MÉTODOS DE FÍSICA ESTADÍSTICA EN EL PROCESAMIENTO DE IMÁGENES: CAMINANTES ALEATORIOS, DIFUSIÓN Y MODELO DE POTTS

TRABAJO DE GRADO

Para optar el título profesional de:

Físico

LUIS ANTONIO BENÍTEZ MORENO

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física
San Juan de Pasto, Colombia
Diciembre 2013

MÉTODOS DE FÍSICA ESTADÍSTICA EN EL PROCESAMIENTO DE IMÁGENES: CAMINANTES ALEATORIOS, DIFUSIÓN Y MODELO DE POTTS

LUIS ANTONIO BENÍTEZ MORENO

TRABAJO DE GRADO

Director:

Dr.Sc. Alejandro Pérez Riascos

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física
San Juan de Pasto, Colombia
Diciembre 2013

©2013 - LUIS ANTONIO BENÍTEZ MORENO

“Las ideas y conclusiones aportadas en la tesis de grado son responsabilidad exclusiva de los autores”

Artículo 1. del acuerdo No. 324 del 11 de Octubre de 1966, emanado por el Honorable Consejo Directivo de la Universidad de Nariño.

Todos los derechos reservados.

Nota de Aceptación

_____

_____

_____

_____

_____

_____

Dr.Sc. Alejandro Pérez Riascos

Director

Dr.Sc. Juan Bautista Florez

Jurado

Ph.D. Álvaro Rugeles Pérez

Jurado

San Juan de Pasto, Diciembre 2013

Agradecimientos

Gracias a la Universidad de Nariño y en especial al departamento de Física por darme la oportunidad de lograr mis ideales añorados tanto académicos como personales. Gracias al Ph.D. Alejandro Pérez Riascos quien con sus invaluables orientaciones, su incansable voluntad y por sobre todo su amistad, hizo posible la culminación de esta meta.

Un sincero agradecimiento a mi familia por su apoyo incondicional, por el esfuerzo, la confianza y el cariño. Especialmente a mi madre Olga Moreno y a mi padre Luis Antonio Benitez. Esto no hubiera sido posible sin ustedes.

Gracias a los docentes que influyeron en mi vida por sus conocimientos y sus consejos. Especialmente a la Msc. Gloria Moncayo y al Ph.D. Alejandro Pérez, quienes fueron los que motivaron en mí la pasión por la Física.

Gracias a Estefanía Burbano por empezar junto a mí este largo camino, llenándome siempre de cariño y apoyo. A todos mis amigos de Física y de la vida, quienes me han brindado momentos maravillosos en su compañía. Por su amistad y alegría.

A mi padre y a mi madre.

"Lo más maravilloso de la ciencia es que está viva."
Richard Phillips Feynman.

MÉTODOS DE FÍSICA ESTADÍSTICA EN EL PROCESAMIENTO DE IMÁGENES: CAMINANTES ALEATORIOS, DIFUSIÓN Y MODELO DE POTTS

Resumen

En esta tesis se exponen diversos métodos de la física estadística aplicados al procesamiento de imágenes digitales, en particular, el proceso de identificación de estructuras en imágenes.

Se analizan a los caminantes aleatorios en imágenes digitales mediante un modelo que describe a la imagen como una red cuadrada con pesos donde los nodos representan a los píxeles de la imagen y las líneas tienen un valor que mide la diferencia o similitud entre pixeles. En esta estructura se definen caminantes aleatorios con probabilidades de transición expresadas en términos de información local o no local contenida en las líneas y se obtienen analíticamente cantidades que describen a este proceso dinámico. El estudio de los caminantes aleatorios en imágenes se complementa con el análisis de su descripción estadística dada por la ecuación de difusión, en este contexto se analiza la segmentación de imágenes mediante diferentes estrategias de movimiento empleadas por un caminante aleatorio.

Finalmente, se analiza el modelo de Potts que se utiliza en algoritmos de detección de comunidades que permiten establecer conjuntos de nodos que son el equivalente en redes de los dominios magnéticos. Se aplica este esquema con el fin de detectar estructuras y patrones en imágenes digitales que son descritas por una red con pesos. Mediante simulaciones Monte Carlo del modelo de Potts se buscan configuraciones de mínima energía, se analizan diferentes tipos de pesos en las líneas y las consecuencias que tienen estas elecciones en la segmentación, identificación de estructuras ocultas y formación de patrones en imágenes digitales.

STATISTICAL METHODS FOR IMAGE PROCESSING: RANDOM WALKS, DIFFUSION AND POTTS MODEL

Abstract

In this thesis we present diverse methods of statistical physics applied to digital image processing, in particular, the process of identifying structures in images.

We analyze random walks in digital images by using a model that describes the image as a square lattice with weights where nodes represents the image pixels and lines have a value that measures the difference or similarity between pixels. Random walkers in this structure are defined with transition probabilities expressed in terms of local or non-local information in the lines; quantities that describe this dynamical process are obtained. The study of random walkers in images is complemented by the analysis of its statistical description given by the diffusion equation, in this context we study the segmentation of images by means of different movement strategies used by the random walker.

Finally, we analyze the Potts model used in community detection algorithms that establish sets of nodes that are the equivalent on networks of magnetic domains. We apply this scheme in order to detect structures and patterns in digital images modeled by a weighted network. By means of Monte Carlo simulations of the Potts model we obtain minimum energy configurations, also we study different types of weights assigned to the lines and the consequences of these choices in the segmentation, identification of hidden structures and pattern formation in digital images.

Índice general

Aceptación IV
Agradecimientos V
Dedicatoria VI
Resumen VII
Abstract VIII
Índice de figuras XI

1. Caminantes aleatorios en redes **1**
1.1. Introducción 1
1.2. Teoría de grafos 2
1.3. Redes 3
1.3.1. Redes de mundo grande 4
1.3.2. Redes de mundo pequeño 5
1.4. Caminantes aleatorios en grafos simples 7
1.4.1. Ecuación maestra 7
1.5. Procesos dinámicos en redes 9
1.6. Caminantes aleatorios en redes con pesos 9
1.6.1. Distribución estacionaria 11

2. Caminatas aleatorias en imágenes **14**
2.1. Introducción 14
2.2. Caminantes aleatorios en imágenes 15
2.3. Distribución estacionaria 18
2.3.1. Estrategias locales 19
2.3.2. Estrategias Globales 23
2.4. Tiempo medio de primer retorno 26
2.5. Resultados 27

3. Difusión en imágenes digitales **29**
3.1. Introducción 29
3.2. Segmentación de imágenes mediante caminantes aleatorios 30
3.2.1. La integral de Dirichlet 32
3.3. Problema de Dirichlet para sistemas discretos finitos 32
3.4. Problema de Dirichelt en imágenes digitales 34
3.5. Difusión de caminantes aleatorios para la segmentación de imágenes 35
3.6. Navegación por componentes 41
3.7. Resultados 45

4. Análisis de imágenes mediante el modelo de Potts **46**
4.1. Introducción 46
4.2. Ecuación maestra y equilibrio termodinámico 47
4.3. El modelo de Ising 49
4.4. Métodos numéricos en física estadística 51

4.4.1. Simulaciones Monte Carlo. 52
4.5. El modelo de Potts 57
4.5.1. El modelo de Potts en detección de comunidades 60
4.6. Segmentación de Imágenes mediante el modelo de Potts 61
4.7. Resultados 69

Conclusiones y recomendaciones **72**

Bibliografía **74**

Índice de figuras

1.1. Grafo 2
1.2. Redes de mundo grande. 4
1.3. Redes de Erdős-Rényi y de Barabási-Albert 6
1.4. Red de contactos de una persona en Facebook 7
1.5. Grafo en el que se mueve un caminante aleatorio preferencial 10
1.6. Distribución estacionaria P_i^{∞} en términos del grado k_i 12

2.1. Simulación Monte Carlo de caminantes aleatorios en imágenes con estrategias locales. 16
2.2. Simulación Monte Carlo de caminantes aleatorios en imágenes con estrategias globales. 17
2.3. Distribución estacionaria para una navegación exponencial. 20
2.4. Distribución estacionaria para una navegación preferencial 21
2.5. Distribución estacionaria para una navegación por diferencia de intensidades. . 22
2.6. Analisis mediante la distribución estacionaria del parámetro de escala para una navegación global. 24
2.7. Distribución estacionaria para una navegación global. 24
2.8. Comparación del efecto de las navegaciones locales y globales mediante la distribución estacionaria. 25
2.9. Tiempo medio de primer retorno para caminantes aleatorios en imágenes. . . . 27

3.1. Marcas en la imagen indicando los pixeles semilla 31
3.2. Efecto de la función peso Ω_{ij} en la difusión de semillas 37
3.3. Segmentación de una tomografía axial computarizada con dos etiquetas 39
3.4. Segmentación de una tomografía axial computarizada con tres etiquetas 40
3.5. Distribución estacionaria de caminantes aleatorios guiados por navegaciones por componentes. 42
3.6. Segmentación de imágenes por componentes 42
3.7. Distribución estacionaria para una navegación exponencial y una navegación por componentes 43
3.8. Segmentación de imágenes definida para una navegación por componentes. . . 44

4.1. Simulación Monte Carlo del modelo de Ising mediante el algoritmo de Metropolis 56
4.2. Resultados numéricos obtenidos mediante el algoritmo de Metropolis para: la energía y magnetización en el modelo de Ising. 57
4.3. Simulación Monte Carlo del modelo de Potts $q = 4$ mediante el algoritmo de baños térmicos 59
4.4. Simulación Monte Carlo del modelo de Potts $q = 10$ mediante el algoritmo de baños térmicos 59
4.5. Distribución estacionaria para caminantes aleatorios guiados por una función peso en el contexto de segmentación de imágenes 63

4.6. Segmentación de imágenes con modelo de Potts mediante el algoritmo de baños térmicos 64
4.7. Efecto de la temperatura T y del parámetro de resolución γ en el algoritmo de baños térmicos en el contexto de segmentación de imágenes 65
4.8. Segmentación de imágenes mediante el modelo de Potts a temperatura cero . . 67
4.9. Segmentación de imágenes mediante el modelo de Potts y algoritmo de caminatas aleatorias en imágenes. 68
4.10. Segmentación de imágenes en el modelo de Potts con pesos 69

Capítulo 1

Caminantes aleatorios en redes

Este capítulo introduce algunos conceptos utilizados a lo largo de todo el trabajo. Inicia con una breve descripción de la teoría de grafos, del concepto de red y de los diferentes tipos de redes de mundo grande y mundo pequeño. Finalmente, se define a los caminantes aleatorios en redes y se describe casos comúnmente estudiados como son el caminante aleatorio normal, la navegación preferencial y la matriz de Google.

1.1. Introducción

El estudio de redes en los últimos años ha resultado fundamental en el análisis de sistemas complejos debido a que estas estructuras permiten describir a sus elementos por medio de nodos y las interacciones entre sus elementos por medio de líneas en un grafo. Como consecuencia, se han establecido redes asociadas a diversos sistemas en campos como la física, biología, sociología, teoría de la información, entro otros. La teoría de grafos es el formalismo matemático que permite un análisis cuantitativo de la estructura de las redes; esta teoría estudia aspectos como la conectividad de una red, las características de cada nodo, la forma en la que se agrupan en comunidades los nodos, entre otros problemas [1].

Adicional a las propiedades estructurales de las redes están los procesos dinámicos que toman lugar en estos sistemas. Procesos como la difusión, la propagación de rumores, el problema de búsqueda, reacciones químicas, transporte, entre otros fenómenos pueden realizarse en una red. La pregunta fundamental en este tipo de problemas es establecer la relación entre las características de la red y el proceso dinámico que tiene lugar en esta estructura [1]. Así pues, este capítulo presenta una introducción a estos conceptos. Las secciones 1.2 y 1.3 introducen aspectos generales de la teoría de grafos y del concepto de red así como diferentes tipos de redes y de medidas de centralidad que describen las características de cada elemento de la red, en particular estas secciones describen las redes aleatorias de Erdős-Rényi y de Barabási-Albert. La sección 1.4 define los caminantes aleatorios en redes, la matriz de transición de un caminante aleatorio y presenta varios casos conocidos en la literatura como son el caminante aleatorio

normal, la navegación preferencial y la matriz de Google. Todos los conceptos mencionados se utilizan en los capítulos 2 y 3 en el contexto de imágenes digitales.

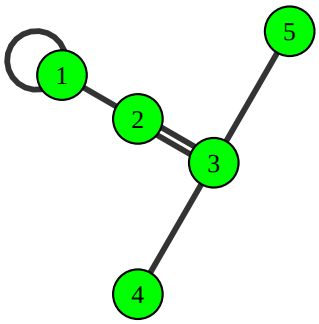
1.2. Teoría de grafos

Con el fin de estudiar procesos dinámicos que tienen lugar en redes es preciso trabajar dentro de un formalismo matemático denominado teoría de grafos. Hoy en día la teoría de grafos es un campo activo de investigación con diversas aplicaciones en la ciencia [1]. En su forma más general, un grafo $\mathcal{G}$ consiste de un conjunto $\mathcal{V}$ de N nodos o vértices y un conjunto de líneas $\mathcal{E}$ formado por pares de nodos [1, 2].

Como muestra la Figura 1.1, un grafo general puede presentar múltiples líneas entre dos nodos, también pueden existir bucles que son líneas que unen a un nodo consigo mismo. Adicional a los conjuntos $\mathcal{V}$, $\mathcal{E}$ los grafos pueden tener valores asociados a cada uno de sus nodos o a cada una de sus líneas, este tipo de grafos se denominan grafos con pesos. Al advertirse el orden de las parejas de nodos en $\mathcal{E}$, el grafo se denomina grafo dirigido. Con esta definición el concepto de grafo es muy amplio y permite describir una gran variedad de estructuras. Una forma común de representar grafos es asignando un punto por cada elemento de $\mathcal{V}$ y a cada elemento en $\mathcal{E}$ se le asigna una curva que une los dos nodos respectivos. En el caso de grafos dirigidos, la dirección de cada línea se representa con una flecha.

Un caso particular en la teoría de grafos lo constituyen los grafos simples que representan estructuras no dirigidas, sin múltiples líneas y sin líneas que conectan a un nodo consigo mismo. Los grafos simples generalmente son representados con una matriz de adyacencia $\mathbf{A}$ de tamaño

Figura 1.1: Grafo con el conjunto de nodos $\mathcal{V} = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ y el conjunto de líneas $\mathcal{E} = \{\{1, 1\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{3, 5\}\}$. Fuente: Esta investigación.



$N \times N$ con elementos $A_{ij} = A_{ji} = 1$ si $\{i, j\} \in \mathcal{E}$ y $A_{ij} = 0$ para otros casos, en particular, $A_{ii} = 0$ representa la no existencia de bucles. En grafos simples el grado de un nodo i es definido como $k_i = \sum_{l=1}^{N} A_{il}$ y representa el número de nodos a los que se encuentra conectado el nodo i mediante una línea. Por lo general, a este conjunto de nodos se les llama vecinos de i.

A continuación se presentan otras definiciones relacionadas con la forma en la que se conectan los nodos en un grafo [2]:

- Un camino en un grafo $\mathcal{G}(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ es una secuencia de nodos y líneas:

$$W = v_o,\, e_1,\, v_1,\, \ldots,\, e_n,\, v_n\,, \tag{1.1}$$

  donde $\{v_i\}_{i=0}^{n} \in \mathcal{V}$, $\{e_i\}_{i=1}^{n} \in \mathcal{E}$. Para $j = 1, \ldots, n$ los nodos v_{j-1} y v_j son los extremos de la línea e_j. En grafos simples un camino es representado por una secuencia de nodos $W = v_0,\, v_1,\, \ldots,\, v_n$ con la condición que los nodos v_{j-1} y v_j estén conectados por una línea, o en otras palabras que sean adyacentes.

- Un ciclo es un camino en el cual únicamente los nodos inicial y final coinciden.

- La distancia d_{ij} entre los nodos i, j en un grafo es el número de líneas del camino más corto que conecta a los nodos i, j.

- Un grafo se denomina conexo si existe por lo menos un camino entre cada par de nodos.

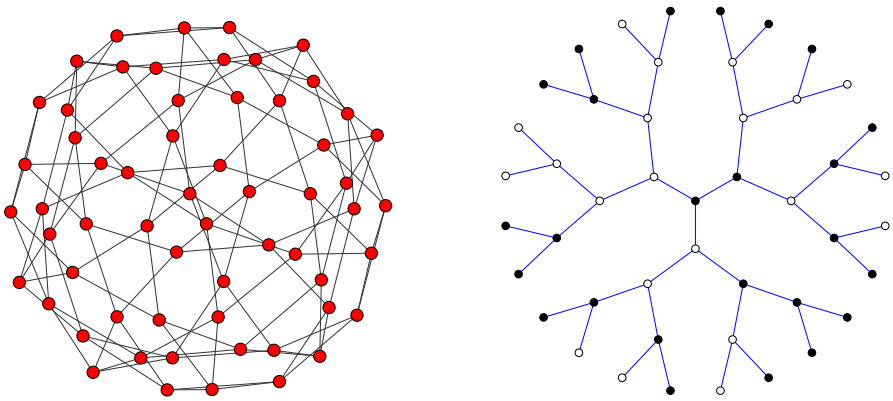
- El diámetro de un grafo conexo es la máxima distancia entre dos nodos del grafo.

Con las definiciones mencionadas, esta sección completa una breve introducción a los conceptos de la teoría de grafos. En la siguiente parte, esta teoría es aplicada en el contexto de las redes.

1.3. Redes

El término red comúnmente es utilizado para hacer referencia a grafos simples conexos, también son comunes los términos redes dirigidas, caso en el que se tiene en cuenta la dirección de las líneas y redes con pesos cuando cada línea tiene un valor asociado denominado peso. En los últimos diez años el estudio de redes ha experimentado un desarrollo significativo debido a que una gran variedad de sistemas complejos pueden ser modelados asignando un nodo a cada elemento del sistema y representando las interacciones por medio de líneas entre nodos. Este tipo de estructuras han sido utilizadas en el estudio de redes eléctricas, sistemas biológicos,

Figura 1.2: Redes de mundo grande: (a) Red regular con grado $k = 4$, $N = 60$. (b) Árbol con $N = 46$. Fuente: Esta investigación.



redes sociales, sistemas de transporte, telefonía, internet, entre otras aplicaciones [1, 3].

Cuando el número de nodos es $N >> 1$ se distinguen dos tipos de redes: las de mundo pequeño donde la distancia promedio entre pares de nodos $\langle d \rangle$ escala como $\log(N)$ y las de mundo grande donde $\langle d \rangle$ escala como una potencia de N.

1.3.1. Redes de mundo grande

Para este caso la distancia promedio entre nodos escala como una potencia del número de nodos en la red, de esta manera, las distancias entre nodos son comparables al tamaño de la red y no se encuentran nodos que faciliten la conectividad de la estructura. Entre las redes de mundo grande se encuentran los árboles, los anillos, las redes cuadradas y triangulares entre otras redes regulares bien conocidas en modelos de física del estado sólido [1]. En la Figura 1.2 se presenta una red cuadrada con condiciones de frontera periódicas y un árbol; esta representación hace evidente que la distancia promedio entre nodos es comparable al tamaño de la red.

Adicionalmente, redes de mundo grande describen redes reales en diversos contextos, por ejemplo, en medios de transporte como la red formada por estaciones de metro, las redes eléctricas [1], los pixeles en una imagen digital [4, 5], las redes resultantes en la propagación de enfermedades [6] entre otros.

1.3.2. Redes de mundo pequeño

En las redes de mundo pequeño la distancia promedio entre nodos es mucho menor que el tamaño de la red. Esta propiedad es común en muchas redes reales. Entre los modelos más conocidos para crear redes aleatorias que capturan esta característica están el de Erdős-Rényi (1959) y el de Barabási-Albert (1999).

Modelo de Erdős-Rényi [1]**.**

Este modelo parte de N nodos, donde la existencia de líneas entre cada par de nodos depende de una probabilidad fija p. De esta manera, al construir la red se decide si se conecta o no cada par de nodos, situaciones que aparecen con probabilidad p y $1-p$ respectivamente. Un grafo generado por este modelo manteniendo N y p fijos se denota con $\mathcal{G}_{N,p}$, una red conexa de este tipo se presenta en la Figura 1.3(a). El valor promedio del número de líneas en $\mathcal{G}_{N,p}$ es $pN(N-1)/2$ y su grado promedio es $\langle k\rangle = p(N-1)$. Por otra parte, la probabilidad de obtener un nodo con grado k está dada por [1]:

$$P(k) = \binom{N-1}{k} p^k (1-p)^{N-1-k} \approx \frac{\langle k\rangle^k \exp(-\langle k\rangle)}{k!}, \tag{1.2}$$

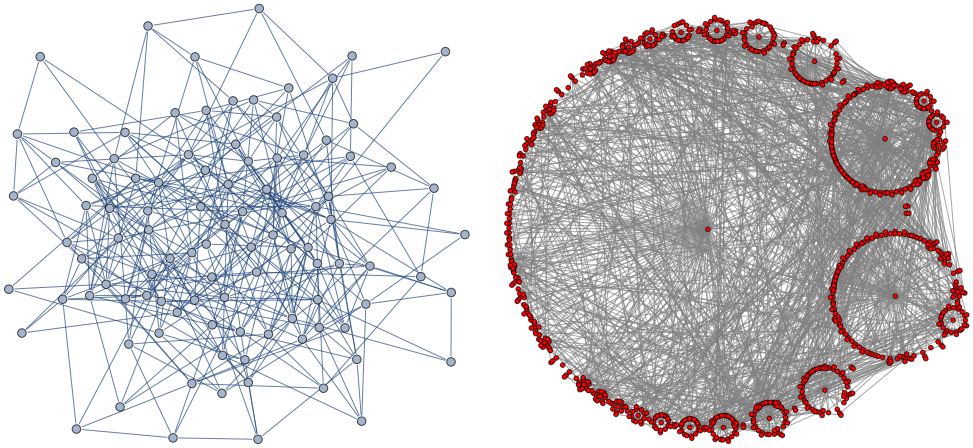
para un $\langle k\rangle$ fijo. La igualdad en la ecuación (1.2) se da en el límite $N \to \infty$. Así, cuando $N \to \infty$, la probabilidad $P(k)$ sigue una distribución de Poisson. En general $\mathcal{G}_{N,p}$ no es un grafo conexo, cuando $p = \frac{\log N + b}{N}$ para algún b positivo, la probabilidad de que $\mathcal{G}_{N,p}$ sea un grafo conexo tiende a $\exp(-\exp(-b))$. En la literatura se hace referencia al valor $p = \frac{\log N}{N}$ como límite de percolación [1].

El modelo de Erdős-Rényi fue el primero en sugerir un método para crear grafos en forma aleatoria. En éste modelo surgen fenómenos de percolación y en la actualidad es una de las estructuras comúnmente utilizadas para el estudio de procesos dinámicos en redes.

Redes libres de escala: Modelo de Barabási-Albert [1]**.**

Este modelo crea una red donde las líneas se agregan con una tendencia a establecer conexiones con nodos de mayor grado, esto da como resultado que $P(k)$ siga una ley de potencias para nodos con $k >> 1$. Con el fin de construir la red se inicia con un grupo pequeño de nodos m_0. En cada paso del crecimiento de la red se conecta un nuevo nodo a $m \leq m_0$ de los nodos que ya se encuentran en la red con una probabilidad de conectarse a un nodo i de grado k_i dada por $p_i = k_i / \sum_{l=1}^{m} k_l$. Este algoritmo con conexiones preferentes permite establecer una red de mundo pequeño y libre de escala, para una red de Barabási-Albert $m_0 = 1$, esto da como

Figura 1.3: (a) Red de Erdős-Rényi con $N = 100$, $p = 0.08$. (b) Red de Barabási-Albert con $N = 1000$. Se identifican unos pocos nodos con bastantes conexiones en la red y muchos nodos que tienen pocas conexiones. Fuente: Esta investigación.



