RESUMEN DE AVANCE DE COLOQUIO DE INVESTIGACIÓN II SEMESTRE 2025-I

Trabajo realizado por:

Maximiliano Galindo

maximilianogalindo7@gmail.com

Proyecto de Tesis:

Optimización Multiobjetivo para la Selección del Parámetro de Regularización en la Reconstrucción de Imágenes Fotoacústicas

Supervisores

Dr. Luis Agustín Alvarez-Icaza Longoria¹ Dr. Roberto Giovanni Ramírez Chavarría²

¹Investigador Titular C Instituto de Ingeniería Universidad Nacional Autónoma de México

²Investigador Asociado C Instituto de Ingeniería Universidad Nacional Autónoma de México

Universidad Nacional Autónoma de México Noviembre 2021

Índice

1.	Intro	oducció	n	2		
	1.1.	Imágenes Fotoacústicas		2		
		1.1.1.	Preguntas de Investigación	3		
		1.1.2.	Contribuciones	4		
2.	Revi	sión de	la Literatura	5		
	2.1.	. Reconstrucción de Imágenes Fotoacústicas				
	2.2.	Model	o de Espacio de Estados Lineales para la Reconstrucción Fotoacústica	5		
	2.3.	Regula	arización de Tikhonov y el Método de la Curva L	6		
	2.4.	4. Métodos de Optimización Multi-Objetivo				
		2.4.1.	Introducción a la Optimización Multi-Objetivo	7		
		2.4.2.	NSGA-II y MOEA/D en la Reconstrucción Fotoacústica	7		
	2.5.	Desafíos y Limitaciones				
3.	Metodología					
	3.1.	. Optimización Multi-Objetivo para λ				
	3.2.	Comparación con el Método de la Curva L				
	3.3.	Evaluación Experimental con MOEA/D y NSGA-II				
	3.4.	4. Implementación Experimental con MOEA/D y NSGA-II				
		3.4.1.	Herramientas de Implementación	10		
		3.4.2.	Configuración de los Experimentos	10		
		3.4.3.	Métricas de Evaluación	10		
		3.4.4.	Pipeline Experimental	11		
		3.4.5.	Visualización y Análisis	11		
		3.4.6.	Conclusión de la Implementación	12		
4.	Exp	eriment	tos y Resultados	13		
	4.1.	Config	guración Experimental	13		
	12	Recult	ados del Frente de Pareto	13		

6.	Con	clusiones	30
	5.6.	Trabajo Futuro	29
	5.5.	Conclusiones del Análisis	29
	5.4.	Comparación entre NSGA-II y MOEA/D	28
	5.3.	Impacto del Nivel de Ruido	28
	5.2.	Correlaciones entre Objetivos	27
	5.1.	Interpretación del Frente de Pareto	27
5.	Anál	lisis de los Resultados	27
		4.9.3. Comparación entre NSGA-II y MOEA/D	26
		4.9.2. Proyecciones en 2D de los Objetivos (MOEA/D)	25
		4.9.1. Proyecciones en 2D de los Objetivos (NSGA-II)	23
	4.9.	Proyecciones en 2D de los Objetivos	23
	4.8.	Correlaciones entre Objetivos y Proyecciones en 2D	22
	4.7.	Impacto del Ruido en el RMSE	21
	4.6.	Comparación entre NSGA-II, MOEA/D y la Curva L	20
	4.5.	Resultados del Hipervolumen	18
	4.4.	Reconstrucción del Perfil de Absorción	17
	4.3.	Análisis de Clustering de los Frentes de Pareto	15

Lista de Figuras

1.1.	Esquema de imágenes fotoacústicas que muestra cómo el láser y el ultrasonido se combinan para detectar estructuras internas como tumores y vasos sanguíneos	2
4.1.	Frente de Pareto generado por NSGA-II para λ . Cada punto representa un compromiso entre los objetivos	14
4.2.	Frente de Pareto generado por MOEA/D para λ . Cada punto representa un compromiso entre los objetivos	15
4.3.	Clustering del frente de Pareto generado por NSGA-II. Cada color representa un grupo de soluciones con características similares	16
4.4.	Clustering del frente de Pareto generado por MOEA/D. Cada color representa un grupo de soluciones con características similares	16
4.5.	Perfiles de absorción reconstruidos utilizando NSGA-II. La curva azul representa el perfil real y la curva roja corresponde a la solución reconstruida	17
4.6.	Perfiles de absorción reconstruidos utilizando MOEA/D. La curva azul representa el perfil real y la curva verde corresponde a la solución reconstruida	18
4.7.	Convergencia del hipervolumen a lo largo de generaciones para NSGA-II	19
4.8.	Convergencia del hipervolumen a lo largo de generaciones para MOEA/D	19
4.9.	Impacto del ruido en el RMSE promedio utilizando NSGA-II para diferentes valores de σ^2	21
4.10.	Impacto del ruido en el RMSE promedio utilizando MOEA/D para diferentes valores de σ^2	22
4.11.	Matriz de correlación entre las funciones objetivo f_1 , f_2 , y f_3	23
4.12.	Proyecciones en 2D entre los objetivos f_1 , f_2 y f_3 para NSGA-II. Cada subgráfica representa la relación entre dos objetivos, mientras que las distribuciones marginales se encuentran en la diagonal	24
4.13.	Proyecciones en 2D entre los objetivos f_1 , f_2 y f_3 para MOEA/D. Las distribuciones marginales están en la diagonal principal, mientras que las relaciones entre pares de objetivos se muestran en las subgráficas	25

Lista de Tablas

4.1.	Comparación de las métricas entre NSGA-II, MOEA/D y la curva L. Los valores	
	están normalizados para permitir una evaluación directa	20

Capítulo 1

Introducción

1.1. Imágenes Fotoacústicas

La generación de imágenes utilizando el efecto fotoacústico se ha establecido como una técnica no invasiva valiosa para investigar la composición y estructura de diversos materiales. Este método combina el alto contraste de las imágenes ópticas con la penetración profunda de la detección ultrasónica, lo que lo hace especialmente relevante en aplicaciones biomédicas. El efecto fotoacústico ocurre cuando un material fotoabsorbente absorbe pulsos de luz, lo que genera aumentos localizados de temperatura y, posteriormente, cambios de presión mecánica. Estas ondas de presión se propagan como señales fotoacústicas, las cuales son detectadas por transductores ultrasónicos para crear imágenes.

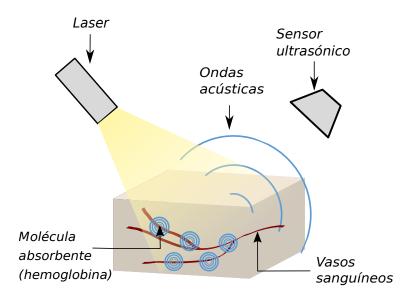


Figura 1.1: Esquema de imágenes fotoacústicas que muestra cómo el láser y el ultrasonido se combinan para detectar estructuras internas como tumores y vasos sanguíneos.

Las aplicaciones de las imágenes fotoacústicas abarcan diversos campos, con especial importancia en la investigación y el diagnóstico biomédico. Se utilizan ampliamente para evaluar estructuras arteriales, monitorear los niveles de oxigenación tisular, realizar endoscopias gastrointestinales y llevar a cabo imágenes *in vivo* de procesos moleculares y celulares en modelos experimentales. Además, las imágenes fotoacústicas han demostrado ser útiles para estudiar el cerebro y sus funciones en animales, proporcionando información tanto en estados saludables como patológicos.

