Memoria de título
Estudio de método adaptativo basado en algoritmos genéticos para la resolución de la ecuación de difusión de la luz

Arturo Benson R
Profesor guía: Oscar Rojas Díaz

Septiembre, 2015

Licenciatura en Ciencia de la Computación
Departamento de Matemáticas y Ciencia de la Computación
Facultad de Ciencia
Universidad de Santiago de Chile

Tabla de Contenidos

Introducción

En 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, otros llevan la ecuación diferencial a un problema más sencillo para después aplicar algoritmos genéticos.

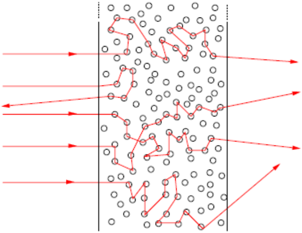
La contribución principal del trabajo es que la inclusión de condiciones físicas del problema en la función Fitness, en la solución de ecuaciones de gran complejidad es determinante en la calidad de la solución.

Problemática

La imagen óptica está basada en el uso de fotones de luz para la obtención de imágenes. La bioluminiscencia es la detección de luz generada en animales que contienen el gen de la luciferasa, los fotones de luz chocan elásticamente miles de veces antes de escapar del animal.

Las problemáticas principales para el desarrollo de los sistemas de detección de fotones son la determinación exacta de la profundidad desde donde se emitió la señal de fotones de luz.

Problemática



Objetivo general

Realizar un estudio acerca de la resolución de la ecuación de difusión de la luz utilizando algoritmos genéticos.

Objetivos específicos

1. Investigar sobre las ecuaciones diferenciales (ED).
2. Describir los algoritmos genéticos (AG) para la solución de ED.
3. Realizar un modelamiento de solución del algoritmo genético en la ecuación de difusión de la luz.
4. Implementar una aplicación que genera resultados de la ecuación de difusión de la luz.
5. Realizar un análisis de resultados.
6. Concluir sobre la investigación.

Ecuación de difusión de fotones de luz

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.

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

Ecuación de difusión de fotones de luz

En la ETR mediante técnicas de álgebra de la proyección, se puede derivar la ecuación de aproximación de la difusión (EAD).

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

La EAD tiene la condición de que la densidad de fotones es cero en la frontera del dominio, es decir $\Phi(r,t) = 0$, donde $r \in \partial\Omega$.

Aproximación de la difusión con elementos finitos

Al aplicar el método de los elementos finitos (MEF) en la EAD, esta se multiplica por una función de prueba $\Psi(r)$, se integra sobre el dominio Ω y se utiliza la formula de Green que permite integrar por partes el primer miembro de la EAD.

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

Aproximación de la difusión con elementos finitos

La solución $\Phi(r)$ se puede aproximar a una base lineal.

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

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.

Aproximación de la difusión con elementos finitos

Al utilizar la fórmula anterior, se obtiene la siguiente ecuación en notación matricial.

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

Si se quiere resolver esta ecuación en estado estable, se tiene que $\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$ y luego el sistema es $F \cdot \Phi = Q$, donde $F = K + B + C$.

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.

Se plantea una función de evaluación denominada Función de Fitness, que evalúa las soluciones, y se conservan las mejores para la próxima iteración (generación).

Modelamiento de solución

En la ecuación de aproximación de la difusión (EAD), al aplicar MEF, se genera el siguiente sistema de ecuaciones.

$$A \cdot \Phi = b$$

Donde:

- $A =$ Matriz de rigidez.
- $\Phi =$ Densidad de fotones.
- $b =$ Vector de cargas.

Modelamiento de solución

El sistema se puede reescribir como $A\Phi - b = 0$, se obtienen siguientes N ecuaciones.

$$f_1(\Phi) - b_1 = 0, f_2(\Phi) - b_2 = 0, ..., f_N(\Phi) - b_N = 0$$

Se define el cromosoma (C) como:

$$C = \{\Phi_1, \Phi_2, ..., \Phi_N\}$$

Modelamiento de solución

La expresión $(f_i(\Phi) - b_i)$ debe tender a 0. Una heurística a analizar es el RMSE (raíz del error cuadrático medio).

