

Optimización Multiobjetivo del Parámetro de Regularización en Imágenes Fotoacústicas

Maximiliano Galindo

Maestría en Ciencia e Ingeniería de la Computación
Universidad Nacional Autónoma de México

Supervisores:

Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria
Dr. Roberto Giovanni Ramírez Chavarría

29 de Noviembre del 2024

Contenido

1. Introducción
2. Problema
3. Enfoque de Modelo en Espacio de Estados Lineal
4. Regularización
5. Optimización Multiobjetivo
6. Resultados
7. Trabajo por hacer

Efecto Fotoacústico

- Las imágenes fotoacústicas combinan óptica y ultrasonido para aplicaciones biomédicas.
- Técnica no invasiva útil para evaluar tejidos arteriales y estudiar procesos celulares.

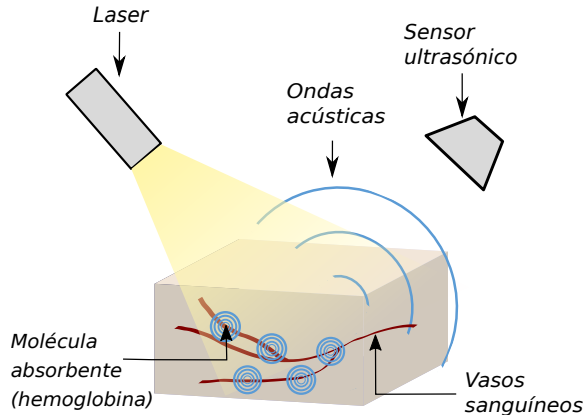


Figure: Efecto fotoacústico

Efecto Fotoacústico

La ecuación que describe el efecto fotoacústico es:

$$\frac{\partial^2 p(z, t)}{\partial z^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p(z, t)}{\partial t^2} + \tau \frac{\partial^3 p(z, t)}{\partial t \partial z^2} = -\frac{\beta}{C_p} \frac{\partial H(z, t)}{\partial t}. \quad (1)$$

Donde

- $p(z, t)$ es la presión local a profundidad z y tiempo t .
- c_0 es la velocidad del sonido.
- τ es el tiempo de relajación.
- β es el coeficiente de expansión térmica.
- C_p es el calor específico a presión constante.
- $H(z, t) = R(z)i(t)$ es el producto de la absorción fraccional de energía $R(z)$ a profundidad z y el perfil temporal de iluminación $i(t)$.

Problema

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] P(\mathbf{x}, t) = 0, \quad t \geq 0$$

$$P(\mathbf{x}', 0) = f(\mathbf{x}'), \quad \left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \quad (2)$$

$$P(\mathbf{x}_S, t) = g(\mathbf{x}_S, t) \text{ para } \mathbf{x}_S \in S, t \geq 0.$$

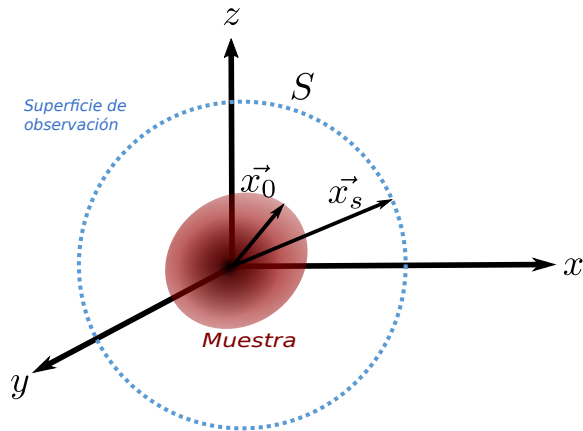


Figure: Problema inverso en la reconstrucción fotoacústica.

Modelo en Espacio de Estados Lineal

Podemos modelar el problema como un modelo en espacio de estados lineal [Lang et al., 2019]:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{k+1} &= A\mathbf{x}_k + B\mathbf{u}_k \\ \mathbf{y}_k &= C^T\mathbf{x}_k + \mathbf{w}_k\end{aligned}\tag{3}$$

Con este enfoque, podemos encontrar la siguiente conexión lineal entre nuestras mediciones \mathbf{y} y un vector \mathbf{d} que contiene el perfil de absorción de nuestra muestra:

$$\mathbf{y} = H\mathbf{d} + \mathbf{w}\tag{4}$$

Regularización

Debido a la naturaleza del problema, es necesario considerar metodos de regularización para solucionar la ecuación 4. Se propone el uso de la regularización de Tikhonov, la cual se define como:

$$\hat{\mathbf{d}} = \arg \min_{\mathbf{d}} \{ \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{d}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{d}\|_2^2 \} \quad (5)$$

Donde

- \mathbf{d} es el vector de que queremos estimar.
- \mathbf{H} es la matriz obtenida a partir de datos experimentales.
- λ es el parámetro de regularización.