La reconstrucción de imágenes a partir de señales fotoacústicas requiere un modelado preciso y técnicas computacionales avanzadas. Métodos como la Reversión Temporal, el algoritmo de Retardo y Suma, y las técnicas de Regularización son ampliamente utilizados. Sin embargo, estos métodos enfrentan desafíos debido a la naturaleza mal condicionada del problema de reconstrucción, donde pequeños errores en los datos pueden resultar en grandes desviaciones en las imágenes reconstruidas.

Esta investigación introduce un enfoque novedoso para la reconstrucción de imágenes foto-acústicas, cambiando el enfoque de los métodos tradicionales de regularización hacia la optimización multiobjetivo. Al aprovechar algoritmos evolutivos como **NSGA-II** y **MOEA/D**, este enfoque explora un conjunto diverso de soluciones sin la necesidad de predefinir un parámetro de regularización óptimo. La cuidadosa selección de los objetivos permite equilibrar restricciones en competencia, como la precisión, la estabilidad y el realismo físico en el proceso de reconstrucción.

MOEA/D en la Reconstrucción de Imágenes Fotoacústicas

Además de NSGA-II, esta investigación incorpora MOEA/D (Multi-Objective Evolutionary Algorithm based on Decomposition), una técnica de optimización multiobjetivo que descompone el problema en múltiples subproblemas escalarizados, cada uno optimizado de manera local. MOEA/D sobresale en escenarios donde se requiere una representación balanceada del frente de Pareto y se deben priorizar soluciones específicas mediante la asignación de pesos.

En este contexto, MOEA/D ofrece las siguientes ventajas para la reconstrucción de imágenes fotoacústicas:

- Exploración de soluciones balanceadas: La descomposición del problema asegura que se exploren todas las regiones del frente de Pareto, incluso aquellas menos dominantes.
- Flexibilidad en la definición de pesos: Permite priorizar objetivos específicos como la penalización de valores negativos o la regularización, ajustando los pesos de las direcciones de referencia.
- Mayor robustez frente a ruido: Las estrategias de vecindario en MOEA/D, junto con la descomposición, mejoran la estabilidad en entornos con ruido.

Los experimentos realizados en este estudio destacan cómo MOEA/D complementa a NSGA-II, proporcionando soluciones más balanceadas al incorporar estrategias basadas en pesos. Esto es particularmente relevante en la reconstrucción de imágenes donde el realismo físico y la estabilidad son fundamentales.

1.1.1. Preguntas de Investigación

La naturaleza mal condicionada del problema de reconstrucción en las imágenes fotoacústicas plantea preguntas críticas sobre cómo equilibrar mejor las compensaciones entre precisión, estabilidad y plausibilidad física de las soluciones. Esta investigación busca responder a la siguiente pregunta principal:

¿Cómo puede la optimización multiobjetivo mejorar la estimación de los parámetros de regularización en la reconstrucción de imágenes fotoacústicas, y cómo se compara esto con los métodos tradicionales como la curva-L?

A partir de esta pregunta, el estudio aborda las siguientes subpreguntas:

- RQ1: ¿Cuáles son las limitaciones del método de la curva-L para estimar parámetros de regularización óptimos en la reconstrucción de imágenes fotoacústicas?
- RQ2: ¿Cómo pueden los algoritmos de optimización multiobjetivo como NSGA-II y MOEA/D mejorar la estimación del parámetro de regularización λ ?
- RQ3: ¿Qué impacto tiene la introducción de objetivos adicionales, como la penalización de la negatividad, en la calidad de las imágenes reconstruidas?
- RQ4: ¿Cómo se comparan las soluciones obtenidas mediante optimización multiobjetivo en rendimiento e interpretabilidad con las derivadas de métodos tradicionales de un solo objetivo?
- RQ5: ¿Cómo se desempeña MOEA/D en la estimación de λ frente a NSGA-II y , especialmente en términos de diversidad del frente y calidad de las soluciones reconstruidas?

1.1.2. Contribuciones

Esta investigación aporta las siguientes contribuciones clave:

- C1: Desarrollo de un marco de optimización multiobjetivo para estimar el parámetro de regularización λ en la reconstrucción de imágenes fotoacústicas.
- C2: Introducción y análisis de objetivos adicionales, como la penalización de valores negativos en la solución reconstruida, para mejorar el realismo físico.
- C3: Análisis comparativo de las soluciones basadas en algoritmos multiobjetivo frente a los métodos tradicionales de la curva-L, destacando fortalezas y debilidades.
- C4: Evaluación integral de frentes de Pareto para visualizar las compensaciones entre objetivos en competencia en la reconstrucción de imágenes.
- C5: Implementación de un *pipeline* reproducible para la generación de datos sintéticos y evaluación de métodos de reconstrucción.
- C6: Identificación de correlaciones y dependencias entre objetivos de reconstrucción, guiando mejoras algorítmicas futuras.
- C7: Integración de MOEA/D como un enfoque complementario para la estimación de λ , destacando su capacidad para producir frentes de Pareto balanceados y soluciones robustas frente al ruido.

Capítulo 2

Revisión de la Literatura

2.1. Reconstrucción de Imágenes Fotoacústicas

La imagen fotoacústica combina los principios de la óptica y la acústica para generar imágenes a partir de señales ultrasónicas. Estas señales son producidas por materiales que absorben pulsos de luz, lo que genera un aumento de temperatura y ondas de presión mecánica detectables por sensores ultrasónicos. Esta técnica es ampliamente utilizada en aplicaciones biomédicas, como la evaluación de tejidos arteriales, la monitorización de oxigenación tisular y estudios cerebrales *in vivo* en modelos animales [6].

El proceso de reconstrucción de imágenes implica la captura y análisis de las señales registradas por sensores. Entre los métodos clásicos se encuentran *Time Reversal* y *Delay and Sum*, conocidos por su rapidez pero limitados frente a ruido y problemas mal condicionados. En este contexto, la regularización de Tikhonov se ha convertido en una herramienta esencial para estabilizar los problemas mal planteados [5].

2.2. Modelo de Espacio de Estados Lineales para la Reconstrucción Fotoacústica

El problema de reconstrucción en imágenes fotoacústicas puede formularse como un sistema de ecuaciones lineales:

$$y = Hd + w, (2.1)$$

donde y representa las mediciones obtenidas por los transductores ultrasónicos, \mathbf{H} es la matriz del sistema que modela la propagación de las ondas acústicas, \mathbf{d} es el vector que contiene las propiedades de absorción óptica del medio, y \mathbf{w} es un término de ruido que sigue una distribución normal $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

La matriz H es construida a partir de datos experimentales o simulaciones numéricas, integrando los efectos de la propagación acústica y las características físicas del medio. Sin embargo, en medios acústicamente atenuantes, la precisión de este modelo puede verse afectada por factores como la dispersión, la atenuación no lineal y las condiciones de frontera [4].

