

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Aceleração quasi-Newton para um problema de ponto fixo proveniente de Tomografia por Emissão de Pósitrons

T. Martini¹

Instituto de Aeronáutica e Espaço, IAE, São José dos Campos, SP

L. Reips²

Departamento de Matemática, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC-Blumenau, Blumenau, SC

J. M. Martínez³

Departamento de Matemática Aplicada, Universidade Estadual de Campinas, IMECC-Unicamp, Campinas, SP

Resumo. Vamos analisar uma estratégia quase-Newton sub-relaxada para acelerar a convergência de iterações de ponto-fixo. Para isso, atualizações secantes clássicas são consideradas. Em seguida, a técnica quasi-Newton é aplicada ao problema prático de representar o comportamento cinético de um marcador PET (Tomografia por Emissão de Pósitrons) durante o exame de perfusão cardíaca, cuja formulação de ponto fixo foi introduzida recentemente. O desempenho do método quando aplicado a problemas com dados reais é ilustrado numericamente.

Palavras-chave. Tomografia por Emissão de Pósitrons, Métodos de Ponto-Fixo, Aceleração quase-Newton.

1 Introdução

Dada uma função $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, um problema de ponto fixo consiste em encontrar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $x = G(x)$. Associado a este problema, definimos uma iteração de ponto fixo por $x^{k+1} = G(x^k)$.

O problema de encontrar um ponto fixo pode ser visto como um sistema não linear. Para isto, basta definirmos a função $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ por $F(x) = x - G(x)$. No entanto, apesar de os problemas serem equivalentes do ponto de vista teórico, Fang & Saad [10] ressaltam que existem diferenças práticas entre resolver um sistema não linear e acelerar uma sequência de vetores. Por exemplo, a possível dificuldade em calcular F pode inviabilizar o uso de técnicas não lineares que envolvem o uso de informações do Jacobiano e, além disso, pode não ser apropriado avaliar $F(x + d)$ para um d arbitrário.

Problemas de ponto fixo surgem naturalmente em aplicações. A grande preocupação acerca da iteração de ponto fixo, como comenta [9], está no fato de que os iterados podem

¹tiaramartini@gmail.com

²l.reips@ufsc.br

³martinez@ime.unicamp.br

convergir com taxa linear e extremamente lenta. Por este motivo, vários autores vêm se dedicando a acelerar de alguma maneira a convergência desses iterados [7, 8, 10, 11, 13, 21].

A Tomografia por Emissão de Pósitrons consiste em um exame de imagem aplicado em medicina nuclear capaz de produzir imagens dos processos fisiológicos em 2D ou 3D. Este procedimento surgiu como uma ferramenta de pesquisa para estudar o cérebro e, apesar de ser um exame de alto custo, fornece uma melhor imagem de diagnóstico de maneira minimamente invasiva, o que permitiu sua transformação em uma ferramenta clínica. Nosso foco é o exame de perfusão cardíaca do miocárdio, mas a técnica PET também é aplicada em uma vasta gama de procedimentos, incluindo detecção e monitoramento da atividade de tumores malignos e de distúrbios cerebrais, como por exemplo, diagnóstico precoce da doença de Alzheimer [5, 6, 19].

Para dados de baixa qualidade, por exemplo em marcadores como $H_2^{15}O$ com decaimento rápido, novas abordagens baseadas na reconstrução direta dos parâmetros a partir de dados PET, sem utilizar uma etapa intermédia de reconstrução da imagem, aparecem como ferramentas promissoras no caso de investigações pré-clínicas [2, 3].

Neste trabalho vamos apresentar nossa experiência com técnicas de aceleração quase-Newton sub-relaxadas aplicadas à reconstrução do comportamento cinético de um marcador radioativo durante a perfusão cardíaca com dados reais. Os resultados obtidos mostram que uma melhora significativa pode ser obtida em comparação com o algoritmo de ponto fixo original.