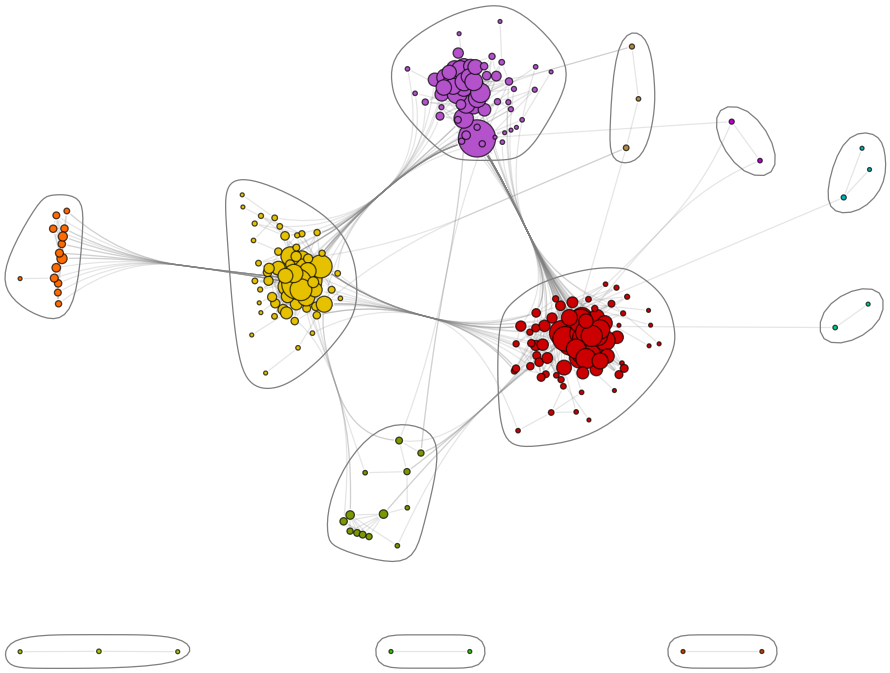
(a) (b)

resultado $P(k) \propto k^{-3}$ para $k >> 1$. El modelo de Barabási-Albert permite construir redes con una ley de potencias en la distribución de grados de nodos. En estas redes existen unos pocos nodos que poseen una gran cantidad de vecinos y un gran número de nodos con pocos vecinos como se ilustra en la Figura 1.3(b).

Redes reales

Hasta el momento únicamente se han mencionado algunas redes comunes en teoría de grafos y métodos para construir redes de manera aleatoria. Sin embargo diversos sistemas reales se pueden describir por medio de redes y el análisis de estas ha revelado estructuras con la propiedad de mundo pequeño. En particular, se han encontrado redes libres de escala en el caso de las páginas de internet, las redes sociales que surgen en colaboraciones entre científicos, las redes sociales en línea como Facebook o Twitter, los actores en Hollywood, las redes de aeropuertos en el mundo, entre un sin número de redes reales [7]. Diversas características de las redes complejas y la forma en la que surgen en casos reales son estudiadas en detalle en [1, 3]. Adicional a esto, en el estudio de redes reales se ha identificado la aparición de comunidades; grupos de nodos con mayor cantidad de conexiones con respecto a la estructura total. La Figura 1.4 muestra la red formada por los contactos de una persona en Facebook, las diferentes comunidades están asociadas a grupos formados por familiares, compañeros de trabajo, amigos de la universidad, entre otros grupos. Actualmente, el estudio de algoritmos que permitan la detección de

Figura 1.4: Red de contactos de una persona en Facebook con $N = 386$. La gráfica identifica diferentes comunidades asociadas al grupo familiar, a los compañeros de trabajo, amigos de la universidad entre otros tipos de comunidades. Estructuras con estas características se encuentran en diversos tipos de redes reales. Fuente: Esta investigación.



comunidades en redes reales es un área importante de investigación.

1.4. Caminantes aleatorios en grafos simples

Una vez definidos los conceptos básicos de teoría de grafos y explicados los modelos típicos para generar redes aleatorias se pueden estudiar procesos dinámicos que toman lugar en estas estructuras. Esta sección introduce algunos de los modelos para caminantes aleatorios en redes; en adelante se consideran únicamente grafos conexos de N nodos.

1.4.1. Ecuación maestra

Un caminante aleatorio en una red es un proceso estocástico descrito por la ecuación maestra con tiempo discreto [8, 9]:

$$P_{ij}(t+1) = \sum_{l=1}^{N} P_{il}(t) w_{l \to j} \ , \tag{1.3}$$

donde $P_{ij}(t)$ es la probabilidad de encontrar al caminante en el nodo j al tiempo t partiendo del nodo i en el instante $t = 0$. La cantidad $w_{i\to j}$ es la probabilidad de pasar del nodo i al nodo j en un solo paso. De esta manera $w_{i\to j}$ contiene la información de cómo el caminante aleatorio se mueve en la red y resulta conveniente definir la matriz de transición $\mathbf{W}$ con elementos $W_{ij} = w_{i\to j}$. A continuación se presentan algunos modelos típicos de caminantes aleatorios en redes.

Caminante aleatorio normal:

En este caso el caminante aleatorio se desplaza en cada paso a un nodo vecino del que se encuentra. Esto define al caminante aleatorio más simple. La probabilidad de pasar a cualquiera de estos vecinos es la misma, en consecuencia, $w_{i\to j}$ está dada por:

$$w_{i\to j} = \frac{A_{ij}}{k_i}. \tag{1.4}$$

Este tipo de movimiento es estudiado inicialmente en redes cuadradas regulares con el fin estudiar difusión [8, 9] y en redes generales se define en [10]. En los últimos años se han estudiado en diversos artículos las consecuencias de esta dinámica para diferentes tipos de redes [11].

Navegación preferencial:

El caminante aleatorio normal pasa de un nodo a sus vecinos con igual probabilidad. Una generalización de esta dinámica tiene en cuenta la preferencia a pasar a nodos vecinos dependiendo de su grado. Para este caso $w_{i\to j}$ toma la forma [12, 13]:

$$w_{i\to j} = \frac{A_{ij}k_j^{\beta}}{\sum_{l=1}^{N} A_{il}k_l^{\beta}}, \tag{1.5}$$

donde β es un parámetro real que define el proceso. Para $\beta = 0$ se recupera al caminante normal, cuando $\beta > 0$ se da preferencia a pasar a nodos con mayores conexiones y para $\beta < 0$ se tiende a pasar a nodos con menor grado. El caminante preferencial se introduce en [12] en el contexto de enrutamiento y tráfico, también es utilizado en [14] para modelar reacciones químicas. Las consecuencias de esta elección para $w_{i\to j}$ han sido exploradas en [13].

Matriz de Google:

En los modelos de navegación clásica y preferencial el caminante aleatorio solo puede pasar a los nodos vecinos. Un proceso que permite un paso entre nodos que no son vecinos se da en la matriz de Google que para grafos simples toma la forma [15]:

$$w_{i\to j} = a\frac{A_{ij}}{k_i} + (1-a)\frac{1-\delta_{ij}}{N-1}, \tag{1.6}$$

donde $0 \leq a \leq 1$ y δ_{ij} denota la delta de Kronecker. En esta navegación se presenta con probabilidad a una dinámica similar al caminante normal y con probabilidad $(1-a)$ es posible pasar a cualquier nodo de la red independiente de si se trata de un nodo vecino. Una forma más general de la matriz Google aplicable a grafos dirigidos se utiliza para que programas de computadora exploren el contenido de páginas de internet. Estos programas crean una base de datos con la ubicación de palabras clave en internet. La información recolectada es parte del funcionamiento del buscador Google donde se ha encontrado favorable utilizar el valor $a = 0.85$ [1, 15].

1.5. Procesos dinámicos en redes

Los caminantes aleatorios son uno de los tantos procesos dinámicos que pueden ocurrir en una red, otros mecanismos en los que se encuentran caminantes aleatorios se dan en el contexto de la difusión en redes, la propagación de rumores y epidemias, el problema de búsqueda, reacciones químicas, entre otros [1]. También son de interés otros problemas relacionados con la sincronización, la teoría de juegos, el análisis de imágenes [5]; campos donde resulta fundamental establecer relaciones entre las características de una red y la forma del proceso dinámico que tiene lugar en esta estructura [1].

El capítulo 2 estudia procesos dinámicos en imágenes modeladas como redes, estos tratamientos se enfocan como procesos Markovianos, de tal manera que la dinámica en la red se da por medio de caminantes aleatorios. En un proceso Markoviano de X_m variables aleatorias con x_m estados respectivamente, la distribución de probabilidad $P(x_{n+1})$ de X_{n+1} condicionada a sus estados pasados está dada por [16] : $P(x_{n+1}|x_n, x_{n-1}; x_{n-2}...x_0) = P_(x_{n+1}|x_n)$, donde x_n es el estado de la variable X_n en el tiempo n. Esta ecuación indica que si se conoce la historia del sistema hasta su instante actual, su estado presente resume toda la información relevante para describir en probabilidad su estado futuro.

1.6. Caminantes aleatorios en redes con pesos

Esta sección presenta un método general que permite estudiar diversos caminantes aleatorios en redes por medio de procesos estocásticos definidos en términos de una red y una matriz de pesos. Considerando una red con N nodos $i = 1, \ldots, N$ y con pesos, la estructura de la red es descrita por la matriz de adyacencia $\mathbf{A}$ con elementos $A_{ij} = A_{ji} = 1$ si los nodos i y j se

encuentran conectados y $A_{ij} = A_{ji} = 0$ en otros casos; en particular se elige $A_{ii} = 0$ con el fin de evitar líneas que conecten a un nodo con sí mismo. Adicional a esta red se tiene una matriz de pesos $\mathbf{\Omega}$ con elementos $\Omega_{ij} = \Omega_{ji} \geq 0$ y $\Omega_{ii} = 0$. La matriz $\mathbf{\Omega}$ puede contener información de la estructura de la red o dar información adicional sobre las conexiones o los nodos. Una generalización de la definición del grado de cada nodo permite establecer el concepto de intensidad S_i del nodo i definida por $S_i = \sum_{l=1}^{N} \Omega_{il}$.

Una vez introducidos estos conceptos se proponen caminantes aleatorios guiados por los elementos de $\mathbf{\Omega}$ y se asume que la red descrita por la matriz de adyacencia es conexa. La probabilidad $P_{ij}(t)$ de encontrar un caminante aleatorio en el nodo j al tiempo t que parte del nodo i al tiempo $t = 0$, satisface la ecuación maestra [8, 9]:

$$P_{ij}(t+1) = \sum_{m=1}^{N} P_{im}(t) w_{m \to j} \ , \tag{1.7}$$

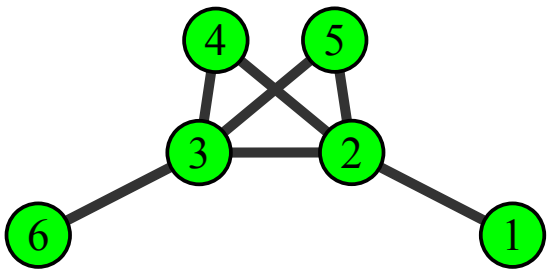
donde las probabilidades de transición $w_{i \to j}$ están dadas por:

$$w_{i \to j} = \frac{\Omega_{ij}}{\sum_{l=1}^{N} \Omega_{il}} = \frac{\Omega_{ij}}{S_i}. \tag{1.8}$$

Las probabilidades de transición definen la matriz $\mathbf{W}$ con elementos $W_{ij} = w_{i \to j}$.

Con el fin de ilustrar algunos de estos conceptos se define un caminante aleatorio preferencial que se mueve en un grafo descrito por la matriz de adyacencia $\mathbf{A}$ tal como muestra la Figura 1.5. Para definir el caminante aleatorio se construye la matriz de transición $\mathbf{W}$. Si $q_i = k_i$ y $\beta = 0$ se obtiene al caminante normal descrito por la matriz $\mathbf{W}$ dada por:

Figura 1.5: Grafo en el que se mueve un caminante preferencial descrito por la matriz de adyacencia $\mathbf{A}$. Fuente: Esta investigación.



$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Por otra parte la elección $\beta = 1$ retoma la navegación preferencial. Para este caso $\mathbf{W}$ es:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/9 & 0 & 4/9 & 2/9 & 2/9 & 0 \\ 0 & 4/9 & 0 & 2/9 & 2/9 & 1/9 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Estos resultados muestran que la matriz de transición cambia drásticamente con respecto a lo establecido para el caminante aleatorio normal, haciendo evidente que las probabilidades de paso son mayores a los nodos con mas conexiones.

1.6.1. Distribución estacionaria

Hasta el momento se ha estudiado las diferentes caminatas aleatorias en grafos simples y en grafos con pesos. Una medida que caracteriza estas entidades dinámicas en redes es la distribución estacionaria. Aunque la matriz de transición $\mathbf{W}$ no es simétrica, como consecuencia directa de la ecuación (1.8) y de la simetría de la matriz de pesos $\mathbf{\Omega}$, se obtiene

$$S_i w_{i\to j} = S_j w_{j\to i}, \tag{1.9}$$

relación que establece una conexión entre $w_{i\to j}$ y $w_{j\to i}$. Por otra parte, iterando la ecuación maestra (1.7), la probabilidad $P_{ij}(t)$ toma la forma:

$$P_{ij}(t) = \sum_{j_1,\ldots,j_{t-1}} w_{i\to j_1} w_{j_1\to j_2} \ldots w_{j_{t-2}\to j_{t-1}} w_{j_{t-1}\to j}\,. \tag{1.10}$$

Combinando los resultados (1.9) y (1.10) se obtiene:

$$\begin{aligned} P_{ij}(t) &= \sum_{j_1,\ldots,j_{t-1}} \frac{S_{j_1}}{S_i}\frac{S_{j_2}}{S_{j_1}}\cdots\frac{S_{j_{t-1}}}{S_{j_{t-2}}}\frac{S_j}{S_{j_{t-1}}} w_{j\to j_{t-1}} w_{j_{t-1}\to j_{t-2}}\cdots w_{j_2\to j_1}\cdot w_{j_1\to i} \\ &= \frac{S_j}{S_i}P_{ji}(t). \end{aligned} \tag{1.11}$$

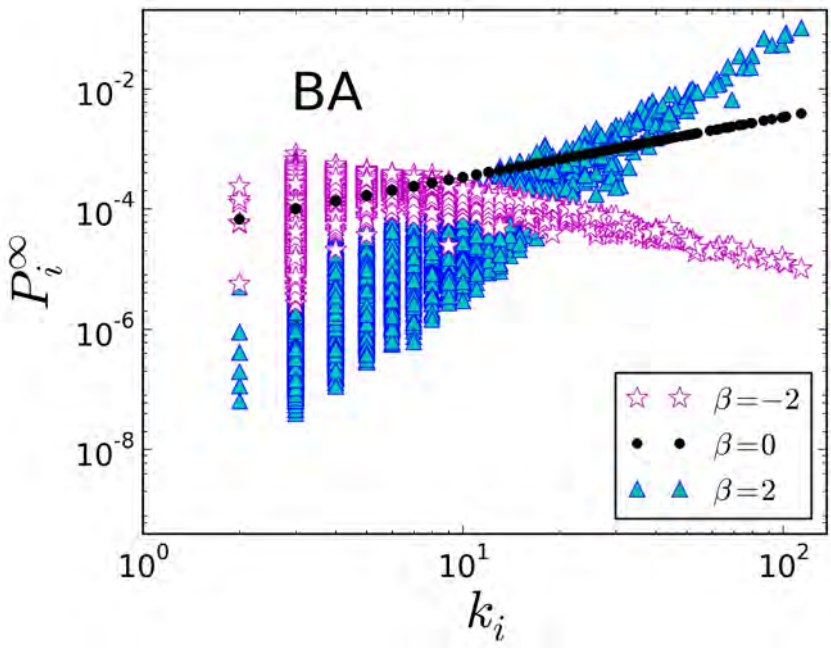
De esta manera se deduce la condición de balance detallado $S_iP_{ij}(t) = S_jP_{ji}(t)$ que es una consecuencia directa de la simetría de $\mathbf{\Omega}$. Para la distribución estacionaria $P_j^\infty = \lim_{t\to\infty} P_{ij}(t)$, que es la probabilidad de encontrar al caminante aleatorio en el sitio j cuando t es muy grande, la condición de balance detallado permite obtener:

$$P_j^\infty = \frac{S_j}{\sum_{l=1}^N S_l}\,, \tag{1.12}$$

resultado que establece que la distribución estacionaria P_j^∞, de la ecuación maestra (1.7) con probabilidades de transición (1.8), es proporcional al valor de la intensidad S_j del nodo j.

Existe una gran variedad de caminantes aleatorios que pueden ser descritos a partir de una elección especifica de la matriz de pesos $\mathbf{\Omega}$. Esto permite por ejemplo, representar la diferencia de intensidades en una imagen y un caminante aleatorio moviéndose con esta información en los pixeles de esta imagen. Esto se estudia en el capítulo 2 con detalle.

Figura 1.6: Distribución estacionaria P_i^∞ en términos del grado k_i para caminantes aleatorios descritos por las probabilidades de transición (1.5). Se utiliza una red de Barabási-Albert (BA) con $\langle k\rangle = 6$ y $N = 5000$. Fuente: Esta investigación.



En particular, la elección $\Omega_{ij} = A_{ij}(k_i k_j)^\beta$ recupera al caminante preferencial definido en la ecuación (1.5). La distribución estacionaria en este caso toma la forma:

$$P_i^\infty = \frac{\sum_{l=1}^N (k_i k_l)^\beta A_{il}}{\sum_{l,m=1}^N (k_l k_m)^\beta A_{lm}} \,. \tag{1.13}$$

La elección $\beta = 0$ en el resultado (1.13) permite deducir la distribución estacionaria $P_i^\infty = \frac{k_i}{\sum_{l=1}^N k_l}$ de un caminante aleatorio normal que es un resultado bien conocido en la literatura [1, 10].

La Figura 1.6 presenta los valores de la distribución estacionaria para un caminante aleatorio preferencial sobre una red de Barabási-Albert. Se calcula P_i^∞ utilizando la ecuación (1.13) y se gráfica en términos de k_i. Esta gráfica muestra que para un caminante aleatorio normal la probabilidad de encontrarse en un nodo es proporcional al grado k_i de éste, para un caminante preferencial con $\beta = 2$ existe mayor probabilidad a mayor número de conexiones posea el nodo, mientras que para $\beta = -2$ el caminante aleatorio tiende a tener mayor probabilidad de encontrarse en nodos con menos conexiones. Así pues, la distribución estacionaria es una medida que permite caracterizar al caminante aleatorio. Este resultado se utiliza con el fin de describir diferentes tipos de caminantes aleatorios en imágenes digitales en los capítulos 2 y 3.

De esta manera, este capítulo introdujo los conceptos necesarios sobre redes y caminantes aleatorios. Estas definiciones serán utilizadas a lo largo del trabajo. Las ideas presentadas para navegantes aleatorios en redes se continúan desarrollando en el capítulo 2 en el contexto de imágenes digitales, en el capítulo 3 en la difusión con condiciones de contorno de caminantes aleatorios en imágenes. En el capítulo 4 se utiliza un esquema similar para analizar un modelo de segmentación de imágenes basado en el modelo de Potts.

Capítulo 2

Caminatas aleatorias en imágenes

En este capítulo se introduce un método que permite estudiar imágenes digitales aplicando los resultados conocidos para el análisis de un caminante aleatorio y el transporte difusivo en redes expuestos en el capítulo 1. Se definen caminantes aleatorios, en imágenes digitales representadas como redes con pesos, con probabilidades de transición expresadas en términos de información local o no local contenida en las líneas. Se estudian diferentes tipos de estrategias que definen el movimiento en la imagen y se obtienen analíticamente la distribución estacionaria y el tiempo medio de primer retorno del caminante aleatorio resultante. Por medio de estas cantidades se deduce un método que permite, en forma rápida y concreta, caracterizar el efecto de matrices de pesos introducidas en el contexto de la segmentación de imágenes, la segmentación de imágenes por comunidades, la identificación de estructuras en imágenes digitales, entre otras.

2.1. Introducción

El procesamiento y análisis de imágenes digitales es un concepto muy amplio que involucra desde el hecho de importar una imagen desde cualquier formato (TIFF, PNG, JPEG, DICOM, ...) ya sea en 2-D o 3-D, pasando por la extracción de la información que ésta contiene como el valor de cada pixel dependiendo del número de canales que la imagen posea, así como su tamaño, tipo, y demás; hasta la manipulación de la misma como agregar un simple efecto, ajustar los niveles de brillo contraste agregar filtros, entre otros [17, 18]. De este proceso hay un tópico en particular llamado segmentación de imágenes el cual busca dividir la imagen en grupos de pixeles con el fin de simplificar o cambiar la representación de una imagen en otra más significativa y más fácil de analizar [5, 19, 20]. Este método se estudia constantemente por sus muchas aplicaciones en el contexto de la tecnología así como en medicina [21, 22, 23]. Este proceso se analiza en los capítulos 3 y 4. Si bien hay varios métodos de segmentación de imágenes propuestos y de software especializado en ésta tarea, diversos procesos de segmen-

tación involucran caminantes aleatorios en su teoría, aunque en gran parte de ellos es cuestión heurística la elección de un caminante en particular y de sus parámetros [5, 19, 24].

Así pues, este capítulo expone desde un marco científico un algoritmo ágil para el análisis de cualquier caminata aleatoria en imágenes basado en las herramientas probabilísticas de éstas entidades dinámicas en redes. El algoritmo funciona al proponer un caminante aleatorio mediante una matriz de pesos simétrica y caracterizar su dinámica con la distribución estacionaria y el tiempo de primer retorno en diferentes imágenes digitales modeladas como redes cuadradas con pesos, para ello la sección 2.2 retoma las ideas de caminantes aleatorios en redes expuestos en las secciones 1.4, 1.5, 1.6 y explica cómo se trasladan estos conceptos a imágenes. Los resultados numéricos de la caracterización de los caminantes aleatorios en imágenes son presentados en las secciones 2.3 y 2.4. Finalmente en la sección 2.5 se mencionan resultados generales del algoritmo propuesto.

2.2. Caminantes aleatorios en imágenes

Una imagen digital se modela como una red cuadrada con pesos. De esta manera, la imagen es una red de N nodos $i = 1, ..., N$, donde cada nodo representa un pixel de la imagen. Cada pixel contiene la información de su composición acorde al número de canales de la imagen [17, 18]. De este modo para una imagen de tres canales, cada pixel contiene en el espacio de color RBG la composición del color en términos de la intensidad de los colores primarios rojo, verde y azul; estas intensidades definen un vector g, cuyos componentes son los valores “R”, “G”, “B”del pixel y la norma del vector g denota la intensidad total. De igual manera cada pixel contiene una coordenada en el modelo de escala de grises, o cuatro coordenadas en el modelo CMYK (Cian, Magenta, Yellow, Key) [17, 18]. Cabe aclarar que en este trabajo siempre que se refiera a una imagen, se hace alusión a imágenes en formato digital.

