neurona biológica

La unidad básica por la cual el cerebro trabaja es la neurona. Las neuronas transmiten señales eléctricas de un extremo a otro (Su-Hyun Han, 2018). Es decir, las señales eléctricas se transmiten desde las dendritas hasta las terminales del axón mediante el cuerpo del axón. De esta forma las señales eléctricas se continúan transmitiendo a través de la sinapsis de una neurona a otra. En la Figura 2.2, se puede apreciar la representación estructural de una neurona.

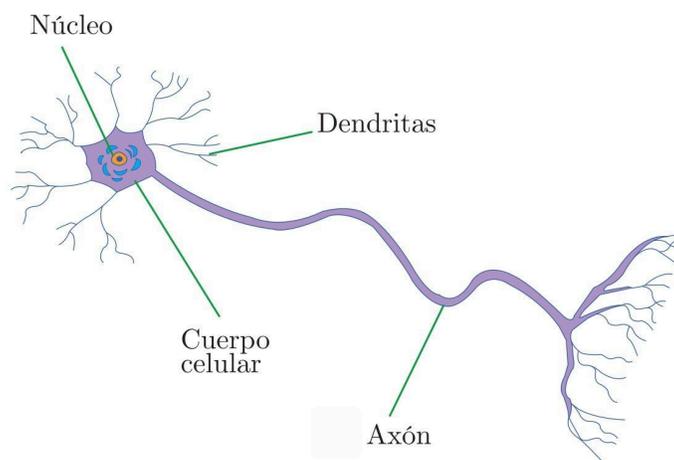


Figura 2.2: Estructura de una neurona biológica

Las transmisiones de señal de una neurona a otra en el proceso de la sinapsis involucran un proceso químico muy complejo en donde se liberan diferentes sustancias químicas transmisoras específicas llamadas neurotransmisores. El objetivo es aumentar o disminuir el potencial eléctrico dentro del cuerpo de la célula receptora, Si este potencial eléctrico alcanza un umbral, se envía un pulso al axón y la célula se llama “*Fired*” (Abraham, 2005).

Neurona Artificial

Las Redes Neuronales Artificiales (ANN) son modelos matemáticos que intentan simular la funcionalidad y estructura de las neuronas biológicas. El bloque básico que compone una red neuronal artificial es la neurona artificial o nodo, que se define como un modelo matemático también llamado función (Krenker, 2011). Los pasos de las sinapsis están representados por pesos de conexión que modulan el efecto de las señales de entrada asociadas, y la característica no lineal exhibida por las neuronas está representada por una función de transferencia. Luego, el impulso neuronal se calcula como la suma ponderada de las señales de entrada, transformadas por la función de transferencia. La capacidad de aprendizaje de una neurona artificial se logra ajustando los pesos de acuerdo con el algoritmo de aprendizaje elegido (Abraham, 2005). En la Figura 2.3 se ilustra la estructura básica de una neurona artificial. Donde se tiene un vector de entrada, que generalmente se representa como $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$. Los vectores de entrada son modificados por un peso sináptico cuyo papel es emular la sinapsis existente entre las neuronas biológicas. Cada neurona, cuenta con el parámetro “*bias*” el cual es el peso aleatorio que las redes neuronales aprenden y ajustan durante el proceso de aprendizaje (Krenker, 2011).

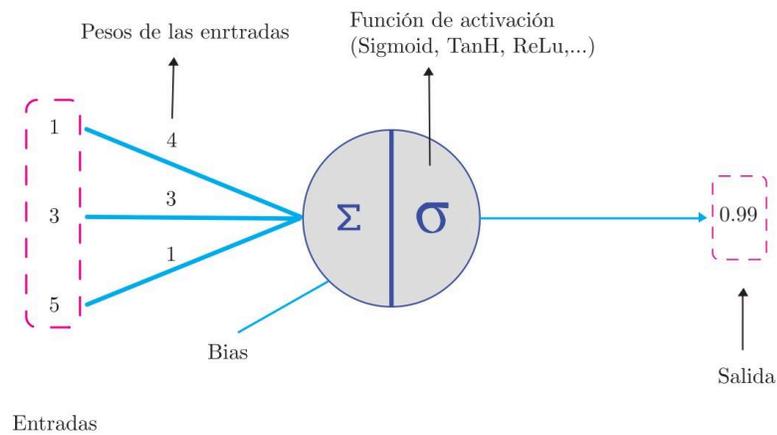


Figura 2.3: Estructura básica de una neurona artificial

El proceso de cálculo de una neurona se inicia con la pre-activación de las entradas, que se representa mediante Z , y que es la suma ponderada de las señales de entrada junto con el sesgo. Matemáticamente, la pre-activación Z se expresa como:

$$Z = W * X + b \quad (3)$$

Donde:

$W = [w_1, w_2, \dots, w_n]$ son los pesos asociadas a las entradas X .

$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ es el vector de entradas a las neuronas.

$b =$ es el sesgo o bias, uno parámetro adicional que ajusta la salida de la neurona independiente de las entradas.

Una vez calculada la pre-activación Z , esta pasa a través de una función de activación σ , la cual introduce la no linealidad en el modelo y permite a la red neuronal aprender

representaciones complejas de los datos. La salida de la neurona se calcula aplicando la función de activación σ sobre Z :

$$Sal = \sigma(Z) \quad (4)$$

Existen diferentes tipos de funciones de activación, las más comunes se enlistan a continuación:

- Función Sigmoide (Ding et al. 2018): La función sigmoide escala los valores entre 0 y 1, es usada generalmente en las capas de salida de las redes neuronales par la tarea de clasificación binaria y está dada por la siguiente fórmula:

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} \quad (5)$$

- Función Tanh (Ding et al. 2018): Tanh es la forma corta para la tangente hiperbólica, esta función escala los valores entre -1 y 1 y se expresa como sigue:

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{(e^x - e^{-x})}{(e^x + e^{-x})} \quad (6)$$

- Función ReLU (Rectified Linear Unit) (Ding et al. 2018): esta función lleva a cabo una operación de umbral no lineal, en donde, cualquier valor que sea inferior a 0 se establece en 0 de lo contrario la salida es igual a la entrada, y se define como:

$$f(x) = \max(0, x) \quad (7)$$

Las funciones de activación tienen como propósito principal agregar la no linealidad a las salidas, agregando este componente, se ayuda a las redes neuronales a identificar patrones que son complejos dentro de los datos (Rajan, 2020).

2.4.2 Tipos de redes neuronales

Aunque por sí solas las neuronas artificiales parecen ser simples, el potencial de cálculo y aprendizaje de estos modelos se pueden observar al interconectarse en lo que conocemos como redes neuronales artificiales (Abraham, 2005) y existen dos categorías principales de ellas, que se definen de acuerdo al tipo de conexiones que existen entre las neuronas, estas son: *las redes neuronales feed-forward* y *las redes neuronales recurrentes*.

Redes Neuronales Feed-forward

Es el tipo de red neuronal más utilizado dentro de las aplicaciones de aprendizaje automático, Se caracteriza por que la información fluye en una sola dirección. El proceso de predicción en una red neuronal feed-forward implica alimentar la red a través de la capa de entrada, posteriormente la información pasa a través de las capas ocultas y finalmente produce la salida mediante la capa de salida. Las redes neuronales feed-forward son utilizadas en una amplia variedad de aplicaciones de aprendizaje automático, incluyendo la clasificación de imágenes, el procesamiento del lenguaje natural, etc. (Gamco, 2021). En la Figura 2.4 se presenta la estructura básica de las redes neuronales feed-forward, la cual consta de tres componentes (Manjarrez, 2014).

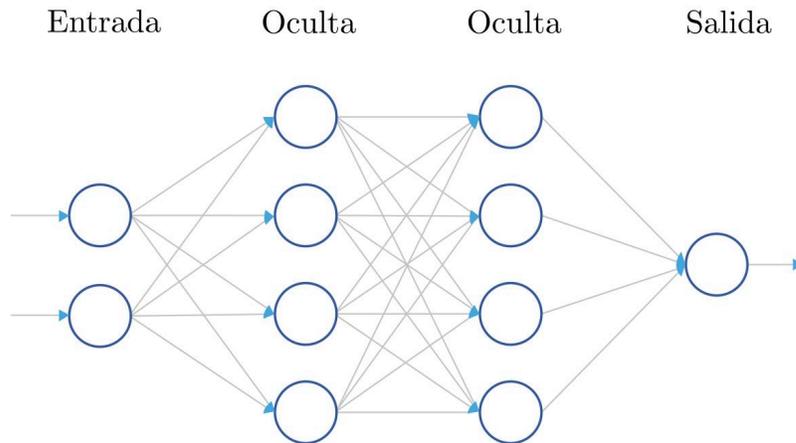


Figura 2.4: Estructura básica de las redes neuronales feed-forward

Estos componentes son:

- Capa de entrada: Son neuronas que reciben los datos de entradas, estas neuronas no cuentan con el componente del *bias*.
- Capas ocultas: Estas capas no tienen conexión directa con el entorno.
- Capa de salida: Son las neuronas que proporcionan la salida del aprendizaje.

Dentro de las redes neuronales feed-forward, el algoritmo de aprendizaje utilizado en este tipo de redes es el algoritmo de *back-propagation*. Este algoritmo se basa en actualizar los pesos de la red en función del error entre las salidas reales y las predicciones de la red, esto se hace de manera iterativa utilizando el descenso del gradiente y esto se lleva a cabo hasta que la red puede predecir correctamente las salidas deseadas (SAZLI, 2006).

Existen diferentes tipos de redes neuronales feed-forward, las cuales incluyen:

- Redes neuronales multicapa (MLP)
- Redes neuronales convolucionales (CNN)

- Redes Neuronales Residuales (ResNet)

Redes Neuronales Convolucionales (CNN)

Las redes neuronales convolucionales es un tipo de red neuronal artificial con aprendizaje supervisado, las cuales intentan imitar al córtex visual del ojo humano para identificar distintas características con el fin de identificar objetos (Goodfellow, 2016). Este tipo de redes neuronales contienen varias capas ocultas especializadas, en donde las primeras capas pueden detectar líneas, curvas y se van especializando hasta llegar a capas más profundas donde se reconocen formas más complejas.

Las redes neuronales convolucionales (CNN) están compuestas por tres tipos principales de capas:

- **Capa Convolutiva:** Esta es la capa fundamental en las CNN, donde se realizan la mayoría de las operaciones. Para su funcionamiento, se requieren varios componentes esenciales: los datos de entrada, el número de filtros, el tamaño del *kernel*, el *stride* y los mapas de activación (Aggarwal, 2018; Goodfellow, 2016). A continuación se describen estos componentes:
 - o **Datos de entrada:** Son los datos con los que se alimenta la red, generalmente imágenes, aunque también pueden ser otros tipos de datos estructurados.
 - o **Número de filtros:** Los filtros son los elementos clave en una CNN, encargados de extraer características relevantes de los datos de entrada. Cada filtro genera una "característica" en la salida, y el uso de más filtros permite a la red aprender una variedad más rica y diversa de características.

- o **Tamaño del kernel:** Se refiere al tamaño del filtro que recorre los datos de entrada durante la operación de convolución, determinando la cantidad de información que se captura en cada paso.
 - o **Stride:** El stride es la cantidad de píxeles que el filtro avanza, tanto horizontal como verticalmente, en cada paso de la convolución. Un *stride* mayor reduce la resolución de la salida, mientras que un stride más pequeño mantiene mayor resolución.
 - o **Mapas de activación:** Tras aplicar los filtros a los datos de entrada mediante la convolución, se generan los mapas de características, también llamados mapas de activación, que contienen la información extraída en cada paso de la operación.
- **Capa de Pooling:** Las capas de *pooling* se utilizan para reducir las dimensiones de los mapas de activación, ayudando a disminuir la complejidad computacional y la posibilidad de sobreajuste. Existen dos tipos principales de *pooling*:
 - o **Max-pooling:** Este tipo de pooling selecciona el valor máximo dentro de una ventana de la matriz del mapa de activación, lo que permite resaltar las características más prominentes de la entrada.
 - o **Average-pooling:** En este caso, se calcula el valor promedio de los elementos dentro de una ventana del mapa de activación, proporcionando una representación más suavizada de las características.
 - **Capa completamente conectada (*Fully Connected*, FC):** Las capas FC son responsables de la fase de clasificación en las redes neuronales. Después de que las capas anteriores han extraído las características relevantes de los datos de entrada, las capas FC utilizan estas características para tomar decisiones de clasificación,

conectando cada neurona a todas las neuronas de la capa anterior y realizando las combinaciones necesarias para obtener las salidas finales.

Existen diferentes arquitecturas de CNN, algunas de ellas son:

- AlexNet
- VGGNet
- GoogLeNet
- ResNet
- ZFNet
- UNet

El enfoque de este estudio es la arquitectura UNet, la cual será descrita con mayor detalle en las siguientes secciones.

U-Net

Como se mencionó previamente, la UNet es una arquitectura de red neuronal convolucional, está diseñada específicamente para tareas de segmentación semántica en imágenes biomédicas (Ronneberger, 2015). La estructura de la UNet se caracteriza por formar una “U”, tal como se puede apreciar en la Figura 2.5. La arquitectura de la UNet cuenta con dos principales componentes, el *encoder* y el *decoder* (Aramendia, 2024), los cuales se describen en la sección siguiente.

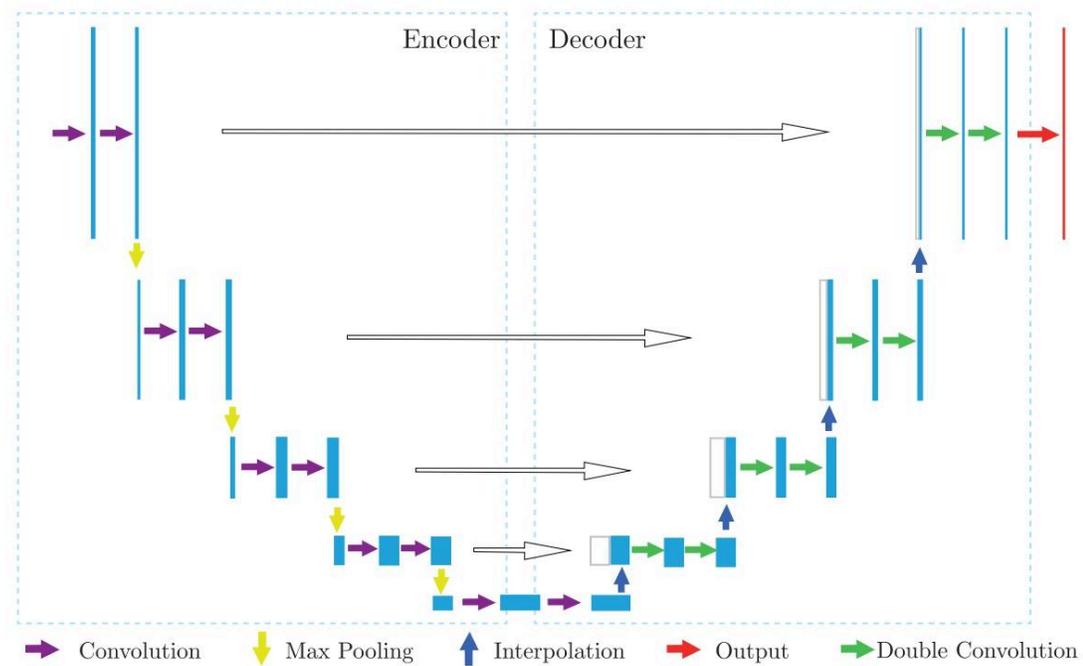


Figura 2.5: Estructura de una U-Net.

Arquitectura y Descripción Detallada de la U-Net

Para entender el funcionamiento detallado de la arquitectura U-Net, es esencial desglosar tanto su fase de contracción (*encoder*) como la de expansión (*decoder*). El *encoder* se encarga de extraer y aprender las características más relevantes de los datos de entrada mediante un proceso jerárquico de convolución y reducción de dimensiones, mientras que el *decoder* tiene como objetivo reconstruir la imagen original o generar una segmentación precisa a través de una serie de operaciones de convolución inversa y *upsampling* (Aramendia, 2024). A continuación, se describen los bloques clave de ambas partes de la red, destacando su estructura y función dentro de la U-Net.

