Detección de Clumps en Nubes Moleculares: Un Enfoque desde el Cálculo Variacional

Martín Villanueva A.[1]

[1]Departamento de Informática
Universidad Técnica Federico Santa María

Seminario de Memoria, 2016-1

Outline

Objetivo General

Realizar un análisis, estudio e implementación de un modelo basado en el **cálculo variacional**, para la segmentación de imágenes astronómicas 3D, y de este modo poder identificar las estructuras densas (**Clumps**) que corresponden a las regiones de interés en las nubes moleculares.

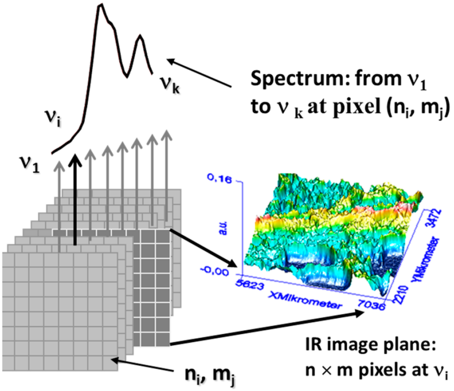
Nubes Moleculares y Clumps...

- Una **Nube Molecular** es un estructura en medio del *interstellar medium*, que se caracteriza por sus bajas temperaturas y alta densidad.
- Están compuestas básicamente de gas y polvo (H_2, CO y , H_2O), bajo una estructura compleja compuesta de zonas de distintas densidades.
- La formación de estrellas se da únicamente al interior de las nubes moleculares!.
- Un **Clump** (*cúmulo*) es entendido como una región de alta densidad contenida dentro de una nube molecular, con una fuerte emisión, acotados por alguna propiedad físico/química y de masividad variable.
- Entender las propiedades, estructuras y relaciones entre los clumps, ayuda a entender el proceso de formación de estrellas.

Nubes Moleculares y Clumps... (2)

Cubos Espectroscópicos de Datos

Los registros de las observaciones a tales nubes moleculares se almacenan en cubos de datos, que contienen coordenadas espaciales: *right ascension* y *declination*, más frecuencia observada.



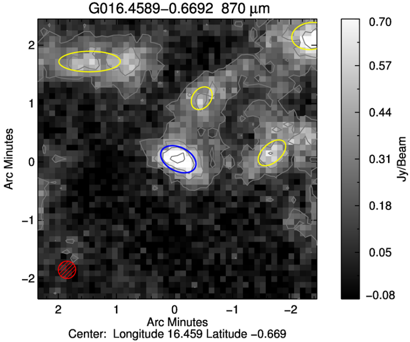
Principales Dificultades

- Tales imágenes astronómicas ya no pueden ser analizadas manualmente por astronomos.
- El tamaño de las imágenes es enorme y puede contener cientos/miles de estructuras de interés.
- Los cubos espectroscópicos de datos son difíciles de manipular y visualizar al día de hoy.
- Identificación manual sufren del *bias* propio de cada astrónomo, debido a sus distintas definiciones o concepciones.

Solución: Construir algoritmos de detección automáticos (y deterministas), para analizar gran cantidad de datos, eliminando el juicio imparcial de cada astrónomo.

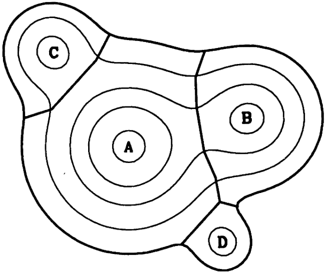
GaussClumps [Stutzki, 1990]

- Ajustar perfiles Gaussianos a los *peaks* de emisión en la data, de forma iterativa bajo un proceso de optimización.
- En cada iteración una Gaussiana ajustada se sustrae de la data, y se repite el proceso sobre el próximo *peak* de emisión en el cubo residual.



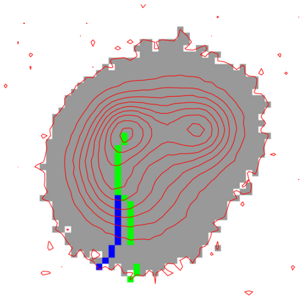
ClumpFind [Williams, 1994]

- Se analiza el cubo a distintos niveles de intensidad, partiendo desde el más alto hacia el más bajo.
- En cada nivel se encuentran las estructuras isoladas, y se enlazan a las estructuras vecinas del nivel superior (en caso de estar conectados).
- Se inspira en cómo el ojo humano segmenta las imágenes.



