

Resolución de ecuación de difusión de fotones de luz en medios turbios utilizando elementos finitos y algoritmos genéticos.

Resolution photon diffusion equation of light in turbid media using finite elements and genetic algorithms.

Arturo Benson R., y Oscar Rojas D. Departamento de Matemática y Ciencia de la Computación,
Universidad de Santiago de Chile.

RESUMEN

En este artículo se realiza un estudio del uso de algoritmos genéticos para resolver la ecuación de difusión de fotones de luz en un medio turbio, donde esta ecuación se utiliza en el área de imagen óptica, para la detección de tumores y seguimiento de tratamientos oncológicos utilizando técnicas de bioluminiscencia. Se utilizó el método de los elementos finitos para obtener un sistema de ecuaciones que es resuelto con algoritmos genéticos. Los resultados de las aproximaciones con algoritmos genéticos difieren de los resultados numéricos, pero son suficientemente precisos para detectar las fuentes de emisión de fotones y su difusión, lo cual es muy relevante del punto de vista clínico, en que el interés es detectar las fuentes de emisión de fotones y como están distribuidas. Desde un punto de vista matemático, resulta interesante el estudio, ya que se demuestra que los algoritmos genéticos pueden aproximar soluciones a sistemas de ecuaciones, incorporando en funciones de evaluación de los cromosomas, heurísticas relacionadas con propiedades físicas y analíticas del problema.

Palabras clave: Fotones - imagen molecular - ecuaciones - algoritmo genético.

ABSTRACT

This article presents a study of the use of genetic algorithms to solve the equation of diffusion of photon of light in a turbid medium, where this equation is used in the area of optical imaging for tumor's detection and monitoring the cancer treatment using bioluminescence techniques. The method of finite elements is used to obtain a system of equations that is solved with genetic algorithms. The results of the approaches with genetic algorithms differ from the numerical results, but they are sufficiently accurate to detect sources of photon's emission and its diffusion, which is very important from the clinical point of view, in which the interest is to detect the sources of photon's emission and how they are distributed. From a mathematical point of view, it is interesting the study because it shows that genetic algorithms can approximate solutions of equation's systems, incorporating in evaluation's functions of the chromosomes, heuristics related to physical's properties and analytical's properties of the problem.

Keywords: Photons - molecular imaging - equations - genetic algorithm.
forma remota y no invasiva [1].

INTRODUCCIÓN

La *Imagen Molecular* es una disciplina de diagnóstico *in vivo* que tiene sus raíces en la Medicina Nuclear, la imagen molecular se define como toda aquella modalidad de imagen biomédica capaz de proporcionar información que permita detectar procesos celulares a nivel molecular en vivo, y que permite el estudio de dichos procesos de

Un considerable esfuerzo se ha dirigido hacia el desarrollo de distintas técnicas de imagen no invasiva y de alta resolución las cuales permitan obtener información necesaria para la generación de imágenes moleculares. Además la imagen óptica también presenta la ventaja de ofrecer una alta resolución temporal y una extraordinaria sensibilidad, por esto los sistemas de formación de imágenes podrían ser utilizados para diagnósticos ambulatorios y seguimiento

continuo de pacientes. Además, las modalidades funcionales de imagen proporcionan información fisiológica y efectos de fármacos con imágenes temporales [2][3].

Respecto a resolver una ecuación diferencial mediante algoritmos genéticos, existen varios trabajos que han usado algoritmos genéticos en la resolución de ecuaciones diferenciales, algunos trabajan directamente sobre la ecuación diferencial, como el trabajo presentado en [4], donde se busca disminuir la sequedad de arroz mediante algoritmos genéticos en la solución de una ecuación de sequedad de arroz o el trabajo [5] que consiste en encontrar los mejores parámetros a la ecuación del calor en ciertas secciones de un material. Otros llevan la ecuación diferencial a un problema más sencillo como el trabajo presentado en [6] que de una ecuación diferencial parcial, se plantea su solución en serie de Fourier y en esta serie se aplica algoritmos genéticos, para encontrar una solución a la ecuación diferencial parcial. En particular este trabajo, se aplica primero el método de elementos finitos a la ecuación de difusión de la luz, con el cual se obtiene un sistema de ecuaciones, el cual es resuelto mediante algoritmos genéticos.

La contribución principal del trabajo es que la investigación realizada, demuestra que la inclusión de condiciones físicas del problema en la función de Fitness del algoritmo genético, en la solución de ecuaciones de gran complejidad, como lo es la ecuación de difusión de la luz, es determinante en la calidad de la solución y no así solo el uso del error cuadrático medio como función a minimizar para una solución del tipo $Ax - b = 0$. Como contribuciones secundarias, esta la formulación detallada de como implementar el algoritmo genético donde sea requerido la solución de ecuaciones de equilibrio, como lo son los sistemas de ecuaciones en general y que desde el punto de vista clínico, una aproximación de la solución de ecuación de difusión de la luz con algoritmos genéticos tiene resultados similares a los obtenidos con métodos tradicionales de solución de sistemas de ecuaciones.

PROBLEMÁTICA

La bioluminiscencia es la generación de luz generada en animales que contienen el gen de la luciferasa. Estos genes se encuentran espontáneamente en animales como la luciérnaga o medusa, las imágenes de bioluminiscencia pueden ser obtenidas con cámaras digitales de alta resolución. La ventaja más importante de las técnicas de bioluminiscencia es que no presentan actividad de fondo y por lo tanto permiten detectar señales de muy pequeña

intensidad.

Las problemáticas principales para el desarrollo de este tipo de sistemas de detección son la determinación exacta de la profundidad desde donde se emitió la señal, ya que en bioluminiscencia los fotones de luz chocan elásticamente miles de veces antes de escapar del animal. Una primera etapa para la creación tomográfica en bioluminiscencia es entender y modelar cómo los fotones de luz recorren los tejidos antes de escapar del animal y ser detectados por detectores especializados. Es decir a partir de la información captada por los detectores, poder estimar lo que los detectores captarían dado una distribución conocida de fuentes de luz [3].