El *encoder* está compuesto por varias capas convolucionales y de *pooling*, organizadas en cinco bloques principales, los cuales se describen a continuación y se encuentran en el lado izquierdo de la imagen:

- **Bloque 1:** Comienza con una imagen de entrada de un solo canal. Se aplican dos capas convolucionales de 3x3, seguidas de una capa ReLU, lo que incrementa el número de canales a 64, permitiendo la captura de características de alto nivel. Luego, se aplica una capa de max pooling de 2x2 para reducir las dimensiones.
- **Bloque 2:** En este bloque, se repiten las dos capas convolucionales de 3x3 seguidas de ReLU, pero el número de canales se duplica a 128 para extraer características más complejas. Posteriormente, se aplica otra capa de max pooling de 2x2, lo que sigue reduciendo las dimensiones espaciales.
- **Bloque 3:** Este bloque sigue el mismo procedimiento que los bloques anteriores, aplicando dos capas convolucionales de 3x3 y ReLU, seguidas de una capa de max pooling de 2x2.
- **Bloque 4:** Similar al bloque 3, con la misma estructura de capas convolucionales, ReLU y *max pooling*, pero con un número mayor de características.
- **Bloque 5:** En el último bloque del camino de contracción, el número de canales alcanza 1024, después de duplicarse en cada bloque anterior. Este bloque contiene dos capas convolucionales de 3x3 con ReLU. Una vez extraídas las características complejas, el mapa de características se transfiere al camino de expansión para reconstruir la imagen.

Una vez completado el Bloque 5, se inicia el camino de expansión o **decoder**. En esta parte de la arquitectura U-Net, que corresponde a la parte derecha de la Figura 2.5, se emplean tanto operaciones de convolución como de convolución inversa (o convolución transpuesta). Estas operaciones permiten combinar las características aprendidas en los

bloques de *decoder* y realizar un *upsampling* del mapa de características hasta generar un mapa de segmentación. El objetivo es reconstruir progresivamente la resolución espacial de la imagen, manteniendo las características detalladas necesarias para una segmentación precisa. Al igual que el encoder, el *decoder* consta de 5 bloques, que se describen a continuación, comenzando desde el bloque 5:

- **Bloque 5:** Se continúa desde la ruta contractiva, aplicando una segunda convolución de 3x3 seguida de una capa ReLU. Luego, se agrega una capa de convolución de 2x2 que realiza un *upsampling* de las dimensiones espaciales, duplicándolas y, al mismo tiempo, reduciendo el número de canales a 512.
- **Bloque 4:** Usando las conexiones skip, se concatena el mapa de características correspondiente de la ruta contractiva, duplicando el número de canales a 1024. Luego, se aplican dos capas de convolución de 3x3, cada una seguida de una capa ReLU, lo que reduce el número de canales a 512. Posteriormente, se aplica una capa de convolución de 2x2, realizando el *upsampling* de las dimensiones espaciales y reduciendo el número de canales a 256.
- **Bloque 3:** El procedimiento seguido en los bloques 5 y 4 se repite en este bloque.
- **Bloque 2:** Similar al bloque 3, se repite el proceso de convolución y *upsampling* para reducir las dimensiones espaciales y ajustar el número de canales.
- **Bloque 1:** En el último bloque del camino expansivo, después de concatenar la conexión skip, se obtienen 128 canales. A continuación, se aplican dos capas de convolución de 3x3 sobre el mapa de características, con capas ReLU intermedias que reducen el número de canales de características a 64. Finalmente, se aplica una capa de convolución 1x1, seguida de una capa de activación (sigmoide en caso de clasificación binaria), reduciendo el número de canales al número deseado de clases.

La U-Net es una arquitectura de red neuronal convolucional (CNN) altamente efectiva, especialmente en tareas de segmentación semántica, como las de la imagen médica. Su diseño simétrico, junto con las conexiones de salto (*skip connections*), le permite combinar de manera eficiente la información contextual de alto nivel y la información espacial detallada. Esto facilita la preservación de las características finas en las imágenes, lo que resulta crucial para obtener segmentaciones precisas y de alta resolución. La capacidad de la U-Net para reconstruir las imágenes mediante su camino expansivo, mientras mantiene la fidelidad espacial, la convierte en una herramienta poderosa y confiable en aplicaciones donde la exactitud y la resolución son esenciales.

2.4.3 Aplicaciones de U-Net en ciencias biomédicas

Gracias a su eficacia, la U-Net se ha utilizado ampliamente en diversas aplicaciones dentro de las ciencias biomédicas, especialmente en la segmentación semántica de imágenes médicas. A continuación, se presentan algunas de sus principales aplicaciones en este campo:

- Segmentación de órganos en imágenes de resonancia magnética (Ronneberger, 2015).
- Segmentación de lesiones en imágenes de tomografía computarizada (Milletari, 2016)
- Segmentación de tejidos en imágenes histológicas (Hussein, 2021).
- Segmentación de células en imágenes de microscopía (Kanadath, 2021).

CAPÍTULO 3: METODOLOGÍA

En este capítulo se presenta de manera detallada la metodología propuesta para la predicción del coeficiente de esparcimiento. Esta metodología abarca desde la recopilación y generación de una base de datos compuesta por imágenes de diversas muestras, hasta el diseño e implementación de la arquitectura de la red neuronal que se emplea para llevar a cabo la predicción.

3.1 Fabricación y caracterización de Maniqués de Piel

La fabricación y caracterización de los maniqués de piel se llevó a cabo utilizando una base de silicona con dióxido de titanio (TiO_2) en diversas concentraciones, lo que permite variar sus propiedades ópticas. Además, algunos de estos maniqués fueron mezclados con café liofilizado para que funcionara como agente absorbente. Las concentraciones de TiO_2 y los tipos de tinte aplicados varían entre los distintos maniqués, lo que influye en sus características físicas. Las muestras utilizadas para este trabajo se encuentran en la Figura 3.2. La caracterización de estos maniqués se realizó siguiendo los procedimientos detallados del método combinado descrito en la sección 2.3.

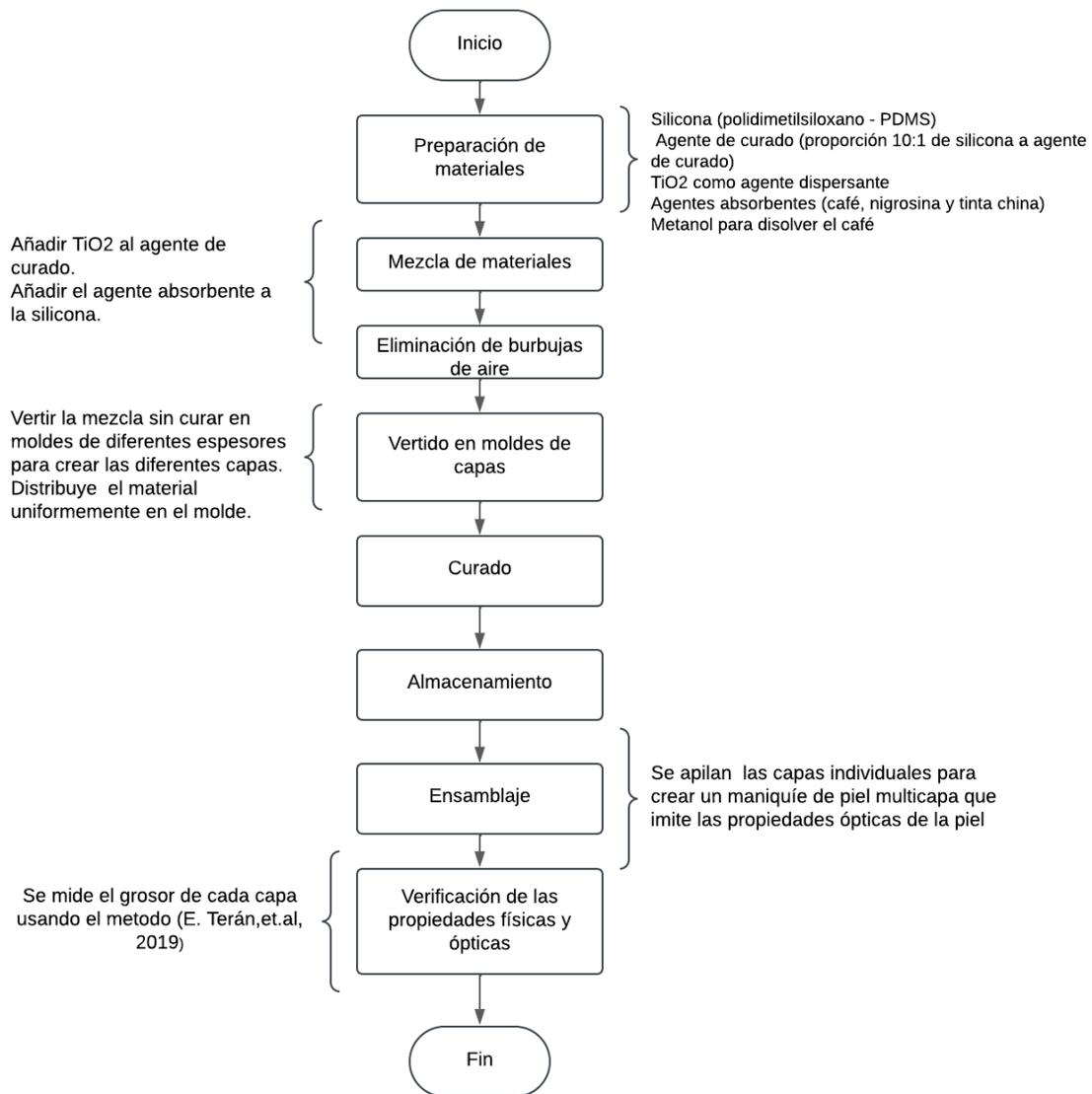


Figura 3.1: Fabricación y caracterización de Maniqués de Piel



Figura 3.2: Maniqués de piel con diferentes concentrados de TiO_2 y café liofilizado

Los resultados de estas pruebas se presentan en las tablas siguientes, donde se especifican sus valores correspondientes a cada parámetro medido, que en lo sucesivo, llamaremos “valores reales”.

sample	Rcd	Tcd	Tc	Rsp	Abs
0.02g TiO_2	0.198 (0.195 / 0.200)	0.410 (0.409 / 0.412)	0.012 (0.010 / 0.015)	0.022 (0.022 / 0.022)	0.358 (0.364 / 0.351)
0.04g TiO_2	0.350 (0.348 / 0.352)	0.331 (0.329 / 0.332)	0.002 (0.000 / 0.003)	0.022 (0.022 / 0.024)	0.296 (0.301 / 0.289)
0.06g TiO_2	0.407 (0.405 / 0.410)	0.359 (0.355 / 0.362)	0.002 (0.000 / 0.003)	0.022 (0.020 / 0.024)	0.210 (0.220 / 0.201)
0.08g TiO_2	0.505 (0.503 / 0.506)	0.315 (0.313 / 0.318)	0.027 (0.000 / 0.099)	0.044 (0.017 / 0.117)	0.108 (0.167 / -0.040)
0.1g TiO_2	0.537 (0.533 / 0.540)	0.297 (0.295 / 0.299)	0.000 (0.000 / 0.002)	0.023 (0.020 / 0.027)	0.143 (0.152 / 0.132)
0.02g TiO_2 +	0.215 (0.213 / 0.216)	0.433 (0.428 / 0.437)	0.002 (0.000 / 0.003)	0.018 (0.015 / 0.020)	0.332 (0.344 / 0.324)

0.006g café					
0.04g TiO ₂ + 0.008 g café	0.265 (0.263 / 0.270)	0.296 (0.283 / 0.307)	0.000 (0.000 / 0.002)	0.016 (0.015 / 0.017)	0.423 (0.440 / 0.404)
0.06g TiO ₂ + 0.01g café	0.506 (0.376 / 0.895)	0.304 (0.225 / 0.541)	0.001 (0.000 / 0.002)	0.014 (0.014 / 0.015)	0.175 (0.386 / -0.453)
0.08g TiO ₂ + 0.012g café	0.494 (0.493 / 0.497)	0.255 (0.251 / 0.262)	0.000 (0.000 / 0.002)	0.016 (0.013 / 0.017)	0.235 (0.243 / 0.223)
0.1g TiO ₂ + 0.012g café	0.561 (0.558 / 0.563)	0.159 (0.156 / 0.162)	0.002 (0.000 / 0.003)	0.020 (0.013 / 0.017)	0.258 (0.273 / 0.254)

Tabla 3.1: Propiedades ópticas de los maniqués de piel 1

sample	d (cm)	mua (cm⁻¹)	mus (cm⁻¹)	g (-)
0.02g TiO ₂	0.36	0.627 (CI 95%: 0.589, 0.665)	18.369 (CI 95%: 18.331, 18.407)	0.773 (CI 95%: 0.767, 0.779)
0.04g TiO ₂	0.36	0.278 (CI 95%: 0.270, 0.285)	18.806 (CI 95%: 18.798, 18.813)	0.666 (CI 95%: 0.664, 0.668)
0.06g TiO ₂	0.342	0.205 (CI 95%: 0.194, 0.217)	19.941 (CI 95%: 19.930, 19.952)	0.637 (CI 95%: 0.636, 0.638)
0.08g TiO ₂	0.342	0.118 (CI 95%: 0.118, 0.119)	11.227 (CI 95%: 11.227, 11.227)	0.086 (CI 95%: 0.084, 0.088)
0.1g TiO ₂	0.341	0.113 (CI 95%: 0.110, 0.116)	22.727 (CI 95%: 22.724, 22.729)	0.454 (CI 95%: 0.453, 0.455)
0.02g TiO ₂ + 0.006g café	0.32	0.388 (CI 95%: 0.384, 0.392)	18.836 (CI 95%: 18.833, 18.840)	0.830 (CI 95%: 0.829, 0.830)

0.04g TiO ₂ + 0.008 g café	0.326	0.502 (CI 95%: 0.495, 0.508)	23.002 (CI 95%: 22.995, 23.008)	0.748 (CI 95%: 0.747, 0.748)
0.06g TiO ₂ + 0.01g café	0.326	0.142 (CI 95%: 0.139, 0.145)	21.539 (CI 95%: 21.536, 21.542)	0.458 (CI 95%: 0.457, 0.459)
0.08g TiO ₂ + 0.012g café	0.376	0.213 (CI 95%: 0.211, 0.214)	23.588 (CI 95%: 23.586, 23.589)	0.442 (CI 95%: 0.441, 0.444)
0.1g TiO ₂ + 0.012g café	0.397	0.214 (CI 95%: 0.203, 0.225)	17.586 (CI 95%: 17.575, 17.597)	0.014 (CI 95%: 0.008, 0.020)

Tabla 3.2: Propiedades ópticas de los maniqués de piel 2

3.2 Diseño Experimental e Impresión del modelo 3D

3.2.1 Variables

- Variable Independiente: Concentración de TiO₂ y café liofilizado en las muestras. Aquí se definen diferentes maniqués de piel, los cuales son: 0.1g, 0.020g, 0.040g, 0.060g y 0.080g, con y sin tinte café (0.006g - 0.012g).
- Variable Dependiente: Imágenes obtenidas de los maniqués de piel con diferentes concentrados de TiO₂.
- Variables de Control: Iluminación, posición y altura de la cámara, configuración del hardware.

3.2.2 Muestras

Se utilizó el mismo tipo de silicona base para todas las pruebas con el fin de mantener la uniformidad en las condiciones experimentales y asegurar que cualquier variación observada en los resultados se deba exclusivamente a los diferentes concentrados de TiO₂,

así como al error intrínseco de la fabricación humana. Para cada uno de los maniqués de piel, se ha planificado capturar un total de cinco mil imágenes. Este número de imágenes por maniquí ha sido seleccionado con el objetivo de proporcionar una representación estadísticamente significativa de los datos, permitiendo un análisis robusto de las posibles variaciones y su relación con los factores experimentales.