FellWalker [Berry, 2015]

- Algoritmo basado en *Hill-Climbing*, aprovechando la propiedad de estancamiento en óptimos locales, para de esta forma definir un nuevo clump.
- Iterativamente computa las rutas de ascenso de mayor gradiente hasta alcanzar un *peak* local, tras lo cual todos los píxeles de tal ruta son asignados a dicho *clump*.



Fellwalker [Berry, 2015] (2)

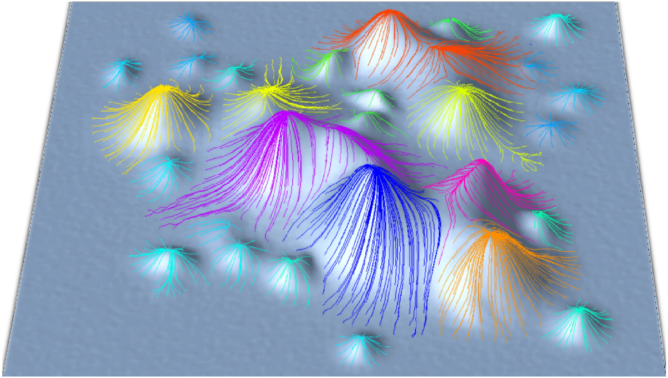


Figura: Resultado Típico de FellWalker

Dificultades de los Algoritmos

En general los tres algoritmos presentados muestran los siguientes problemas:

- Dependientes de una gran cantidad de parámetros, donde cada parámetro puede variar en gran medida los resultados.
- Varios parámetros no son simples de configurar, debido a que no tienen una interpretación física/astronómica acorde.
- Son computacionalmente costos y poco escalables al tamaño de la data.

Calculo Variacional

Definition

Sea una función $f : K^n \to K$, y el funcional $\mathcal{U} : \mathcal{F} \to K$, con $\mathcal{F} = \{f : \ f : K^n \to K\}$ un espacio de funciones. El objetivo del cálculo variacional, es determinar la función $f_0 \in \mathcal{F}$ que minimize el funcional $\mathcal{U}$:

$$\min_{f} \mathcal{U}(f) = \mathcal{U}(f_0)$$

donde usualmente el funcional se expresa como una integral definida:

$$\mathcal{U}(f) = \int_{\Omega} L\left(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}), \nabla f(\mathbf{x}), \Delta f(\mathbf{x})\right)$$

con L es conocido como el **Lagrangiano**.

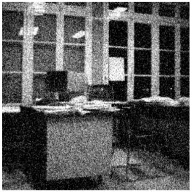
Cálculo Variacional (2)

- Siguiendo una idea similar al cálculo tradicional, es posible definir *derivadas* de funcionales conocida como *primera variación* o *variación de Gateaux*.
- De este modo se traslada el problema de minimización en su forma integral, a un problema diferencial equivalente, que consiste en resolver una *PDE* conocida como **Ecuación de Euler-Lagrange**.
- Para la resolución de esta se tienen gran cantidad de métodos numéricos (*Finite Differences, Finite Element Method, Collocation Methods and Spectral Methods*).

Cálculo Variacional en Procesamiento de Imágenes

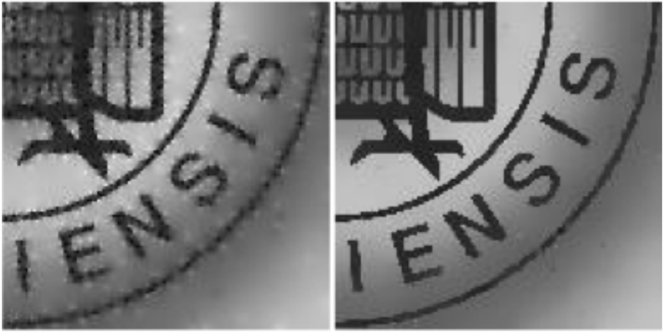
La filosofía del cálculo variacional en procesamiento de imágenes, es **abordar el problema de tratamiento de imágenes como si fuese un problema de aproximación de funciones**.

- DENOISING. **Objetivo**: Eliminar el ruido de una imágen. **Formulación Variacional**: Encontrar una aproximación *suave* de una imagen con ruido, en el espacio de imágenes.