Un desafío significativo al resolver este sistema es su naturaleza mal condicionada, especial-

mente cuando H es grande o cercana a ser singular. Esto implica que pequeñas perturbaciones en las mediciones y pueden causar grandes errores en la estimación de d. Además, la presencia de ruido w exacerba la inestabilidad del sistema, lo que hace necesario emplear técnicas avanzadas de regularización para obtener soluciones estables.

El enfoque de espacio de estados lineales propuesto por Lang et al. (2019) modela directamente la dinámica del sistema acústico utilizando ecuaciones diferenciales parciales lineales. Este modelo permite representar la propagación acústica en medios atenuantes mediante un sistema matricial de la forma:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{u}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{w},\tag{2.2}$$

donde x es el estado interno del sistema que describe la propagación de las ondas acústicas, u es la entrada del sistema (generalmente las fuentes fotoacústicas), A es la matriz de dinámica, B acopla las fuentes al sistema, C mapea los estados internos a las mediciones y, y w representa el ruido.

Este modelo tiene varias ventajas:

- Permite capturar las características dinámicas del sistema acústico de manera compacta y eficiente.
- Es compatible con técnicas modernas de regularización y algoritmos de optimización multiobjetivo, como NSGA-II y MOEA/D, para abordar el problema de estimar d de manera robusta.
- Facilita la incorporación de restricciones físicas, como la positividad de d, y la penalización de valores no plausibles, mejorando la interpretación y utilidad de las soluciones reconstruidas.

En resumen, el modelo de espacio de estados lineales proporciona un marco riguroso y flexible para abordar los desafíos de reconstrucción en imágenes fotoacústicas, permitiendo la integración de métodos computacionales avanzados para mitigar los efectos del ruido y la inestabilidad inherente al sistema [4].

2.3. Regularización de Tikhonov y el Método de la Curva L

La regularización de Tikhonov introduce un término de penalización para estabilizar la solución:

$$\hat{\mathbf{d}} = \arg\min_{\mathbf{d}} \left\{ \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{d}\|_{2}^{2} + \lambda \|\mathbf{d}\|_{2}^{2} \right\}, \tag{2.3}$$

donde λ controla el equilibrio entre fidelidad a los datos y estabilidad de la solución [5].

El método de la curva L selecciona λ graficando la norma del residuo contra la norma de regularización en escala logarítmica. El vértice de la curva representa el mejor compromiso entre ambos criterios [3]. Sin embargo, esta metodología puede ser subjetiva y computacionalmente costosa en problemas de alta dimensionalidad.

2.4. Métodos de Optimización Multi-Objetivo

2.4.1. Introducción a la Optimización Multi-Objetivo

La optimización multi-objetivo busca soluciones que equilibren múltiples criterios simultáneamente. En la reconstrucción fotoacústica, los objetivos típicos incluyen minimizar el residuo y garantizar la estabilidad de la solución, generando un frente de Pareto que representa compromisos entre estos objetivos [1].

2.4.2. NSGA-II y MOEA/D en la Reconstrucción Fotoacústica

NSGA-II es un algoritmo evolutivo diseñado para problemas multi-objetivo. Este método clasifica soluciones en términos de dominancia y promueve la diversidad del frente de Pareto [2]. Su capacidad para manejar múltiples objetivos simultáneamente lo hace ideal para explorar alternativas en la estimación del parámetro de regularización y mejorar la reconstrucción.

Por otro lado, MOEA/D (Multi-Objective Evolutionary Algorithm based on Decomposition) descompone el problema multi-objetivo en varios subproblemas escalarizados, resolviendo cada uno de manera local utilizando direcciones de referencia [7]. MOEA/D ofrece ventajas clave para la reconstrucción de imágenes fotoacústicas:

- Exploración uniforme: Genera una representación balanceada del frente de Pareto, asegurando la diversidad.
- **Flexibilidad:** Permite priorizar ciertos objetivos asignando pesos específicos a las direcciones de referencia.
- Robustez frente al ruido: Las estrategias basadas en vecindarios mejoran la estabilidad de las soluciones.

Este trabajo destaca cómo MOEA/D complementa a NSGA-II al ofrecer una mayor capacidad para ajustar las prioridades de los objetivos y explorar soluciones más balanceadas.

2.5. Desafíos y Limitaciones

A pesar de los avances, la reconstrucción de imágenes fotoacústicas enfrenta desafíos significativos:

- Sensibilidad al ruido en las mediciones.
- Dificultad para determinar un valor óptimo de λ en escenarios complejos.
- Limitaciones computacionales en técnicas tradicionales como la curva L.
- Necesidad de garantizar un balance adecuado entre fidelidad, regularización y restricciones físicas como la positividad.

Este trabajo aborda estas limitaciones mediante el uso de algoritmos multi-objetivo, destacando cómo NSGA-II y MOEA/D permiten explorar frentes de Pareto diversos, ajustando objetivos específicos para mejorar la reconstrucción y superar las limitaciones de los métodos tradicionales.

Capítulo 3

Metodología

3.1. Optimización Multi-Objetivo para λ

Para abordar la estimación del parámetro λ de manera más robusta, este trabajo emplea algoritmos de optimización multi-objetivo avanzados, específicamente NSGA-II y MOEA/D. Ambos métodos están diseñados para explorar y optimizar soluciones en escenarios con objetivos múltiples y en competencia.

NSGA-II

NSGA-II se utiliza para generar un frente de Pareto que representa las posibles soluciones para λ , optimizando los siguientes objetivos:

- 1. Minimización del residuo: $\|\mathbf{y} \mathbf{Hd}\|_2^2$,
- 2. Minimización del término de regularización: $\|\mathbf{d}\|_{2}^{2}$,
- 3. Penalización de valores negativos en d: $\sum |\mathbf{d}_i|$ para $\mathbf{d}_i < 0$.

El enfoque de NSGA-II permite generar un conjunto diverso de soluciones que reflejan los compromisos entre los objetivos definidos. Cada punto del frente de Pareto representa un valor de λ y su correspondiente reconstrucción $\hat{\mathbf{d}}$.

MOEA/D

MOEA/D, por otro lado, adopta un enfoque basado en la descomposición del problema multiobjetivo en múltiples subproblemas de optimización escalar. Cada subproblema se resuelve utilizando una combinación lineal ponderada de los objetivos:

$$f_{\text{scalar}} = \omega_1 \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{d}\|_2^2 + \omega_2 \|\mathbf{d}\|_2^2 + \omega_3 \sum |\mathbf{d}_i| \text{ para } \mathbf{d}_i < 0,$$
(3.1)

donde $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ son pesos que determinan la importancia relativa de cada objetivo.

Ventajas de MOEA/D:

• Generación más eficiente del frente de Pareto al enfocarse en subproblemas individuales.

- Mayor flexibilidad para explorar regiones específicas del espacio de soluciones.
- Escalabilidad superior en problemas con un número elevado de objetivos.

El uso combinado de MOEA/D y NSGA-II permite evaluar las diferencias en la diversidad y calidad de las soluciones generadas, así como el tiempo computacional requerido para cada algoritmo.

3.2. Comparación con el Método de la Curva L

El método de la curva L proporciona un único valor óptimo de λ que equilibra la fidelidad de los datos y la regularización. Sin embargo, su naturaleza unidimensional limita su capacidad para explorar soluciones alternativas. La integración de MOEA/D y NSGA-II permite:

- Identificar un conjunto diverso de soluciones con diferentes compromisos entre objetivos.
- Incorporar restricciones adicionales, como la positividad de d, para mejorar la plausibilidad física de las soluciones.
- Analizar cómo diferentes configuraciones de λ afectan la reconstrucción del perfil de absorción μ .