Como se detalló en el capítulo 1, los caminantes aleatorios en redes con pesos se definen mediante la matriz de transición dada por la expresión (1.8) con los elementos asignados por la matriz de pesos simétrica $\mathbf{\Omega}$. Así, una vez definida la manera en que se representa una imagen como un grafo, es necesario definir a los caminantes aleatorios en imágenes guiados por la matiz de pesos $\mathbf{\Omega}$ con elementos $\Omega_{ij} = \Omega_{ji} \geq 0$, $\Omega_{ii} = 0$. La matriz $\mathbf{\Omega}$ da información sobre el cambio de la intensidad de la imagen, de tal modo que, Ω_{ij} se interpreta como una medida de la diferencia o similitud de los pixeles i y j. La intensidad S_i del nodo i es definida como:

$$S_i = \sum_{j \in N} \Omega_{ij}. \tag{2.1}$$

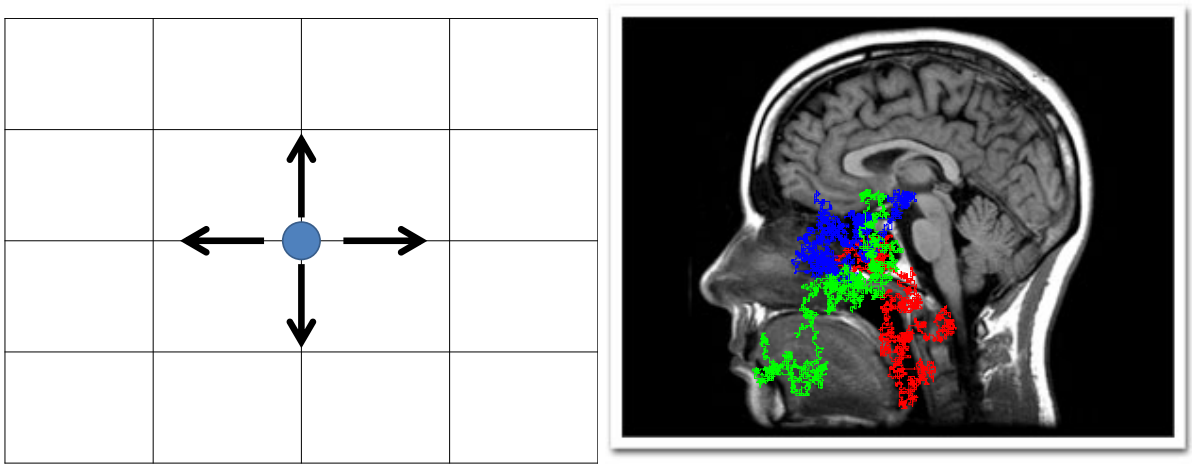
De forma que, un caminante aleatorio se mueve a través de una red cuyos nodos identifican los pixeles de la imagen digital. La dinámica de un caminante aleatorio en una red, tal como se detalló en el capítulo 1, está dada por la ecuación maestra (1.7):

$$P_{ij}(t+1) = \sum_{m=1}^{N} P_{im} w_{m \to j},$$

donde $P_{ij}(t)$ denota la probabilidad de encontrar un caminante aleatorio en el nodo j al tiempo t partiendo del nodo i al tiempo $t = 0$ y el término $w_{m \to j}$ representa las transiciones de probabilidad de ir del nodo m al nodo j dadas por $w_{i \to j} = \frac{\Omega_{ij}}{S_i}$. Este proceso se estudió de forma general con la expresión (1.8) en el capítulo 1.

A continuación se proponen caminantes aleatorios en imágenes guiados por los elementos de $\mathbf{\Omega}$. Esto quiere decir que cada definición de Ω_{ij} representa una forma particular de movimiento para los caminantes aleatorios en imágenes digitales. Estas formas de navegación pueden ser locales o globales de acuerdo a las siguientes definiciones:

Figura 2.1: (a) Representación esquemática de un entorno local para un caminante aleatorio en el que la probabilidad de ir a un vecino o a otro está relacionada por la función peso Ω_{ij}. (b) Simulación Monte Carlo de caminantes aleatorios en imágenes con estrategias locales guiados por los elementos de la matriz de pesos de la forma $\Omega_{ij} = \exp(-||g_i - g_j||^2)$, donde $||..||$ indica norma de un vector. Cada caminante se mueve con información local, es representado por un color y realiza 5000 pasos. Fuente: Esta investigación.



(a) (b)

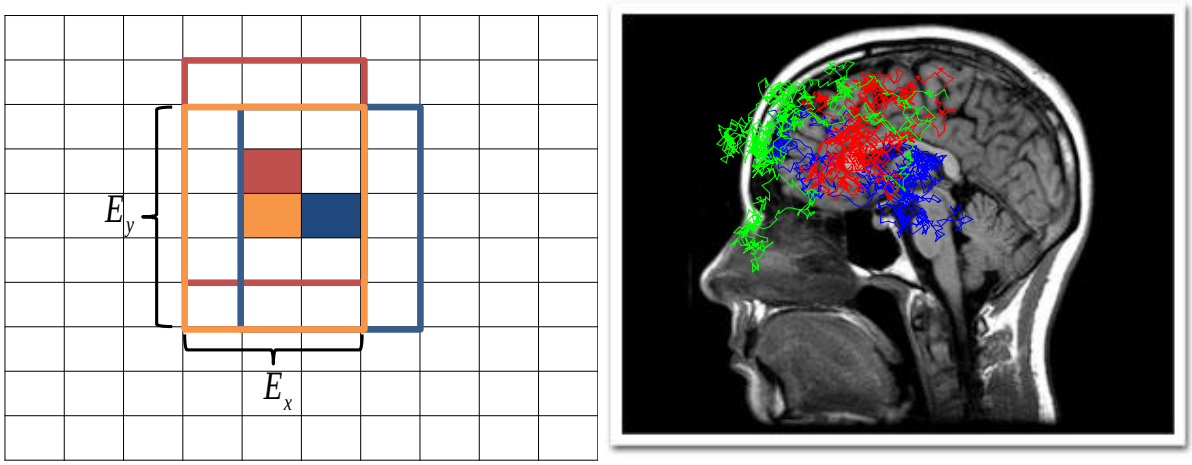
- **Estrategias locales.**

  En este tipo de estrategias el caminante aleatorio está guiado por los elementos Ω_{ij} proporcionales a A_{ij}, donde $\mathbf{A}$ es la matriz de adyacencia con elementos $A_{ij} = A_{ji} = 1$ si los nodos i y j son nodos adyacentes y $A_{ij} = A_{ji} = 0$ en otros casos. En esta forma de conectar los nodos la información del caminante aleatorio en el nodo i está restringida a un entorno local de cuatro vecinos. En la Figura 2.1 se presentan simulaciones Monte Carlo para caminantes aleatorios con una navegación local.

- **Estrategias globales.**

  Por otra parte, en estudios de detección de comunidades en imágenes [20], es necesario introducir conexiones más amplias entre los pixeles, en las que un caminante aleatorio tenga probabilidad de paso de ir a uno de los cuatro vecinos cercanos o a otro pixel que se encuentre dentro de una comunidad o un entorno de muchos más pixeles. Así pues, se define un entorno conectado de dimensiones $E_x \times E_y$. Los elementos i, j de éste entorno están dados por: $1 - \delta_{ij}$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Esta forma de conectar los nodos i, j se denomina entorno global. Así pues, el caminante aleatorio se guía por los

Figura 2.2: Simulaciones Monte Carlo de caminantes aleatorios guiados por la función $\Omega_{ij} = A_{ij} \exp(-||g_i - g_j||^2)$, donde $||..||$ indica norma de un vector. (a) Representación esquemática de entornos globales para los nodos naranja, azul y rojo. Cada entorno es un bloque de tamaño $E_x \times E_y = 3 \times 4$. (b) Caminantes aleatorios que se mueven con información de un entorno de dimensiones $E_x \times E_y = 9 \times 9$, muestran saltos no más grandes que el entorno. Cada caminante aleatorio realiza 1000 pasos. Fuente: Esta investigación.



(a) (b)

elementos Ω_{ij} proporcionales a $1 - \delta_{ij}$. Para crear el entorno global, se divide la imagen de dimensión $N = L_x \times L_y$ en N cajas que se superponen entre sí. Estas cajas de dimensiones $E_x \times E_y$ están centradas en cada pixel de la imagen, con $E_x \times E_y << L_x \times L_y$. La Figura 2.2 representa esquemáticamente esta idea y presenta simulaciones Monte Carlo para caminantes aleatorios que se mueven con una estrategia global.

Ahora bien, para caracterizar las caminatas aleatorias en imágenes no es importante la simulación Monte Carlo de cada navegación en particular, si no observar el comportamiento del caminante aleatorio cuando ha alcanzado el equilibrio a $t \to \infty$ mediante un tratamiento estadístico, esto permite observar estructuras y patrones en imágenes. Con el fin de caracterizar al caminante aleatorio en la imagen se utiliza la distribución estacionaria (1.12), cantidad que expresa la probabilidad de encontrar al caminante aleatorio a $t \to \infty$, $P_j \equiv \lim_{t\to\infty} P_{ij}(t)$:

$$P_j^{\infty} = \frac{S_j}{\sum_{l=1}^{N} S_l}.$$

Por otra parte, el inverso de la distribución estacionaria es el tiempo medio de primer retorno $\langle T_{ii} \rangle$, cantidad que expresa el número de pasos promedio en los que el caminante aleatorio retorna a su posición de inicio [10, 11]:

$$\langle T_{ii} \rangle = (P_i^{\infty})^{-1}. \tag{2.2}$$

Los elementos P_i^{∞} definen el vector $\mathbf{P}$ de $i = 1...N$ elementos. La distribución estacionaria P_i^{∞}, así como el tiempo medio de primer retorno $\langle T_{ii} \rangle$ son las cantidades que sirven para caracterizar los caminantes aleatorios en este trabajo.

2.3. Distribución estacionaria

Esta sección presenta los resultados numéricos de la distribución estacionaria para diferentes formas de navegación que son comunes en el contexto de segmentación de imágenes. También propone el uso de la navegación preferencial, conocida en enrutamiento y tráfico [12] e introducida en el capítulo 1, con el fin de observar su comportamiento en imágenes. La sección se divide en estrategias locales y globales.

2.3.1. Estrategias locales

En las estrategias locales, el caminante aleatorio está guiado por los elementos de la matriz de adyacencia, la cual se forma modelando la imagen como un grafo regular de grado cuatro. A continuación se especifican algunas funciones acorde a este tipo de definición.

- **Navegación exponencial**

  La navegación exponencial se ha empleado ampliamente en el contexto de segmentación supervisada de imágenes [5, 19, 24] , aunque su elección y la definición de su parámetros es una cuestión heurística en estos trabajos. Para este caso los elementos de matriz de peso están dados por:

$$\Omega_{ij} = \exp(-||g_i - g_j||^{\beta})A_{ij}, \tag{2.3}$$

  donde $\beta \in \mathbb{R}^+$, g_i y g_j representan los vectores RGB de los pixeles i y j respectivamente, A_{ij} es la matriz de adyacencia y $\|...\|$ denota norma de un vector. El parámetro β es un parámetro libre. Un caso particular de esta definición es la navegación Gaussiana dada para el caso especial $\beta = 2$.

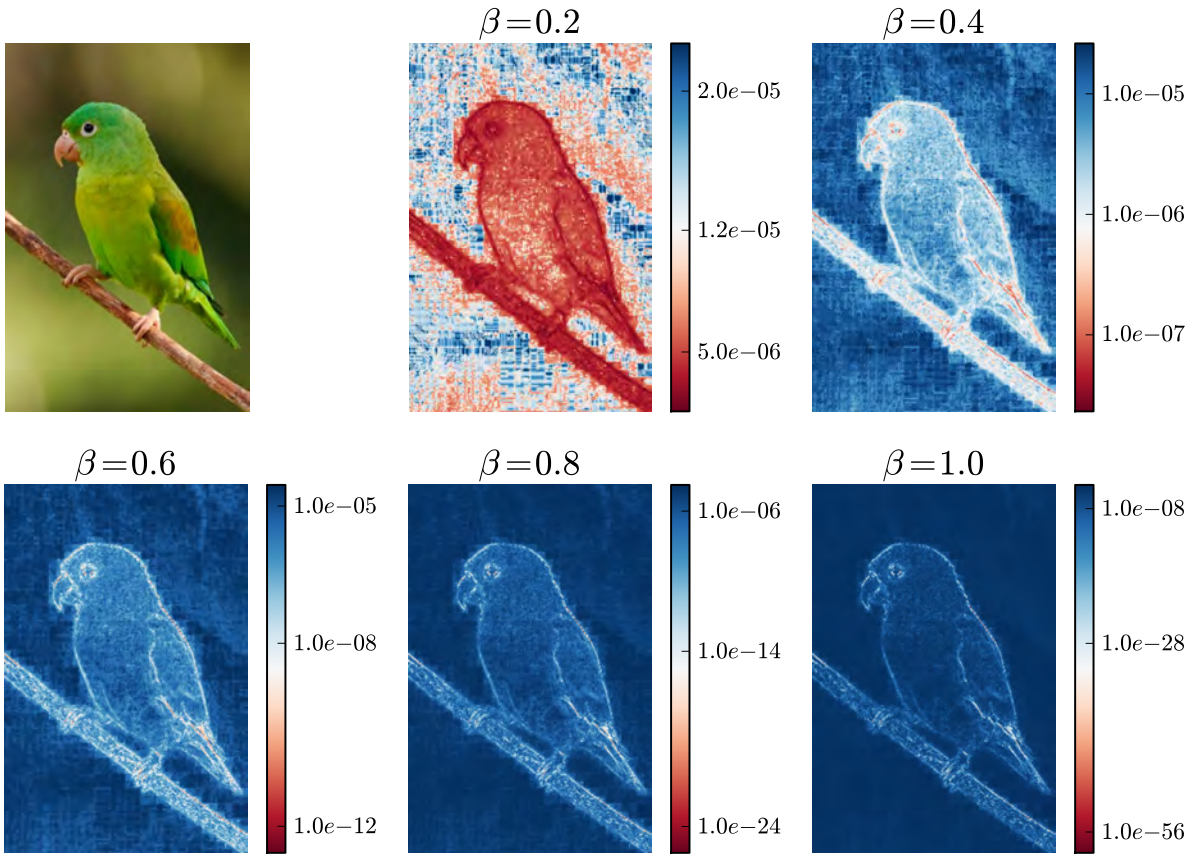
La Figura 2.3 muestra gráficamente la distribución estacionaria para un caminante conducido por los elementos de la matriz de pesos dados por la expresión (2.3). Esta gráfica permite observar como este tipo de navegación resalta las fronteras de la imagen, lo cual es útil en el contexto de segmentación de imágenes. La gráfica representa en colores la probabilidad de encontrar al caminante aleatorio en una región específica dentro de la imagen, siendo las fronteras los lugares que el caminante tiende a evitar con probabilidades cercanas a cero. Se observa que para $\beta = 0.2$ la textura de la imagen desaparece pero se detectan objetos en la misma, para $\beta = 0.4$ el caminante aleatorio empieza a detectar las líneas de las fronteras en la imagen de manera más clara. Finalmente la gráfica indica que para los parámetros $\beta = 0.8$ y $\beta = 1$, el caminante aleatorio tiene probabilidad nula de estar en las fronteras.

- **Navegación preferencial**

  La navegación preferencial no ha sido estudiada en el análisis de imágenes aunque se analiza en otros campos [12, 13]. En la navegación preferencial el caminante pasa de un nodo i a un nodo j dependiendo del valor del vector RGB de sus vecinos. Para este caso Ω_{ij} toma la forma:

$$\Omega_{ij} = A_{ij}||g_i||^{\alpha}||g_j||^{\alpha} \qquad \alpha \in \mathbb{R}, \tag{2.4}$$

Figura 2.3: Resultados numéricos de la distribución estacionaria para una caminante aleatorio guiado por la expresión (2.3). La barra de color muestra la probabilidad de encontrar al caminante aleatorio en cada punto de la imagen en el equilibrio. Se aprecia el cambio significativo de la imagen como consecuencia la elección del parámetro β. Este tipo de navegación es esencial en segmentación de imágenes y se estudia en el capítulo 3. Fuente: Esta investigación.



α es un parámetro libre. El resultado del cálculo de la distribución estacionaria para caminantes aleatorios orientados por la expresión (2.4) se muestra en la Figura 2.4. La gráfica sugiere que este tipo de navegación conserva la información de la textura y del color; además, no se definen los bordes en la imagen sin importar el valor del parámetro α. Por consiguiente, no contribuye mucho en la segmentación de imágenes ya que precisamente sin importar el valor parámetro α, el caminante aleatorio no excluye información importante como la textura ni detecta los bordes presentes en la misma.

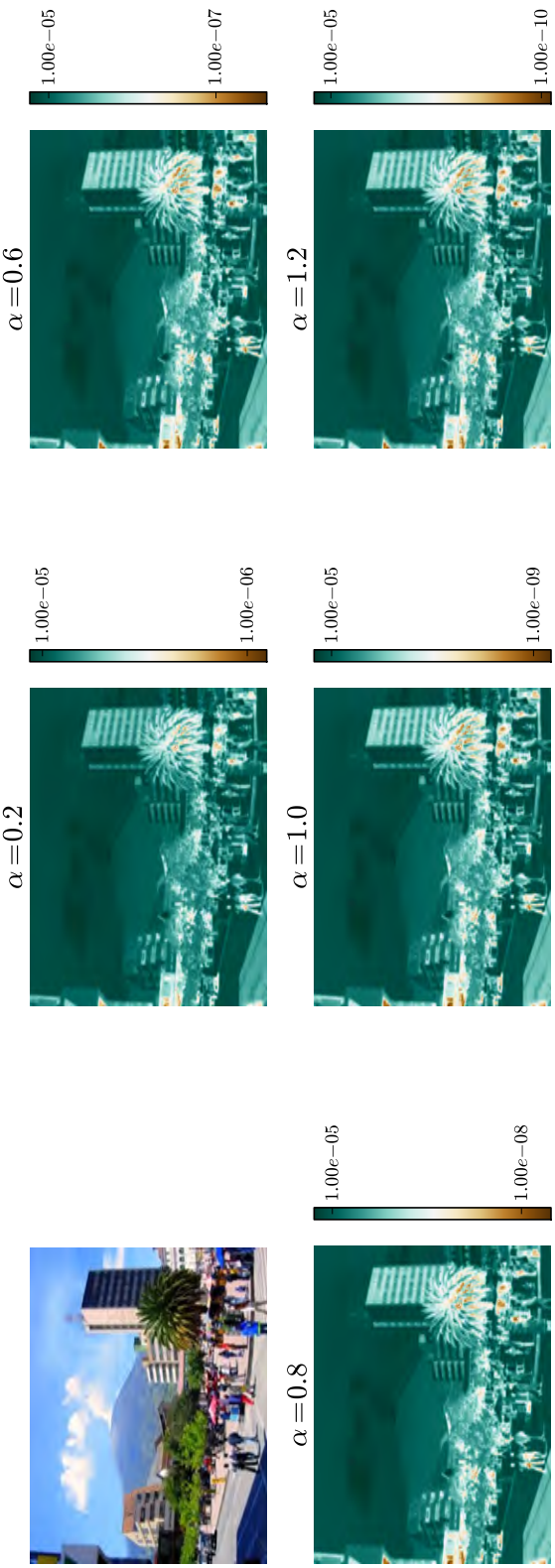


Figura 2.4: Resultados numéricos de la distribución estacionaria para un caminante aleatorio en una imagen determinado por medio de los pesos (2.4). El caminante aleatorio conserva la información de la imagen tanto como en textura y color, no se observa que se detecten fronteras ni estructuras. Se aprecia un efecto de "negativo"de la imagen original por su inversión en el color. Fuente: Esta investigación.

- **Navegación por diferencia de intensidades**

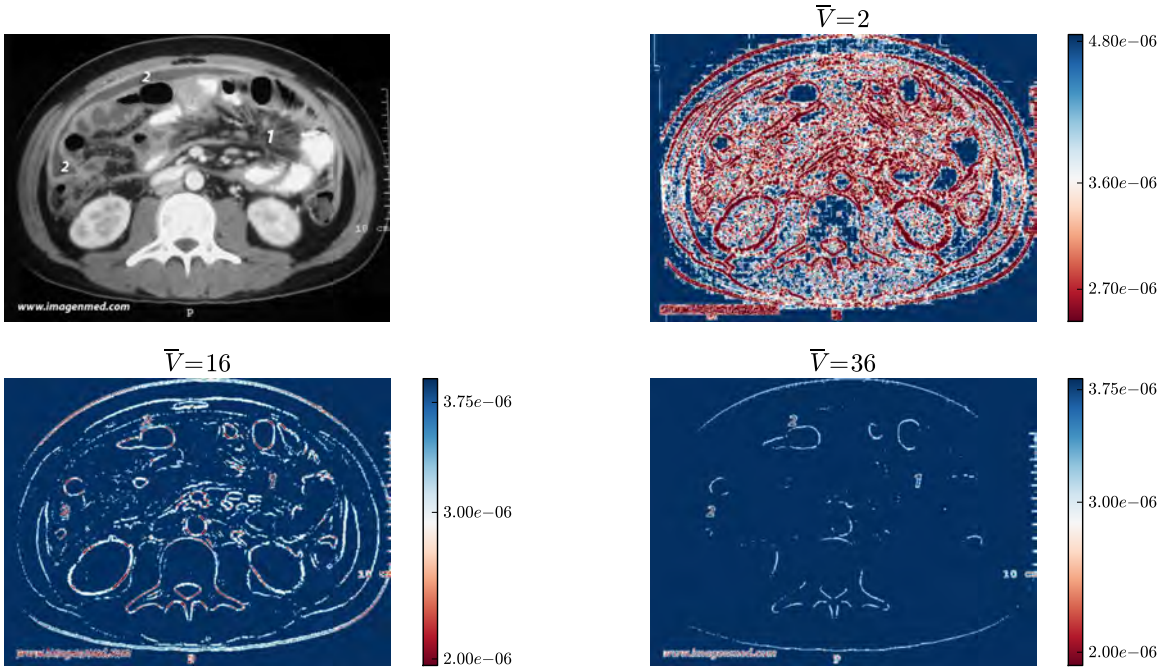
  Este modelo de navegación se utiliza para la detección de comunidades en una imagen y se introduce particularmente para la segmentación de imágenes mediante el modelo de Potts [20] que se estudia en el capítulo 4. Para ello, se definen los pesos de las líneas basados únicamente en la similitud o diferencia entre pixeles vecinos i y j y en un valor umbral $\overline{V}$ de la siguiente manera:

$$\Omega_{ij} = A_{ij}\Theta(V_{ij} - \overline{V}), \tag{2.5}$$

  donde la función $\Theta(x \geq 0) = a$, $\Theta(x < 0) = b$, los valores a y b son números reales; generalmente se toman como 1 y 0 respectivamente. V_{ij} en este caso representa la norma de la diferencia de los pixeles i y j, $V_{ij} = \|g_i - g_j\|$. Finalmente $\overline{V}$ es el valor umbral. Este valor se puede ajustar libremente.