La física es donde directamente se induce a la emisión de fotones en componentes inorgánicos que tienen propiedades similares a las orgánicas. A estos componentes se les conoce como Phantom. La obtención de información es a través de máquinas compuestas por sensores ópticos que captan las emisiones de luz. Una técnica simulada para el problema planteado consiste que a través de una aplicación computacional obtener la solución a la ecuación diferencial del transporte de la luz [7].

DIFUSIÓN DE FOTONES DE LUZ

La ecuación de aproximación de la difusión (EAD) se obtiene de la ecuación de transferencia de radiación (ETR). La ETR modela el comportamiento de cómo se propaga la energía en forma de partículas subatómicas en un dominio en el cual existen condiciones impuestas por el medio, específicamente la materia. En la formulación ec.(1) se describe esta ecuación.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, \hat{s}, t) + \hat{s} \cdot \nabla \phi(r, \hat{s}, t) \\ & + (u_s(r) + u_a(r)) \phi(r, \hat{s}, t) = \\ & u_s(r) \int \Theta(\hat{s} \cdot \hat{s}') \cdot \phi(r, \hat{s}', t) d\hat{s}' + q(r, \hat{s}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

La ecuación ec.(1) está sujeta a la condición ec.(2).

$$\phi(r, \hat{s}, t) = 0, r \in \partial\Omega, \hat{s} \cdot \hat{n} < 0 \quad (2)$$

La cual establece que una vez que un fotón escapa del dominio Ω no vuelve a entrar. Además la ETR es una aproximación de la ecuación de transporte y se asume que la energía de las partículas no cambia en la colisión y que el índice de refracción es constante en el medio [8]. Los términos de ec.(1) son:

- c = Velocidad de luz en el medio.
- $u_s(r)$ = Coeficientes de dispersión monocromáticos del medio.
- $u_a(r)$ = Coeficientes de absorción monocromáticos del medio.
- $\phi(r, \hat{s}, t)$ = Tasa de partículas que se propagan dentro de un ángulo sólido en dirección \hat{s} en un instante t .
- $\Theta(\hat{s} \cdot \hat{s}')$ = Función de fase de la dispersión.
- $q(r, \hat{s}, t)$ = Fuente de fotones.
- r = Cierta lugar en el dominio.
- \hat{n} = Unidad normal hacia el exterior.

En la ETR mediante técnicas de álgebra de la proyección, se puede derivar la ecuación de aproximación de la difusión (EAD), la cual modela la propagación de luz en tejidos [9], esta ecuación se muestra en ec.(3).

$$-\nabla k(r) \nabla \Phi(r, t) + u_a(r) \Phi(r, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial t} = q_0(r) \quad (3)$$

Donde:

- $k(r) = (3(u_a(r) + u'_s(r)))^{-1}$ es el coeficiente de difusión.
- $u'_s(r) = u_s(r)(1 - g_1)$ es el coeficiente de dispersión reducido.
- $g_1 = \int_{s_{n-1}} \Theta(\hat{s} \cdot \hat{s}')(\hat{s} \cdot \hat{s}') d\hat{s}$ es la función de fase.
- r = Posición en el dominio.
- $u_a(r)$ = Coeficiente de absorción en la posición.
- c = Velocidad de la luz del medio.
- t = Tiempo.
- $q_0(r)$ = Densidad de fotones de luz en la fuente ubicada en r .
- $\Phi(r, t)$ = Densidad de fotones de luz en r .

La EAD no puede cumplir la condición de frontera ec.(2). Sin embargo tiene la condición de que la densidad de fotones es cero en la frontera del dominio, es decir $\Phi(r, t) = 0$, donde $r \in \partial\Omega$.

Para el trabajo presente solo se utilizará la EAD, que como se mencionó, se deriva de la ETR. Para la solución de la EAD se aplica el método de los elementos finitos, con el cual se obtiene un sistema de ecuaciones a resolver.

APROXIMACIÓN DE LA DIFUSIÓN CON ELEMENTOS FINITOS

Al aplicar el método de los elementos finitos (MEF) en la ecuación ec.(3), esta se multiplica por una función de prueba $\Psi(r)$, se integra sobre el dominio Ω y se utiliza la fórmula de Green que permite integrar por partes el primer miembro de la ecuación ec.(3) la cual queda como la formulación ec.(4).

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} k(r) \nabla \Phi(r) \nabla \Psi(r) d\Omega + \\ & \int_{\partial\Omega} -k(r)(n(r) \nabla \Phi(r)) \Psi(r) d(\partial\Omega) + \\ & \int_{\Omega} u_a(r) \Phi(r) \Psi(r) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi(r)}{\partial t} \Psi(r) d\Omega \\ & = \int_{\Omega} q_0(r) \Psi(r) d\Omega \end{aligned} \quad (4)$$

La solución $\Phi(r)$ se puede aproximar a una base lineal como se muestra en ec.(5).

$$\Phi(r) = \sum_{j=1}^N \phi_j \psi_j(r) \quad (5)$$

Donde:

- $\psi_j(r)$ es la función de base nodal.
- ϕ_j es la densidad de fotones en el punto nodal j .
- N es el número de puntos nodales.