3.3. Evaluación Experimental con MOEA/D y NSGA-II

Los experimentos realizados con MOEA/D y NSGA-II incluyen:

- 1. Simulación de datos con diferentes niveles de ruido ($\sigma^2=0.0,10^{-4},10^{-3},10^{-2},10^{-1},1.0$), donde σ^2 representa la varianza del ruido agregado a las mediciones.
- 2. Generación del frente de Pareto utilizando MOEA/D y NSGA-II para explorar configuraciones óptimas del parámetro λ .
- 3. Comparación de las soluciones generadas con las obtenidas mediante el método de la curva L en términos de fidelidad de los datos, estabilidad de la solución y plausibilidad física.
- 4. Visualización y análisis del frente de Pareto, incluyendo la evaluación de la correlación entre los objetivos y el impacto del ruido en las soluciones generadas.

Los niveles de σ^2 fueron seleccionados para simular condiciones prácticas y analizar la robustez de cada método frente a diferentes niveles de ruido. Esto permite evaluar la efectividad de MOEA/D y NSGA-II en escenarios donde el ruido afecta significativamente la calidad de las mediciones y, por ende, la reconstrucción del perfil de absorción μ .

Los resultados destacan que MOEA/D tiende a generar soluciones más equilibradas y robustas en presencia de altos niveles de ruido, mientras que NSGA-II ofrece una mayor diversidad en el frente de Pareto en niveles de ruido bajos.

3.4. Implementación Experimental con MOEA/D y NSGA-II

La implementación experimental se diseñó para evaluar la efectividad de los algoritmos multiobjetivo MOEA/D y NSGA-II en la selección del parámetro de regularización λ en la reconstrucción de imágenes fotoacústicas. Este enfoque comparativo se estructuró en los siguientes componentes clave:

3.4.1. Herramientas de Implementación

Se utilizó la biblioteca Pymoo para implementar MOEA/D y NSGA-II debido a su flexibilidad para diseñar algoritmos evolutivos y personalizar operadores genéticos. Las características específicas incluyeron:

- Implementación de MOEA/D con particiones de pesos uniformes (*reference directions*) para explorar de manera equitativa todo el frente de Pareto.
- Configuración de NSGA-II para maximizar la diversidad del frente mediante operadores de selección basados en dominancia y mantenimiento de diversidad con *crowding distance*.
- Personalización de operadores de cruce y mutación para mejorar la exploración del espacio de soluciones:
 - Cruce Simulado de Binarios (SBX): Utilizado en ambos algoritmos para generar soluciones variadas respetando los límites del problema.
 - **Mutación Polinomial:** Configurada con una probabilidad de 0.8 para asegurar una exploración constante del espacio de búsqueda.

3.4.2. Configuración de los Experimentos

Se realizaron simulaciones utilizando datos sintéticos generados con base en el modelo de espacio de estados lineales descrito en la Sección 2.2. Las configuraciones específicas incluyeron:

- Población inicial generada mediante un muestreo Latin Hypercube para asegurar una distribución uniforme de las soluciones iniciales en el espacio de diseño.
- Definición de tres objetivos principales para cada algoritmo:
 - 1. Minimización del residuo $\|\mathbf{y} \mathbf{Hd}\|_2^2$.
 - 2. Minimización del término de regularización $\|\mathbf{d}\|_{2}^{2}$.
 - 3. Penalización de la negatividad para garantizar soluciones físicamente significativas.
- Configuración del número de generaciones (n_{gen}) en 500 y tamaños de población (pop_size) de 300 para ambos algoritmos.

3.4.3. Métricas de Evaluación

Para evaluar los algoritmos MOEA/D y NSGA-II, se consideraron las siguientes métricas:

- **Hipervolumen:** Calculado respecto a un punto de referencia común para medir la calidad y diversidad del frente de Pareto.
- Distribución en el Frente: Análisis visual y cuantitativo de la uniformidad de las soluciones generadas.
- Reconstrucción del Perfil de Absorción (μ): Comparación gráfica de los perfiles obtenidos con los valores de λ seleccionados por cada algoritmo.
- Comparación con la Curva L: Evaluación de las soluciones obtenidas por ambos algoritmos en comparación con el parámetro λ propuesto por la curva L.

3.4.4. Pipeline Experimental

El pipeline experimental incluyó los siguientes pasos:

- 1. **Generación de Datos:** Se simularon señales fotoacústicas con diferentes niveles de ruido $(\sigma^2 = 0.0, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 0)$.
- 2. **Ejecución de Algoritmos:** Se ejecutaron MOEA/D y NSGA-II para cada nivel de ruido, optimizando los tres objetivos definidos.
- 3. **Reconstrucción de Imágenes:** Se seleccionaron las mejores soluciones basadas en un puntaje ponderado de los objetivos ($w_1 = 0.6$ para f_1 , $w_2 = 0.1$ para f_2 , y $w_3 = 0.3$ para f_3).
- 4. Evaluación del Frente de Pareto: Se analizaron las métricas de hipervolumen, distribución y correlaciones entre objetivos.
- Análisis Comparativo: Se compararon los resultados de MOEA/D y NSGA-II con la solución propuesta por la curva L, considerando fidelidad, regularización y penalización de negatividad.

3.4.5. Visualización y Análisis

Las soluciones generadas se visualizan mediante:

- Diagramas de dispersión 2D y 3D de los frentes de Pareto para interpretar los compromisos entre objetivos.
- Gráficas de convergencia del hipervolumen para analizar la estabilidad de los algoritmos a lo largo de las generaciones.
- Comparación gráfica de los perfiles de absorción reconstruidos con los valores de λ obtenidos.

3.4.6. Conclusión de la Implementación

Este diseño experimental asegura una evaluación justa y robusta de MOEA/D y NSGA-II en comparación con la curva L. Los resultados destacan la capacidad de ambos algoritmos para generar soluciones diversas y físicamente consistentes, proporcionando un marco flexible para la selección del parámetro de regularización en problemas mal condicionados como la reconstrucción de imágenes fotoacústicas.

Capítulo 4

Experimentos y Resultados

4.1. Configuración Experimental

Para evaluar la efectividad de NSGA-II y MOEA/D en la estimación del parámetro de regularización λ , se llevaron a cabo experimentos utilizando datos sintéticos generados con base en el modelo de espacio de estados lineales descrito en la Sección 2.2. Se analizaron diferentes niveles de varianza del ruido ($\sigma^2 = 0.0, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1.0$) para simular condiciones realistas de medición.

El procedimiento experimental incluyó los siguientes pasos:

- Resolución del problema de reconstrucción utilizando el método de la curva L para determinar λ.
- 2. Exploración de frentes de Pareto de soluciones multiobjetivo utilizando:
 - NSGA-II, un algoritmo evolutivo elitista que prioriza la diversidad del frente de Pareto.
 - MOEA/D, un algoritmo basado en descomposición que equilibra las soluciones a través del frente.
- 3. Definición de los siguientes objetivos:
 - a) Minimización del residual: $\|\mathbf{y} \mathbf{Hd}\|_2^2$,
 - b) Minimización de la regularización: $\|\mathbf{d}\|_{2}^{2}$,
 - c) Penalización de valores negativos en d, para garantizar soluciones físicamente consistentes.
- 4. Reconstrucción del perfil de absorción μ utilizando los valores de λ generados por ambos algoritmos.
- 5. Comparación gráfica y cuantitativa de los resultados obtenidos con NSGA-II, MOEA/D y el método de la curva L.