Método de la Curva L

El método de la curva L es una técnica para seleccionar el parámetro de regularización λ de manera automática. Se basa en graficar la norma del residuo contra la norma de regularización en escala logarítmica. El vértice de la curva representa el mejor compromiso entre ambos criterios.

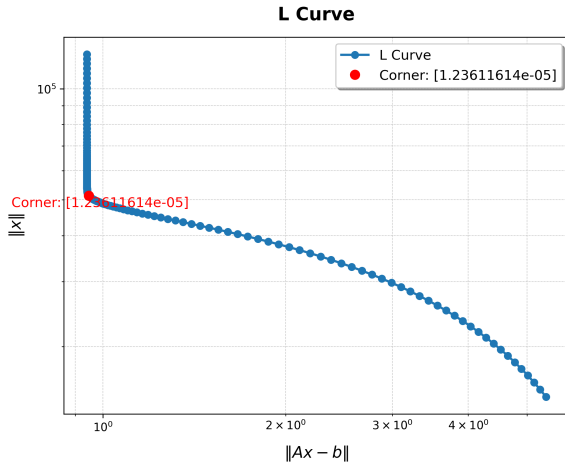


Figure: Método de la curva L.

Limitaciones de la Curva L

Limitaciones

- Puede ser computacionalmente costosa en problemas de alta dimensionalidad, debido a la necesidad de resolver el sistema para múltiples valores de λ .
- Es sensible al ruido y a la condición numérica de la matriz \mathbf{H} , lo que puede generar resultados menos robustos.
- Requiere una búsqueda exhaustiva para identificar el vértice de la curva, aumentando el tiempo de cálculo en problemas grandes.
- No explora soluciones alternativas o trade-offs explícitos, ya que se enfoca en una única solución óptima.
- No considera explícitamente la naturaleza multiobjetivo del problema (e.g., fidelidad, regularización, y restricciones físicas como positividad).

Optimización Multiobjetivo

La optimización multiobjetivo permite encontrar soluciones óptimas que equilibran múltiples objetivos en conflicto. En el contexto de la regularización de Tikhonov, los objetivos considerados son:

Objetivos

- Minimizar el error de ajuste: $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{d}\|_2^2$.
- Minimizar la norma de la solución (regularización): $\|\mathbf{d}\|_2^2$.
- Minimizar la penalización por valores negativos en \mathbf{d} , asegurando soluciones físicamente significativas.

Ventajas de la Optimización Multiobjetivo

Ventajas

- Permite explorar el espacio de soluciones y encontrar compromisos entre los objetivos definidos.
- Proporciona un conjunto de soluciones (frente de Pareto) que representan diferentes trade-offs entre los objetivos.
- Permite identificar soluciones que satisfacen restricciones físicas y son más robustas ante ruido y errores de medición.
- Proporciona información valiosa para la toma de decisiones y la selección de la solución más adecuada.

NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II) es un algoritmo evolutivo multiobjetivo que permite encontrar soluciones óptimas en problemas de optimización multiobjetivo. Este algoritmo clasifica las soluciones en diferentes frentes no dominados basándose en el concepto de *dominancia de Pareto*. Su principal ventaja es la capacidad de generar soluciones diversas y bien distribuidas a lo largo del frente de Pareto [Deb et al., 2002].

Algorithm 1: NSGA-II Algorithm

```
Inicializar  $P$ ,  $n_{\text{generations}}$  // Población inicial  
 $\mathcal{N} = |P|$ ;  
 $P_t \leftarrow P$ ;  
 $Q_t \leftarrow \text{make\_new\_pop}(P_t)$ ;  
while  $t < n_{\text{generations}}$  do  
     $R_t \leftarrow P_t \cup Q_t$ ;  
     $\mathcal{F} \leftarrow \text{fast\_non\_dominated\_sort}(R_t)$ ;  
     $P_{t+1} \leftarrow \emptyset$ ,  $i \leftarrow 1$ ;  
    while  $|P_{t+1}| + |\mathcal{F}_i| \leq \mathcal{N}$  do  
        crowding\_distance\_assignment( $\mathcal{F}_i$ );  
         $P_{t+1} \leftarrow P_{t+1} \cup \mathcal{F}_i$ ;  
         $i \leftarrow i + 1$ ;  
    Sort( $\mathcal{F}_i, \prec_n$ ) // Orden descendente usando  $\prec_n$ ;  
     $P_{t+1} \leftarrow P_{t+1} \cup \mathcal{F}_i[1 : (\mathcal{N} - |P_{t+1}|)]$ ;  
     $Q_{t+1} \leftarrow \text{make\_new\_pop}(P_{t+1})$ ;  
     $t \leftarrow t + 1$ ;
```