Entonces al remplazar la ecuación ec.(5) en la ecuación ec.(4), se obtiene la formulación ec.(6).

$$\sum_{j=1}^N (k_{ij} + b_{ij} + c_{ij}) \phi_j + \sum_{j=1}^N (m_{ij}) \frac{\partial \phi_j}{\partial t} = q_i \quad (6)$$

Los coeficientes de las sumatorias corresponden a las siguientes integrales:

$$k_{ij} = \int_{\Omega} k(r) \nabla \psi_j(r) \nabla \psi_i(r) d\Omega \quad (7)$$

$$b_{ij} = \int_{\partial\Omega} -k(r)(n(r) \nabla \psi_j(r)) \psi_i(r) d(\partial\Omega) \quad (8)$$

$$c_{ij} = \int_{\Omega} u_a(r) \psi_j(r) \psi_i(r) d\Omega \quad (9)$$

$$m_{ij} = \int_{\Omega} \frac{1}{c} \psi_j(r) \psi_i(r) d\Omega \quad (10)$$

$$q_i = \int_{\Omega} q_0(r) \psi_i(r) d\Omega \quad (11)$$

En notación matricial la expresión ec.(6) queda como la ecuación ec.(12), donde $\Phi = [\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N]^t$.

$$(K + B + C)\Phi + M \frac{\partial \Phi}{\partial t} = Q \quad (12)$$

Se debe calcular las integrales de la ec.(7) a ec.(11), y al simplificar de forma algebraica la ecuación ec.(12) se procede a resolver el sistema de ecuaciones. Si se quiere resolver la ecuación ec.(12) en estado estable, se tiene que $\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$ y luego el sistema es $F \cdot \Phi = Q$, donde $F = K + B + C$ es simétrica, definida positiva y dispersa.

SOLUCIÓN CON ALGORITMOS GENÉTICOS

Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos son métodos adaptativos que se usan en problemas de búsqueda y optimización. A estos problemas se le establece un conjunto de soluciones iniciales denominada cromosoma, las soluciones se codifican en bits [10].

Se plantea una función de evaluación denominada función de Fitness, que evalúa las soluciones, y se conservan las mejores para la próxima iteración (generación) [11]. El funcionamiento del AG [12] se muestra en la figura 1.

Modelo de solución

En la ecuación de aproximación de la difusión (EAD), al aplicar el método de los elementos finitos (MEF), se genera un sistema de ecuaciones que se muestra en ec.(13).

$$A \cdot \Phi = b \quad (13)$$

Donde:

- A = Matriz de rigidez.
- Φ = Densidad de fotones.
- b = Vector de cargas.

El sistema se puede reescribir como $A \cdot \Phi - b = 0$, se obtienen las N ecuaciones que se muestran en ec.(14) [13], donde $f_i(\Phi)$ es el producto de la i -ésima fila de la matriz A con el vector Φ .

$$f_1(\Phi) - b_1 = 0, f_2(\Phi) - b_2 = 0, \dots, f_N(\Phi) - b_N = 0 \quad (14)$$

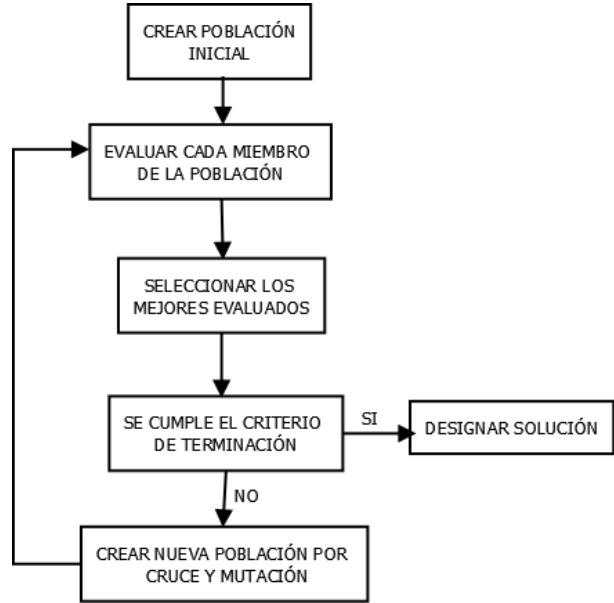


Figura 1: Funcionalidad del algoritmo genético.

El valor de Φ se aproxima de forma heurística, de modo que cada $(f_i(\Phi) - b_i)$ tienda a 0, donde $i \in [1, N]$. El Φ se desconoce y este se compone de N componentes, por tanto se define el cromosoma en ec.(15).

$$C = \{\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N\} \quad (15)$$

La expresión $(f_i(\Phi) - b_i)$ debe tender a 0, entonces se minimiza $|f_i(\Phi) - b_i|$ de modo que al efectuar una suma de estos valores, la suma sea lo más mínimo posible. Una heurística a analizar es el RMSE que corresponde a la raíz del error cuadrático medio que se muestra en ec.(16).

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (f_i(\Phi) - b_i)^2}{n}} \quad (16)$$

Además en el sistema de ecuaciones obtenido de la EAD se tienen las siguientes consideraciones físicas del problema:

1. $A \cdot \Phi \leq b$
2. $\forall i \in [1, N]$, donde N es la cantidad de nodos, se tiene: $\Phi_i \geq 0$
3. $\Phi_i = 0$ en nodos fronteras.
4. Se distribuye la masa de fotones de forma aleatoria en los nodos que no son frontera.
5. $\sum_{i=1}^N \Phi_i \leq \sum_{i=1}^N b_i$, es decir la suma de los Φ_i en los nodos va ser menor o igual que la suma de la fuente.
6. En nodos donde se encuentra la fuente, sucede que: $\Phi_i \sim b_i$

Los parámetros del AG a estudiar son la población inicial, restricciones y función de Fitness. Si se generan N nodos, entonces se genera un sistema de ecuaciones de $N \times N$, para el trabajo presente se utilizaron geometrías de elementos finitos de 289, 1089 y 4225 nodos. Para 289 y 1089 nodos, la solución AG consiste en lo siguiente: la función de Fitness corresponde al RMSE y a unos puntajes que se asignan de acuerdo a 2 condiciones a usar. Una heurística a tener es $F0 = RMSE$, las otras 2 corresponden a las condiciones de que en los nodos frontera el $\Phi_i = 0$ y que la suma de los Φ_i en los nodos sea menor o igual que la suma de la fuente.