4.2. Resultados del Frente de Pareto

Los frentes de Pareto generados por NSGA-II y MOEA/D proporcionan un conjunto de soluciones que representan distintos compromisos entre los objetivos definidos. Las Figuras 4.1 y

4.2 muestran los frentes de Pareto obtenidos para $\sigma^2=10^{-1}$ utilizando NSGA-II y MOEA/D, respectivamente.

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

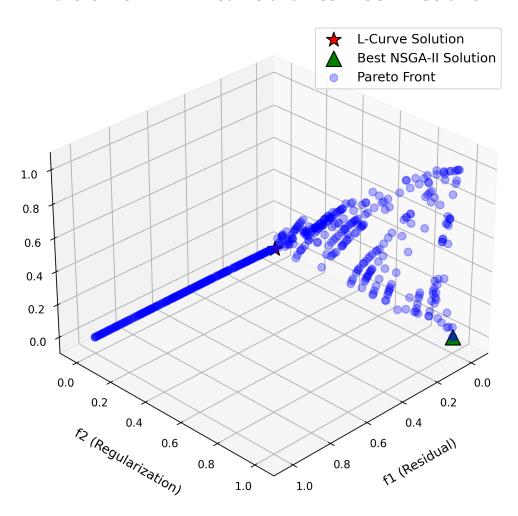


Figura 4.1: Frente de Pareto generado por NSGA-II para λ . Cada punto representa un compromiso entre los objetivos.

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

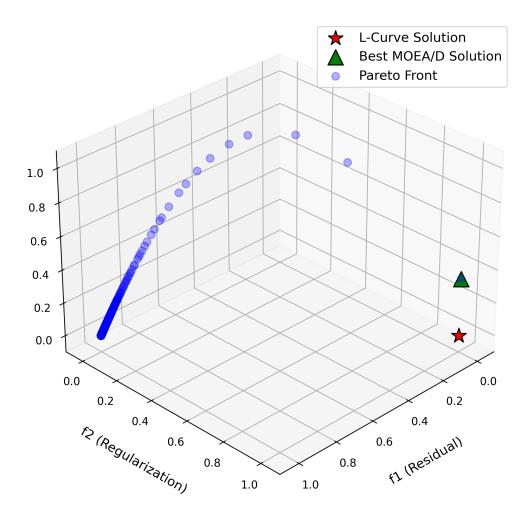


Figura 4.2: Frente de Pareto generado por MOEA/D para λ . Cada punto representa un compromiso entre los objetivos.

Aunque ambos algoritmos exploran soluciones diversas, MOEA/D genera frentes más equilibrados debido a su enfoque basado en descomposición, mientras que NSGA-II se enfoca más en la diversidad.

4.3. Análisis de Clustering de los Frentes de Pareto

Se realizó un análisis de clustering para interpretar mejor los frentes de Pareto, identificando regiones que representan diferentes compromisos entre los objetivos. Las Figuras 4.3 y 4.4 muestran los frentes de Pareto agrupados en tres clusters para NSGA-II y MOEA/D, respectivamente.

Pareto Front with 3 Clusters (NSGA-II) Cluster 1 Cluster 2 Cluster 3 Regularization, 0.8 1.0 1.0 Occurrence of the control of the control

Figura 4.3: Clustering del frente de Pareto generado por NSGA-II. Cada color representa un grupo de soluciones con características similares.

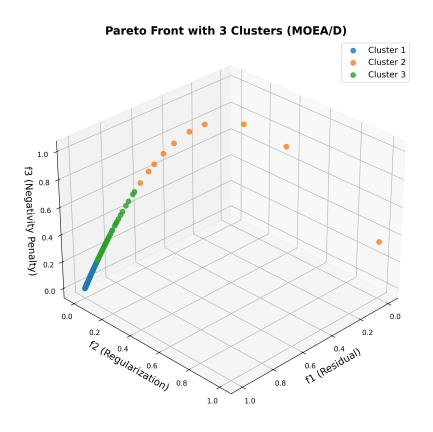


Figura 4.4: Clustering del frente de Pareto generado por MOEA/D. Cada color representa un grupo de soluciones con características similares.

El análisis revela:

- NSGA-II ofrece mayor diversidad en regiones dominadas por el residual (f_1) .
- MOEA/D genera soluciones más uniformes en zonas con alta penalización de negatividad (f_3) .

4.4. Reconstrucción del Perfil de Absorción

Las Figuras 4.5 y 4.6 presentan los perfiles de absorción μ reconstruidos utilizando los valores de λ obtenidos con NSGA-II y MOEA/D para $\sigma^2=10^{-1}$, respectivamente.

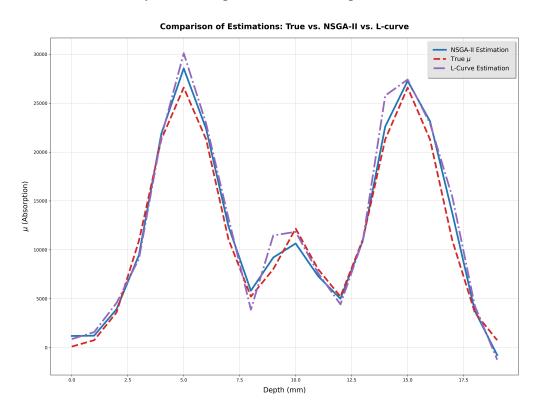


Figura 4.5: Perfiles de absorción reconstruidos utilizando NSGA-II. La curva azul representa el perfil real y la curva roja corresponde a la solución reconstruida.

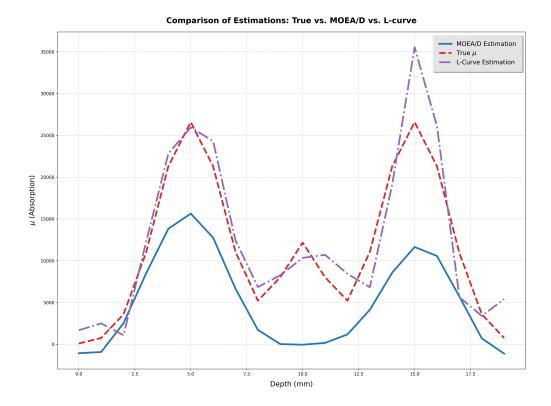


Figura 4.6: Perfiles de absorción reconstruidos utilizando MOEA/D. La curva azul representa el perfil real y la curva verde corresponde a la solución reconstruida.

Ambos métodos producen reconstrucciones físicamente consistentes en comparación con el método de la curva L, pero MOEA/D genera perfiles más estables en condiciones de ruido elevado.