Cálculo Variacional en Procesamiento de Imágenes (2)

- RESTORATION. **Objetivo**: Determinar información faltante en una imagen. **Formulación Variacional**: Encontrar una aproximación de una imágen con datos faltantes, que reconstruya las zonas faltantes de modo *suave*.



Cálculo Variacional en Procesamiento de Imágenes (3)

- Segmentation. **Objetivo**: Particionar la imagen entre objeto y fondo. **Formulación Variacional**: Encontrar una curva cerrada *suave* entre el objeto y el fondo.

Aplicación al Problema

Sea entonces $f(x, y, z)$ la función del cubo de datos, y $u(x, y, z)$ la función que pretende aproximarla, se propone entonces el siguiente funcional:

$$\begin{aligned}
\Phi(u) &= \int_{\Omega \subset R^3} L(x, y, z, u, u_x, u_y, u_z) d\Omega \\
&= \int_{\Omega \subset R^3} F_{\text{similitud}}(f, u) + \alpha F_{\text{penalización}}(f, u) \\
&\quad + \beta \; F_{\text{suavidad}}(u_x, u_y, u_z) + \cdots \;\; d\Omega
\end{aligned}$$

Una vez planteado y definido el Lagrangiano L que resuelve nuestro problema, es posible pasar a la ecuación de **Euler-Lagrange** correspondiente.

Aplicación al Problema

Sea entonces $f(x,y,z)$ la función del cubo de datos, y $u(x,y,z)$ la función que pretende aproximarla, se propone entonces el siguiente funcional:

$$\Phi(u) = \int_{\Omega\subset R^3} L(x,y,z,u,u_x,u_y,u_z)d\Omega$$
$$= \int_{\Omega\subset R^3} (u-f)^2 + \alpha\Psi_1(u-f)$$
$$+ \beta\ \Psi_2(|\nabla u|^2)\ d\Omega$$

Donde Ψ_1 es una función monotonamente creciente con valor 0 para $x<0$, y Ψ_2 es monotonamente creciente.

Aplicación al Problema

Dado que no es posible trabajar en el espacio de todas las funciones u posibles, y dada la estructura Gaussiana inherente de las fuentes a extraer, se propone una solución del siguiente tipo:

$$
\begin{aligned}
u(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^{N} c_i \, \exp(-(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)) \\
&= \sum_{i=1}^{N} c_i \, \exp\left(-\frac{(x-\mu_{x_i})^2+(y-\mu_{y_i})^2+(z-\mu_{z_i})^2}{3\sigma_i^2}\right),
\end{aligned}
$$

es decir, una combinación lineal de funciones Gaussianas esféricamente simétricas, cada una parametrizada por $(\mu_{x_i}, \mu_{y_i}, \mu_{z_i}, c_i, \sigma_i)$ ($5N$ parámetros en total).

Aplicación al Problema

Para restringir el espacio de parámetros en los que opera el algoritmo de optimización, se realizan las siguientes decisiones de modelado

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} c_i^2 \exp\left(-\frac{(x - [\mu_{x_i} + \delta_x \sin(\theta_{x_i})])^2 + \cdots}{3(\sigma_i + \sigma_0)^2}\right),$$

donde los parámetros son ahora $(\theta_{x_i}, \theta_{y_i}, \theta_{z_i}, c_i, \sigma_i)$ ($5N$ parámetros en total). Aquí σ_0 es el **minimal broadening**, y los centros $(\mu_{x_i}, \mu_{y_i}, \mu_{z_i})$ no forma parte de los parámetros de optimización (se determinan previamente).

Objetivos de la Memoria

- Determinar un modelo matemático derivado desde el cálculo variacional, que sea **consistente** con el problema a resolver, que no requiera gran **cantidad de parámetros**, y que los parámetros a utilizar tengan una **interpretación** física/astronómica simple.
- Establecer un esquema para la **resolución** del problema variacional, así como las optimizaciones necesarias para generar un método computacionalmente eficiente, escalable y con posibilidades de paralelización.
- **Implementación** del modelo propuesto por medio del lenguaje de programación Python, haciendo uso de bibliotecas optimizadas para métodos numéricos (NumPy, SciPy, Cython, Numba, entre otras).
- Realizar un **análisis comparativo** del método aquí propuesto, con los algoritmos estándar para la detección de *Clumps*.