Como se quiere minimizar, entonces los Φ que mejor cumplan la condición se le asigna el puntaje 0 (que es el mínimo puntaje y en este caso el mejor), los que no cumplan se le asigna un puntaje de castigo. En los algoritmos 1 y 2 se muestra como se asignan los puntajes.

Algoritmo 1 Condición suma de Φ_i

```

si  $\sum_{i=1}^n (\Phi_i) \leq \sum_{i=1}^n (b_i)$  entonces
     $F1 = 0$ 
si no
     $F1 = 30$ 
fin si

```

Algoritmo 2 Condición nodos fronteras

```

para  $i = 1:n$  hacer
    si  $i$  = nodo frontera entonces
        si  $\Phi_i \sim 0$  entonces
             $f2_i < 5$ 
        si no
             $f2_i > 20$ 
        fin si
    fin si
fin para
 $F2 = \sum(f2)$ 

```

La función de Fitness se define en ec.(17).

$$F = F0 + F1 + F2 \quad (17)$$

Se establece la restricción de $A \cdot \Phi \leq b$, que significa que el vector de cargas es mayor que la combinación lineal de las densidades de fotones. No se le asignan condiciones a la población inicial para estas cantidades de nodos porque con la función de Fitness determinada en ec.(17) y la restricción descrita, es suficiente para encontrar las soluciones que mejor se adaptan al problema. La población inicial se genera por defecto.

Para 4225 nodos, se construye una población inicial válida con las condiciones: en los nodos frontera $\Phi_i = 0$, se distribuye la densidad de fotones de forma aleatoria en los nodos que no son fronteras y en los nodos donde se encuentra la fuente, se asigna a Φ_i un porcentaje de b_i , suponer un 80 %, es decir: $\Phi_i = 0,8 \cdot b_i$. Se establece una restricción en el algoritmo 3.

Algoritmo 3 Restricción para 4225 nodos

```

para  $i = 1:n$  hacer
    si  $b_i > 0$  entonces
         $A \cdot \Phi \leq b$ 
    si no
         $\Phi_i \geq 0$ 
    fin si
fin para

```

Para 4225 nodos se le da prioridad a los nodos donde $b_i > 0$, ya que si la restricción $A \cdot \Phi \leq b$ se establece para todos los Φ_i , el AG comienza a funcionar de forma inestable, es decir no converge a la solución esperada. Para este caso la función de Fitness corresponde solo a $F = RMSE$.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

La geometría de elementos finitos se construye con la API pdetools de matlab, donde se simuló una difusión de fotones en un corte transversal del cerebro humano adulto, el cual está compuesto por materia gris, materia blanca y rodeado por el cráneo. Para la validación se utilizaron valores de absorción y coeficiente de dispersión obtenido del trabajo [14]. Los dominios están definidos a escala real en centímetros. En la tabla 1 se muestran los valores utilizados.

La construcción de los sistemas de ecuaciones se construyen de forma off-line con un programa en C++, donde el detalle completo de la programación de elementos finitos, la derivación formal de la matemática asociada y la descripción en detalle de la técnica de bioluminiscencia utilizada en este trabajo, esta disponible en [3]. La solución con algoritmos genéticos y método numérico se programa en Matlab.

Para la solución numérica, se utilizó el método basado en factorización LU. Para todas las fuentes, se utilizó una densidad de 10^6 fotones. Los resultados y gráficas están representados en su forma normalizada, para favorecer el análisis.

Tabla 1: Propiedades ópticas de tejidos.

| Tipo de tejido | Tipo | $u_a cm^{-1}$ | $u'_s cm^{-1}$ |
|-----------------------|---------|---------------|----------------|
| Materia gris adulto | In vivo | 0.18 | 4.8 |
| Materia blanca adulto | In vivo | 0.13 | 9.8 |
| Cráneo adulto | In vivo | 0.22 | 9.1 |

La tabla 2 muestra el tamaño de población y cantidad de generaciones utilizadas para la resolución del sistema de ecuaciones de acuerdo a la cantidad de nodos.

Tabla 2: Parámetros de entrada del AG.

| Nodos | Tamaño de población | Generaciones |
|-------|---------------------|--------------|
| 289 | 40 | 200 |
| 1089 | 20 | 35 |
| 4225 | 20 | 35 |

Para comparar la solución AG con la solución numérica, se utilizan 2 tipos de errores, el error absoluto medio (EM) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE). Además, se utiliza el coeficiente de correlación de Pearson entre los resultados, con el objetivo de analizar los errores obtenidos.

En la tabla 3 se muestra las medidas de comparación de errores entre las soluciones AG y la solución numérica para distinto número de nodos y fuentes, donde se experimenta con fuentes denotadas por q en el interior y borde del dominio.

Tabla 3: Medidas de error entre la solución numérica (LU) y AG.

| Nodos | Fuentes | Ubicación q | EM | $RMSE$ | r |
|-------|---------|----------------|--------------|--------------|--------------|
| 289 | 3 | interior | 0.018 | 0.067 | 0.865 |
| 289 | 4 | borde | 0.028 | 0.118 | 0.381 |
| 289 | 5 | borde/interior | 0.040 | 0.123 | 0.316 |
| 1089 | 3 | interior | 0.013 | 0.062 | 0.733 |
| 4225 | 3 | interior | 0.026 | 0.075 | 0.379 |

De los resultados de la tabla 3 se observa que los mejores resultados se obtienen cuando las fuentes de fotones están al interior del dominio y la precisión disminuye al aumentar el número de nodos y por tanto las dimensiones de los sistemas de ecuaciones, en la figura (2) y (3) se muestra la solución normalizada con método LU y algoritmo genético de 289 nodos y 5 fuentes.