3.2.3 Configuración del equipo

Raspberry Pi: Para la implementación del proyecto, se utilizó una Raspberry Pi 4 Model B, cuya configuración técnica se detalla a continuación:

- **Modelo:** Raspberry Pi 4 Model B Rev 1.5
- **Hardware:** BCM2835
- **Número de Procesadores:** 4 (quad-core)

Las especificaciones del procesador son las siguientes:

Arquitectura: ARMv8

Implementador de CPU: 0x41 (ARM)

Características:

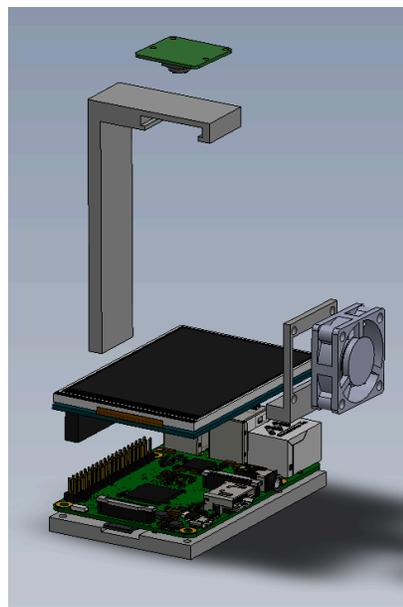
- Soporte para operaciones de punto flotante (fp)
- Asimetría de instrucciones (asimd)
- Soporte para streaming de eventos (evtstrm)
- Soporte para CRC32
- Identificación del procesador (cpuid)

Cámara: La Raspberry Pi cuenta con una cámara de 5 megapíxeles, lanzada originalmente en 2013¹, diseñada específicamente para su uso con esta plataforma. Ofrece una resolución de 5 megapíxeles, lo que permite la captura de imágenes nítidas y detalladas. La cámara se

¹ <https://www.raspberrypi.com/documentation/accessories/camera.html>

conecta a través del puerto CSI (Camera Serial Interface), lo que garantiza una transmisión de datos rápida y eficiente. Es compatible con formatos de imagen como JPEG y PNG y soporta grabación de vídeo a 1080p a 30 fps, 720p a 60 fps y 640x480 a 90 fps, lo que la hace adecuada para aplicaciones de vídeo en tiempo real. Su fácil integración en diversos proyectos y aplicaciones, desde sistemas de vigilancia hasta robótica y automatización, ha contribuido a su popularidad.

Prototipo 3D: Se implementó un prototipo de impresión 3D funcional (Chiu Coutiño, 2024) para el sistema de captura de imágenes, en este sistema la cámara se ajusta en la base del modelo, sobre el centro del display de la raspberry, y con ello se capturan las imágenes de los diferentes maniqués de piel. En la Figura 3.3, se puede apreciar el modelo en 3D y el prototipo funcional.



(a)



(b)

Figura 3.3: a) Planos de impresión 3D y simulación de componentes físicos b) Prototipo funcional del sistema de captura de imágenes

3.2.4 Configuración del entorno

Para la configuración del entorno de captura de imágenes, se habilitó un espacio especialmente diseñado para asegurar la total ausencia de luz de cualquier fuente externa, permitiendo que la única iluminación provenga del display durante todo el proceso. La cámara, conectada al ordenador monoplaca, fue posicionada de manera fija y estable, asegurando una captura consistente desde una distancia y un ángulo predeterminado desde el diseño del prototipo 3D. Antes de iniciar la captura de las imágenes, se llevaron a cabo pruebas de calibración para confirmar el funcionamiento adecuado del sistema y la cámara. Los parámetros de exposición e iluminación fueron ajustados de manera precisa, según las necesidades de cada prueba, con el fin de optimizar la calidad de las imágenes y asegurar que todas las muestras fueran capturadas con la misma claridad y detalle.

3.3 Programación del Raspberry Pi

Una vez adaptado el arreglo experimental y configurado el entorno físico de captura, se procedió a instalar el software adecuado en la Raspberry Pi (seleccionado con el fin de maximizar la compatibilidad de la cámara a utilizar). En primer lugar, se configuraron los permisos necesarios para garantizar el correcto funcionamiento del sistema, y se asociaron las direcciones IP de trabajo, lo que permitió establecer una comunicación eficiente entre los dispositivos involucrados. Posteriormente, se verificaron los puertos y se realizaron pruebas preliminares con la cámara para asegurar su funcionamiento óptimo en el entorno experimental.

A continuación, se instalaron los controladores necesarios para el display, seguido de pruebas de intensidad de luz para garantizar que los niveles de iluminación fueran adecuados y consistentes durante la captura de las imágenes. También se verificó la

respuesta del sistema en términos de tiempo de reacción y se realizó una configuración detallada de las rutas de almacenamiento y memoria para asegurar la organización y el acceso adecuado a los datos generados.

Con el entorno completamente configurado, se implementó un sistema automatizado en Python para manejar las imágenes de acuerdo con el diseño experimental. El algoritmo desarrollado permitió la captura secuencial de las imágenes, reduciendo el riesgo de errores manuales y garantizando una captura consistente y eficiente. Además, el uso de este algoritmo facilitó la programación de intervalos de captura, el ajuste automático de parámetros como la exposición y el enfoque, así como la organización de las imágenes en carpetas específicas, de acuerdo con el concentrado de TiO_2 utilizado. El diagrama de flujo correspondiente se puede visualizar en la Figura 3.4.

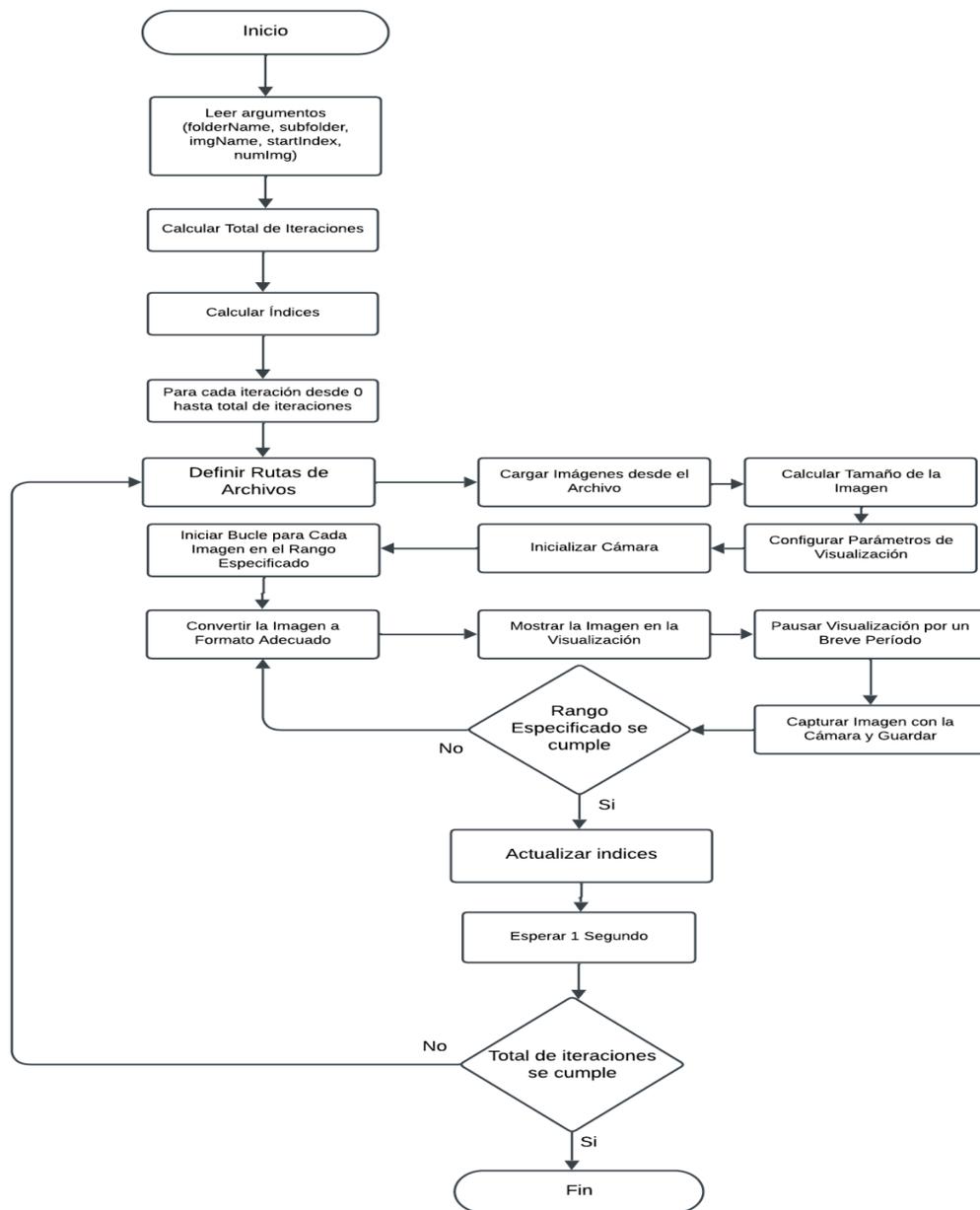


Figura 3.4: Diagrama de Flujo del código para la toma de imágenes mediante la Raspberry Pi4.

3.4 Generación de Imágenes

Las imágenes se capturaron con una resolución de 512 x 512 píxeles, seleccionada para proporcionar un equilibrio óptimo entre la calidad de los detalles visualizados y el tamaño

manejable de los archivos. En redes neuronales, esta resolución resulta ideal para reducir las dimensiones de las imágenes durante el preprocesamiento, en caso de que sea necesario realizar ajustes o recortes, sin sacrificar la capacidad de identificar adecuadamente las características del esparcimiento. Con el fin de facilitar el análisis y la gestión de los datos, las imágenes se organizaron en carpetas separadas según el concentrado de TiO_2 por esparcido, lo que asegura una diferenciación clara y una identificación rápida durante el proceso de análisis. Esta estructura de carpetas favorece una organización eficiente, permitiendo un acceso ágil a las imágenes correspondientes a cada nivel de esparcimiento.

Las imágenes se almacenaron en formato JPG, conocido por su eficiente compresión y su capacidad para mantener una calidad visual adecuada sin una pérdida significativa de detalles. La elección de este formato también se basó en su capacidad para manejar grandes volúmenes de datos de imágenes, lo cual facilita tanto el almacenamiento como la gestión. En la Figura 3.5 se presentan pruebas preliminares de las imágenes capturadas de diferentes maniqués de piel sin realizar aún la proyección de patrones a través de ellos.

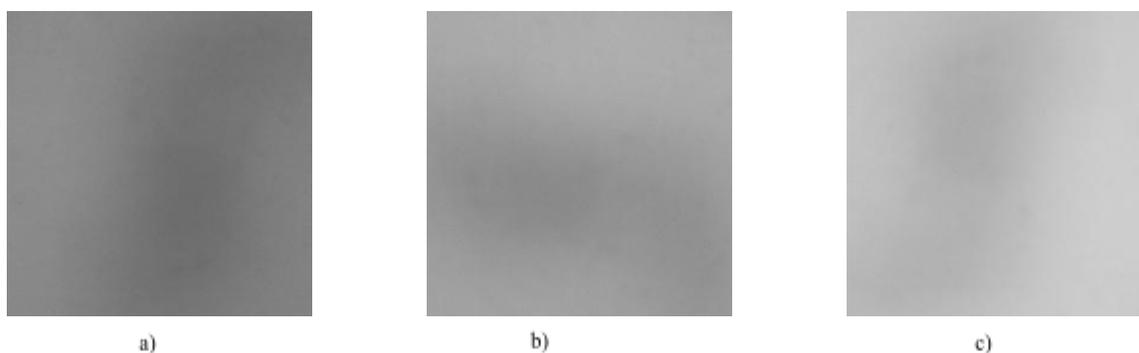


Figura 3.5: a) Imagen del maniquí de 0.060 g TiO_2 , b) Imagen del maniquí de 0.040g TiO_2 , c) Imagen del maniquí de 0.020 g TiO_2

3.5 Preprocesamiento de los Datos

Como se mencionó anteriormente, para esta investigación se creó una base de datos personalizada, compuesta por diez clases, cada una, con cinco patrones de imágenes diferentes: patrones de Hadamard, de líneas, de puntos, de números y de cebras. Estos patrones se muestran en la Figura 3.6. De las diez clases, cinco corresponden a maniqués de piel con distintos concentrados de TiO_2 , mientras que las otras cinco corresponden a maniqués de piel con concentrados de TiO_2 y tinte café. Las estadísticas del conjunto de datos utilizado para el entrenamiento y la prueba de nuestro modelo propuesto se presentan en la Tabla 4.1.

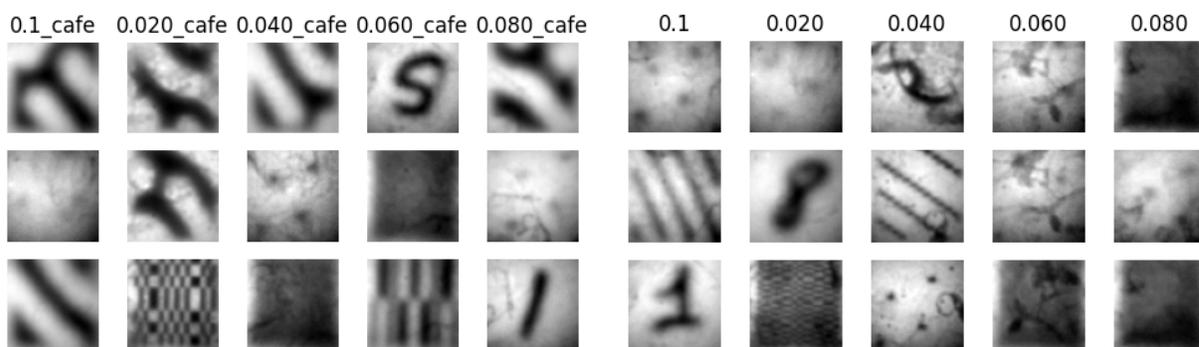


Figura 3.6: Ejemplo de los cinco patrones utilizados para la creación del conjunto de datos

Clase	Número de Imágenes Usadas	Número de Imágenes de entrenamiento	Número de imágenes de Prueba	Número de imágenes de validación
0.1g TiO_2	5000	3500	525	525
0.1g TiO_2 + 0.014g café	5000	3500	525	525

0.020g TiO ₂	5000	3500	525	525
0.020g TiO ₂ + 0.006g cafe	5000	3500	525	525
0.040g TiO ₂	5000	3500	525	525
0.040g TiO ₂ + 0.008g cafe	5000	3500	525	525
0.060g TiO ₂	5000	3500	525	525
0.060g TiO ₂ + 0.01g cafe	5000	3500	525	525
0.080g TiO ₂	5000	3500	525	525
0.080g TiO ₂ + 0.012g café	5000	3500	525	525

Tabla 3.2: Estadísticas del conjunto de datos

Antes de realizar la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción con la arquitectura U-Net, se llevó a cabo un preprocesamiento de las imágenes en nuestro conjunto de datos, con el objetivo de optimizar los recursos disponibles y mejorar el análisis de las imágenes. Este preprocesamiento consistió en tres pasos clave, que se describen a continuación:

1. **Conversión a escala de grises:** Todas las imágenes, tanto las que no contenían tinte café como las teñidas, fueron convertidas a escala de grises para simplificar el análisis y eliminar variaciones innecesarias en la colorimetría.
2. **Redimensionamiento de las imágenes:** Las imágenes fueron redimensionadas a 64 x 64 píxeles, ya que su tamaño original excedía la capacidad de procesamiento disponible en Google Colab, lo que podría afectar la eficiencia del modelo.
3. **Conversión a formato U-Byte:** Las imágenes se transformaron a formato U-Byte para reducir el espacio de almacenamiento y disminuir el coste computacional asociado con la manipulación de las imágenes en la red neuronal.

3.6 Método para la predicción del coeficiente de esparcimiento y absorción

De manera general, el modelo propuesto se fundamenta en la aplicación de la arquitectura U-Net, utilizada principalmente para la predicción del coeficiente de esparcimiento y, de forma secundaria, para la predicción del coeficiente de absorción, aplicable a ambos grupos de imágenes (Con tinte y sin tinte). Como se mencionó en capítulos anteriores, la U-Net es una arquitectura de red neuronal especialmente diseñada para el análisis de imágenes biomédicas, destacándose por su capacidad para segmentar y procesar imágenes de manera precisa.