La Figura 2.5 muestra los resultados de la distribución estacionaria para una imagen en escala de grises. El valor umbral $\overline{V}$ permite filtrar la cantidad de información. Un valor pequeño

Figura 2.5: Distribución estacionaria para una navegación determinada por los pesos (2.5) para difierentes valores umbral $\overline{V}$. El caminante aleatorio muestra las fronteras de los objetos de la imagen para $\overline{V} = 16$. Este tipo de navegación es propuesta para segmentación de imágenes mediante el modelo de Potts. La imágen original muestra una tomografía computarizada de una tuberculosis peritoneal descargada del servidor de imágenes médicas IMAGEMED.COM `http://www.imagenmed.com/imagen_mes/2009/05_tuberc.html`.



de $\overline{V}$ para esta imagen no permite observar estructuras, mientras que con un valor $\overline{V} = 36$ se pierde mucha información. Por otro lado, para un valor adecuado del umbral se observan todas las regiones de la imagen segmentadas aportando una ayuda al diagnostico de esta tomografía computarizada (TC) de una tuberculosis peritoneal.

De esta manera, hasta el momento se han estudiado diferentes formas de navegación mediante una estrategia local, encontrando de manera gráfica la forma en que operan los diferentes caminantes aleatorios en imágenes al caracterizar su dinámica mediante la distribución estacionaria. La siguiente sección estudia caminantes aleatorios que se mueven con información global.

2.3.2. Estrategias Globales

A diferencia de las anteriores navegaciones en donde el caminante aleatorio era capaz de ver a través de la función peso a sus cuatro vecinos cercanos y moverse en una dirección, en las estrategias globales, el caminante aleatorio se mueve con la información de un entorno de tamaño $E_x \times E_y$, incorporando mas información a cada pixel de la imagen. Esta estrategia fue propuesta en el contexto de segmentación de imágenes por medio de comunidades mediante el método de Potts [20].

- **Navegación por comunidades**.

  Esta navegación fue propuesta en un contexto completamente diferente, para segmentar imágenes mediante el modelo de Potts [20]. El modelo de Potts permite estudiar el comportamiento de elementos ferromagnéticos, los vidrios de espín, se aplica en detección de comunidades en redes complejas y recientemente se ha visto potencial en el contexto de segmentación de imágenes [25, 26, 27, 28]. Este método en el contexto de imágenes se estudia en el capítulo 4. Para este tipo de navegación, el peso entre líneas se asigna teniendo en cuenta la información del bloque de pixeles y un factor geométrico que incluye la distancia que los separa:

$$\Omega_{mn} = D_{mn} \exp\left(-\frac{\|\vec{r_m} - \vec{r_m}\|}{\varepsilon}\right) \quad \beta \in \mathbb{R}^+, \tag{2.6}$$

  donde D_{mn} contiene la información del entorno y es la suma de la norma de las diferencias de las intensidades entre los bloques m y n, donde cada bloque tiene dimensiones $E_x \times E_y$:

$$D_{mn} = (1 - \delta_{mn}) \sum_{i=1}^{E_x} \sum_{j=1}^{E_y} (\|\vec{g}(i,j)_m\| - \|\vec{g}(i,j)_n\|). \tag{2.7}$$

Figura 2.6: Distribución estacionaria para un caminante aleatorio no local determinado por los pesos (2.6) en un entorno de dimensiones $E_x \times E_y = 9 \times 9$. Se aprecia el efecto del parámetro de escala ε para: (a) $\varepsilon = 0.1$ y (b) $\varepsilon = 10$. Fuente: Esta investigación.

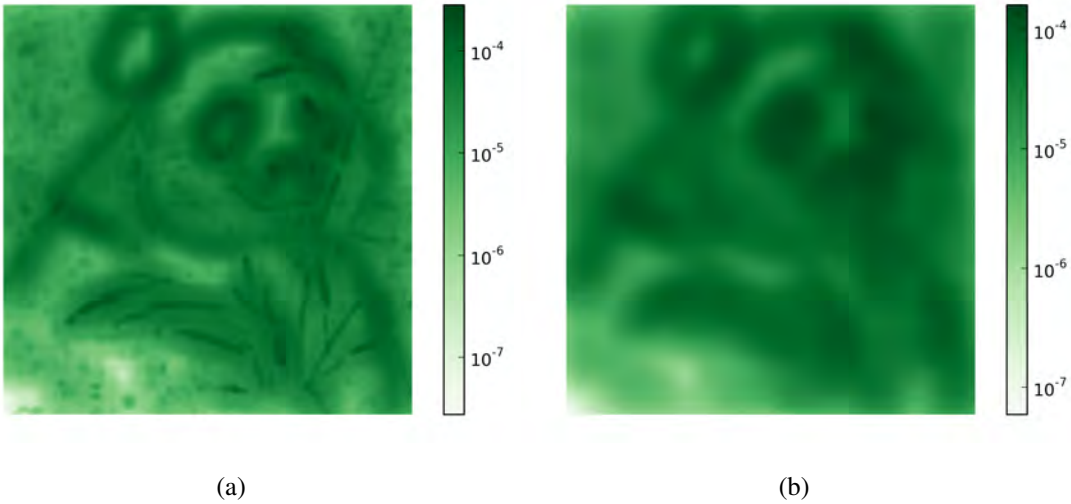
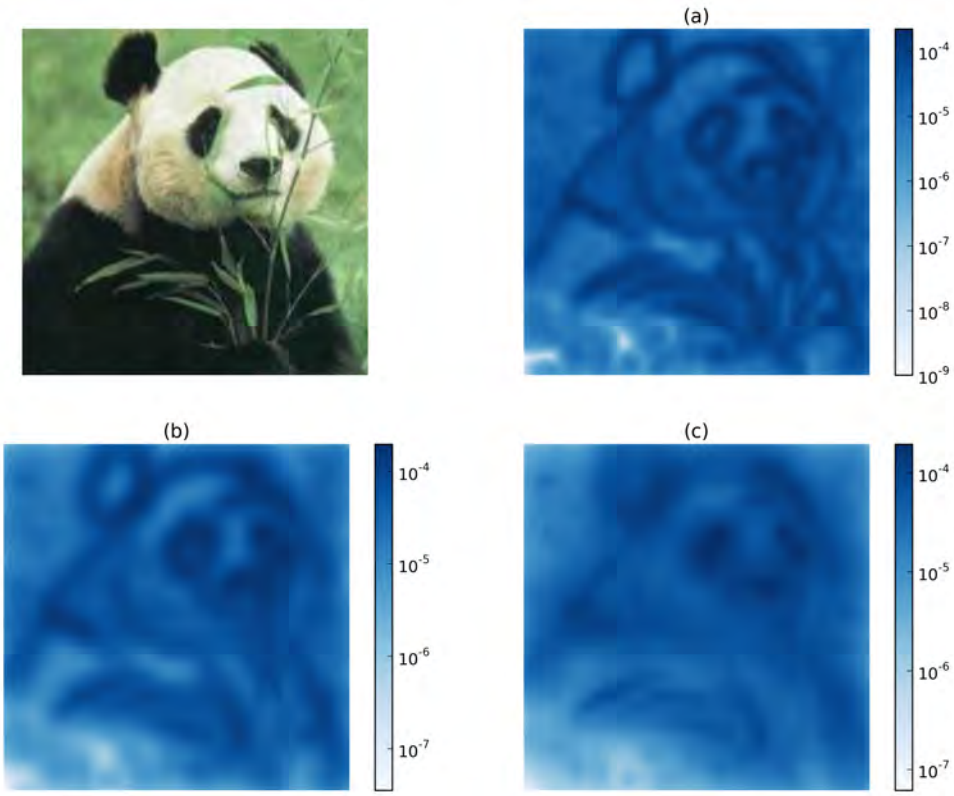


Figura 2.7: Distribución estacionaria para un caminante aleatorio con estrategias globales definidas por medio de los pesos 2.6 con $\varepsilon = 2$, para entornos de dimensiones (a) $E_x \times E_y = 4 \times 4$, (b) 9×9, (c) 17×17. Fuente: Esta investigación.



En la ecuación (2.6) el término $\|\vec{r_i} - \vec{r_j}\|$, representa la norma de la diferencia en la distancia del entorno de pixeles i y j respectivamente. El factor geométrico $\exp(-\frac{\|\vec{r_m} - \vec{r_m}\|}{\varepsilon})$ con una variable ε se puede ajustar para incorporar ciertas escalas en la imagen, tal como se exhibe en la Figura 2.6 mediante la distribución estacionaria. La Figura 2.7 muestra la distribución estacionaria para esta forma de navegación para entornos de diferentes dimensiones, donde es posible observar como al aumentar el tamaño del entorno el resultado tiende a difuminar los contorno de la imagen original. Por otra parte, en la Figura 2.8 se compara la navegación exponencial descrita en la ecuación 2.3) mencionada en las estrategias locales, con la forma de navegación global (2.6). De esta gráfica se infiere que la navegación global permite una mejor definición de bordes y una reducción de ruido en la imagen. Permite identificar además, áreas de la imagen que comparten características similares en color, con mayor precisión.

Figura 2.8: Distribución estacionaria para caminantes aleatorios locales y globales. (a) Imagen digital original descargada de la base de datos de Microsoft Research `http://research.microsoft.com/en-us/projects/objectclassrecognition/`. (b) Resultado del algoritmo para una caminante aleatorio guiado información global dada por la ecuación (2.6), los parámetros son: $\varepsilon = 2$, $L_{x,y} = 9 \times 9$. (c) Distribución estacionaria para un caminante aleatorio que se mueve con información local y está descrito por los elementos: $\Omega_{ij} = A_{ij} \exp(-0.2 * ||g_i - g_j||^{0.8})$. Fuente: Esta investigación.

(a) (b) (c)

2.4. Tiempo medio de primer retorno

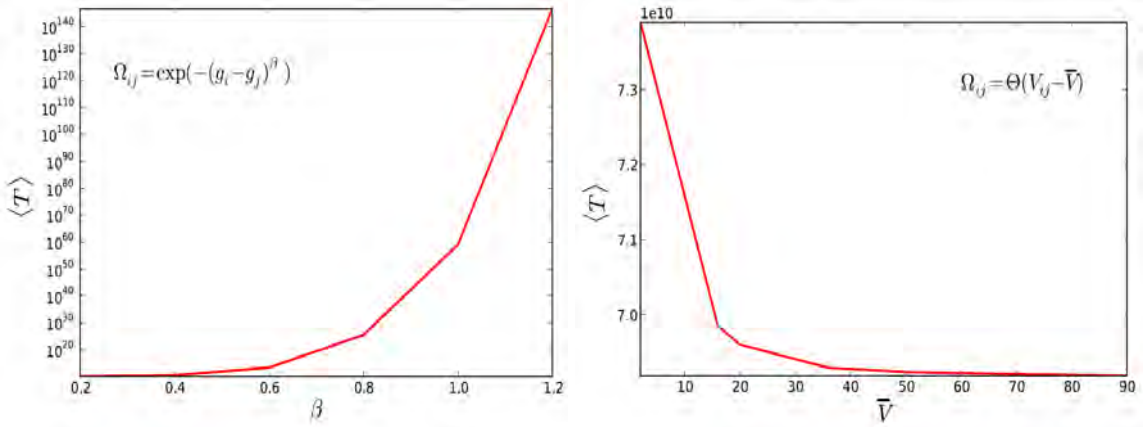
Hasta el momento se ha analizado la dinámica de cada caminante aleatorio con la distribución estacionaria dada por la ecuación 1.12. Por otra lado, el tiempo de primer retorno de un caminante aleatorio está expresado en la ecuación (2.2). Esta cantidad expresa el número de pasos promedio en los que el caminante aleatorio retorna a su posición de inicio partiendo del nodo i. Un promedio general de esta cantidad para los N nodos de la imagen da una cantidad global que ayuda a comprender la manera en que operan los caminantes aleatorios en imágenes. La cantidad $\langle T \rangle$ se define como el tiempo de primer retorno global, calculado para cada caminante aleatorio que se mueve en una imagen. De esta manera, $\langle T \rangle$ se calcula como:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle T_{ii} \rangle \tag{2.8}$$

La Figura 2.9(a) muestra el tiempo de primer retorno global $\langle T \rangle$ dado por la ecuación (2.8), en función del parámetro β para un caminante aleatorio guiado por la expresión (2.3). Esta gráfica indica que el tiempo de primer retorno promedio, aumenta en varios órdenes de magnitud a medida que el parámetro β aumenta. Esto quiere decir que el caminante aleatorio queda atrapado dentro de regiones en la imagen a medida que el parámetro β crece, puesto que le toma mucho tiempo retornar a su posición inicial. Esto se debe a que no puede cruzar por los bordes de los objetos en una imagen, los cuales, para este caso se empiezan a marcar cuando $\beta = 0.8$. Cabe recordar que, para observar gráficamente el efecto de los caminantes aleatorios es preciso utilizar la distribución estacionaria definida en el contexto de imágenes digitales, tal como se hizo durante el desarrollo de éste capítulo.

De igual manera, La Figura 2.9(b) muestra el tiempo de primer retorno global para un caminante aleatorio definido por una navegación por diferencia de intensidades de la forma (2.5). Para este caso la gráfica de la distribución estacionaria de un caminante aleatorio en una imagen presentada en la Figura 2.4, muestra que los bordes de los objetos de la imagen son menos evidentes a medida que el umbral $\overline{V}$ tiene mayor valor. De este modo, la gráfica del tiempo de primer retorno global en función del parámetro muestra que el caminante aleatorio tiene más libertad de movimiento a medida que las fronteras en la imagen empiezan a desaparecer, en este caso cuando $\overline{V} = 36$.

Figura 2.9: Tiempo de primer retorno promedio $\langle T \rangle$ calculado para caminantes aleatorios definidos por: (a) los elementos de matriz de pesos dados por la navegación exponencial (2.3), (b) el caminante aleatorio está guiado por los elementos definidos en la navegación por diferencia de intensidades (2.5). Se utiliza $V_{ij} = |g_i - g_j|$ y $\Theta(x \geq 0) = 1$, $\Theta(x < 0) = 0$. Fuente: Esta investigación.



(a) (b)

2.5. Resultados

En este capítulo se introdujo un método que permite estudiar imágenes digitales aplicando los conceptos de distribución estacionaria y tiempo medio de primer retorno de un caminante aleatorio en redes, expuestos en el capítulo 1. Así, una imagen es representada como una red con pesos en donde los nodos describen a los píxeles de la imagen y las líneas tienen un valor que mide la diferencia o similitud entre pixeles. En esta estructura se definen caminantes aleatorios con probabilidades de transición expresadas en términos de información local o no local contenida en las líneas. Se estudiaron diferentes tipos de estrategias que definen el movimiento en la imagen para las cuales se obtienen analíticamente la distribución estacionaria y el tiempo medio de primer retorno del caminante aleatorio resultante. Esto permitió ver que la distribución estacionaria posibilita, para algunas estrategias, identificar fronteras y bordes de objetos de una imagen en términos de probabilidad del caminante aleatorio; mientras que, el tiempo de primer retorno resulta una ayuda a la hora de interpretar los resultados numéricos. Los caminantes aleatorios propuestos en este capítulo son conocidos en el análisis de imágenes, aunque en los artículos que se mencionan no se explica el porqué de su elección en particular, siendo el método propuesto en este capítulo una herramienta que da una razón clara de por qué estas navegaciones en particular son especialmente buenas para segmentar imágenes.

Con base en los resultados numéricos es posible concluir además, que con simplemente proponer de manera heurística un nuevo caminante aleatorio no se tiene intuición sobre su comportamiento en la imagen aunque pueda aparentemente ser evidente lo que hace el caminante aleatorio. Sin embargo, la propuesta de éste capítulo permite ver claramente las consecuencias de los pesos propuestos en cada imagen en particular lo que comprueba la utilidad de la teoría general implementada en este capítulo. Esto permite ver que la navegación preferencial no parece ser adecuada para modelos de segmentación de imágenes ni para detección de comunidades en las mismas. Por el contrario, las navegaciones: exponencial, por diferencia de intensidades y la navegación por comunidades definida en entornos globales; expuestas en este capítulo, son más eficientes a la hora de encontrar bordes de objetos y estructuras en imágenes.

De esta manera, se deduce un método que permite, en forma rápida y concreta, caracterizar el efecto de matrices de pesos introducidas en el contexto de la segmentación de imágenes mediante la difusión de caminatas aleatorias en imágenes con condiciones de contorno en el capítulo 3 y la segmentación de imágenes por comunidades mediante el modelo de Potts de física estadística en el capítulo 4.

Capítulo 3

Difusión en imágenes digitales

En este capítulo se estudia la segmentación de imágenes mediante la difusión de caminantes aleatorios en imágenes con condiciones de contorno establecidas. Se inicia con los conceptos que explican el proceso de segmentación de imágenes, se estudia el problema de Dirichelt y su solución en sistemas discretos y finitos. Finalmente, se expone la implementación de la teoría mencionada en el contexto de segmentación de imágenes digitales y se resalta la importancia que tiene la distribución estacionaria en este proceso.

3.1. Introducción

Hasta el momento se ha estudiado la dinámica de los caminantes aleatorios en imágenes y su comportamiento en el equilibrio sin condiciones de frontera. De esta manera, surge un nuevo interrogante que plantea el escenario que permite al caminante aleatorio moverse en una imagen con condiciones de frontera establecidas. De este interrogante surge un proceso conocido como segmentación de imágenes y tiene como propósito localizar un contenido particular en una imagen [5, 19, 20]. Diversas técnicas y métodos matemáticos han sido propuestos con el fin de lograr dicha tarea, en estos se incluyen campos Gaussianos y funciones armónicas [29], normalización de cortes [19], caminantes aleatorios deterministas para el análisis de texturas [30], métodos que involucran medidas de la teoría de la información en redes [31], entre otros. La tarea de segmentar imágenes trasciende en sus aplicaciones en campos como medicina [23], en tecnología para problemas como la detección de rostros [22], la visión artificial [21], el análisis de imágenes satelitales [31] entre otras [32].

Así pues, en este capítulo se estudia el tratamiento estadístico de la difusión de los caminantes aleatorios en imágenes con condiciones de frontera. De ese modo, el proceso de segmentación de imágenes es una solución particular al problema de la difusión estacionaria dada por la ecuación de Laplace [33] en medios discretos. Se muestra además, la relevancia de la distribución estacionaria de un caminante aleatorio descrita en el contexto de imágenes en el capítulo 2 para

éste proceso. El capítulo se organiza de la siguiente manera: la sección 3.2 introduce las ideas y conceptos de la segmentación de imágenes, el algoritmo de caminatas aleatorias para este fin y como se relaciona con el problema de Dirichelt. La sección 3.3 soluciona el problema de Dirichelt para sistemas discretos y finitos, para luego en la sección 3.5 implementar numéricamente el algoritmo de segmentación de imágenes mediante el algoritmo de caminatas aleatorias y relacionar los resultados con los obtenidos en el capítulo 2. La sección 3.6 estudia una nueva forma de navegación para caminantes aleatorios con la distribución estacionaria analizada en el capítulo 2 y mide su efecto en la segmentación de imágenes. Finalmente la sección 3.7 presenta las conclusiones de este capítulo.

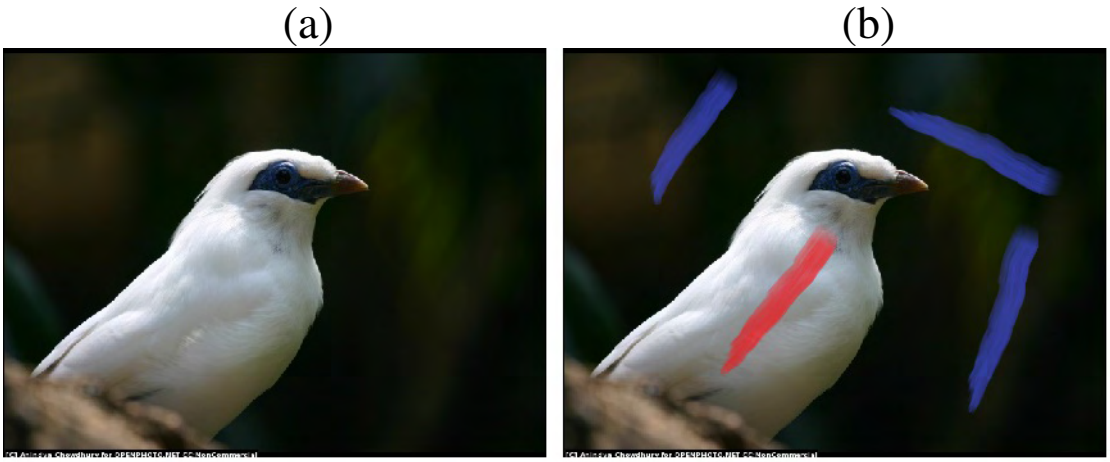
3.2. Segmentación de imágenes mediante caminantes aleatorios

La segmentación de imágenes se refiere al proceso de partición de una imagen digital en múltiples objetos en función de ciertas características visuales. Esta tarea se utiliza típicamente para localizar objetos y sus bordes en una imagen [20]. Esto con el fin de simplificar o cambiar la representación de una imagen en otra más significativa y más fácil de analizar [5, 19, 20].

Para empezar, tal como en el capítulo 2, una imagen digital se representa como una red cuadrada con pesos. De esta manera, la imagen es una red de N nodos $i = 1, ..., N$, donde cada nodo representa un pixel de la imagen. La matriz de pesos $\mathbf{\Omega}$ da información sobre el cambio de la intensidad de la imagen; así, Ω_{ij} se interpreta como una medida de la diferencia o similitud de los pixeles i y j.

El modelo de difusión de caminantes aleatorios para la segmentación de imágenes fue propuesto en [33]. Este modelo parte de la identificación inicial por parte del usuario de objetos dentro de la imagen mediante marcas en la misma. Es decir, pixeles dentro de la imagen que representan un objeto de interés son marcados mediante la asignación de una etiqueta s, donde $s \in \mathbb{Z}$, tal como se presenta en la Figura 3.1. Estos pixeles marcados se conocen como pixeles semilla. En total habrán K etiquetas o también llamadas fases, donde $K \in \mathbb{Z}$, $0 < s \leq K$. Ahora, una vez marcadas las fases en la imagen, se busca encontrar cual es la probabilidad de que un caminante aleatorio que empiece en un pixel semilla, alcance cualquier pixel que no esté marcado. La solución se puede lograr sin hacer exactamente la simulación del caminante aleatorio. De esta manera, aunque el algoritmo está motivado en por el proceso de caminatas aleatorias en una

Figura 3.1: (a) Imagen original. (b) Marcas de pixeles semilla representadas por las líneas azules y rojas indicando un objeto en la imagen. Los pixeles azules son una fase, mientras que los pixeles rojos otra. En este caso $K = 2$. Fuente: Esta investigación.



imagen, un muestreo adecuado de ésta distribución de probabilidades no muestra información significativa para los problemas de segmentación de interés. Por otra parte, se ha establecido que encontrar la probabilidad de un caminante aleatorio que empiece en un pixel semilla alcanze un pixel no marcado, es exactamente igual a la solución de la difusión estacionaria de las fases marcadas en la imagen. De esta manera la solución al problema de la difusión estacionaria de las fases marcadas en la imágen, se logra al resolver el problema de Dirichlet con condiciones de contorno en las ubicaciones de los pixeles semilla [5, 24, 33, 34, 35].

Así, la tarea de segmentar imágenes mediante caminatas aleatorias está relacionada con un proceso de difusión de la siguiente manera: al fijar los pixeles semilla en principio se está etiquetando a los pixeles con la fase que tiene la mayor probabilidad de difundir en primera instancia el caminante aleatorio hacia los demás pixeles. Esta interpretación surge de igual manera en muchos otros problemas tales como la ecuación de calor, en donde fijadas las condiciones de contorno en un dominio, la temperatura fluye de fuentes puntuales hasta alcanzar un estado estacionario en el que el valor de la temperatura en cada punto del dominio no cambia más. La distribución de la temperatura en un entorno, así como la distribución de probabilidades de que una fase alcance un pixel cualquiera por difusión, será entonces la solución correspondiente al problema de Dirichlet [36, 37]. Por otra parte, el equivalente eléctrico del problema de Dirichlet para caminantes aleatorios en un grafo, es la distribución de los potenciales eléctricos en los nodos de un circuito eléctrico con resistencias que representan la inversa de los pesos y las condiciones de contorno dadas por fuentes de tensión, que fijan el potencial eléctrico en los nodos semilla en 0 y 1 [33, 34].

