El diagnóstico final de la mayoría de tipos de cáncer lo realiza un médico experto en anatomía patológica que examina muestras tisulares o celulares sospechosas extraídas del paciente. Actualmente, esta evaluación depende en gran medida de la experiencia del médico y se lleva a cabo de forma cualitativa mediante técnicas de imagen tradicionales como la microscopía óptica. Esta tarea tediosa está sujeta a altos grados de subjetividad y da lugar a niveles de discordancia inadecuados entre diferentes patólogos, especialmente en las primeras etapas de desarrollo del cáncer.

La espectroscopía infrarroja por Transformada de Fourier (siglas FTIR en inglés) es una tecnología ampliamente utilizada en la industria que recientemente ha demostrado una capacidad creciente para mejorar el diagnóstico de diferentes tipos de cáncer. Esta técnica aprovecha las propiedades del infrarrojo medio para excitar los modos vibratorios de los enlaces químicos que forman las muestras biológicas. La principal señal generada consiste en un espectro de absorción que informa sobre la composición química de la muestra iluminada. Los microespectrómetros FTIR modernos, compuestos por complejos componentes ópticos y detectores matriciales de alta sensibilidad, permiten capturar en un laboratorio de investigación común imágenes hiperespectrales de alta calidad que aúnan información química y espacial. Las imágenes FTIR son estructuras de datos ricas en información que se pueden analizar individualmente o junto con otras modalidades de imagen para realizar diagnósticos patológicos objetivos. Por lo tanto, esta técnica de imagen emergente alberga un alto potencial para mejorar la detección y la graduación del riesgo del paciente en el cribado y vigilancia de cáncer.

Esta tesis estudia e implementa diferentes metodologías y algoritmos de los campos interrelacionados de procesamiento de imagen, visión por ordenador, aprendizaje automático, reconocimiento de patrones, análisis multivariante y quimiometría para el procesamiento y análisis de imágenes hiperespectrales FTIR. Estas imágenes se capturaron con un moderno microscopio FTIR de laboratorio a partir de muestras de tejidos y células afectadas por cáncer colorrectal y de piel, las cuales se prepararon siguiendo protocolos alineados con la práctica clínica actual. Los conceptos más relevantes de la espectroscopía FTIR se investigan profundamente, ya que deben ser comprendidos y tenidos en cuenta para llevar a cabo una correcta interpretación y tratamiento de sus señales especiales. En particular, se revisan y analizan diferentes factores fisicoquímicos que influyen en las mediciones espectroscópicas en el caso particular de muestras biológicas y pueden afectar críticamente su análisis posterior.

Todos estos conceptos y estudios preliminares entran en juego en dos aplicaciones principales. La primera aplicación aborda el problema del registro o alineación de imágenes hiperespectrales FTIR con imágenes en color adquiridas con microscopios tradicionales. El objetivo es fusionar la información espacial de distintas muestras de tejido medidas con esas dos modalidades de imagen y centrar la discriminación en las regiones seleccionadas por los patólogos, las cuales se consideran más relevantes para el diagnóstico de cáncer colorrectal. En la segunda aplicación, la espectroscopía FTIR se lleva a sus límites de detección para el estudio de las entidades biomédicas más pequeñas. El objetivo es evaluar las capacidades de las señales FTIR para discriminar de manera fiable diferentes tipos de células de piel que contienen fenotipos malignos. Los estudios desarrollados contribuyen a la mejora de métodos de decisión objetivos que ayuden al patólogo en el diagnóstico final del cáncer. Además, revelan las limitaciones de los protocolos actuales y los problemas intrínsecos de la tecnología FTIR moderna, que deberían abordarse para permitir su transferencia a los laboratorios de anatomía patológica en el futuro.