3.6.1 Arquitectura propuesta

Existen diversas arquitecturas para abordar tareas de clasificación y regresión en imágenes, sin embargo, para el análisis de imágenes biomédicas, destaca una arquitectura especialmente diseñada para este propósito: la red neuronal U-Net. Esta arquitectura sobresale por su capacidad para procesar eficientemente datos limitados, lo que la convierte en una opción idónea para aplicaciones en este contexto.

En el marco de esta investigación, se implementó una adaptación de la arquitectura U-Net, focalizada en la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción. En lugar de utilizar la U-Net convencional en su totalidad, se ha adaptado para aprovechar únicamente la parte de *encoder* de la red, encargada de extraer las características esenciales de las imágenes. El *decoder*, por su parte, es reemplazado por un enfoque orientado a **regresión multivariable**² lo que permite obtener las predicciones de los coeficientes en un rango

² La regresión multivariada es un enfoque estadístico que se emplea para evaluar la relación lineal entre múltiples variables independientes (predictores) y varias variables dependientes (respuestas). Este método permite modelar y entender cómo los cambios en las variables predictoras afectan simultáneamente a las

tolerable. Además, se incorpora la regularización L2 para mitigar el riesgo de sobreajuste, mejorando así la capacidad generalizadora del modelo. Esta modificación proporciona una solución más adecuada para el tipo de datos y objetivos de este estudio.. A continuación, se describe la arquitectura paso a paso, la cual sigue el esquema clásico de la U-Net con capas de contracción y expansión, pero con una capa densa final que produce valores numéricos para una tarea de regresión:

1. La arquitectura comienza con dos capas convolucionales que tienen como objetivo extraer características de alto nivel a partir de las entradas de datos. La definición de las capas es la siguiente:
 - a. **Número de Filtros:** Ambas capas utilizan 256 filtros, lo que permite a la red aprender una representación robusta de los datos.
 - b. **Tamaño del Kernel:** Se utiliza un kernel de tamaño 3x3 para la convolución, que es efectivo para capturar patrones locales.
 - c. **Activación:** La función de activación empleada es ReLU (Rectified Linear Unit), que introduce no linealidades en el modelo y ayuda a manejar representaciones complejas.
 - d. **Padding:** El padding es de tipo same, lo que asegura que la salida de cada capa convolucional tenga el mismo tamaño que su entrada.

2. Una vez que las características han sido extraídas por las capas convolucionales, se aplanan para ser utilizadas en las capas densas. La capa *Flatten* convierte la salida tridimensional de las capas convolucionales en un vector unidimensional. Esto permite que los datos sean procesados por las capas densas.

respuestas, proporcionando una visión más completa y precisa de las interdependencias en contextos complejos.

3. Las capas densas (o totalmente conectadas) procesan el vector aplanado y realizan la clasificación o regresión según sea el caso. La arquitectura de estas capas es la siguiente:
 - a. **Número de neuronas:** Se utilizan dos capas densas con 256 neuronas cada una.
 - b. **Activación:** Ambas capas densas emplean la función de activación ReLU, que permite al modelo capturar y aprender representaciones no lineales.
 - c. **Dropout:** Se aplica una capa de Dropout con una tasa del 50% después de la segunda capa densa. Esto ayuda a prevenir el sobreajuste al regularizar la red, evitando que se vuelva demasiado dependiente de cualquier característica específica durante el entrenamiento.
 - d. **Capa de Salida:** La capa final es una capa densa con una sola neurona y una activación lineal, adecuada para tareas de regresión. Para tareas de clasificación, esta capa se cambia a softmax según el número de clases.

En resumen, se enlistan las principales características del diseño:

- Todas las imágenes fueron normalizadas y convertidas a escala de grises
- La arquitectura se entrena con la función objetivo *mean_squared_error*, con lotes de 32 instancias y 100 épocas.
- El desarrollo se llevó a cabo en el lenguaje Python 3.6, empleando la framework de KERAS³.

³ <https://keras.io/api/>

3.6.2 Métricas de Evaluación

Para la evaluación de los diferentes algoritmos de aprendizaje, se utilizan diversas métricas que permiten medir su desempeño según la tarea específica. En el caso de la tarea de regresión, las métricas más comunes son el error cuadrático medio (MSE) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE), que se describen posteriormente. Cada una de estas métricas proporciona información valiosa sobre la precisión del modelo en función del tipo de error que se desea minimizar.

Error Cuadrático Medio

El **Error Cuadrático Medio**, es una métrica utilizada para evaluar la calidad de un modelo de regresión. Mide la diferencia promedio al cuadrado, entre los valores predichos por el modelo y los valores verdaderos. Es ampliamente utilizada para la evaluación de modelos de regresión debido a su sensibilidad a los errores grandes. Esta métrica está definida por la siguiente ecuación:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

Donde:

- n es el número total de muestras.
- y_i es el valor verdadero para la i -ésima muestra.
- \hat{y}_i es el valor predicho por el modelo para la i -ésima muestra.
- $(y_i - \hat{y}_i)^2$ es el error al cuadrado para la i -ésima muestra

Raíz del error Cuadrático Medio

El **Error Cuadrático Medio de la Raíz** es una métrica que evalúa el rendimiento de un modelo de regresión. Proporciona una medida de la magnitud de los errores en las

predicciones, y se expresa en las mismas unidades que los datos originales, lo que facilita la interpretación. La fórmula para calcular el RMSE es:

$$RMSE = \sqrt{MSE} \quad (9)$$

Donde:

- **MSE** es el Error Cuadrático Medio

En el caso de la tarea de regresión, las métricas del MSE (Error Cuadrático Medio) y el RMSE (Raíz del Error Cuadrático Medio) se interpretan: Un valor cercano a 0 indica que las predicciones del modelo están bastante cerca de los valores verdaderos y sugiere que el modelo tiene un buen entrenamiento y ajuste.

Discusión

La arquitectura U-Net, aunque originalmente diseñada para la segmentación de imágenes médicas, ha demostrado ser altamente adaptable a una variedad de tareas de análisis de imágenes más allá de su propósito inicial. Su estructura en forma de U, que permite la captura de detalles espaciales a través de la combinación de capas de contracción y expansión, ha sido fundamental no solo en la segmentación precisa de imágenes complejas, sino también en la extracción de características relevantes en problemas de regresión, como es el caso del análisis de los coeficientes de esparcimiento y absorción. Esta capacidad de adaptación a tareas de regresión ha sido clave para abordar los objetivos de este estudio, donde la U-Net ha sido utilizada para predecir valores específicos en lugar de realizar segmentaciones, un enfoque innovador que demuestra la flexibilidad de la red.

El coeficiente de absorción y de esparcimiento, en particular, son unas métricas críticas para caracterizar tejido biológico o sintético. Si bien se han utilizado diversos métodos para estimar estos coeficientes, como técnicas basadas en Monte Carlo o análisis de textura, la

U-Net ha mostrado una capacidad única para integrar información espacial y contextual, lo que ha permitido obtener predicciones aceptables incluso con datos limitados.

Sin embargo, este enfoque presenta ciertos desafíos y restricciones. La adaptación de la U-Net para tareas de regresión exige modificaciones manuales específicas en la arquitectura, las cuales suelen implicar un proceso de ajuste iterativo de *prueba y error*. En este estudio, se empleó regularización L2 para reducir el sobreajuste, pero el modelo podría beneficiarse aún más con una exploración profunda de técnicas de optimización y ajustes adicionales en la arquitectura. Además, a pesar de la efectividad de la U-Net en este contexto, es crucial reconocer que el rendimiento de la red depende en gran medida de la calidad y cantidad de los datos de entrenamiento, lo que constituye una limitación frecuente en los problemas de aprendizaje automático.

Comparado con otros enfoques de regresión, como los basados en redes neuronales tradicionales o modelos de regresión más simples, la U-Net proporciona una ventaja significativa al capturar información espacial de manera más detallada. No obstante, la complejidad computacional de la U-Net podría ser un inconveniente en escenarios con recursos limitados, por lo que futuros estudios podrían explorar métodos para mejorar la eficiencia del modelo, o la implementación de GPU, sin sacrificar su precisión o un tiempo muy prolongado de ejecución.

En conclusión, la flexibilidad de la arquitectura U-Net en este estudio resalta su potencial para ser aplicada en una amplia variedad de tareas de análisis de imágenes, más allá de su aplicación original en la segmentación. Los resultados obtenidos son prometedores, pero también abren el camino para investigaciones adicionales que optimicen el modelo y exploren otras aplicaciones posibles en el análisis biomédico y otras disciplinas.

CAPÍTULO 4: EXPERIMENTOS Y RESULTADOS

En el presente capítulo se detallan los experimentos realizados para evaluar el modelo propuesto y los resultados obtenidos en relación con el coeficiente de esparcimiento y absorción. Además, se realiza una comparación entre la arquitectura propuesta y otros métodos de aprendizaje, seguida de un análisis exhaustivo de los resultados obtenidos.

Partiendo de las propiedades ópticas descritas en el capítulo anterior, se llevó a cabo un análisis de correlación para cada concentrado de TiO_2 en relación con el coeficiente de esparcimiento, cuyos resultados se presentan a continuación.

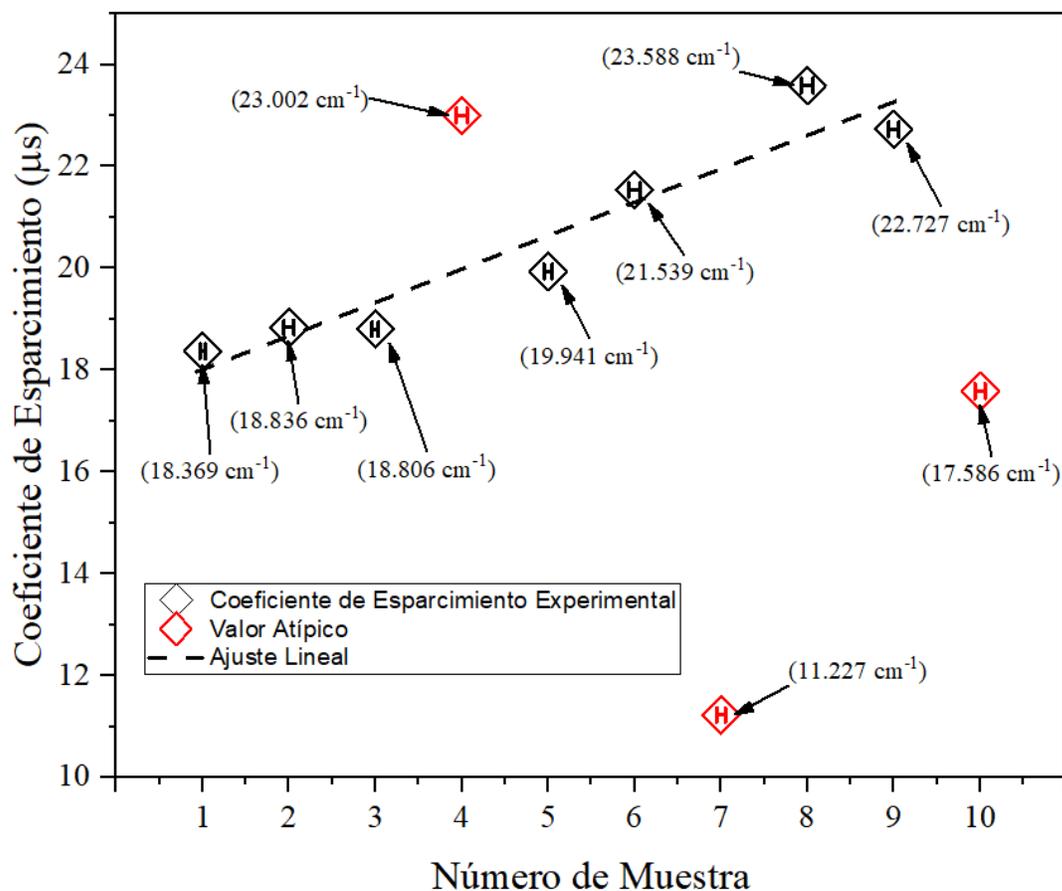


Figura 4.1: Dependencia del coeficiente de esparcimiento respecto al concentrado de TiO₂, el método utilizado para medir el coeficiente de esparcimiento se encuentra descrito en la sección 2.3 propuesto por (Terán et al., 2019)

De acuerdo con (Usenko et al., 2023,) existe una relación lineal entre la concentración de partículas esparcidoras (TiO₂) y el coeficiente de esparcimiento. Como se observa en la Figura 4.1, en las muestras sobre las cuales se realizó este trabajo, existe una relación entre los concentrados de TiO₂ y el coeficiente de esparcimiento de las muestras. Sin embargo, los datos correspondientes a las concentraciones de 0.040 g con tinte café, 0.1 g y 0.060 g con tinte café, muestran un comportamiento diferente, lo que sugiere la presencia de valores atípicos. Estos valores pueden deberse a errores humanos en la fabricación de los maniqués, cómo puede ser la distribución espacial del TiO₂ en la silicona. Este fenómeno

indica que los maniqués de estas concentraciones pueden tener características que alteran el patrón general de esparcimiento, lo cual no es representativo de las tendencias observadas en las demás clases. Idealmente, debería existir una relación lineal en la que, a mayor concentración de TiO_2 en la muestra, se observe un aumento proporcional en el esparcimiento.

Para abordar estos valores atípicos, se realizaron dos experimentos distintos. El primero consistió en entrenar el modelo utilizando todos los datos disponibles, incluidos los maniqués con las concentraciones de TiO_2 y tinte café que presentaban valores atípicos. El objetivo de este experimento fue evaluar la capacidad del modelo para ajustarse a los datos de prueba, incluyendo las observaciones con un comportamiento anómalo. El segundo experimento consistió en eliminar estos valores atípicos del conjunto de datos de entrenamiento, con el propósito de observar si el modelo, al no verse afectado por estos datos inusuales, podría generalizar de manera más efectiva sobre maniqués de piel no vistos previamente durante el entrenamiento.

Ambos enfoques fueron evaluados para determinar si el modelo puede manejar adecuadamente las variaciones en los datos y generalizar bien en ambos escenarios, proporcionando una comparación de la robustez del modelo frente a la presencia de valores atípicos en el conjunto de datos.

El conjunto total de datos se dividió en un 70% para entrenamiento, un 15% para prueba y un 15% para validación.

4.2 Predicción del coeficiente de esparcimiento y absorción

En esta sección, se analiza el rendimiento de la arquitectura de la red neuronal U-Net, en comparación con otros enfoques de aprendizaje computacional, para la predicción de los dos coeficientes mencionados.

4.2.2 Desempeño de la U-Net para la predicción de coeficientes ópticos

En el primer experimento, se evaluó el desempeño de la arquitectura U-Net propuesta utilizando el conjunto de datos seleccionado. El objetivo principal fue determinar su capacidad para predecir con precisión los coeficientes de esparcimiento y absorción. La Figura 4.2 ilustra la evolución de la función de pérdida durante el proceso de entrenamiento, mostrando su comportamiento tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de validación a lo largo de 100 épocas.

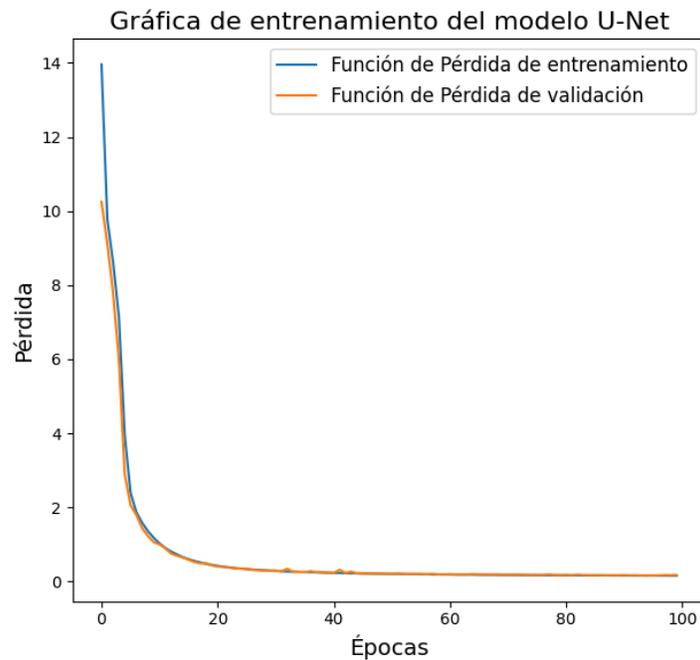


Figura 4.2: Evolución de la función de pérdida durante el entrenamiento del modelo U-Net.