3.2.1. La integral de Dirichlet

Una vez introducida la forma en que se aborda el problema de segmentación de imágenes se introduce la integral de Dirichlet. En matemáticas, el problema de Dirichlet consiste en hallar una función que es la solución de una ecuación en derivadas parciales en el interior de un dominio de $\mathbb{R}^n$. Esta función necesariamente toma los valores establecidos sobre el contorno de dicho dominio [36]. El problema de Dirichlet puede resolverse para muchas ecuaciones diferenciales parciales, aunque originalmente fue planteado para la ecuación de Laplace [37]. La formulación variacional del problema de Dirichlet se expresa a través de la integral de Dirichlet definida como [38]:

$$D[u] = \frac{1}{2}\int_{\sigma} |\nabla u|^2 d\sigma, \tag{3.1}$$

para una función u diferenciable en la región σ, que toma los valores establecidos $u = f$ en el contorno $\partial\sigma$ tangente a σ. Esta integral aparece en muchos problemas físicos incluyendo transferencia de calor, potenciales electrostáticos para regiones desprovistas de carga y caminantes aleatorios, entre otros [36, 37, 38]. Por otra parte, se define una función armónica como aquella que satisface la ecuación de Laplace [36, 38]:

$$\nabla^2 u = 0, \tag{3.2}$$

donde u es una función escalar. La ecuación (3.2) es una ecuación diferencial de segundo orden de n términos donde $\nabla^2 f(x_1, ..., x_n) = \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial^2 f}{\partial x_k^2}$. Así, si la función armónica u satisface las condiciones de frontera $u = f$ en el contorno de σ, minimiza entonces la integral de Dirichelt dada por la ecuación (3.1). El problema de encontrar una función armónica sujeta a las condiciones de frontera es el llamado el *problema de Dirichelt*.

3.3. Problema de Dirichlet para sistemas discretos finitos

En esta sección se establece el equivalente de la ecuación de Laplace dada por la expresión (3.2) y la integral de Dirichelt expresada en (3.1), para sistemas discretos finitos. De tal manera que si se encuentra una función armónica u utilizando ecuaciones matriciales, se encontrarán las probabilidades de que un caminante aleatorio empezando en un pixel semilla alcance un pixel cualquiera, mediante el proceso de difusión estacionaria en grafos con pesos.

La función armónica que satisface las condiciones de contorno y minimiza la integral de Dirichlet se deduce a partir de las ecuaciones de Euler-Lagrange [5, 38]. Así pues, para establecer un

equivalente en redes de la ecuación de difusión (3.2) es preciso representar en forma matricial el operador Laplaciano en grafos con pesos. El operador Laplaciano $\mathbf{L}$ se define como [39]:

$$L_{ij} = \begin{cases} S_i & \text{si } i = j, \\ -\Omega_{ij} & \text{si } i \text{ y } j \text{ son nodos adyacentes,} \\ 0 & \text{en otros casos.} \end{cases} \tag{3.3}$$

S_i es la intensidad del nodo i y está dada por la ecuación (2.1), $S_i = \sum_{j \in N} \Omega_{ij}$. La matriz Laplaciana que representa la ecuación de Laplace es una matriz cuadrada de $N \times N$ elementos.

Con el fin de establecer la ecuación de Laplace en forma matricial se introduce la matriz de incidencia $\mathbf{\Gamma}$ [33]:

$$\Gamma_{e_{ij} v_k} = \begin{cases} +1 & \text{si } i = k, \\ -1 & \text{si } j = k, \\ 0 & \text{en otros casos.} \end{cases}$$

Esta matriz es definida para cada línea e_{ij} y cada nodo v_k. Es así que la dimensión de esta matriz es $m \times n$, donde m es el número de líneas de la imagen y n el número de nodos. La matriz $\mathbf{\Gamma}$ puede ser interpretada como un operador gradiente y $\mathbf{\Gamma}^T$ como una divergencia [33, 34]. En consecuencia el operador Laplaciano para grafos simples es dado por $\mathbf{L} = \mathbf{\Gamma}^T \mathbf{\Gamma}$. En grafos con pesos el operador Lapaciano involucra una matriz llamada constitutiva $\mathbf{C}$ [33], cuyos elementos son los pesos de las líneas Ω_{ij}. La matriz $\mathbf{C}$ es una matriz diagonal de dimensiones $m \times m$, donde m es el número total de líneas de la imagen. En consecuencia, la multiplicación de matrices $\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{C} \mathbf{\Gamma}$ resulta una nueva matriz de dimensiones $n \times n$, donde n es el número total de nodos de la red. Esta es la matriz Laplaciana en grafos con pesos $\mathbf{L} = \mathbf{\Gamma}^T \mathbf{C} \mathbf{\Gamma}$.

Hasta el momento se ha establecido la ecuación de difusión que describe el comportamiento estadístico de los caminantes aleatorios en redes con pesos. El siguiente paso es encontrar una función armónica que satisface la ecuación de Laplace en grafos $\mathbf{Lx} = \mathbf{0}$ y que minimiza la integral de Dirichelt. La integral de Dirichelt para estructuras discretas y finitas es dada por [33]:

$$D[\mathbf{x}] = \frac{1}{2}(\mathbf{\Gamma x})^T \mathbf{C \Gamma x} \; = \; \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{\Gamma}^T \mathbf{C \Gamma x} \; = \; \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{L x}, \tag{3.4}$$

$\mathbf{x}$ representa todo el conjunto de nodos en el grafo. Un vector $\mathbf{x}$, cuyos elementos son funciones armónicas es tal que minimiza la ecuación (3.4) y toma los valores establecidos en las fronteras $\mathbf{x} = \mathbf{f}$. De esta manera esta sección introdujo la definición del problema de Dirichelt para

sistemas discretos en general. En la siguiente sección se detalla la solución de este problema para el caso particular de la difusión estacionaria de fases en imágenes digitales.

3.4. Problema de Dirichelt en imágenes digitales

Hasta el momento se ha definido el problema variacional de Dirichelt en sistemas discretos en general. En esta sección se presenta una aplicación particular de este método en la solución de la difusión de las fases marcadas en imágenes digitales. De esta manera, los valores prescritos de la función x en la frontera son los que se definen el los pixeles semilla. Así, para separar los nodos marcados de los no marcados, el conjunto total de nodos V se parte en: V_M, que representa el conjunto de nodos marcados o pixeles semilla y V_U como el conjunto de nodos no marcados. $V_M \cup V_U = V$, $V_M \cap V_U = \varnothing$. El conjunto V_M contiene los nodos semilla sin importar su etiqueta. Continuando, es posible asumir sin perder la generalidad, que los nodos en **L** están ordenados de tal manera que los nodos marcados están primero y luego los nodos no marcados [33]. En consecuencia, ordenando la expresión (3.4):

$$\begin{aligned} D[x_U] &= \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix} x_M^T & x_U^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_M & B \\ B^T & L_U \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_M \\ x_U \end{bmatrix} \\ &= \tfrac{1}{2}(x_M^T L_x x_M + 2x_U^T B^T x_M + x_U^T L_U x_U), \end{aligned}$$

donde x_M y x_U son los vectores asociados a los pixeles marcados y no marcados respectivamente. Puesto que la matriz **L** es positivamente definida, solo los puntos críticos de $D[x_U]$ serán mínimos [33]. Diferenciando $D[x_U]$ con respecto a x_U y encontrando los puntos críticos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(0 + 2B^T x_M + 2L_U x_U) &= 0 \\ B^T x_M + L_U x_U &= 0 \end{aligned}$$

y finalmente [5]:

$$L_U x_U = -B^T x_M. \tag{3.5}$$

Este es un sistema de ecuaciones lineales con $|V_U|$ incógnitas. De esta manera, al solucionar la ecuación (3.5) para cada pixel no marcado en la imagen en principio se resuelve el problema de Dirichelt con condiciones de contorno dadas por x_M y por tanto se soluciona la ecuación de difusión en un estado estacionario de las fases marcadas por los pixeles semilla. La interpretación probabilistica en términos de caminantes aleatorios del proceso de difusión de fases ubicadas en los pixeles semilla, está dada precisamente por la probabilidad x_u que tiene un caminante

aleatorio de alcanzar cualquier pixel de la imagen si parte en los pixeles semilla.

El vector x_M contiene el conjunto de pixeles marcados como semillas sin importar el valor s de las mismas. En consecuencia, la probabilidad de que un caminante aleatorio presente en un pixel i alcance la fase s se define como x_i^s. Definiendo el conjunto de etiquetas para cada pixel semilla como una función $Q(v_j) = s, \forall v_j \in V_M$ donde $s \in \mathbb{Z}$ y $0 < s \leq K$. K es el número total de etiquetas definidas en la imagen. El vector m_j^s contiene la información de los pixeles marcados para cada fase s de la siguiente manera:

$$m_j^s = \begin{cases} 1 & \text{si } Q(v_j) = s, \\ 0 & \text{si } Q(v_j) \neq s. \end{cases} \tag{3.6}$$

Así pues, para la etiqueta s, la solución al problema de Dirichelt se encuentra al resolver:

$$L_U x^s = -B^T m^s. \tag{3.7}$$

Para todas las etiquetas la expresión (3.7) se puede simplificar como:

$$\mathbf{L_U X} = -\mathbf{B}^T \mathbf{M}, \tag{3.8}$$

donde $\mathbf{X}$ es un vector de K columnas que contiene la difusión de cada etiqueta dada por x^s y $\mathbf{M}$ tiene K columnas dadas por m^s.

De esta manera en esta sección se presenta la solución general al problema de la difusión de caminatas aleatorias en imágenes digitales. En la siguiente sección se introduce la manera en que se logra la segmentación final de la imagen al resolver K sistemas de ecuaciones de la forma (3.5).

3.5. Difusión de caminantes aleatorios para la segmentación de imágenes

En esta sección se implementa la teoría general expuesta hasta el momento con el fin de segmentar objetos en una imagen. Como se ha mencionado, la tarea de segmentación se logra al encontrar la probabilidad que tiene cada fase marcada en la imagen de difundir al caminante aleatorio a todos los pixeles de la imagen. En otras palabras, esto es resolver la ecuación (3.8). Para implementar numéricamente, la segmentación de imágenes mediante la solución de la ecuación (3.8) es necesario en primera instancia definir caminantes aleatorios en imágenes

mediante la expresión $w_{i\to j} = \frac{\Omega_{ij}}{S_i}$, donde Ω_{ij} define los elementos de la matriz de pesos y S_i es definida como $\sum_{l=1}^{N} \Omega_{il}$. Los pesos Ω_{ij} dan toda la información de la imagen al caminante aleatorio. Diferentes estrategias definidas a partir de la matriz de pesos se analizaron en el capítulo 2 en las que, para observar el comportamiento una definición particular de Ω_{ij} en una imagen, es conveniente utilizar la distribución estacionaria P_i^{∞}. De esta manera, al aplicar el algoritmo propuesto en el capítulo 2 se obtiene de manera rápida la mejor definición de Ω_{ij} para una imagen en particular. Para estudiar la mejor definición de Ω_{ij} es preciso definir antes los siguientes pasos en la aplicación del algoritmo de segmentación de imágenes.

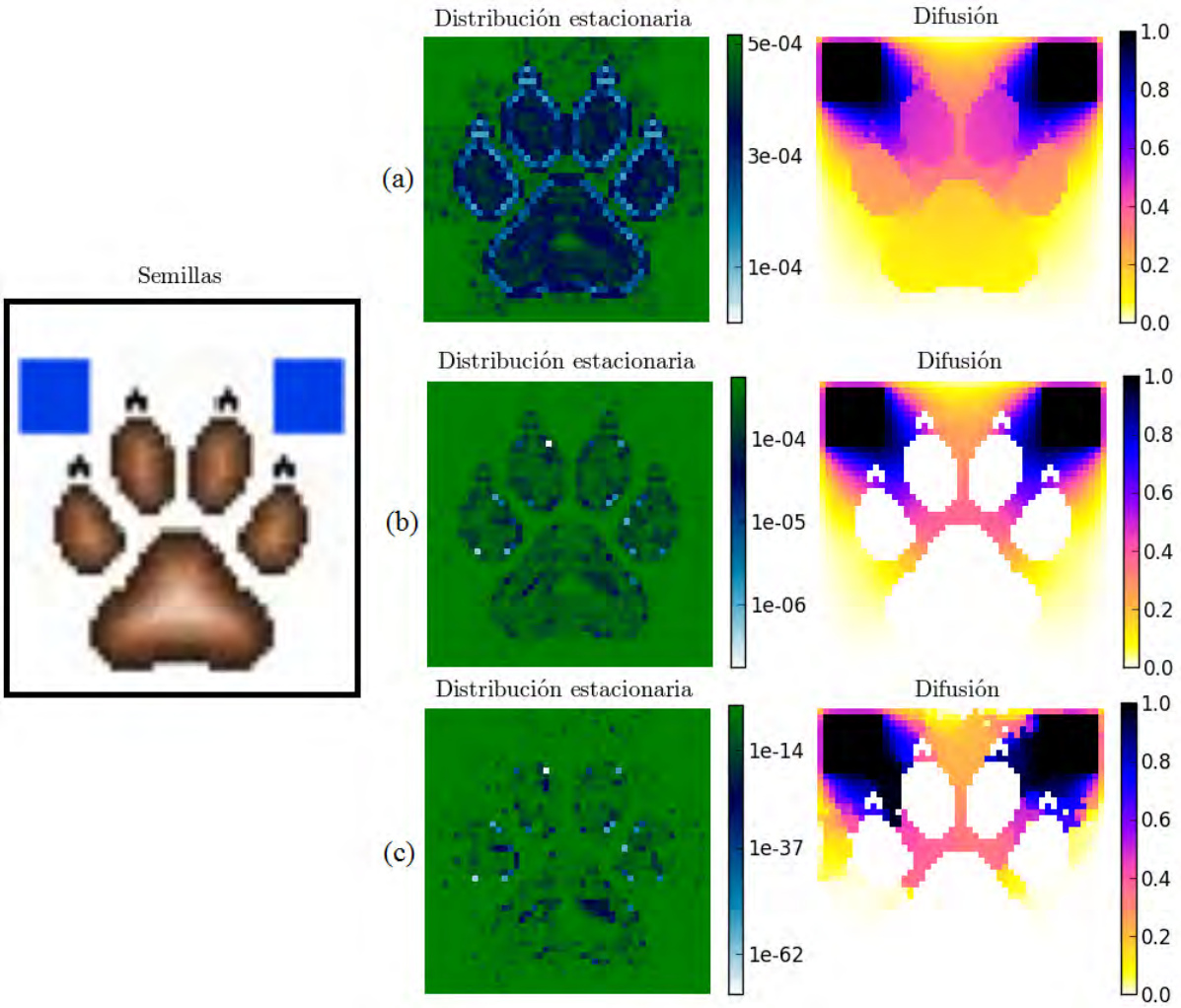
Una vez definida la forma adecuada de navegación para el caminante aleatorio mediante el algoritmo de caminantes aleatorios en imágenes propuesto en el capítulo 2, se define el conjunto V_M de pixeles marcados como semilla. Este conjunto contiene K semillas diferentes, donde $K \in \mathbb{Z}$. Cada semilla tiene valor s, donde $s \in \mathbb{Z}$. Una vez determinados estos aspectos, es posible definir el operador Laplaciano $\mathbf{L}$, para finalmente resolver el sistema de ecuaciones dado por la expresión (3.8). Cabe resaltar que, un algoritmo eficiente en este proceso debe tener en cuenta los siguientes aspectos: primero, definir el Laplaciano $\mathbf{L}$; puesto que éste contiene $N \times N$ elementos en función de la ecuación (3.3), donde N es el número total de pixeles de la imagen de dimensiones $L_x \times L_y = N$. Segundo, resolver un sistema de $N \times N$ ecuaciones K veces de manera independiente, donde K es el número de etiquetas definidas en la imagen. Así por ejemplo, para una imagen VGA de dimensiones estándar 640×480, el Laplaciano tendría un número aproximado de 9×10^{10} elementos y por ende el mismo número de ecuaciones en el caso de una sola etiqueta. Por tal razón, al resolver este sistema de ecuaciones de manera exacta con el método de factorización LU [40] por ejemplo, ocuparía una memoria RAM que excedería las capacidades de un computador con 8 Gigabytes. Afortunadamente, la mayoría de elementos de la matriz $\mathbf{L}$ son cero lo que permite definir dicha matriz como una matriz dispersa [40] y utilizar técnicas especiales propuestas para este propósito tales como métodos iterativos o de convergencia [40, 41].

Retomando, una adecuada definición de la función peso Ω_{ij} permite al caminante aleatorio observar los contornos de objetos en la imagen pero con la posibilidad de moverse entre ellos. Los contornos de los objetos de una imagen, para un caminante aleatorio se miden en función de probabilidades. Es decir, el caminante aleatorio va a experimentar barreras o probabilidades de transición w_{ij} muy bajas en los bordes de un objeto dentro de la imagen. Estas probabilidades de transición le van a impedir al caminante aleatorio salir o entrar en cierta medida, a regiones

especificas en la imagen. Tal como se detallo en el capítulo 2, la localización de estas barreras en la imagen se observan mediante la distribución estacionaria definida en la expresión (1.12).

La Figura 3.2 presenta tres definiciones de caminantes aleatorios en imágenes, las cuales se analizan con la distribución estacionaria. La gráfica muestra además el efecto de cada una de estas definiciones en la difusión de las semillas. Para el caso de la Figura 3.2(a), las fronteras de los objetos de la imagen no se definen con claridad en función de la probabilidad; en otras

Figura 3.2: Efecto de diferentes funciones peso $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-\gamma\|g_i - g_j\|^{\beta})$ para la difusión de las semillas en una imagen. La forma en que cada caminante aleatorio se mueve en la imagen se analiza mediante la distribución estacionaria definida en la expresión (1.12). La gráfica muestra además, la manera en que ocurre la difusión de semillas para cada función peso Ω_{ij}. Las semillas son marcadas con los cuadros azules en la imagen. Las barras de color en la difusión muestran la probabilidad en cada punto que tiene un caminante aleatorio de alcanzar un pixel cualquiera de la imagen partiendo de los pixeles semilla. Se utilizan los parámetros (a) $\gamma = 10^{-2}$, $\beta = 1$. (b) $\gamma = 10^{-3}$, $\beta = 1$. (c) $\gamma = 0.2$, $\beta = 1.5$. Fuente: Esta investigación.



palabras, se observa mediante la distribución estacionaria que la probabilidad del caminante aleatorio de estar o no en un borde es del mismo orden de magnitud. A diferencia, en la Figura 3.2(b) la probabilidad dada por la distribución estacionaria, de que el caminante aleatorio esté en las fronteras o en una estructura de la imagen difiere en dos órdenes de magnitud. Esto se traduce en que la difusión de las fases marcadas se propaga por ciertas regiones de la imagen, evitando otras. Finalmente en el caso de la Figura 3.2(c), el caminante aleatorio encuentra un medio que en principio es totalmente inhomogéneo y el resultado de la difusión de semillas contiene singularidades en varios puntos de la imagen lo que es inapropiado para el algoritmo de segmentación de imágenes mediante caminatas aleatorias.

En resumen, el algoritmo de segmentación de imágenes por difusión de caminantes aleatorios con condiciones de frontera, se puede expresar en los siguientes pasos:

- Se propone una función peso que hace un mapa de la imagen el cual se puede analizar por medio de la distribución estacionaria de un caminante aleatorio dada por la expresión (1.12).

- Una vez definida la función peso que guía al caminante aleatorio, se obtiene el conjunto V_M de pixeles marcados con K etiquetas, en la imagen a segmentar. Esto con el propósito de localizar objetos de interés en la misma, tal como el la Figura 3.1. De este modo es posible construir la matriz Laplaciana $\mathbf{L}$ en función de los pixeles marcados y no marcados.

- Se resuelve numéricamente la ecuación (3.8) para cada etiqueta. En este paso es conveniente utilizar métodos de matrices dispersas y métodos que agilicen la solución de sistemas de ecuaciones matriciales [40].

- Finalmente, a partir de los resultados de la ecuación (3.8) la segmentación final se logra mediante la asignación a cada nodo v_i de la imagen, la etiqueta correspondiente al máximo valor de x_i^s. Así, al graficar cada etiqueta para la cual se obtiene la máxima probabilidad x^s se obtiene la segmentación de la imagen en función del número K de etiquetas.

En la Figura 3.3 se muestra todos los pasos de este proceso en una tomografía axial computarizada, desde de la adecuada definición de la función Ω_{ij} mediante la distribución estacionaria, la adquisición la semillas para el cálculo de las probabilidades y la segmentación resultante al graficar la etiqueta para la cual se obtiene la maxima probabilidad x^s. La Figura 3.4 muestra el resultado de la segmentación de la misma tomografía con tres etiquetas.

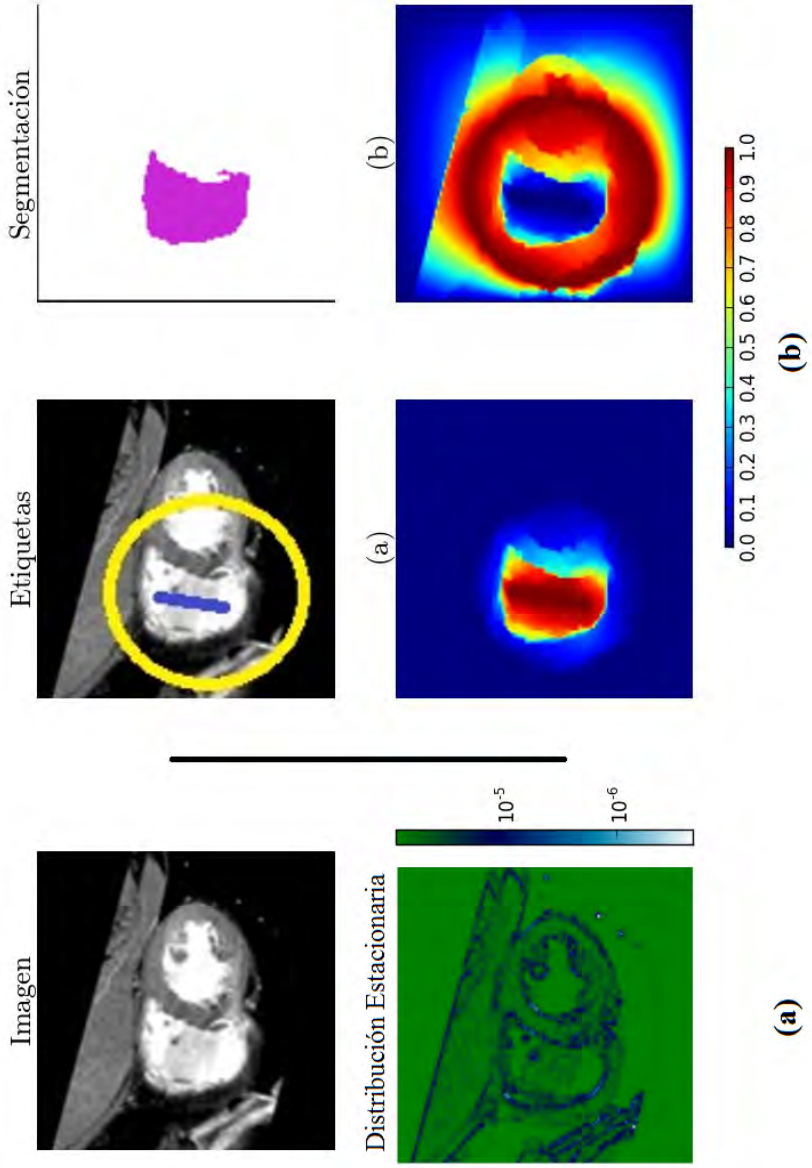


Figura 3.3: Paso a paso de la segmentación de una tomografía axial computarizada con dos semillas. La gráfica (a) muestra la imagen a ser segmentada y la distribución estacionaria para una función peso $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-10^{-2}\|g_i - g_j\|^{1.3})$. En la gráfica (b): en primera instancia, se marca el fondo de la imagen y un objeto dentro de la misma mediante los pixeles semilla. En este caso hay $K = 2$ etiquetas identificadas con los colores azul y amarillo. Se presenta el resultado final de la segmentación. Los cuadros (a) y (b) de la columna (b) muestran la probabilidad de alcanzar la etiqueta azul y amarilla respectivamente. Fuente: Esta investigación.