2 Modelagem PET

Utilizamos o modelo de equações diferenciais proposto em [18], capaz de representar o comportamento cinético do marcador radioativo, $H_2^{15}O$, durante o exame PET de perfusão cardíaca, a saber

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_A}{\partial t} &= -k_0(x)C_A(x, t) - k_1(x)C_A(x, t) + k_3C_V(x, t) \\ &+ \nabla \cdot (V_A(x)C_A(x, t)) + \nabla \cdot (D_A(x)\nabla C_A(x, t)), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_T}{\partial t} &= -k_0(x)C_T(x, t) + k_1(x)C_A(x, t) - k_2C_T(x, t) \\ &+ \nabla \cdot (V_T(x)C_T(x, t)) + \nabla \cdot (D_T(x)\nabla C_T(x, t)), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_V}{\partial t} &= -k_0(x)C_V(x, t) - k_3(x)C_V(x, t) + k_2C_T(x, t) \\ &+ \nabla \cdot (V_V(x)C_V(x, t)) + \nabla \cdot (D_V(x)\nabla C_V(x, t)), \end{aligned} \quad (3)$$

sujeito às condições de contorno:

$$\begin{aligned} (D\nabla C_{A/T/V} + VC_{A/T/V}) \cdot n &= j_{in} \quad \Gamma \subset \partial\Omega \quad j_{in} = const \cdot V, \\ (D\nabla C_{A/T/V} + VC_{A/T/V}) \cdot n &= C_{A/T/V}V_{out} \quad \partial\Omega/\Gamma. \end{aligned} \quad (4)$$

em que $C_A(x, t)$, $C_T(x, t)$ e $C_V(x, t)$ representam as concentrações do marcador radioativo na artéria, tecido (capilares) e veia, respectivamente, e $const$ é uma constante.

Tal modelo considera ainda os parâmetros biológicos de difusão e velocidade na artéria, tecido e veia ($D_A, D_T, D_V, V_A, V_T, V_V$). As parcelas k_0C_A, k_0C_T e k_0C_V retratam o decaimento radioativo do marcador e as constantes k_1, k_2 e k_3 representam a troca de fluidos entre artéria, tecido e veia.

Nesse estudo, buscamos reconstruir com maior eficácia a imagem $u(x, t) = C_T(x, t) + C_V(x, t) + C_A(x, t)$ e todos os parâmetros biológicos envolvidos que compõe o vetor p :

$$p = (k_1(x), k_2(x), k_3(x), D_T(x), D_A(x), D_V(x), V_T(x), V_A(x), V_V(x))^T. \quad (5)$$

Maiores detalhes sobre o problema inverso, a discretização das equações citadas e o problema de identificação de parâmetros envolvido no processo podem ser encontrados em [18].

3 Aceleração quase-Newton para problemas PET

Dado um parâmetro $p \in \mathbb{R}^n$ vamos definir $p^+ = G(p)$ como o próximo iterando, proveniente da aplicação do método *Forward-Backward Splitting* (FBS) [20] ao problema de reconstruir a imagem u . Nesse contexto, uma iteração de ponto fixo é definida como uma iteração do método FBS.

Veremos agora como resolver o sistema não linear associado, isto é $F(p) = 0$ com $F(p) = p - G(p)$, usando diferentes atualização quase-Newton que satisfaçam a condição secante [4]. Por definição, uma iteração FBS corresponde a $p^{k+1} = p^k - H_0F(p^k)$, em que $H_0 = I$. Como este processo iterativo converge com taxa linear, é natural conjecturar que os métodos quase-Newton definidos por $p^{k+1} = p^k - H_kF(p^k)$ ou $p^{k+1} = p^k - B_k^{-1}F(p^k)$, em que H_k satisfaz a equação secante $H^{k+1}(F(p^{k+1}) - F(p^k)) = p^{k+1} - p^k$ (ou $B_{k+1}(p^{k+1} - p^k) = F(p^{k+1}) - F(p^k)$) com algum princípio de variação mínima converjam com taxa superlinear, e dessa forma, acelerando a convergência do método FBS.

Na sequência, descrevemos as atualizações quase-Newton consideradas neste estudo.

3.1 Atualizações quase-Newton consideradas

Foram consideradas cinco atualizações secantes diferentes, a saber: Primeiro e Segundo Métodos de Broyden [12], o Método de atualização de uma coluna por iteração [14], o Método de atualização de uma coluna por iteração inverso [16] e o Método de Thomas [17].