Solución numérica 289 nodos - 5 fuentes

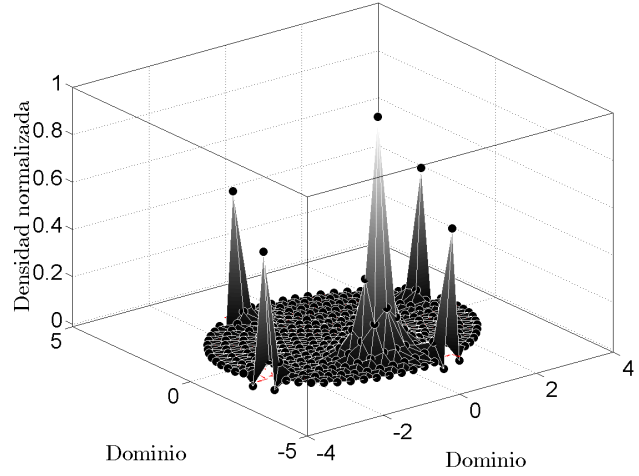


Figura 2: Solución normalizada con método LU de 289 nodos y 5 fuentes.

Solución AG 289 nodos - 5 fuentes

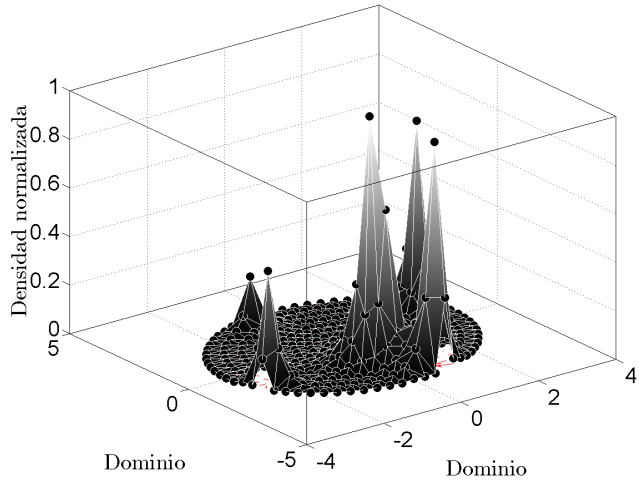


Figura 3: Solución normalizada con algoritmo genético de 289 nodos y 5 fuentes.

La causa de la disminución de la precisión con fuentes en el borde, se debe a que la EAD no puede cumplir la condición de frontera $ec(2)$ de la ETR, y la EAD usa la condición $\Phi(r) = 0$, donde $r \in \partial\Omega$ y la solución numérica no será precisa en esas zonas y por tanto se produce una divergencia hacia valores negativos en dicha zona. A pesar de lo anterior, para el caso del AG, este traslada hacia nodos internos contiguos al borde los fotones, lo cual resulta ser un fenómeno muy interesante del punto de vista analítico, ya que el AG al aplicar las condiciones físicas del problema, sobre un sistema de ecuaciones que puede quedar mal condicionado por las posiciones de fotones cercanas a la fuente,

el AG de igual forma aproxima los valores, pero con una divergencia menor que el método numérico, para este caso en específico. Este fenómeno se puede observar en las figuras (2) y (3).

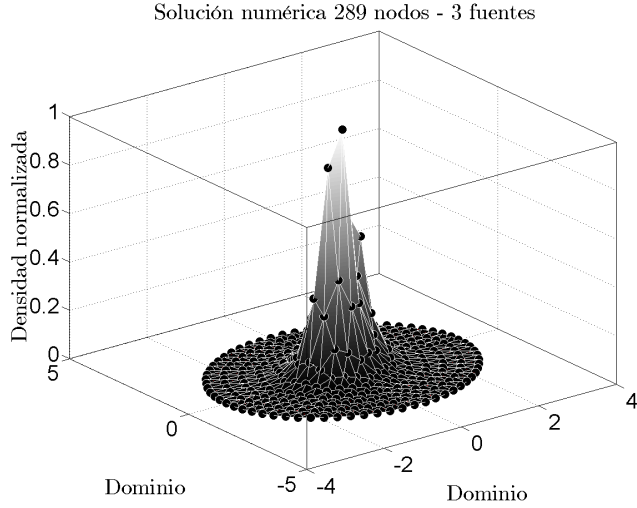


Figura 4: Solución normalizada con método LU de 289 nodos y 3 fuentes.

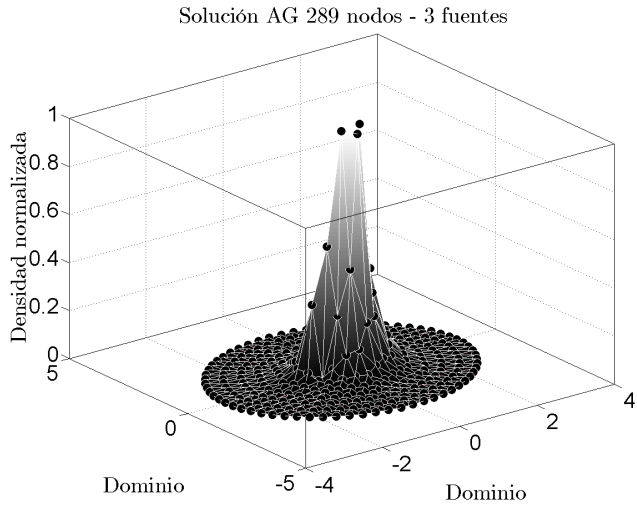


Figura 5: Solución normalizada con algoritmo genético de 289 nodos y 3 fuentes.

En las figuras (4) y (5) se visualiza la aproximación con 289 nodos y 3 fuentes de fotones, donde se observa que de forma analítica, las soluciones son muy similares. Pero a medida que aumenta la resolución de la geometría y por tanto la dimensión de los sistemas de ecuaciones, la aproximación con AG tiende a ser menos precisa, lo cual se puede observar en las figuras (6) y (7).