4.5. Resultados del Hipervolumen

El hipervolumen se utilizó como una métrica clave para evaluar la calidad y la diversidad del frente de Pareto generado por NSGA-II y MOEA/D para $\sigma^2=10^{-1}$. Este indicador mide el espacio objetivo dominado por las soluciones en el frente de Pareto en relación con un punto de referencia ([10, 10, 10]). Por lo tanto, un mayor hipervolumen indica una mejor representación y diversidad del frente.

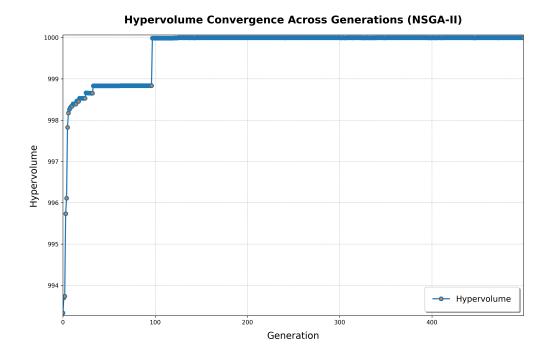


Figura 4.7: Convergencia del hipervolumen a lo largo de generaciones para NSGA-II.

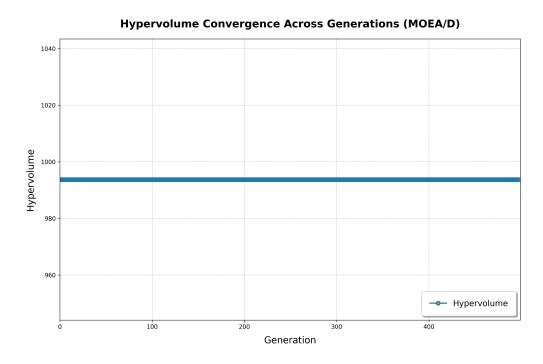


Figura 4.8: Convergencia del hipervolumen a lo largo de generaciones para MOEA/D.

Observaciones

NSGA-II: La Figura 4.7 muestra que el hipervolumen generado por NSGA-II converge rápidamente a un valor máximo alrededor de las primeras 50 generaciones. Esto indica que NSGA-II es capaz de explorar eficientemente el espacio objetivo y alcanzar un frente de Pareto de alta calidad en pocas iteraciones. Además, la variación inicial del hipervolumen refleja la diversidad de soluciones generadas durante las primeras generaciones, lo que sugiere un enfoque efectivo para equilibrar los objetivos definidos.

MOEA/D: Por otro lado, la Figura 4.8 presenta un comportamiento notablemente constante del hipervolumen a lo largo de todas las generaciones. Aunque este patrón podría interpretarse inicialmente como una falta de progreso, el análisis de las soluciones generadas revela que MOEA/D produce frentes de Pareto altamente uniformes y equilibrados desde el inicio de la ejecución. Este comportamiento destaca la eficiencia de MOEA/D para mantener una representación estable del espacio objetivo, aunque su dinámica de convergencia requiere un análisis más detallado para comprender completamente sus implicaciones.

Consideraciones Finales:

El comportamiento del hipervolumen en MOEA/D, aunque constante, no debe ser interpretado como una deficiencia en su desempeño. Por el contrario, las soluciones generadas por MOEA/D muestran una alta calidad y diversidad, lo que sugiere que el algoritmo logra rápidamente un equilibrio óptimo en el frente de Pareto. Este comportamiento podría deberse a la naturaleza de su enfoque basado en descomposición, que prioriza soluciones distribuidas de manera uniforme en el espacio objetivo desde el inicio.

En contraste, NSGA-II presenta una convergencia más dinámica, lo que refleja su capacidad para explorar y refinar continuamente el frente de Pareto. Ambos algoritmos ofrecen ventajas complementarias, y su uso debe ser considerado en función de las necesidades específicas del problema, como la rapidez en la convergencia o la uniformidad de las soluciones.

4.6. Comparación entre NSGA-II, MOEA/D y la Curva L

En esta sección se evalúan las soluciones obtenidas mediante NSGA-II, MOEA/D y la solución propuesta por la curva L. La Tabla 4.1 resume los valores de los objetivos normalizados para cada metodología para $\sigma^2=10^{-1}$.

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

Cuadro 4.1: Comparación de las métricas entre NSGA-II, MOEA/D y la curva L. Los valores están normalizados para permitir una evaluación directa.

Observaciones:

- NSGA-II: Este algoritmo generó la solución con los mejores valores de fidelidad (f_1) y negatividad (f_3) , destacándose en situaciones donde la prioridad es maximizar la precisión y garantizar la consistencia física de la solución.
- MOEA/D: Aunque alcanzó valores similares en fidelidad (f_1) y regularización (f_2) en comparación con NSGA-II, este algoritmo ofreció soluciones con un balance más equitativo entre los tres objetivos, lo que puede ser beneficioso en aplicaciones donde la penalización de la negatividad (f_3) no sea tan estricta.
- Curva L: Este enfoque tradicional produjo soluciones menos competitivas en todos los objetivos, ya que se centra únicamente en encontrar un compromiso entre fidelidad y regularización, sin considerar objetivos adicionales como la penalización de valores negativos. Sin embargo, destaca por su simplicidad y bajo costo computacional.

La selección de las "mejores" soluciones se realizó utilizando un sistema de puntuación ponderado, donde se asignó mayor importancia a la fidelidad (f_1) y la regularización (f_2) , mientras que se aplicó una penalización significativa a la negatividad (f_3) . Las ponderaciones utilizadas fueron [0,6,0,1,0,3], reflejando la prioridad otorgada a cada objetivo en el análisis.

4.7. Impacto del Ruido en el RMSE

Las Figuras 4.9 y 4.10 muestran el RMSE promedio obtenido para diferentes niveles de varianza del ruido (σ^2) utilizando NSGA-II y MOEA/D, respectivamente.

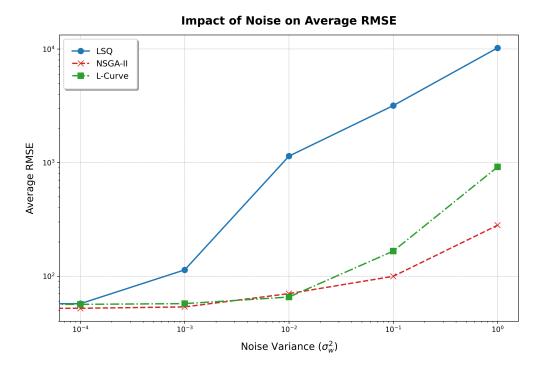


Figura 4.9: Impacto del ruido en el RMSE promedio utilizando NSGA-II para diferentes valores de σ^2 .

Impact of Noise on Average RMSE

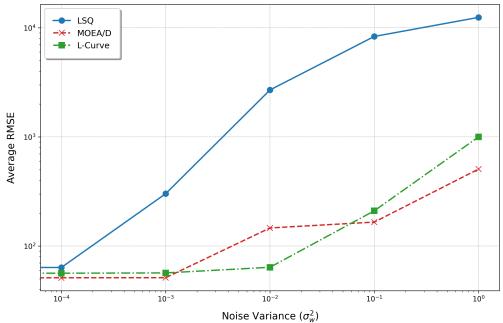


Figura 4.10: Impacto del ruido en el RMSE promedio utilizando MOEA/D para diferentes valores de σ^2 .