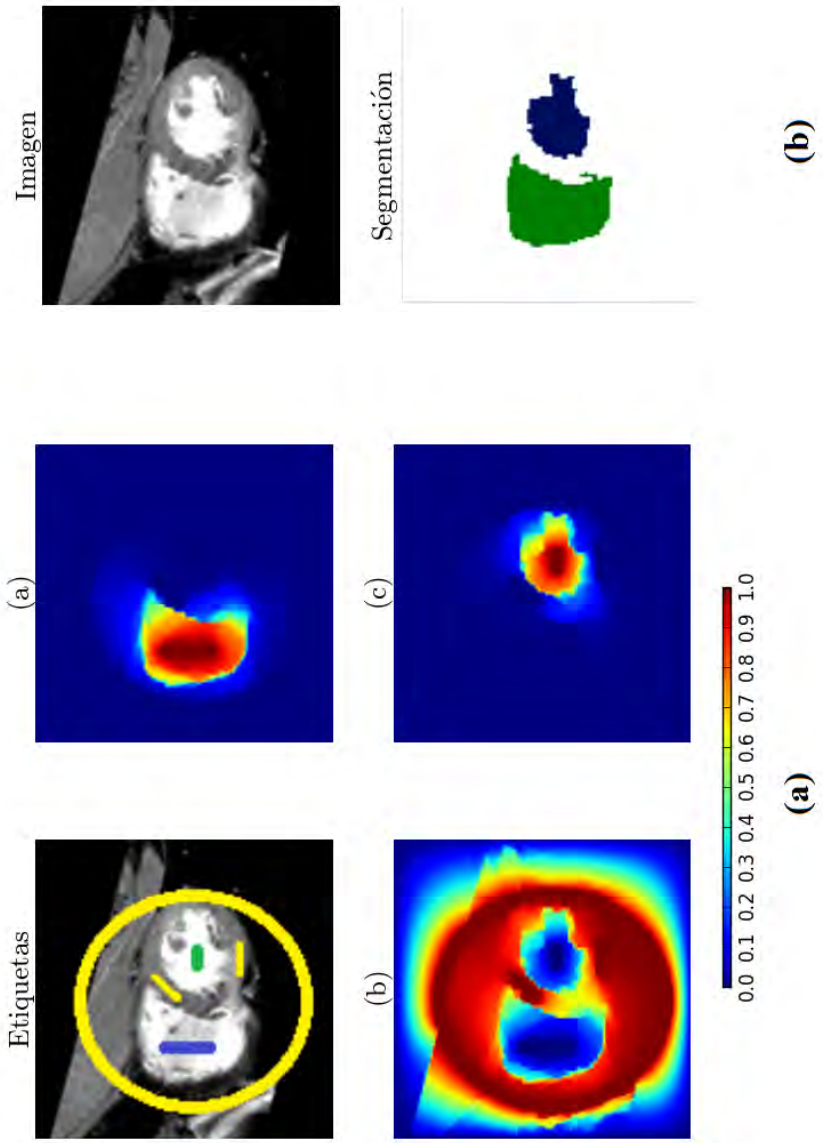


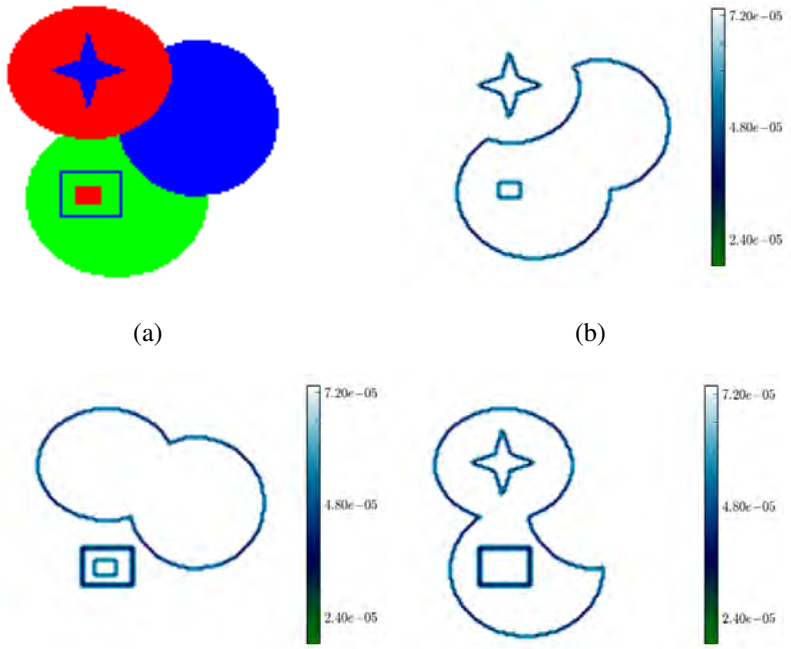
Figura 3.4: Segmentación de una tomografía axial computarizada con tres etiquetas. La gráfica (a) muestra la imagen con tres etiquetas indicando los objetos a segmentar y la solución de la difusión de cada fase marcada, dada por la expresión (3.8). Recordando, la solución de la ecuación de difusión estacionaria se interpreta como la probabilidad de que un caminante aleatorio empezando en los pixeles semilla alcance cualquier punto de la imagen. Los caminantes aleatorios están guiados por la función peso $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-10^{-2}\|g_i - g_j\|^{1.3})$. La gráfica (b) muestra la imagen original y el resultado de la segmentación según el proceso expuesto en la sección 3.5. Fuente: Esta investigación.

3.6. Navegación por componentes

Hasta el momento se ha estudiado un método de segmentación de imágenes que se pude implementar para todas las definiciones de caminatas aleatorias analizadas en el capítulo 2. En esta sección se introduce una nueva definición para la función peso Ω_{ij}. La función peso hace un mapa de la imagen con la información presente en cada canal de ésta. Sin embargo en imágenes a color, es posible hacer filtros de canales de las mismas. Es decir, favorecer un canal o ciertos canales específicos de la imagen, esto con el fin de lograr definir y eliminar ruido sistemático en la imagen. De este modo, para imágenes en el modelo de color RGB, en este capítulo se propone una forma de navegación exponencial que tenga en cuenta solo un canal de la imagen. En otras palabras, el caminante aleatorio es capaz de moverse solo con información presente en un solo canal. Por ejemplo, si se mueve por el canal rojo, el vector g_i del pixel i solo tendrá la componente $(x, 0, 0)$ donde x es la intensidad de color rojo correspondiente. Con el fin de observar el efecto que tiene en la imagen un caminante aleatorio guiado por los elementos Ω_{ij} que tienen en cuenta solo la información de un canal de la imagen, es preciso hacer uso de la distribución estacionaria del caminante aleatorio analizada en el contexto de imágenes digitales en el capítulo 2.

La Figura 3.5 muestra la distribución estacionaria para caminantes aleatorios que se mueven con solo la información de ciertos canales de la imagen. La imagen original es construida solo con colores rojo, verde y azul, con el fin de detallar de manera clara el efecto de cada navegación en particular. La imagen contiene además un fondo blanco, el cual se forma al combinar los colores rojo, verde y azul, a su máxima intensidad. En el caso de la Figura 3.5(b), la función peso se define únicamente para la componente R del vector g_i. En este caso, se resaltan los bordes entre las estructuras que limitan con objetos rojos o blancos. No se definen las fronteras entre los objetos rojos y blancos, puesto que el color blanco está compuesto por los colores rojo, verde y azul en su máxima intensidad. En la Figura 3.5(c), la función peso se define solo para la componente G del vector g_i. Para esta definición se definen los bordes de los objetos que limitan con estructuras verdes y blancas. Tal como en el caso anterior, los objetos verdes que limitan con el fondo blanco no se definen. La Figura 3.5(d) muestra finalmente la distribución estacionaria de un caminante guiado por los elementos Ω_{ij} definida solo para la componente B del vector g_i, donde siguiendo la misma lógica, se resaltan los bordes que existen entre estructuras que limitan con objetos azules o blancos. De esta manera, el proceso de segmentación de estructuras dentro de esta imagen resulta más sencillo con la adecuada definición de la componente del vector g_i.

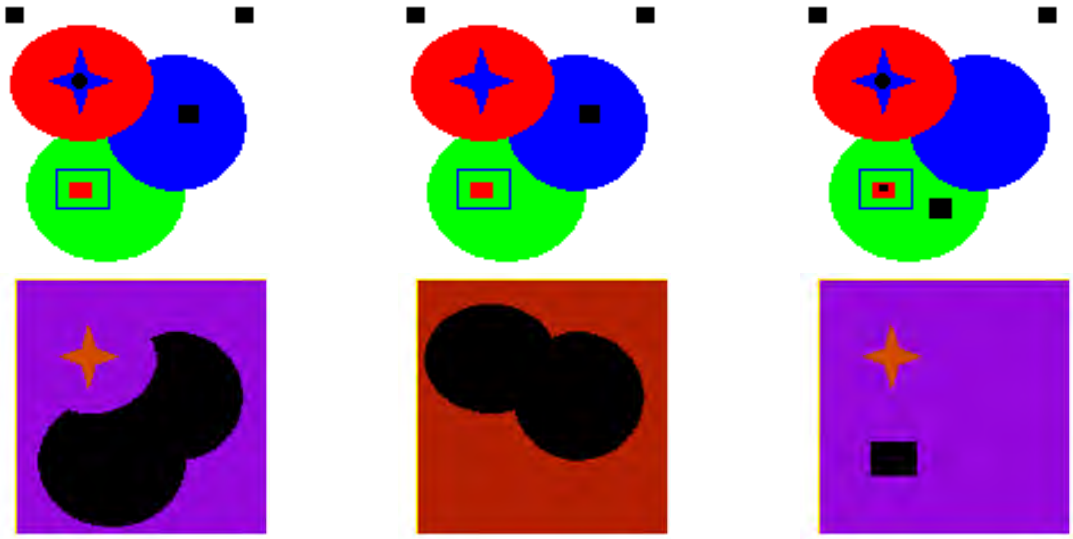
Figura 3.5: Distribución estacionaria para caminantes aleatorios guiados por los pesos $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-\beta(g_i - g_j)^\gamma)$, con $\beta = 15 \times 10^{-4}$ y $\gamma = 1.3$. (a) Imagen original construida con solo colores rojo, verde, azul y blanco. (b) El vector g_i solo contiene la información del canal R. (c) El vector g_i contiene solo información del canal G. (d) g_i da información únicamente del canal B. Fuente: Esta investigación.



(a) (b)

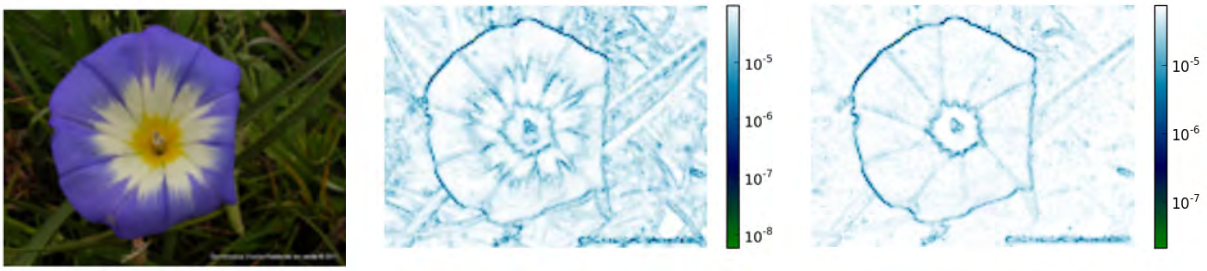
(c) (d)

Figura 3.6: Segmentación de imágenes por componentes mediante el algoritmo de difusión de caminatas aleatorias con condiciones de contorno en los pixeles semilla. En la gráfica se muestra la imagen a ser segmentada con las semillas representadas por los pixeles negros y su correspondiente segmentación. (a) La función peso está determinada únicamente por la componente R del vector g_i. (b) El vector g_i solo contiene la información del canal G. (c) El vector g_i contiene unicamente información del canal B. La función peso está dada por $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-\beta(g_i - g_j)^\gamma)$, con $\beta = 15 \times 10^{-4}$ y $\gamma = 1.3$. Fuente: Esta investigación.



(a) (b) (c)

Figura 3.7: Distribución estacionaria para una caminante aleatorio guiado por una función peso de la forma (2.3), con $\beta = 15 \times 10^{-4}$ y $\gamma = 1.4$. (b) La función peso está determinada por todos los componentes del vector g_i. (c) La función peso está determinada únicamente por la componente B del vector g_i. Fuente: Esta investigación. (a) Fuente de la fotografía: [42]



(a) (b) (c)

En la Figura 3.6 se presentan ejemplos de segmentación de objetos para cada caso analizado en la Figura 3.5 mediante el algoritmo de difusión de caminatas aleatorias con condiciones de contorno, descrito en este capítulo. De esta manera, primero en la imagen construida con únicamente los colores del modelo RGB sin combinaciones, se marcan pixeles semilla representados en la imagen como cuadros negros. Estos pixeles marcan el fondo y los objetos en la imagen, los cuales se buscan segmentar. Se definen pesos definidos con la información de únicamente ciertos canales de la imagen. Estos pesos se analizaron previamente con la distribución estacionaria en la Figura 3.5.

En el caso de una imagen real, tal como se hizo anteriormente, primero se analiza el efecto de cada definición peso mediante la distribución estacionaria. En la Figura 3.7 se presenta el cálculo de la distribución estacionaria para una caminante aleatorio guiado por una función peso de la forma (2.3). Se analizan dos casos, primero en la Figura 3.7(b) la función peso se define con la información de todas las componentes del vector g_i, lo que muestra que para esta imagen en particular hay muchas estructuras y definir una de ellas con el fin de segmentarla necesitaría un gran número de semillas. De esta manera ésta navegación no está dando una información representativa de la imagen. Por otra parte, en la Figura 3.7(c) la función peso se define únicamente para la componente B del vector g_i, lo que logra definir de manera clara los bordes de la flor, eliminando ruido presente en el fondo del objeto y estructuras presentes dentro de la flor. Esto sugiere que el resultado de la segmentación va ser más preciso y eficiente con una navegación exponencial definida únicamente para la componente B del vector g_i. Esto se comprueba en la Figura 3.8, donde se muestran paso a paso el proceso de segmentación por difusión, analizado durante todo este capítulo.

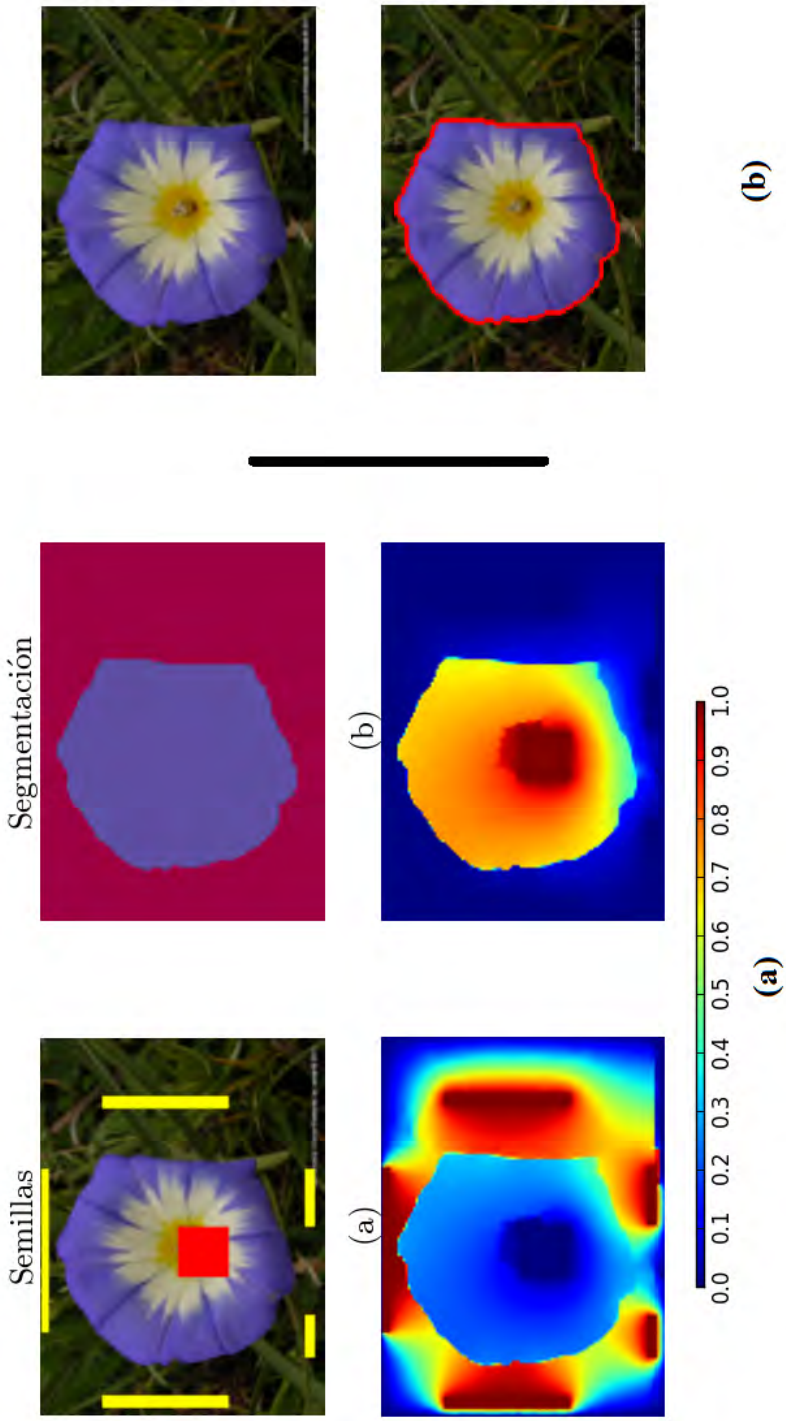


Figura 3.8: segmentación de imágenes mediante el algoritmo de difusión de caminantes aleatorios en imágenes guiados por una función peso $\Omega_{ij} = A_{ij}\exp(-\beta(g_i - g_j)^\gamma)$, con $\beta = 15 \times 10^{-4}$ y $\gamma = 1.4$. La función peso es definida unicamente con la componente G del vector g_i. (a) muestra la imagen con dos etiquetas y la segmentación resultante. Muestra además en los cuadros (a) y (b) la solución de la difusión de cada fase marcada, dada por la expresión (3.8). La columna (b) muestra la imagen original y la segmentación de la imagen. Fuente: Esta investigación. Fuente de la fotografía: [42]

3.7. Resultados

En este capítulo se estudió la difusión estacionaria de caminatas aleatorias en imágenes con condiciones de frontera en los lugares marcados como pixeles semilla. Se presenta el problema de Dirichelt en sistemas continuos y en sistemas discretos finitos. De esta manera, el proceso de segmentación es una aplicación particular a la solución del problema de Dirichelt en sistemas discretos. En este proceso, se comprueba la utilidad de la teoría del análisis de caminatas aleatorias propuesto en el capítulo 2. De esta manera, se estudió en detalle el algoritmo de caminatas aleatorias para la segmentación de imágenes mediante caminatas aleatorias y se hizo uso de la distribución estacionaria como herramienta fundamental en la aplicación de este algoritmo. Con el fin de estudiar la difusión de semillas en imágenes, se elaboró un propio método computacional que da solución al problema de Dirichelt en función de la difusión de semillas tratado en [33]. El algoritmo diseñado hace uso de las matrices dispersas y de técnicas propuestas para este propósito tales como métodos iterativos y de convergencia.

Se propuso además una nueva forma de definir la función peso que privilegia ciertos canales de la imagen. La distribución estacionaria de caminantes aleatorios definidos según esta navegación muestra que, estas funciones peso logran obtener una mejor definición de contornos de objetos en una imagen, logrando obtener una segmentación mas precisa y ágil.

Capítulo 4

Análisis de imágenes mediante el modelo de Potts

Este capítulo presenta un modelo de segmentación de imágenes basado en la detección de comunidades mediante el modelo de Potts de física estadística. Inicia con el análisis de los procesos físicos que dan lugar a la ecuación maestra y al equilibrio termodinámico, seguido hace una breve descripción del modelo de Ising y expone los conceptos de las simulaciones Monte Carlo en física estadística. Finalmente aborda el modelo de Potts así como la detección de comunidades en grafos mediante este modelo para tratar el problema de la segmentación de imágenes.

4.1. Introducción

Hasta el momento se ha estudiado procesos de segmentación de imágenes basados en funciones armónicas que obedecen la ecuación de Laplace $\nabla^2 u = 0$, otros proceso físicos pueden llevar a diferentes análisis. Así pues, nuevas estrategias que sean más rápidas y efectivas en el proceso de segmentación de imágenes son activamente estudiadas [43, 44]. Con esto en mente y en virtud de que las imágenes se pueden representar como redes, recientemente en [20] se propone un método de segmentación de imágenes basado en la "detección de comunidades", problema que es conocido en grafos y redes [26, 27]. Este problema busca identificar grupos de nodos densamente conectados entre los miembros de una comunidad y débilmente conectados con otros grupos [26] y aparece en sistemas físicos reales tales como los sistemas cristalinos, las redes biológicas o en redes sociales [45, 46].

El problema de detección de comunidades en grafos se puede abordar desde distintos enfoques tales como la agrupación jerárquica, la agrupación por particiones, la agrupación espectral entre otros [45, 47]. En física estadística las comunidades aparecen de forma natural en el modelo de Potts como regiones de espines alienados, esto ha permitido estudiar el problema de detección

de comunidades mediante este modelo, lo que ha sido de gran utilidad y una herramienta valiosa en problemas de este tipo [25, 26, 27, 48] Este capítulo expone un algoritmo de segmentación de imágenes digitales basado en el modelo de Potts de física estadística; para ello, la sección 4.2 presenta los conceptos de mecánica estadística que se utilizan a lo largo del capítulo, la secciones 4.3, 4.4 introducen el modelo de Ising y las simulaciones Monte Carlo, para luego exponer en las secciones 4.5 y 4.6 el modelo de Potts en física estadística, en detección de comunidades y en segmentación de imágenes. Finalmente la sección 4.7 presenta los resultados de este capítulo.