De la imagen anterior, se puede observar que la curva de aprendizaje representa el comportamiento de la función de pérdida a lo largo de las épocas durante el entrenamiento y la validación. En este caso, la curva evidencia una disminución consistente de la pérdida tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de validación. Esto sugiere que el modelo

no solo está aprendiendo de manera efectiva, sino que también está generalizando correctamente, ya que la pérdida en el conjunto de validación disminuye de manera proporcional, indicando la ausencia de sobreajuste.

Es importante destacar que este desempeño no se logró de manera inmediata o sin pruebas iterativas de ajustes previos. Se implementó una estrategia cuidadosa de sintonización de hiperparámetros, que incluyó la regularización L1⁴ para prevenir el sobreajuste y una optimización manual de hiperparámetros para refinar el rendimiento del modelo. Durante este proceso, se realizaron pruebas y se ajustaron parámetros como la tasa de aprendizaje, el número de épocas y el tamaño de los lotes (batches) con el objetivo de maximizar la eficiencia de la red. Estas estrategias fueron fundamentales para alcanzar los resultados presentados en este trabajo.

En la tabla 4.1 se presentan los resultados obtenidos para el modelo de regresión, evaluados en el conjunto de test mediante tres métricas clave: el error cuadrático medio (MSE), el error cuadrático medio de la raíz (RMSE) y el error absoluto medio (MAE). Estas métricas son fundamentales para evaluar la precisión de las predicciones realizadas por el modelo, ya que indican la diferencia entre los valores predichos y los valores reales.

Métrica	Valor obtenido en el conjunto de prueba para el coeficiente de esparcimiento	Valor obtenido en el conjunto de prueba para el coeficiente de absorción
MSE	0.06316	0.00091
RSME	0.2513	0.0302
MAE	0.1904	0.0248

Tabla 4.1: Resultados del modelo U-Net para la predicción del coeficiente de esparcimiento

⁴ La regularización L1 ayuda a evitar el sobreajuste al penalizar los pesos grandes en el modelo, lo que facilita que la red aprenda de manera más robusta y generalice mejor en nuevos datos.

y absorción en el conjunto de prueba

4.2.3 Modelos comparativos para evaluar el desempeño de la U-Net

Para evaluar adecuadamente la arquitectura U-Net presentada en este trabajo, se seleccionó un conjunto de modelos de aprendizaje como referencia para la comparación. Estos modelos son:

- Perceptrón Multicapa
- Red Neuronal Convolutiva
- Random Forest
- XGBoost

Es importante señalar que, en los modelos basados en redes neuronales, se empleó la misma configuración descrita en el capítulo 4. Esto garantiza la homogeneidad en los experimentos realizados con las diferentes arquitecturas y permite una evaluación justa y uniforme de su desempeño.

Perceptrón Multicapa

El Perceptrón Multicapa (MLP) es una red neuronal clásica de alimentación directa, comúnmente utilizada para tareas de regresión. A diferencia de la U-Net, que se especializa en procesar características espaciales a través de capas convolucionales y conexiones de salto, el MLP transforma los datos de entrada en una única dimensión para luego procesarlos mediante múltiples capas densas.

La inclusión de este modelo en el estudio responde a su simplicidad y su capacidad de servir como referencia para evaluar el rendimiento de arquitecturas más sofisticadas como la U-Net. La arquitectura propuesta para este MLP se describe a continuación:

- **Capa de Entrada:**

El modelo recibe imágenes de tamaño $64 \times 64 \times 1$, que son aplanadas en un único vector para su procesamiento en capas densas.

- **Capas Densas Ocultas:**

Primera capa: 128 neuronas con función de activación ReLU.

Segunda capa: 64 neuronas, también activadas mediante ReLU.

Tercera capa: 32 neuronas, manteniendo ReLU como función de activación.

- **Regularización:**

Se implementa regularización L2 en todas las capas densas para reducir el riesgo de sobreajuste y mejorar la generalización del modelo.

- **Capa de Salida:**

La capa de salida consta de 2 neuronas, activadas mediante una función lineal, para predecir simultáneamente los coeficientes de esparcimiento y absorción.

En la Figura 4.3 se presenta la evolución del MSE a lo largo del entrenamiento del modelo, tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de validación. La curva de la función de pérdida del conjunto de entrenamiento muestra una rápida disminución inicial y luego se estabiliza, lo que sugiere que el modelo alcanza rápidamente su capacidad máxima para aprender patrones en los datos de entrenamiento. Por otro lado, la curva del conjunto de validación también desciende inicialmente de manera significativa, pero presenta picos irregulares a lo largo del entrenamiento, lo que indica fluctuaciones en el error de predicción sobre datos no vistos.

Este comportamiento puede deberse a varias razones. La rápida estabilización en la pérdida del entrenamiento podría ser un signo de un modelo subajustado, es decir, con una capacidad insuficiente para capturar patrones complejos en los datos. Esto puede ser consecuencia de una arquitectura demasiado simple o de hiperparámetros mal ajustados, como una tasa de aprendizaje alta que permite una convergencia inicial rápida pero limita el refinamiento posterior del modelo.

Por su parte, los picos en la pérdida de validación sugieren una falta de estabilidad en el aprendizaje del modelo frente a datos nuevos. Esto podría atribuirse a varias causas:

1. **Sobreajuste localizado:** Aunque el modelo reduce el error en entrenamiento, podría estar ajustándose a ruidos o patrones específicos de los datos de entrenamiento en lugar de generalizar correctamente.
2. **Tamaño insuficiente del conjunto de validación:** Un conjunto de validación pequeño puede exacerbar fluctuaciones debido a su sensibilidad a las características específicas de los datos.
3. **Problemas en la regularización:** La regularización utilizada podría no ser suficiente para controlar el aprendizaje, lo que lleva a inestabilidad en las predicciones.
4. **Gradientes inestables:** Una tasa de aprendizaje alta o la ausencia de técnicas como normalización por lotes pueden provocar oscilaciones en los gradientes durante el proceso de optimización.

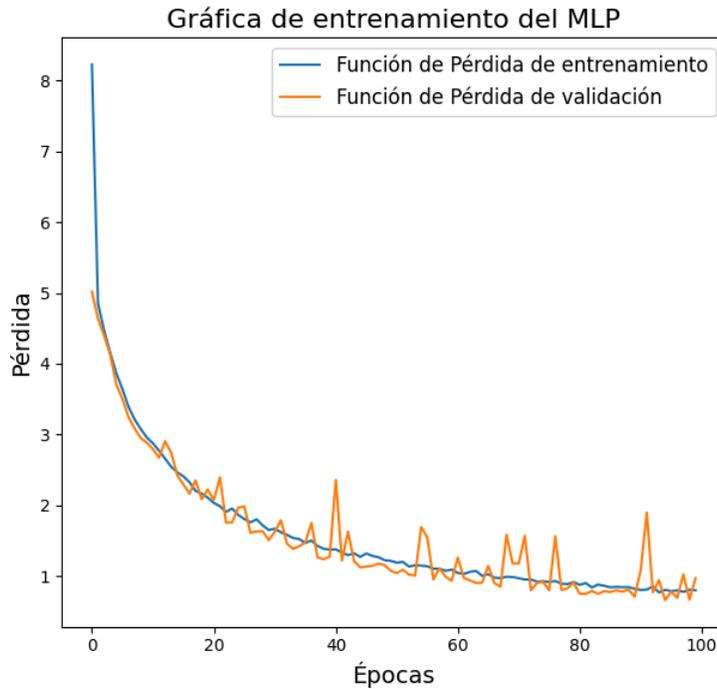


Figura 4.3: Evolución de la función de pérdida durante el entrenamiento del Perceptrón Multicapa

Red Neuronal Convolutacional

La arquitectura de la red neuronal convolutacional (CNN) empleada en esta investigación fue diseñada siguiendo un enfoque secuencial. La elección de esta arquitectura se basa en su eficacia ampliamente demostrada para tareas que involucran datos en formato de imágenes.

A continuación, se detalla en una tabla la estructura del modelo utilizado:

Componente	Descripción
Capa de entrada	Tamaño: (64, 64, 1) (imágenes en escala de grises)
Primera capa convolutacional	Filtros: 32, Kernel: (3, 3), Activación: ReLU
Primera capa de Max Pooling	Pooling: (2, 2)

Segunda capa convolucional	Filtros: 64, Kernel: (3, 3), Activación: ReLU
Segunda capa de Max Pooling	Pooling: (2, 2)
Capa de Aplanamiento	Aplana la salida a un vector unidimensional
Primera capa Densa	Neuronas: 64, Activación: ReLU
Capa de Salida	Neuronas: 2, Activación: lineal (tarea de regresión)
Compilación	Optimizador: Adam, Pérdida: MSE
Entrenamiento	100 épocas, Batch size: 32

Tabla 4.2: Descripción de los componente utilizados en la arquitectura de la CNN

En la Figura 4.4 se ilustra la evolución del error cuadrático medio (MSE) durante el entrenamiento del modelo a lo largo de las épocas, tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de validación. Como se observa, en las primeras 10 épocas, la curva de validación presenta oscilaciones notables, lo que sugiere que el modelo está teniendo dificultades para estabilizarse en esta fase inicial. Esta inestabilidad podría ser un indicio de que el modelo no está generalizando adecuadamente desde el principio, posiblemente debido a una tasa de aprendizaje inadecuada o una arquitectura que aún no se ajusta de manera óptima a los datos de entrenamiento.

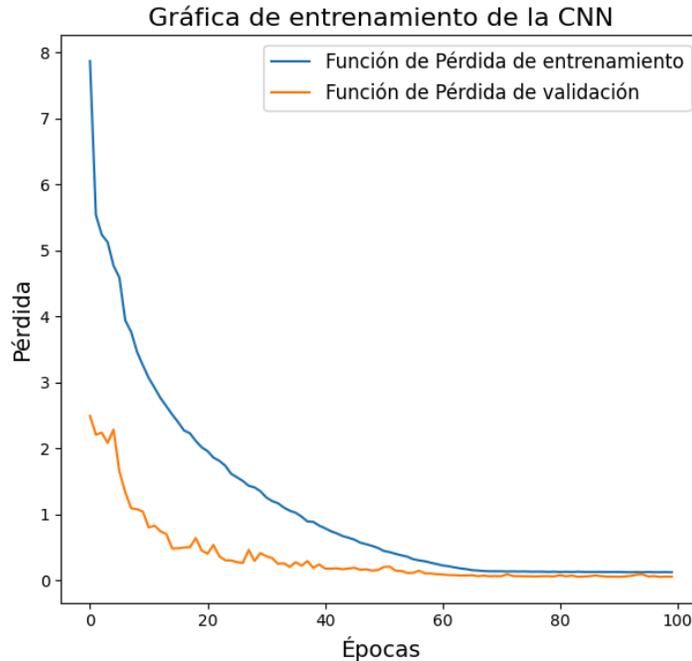


Figura 4.4: Función de pérdida durante el entrenamiento del modelo CNN

Además de los modelos basados en redes neuronales, fueron seleccionados otros dos modelos de aprendizaje automático como referencia. Utilizar estos modelos como base permite comparar el desempeño de una arquitectura mucho más compleja, como la U-Net, frente a modelos más simples y fácilmente interpretables. Si la U-Net demuestra un rendimiento superior, podemos concluir que la complejidad del problema justifica el uso de una arquitectura avanzada.

Random Forest y XG-Boost

Random Forest (Breiman, L., 2001) es un algoritmo mucho más simple en su funcionamiento e interpretable que la U-Net. Se basa en árboles de decisión, los cuales no requieren preprocesamiento de los datos de entrada (como normalización o transformación espacial).

Por otro lado, XG-Boost (Extreme Gradient Boosting) (Chen & Guestrin, 2016) es un algoritmo de aprendizaje automático que se utiliza principalmente para tareas de clasificación y regresión. Es especialmente conocido por su eficiencia y rendimiento. XG Boost es un algoritmo de ensemble que utiliza la técnica de *boosting*, donde se combinan múltiples modelos débiles (en este caso, árboles de decisión) para crear un modelo fuerte. Cada nuevo modelo se entrena para corregir los errores de los modelos anteriores. XG Boost se basa en la idea de *gradient boosting*, que optimiza un modelo de pérdida mediante el uso de gradientes. Se ajusta iterativamente para minimizar la función de pérdida, lo que permite que cada nuevo árbol mejore el rendimiento del conjunto de modelos existente.

Al igual que en el caso de las redes neuronales, los modelos predicen simultáneamente el coeficiente de esparcimiento y el coeficiente de absorción. Dado que estos modelos no pueden trabajar con datos de múltiples dimensiones, es necesario aplanar cada imagen para representarla como un único vector. El conjunto de entrenamiento consta de 54,000 imágenes en escala de grises de 64x64 píxeles, lo que al aplanarse genera una matriz de tamaño (54,000; 4,096), donde 4,096 corresponde a su dimensión de $64 * 64$.

A continuación se presentan los resultados obtenidos utilizando Random Forest y XGBoost, respectivamente:

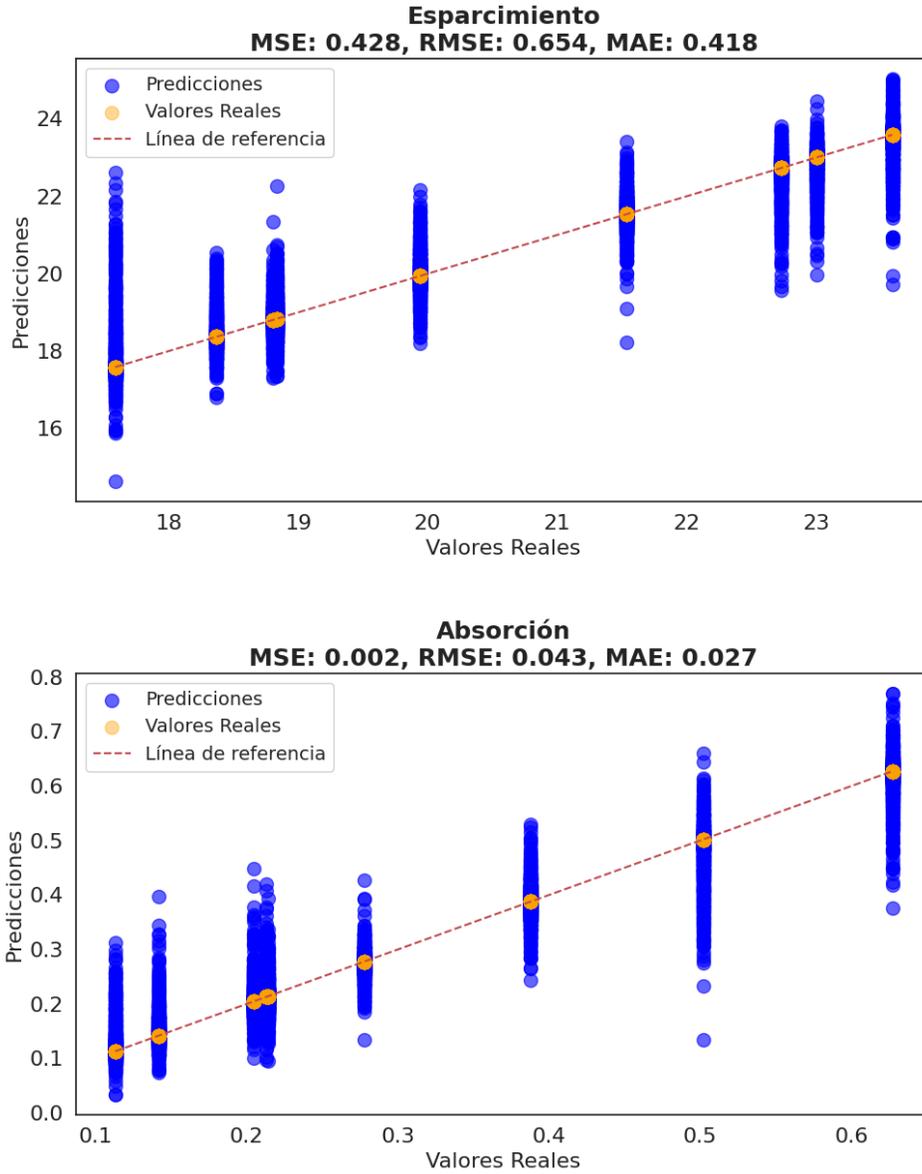


Figura 4.5: Distribución de las predicciones del coeficiente de absorción y esparcimiento usando RandomForest.