Observaciones clave:

- NSGA-II mantiene un RMSE más estable incluso en niveles altos de ruido, demostrando mejor adaptabilidad en condiciones adversas.
- MOEA/D es robusto a niveles bajos y moderados de ruido, pero muestra mayor sensibilidad para $\sigma^2 > 10^{-1}$.

4.8. Correlaciones entre Objetivos y Proyecciones en 2D

Para interpretar mejor los compromisos entre los objetivos definidos (f_1, f_2, f_3) , se analizaron las correlaciones entre ellos y se visualizaron las proyecciones en 2D de los frentes de Pareto generados por NSGA-II y MOEA/D.

Correlaciones entre Objetivos

La Figura 4.11 presenta la matriz de correlación entre las funciones objetivo f_1 (residual), f_2 (regularización) y f_3 (penalización de valores negativos), calculada utilizando las soluciones del frente de Pareto generado por MOEA/D y NSGA-II para $\sigma^2=10^{-1}$.

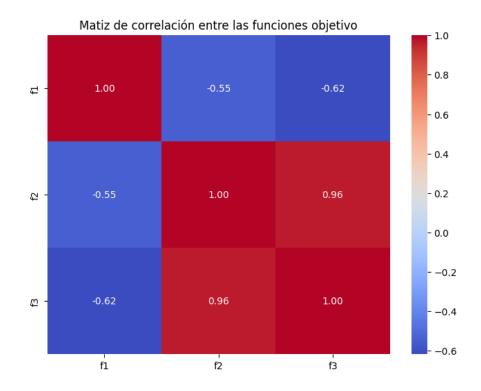


Figura 4.11: Matriz de correlación entre las funciones objetivo f_1 , f_2 , y f_3 .

Los resultados destacan las siguientes tendencias clave:

- Existe una correlación negativa entre f_1 y f_3 (-0.62) y entre f_1 y f_2 (-0.55), lo que refleja un compromiso entre minimizar el residual y garantizar soluciones físicamente consistentes.
- Se observa una alta correlación positiva entre f_2 y f_3 (0,96), lo que sugiere que aumentar la regularización también promueve soluciones con menor penalización por valores negativos.
- Estos patrones indican que los objetivos no son completamente independientes, y los algoritmos deben gestionar cuidadosamente estas correlaciones al explorar el espacio de soluciones.

Este análisis permite identificar relaciones entre objetivos, lo que facilita priorizar soluciones específicas según las necesidades de la aplicación.

4.9. Proyecciones en 2D de los Objetivos

4.9.1. Proyecciones en 2D de los Objetivos (NSGA-II)

Para analizar las relaciones entre los objetivos definidos, se realizaron proyecciones bidimensionales de las soluciones obtenidas con NSGA-II en el frente de Pareto. La Figura 4.12 muestra las distribuciones marginales de cada objetivo $(f_1, f_2 \ y \ f_3)$ en las diagonales principales, y los diagramas de dispersión para cada par de objetivos en las subgráficas restantes.

Diagramas de Dispersión por Pares de Objetivos

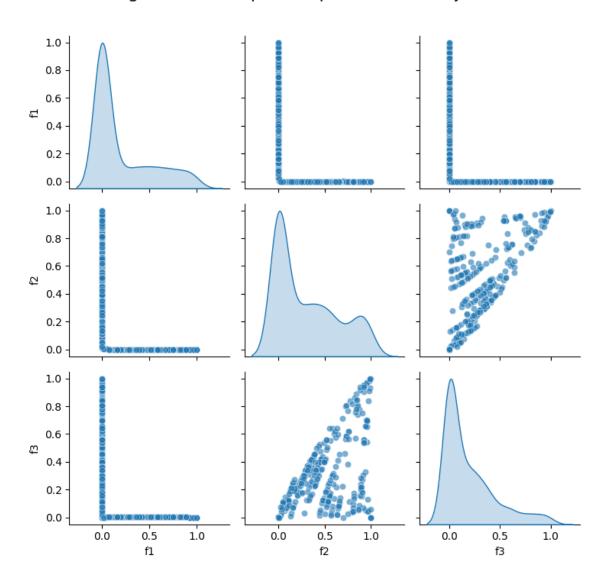


Figura 4.12: Proyecciones en 2D entre los objetivos f_1 , f_2 y f_3 para NSGA-II. Cada subgráfica representa la relación entre dos objetivos, mientras que las distribuciones marginales se encuentran en la diagonal.

Observaciones clave:

- La relación entre f_2 (regularización) y f_3 (penalización de negatividad) es aproximadamente lineal, lo que confirma la correlación positiva observada en la matriz de correlación.
- f_1 (residual) muestra una dispersión no lineal con respecto a f_2 y f_3 , destacando compromisos complejos entre la fidelidad de los datos y la estabilidad de las soluciones.
- Las distribuciones marginales muestran una fuerte concentración de soluciones en valores bajos de f_1 y f_3 , indicando que NSGA-II prioriza soluciones con bajos residuos y consistencia física.

4.9.2. Proyecciones en 2D de los Objetivos (MOEA/D)

Para MOEA/D, las proyecciones bidimensionales de los objetivos muestran relaciones distintivas en comparación con NSGA-II. La Figura 4.13 presenta las distribuciones marginales de f_1 , f_2 y f_3 en la diagonal principal, junto con diagramas de dispersión para cada par de objetivos.

Diagramas de Dispersión por Pares de Objetivos

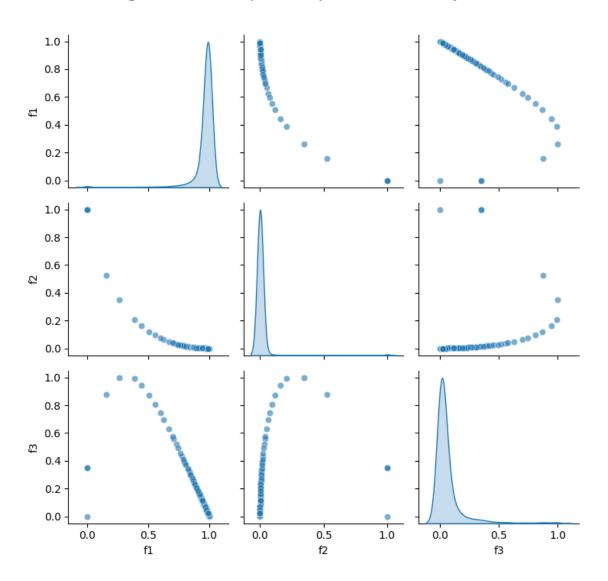


Figura 4.13: Proyecciones en 2D entre los objetivos f_1 , f_2 y f_3 para MOEA/D. Las distribuciones marginales están en la diagonal principal, mientras que las relaciones entre pares de objetivos se muestran en las subgráficas.

Observaciones clave:

- La relación entre f_2 (regularización) y f_3 (penalización de negatividad) muestra una fuerte correlación no lineal, indicando una interacción más controlada entre estos objetivos.
- A diferencia de NSGA-II, f_1 (residual) presenta una tendencia más estructurada en relación con f_2 , sugiriendo que MOEA/D logra una asignación más equilibrada en el frente de Pareto.

 Las distribuciones marginales son más uniformes en comparación con NSGA-II, lo que refleja el enfoque de descomposición de MOEA/D para generar soluciones equidistantes en el espacio objetivo.