4.2. Ecuación maestra y equilibrio termodinámico

Esta sección inicia con una revisión de los conceptos de mecánica estadística que se utilizan durante todo el capítulo, para luego introducir la ecuación maestra y el concepto de equilibrio termodinámico. Expone además los conceptos necesarios para entender las simulaciones Monte Carlo en el equilibrio termodinámico.

La mecánica estadística se enfoca principalmente en encontrar propiedades de sistemas compuestos por pequeñas partes, típicamente átomos o moléculas, las cuales obedecen ciertas ecuaciones de movimiento; permitiendo expresar el comportamiento de todo el sistema en función de estas ecuaciones [49]. Estos sistemas están gobernados por la función Hamiltoniana H, la cual representa la energía total del sistema en un estado en particular. Así pues, cada estado discreto posee su propia energía, $E_0, E_1, E_2 \ldots$. Si el sistema está totalmente aislado, este es un sistema Hamiltoniano en el que se conserva la energía lo que significa que el sistema siempre va a tener el mismo valor de energía en cualquier estado que se encuentre. Sin embargo, hay otro componente importante que es preciso tener en cuenta. Este componente adicional es un sistema externo llamado *depósito térmico*, que actúa como fuente de calor y está constantemente intercambiando energía con el sistema Hamiltoniano, esto pone el sistema frecuentemente de un nivel de energía a otro. El depósito térmico produce unas leves perturbaciones en el Hamiltoniano H las cuales en este trabajo se ignoran para el cálculo de los niveles de energía del sistema. El ensamble de estos sistemas se conoce como ensamble canónico [50].

Para incorporar el efecto del depósito térmico es necesario implementar dinámica al sistema, es decir una regla por la cual el sistema cambia periódicamente de un estado a otro. Para esto si se supone que el sistema está en el estado μ, la probabilidad de que éste se encuentre en un

estado ν en un tiempo dt es $R(\mu \to \nu)dt$, así la razón de transición de μ a ν es $R(\mu \to \nu)$. Estas razones de transición no dependen del tiempo y son usualmente todo lo que se conoce del sistema. De manera que, si el sistema está en un estado μ dentro de un intervalo corto de tiempo, éste ya habrá pasado por una gran cantidad de nuevos estados [49]. Es aquí cuando el tratamiento probabilístico es necesario.

Definiendo un conjunto de pesos $w_\mu(t)$, los cuales representan la probabilidad de que el sistema esté en el estado μ en el tiempo t, se escribe la ecuación maestra para la evolución de $w_\mu(t)$ en términos de las probabilidades $R(\mu \to \nu)$ [49]:

$$\frac{dw_\mu}{dt} = \sum [w_\nu(t)R(\nu \to \mu) - w_\mu(t)R(\mu \to \nu)], \tag{4.1}$$

siendo el término del lado derecho de la igualdad la razón de probabilidad del sistema pasando al estado μ menos la probabilidad de que el sistema estando en μ vaya a otros estados. Las probabilidades $w_\mu(t)$ generalmente representan toda la información que se pude conocer del estado del sistema, estas también satisfacen la condición:

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1. \tag{4.2}$$

Así pues, la solución de la ecuación (4.1) sujeta a la condición (4.2), establece la forma en la que los pesos w_μ varían con el tiempo. Estos pesos están íntimamente relacionados con las propiedades macroscópicas del sistema, así el valor esperado de una cantidad Q, la cual toma el valor Q_μ en el estado μ se define como [49, 50]:

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu w_\mu(t). \tag{4.3}$$

Generar estados acorde a las probabilidades w_μ, es uno de los retos que se imponen para el cálculo de los valores esperados, de modo que, estas cantidades son uno de los propósitos fundamentales en la mecánica estadística y de las simulaciones Monte Carlo en física estadística.

Por otra parte puesto que la ecuación maestra (4.1) es de primer orden en sus derivadas, con parámetros reales y los pesos w_μ están restringidos a tomar valores entre 0 y 1, el sistema debe alcanzar el equilibrio térmico dentro de determinado tiempo [50]; así, todas las técnicas Monte Carlo a lo largo de este capítulo están concentradas en alcanzar el equilibrio termodinámico.

Equilibrio

Las razones de transición $R(\mu \to \nu)$ toman valores particulares que surgen de la interacción entre el depósito térmico y el sistema. Es así que, en las siguientes secciones de este capítulo se escogerán valores de estas cantidades de tal manera que imiten las interacciones con el depósito térmico de forma adecuada. Para ello, es importante saber que se conoce a priori cuales son los valores de los pesos w_μ en el equilibrio, estas cantidades se denominan probabilidades de ocupación en el equilibrio y están dadas por $p_\mu = \lim_{t\to\infty} w_\mu(t)$. De hecho fue Gibbs quien demostró que para un sistema en equilibrio térmico con un depósito a temperatura T, las probabilidades de ocupación en el equilibrio son [50]:

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/kT}, \tag{4.4}$$

donde E_μ es la energía del estado μ, k es la constante de Boltzmann cuyo valor es $1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$. En este capítulo la cantidad $(kT)^{-1}$ se representa con el símbolo β. La ecuación (4.4) es conocida también como la distribución de Boltzmann, donde Z es una constante de normalización cuyo valor es:

$$Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/kT} = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} \tag{4.5}$$

Z es conocida también como la función de partición y tiene un valor importante en mecánica estadística. En virtud de la ecuación (4.3) la función de partición puede expresar toda la información acerca del comportamiento macroscópico del sistema [50].

4.3. El modelo de Ising

En este trabajo se aplica el modelo de Potts con el fin de detectar estructuras y patrones en imágenes y puesto que éste es una generalización del modelo de Ising, esta sección incluye una recapitulación de los conceptos básicos de éste modelo.

El modelo de Ising en un modelo para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos. La premisa esencial detrás de éste y de muchos modelos de ferromagnetismo, es que la propiedad de magnetismo es producto de la combinación de momentos dipolares magnéticos de muchos espines dentro del material [51], es decir, la presencia de dominios magnéticos. El

modelo de Ising postula una red o grafo regular el cual puede ser de cualquier geometría, con un momento dipolar magnético o espín en cada nodo. En el modelo de Ising, los espines representados por las variables escalares s_i, pueden tomar solo dos valores: ± 1; representando la dirección arriba o abajo de los dipolos magnéticos.

En un material magnético real el sentido del espín queda determinado mediante la interacción de la partícula con sus vecinas, el modelo de Ising imita esto incluyendo términos en el Hamiltoniano proporcionales a los productos $s_i s_j$ de los espines. En el caso más simple, las interacciones son todas de la misma intensidad, denotadas por J, la cual posee dimensiones de energía y existe solo entre los espines vecinos más cercanos en el grafo regular. Se puede introducir además un campo magnético externo B. Por lo tanto, el Hamiltoniano toma la siguiente forma [50]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \tag{4.6}$$

donde la notación $\langle ij \rangle$ indica que los sitios i y j que aparecen en la suma son los vecinos más cercanos. El signo negativo es por convención y simplemente dispone la elección del signo para el parámetro de interacción J y el campo magnético externo B. Con esta disposición de signos un valor positivo de J hace que los espines traten de alinearse entre sí, mientras que un modelo anti-ferromagnético es cuando J es negativo. Los espines tienden a alinearse en la misma dirección que el campo magnético externo: $s_i = 1$ si $B > 0$, $s_i = -1$ si $B < 0$.

Los estados en el modelo de Ising son los diferentes conjuntos de variables s_i que los espines pueden tomar en un grafo regular, de esta manera, puesto que cada espín puede tomar uno de dos posibles valores $s_i = \pm 1$, en total hay 2^N estados para un enrejado con N espines.

La función de partición de este modelo es:

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i], \tag{4.7}$$

la cual escrita en una notación más compacta toma la forma:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp[-\beta H]. \tag{4.8}$$

Desarrollando esta suma ya sea de manera analítica o utilizando un computador, se puede calcular medidas tales como la energía interna $U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}$, donde $\beta = 1/kT$ y k es la constante de Boltzman, el calor especifico $C = \frac{\partial U}{\partial T}$, o la entropía $S = -k\beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k \log Z$ [50]. Se puede

calcular también la magnetización M como [50]:

$$M = \frac{\partial F}{\partial \beta}, \tag{4.9}$$

donde $F = -kT \log Z$ es la energía libre de Helmholtz [50]. Sin embargo es posible calcular la magnetización promedio $\langle M \rangle$ directamente de la suma de todos los estados del sistema [49]:

$$\langle M \rangle = \langle \sum_i s_i \rangle \tag{4.10}$$

y la magnetización por espín como:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_i s_i \rangle. \tag{4.11}$$

Si bien la solución analítica de este modelo para un enrejado de dos dimensiones ya es conocida [49], una solución analítica para un enrejado de más de dos dimensiones aún es incierta. Esto sin embargo, con los computadores actuales no es un impedimento para encontrar una solución a este problema. Para esto, en la siguiente sección se exponen métodos numéricos que dan solución no solo a este modelo si no a muchos modelos de la física estadística.

4.4. Métodos numéricos en física estadística

En esta sección se incluyen las ideas que se emplean a lo largo del capítulo, con el fin de desarrollar métodos numéricos que den solución al problema de Ising, al método de Potts y finalmente a la segmentación de imágenes mediante el modelo de Potts.

Calcular las propiedades de un modelo en particular es muchas veces muy complicado analíticamente, por ejemplo para calcular la función de partición Z de la cual se deducen una gran cantidad de propiedades de interés, es necesario realizar una cantidad infinita de sumas para alcanzar el equilibrio termodinámico, puesto que es necesario proponer un número infinito de estados. Debido a esto, es necesario desarrollar estrategias y métodos computacionales para resolver problemas de física estadística tales como el modelo de Ising o el modelo de Potts. La estrategia más sencilla es considerar un red finita, así habrá un número finito de términos en la suma para calcular la función de partición Z, y con ésta técnica utilizar otras como el escalonamiento de tamaño finito para extrapolar los resultados y extraer buenos resultados en el límite termodinámico [49]. Aunque esta técnica puede ser adecuada para ver el comportamiento del

sistema en el límite termodinámico, su precisión siempre va a estar en función del tamaño del enrejado, haciendo de esta técnica insuficiente para grandes redes. Así pues, en este trabajo se estudia el método numérico conocido como *Monte Carlo*, el cual permite calcular la función de partición en sistemas de gran tamaño en el modelo de Ising o el modelo de Potts.

4.4.1. Simulaciones Monte Carlo.

La idea básica de las simulaciones Monte Carlo es reproducir las fluctuaciones térmicas aleatorias del sistema de un estado a otro que ocurren sobre el curso de un experimento. Para esto, se crea de manera computacional un sistema el cual pasa por una variedad de estados en donde la probabilidad de estar en cualquier estado particular μ al tiempo t es igual al peso $w_\mu(t)$, probabilidad que tendría en un sistema real. Para alcanzar esto es necesario tener una regla para cambiar de un estado a otro durante la simulación. En las siguientes secciones se discuten estrategias particulares para hacerlo en el modelo de Ising y en el modelo de Potts.

Aunque hay muchas estrategias para darle dinámica a la simulación, la idea esencial es tratar de simular el proceso físico que da lugar a la ecuación maestra (4.1). Para ello, se escogen un conjunto de probabilidades $R(\mu \to \nu)$ para transiciones de un estado a otro, de tal manera que la solución en el equilibrio de la ecuación maestra sea precisamente la distribución de Boltzmann (4.4), luego se utilizan éstas razones para escoger los estados por los cuales va a pasar la simulación y de estos estados calculamos los valores esperados de acuerdo a la ecuación (4.3). La ventaja de los métodos Monte Carlo es que solo es necesario un número pequeño de muestras de estados del sistema con el fin de conseguir valores de interés del sistema. La desventaja es que precisamente, al no incluir todos los estados del sistema se introduce ruido estadístico en la función de partición lo que quiere decir que calcular los valores esperados directamente de la función de partición no es un método adecuado; por eso, es normalmente aceptado calcular tantos valores esperados sea posible directamente de la simulación Monte Carlo puesto que es más preciso [49].

Por otra parte, en esta sección se incluyen los principios de las simulaciones Monte Carlo en el equilibrio, principios que se van a utilizar a lo largo de este capítulo en diferentes algoritmos. Para calcular los valores esperados en el equilibrio las simulaciones Monte Carlo utilizan un subconjunto del conjunto total de estados del sistema, cuyos elementos se escogen aleatoriamente de una distribución de probabilidad p_μ. Suponiendo que se tienen M estados $\{\mu_1, \mu_2, ..., \mu_M\}$,

el cálculo del valor estimado de una cantidad Q está dada por [49]:

$$Q_M = \frac{\sum_{l=1}^{M} Q_{\mu_l} p_{\mu_l}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_l}}}{\sum_{j=1}^{M} p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \tag{4.12}$$

Q_M es llamado *el estimador* de Q y a medida que el número de estados M aumenta Q_M se acerca al valor esperado de $\langle Q \rangle$. Pero, es evidente que no sería práctico escoger todo el conjunto de estados con el fin de calcular esta cantidad. Así que, es necesario distinguir cuales estados hacen contribuciones importantes a $\langle Q \rangle$ y así escoger estos estados e ignorar los demás. En consecuencia, con un número pequeño de estados se tendría un buen estimado del valor esperado. Esta es la esencia detrás de las simulaciones Monte Carlo en el equilibrio térmico. La técnica de recoger los estados importantes de un gran número de posibilidades es conocida como el *muestreo de importancia* [49].

Siguiendo con esta idea, normalmente se trata de tomar una muestra de estados del sistema de acuerdo a la distribución de probabilidad de Boltzmman (4.4), es decir que la probabilidad de escoger un estado particular μ es $p_\mu = Z^{-1} e^{-\beta E_\mu}$, así el valor esperado de acuerdo a la ecuación (4.12) es:

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} Q_{\mu_i}. \tag{4.13}$$

Pero la cuestión ahora es como exactamente se recogen estados correctamente de acuerdo a la probabilidad de Boltzmman, puesto que no es posible simplemente escoger un estado y decidir si aceptarlo o no, de acuerdo a una probabilidad proporcional a $e^{-\beta E_\mu}$. La solución están en hacer uso de un proceso Markoviano, siendo éste el motor que genera el conjunto de estados de manera adecuada [49]. Tal como se utilizó en los capítulos 1 y 2, en un proceso Markoviano dado un estado μ, se genera un nuevo estado ν acorde a una probabilidad. Esta probabilidad es llamada probabilidad de transición $P(\mu \to \nu)$ la cual satisface las condiciones de no variar con el tiempo y la probabilidad de generar un nuevo estado solo depende del inmediatamente anterior. Además de $\sum_\nu P(\mu \to \nu) = 1$. De este modo, se genera una cadena de Markov de estados que surgen con probabilidades dadas por la distribución de Boltzmman. Con este fin son dos condiciones necesarias en todo proceso Markoviano que son: la *ergodicidad* y la *la ecuación de balance detallado* [52].

La condición de ergodicidad supone que debe ser posible para el proceso Markoviano alcanzar cualquier estado desde cualquier otro estado. Mientras que la condición de balance detallado es la que asegura que es la distribución de probabilidad de Boltzmann la que surge al alcanzar

el equilibrio termodinámico en nuestro sistema. La ecuación de balance detallado se expresa como [49]:

$$p_\mu P(\mu \to \nu) = p_\nu P(\nu \to \mu). \tag{4.14}$$

Sin embargo, aunque ya se han dado las herramientas para generar nuevos estados acorde con la distribución de Boltzmann, el diseño de algoritmos para simulaciones Monte Carlo necesitan de un método que asegure escoger de todas las cadenas de Markov que se puedan generar la más apropiada. Esto se logra introduciendo un concepto llamado *porcentaje de aceptación* en las probabilidades de transición. La probabilidad de transición $P(\mu \to \nu)$ se divide en [52]:

$$P(\mu \to \nu) = g(\mu \to \nu)A(\mu \to \nu), \tag{4.15}$$

donde $g(\mu \to \nu)$ es la probabilidad de que dado el estado μ se genere un nuevo estado ν y $A(\mu \to \nu)$ es el porcentaje de aceptación de los nuevos estados, el cual expresa que si se empieza en un estado μ y se genera mediante el algoritmo un nuevo estado, solo una fracción de veces se acepta este cambio el resto de veces permanece en el estado inicial.

Es necesario saber que para mantener los porcentajes de aceptación más altos, se trata de incorporar en $g(\mu \to \nu)$ tanto como se pueda la dependencia de $P(\mu \to \nu)$ como función de los estados μ y ν y poner tan poca dependencia como se pueda en los porcentajes de aceptación. En las siguientes secciones se introducen todos estos conceptos en el diseño de un método Monte Carlo que permita obtener la solución al modelo de Ising y al modelo de Potts.

El modelo de Ising y el algoritmo de Metropolis

En el algoritmo de Metropolis se generan nuevos estados cambiando la orientación de cada espín en una red. Si hay N espines en el grafo regular de grado z, hay N diferentes espines a los cuales se podría cambiar su dirección y por lo tanto hay N posibles estados ν los cuales se pueden alcanzar dado un estado μ. Así hay N probabilidades de selección $g(\mu \to \nu)$, las cuales cumplen la condición de ergodicidad [49] y toman el valor de:

$$g(\mu \to \nu) = \frac{1}{N}.$$

Con estas selecciones de probabilidad, la condición de balance detallado (4.14) toma la forma:

$$\frac{P(\mu \to \nu)}{P(\nu \to \mu)} = \frac{g(\mu \to \nu)A(\mu \to \nu)}{g(\nu \to \mu)A(\nu \to \mu)} = \frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)}. \tag{4.16}$$

De forma que, para maximizar el porcentaje de aceptación de cambiar el estado, se toma para cierto rango de valores en ΔE el máximo valor para $A(\mu \to \nu)$, es decir 1. Mientras que para el

resto de valores en ΔE la probabilidad de aceptar el cambio está sujeta a la restricción (4.16). Puesto que el fin es alcanzar el equilibrio térmico $A(\mu \to \nu)$ toma la forma [49]:

$$A(\mu \to \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} & \text{si } E_\mu - E_\nu > 0 \\ 1 & \text{en otras ocasiones.} \end{cases} \tag{4.17}$$

Esto quiere decir que si se selecciona un estado en el cual el cambio de energía sea negativo, definitivamente se acepta el nuevo estado. Si por el contrario se selecciona un estado para el cual la diferencia de energía es positiva se acepta el cambio en proporción a $e^{-\beta\Delta E}$. Este es entonces el algoritmo de Metropolis que satisface la ecuación de balance detallado (4.14) y es eficiente a la hora de aceptar de manera rápida los movimientos de espines con el fin de alcanzar el equilibrio térmico.

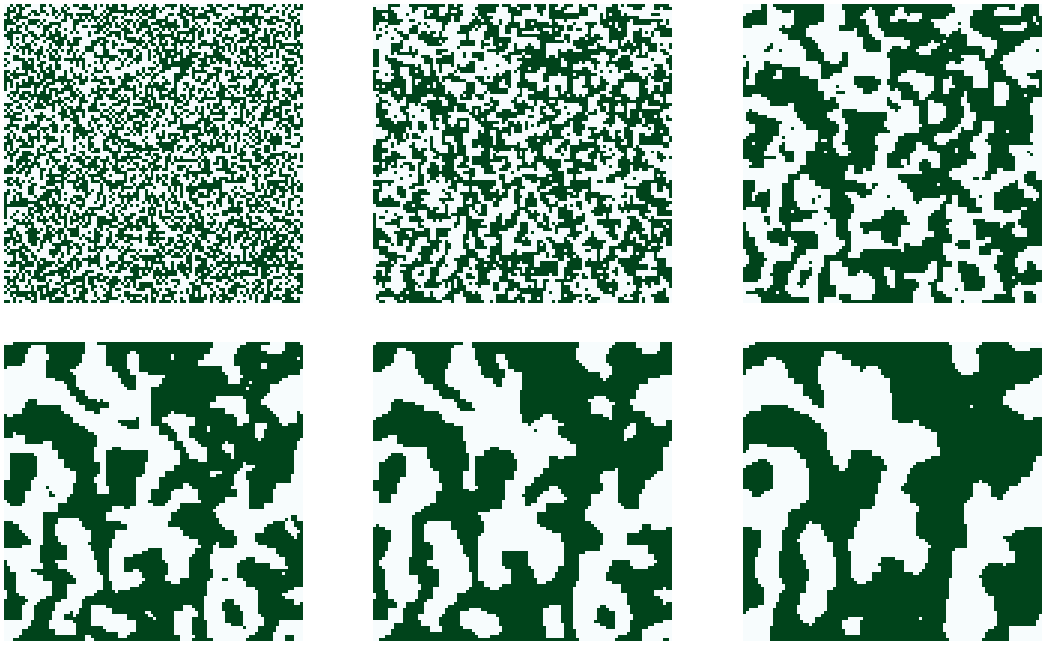
Para implementar el algoritmo se toma el caso especial de $B = 0$ y las medidas de temperatura T en unidades de energía es decir $k = 1$. Se define un conjunto de N espines, los cuales pueden tomar los valores $s_i = \pm 1$, en un grafo regular de grado 4, esto con el fin de asegurar que todos los espines tienen el mismo número de vecinos y por lo tanto asegurar que no hay espines diferentes que otros. Las condiciones iniciales del sistema pueden ser a $T = 0$ o $T = \infty$, es decir lo espines totalmente alienados o puestos de manera aleatoria respectivamente. Estos dos estados son generalmente los adecuados para inicializar el sistema puesto que son los únicos que están bien definidos a estas temperaturas. El primer paso en la simulación es generar un nuevo estado ν el cual difiere del presente estado solo en la dirección de un solo espín dentro del grafo, es decir que para generar el nuevo estado se escoge de manera aleatoria un espín en el grafo y se le cambia su dirección. Luego se calcula $E_\nu - E_\mu$. Para hacer este cálculo de manera eficiente hay que tener en cuenta que solo cambia un solo espín en la red y por lo tanto hay solo ciertos términos que en realidad contribuyen al Hamiltoniano, es decir hay un muestreo de importancia. Puesto que solo se cambia el valor de la variable de espín s_k se tiene [49]:

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^\nu s_j^\nu + J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^\mu s_j^\mu \;\; = \;\; -J \sum_{\langle ik \rangle} s_i^\mu (s_k^\nu - s_k^\mu),$$

donde s_i^μ es la variable que representa al espín i, en el estado μ. Para simplificar la anterior ecuación se sabe que si el espín s_k^μ vale 1 entonces s_k^ν debe tener un valor de -1 y si por el contrario $s_k^\mu = -1$ entonces necesariamente $s_k^\nu = 1$. Por lo que $s_k^\nu - s_k^\mu = -2s_k^\mu$ y en consecuencia [49]:

$$E_\nu - E_\mu = -2J \sum_{\langle ik \rangle} s_i^\mu s_k^\mu. \tag{4.18}$$

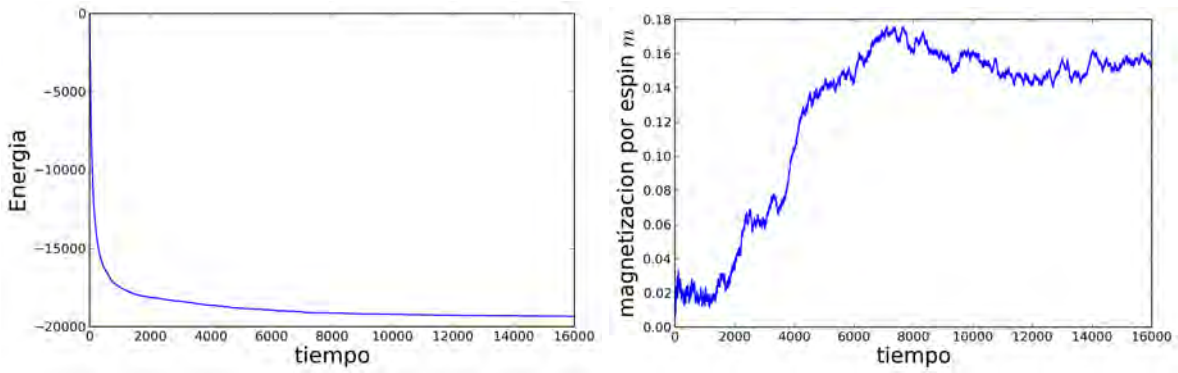
Figura 4.1: Simulación Monte Carlo mediante el algoritmo de Metropolis del modelo de Ising descrito por el Hamilatoniano (4.6), en un grafo regular de grado 4 de dimensiones 100×100. Los parámetros son $J = 1$ y $B = 0$. Los cuadros blancos representan los valores de espín $+1$ y los verdes -1. Las imágenes fueron tomadas a $t = 1, 1\times10^4, 5\times10^4, 10\times10^4, 15\times10^4, 30\times10^4$. Fuente: Esta investigación.