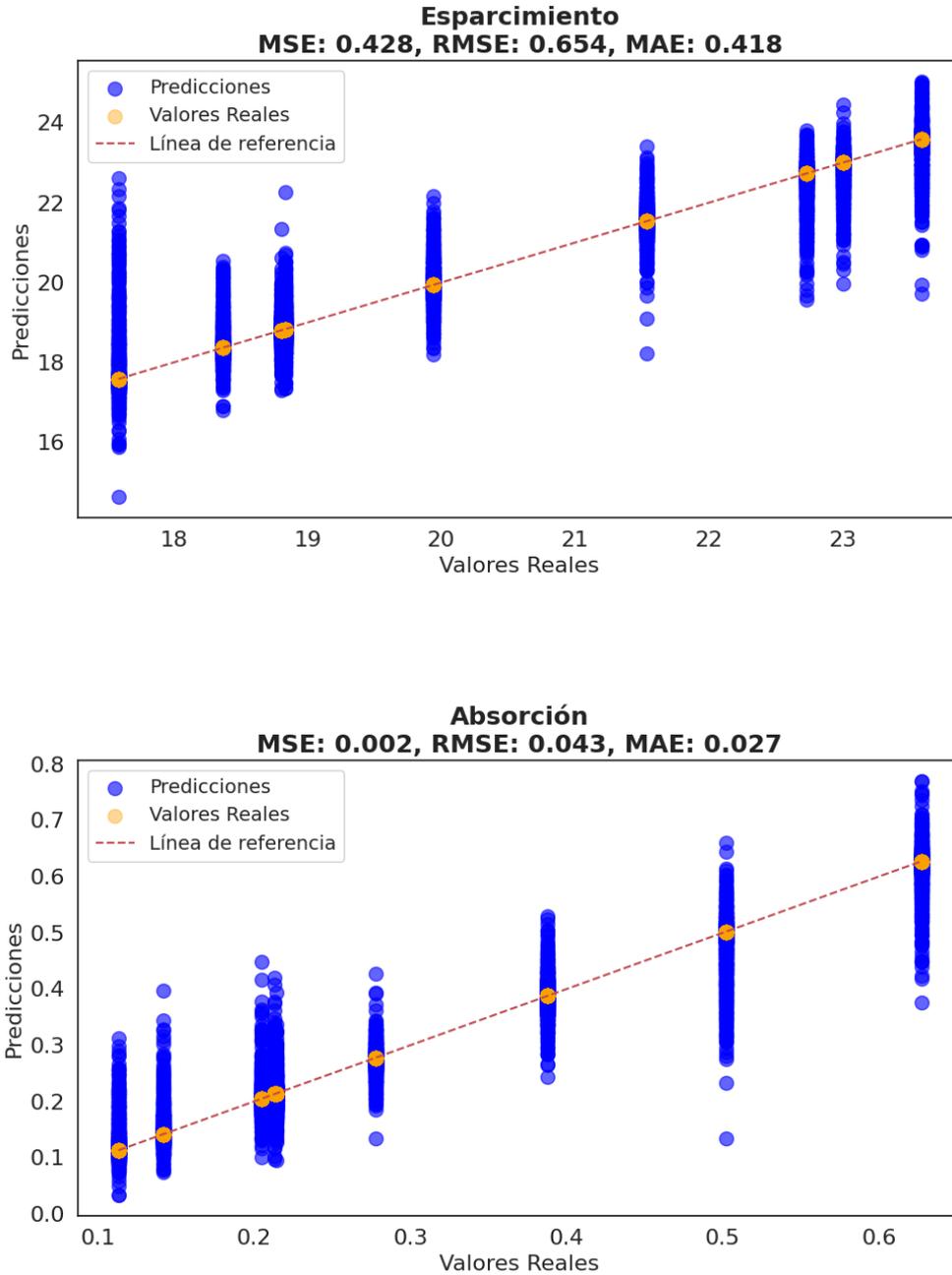


Figura 4.6: Distribución de las predicciones del coeficiente de absorción y esparcimiento usando XG-Boost.

En las Figuras 4.5 y 4.6 se visualiza una considerable dispersión entre las predicciones y los valores reales, lo que sugiere que los modelos tienen dificultades para ajustar de manera adecuada las predicciones a los valores reales.

Resultados finales del rendimiento de las cinco arquitecturas

En la Tabla 4.3 se presentan los resultados de todos los modelos evaluados, comparados con los resultados obtenidos con la arquitectura U-Net.

Modelo	RMSE	MSE	MAE
Coefficiente de Esparcimiento			
MLP	0.9110	0.82991	0.6662
CNN	0.3456	0.11941	0.2707
Random Forest	0.829	0.687	0.415
XG Boost	0.645	0.428	0.418
U-Net	0.2513	0.06316	0.1904
Coefficiente de Absorción			
MLP	0.1482	0.02198	0.1140
CNN	0.0691	0.00478	0.0539
Random Forest	0.067	0.005	0.033
XG Boost	0.043	0.002	0.027
U-Net	0.0302	0.00091	0.0248

Tabla 4.3: Comparativa de los diferentes modelos utilizados para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción. Los mejores resultados para cada métrica se destacan en negrita.

En la Tabla 4.3 se puede observar que el modelo propuesto en esta investigación, la arquitectura U-Net, alcanza los mejores resultados en comparación con los modelos utilizados como referencia (baseline). Esto se debe a que la U-Net (como ya se ha repetido en diversas ocasiones a lo largo de este texto) está específicamente diseñada para el

procesamiento de imágenes y su arquitectura se especializa en tareas de segmentación, lo que le permite capturar tanto características de bajo como de alto nivel. Además, la U-Net es capaz de modelar relaciones complejas entre los datos de entrada, incluso cuando los patrones son intrincados y las estructuras varían, lo que la convierte en una opción destacada para aplicaciones donde la precisión y la interpretación detallada de las características son esenciales.

4.2.4 Análisis de los resultados.

Una vez obtenidos los resultados de los experimentos, se procedió a realizar un análisis de los mismos en el conjunto de prueba. Cabe aclarar que se realizaron dos experimentos distintos: el primero, que se muestra a continuación, consistió en entrenar la red con los valores atípicos incluidos en el conjunto de datos. Este enfoque produjo, como era de esperar, un valor atípico de predicción en el conjunto de prueba. Sin embargo, aunque el modelo generó una predicción atípica, éste se encuentra ligeramente más cerca de la línea de ajuste lineal que el valor real. Esta observación resalta la capacidad del modelo para manejar situaciones complejas, aunque no exentas de ciertos errores en los datos.

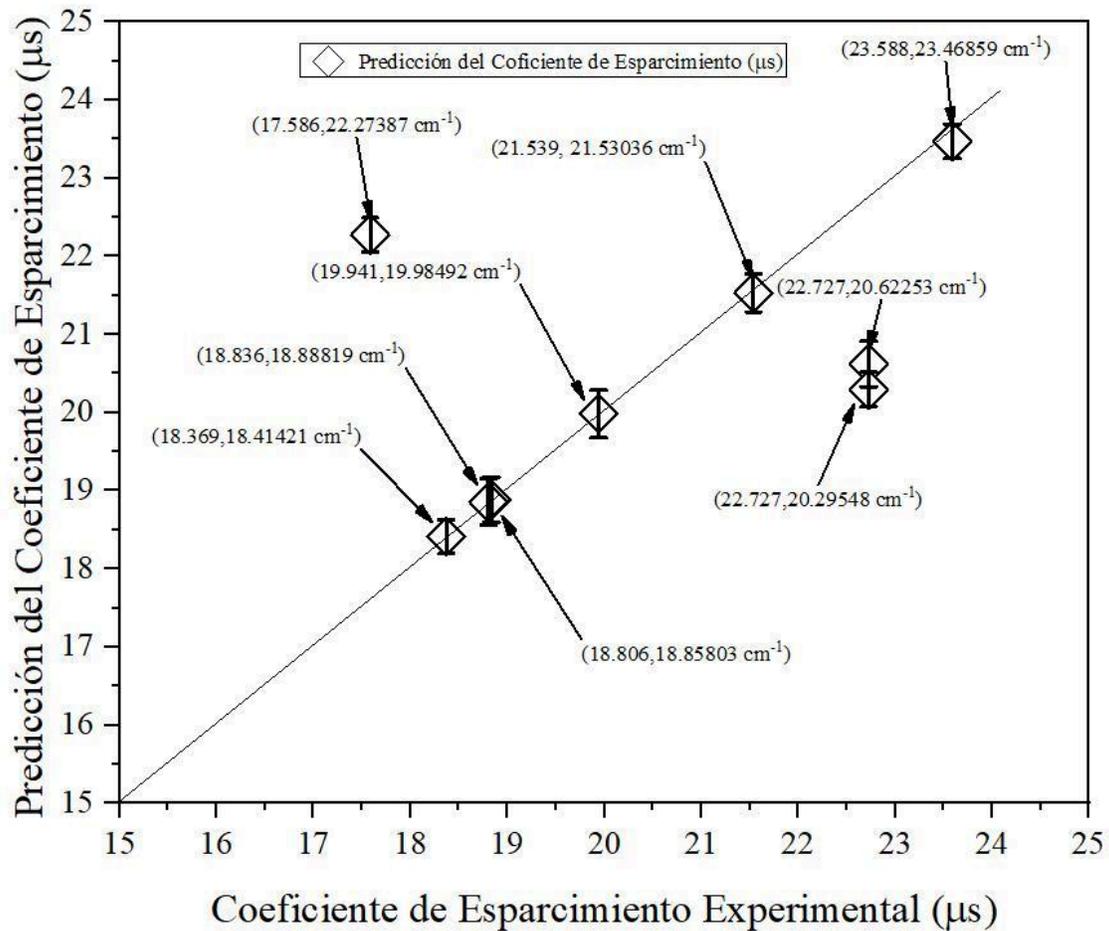


Figura 4.7: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de esparcimiento utilizando la arquitectura U-Net.

En la imagen anterior se presentan los resultados de las predicciones realizadas por el modelo. Como se puede observar, el modelo muestra una capacidad predictiva razonablemente buena, lo que indica que, aunque las predicciones no son completamente precisas, los resultados son bastante aceptables. Estos resultados sugieren que el modelo es eficaz en capturar las relaciones entre las imágenes y el coeficiente de esparcimiento, aun cuando se entrenó con valores atípicos que influyeron en las predicciones.

A continuación, se presenta un análisis similar para el coeficiente de absorción:

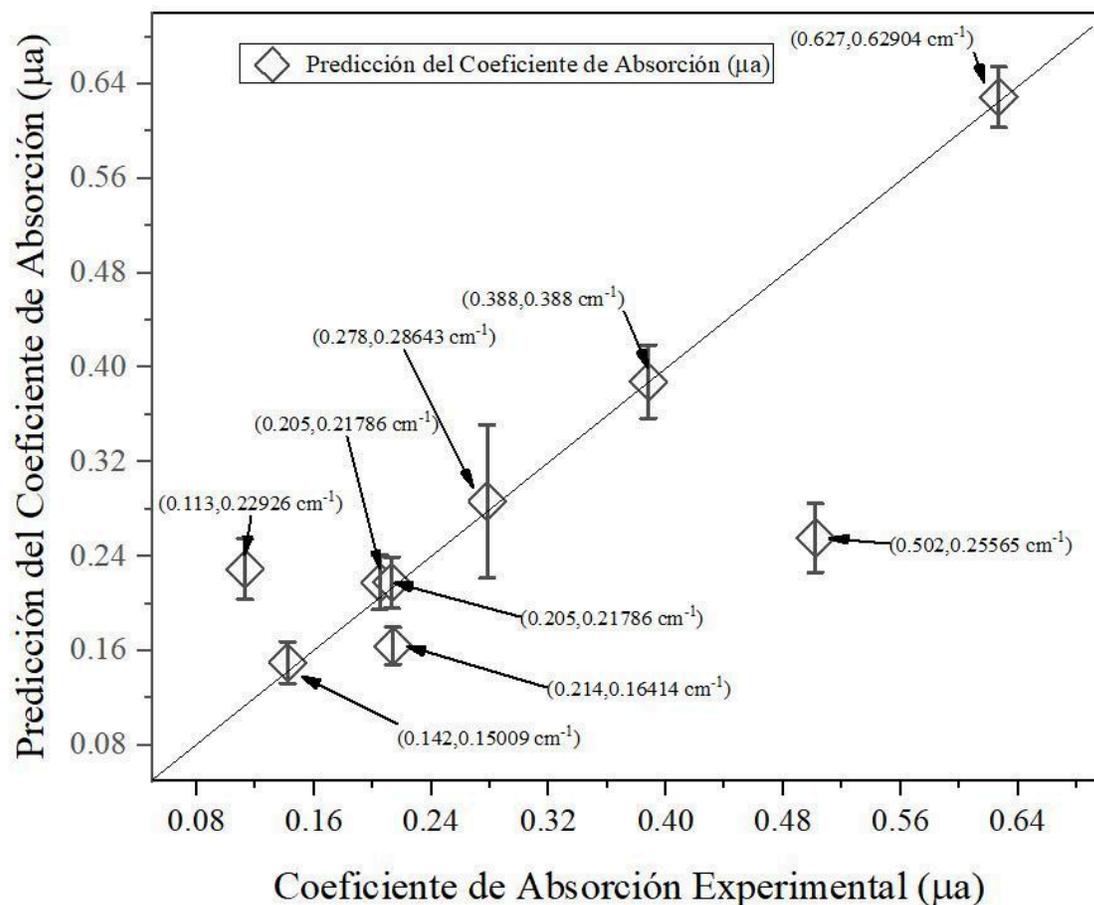


Figura 4.8: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de absorción usando la U-Net.

Al igual que en el caso del coeficiente de esparcimiento, los valores predichos por el modelo intentan ajustarse a la línea de referencia de los valores reales. Sin embargo, el rendimiento en la predicción del coeficiente de absorción no es tan sólido como en el caso del coeficiente de esparcimiento. Las posibles razones por las cuales el modelo podría tener un desempeño inferior en la predicción del coeficiente de absorción en comparación con el coeficiente de esparcimiento:

- **Ruido en los datos de absorción:** Si los datos de absorción contienen más ruido o fluctuaciones, el modelo podría tener dificultades para hacer predicciones precisas.

Es posible que los patrones en los datos de esparcimiento sean más claros o más fáciles de aprender para el modelo.

- **Diferencias en la escala de los coeficientes:** El coeficiente de absorción podría variar en un rango más amplio o más pequeño que el coeficiente de esparcimiento, lo que podría generar que la red neuronal tenga dificultades para predecir correctamente si no se realiza una normalización o un procesamiento adecuado de los datos.
- **Complejidad de la relación entre características:** En algunos casos, los patrones que definen el coeficiente de absorción podrían ser más complejos o menos intuitivos en comparación con los patrones del coeficiente de esparcimiento. Si las características de las imágenes que afectan la absorción son más difíciles de modelar, el rendimiento de la predicción será afectado.
- **Menor cantidad de información relevante para absorción:** Es posible que las imágenes contenidas en el conjunto de datos no proporcionan tanta información relevante para el coeficiente de absorción como lo hacen para el de esparcimiento. Si las imágenes no contienen suficientes características informativas para la absorción, el modelo podría tener un desempeño inferior en su predicción.
- **Tamaño y calidad de los datos de absorción:** Si el conjunto de datos de absorción contiene menos muestras o si hay más errores en la medición de estos valores en comparación con el esparcimiento, el modelo podría entrenarse con datos menos representativos o de menor calidad, lo que podría afectar la precisión de las predicciones.
- **Sobreajuste a la tarea de esparcimiento:** Si el modelo ha sido entrenado con más enfoque en la predicción de esparcimiento, podría haber sobreajustado mejor para esa variable. Esto podría haberle dado mayor capacidad de generalización en ese

aspecto, mientras que la predicción de absorción podría verse afectada por este sesgo.