4.9.3. Comparación entre NSGA-II y MOEA/D

El análisis de las proyecciones de los objetivos para NSGA-II (Figura 4.12) y MOEA/D (Figura 4.13) revela diferencias significativas en cómo estos algoritmos exploran el espacio de soluciones:

- NSGA-II tiende a priorizar la diversidad en regiones dominadas por f_1 , mientras que MOEA/D genera frentes más uniformes con una mejor representación de f_2 y f_3 .
- MOEA/D presenta una estructura más definida entre los objetivos, lo que puede ser ventajoso para problemas que requieren soluciones equitativas en el frente.
- En aplicaciones donde la positividad y la estabilidad son críticas, MOEA/D muestra un mejor desempeño debido a su habilidad para equilibrar f_3 (penalización de negatividad).

Capítulo 5

Análisis de los Resultados

5.1. Interpretación del Frente de Pareto

Los frentes de Pareto generados por NSGA-II y MOEA/D ofrecen perspectivas valiosas sobre los compromisos entre los objetivos de fidelidad (f_1) , regularización (f_2) y positividad (f_3) .

Para NSGA-II:

- Las soluciones cercanas a la esquina inferior izquierda representan configuraciones óptimas en fidelidad y regularización, pero con una posible disminución en la positividad de las soluciones.
- En contraste, las soluciones hacia la parte superior derecha del frente implican un énfasis excesivo en la regularización, lo que compromete la fidelidad.

Para MOEA/D:

- Las soluciones están distribuidas de manera más uniforme en el frente de Pareto, con compromisos mejor equilibrados entre los tres objetivos.
- Esto sugiere que MOEA/D es más efectivo para garantizar que todas las regiones del frente sean exploradas, lo que es especialmente útil cuando los objetivos son igualmente importantes.

El uso de estos algoritmos supera significativamente la limitación de la curva L, que solo identifica un único punto en el espacio de soluciones.

5.2. Correlaciones entre Objetivos

El análisis de correlaciones entre los objetivos muestra interacciones clave que influyen en el desempeño de las soluciones obtenidas. La Figura 4.11 para NSGA-II destaca:

• Una correlación negativa moderada entre f_1 (fidelidad) y f_3 (positividad), lo que indica que la mejora en fidelidad tiende a comprometer la positividad.

• Una correlación positiva significativa entre f_2 (regularización) y f_3 , sugiriendo que las soluciones con mayor regularización tienden a reducir la negatividad.

Para MOEA/D, las correlaciones muestran:

- Una relación más definida entre f_1 y f_2 , lo que refleja que este algoritmo gestiona de manera más estructurada los compromisos entre fidelidad y regularización.
- Una menor variabilidad en las correlaciones, lo que indica una exploración más balanceada del espacio de objetivos.

Estos resultados subrayan la importancia de comprender las correlaciones para orientar la selección de soluciones dependiendo de los requisitos específicos de la aplicación.

5.3. Impacto del Nivel de Ruido

El nivel de ruido en los datos (σ^2) influye significativamente en el desempeño de NSGA-II y MOEA/D, como se ilustra en las Figuras 4.9 y 4.10:

- NSGA-II mantiene un RMSE estable para valores de ruido moderado ($\sigma^2 \le 10^{-2}$), lo que lo hace adecuado para aplicaciones con mediciones moderadamente ruidosas.
- MOEA/D muestra una mayor robustez para niveles de ruido bajo y medio, pero presenta una sensibilidad ligeramente mayor a niveles de ruido elevados ($\sigma^2 > 10^{-1}$).

Ambos algoritmos superan al método de la curva L, que es considerablemente más sensible al ruido, limitando su aplicabilidad en entornos experimentales realistas.

5.4. Comparación entre NSGA-II y MOEA/D

La comparación entre NSGA-II y MOEA/D resalta diferencias significativas:

- NSGA-II prioriza la diversidad en el frente de Pareto, generando soluciones en regiones dominadas por f_1 (fidelidad).
- MOEA/D ofrece una distribución más equilibrada de soluciones, lo que facilita la selección en problemas con objetivos igualmente importantes.
- En términos de sensibilidad al ruido, NSGA-II es más adaptable en escenarios adversos, mientras que MOEA/D sobresale en problemas con restricciones definidas.

Esta comparación destaca que ambos algoritmos son complementarios, dependiendo de los requisitos específicos del problema.

5.5. Conclusiones del Análisis

Este análisis demuestra la efectividad de NSGA-II y MOEA/D en problemas de regularización para reconstrucción de imágenes fotoacústicas. En comparación con la curva L, ambos algoritmos:

- Proporcionan un rango más amplio de soluciones que reflejan compromisos bien definidos entre fidelidad, regularización y positividad.
- Incorporan objetivos adicionales que mejoran la calidad física y matemática de las soluciones.
- Ofrecen una mayor flexibilidad para analizar la sensibilidad del problema a diferentes niveles de ruido y restricciones.

5.6. Trabajo Futuro

- 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.

Capítulo 6

Conclusiones

Este estudio exploró el uso de optimización multiobjetivo mediante los algoritmos NSGA-II y MOEA/D para abordar los desafíos de regularización en la reconstrucción de imágenes fotoacústicas. Los resultados obtenidos demuestran que ambos algoritmos son herramientas poderosas que superan las limitaciones del método tradicional de la curva L.

NSGA-II destacó por su capacidad para generar soluciones diversas, particularmente en regiones donde la fidelidad (f_1) es prioritaria, mientras que MOEA/D mostró un mejor equilibrio en la exploración del frente de Pareto. Ambos algoritmos permitieron analizar los compromisos entre fidelidad, regularización y positividad, proporcionando una base sólida para seleccionar soluciones adaptadas a las restricciones específicas del problema.

Además, los análisis de correlaciones y proyecciones en 2D mostraron cómo interactúan los objetivos, proporcionando una mejor comprensión de las dependencias entre ellos. Esto resulta crucial para guiar futuras aplicaciones en escenarios experimentales realistas, donde el ruido y otras limitaciones físicas son factores determinantes.

En general, este trabajo sienta las bases para futuras investigaciones en la optimización de hiperparámetros y la extensión de los métodos de reconstrucción a dimensiones más altas, como en imágenes 2D y 3D. Estos avances permitirán desarrollar herramientas más robustas y adaptables para aplicaciones biomédicas y científicas.

Bibliografía

- [1] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.
- [2] Kalyanmoy Deb, Amrit Pratap, Sameer Agarwal, and T Meyarivan. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2):182–197, 2002.
- [3] Per Christian Hansen. *Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve*. SIAM Review, 1992.
- [4] Oliver Lang, Péter Kovács, Christian Motz, Mario Huemer, Thomas Berer, and Peter Burgholzer. A linear state space model for photoacoustic imaging in an acoustic attenuating media. *Inverse Problems*, 35(1):015003, 2019.
- [5] A. N. Tikhonov. Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. *Soviet Mathematics Doklady*, 4:1035–1038, 1963.
- [6] Minghua Xu and Lihong V. Wang. Photoacoustic imaging in biomedicine. *Review of Scientific Instruments*, 77:041101, 2006.
- [7] Qingfu Zhang and Hui Li. Moea/d: A multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 11(6):712–731, 2007.