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

Modelamiento de solución

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: $\Phi_i \sim b_i$

Modelamiento de solución

Los parámetros del AG a estudiar son la población inicial, restricciones y función de Fitness. Para el trabajo presente se utilizaron geometrías de elementos finitos de 289, 1089 y 4225 nodos.

Para 289 y 1089 nodos, 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.

Modelamiento de solución

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

Modelamiento de solución

Algoritmo 2 Condición nodos fronteras

para i = 1:nodos **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
$F2 = \sum(f2)$

Modelamiento de solución

La función de Fitness es:

$$F = F0 + F1 + F2$$

Modelamiento de solución

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, la población inicial se genera por defecto.

Modelamiento de solución

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.

Modelamiento de solución

Se establece una restricción para 4225 nodos.

Algoritmo 3 Restricción para 4225 nodos

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

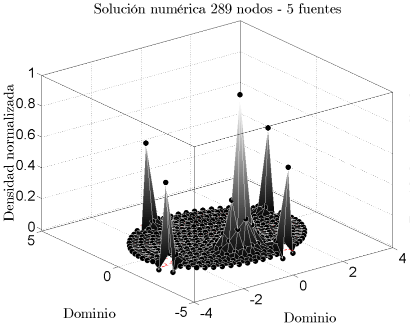
Para 4225 nodos se le da prioridad a los nodos donde $b_i > 0$. La función de Fitness corresponde solo a $F = RMSE$.

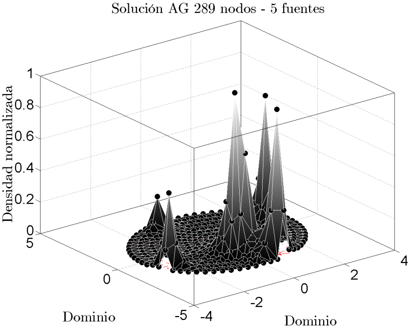
Parámetros de entrada y medidas de error

Nodos	Tamaño población	Generaciones
289	40	200
1089	20	35
4225	20	35

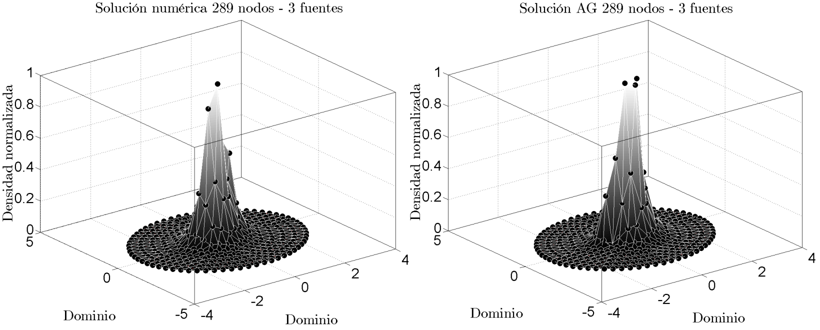
Nodos	Fuentes	Ubicación q	EM	$RMSE$	r
289	3	interior	**0.018**	**0.067**	**0.865**
289	4	borde	0.028	0.118	0.381
289	5	borde/interior	0.040	0.123	0.316
1089	3	interior	**0.013**	**0.062**	**0.733**
4225	3	interior	0.026	0.075	0.379