- **Arquitectura del modelo:** Aunque U-Net es eficaz para tareas de segmentación, puede que la arquitectura no sea completamente adecuada para capturar las relaciones complejas entre las características de las imágenes y la absorción. Ajustes adicionales en la arquitectura o el uso de redes más especializadas para tareas de regresión podrían mejorar el rendimiento.
- **Interacciones entre características de entrada:** Si existen interacciones complejas entre las características de las imágenes que afectan más significativamente el coeficiente de absorción que el de esparcimiento, es posible que el modelo no sea capaz de identificar correctamente esas interacciones sin una configuración adicional en el preprocesamiento o ajustes en la arquitectura.

Una vez completado el primer experimento, se procedió a realizar el segundo, el cual consistió en no contemplar los maniqués de piel con valores atípicos en el coeficiente de esparcimiento dentro del conjunto de muestras para entrenamiento. Después de entrenar el modelo con este nuevo conjunto de datos seleccionado, se reincorporaron las imágenes de dichos maniqués al conjunto de prueba para evaluar el desempeño del modelo en datos no vistos previamente durante el entrenamiento. El objetivo fue verificar si el modelo había aprendido a generalizar adecuadamente sobre datos atípicos o no vistos previamente, sin forzarlo a entrenar sobre valores alejados del ajuste lineal de los datos reales. De esta forma, se evitó que el modelo se viera influenciado por estos valores atípicos durante el entrenamiento. Los resultados obtenidos se presentan en las figuras siguientes:

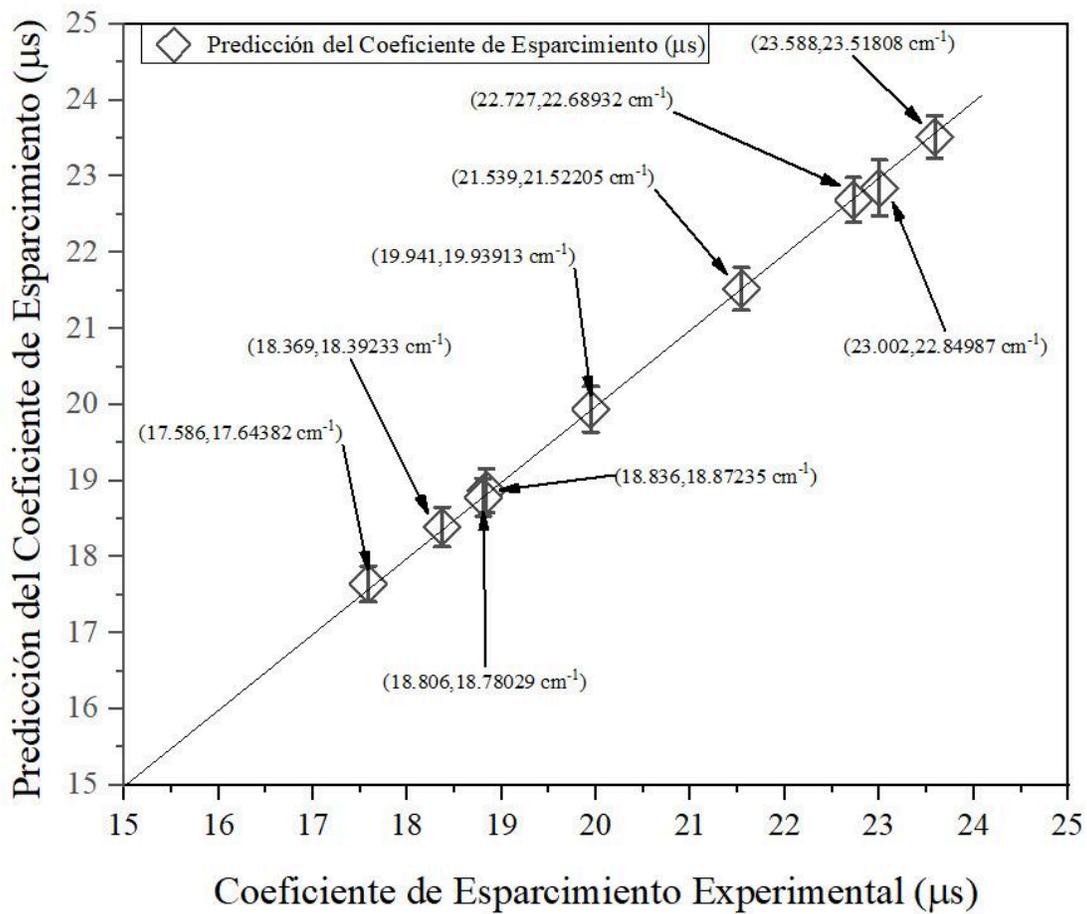


Figura 4.9: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de esparcimiento excluyendo las imágenes de maniqués de piel con datos atípicos.

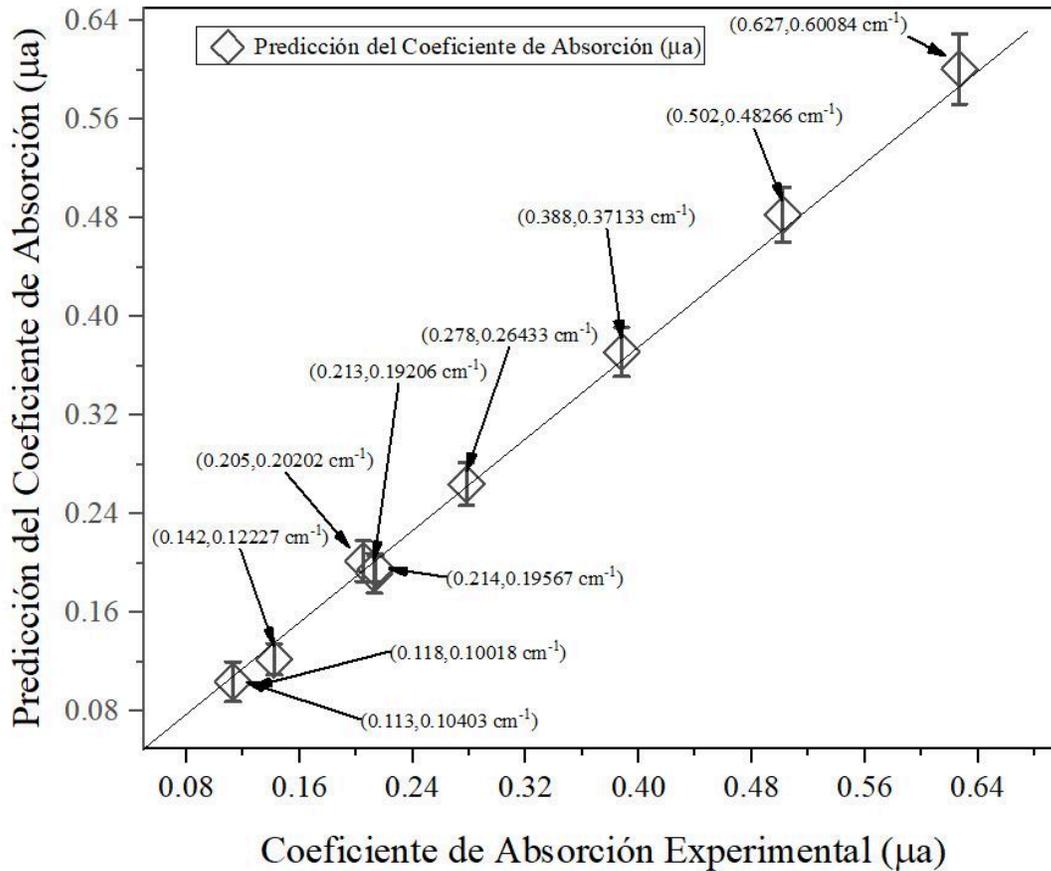


Figura 4.10: Gráfica de dispersión de las predicciones del coeficiente de absorción excluyendo las imágenes de maniqués de piel con datos atípicos.

El segundo experimento demostró una mejora significativa en la capacidad predictiva del modelo, tanto para el coeficiente de esparcimiento como para el de absorción, especialmente en el caso del esparcimiento. Aunque la mejora en la predicción de absorción fue más modesta, el modelo mostró un desempeño más robusto en comparación con el primer experimento, donde los valores atípicos estuvieron presentes en el entrenamiento.

Además, al no incluir los maniqués de piel con valores atípicos en el conjunto de entrenamiento, el modelo demostró una notable capacidad de generalización al predecir en

un rango tolerable los coeficientes para los maniqués que nunca había visto. Esto confirma que, al evitar la influencia de datos atípicos, el modelo mejora su capacidad para adaptarse a nuevas muestras y generalizar mejor en contextos no previstos, lo que lo convierte en una herramienta más confiable y versátil para predicciones en este tipo de aplicaciones.

4.3 Discusión

Los resultados obtenidos en este estudio subrayan el potencial de la arquitectura U-Net en la predicción de coeficientes ópticos en materiales compuestos, destacando su capacidad para abstraer relaciones complejas en los datos de manera efectiva. En comparación con otros modelos de aprendizaje automático, como el Perceptrón Multicapa, las Redes Neuronales Convolucionales tradicionales, Random Forest y XG Boost, la U-Net demostró un rendimiento superior en términos de precisión y aprendizaje, lo que resalta la ventaja de usar arquitecturas especializadas en el tratamiento de datos espaciales y estructurados, como las imágenes con datos no evidentes.

Uno de los aspectos clave que emergen de los resultados es la capacidad de la U-Net para capturar tanto características de bajo como de alto nivel en las imágenes, lo que permite una mejor comprensión de las relaciones intrínsecas entre las variables. Esta capacidad es especialmente relevante en contextos como el de esta investigación, donde los patrones de esparcimiento y absorción de las muestras utilizadas son no lineales y presentan una variabilidad que otros modelos más simples no logran captar. Así, la comparación con modelos tradicionales sugiere que problemas complejos como el análisis de características de tejidos y materiales, requieren el uso de arquitecturas avanzadas, capaces de interpretar estructuras y relaciones subyacentes en los datos, como lo hace la U-Net.

No obstante, a pesar de los resultados prometedores, en especial en la predicción del coeficiente de esparcimiento, se identificó un área de mejora en la predicción del coeficiente de absorción. Aunque el modelo muestra un buen desempeño general, el ajuste en la absorción no fue tan preciso como en el caso del esparcimiento, lo que apunta a una posible complejidad adicional en la relación entre las características de las imágenes y este parámetro óptico. Esto sugiere que el modelo aún puede beneficiarse de una mayor optimización de parámetros, lo cual podría incluir un ajuste más fino de la arquitectura o el uso de técnicas como la regularización, que ayuden a reducir el error y mejorar la precisión de las predicciones para este parámetro específico sin comprometer la eficiencia del otro.

Adicionalmente, la validación con datos de prueba no vistos durante el entrenamiento resultó ser un paso crucial para evaluar la capacidad de generalización del modelo. La incorporación de maniqués con valores atípicos en el conjunto de prueba, a pesar de haber sido excluidos del entrenamiento, permitió verificar que el modelo mantiene un buen desempeño incluso en datos no representados explícitamente en el proceso de aprendizaje. Esta capacidad de generalización es un indicativo de que el modelo U-Net tiene el potencial para adaptarse a nuevas condiciones y situaciones, lo que es fundamental para su aplicación en entornos prácticos donde los datos pueden variar o no ser completamente predecibles. Sin embargo, este análisis también reveló que el modelo se beneficia de un entrenamiento sin la presencia de datos atípicos, lo que reduce su tendencia a ajustarse a valores alejados del ajuste lineal y mejora su rendimiento en la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción.

A pesar de estos avances, es evidente que aún existen áreas que requieren mayor exploración. Una de ellas es la interacción entre las características de las imágenes y los coeficientes de absorción, lo que podría indicar que la absorción responde a patrones más complejos o menos homogéneos dentro de las imágenes. En este sentido, futuras

investigaciones podrían centrarse en técnicas adicionales de preprocesamiento de imágenes o en la inclusión de más características para enriquecer el modelo, como datos espectrales o de textura, que podrían mejorar la capacidad del modelo para hacer predicciones más precisas.

En conclusión, la arquitectura U-Net ha demostrado ser una herramienta poderosa y prometedora para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción en maniqués de piel. Los resultados también destacan áreas para futuras mejoras, como la incorporación de la predicción del parámetro de anisotropía. El análisis continuo y la experimentación adicional serán esenciales para mejorar la precisión del modelo y explorar nuevas aplicaciones de esta metodología en contextos más amplios.

CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES

En este capítulo, se presenta una recapitulación de las ideas clave abordadas a lo largo del trabajo, así como las conclusiones derivadas de los experimentos realizados. Este estudio ha enfrentado un desafío crucial en el campo de la óptica biomédica: la predicción precisa de los coeficientes de esparcimiento y absorción, parámetros esenciales para el estudio de tejidos biológicos, así como para el diagnóstico y tratamiento de pacientes.

En este contexto, el trabajo realizado se centró en el desarrollo y evaluación de un modelo de aprendizaje automático basado en redes neuronales, específicamente diseñado para predecir el coeficiente de esparcimiento en maniqués de piel. El objetivo principal fue crear una arquitectura capaz de predecir este coeficiente de manera efectiva, incluso con un conjunto de datos limitado, superando las deficiencias de los enfoques tradicionales. Además, el estudio se expandió para incluir la predicción del coeficiente de absorción, ampliando la aplicación del modelo y evaluando su capacidad para abordar ambos parámetros de manera integral.

A lo largo de este estudio, se adaptó e implementó una red neuronal de la arquitectura U-Net. Este enfoque no sólo permitió superar las limitaciones computacionales y tecnológicas de los métodos convencionales, sino que también proporcionó una alternativa robusta y adaptativa para la predicción de los coeficientes en materiales heterogéneos como los maniqués de piel.

A continuación, se concluyen los principales hallazgos de este trabajo, desglosados por cada objetivo de esta investigación:

1. El trabajo realizado demuestra que, al emplear una arquitectura adaptada de la U-Net, es posible obtener predicciones precisas del coeficiente de esparcimiento en maniqués de piel, incluso cuando el conjunto de datos disponible es limitado. La adaptación de la U-Net a este contexto específico permitió superar las limitaciones de los métodos tradicionales, brindando un modelo eficaz. A pesar de las restricciones en los recursos de procesamiento y en la cantidad de datos, la U-Net mostró ser una herramienta poderosa para modelar y predecir con precisión este coeficiente, lo que valida la hipótesis de que redes neuronales avanzadas pueden ser efectivas en contextos de caracterización de propiedades ópticas con datos escasos.
2. La modificación de la U-Net no sólo permitió la predicción del coeficiente de esparcimiento, sino que también fue efectiva para predecir el coeficiente de absorción en los maniqués de piel. Esta capacidad de la U-Net para modelar y predecir ambos coeficientes destaca su versatilidad y demuestra que una arquitectura adaptada puede abordar múltiples tareas. Los resultados obtenidos demostraron que la U-Net presenta una ligera superioridad en la predicción del coeficiente de esparcimiento en comparación con el coeficiente de absorción.
3. Los experimentos realizados evidencian que la arquitectura modificada de U-Net tiene una capacidad destacable para generalizar las predicciones a datos no vistos, incluyendo maniqués de piel que no fueron parte del conjunto de entrenamiento. Este comportamiento refleja su habilidad para adaptarse a situaciones fuera del ámbito inicial del entrenamiento. La capacidad de generalización de la U-Net refuerza su aplicabilidad en escenarios del mundo real, donde los datos varían en función de múltiples factores.