Podemos formular o processo de atualização da matriz B_k por: $B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)v_k^\top}{s_k^\top v_k}$, em que $s_k = x^{k+1} - x^k, y_k = F(x^{k+1}) - F(x^k)$ e $v_k \in \mathbb{R}^n$.

A escolha $v_k = s_k$ define o Primeiro Método de Broyden (MB1), $v_k = e_k$ define o Método de atualização de uma coluna por iteração (COLUM), e $v_k = \left(P_k + \frac{\|s_k\|}{2} I \right) s_k$ corresponde ao Método de Thomas, em que $P_{k+1} = (1 + \|s_k\|) \left(\|s_k\| I + P_k - \frac{w_k w_k^\top}{w_k^\top s_k} \right), P_0 = \rho^2 I$.

Por outro lado, para as atualizações que satisfazem a equação secante inversa, temos $B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1} + \frac{(s_k - B_k^{-1} y_k)v_k^\top}{v_k^\top y_k}$, em que $v_k = y_k$ para o Segundo Método de Broyden (MB2) e $v_k = e_k$ para o Método de atualização de uma coluna por iteração inverso (ICOLUM).

4 Experimentos Computacionais

Os códigos utilizados nesse experimento foram escritos em Fortran 77 com dupla precisão. Os experimentos foram então realizados usando gfortran-4.6 em uma máquina Intel CORE I3-2310M @ 2.10 GHz com 100 Gb de HD e 4Gb de Ram.

Como critério de parada utilizamos a medida de sensibilidade utilizada em [19], a saber $\frac{\|p_i^{k+1} - p_i^k\|_F}{\|p_i^{k+1}\|_F} < 10^{-4}$, em que p_i^k representa uma componente do vetor p descrito em (5) na iteração k e $\|\cdot\|_F$ denota a norma de Frobenius.

Além do critério colocado acima, limitamos o número de iterações em $\max\{100, n^2\}$ e o tempo computacional (para os métodos quase-Newton) em 600 segundos.

Para o exemplo aqui analisado, vamos considerar um operador K (16512×4225) obtido através do exame PET. Tal operador está associado a uma imagem 65×65 em um domínio Ω . A concentração inicial do marcador radioativo na artéria, C_A , é dada por $C_A(x, y, 0) = \tau(1 - x^2)(N - y)y$, com $N = 50$. As concentrações iniciais no tecido e veias foram consideradas nulas, $C_T(x, y, 0) = 0$ e $C_V(x, y, 0) = 0$ e o intervalo de tempo utilizado é $\tau = 3 \times 10^{-5}$.

Aplicando a aceleração quase-Newton conseguimos reduzir significativamente o número de iterações e, conseqüentemente, o tempo computacional. A Tabela 1 descreve o comportamento dos métodos de ponto fixo (FBS) e aceleração quase-Newton aplicados ao caso considerado. Nesta tabela, utilizamos a seguinte notação: NI - número de iterações; TEMPO - tempo computacional (em segundos) medido pela função `etime`; RES - o resíduo encontrado, isto é, $\|F(\bar{x})\|$ em que \bar{x} é a solução encontrada pelo algoritmo; SENS - medida de sensibilidade utilizada como critério de parada.

Tabela 1: Comparativo entre os métodos testados.

	$\alpha_k = 1$				$\alpha_k = 0.01$			
	NI	TEMPO	RES	SENS	NI	TEMPO	RES	SENS
FBS	317	4138.5	6.6958	9.99e-5	317	4138.5	6.6958	9.99e-5
MB1	2	53.699	7.97e-3	5.51e-5	5	93.317	6.6595	9.96e-5
MB2	2	58.959	7.97e-3	5.52e-5	5	102.31	6.6594	9.92e-5
MAC	2	59.827	9.29e-3	5.54e-5	5	91.401	6.6597	9.96e-5
MACI	2	60.703	1.46e-2	5.58e-5	5	91.325	6.6600	9.96e-5
MTH	2	59.827	7.97e-3	5.51e-5	5	91.273	6.6595	9.96e-5