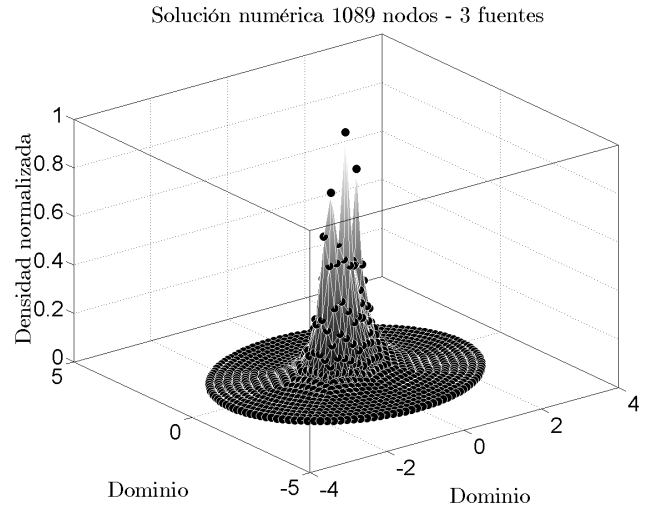


Figura 6: Solución normalizada con método LU de 1089 nodos y 3 fuentes.

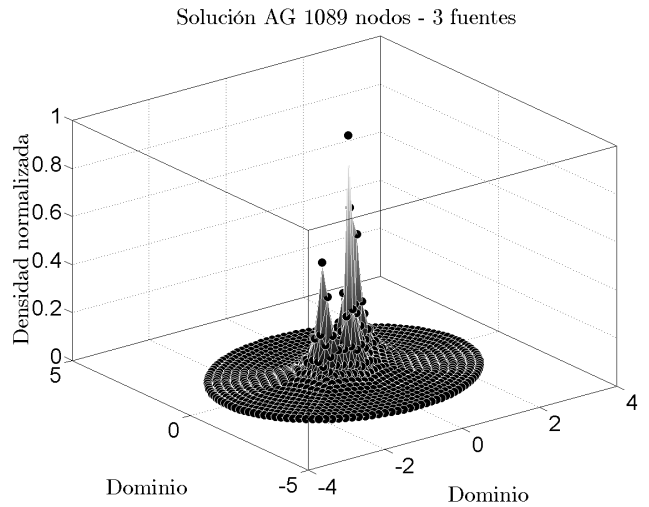


Figura 7: Solución normalizada con algoritmo genético de 1089 nodos y 3 fuentes.

La precisión disminuye más aun para el caso de 4225 nodos al analizar las gráficas presentes en las figuras (8) y (9). A pesar de esta pérdida de precisión, el AG localiza las posiciones en que existen densidades de fotones altas que están cercanas a fuentes de emisión de fotones, por lo que este método puede ser aplicable en imagen óptica, donde el interés es obtener el origen de las fuentes de radiación lumínica y como son las magnitudes de las densidades en distintas zonas del dominio.

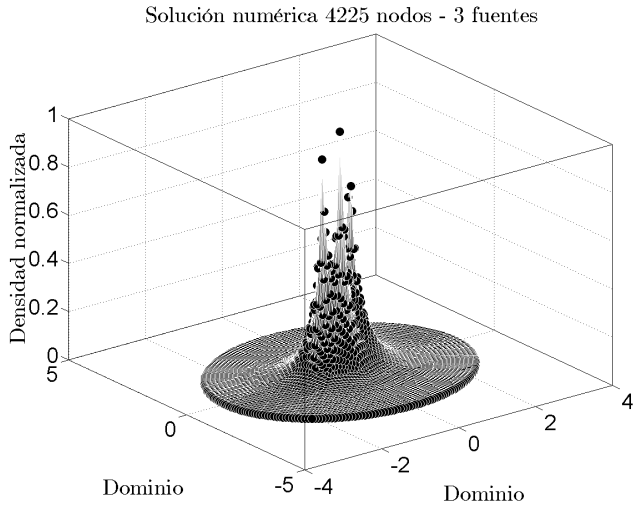


Figura 8: Solución normalizada con método LU de 4225 nodos y 3 fuentes.

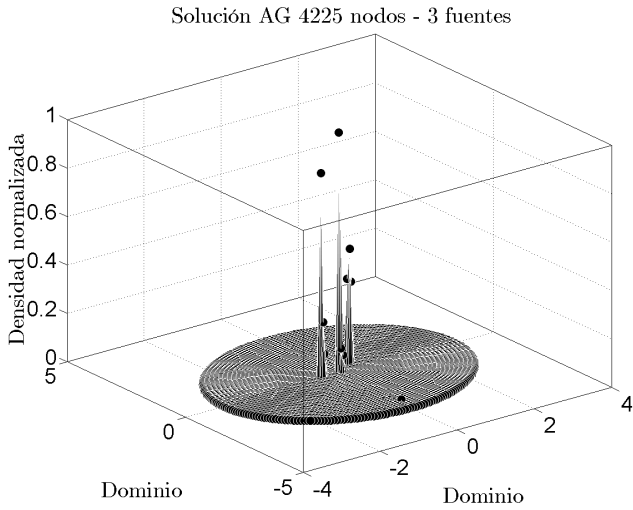


Figura 9: Solución normalizada con algoritmo genético de 4225 nodos y 3 fuentes.

En relación a la función Fitness de la solución mediante AG, al ser incluidas las condiciones físicas de la EAD, los resultados de la aproximación mejoran significativamente. Esto se debe a que el solo uso del RMSE como medida a minimizar en el AG ($\min\{A \cdot \Phi - b\}$), tiende a minimizar $A \cdot \Phi - b$ distribuyendo en el dominio los valores de las fuentes determinados por b y por tanto el AG tiende a realizar una aproximación basada en el promedio de los valores en el dominio y no una aproximación nodal Φ_i , donde en la mayoría de los casos el valor es muy cercano a 0. En el caso particular de la ecuación de difusión de la luz y ecuaciones de difusión en general concentran valores altos en

zonas donde están las fuentes de radiación, energía y/o calor y valores lejanos a ella tienden a disminuir, lo cual se ve reflejado en las soluciones que tienen una mayor precisión en sus resultados. Este fenómeno se puede observar al comparar las gráficas de las figuras (10) y (5), donde la figura (10) corresponde a la aproximación realizada con el AG sin incluir condiciones físicas de la ecuación EAD (solo $F0 = RMSE$) y la figura (5) es la aproximación con AG que utiliza las condiciones presentadas en ec.(17).