MOEA/D (Multiobjective Evolutionary Algorithm based on Decomposition) descompone el problema multiobjetivo en múltiples subproblemas escalares. Cada subproblema se resuelve utilizando información de sus vecinos, logrando una mejor representación en el frente de Pareto.

Algorithm 2: MOEA/D Algorithm

Entrada: Población inicial P , vectores de peso λ , vecindario T ;

Salida: Soluciones no dominadas;

Inicializar población y vecindarios;

for $t = 1$ **to** $n_{generations}$ **do**

foreach *subproblema* i **do**

 Seleccionar vecinos $B(i)$;

 Generar nueva solución y mediante cruce y mutación;

 Evaluar y y actualizar población;

foreach $j \in B(i)$ **do**

if $g(y, \lambda_j) < g(P_j, \lambda_j)$ **then**

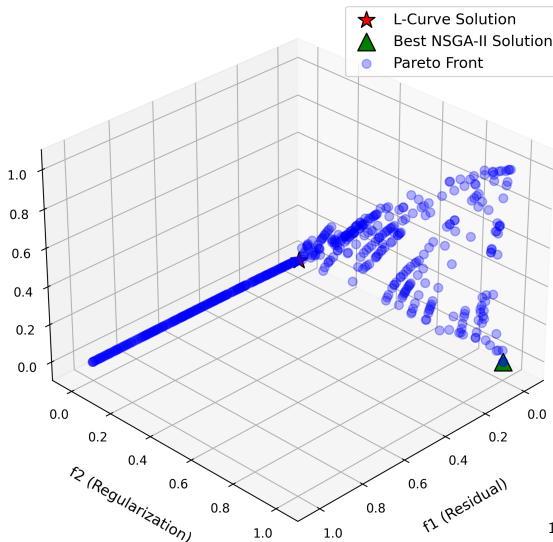
 Reemplazar P_j con y ;

Retornar soluciones no dominadas;

Frente de Pareto NSGA-II

Se aplicó el algoritmo NSGA-II para estimar el parámetro de regularización λ para la reconstrucción del perfil de absorción donde el ruido fue modelado como una distribución normal $\mathcal{N}(0, 0.1)$. Se obtuvo un frente de Pareto que muestra diferentes trade-offs entre el error de ajuste y la regularización.

Pareto Front with L-Curve and Best NSGA-II Solution



Frente de Pareto NSGA-II

Podemos agrupar las soluciones del frente de Pareto en diferentes categorías según su desempeño en los objetivos definidos.

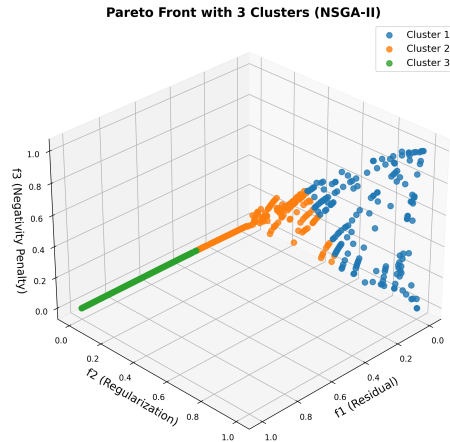
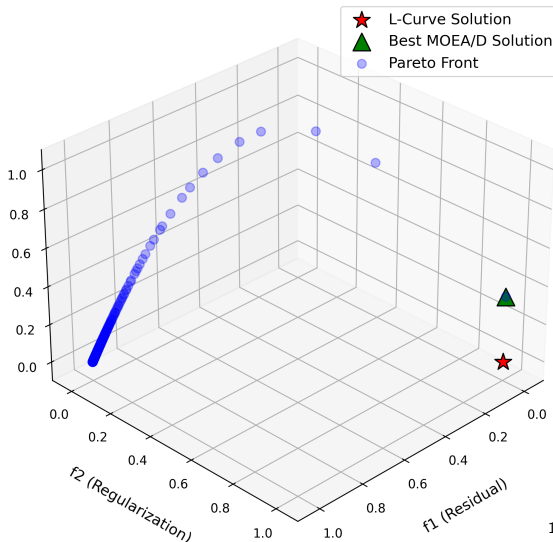


Figure: Representación de un frente de Pareto.