As imagens expostas na Figura 1 referem-se ao parâmetro V_{xT} calculado via método FBS e MB2. Observe que, apesar de as imagens serem visualmente muito semelhantes, as mesmas apresentaram valores diferentes. Sob o ponto de vista teórico, os métodos quase-Newton melhoraram a solução obtida, uma vez que a imagem encontrada está mais próxima de um ponto fixo do problema. No entanto, sob o ponto de vista prático, a solução ideal é aquela que se assemelha à imagem obtida via método *Forward-Backward Splitting*. Por este motivo decidimos limitar o tamanho do passo em cada iteração quase-

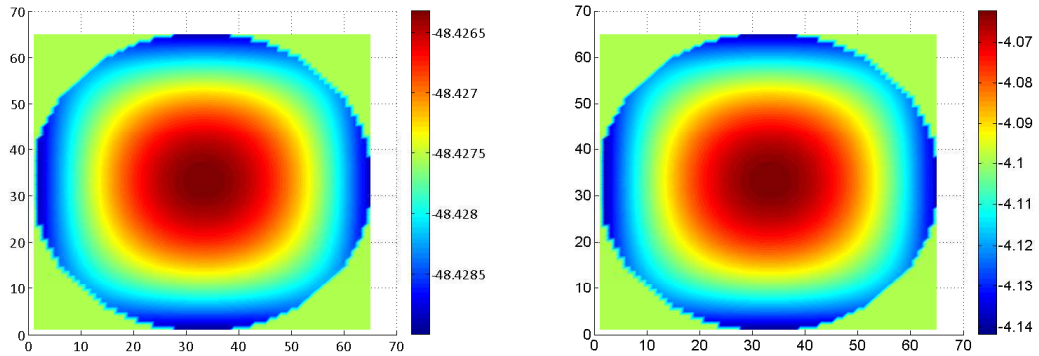


Figura 1: Imagens geradas pelos métodos FBS (esquerda) e MB2 (direita).

Newton por α_k , assim $p^{k+1} = p^k + \alpha_k s^k$, em que s^k é a direção quase-Newton. Utilizamos $\alpha_k = 0.1$ e $\alpha_k = 0.01$, o valor $\alpha_k = 1$ representa o passo quase-Newton puro, enquanto que $\alpha_k < 1$ corresponde às iterações quase-Newton “sub-relaxadas”. Após essa correção de passo, conseguimos aproximar muito bem as imagens obtidas, conforme exemplificado para o parâmetro $V_{x\mathcal{T}}$ na Figura 2.

O comportamento dos métodos quase-Newton com $\alpha_k = 0.01$ também é apresentado na Tabela 1. Observe que, mesmo restringindo o tamanho de passo para adequar a solução obtida pelo algoritmo ao problema PET, a redução no número de iterações e no tempo computacional foi de aproximadamente 98% e, mais importante, mantendo a qualidade da solução.

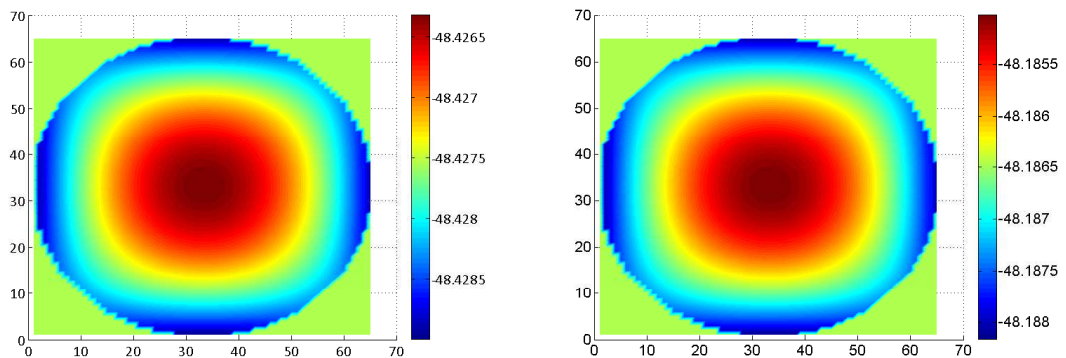


Figura 2: Imagens geradas pelos métodos FBS (esquerda) e MB2 com $\alpha_k = 0.01$ (direita).