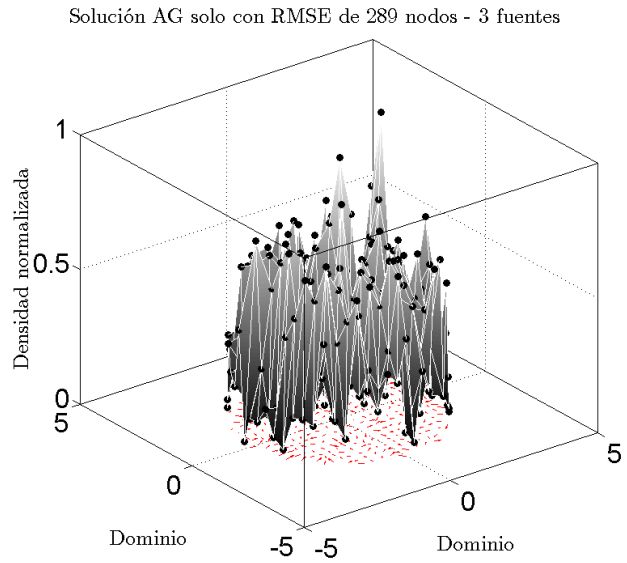


Figura 10: Solución normalizada con algoritmos genéticos solo con RMSE de 289 nodos y 3 fuentes.

Como se ha mencionado, lo más relevante es la detección de fuentes de fotones y su densidad, disminuyendo al máximo el ruido presente en las imágenes. Este ruido, para el caso de la EAD serían falsas estimaciones alejadas de las fuentes de fotones, lo cual no sucede en ninguno de los experimentos realizados. Esto es porque el AG tiende a minimizar las densidades alejadas de la fuente y converge a valores de alta densidad, lo cual se puede observar en la gráfica de la figura (9) que corresponde al peor caso considerando su estudio *analítico*, ya que si se observa la tabla 3, el de menor precisión *numéricamente* es para 289 nodos, con 5 fuentes debido al problema de fuentes de fotones cercanas al borde del dominio. En la figura (11) se muestran las aproximaciones de los 4225 nodos y su densidad con el método numérico y AG, el cual corresponde al peor caso estudiado. Se observa que a pesar del mal resultado numérico, el AG logra estimar zonas de alta densidad de fotones. Además en las figuras (12) y (13) se muestran difusiones de fotones para cierta cantidad de nodos (una con método LU y otra con algoritmo genético).

Desde un punto de vista clínico, lo relevante de la solución de la EAD, es la determinación de las fuentes de fotones, ya que estas indican zonas tumorales, es por ello que el estudio para problemas relacionados con Imagen Óptica no solo es suficiente el resultado numérico, sino que es importante un estudio analítico que permita determinar si la técnica utilizada es adecuada para resolver el problema. En este sentido si se analiza en resultado de mejor resolución dado por 4225 nodos y su resolución con el método numérico que se presenta en la figura (12) y se compara con un caso medio de 1089 nodos resuelto con AG, y se gráfica la difusión de la imagen del corte transversal del cerebro humano en que se simuló la difusión.

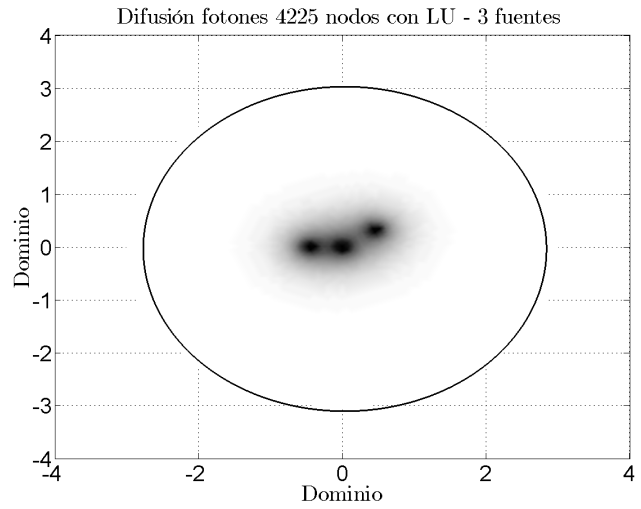


Figura 12: Difusión de fotones con método LU de 4225 nodos y 3 fuentes.

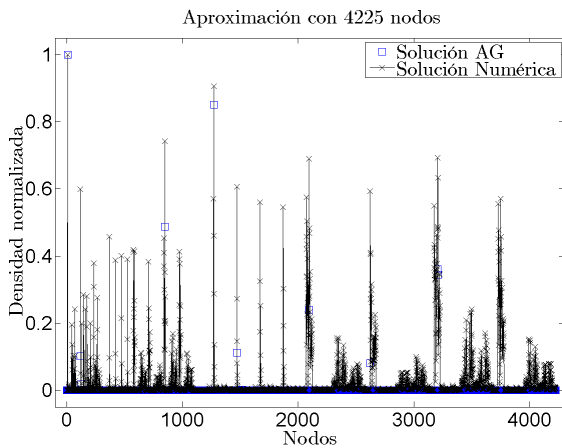


Figura 11: Solución AG y numérica de 4225 nodos.