Frente de Pareto MOEA/D

Se aplicó el algoritmo MOEA/D para estimar el parámetro de regularización λ para la reconstrucción del perfil de absorción donde el ruido fue modelado como una distribución normal $\mathcal{N}(0, 0.1)$. Se obtuvo un frente de Pareto que muestra diferentes trade-offs entre el error de ajuste y la regularización.

Pareto Front with L-Curve and Best MOEA/D Solution



Frente de Pareto MOEA/D

Podemos agrupar las soluciones del frente de Pareto en diferentes categorías según su desempeño en los objetivos definidos.

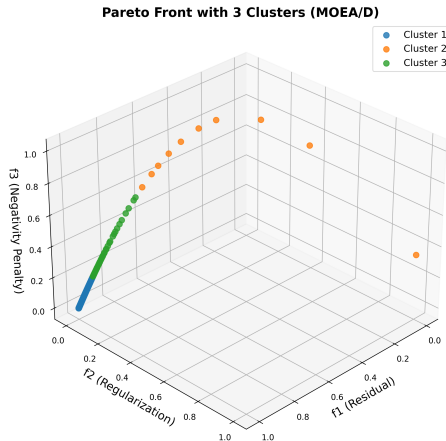


Figure: Representación de un frente de Pareto.

Correlación entre los Objetivos

Se evaluó la correlación entre los objetivos definidos en el problema de optimización multiobjetivo, así como las proyecciones de las soluciones en el espacio de objetivos generadas por NSGA-II y MOEA/D.

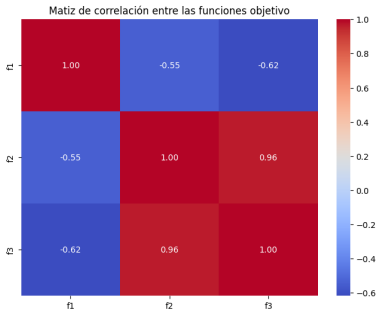


Figure: Matriz de correlación entre los objetivos.

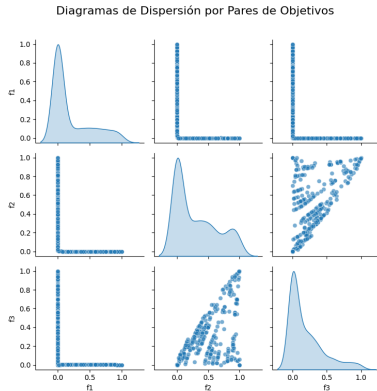


Figure: Proyecciones de las soluciones en el espacio de objetivos

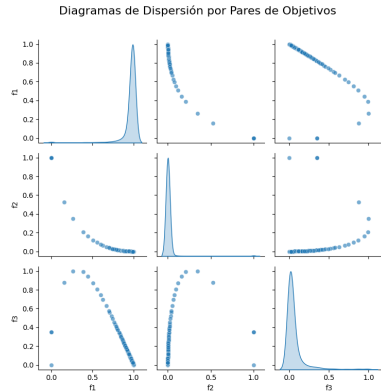
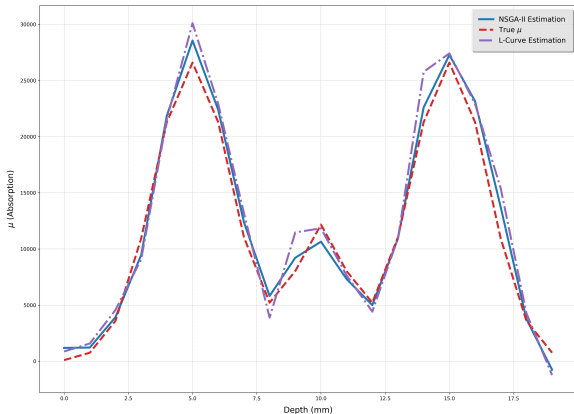