Solución normalizada de 289 nodos y 5 fuentes

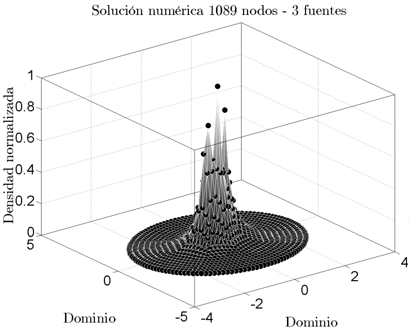


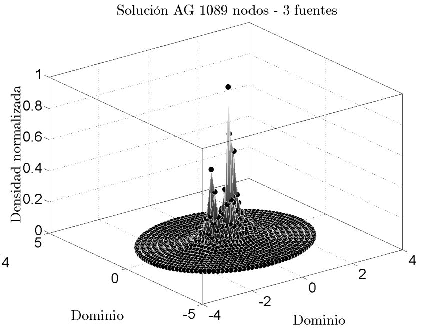


Solución normalizada de 289 nodos y 3 fuentes

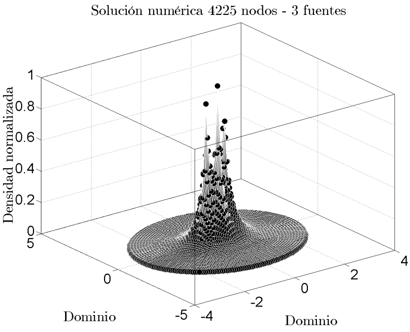


Solución normalizada de 1089 nodos y 3 fuentes

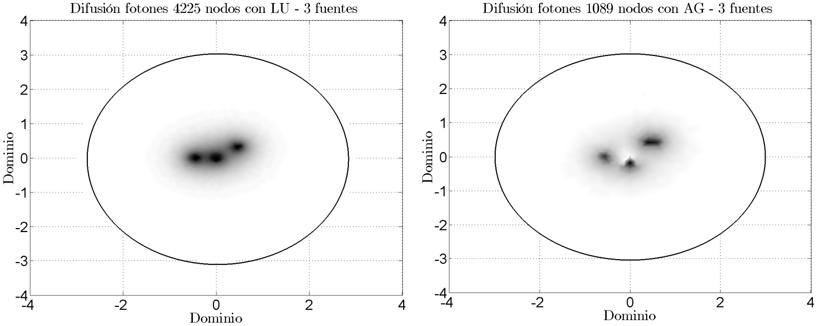




Solución normalizada de 4225 nodos y 3 fuentes



Difusión de fotones con 3 fuentes



Conclusiones

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, sin embargo para 4225 nodos el AG procesa una matriz de 4225×4225, con lo que se obtiene una aproximación considerable de la solución.

Al modelar soluciones heurísticas, es normal que los primeros resultados no sean los esperados. Al reafinar el modelamiento de solución, se puede obtener las soluciones que se esperan del punto de vista numérico, ya que las soluciones son muy cercanas a lo requerido en imagen óptica, que es visualizar la difusión para poder interpretarlas.

Conclusiones

El método demuestra que para sistemas de ecuaciones de dimensión media (1000 incógnitas), el AG obtiene buenos resultados y en el mundo real existen varios sistemas de ecuaciones a resolver con dimensiones menor a 1000, por tanto el uso de este método puede ser aplicable a dichos problemas. A través de la Pseudo-aleatoriedad de las soluciones, el AG logra resolver los sistemas de ecuaciones, en que no se aplica directamente un método numérico.

Como proyección futura queda resolver el sistemas de ecuaciones mediante AG con computación paralela, aproximar la solución de ecuaciones diferenciales, que con cierto método, se obtenga un sistema de ecuaciones donde el número de ecuaciones sea mayor al número de variables.

Referencias bibliográficas

Tarvainen, T. 2006. Computational Methods for Light in Transport in Optical Tomography. Kuopio, University Publications C. Natural and Environmental Sciences, 2006.

Arridge, S R. 1999. Optical tomography in medical imaging. Londres :Department of Computer Science, University College, 1999. R41?R93.

Alexandrakis, G., Farrrel, T., & Patterson, M. (1998). Accuracy of the diffusion approximation in determining the optical properties of a two-layer turbid medium. Appl Opt, 7401- 7409.

Gestal, M., Rivero, D., Rabuñal, J., Dorado, J., & Pazos, A. (2010). Introducción a los Algoritmos Genéticos y la Programación Genética. Universidade da Coruña, 76.

Referencias bibliográficas

Aguilar, R., Valenzuela, M., & Rodríguez, J. (2015). Genetic algorithms and Darwinian approaches in financial applications: A survey. Expert Systems with Applications, 13.

Nayak, T., & Dash, T. (2012). Solution to Quadratic Equation Using Genetic Algorithm. Odisha: National Institute of Science and Technology.

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.

Fin