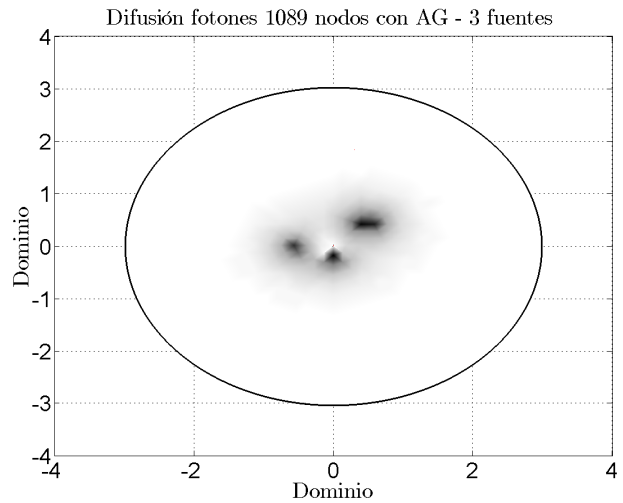


Figura 13: Difusión de fotones con algoritmo genético de 1089 nodos y 3 fuentes.

La aproximación con AG con 1089 nodos que se muestra en la figura (13) de igual forma permite obtener un resultado sin *ruido*, lo cual es un aspecto relevante de este estudio, ya que si hubiera ruido presente serían falsas estimaciones alejadas de las fuentes de fotones, y esto dificultaría en identificar las zonas tumorales. La imagen obtenida, es evidente que tiene una menor resolución a nivel de densidad de fotones por unidad de área, donde en particular para estos experimentos el área de aproximación no supera los 36 cm^2 y al comparar ambas gráficas, se obtienen densidades parecidas y ubicación de fuentes de fotones similares.

CONCLUSIONES

En este trabajo se resolvió la operación de estimar la difusión de fotones desde una fuente al interior hacia los detectores de fotones, resolviendo la ecuación diferencial de difusión de la luz en medios turbios mediante una solución con algoritmos genéticos con elementos finitos. Al resolver la operación nombrada se puede estudiar el

comportamiento de nuevas sondas moleculares de bioluminiscencia en aplicaciones oncológicas, donde el principal interés es el monitoreo de procesos patológicos en vivo, ya sea para detectar diversas patologías como para su tratamiento y efectos de los fármacos utilizados.

En el trabajo se observa que a un mayor número de incógnitas, el modelo comienza a perder precisión, esto se puede deber a una gran combinatoria de los cromosomas, ya que se tienen mas de 4000 fenotipos (en el caso de 4225 nodos), sin embargo para 4225 nodos el AG procesa una matriz de 17.850.625 de elementos (4225×4225), con lo que se obtiene una aproximación considerable de la solución, ya que el AG localiza los puntos donde existe una gran densidad de fotones. Además, la ventaja de trabajar con heurísticas como los algoritmos genéticos, es que la inclusión de condiciones físicas del problema colaboran en la aproximación de la solución.

Como proyección futura queda resolver el sistema de ecuaciones mediante AG con computación paralela. Otra proyección es aproximar la solución de ecuaciones diferenciales, que con cierto método, se obtenga un sistema de ecuaciones no de $n \times n$, es decir obtener un sistema de ecuaciones donde el número de ecuaciones sea mayor al número de variables, en estos sistemas es posible que el AG de buena aproximación, ya que para sistemas de ecuaciones cuadrados el AG disminuye el RMSE y para sistemas no cuadrados, la técnica usada en este trabajo se aplicaría de igual forma.

REFERENCIAS

- [1] Massoud, Tarik F y Gambhir, Sanvij S. 2003. Molecular imaging in living subjects: seeing fundamental biological processes in a new light?. GENES & DEVELOPMENT, 2003. pp. 545-580. Vol. 17.
- [2] Tarvainen, T. 2006. Computational Methods for Light in Transport in Optical Tomography. Kuopio, University Publications C. Natural and Environmental Sciences, 2006.
- [3] Rojas, O. 2009, Modelamiento y simulación de fotones de luz en medios turbios utilizando elementos finitos y computo paralelo, DIINF, U. de Santiago, Chile.
- [4] Wongrat, W., Younes, A., Elkamel, A., Douglas & P., Lohi, A. (2009). Control vector optimization and genetic algorithms for mixed-integer dynamic optimization in the synthesis of rice drying processes. University of Waterloo, 21.
- [5] Xu, X., Liang, X., & Ren, J. (2007). Optimization of heat conduction using combinatorial optimization algorithms. International Journal of Heat and Mass Transfer, 8.
- [6] Chaquet, J., & Carmona, E. (2012). Solving differential equations with Fourier series and Evolution Strategies. Applied Soft Computing, 12.
- [7] Arridge, S R. 1999. Optical tomography in medical imaging. Londres :Department of Computer Science, University College, 1999.
- [8] Firbank, M. 1996. An investigation of light transport through scattering bodies with non-scattering regions. s.l. : Phys Med Biol, 1996. págs. 767-783. Vol. 41.
- [9] Alexandrakis, G., Farrel, T., & Patterson, M. (1998). Accuracy of the diffusion approximation in determining the optical properties of a two-layer turbid medium. Appl Opt, 7401- 7409.
- [10] Gestal, M., Rivero, D., Rabuñal, J., Dorado, J., & Pazos, A. (2010). Introducción a los Algoritmos Genéticos y la Programación Genética. Universidade da Coruña, 76.
- [11] Aguilar, R., Valenzuela, M., & Rodríguez, J. (2015). Genetic algorithms and Darwinian approaches in financial applications: A survey. Expert Systems with Applications, 13.
- [12] Renner, G., & Ekárt, A. (2003). Genetic algorithms in computer aided design. Computer-Aided Design, 18.
- [13] Nayak, T., & Dash, T. (2012). Solution to Quadratic Equation Using Genetic Algorithm. Odisha: National Institute of Science and Technology.
- [14] Frédéric Bevilacqua, Dominique Piguet y Pierre Marquet. (1999). In vivo local determination of tissue optical properties: applications to human brain. OSA,1999,Vol.38, págs. 4939-4950.