Figure: Proyecciones de las soluciones en el espacio de objetivos

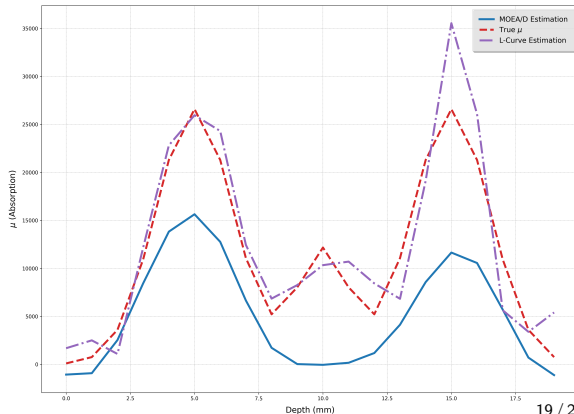
Reconstrucción del Perfil de Absorción

Las soluciones seleccionadas en los frentes de Pareto 14 y 16 fueron seleccionadas en base a su desempeño en los objetivos definidos utilizando un sistema de puntacion ponderado de 80 % para el error de ajuste, 10 % para la regularización y 10 % para la penalización por valores negativos.

Comparison of Estimations: True vs. NSGA-II vs. L-curve



Comparison of Estimations: True vs. MOEA/D vs. L-curve



Comparacion entre NSGA-II, MOEA/D y la Curva L

Método	Fidelidad (f_1)	Regularización (f_2)	Negatividad (f_3)
NSGA-II (mejor solución)	0.000	1.000	0.000
MOEA/D (mejor solución)	0.000	1.000	0.347
Curva L	0.00063	0.0071	0.0001

Table: Comparación de las métricas entre NSGA-II, MOEA/D y la curva L. Los valores están normalizados para permitir una evaluación directa.

Impacto del Ruido en el RMSE

Con la misma ponderación, se evaluó el impacto del ruido en el RMSE de las soluciones generadas mediante NSGA-II y MOEA/D, comparándolas con las obtenidas mediante la Curva L y el método de mínimos cuadrados.

Impact of Noise on Average RMSE

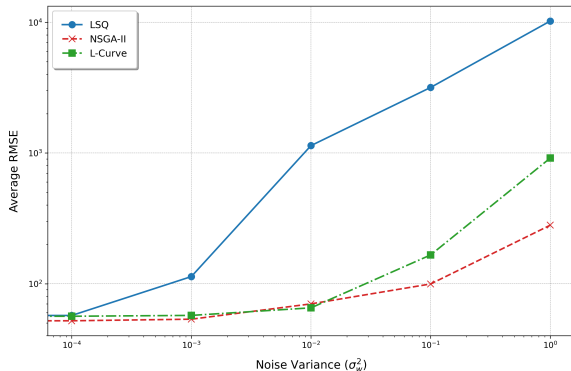


Figure: Impacto del ruido en el RMSE con NSGA-II.

Impact of Noise on Average RMSE

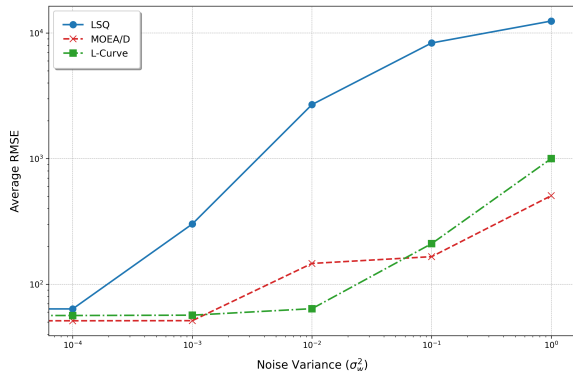


Figure: Impacto del ruido en el RMSE con MOEA/D.

To Do

- Extender la reconstrucción a dominios 2D para evaluar la escalabilidad de los algoritmos.
- Optimizar los hiperparámetros de los algoritmos multiobjetivo para mejorar su desempeño en exploración y convergencia.
- Analizar más a fondo las interacciones entre objetivos para guiar el diseño de algoritmos específicos para aplicaciones biomédicas.

Referencias



K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan (2002)

A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II

IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 6(2), 182–197. DOI:

<https://doi.org/10.1109/4235.996017>.



Q. Zhang and H. Li (2007)

MOEA/D: A multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition

IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 11(6), 712–731. DOI:

<https://doi.org/10.1109/TEVC.2007.892759>.



Oliver Lang, Péter Kovács, Christian Motz, Mario Huemer, Thomas Berer, and Peter Burgholzer (2019)

A linear state space model for photoacoustic imaging in an acoustic attenuating media

Inverse Problems, 35(1), 015003. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6420/aaea2c>.

Gracias.