5 Conclusões

Mostramos que as versões sub-relaxadas dos métodos quasi-Newton são muito eficientes para acelerar o comportamento dos métodos de ponto fixo associados a um problema de reconstrução de imagens provenientes de tomografias. O fato de precisarmos de sub-

relaxamento ($\alpha_k \approx 0.01$) é muito interessante e reflete uma característica de muitos problemas inversos [1]. Do mesmo modo como acontece com sistemas de equações lineares e não lineares muito mal condicionados, a “solução exata” não é a desejada na prática e toda a vasta teoria de regularização está relacionada com este fato. O sub-relaxamento é uma das técnicas que têm sido associadas com regularização a fim de obter soluções fisicamente significativas de problemas inversos. É um tanto surpreendente que essa técnica funcione tão bem quando associada à aceleração quasi-Newton.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao apoio recebido da FAPESP (Processo nº 2012/10444-0) e ao Professor Martin Burger (Institute for Computational and Applied Mathematics University of Münster).

Referências

- [1] C. L. Byrne. *Iterative Optimization in Inverse Problems*. CRC Press, 2014.
- [2] M. Benning and T. Köesters and F. Wüebbeling and K. Schäfers and M. Burger. A nonlinear variational method for improved quantification of myocardial blood flow using dynamic $H_2^{15}O$ PET, *IEEE Nuclear Science Symposium Conference*, 4472–4477, 2008.
- [3] M. Benning and P. Heins and M. Burger and T. E. Simos and G. Psihoyios and C. Tsitouras. A solver for dynamic PET reconstructions based on forward-backward-splitting, *AIP Conference Proceedings*, 1281(1):1967–1970, 2010.
- [4] J. M. Martínez. Practical quasi-Newton methods for solving nonlinear systems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 124:97–122, 2000.
- [5] G. Muehlelehner and J. S. Karp. Positron emission tomography, *Physics in medicine and biology*, 51(13):R117–R137, 2006.
- [6] J. M. Ollinger and J. A. Fessler. Positron-emission tomography, *Signal Processing Magazine*, 14(1):43–55, 1997.
- [7] D. D. Johnson. Modified Broyden’s method for accelerating convergence in self-consistent calculations, *Physical Review B*, 38(18):12807–12813, 1988.
- [8] M. Bierlaire and F. Crittin. Solving noisy, large-scale fixed-point problems and systems of nonlinear equations, *Transportation Science*, 40(1):44–63, 2006.
- [9] H. F. Walker and P. Ni. Anderson acceleration for fixed-point iterations, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(4):1715–1735, 2011.
- [10] H. Fang and Y. Saad. Two classes of multiseccant methods for nonlinear acceleration, *Numerical Linear Algebra with Applications*, 16(3):197–221, 2009.

- [11] H. Zhou and D. Alexander and K. Lange. A quasi-Newton acceleration for high-dimensional optimization algorithms, *Statistics and Computing*, 21(2):261–273, 2011.
- [12] C. G. Broyden. A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations, *Mathematics of Computation*, 19(92):577–593, 1965.
- [13] P. Deuffhard and R. Freund and A. Walter. Fast secant methods for the iterative solution of large nonsymmetric linear systems, *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, 2(3):244–276, 1990.
- [14] J. M. Martínez. A Quasi-Newton method with modification of one column per iteration, *Computing*, 33(3-4):353–362, 1984.
- [15] J. M. Martínez. Fixed-point quasi-Newton methods, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29:1413–1434, 1992.
- [16] J. M. Martínez and M. C. Zambaldi. An inverse Column-Updating method for solving Large-Scale Nonlinear Systems of Equations, *Optimization Methods and Software*, 1:129–140, 1992.
- [17] S. W. Thomas. *Sequential estimation techniques for quasi-Newton algorithms*. Cornell University, 1975.
- [18] L. Reips and M. Burger and R. Engbers. Towards Dynamic PET Reconstruction under Flow Conditions: Parameter Identification in a PDE Model, *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, 2016, to appear.
- [19] L. Reips, Parameter Identification in Medical Imaging, Tese de Doutorado, Westfälische Wilhelms Universität Münster, 2013.
- [20] G. H-G. Chen and R. T. Rockafellar. Convergence rates in forward-backward splitting, *SIAM Journal on Optimization*, 7(2):421–444, 1997.
- [21] R. Saigal and M. J. Todd. Efficient acceleration techniques for fixed point algorithms, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 15(5):997–1007, 1978.