4. La comparación entre el modelo U-Net adaptado y otros algoritmos de aprendizaje automático (como Redes Neuronales Convolucionales tradicionales, Random Forest y XG Boost) mostró que la U-Net superó a los demás enfoques en términos de precisión. El modelo propuesto logró los mejores resultados en métricas clave como RMSE, MAE y MSE. La Red Neuronal Convolutiva convencional fue el enfoque que más se acercó al rendimiento de la U-Net, aunque aún no alcanzó su nivel de precisión.
5. Al comparar los resultados obtenidos con la U-Net adaptada frente a las mediciones experimentales generadas mediante un método combinado de obtención de reflectancias y transmitancias y el método numérico basado en *Monte Carlo Multi-Layered* (MCML), se observó que el modelo propuesto ofrece una aproximación muy cercana a las mediciones experimentales. A pesar de las diferencias inherentes entre los métodos, los resultados obtenidos con la U-Net muestran una correspondencia significativa con los valores reales, lo que refuerza la confiabilidad y la efectividad de la red neuronal.

Los hallazgos sugieren que la arquitectura es prometedora para futuras aplicaciones en el campo de la óptica biomédica y proporciona una base sólida para investigaciones posteriores. La capacidad de la U-Net para generalizar, su rendimiento superior frente a otros modelos y su concordancia con mediciones experimentales demuestran su potencial, abriendo oportunidades para mejorar y expandir la metodología en futuras investigaciones.

CAPÍTULO 6: TRABAJO A FUTURO

En el presente capítulo se exponen algunas ideas para trabajos futuros, derivadas del análisis y las conclusiones obtenidas en el estudio realizado.

Como trabajo a futuro se propone lo siguiente:

1. **Ampliación del Conjunto de Datos:** Crear un conjunto de datos más amplio y diverso que incluya diferentes tipos de tejidos biológicos y variaciones en la concentración de TiO_2 . Esto ayudaría a mejorar la capacidad de generalización del modelo y su aplicabilidad en contextos clínicos más amplios.
2. **Optimización de la Arquitectura de U-Net:** Explorar y comparar diferentes arquitecturas de redes neuronales más avanzadas, como U-Net++ o variantes de U-Net con capas adicionales de atención, para evaluar si pueden ofrecer mejoras en la precisión de la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción.
3. **Uso de Imágenes de Speckle para Predicción:** Investigar la aplicación de imágenes de speckle para la predicción de los coeficientes de esparcimiento y absorción. Se podría desarrollar un modelo específico que integre el análisis de patrones de speckle y combine esta información con el aprendizaje automático para mejorar la precisión de las predicciones.
4. **Modificación del prototipo de impresión 3D:** Mejorar el prototipo de impresión 3D desarrollado para la captura de imágenes con la modificación de la base a una ajustable, que permita modificar la distancia entre la pantalla de proyección y la cámara, así como la capacidad de enfocar de diferentes maneras, en lugar de mantener la configuración estática actual.

REFERENCIAS

- Abraham, A. (2005). Artificial neural networks. *Handbook of measuring system design*.
- Aggarwal, C. C. (2018). *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook*. Springer Cham.
- Applegate, M. B., Spink, S. S., & Roblyer, D. (2020). Dual-DMD hyperspectral spatial frequency domain imaging (SFDI) using dispersed broadband illumination with a demonstration of blood stain spectral monitoring. *Biomedical Optics Express*, 12(1), 676-688.
- Aramendia, A. I. (2024, January 31). *The U-Net : A Complete Guide*. Medium. Retrieved November 13, 2024, from <https://medium.com/@alejandro.itoaramendia/decoding-the-u-net-a-complete-guide-810b1c6d56d8>
- Archana, R., & Jeevaraj, P. E. (2024). Deep learning models for digital image processing: a review. *Artificial Intelligence Review*, 57(1).
- Asllanaj, F., Contassot-Vivier, S., Hohmann, A., & Kienle, A. (2019). Light propagation in biological tissue. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 224, 78-90.
- Bassani, G. F., Liedl, G., & Wyder, P. (Eds.). (2005). *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*. Elsevier Science.
- Ben-Yehud, A., Sefi, O., Klein, Y., Schwartz, H., Cohen, E., Shukrun, R. H., & Shwartz, S. (2024). High-resolution computed tomography with scattered X-ray radiation and a single pixel detector. *Communications Engineering*, 3(1), 39.

- Born, M. (1999). *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press.
- Boudoux, C. (2017). *Fundamentals of Biomedical Optics: From Light Interactions with Cells to Complex Imaging Systems*. Pollux.
- Breiman, L. (2001). Random Forests. *Machine Learning*, 45, 5-32.
- Chen, T., & Guestrin, C. (2016). XGBoost: A Scalable Tree Boosting System. *In Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 785–794.
- Chiu Coutiño, R. (2024). Detección de vasos sanguíneos en medios altamente esparcidos. *Instituto Tecnológico de México, campus León*.
- Chopra, R., Wagner, S. K., & Keane, P. A. (2021). Optical coherence tomography in the 2020s—outside the eye clinic. *Eye*, 35(1), 236-243.
- Cloonan, A. J. (2014). 3D-printed tissue-mimicking phantoms for medical imaging and computational validation applications. *3D printing and additive manufacturing*, 14-23.
- Cromtek. (2022, September 12). *Espectrometría UV-VIS: Ventajas y desventajas – Cromtek*. Cromtek. Retrieved November 16, 2024, from <https://www.cromtek.cl/2022/09/12/espectrometria-uv-vis-ventajas-y-desventajas/>
- Díaz, N. A., Ruiz, J. A. B., Reyes, E. F., Cejudo, A. G., Novo, J.J., Peinado, J. P., & Fiñana, I. T. (2010). Espectrofometría: Espectros de absorción y cuantificación colorimétrica de biomoléculas. *Universidad de Córdoba*.

- Ding, B., Qian, H., & Zhou, J. (2018). Activation functions and their characteristics in deep neural networks. *Chinese Control And Decision Conference (CCDC)*, 1836-1841. <https://ieeexplore.ieee.org/document/8407425>
- Farell T.J., Wilson B.C & Patterson M. S. (1992). The use of a neural network to determine tissue optical properties from spatially resolved diffuse reflectance measurements. *Physics in Medicine & Biology*, 2281.
- Fox, M. (2010). *Optical Properties of Solids*. OUP Oxford.
- G. Lamouche, B. K. (2012). Review of tissue simulating phantoms with controllable optical, mechanical and structural properties for use in optical coherence tomography. *Biomed. Opt. Express* 3, 1381-1398.
- gamco. (2021). *Red neuronal feedforward*. Retrieved from gamco: <https://gamco.es/glosario/red-neuronal-feedforward/>
- Goodfellow, I. Y. (2016). *Deep learning*. MIT press.
- Graaff, R. K. (1993). Condensed Monte Carlo simulations for the description of light transport. *Applied optics*, 426-434.
- Hecht, E. (2002). *Optics*. Addison-Wesley.
- Hergert, W., & Wriedt, T. (Eds.). (2012). *The Mie Theory: Basics and Applications*. Springer Berlin Heidelberg.
- Hohmann, M., Lengenfelder, B., Muhr, D., Späth, M., Hauptkorn, M., Klämpfl, F., & Schmidt, M. (2020). Direct measurement of the scattering coefficient. *Biomedical optics express*, 12(1), 320-335.
- Hokr, B. B. (2021). Machine learning estimation of tissue optical properties. *Scientific Reports*, 6561.

- Huang, D., Swanson, A., Lin, C., Schuman, J., Stinson, W., Chang, W., Hee, M., Flotte, T., Gregory, K., & Puliafito, C. (1991). Optical coherence tomography. *Science*, 1178-81.
- Hussein, S. K. (2021). Semantic segmentation of aerial images using u-net architecture. *Iraqi J. Electr. Electron. Eng*, 58-63.
- Jacques, S. L. (2013). Optical properties of biological tissues: a review. *Physics in Medicine & Biology*, vol. 58, no 11, p. R37.
- Jaszczak, M. (2024). *What Is A Phantom? How Does It Work?* Retrieved from DataSpectrum: <https://www.spect.com/blog/what-is-a-phantom-how-does-it-work>
- Jones, L. R., Preyer, N. W., Wolfsen, H. C., Reynolds, D. M., Davis, M. A., & Wallace, M. B. (2009). Monte Carlo model of stricture formation in photodynamic therapy of normal pig esophagus. *Photochemistry and photobiology*, 85(1), 341-346.
- Kanadath, A. a. (2021). Histopathology image segmentation using MobileNetV2 based U-net model. *International Conference on Intelligent Technologies (CONIT)*, 1--8.
- Kaniyala Melanthota, S., Kistenev, Y. V., & Borisova, E. (2022). Types of spectroscopy and microscopy techniques for cancer diagnosis: a review. *Lasers in Medical Science*, 37(8), 3067-3084.
- Keiser, G. (2022). *Biophotonics: Concepts to Applications*. Springer Nature Singapore.
- Kim, M. I. (2024). Fabrication of agar-based tissue-mimicking phantom for the technical evaluation of biomedical optical imaging systems. *Current Applied Physics*, 80-85.
- Krenker, A. J. (2011). Introduction to the artificial neural networks. *Artificial Neural Networks: Methodological Advances and Biomedical Applications.*, 1-18.

- Klose, A.D., & Hielscher, A.H. (2002). Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer—Part 2: inverse model. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72.
- Klose, A.D., Netz, U., Beuthan, J., & Hielscher, A.H. (2002). Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer—Part 1: forward model. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72(5).
- Kubelka, P., & Munk, F. (1931). An article on optics of paint layers. *Z. Tech. Phys*, 12.
- LUSTIG, M., DONOHO, D., & PAULY, J. M. (2007). Sparse MRI: The application of compressed sensing for rapid MR imaging. *Magnetic Resonance in Medicine: An Official Journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine*, 1182-1195.
- Manjarrez, L. a. (2014). *Relaciones neuronales para determinar la atenuación del valor de la aceleración máxima en superficie de sitios en roca para zonas de subducción*. ResearchGate.
- McGarry, C. K., Grattan, L.J., Ivory, A. M., Leek, F., Liney, G. P., Liu, Y., & Clark, C.H. (2020). Tissue mimicking materials for imaging and therapy phantoms: a review. *Physics in Medicine & Biology*, 65, 23. 10.1088/1361-6560/abbd17
- Metropolis, N. &. (1949). The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, 335-341.
- Milletari, F. a.-A. (2016). V-Net: Fully Convolutional Neural Networks for Volumetric Medical Image Segmentation. *Fourth International Conference on 3D Vision (3DV)*, 565-571.
- Moreira, J. S. (2011). TiO₂ absorption and scattering coefficients using Monte Carlo method and macroscopic balances in a photo-CREC unit. *Chemical engineering science*, 5813-5821.

- Mourant, J., Bigio, I., Boyer, J., Conn, R., Johnson, T., & Shimada, T. (1995). Spectroscopic diagnosis of bladder cancer with elastic light scattering. *Lasers in surgery and medicine*, *17*, 350–357.
- Movasaghi, Z., Rehman, S., & Rehman, I. U. (2007). Raman spectroscopy of biological tissues. *Applied Spectroscopy Reviews*, *45*(5), 493-541.
- Olmo, M., & Nave, R. (2005). *Dispersión de Brillouin*. Brillouin Scattering. Retrieved November 18, 2024, from <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/optmod/brill.html>
- Pawley, J. (Ed.). (2010). *Handbook of Biological Confocal Microscopy*. Springer US.
- Pilot, R., Signorini, R., Durante, C., Orian, L., Bhamidipati, M., & Fabris, L. (2019). A review on surface-enhanced Raman scattering. *Biosensors*, *9*(2), 57.
- Prahl, S. A., van Gemert, M. J. C., & Ashley, A. J. (1993). Determining the optical properties of turbid media by using the adding-doubling method. *Applied Optics*, *32*.
- Prahl, S. (2018). *Project: Optical Phantoms*. OMLC. Retrieved November 16, 2024, from <https://omlc.org/~prahl/projects/phantoms.html>
- Rajan, S. (2020, Julio 15). *An Introduction to Artificial Neural Networks*. Retrieved from Towards Data Science: <https://towardsdatascience.com/an-introduction-to-artificial-neural-networks-5d2e108ff2c3>
- Razzak, M. I. (2018). Deep learning for medical image processing: Overview, challenges and the future. *Classification in BioApps: Automation of decision making*, 323-350.

- Ronneberger, O. a. (2015). U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. *Medical image computing and computer-assisted intervention--MICCAI 2015: 18th international conference*, 234-241.
- Roggan, A., Müller, G., & Meinke, M. (2006). Determination of optical properties of human blood in the spectral range 250 to 1100 nm using Monte Carlo simulations with hematocrit-dependent effective scattering phase functions. *Journal of Biomedical Optics*, 11.
- Rutherford, E. (1911). The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 21, no 125, p. 669-688.
- Saiko G, Z. X. (2020). Fabrication and Optical Characterization of Gelatin-Based Phantoms for Tissue Oximetry. *Adv Exp Med Biol*, 369-374.
- Salomatina, E., Jiang, B., Novak, J., & Yaroslavsky, A. N. (2006). Optical properties of normal and cancerous human skin in the visible and near-infrared spectral range. *Journal of biomedical optics*, 11(6), 064026-064026.
- Salzi, M. H. (2006). A brief review of feed-forward neural networks. *Communications Faculty of Sciences University of Ankara Series A2-A3 Physical Sciences and Engineering*.
- Sharma, S. B. (2010). Use of Monte Carlo simulations for propagation of light in biomedical tissues. *Applied Optics*, 4152-4159.
- Steelman, Z. A., Ho, D. S., Chu, K. K., & Wax, A. (2019). Light scattering methods for tissue diagnosis. *Optica*, 6(4), 479-489.
- Steven L. Jacques, L. K. (2000). Optical properties of tissues: a comprehensive review. *Lasers in Surgery and Medicine*.

- Su-Hyun Han, K. W. (2018). Artificial Neural Network: Understanding the Basic Concepts without Mathematics. *Dementia and neurocognitive disorders*, 83-89.
- Taroni, P. P. (2003). In vivo absorption and scattering spectroscopy of biological tissues. *Photochemical & Photobiological Sciences*, 124-129.
- Tank, A., Vergato, C., Waxman, D. J., & Roblyer, D. (2022). Spatial frequency domain imaging for monitoring immune-mediated chemotherapy treatment response and resistance in a murine breast cancer model. *Scientific Reports*, 12(1).
- Terán, E., Méndez, E. R., Quispe-Siccha, R., Pérez-Pacheco, A., & Cuppo, F. L. S. (2019). Application of single integrating sphere system to obtain the optical properties of turbid media. *OSA Continuum*, 2, 1791-1806.
- Troy, T. L., Page, D. L., & Sevick-Muraca, E. M. (1996). Optical properties of normal and diseased breast tissues: prognosis for optical mammography. *Journal of biomedical optics*, 1(3), 342-355.
- Tyndall effect | Definition & Facts*. (2023, 05 17). Britannica. Retrieved November 18, 2024, from <https://www.britannica.com/science/Tyndall-effect>
- ul Rehman, A. A. (2020). Biomedical applications of integrating sphere: a review. *Photodiagnosis and photodynamic therapy*, 1017.
- Usenko, E., Glamazda, A., Svidzerska, V., Valeev, V., Laguta, A., Petrushenko, S., & Karachevtsev, V. (2023). DNA: TiO₂ nanoparticle nanoassemblies: effect of temperature and nanoparticle concentration on aggregation. *Journal of Nanoparticle Research*, 25(6), 113.
- WANG, Z., CHEN, J., & HOI, S. C. (2020). Deep learning for image super-resolution: A survey. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 3365-3387.

- Welch, A. J., & van Gemert, M. J. C. (1995). *Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue*.
Press New York.
- Yang, D., Guo, W., Cheng, T., Wei, Z., & Xu, B. (2022). *Artificial neural network (ANN) for dispersion compensation of spectral domain – optical coherence tomography (SD-OCT)*. *Instrumentation Science & Technology*.
- Yasuo Hasegawa, Y. Y. (1991). Monte Carlo simulation of light transmission through living tissues. *Applied Optics*, 4515--4520.