Esta ecuación expresa que el cambio de energía se conoce antes de cambiar el espín, es decir se calcula solo en el estado μ. La suma incluye z términos, donde z es el grado del grafo regular, lo cual es sencillo de calcular.

En la Figura 4.1 se presentan los resultados obtenidos de la simulación Monte Carlo del modelo de Ising mediante el algoritmo de Metropolis. El tiempo t de la simulación se mide por la cantidad de iteraciones que se realizan. Por ejemplo, al realizar un paso Monte Carlo, sin importar si se redirecciona o no un espín en la red, ha trascurrido un tiempo $t = 1$. Por otra parte, si bien las imágenes muestran la formación de dominios magnéticos, con solo éstas no se puede deducir que el sistema ha alcanzado el equilibrio térmico. De un gráfico de una cantidad tal como la magnetización por espín m o la energía del sistema H en función del tiempo t de la simulación, es fácil deducir que el sistema ha alcanzado el equilibrio; puesto que, éstas cantidades fluctúan en un promedio constante alrededor de un tiempo t especifico, tal como se muestran en las Figura 4.2. En este trabajo una medida adicional a t, es el número de bucles o *barridos* del sistema. Un barrido del sistema se define al desarrollar $L_x \times L_y$ pasos Monte Carlo, donde L_x y L_y son las dimensiones de la red.

Figura 4.2: Resultados numéricos obtenidos mediante el algoritmo de Metropolis para: (a) la energía, dada por la expresión (4.6) y (b) la magnetización por espín expresada en la ecuación (4.11), en el modelo de Ising para una red cuadrada de dimensiones 100×100. Los parámetros de la simulación son: $J = 1$ y $B = 0$. El sistema ha alcanzando el equilibrio alrededor del tiempo 8000, puesto que los valores de energía H y magnetización m fluctúan alrededor de un valor constante. Fuente: Esta investigación.



(a) (b)

4.5. El modelo de Potts

El modelo de Potts es similar al modelo de Ising excepto que en este modelo los espines pueden tomar más de dos valores discretos. Estos estados se pueden representar mediante vectores ortogonales, colores como en este capítulo, o mediante números enteros. El modelo de Potts de q estados es uno en el que cual cada espín toma valores enteros entre $s_i = 1, 2, \ldots, q$. El Hamiltoniano del modelo en ausencia de un campo magnético externo es [50]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}, \tag{4.19}$$

donde J representa la energía de interacción, δ_{ij} es la delta de Kronecker. Para el caso $q = 2$ el modelo de Potts es equivalente al modelo de Ising en un factor $J_{Ising} = 1/2 J_{Potts}$:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} 2(\delta_{s_i s_j} - \frac{1}{2}) - \sum_{ij} \frac{1}{2} J.$$

En el ensamble canónico, tal como en el modelo de Ising, la probabilidad de encontrar un estado particular μ dentro de todo el conjunto de estados posibles es [50]:

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu},$$

donde Z es la función de partición. Con el fin de hacer una simulación Monte Carlo del modelo de Potts, es necesario un algoritmo apropiado. Si bien el algoritmo de Metropolis funciona

para este modelo, no es tan eficiente a bajas temperaturas especialmente cuando hay un gran número de estados posibles q [49]. Debido a esto se propone el algoritmo de baños térmicos para estudiar el modelo de Potts en el equilibrio.

El algoritmo de baños térmicos

Este es al igual que el algoritmo de Metropolis un algoritmo de redireccionamiento de espines en la red, a diferencia que es mucho más eficiente para encontrar los estados de energía adecuados para grandes valores de q. El algoritmo funciona al escoger aleatoriamente de la red un espín k, luego sin importar su valor, se escoge un nuevo valor s_k para el espín en proporción a la distribución de Boltzmann (4.4). En otras palabras se da al espín un valor n entre 1 y q con la probabilidad [49]:

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{m=1}^{q} e^{-\beta E_m}}, \tag{4.20}$$

donde E_n es la energía del sistema cuando $s_k = n$. Este algoritmo satisface la condición de ergodicidad puesto que movimientos de este tipo pueden llevar de cualquier estado a otro en N movimientos o menos, donde N es el número de espines en la red [49].

La probabilidad de hacer la transición de un estado en el cual $s_k = n$ a uno en el que $s_k = n'$ es $p_{n'}$ y la de regresar es p_n, es decir solo dependen del estado final [49] (a diferencia del algoritmo de Metropolis). En consecuencia, la ecuación de balance detallado satisface:

$$\frac{P(n \to n')}{P(n' \to n)} = \frac{p_{n'}}{p_n} = e^{-\beta(E_{n'} - E_n)}. \tag{4.21}$$

La eficiencia de este algoritmo radica en que se escogen estados que tienen una mayor probabilidad de Boltzmann en la mayoría de los casos en un solo movimiento.

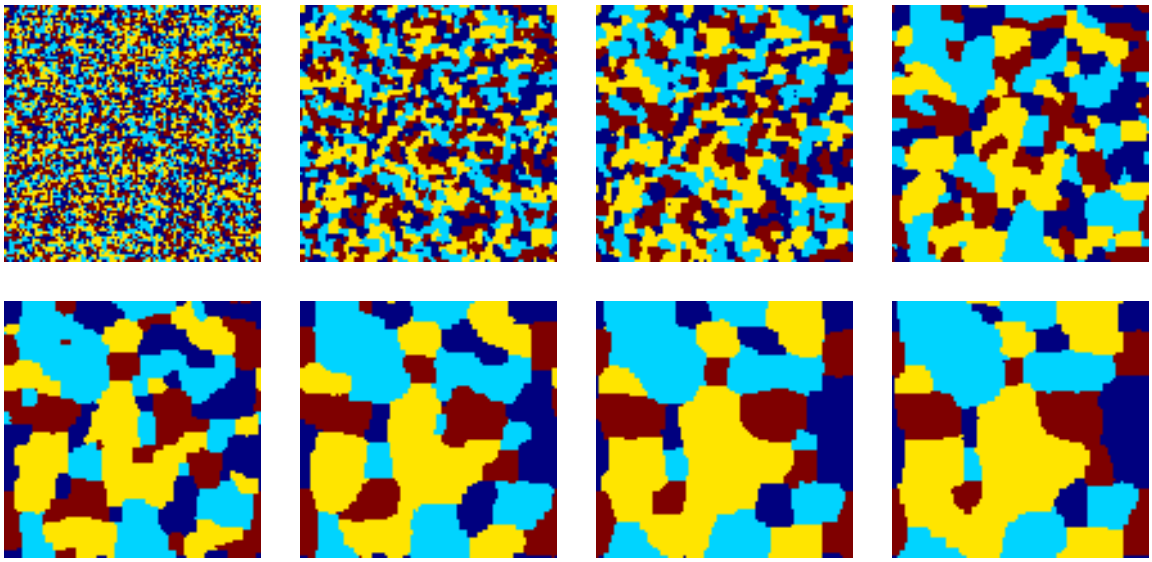
Para implementar el algoritmo, hay que tener en cuenta que una vez se escoge cual espín k se va a cambiar, es posible dividir el Hamiltoniano (4.19) en términos que involucran s_k y los que no de la siguiente manera:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle (i,j \neq k)} \delta_{s_i s_j} - J \sum_{\langle ik \rangle} \delta_{s_i s_k}.$$

La primera suma es la misma para todos los q posibles valores de s_k y por lo tanto no contribuye en la ecuación (4.20). La segunda suma solo tiene z términos donde z es el grado del grafo regular, esto quiere decir que hay al menos z términos que contribuyen al Hamiltoniano.

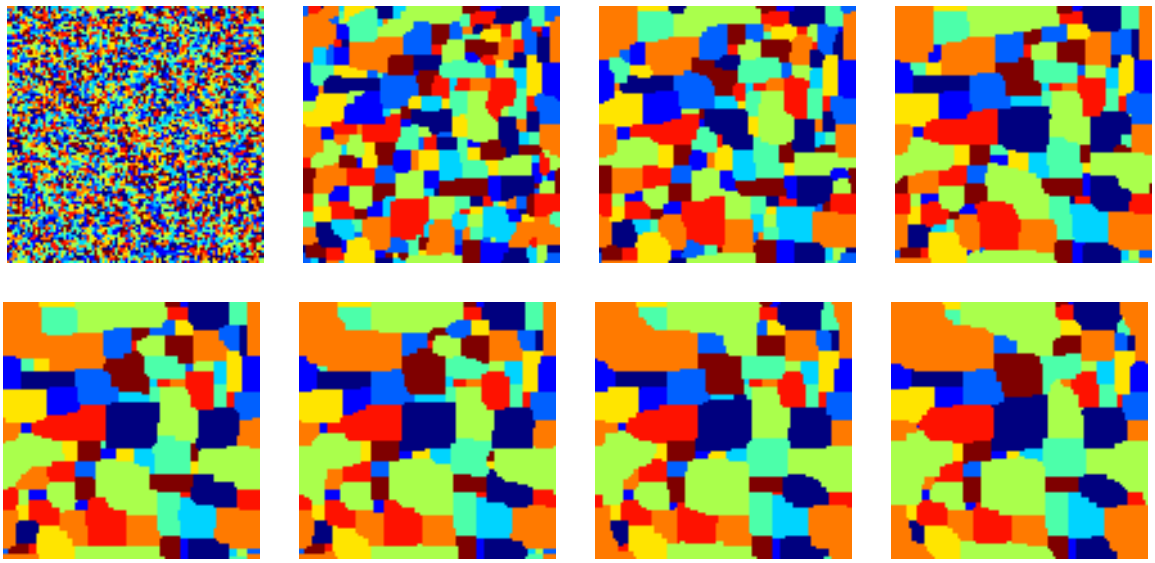
En la Figura 4.3 se presentan fotografías la simulación Monte Carlo del modelo de Potts mediante el algoritmo de baños térmicos. Estas gráficas alcanzan el equilibrio termodinámico puesto

Figura 4.3: Simulación Monte Carlo mediante el algoritmo de baños térmicos del modelo de Potts descrito por la expresión (4.19) con $J = 1$. La simulación está hecha para $q = 4$ en un grafo regular de grado 4 de dimensiones 100×100. Las imágenes fueron tomadas a los barridos número 1, 10, 25, 100, 210, 410, 710, 910. Fuente: Esta investigación.



que la energía del sistema desde un tiempo determinado permanece constante. En la Figura 4.4 se muestra la simulación Monte Carlo del modelo de Potts para $q = 10$.

Figura 4.4: Simulación Monte Carlo mediante el algoritmo de baños térmicos del modelo de Potts descrito por la expresión (4.19) con $J = 1$. La simulación está hecha para $q = 10$ en un grafo regular de grado 4 de dimensiones 100×100. Las imágenes fueron tomadas a los barridos número 1, 500, 1000, 2000, 2500, 3000, 3500, 4000. Fuente: Esta investigación.



4.5.1. El modelo de Potts en detección de comunidades

Hasta el momento los grafos han representado una red donde se estudia el comportamiento de los espines mediante el modelo de Potts o el modelo de Ising. Pero el hecho es que los grafos pueden representar muchos sistemas físicos reales, tal como se mencionó en el capítulo 1. En estos sistemas físicos se encuentra que hay un orden en la distribución de nodos y líneas, presentándose concentraciones altas de líneas en determinados nodos formando grupos los cuales tienen la característica de conectarse débilmente entre ellos [46, 53]. Estos grupos densamente conectados se denominan comunidades [45] y se forman en diversos contextos tales como las redes sociales, redes biológicas, redes de transporte, redes de producción, sistemas cristalinos entre otras [27, 45]. Recientemente en [20] el problema de segmentación de imágenes se ha propuesto como un problema de detección de comunidades, problema que se aborda en la siguiente sección de este capítulo.

Aunque el problema de detección de comunidades se ha tratado desde distintos métodos [45], en el modelo de Potts, las comunidades en un grafo aparecen de manera natural como dominios magnéticos. Esto permite en cierta manera utilizar todas las estrategias que se han mencionado con el propósito encontrar comunidades en un sistema real, tal como una imagen digital, en analogía con un sistema de espines. Esto quiere decir que si las variables de espín del modelo de Potts se asignan a los nodos de un grafo y puesto que las interacciones son entre espines vecinos, es probable que los grupos estructurales o comunidades pueden ser encontrados como dominios magnéticos, es decir como grupos de espines alienados en cierta dirección. Con esta idea en [27] se propone un modelo de Hamiltoniano para encontrar comunidades mediante el modelo de Potts de la siguiente manera:

$$H(s) = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(a_{ij}A_{ij} - \gamma b_{ij}(1 - A_{ij}))\delta(s_i s_j). \tag{4.22}$$

$a_{ij},\ b_{ij}$ son los pesos de las líneas, $\mathbf{A}$ es la matriz de adyacencia y γ es llamado factor de resolución y permite relacionar mediante una escala las líneas en la comunidad con las líneas que están fuera. s es la variable que representa el espín, la cual está definida en el rango $1 \leq s_i \leq q$, donde q representa el número de comunidades. De esta manera, un sistema representado por las variables de espín $\{s_i\}_{i=1}^{N}$ corresponde a una partición de el sistema en q comunidades, las cuales se encuentran minimizando el Hamiltoniano (4.23) [20, 26, 27, 45].

La energía dada por la ecuación (4.22) es la suma de dos componentes, el primer componente es el modelo de Potts tal como se lo definió en la ecuación (4.19), con la diferencia de que

ahora la intensidad J de interacción entre los espines no es constante. Este término como se observo en las secciones anteriores favorece el alineamiento de los espines. El segundo término en cambio es un modelo anti-ferromagnético que se interpreta como una penalización a los nodos no conectados es decir cuando el elemento de la matriz de adyacencia A_{ij} es nulo [20, 45]. El parámetro γ permite variar entonces el grado de penalización de los nodos que no están en una comunidad; así, para un valor de γ alto los nodos van tratan de incluirse en una comunidad para evitar la penalización. Para $\gamma = 0$ no existe penalización y por lo tanto los nodos que no están en una comunidad no van a tratar de unirse a una y la energía más baja del sistema generalmente va a corresponder al sistema sin cambios [25, 26, 27].

4.6. Segmentación de Imágenes mediante el modelo de Potts

En esta sección se presenta un algoritmo de detección de comunidades con el fin de segmentar imágenes digitales, es decir dividir una imagen en diferentes regiones o comunidades basados en un cierto criterio expresado en la matriz de adyacencia. En este caso cada región corresponde a un objeto de la imagen original.

Para empezar las imágenes se representan como grafos tal como se detallo en el capítulo 2. Para retomar brevemente algunas ideas, los pixeles de la imagen representan los nodos del grafo y las líneas la similitud o diferencia entre pixeles vecinos. En este capítulo se retoman los pesos en imágenes definidos en el capítulo 2.

En la segmentación de una imagen de N pixeles mediante el modelo de Potts, la variable s_i de un nodo i pertenece a una comunidad l cuando $s_i = l$. Si hay q comunidades en la imagen entonces s_i asume un valor entre $1 \leq s_i \leq q$. Un estado $\{s_k\}_{k=1}^N$ corresponde a una segmentación de la imagen en q comunidades u objetos. En el contexto de imágenes el modelo de Potts se encuentra en [20, 54, 55, 56]. Particularmente en [20] se introduce un Hamiltoniano para la detección de comunidades en imágenes modeladas como grafos sin pesos, esto quiere decir que para los nodos i y j, $A_{ij} = 1$ si están conectados y $A_{ij} = 0$ de otra manera. El Hamiltoniano se expresa como:

$$H(\{s_k\}_{k=1}^N) = -\frac{1}{2}\sum_{i \neq j}(A_{ij} - \gamma(1 - A_{ij}))\delta_{s_i s_j}. \tag{4.23}$$

Por otra parte, en grafos con pesos, se asignan líneas con pesos V_{ij} entre los nodos i y j basados en la intensidad de la interacción entre pixeles vecinos de la imagen. Estas intensidades definen por ejemplo la similitud o diferencia entre pixeles vecinos. El Hamiltoniano se define como

[20]:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{a=1}^{q}\sum_{i,j\in c_a}(V_{ij}-\overline{V})[\Theta(\overline{V}-V_{ij})+\gamma\Theta(V_{ij}-\overline{V})]\delta_{s_i s_j}. \tag{4.24}$$

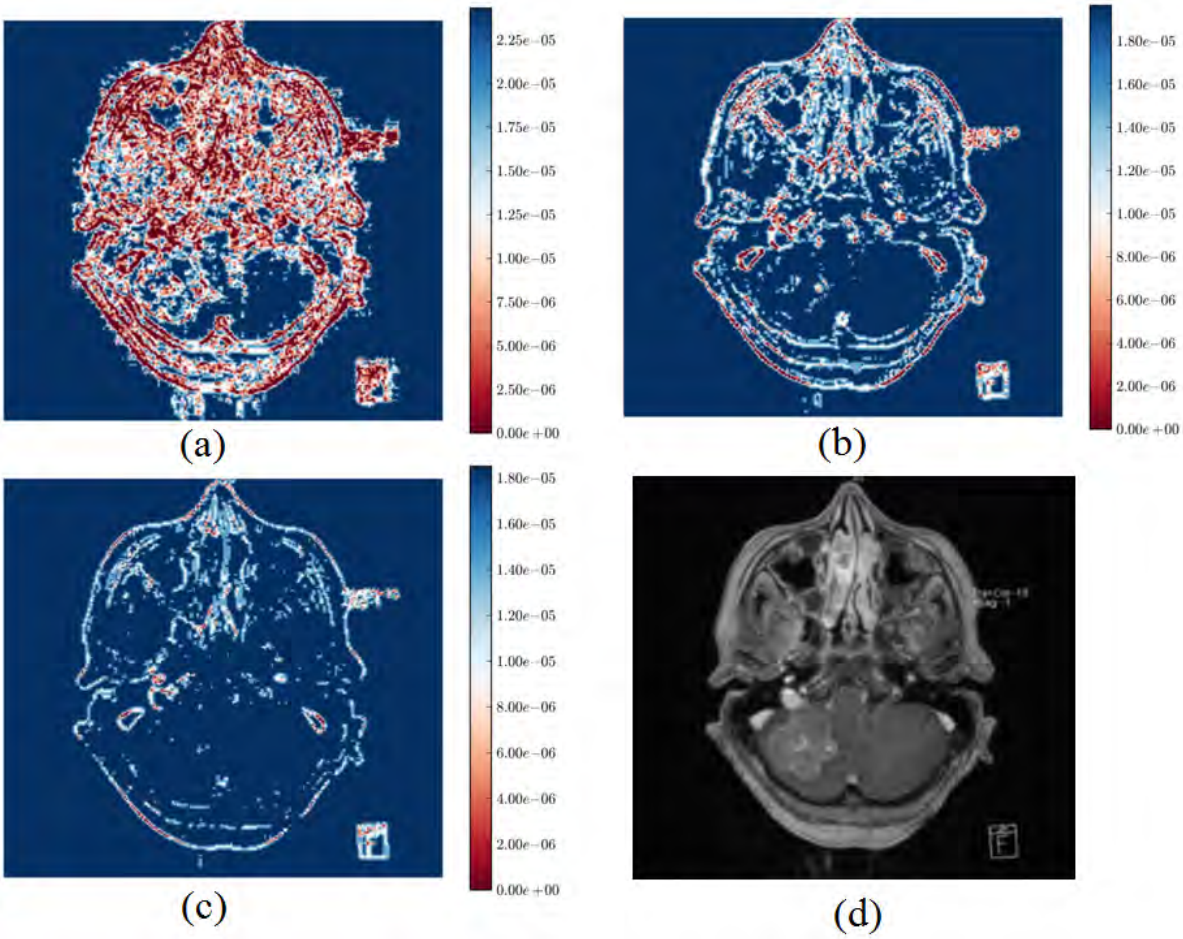
La suma interna corre para los nodos i, j que pertenecen a una comunidad c_a. El número de comunidades q puede ser definido o el algoritmo puede decidir para cuantos q se produce la optima minimización de H, ya sea para la ecuación (4.23) o la ecuación (4.24). La función $\Theta(x)$ es la que conecta o no, los pixeles de la imagen [$\Theta(x \geq 0) = 1$ y $\Theta(x \leq 0) = 0$]. La inclusión de un umbral $\overline{V}$ permite una mejor partición del grafo [20]. Este valor umbral es una constante y permite filtrar ruido en la imagen.

Para implementar el algoritmo de detección de comunidades mediante el modelo de Potts con el fin de segmentar imágenes se utiliza como primera instancia el algoritmo de baños térmicos definido en la sección 4.5 con el fin de minimizar las ecuaciones (4.23) y (4.24). En principio se analiza imágenes modeladas como redes sin pesos cuya segmentación se logra al minimizar el Hamiltoniano descrito por la ecuación (4.23). En este caso los nodos de la imagen están conectados o no, de acuerdo a la siguiente condición:

$$A_{ij} = \Theta(\overline{V} - D_{ij}), \tag{4.25}$$

donde $D_{ij} = ||g_i - g_j||$. Con estas definiciones se ejecuta el algoritmo de baños térmicos con el fin de encontrar un mínimo global para la función de energía dada por la ecuación (4.23); de tal manera, en el punto en que la energía fluctúa sobre un valor constante se ha alcanzado la segmentación de la imagen. La siguiente pregunta es como escoger el valor $\overline{V}$ de manera adecuada, en [20] esto se logra al hacer varios intentos con diferentes valores y escoger el mejor resultado. En este capítulo el proceso de escoger el valor umbral $\overline{V}$ se hace mediante el algoritmo de análisis de caminatas aleatorias en imágenes propuesto en el capítulo 2. La Figura 4.5 presenta el análisis de diferentes valores umbrales $\overline{V}$ para una determinada imagen con el fin de seleccionar el que en principio es el más adecuado. Con esto en mente se efectúa el algoritmo de baños térmicos t iteraciones independientes con $\overline{V} = 51$ hasta alcanzar la minimización de la ecuación (4.23). En la Figura 4.6 se presentan los resultados durante el proceso hasta alcanzar la segmentación de la imagen. La segmentación de la imagen se logra en el barrido 30 aproximadamente a $\beta = 10J^{-1}$. Por otra parte, al aumentar la temperatura, el sistema tiende al desorden [49] y por lo tanto toma más tiempo segmentar la imagen y no se obtienen buenos resultados puesto que se presentan regiones de pixeles que no corresponden a estructuras de la imagen, tal como se observa en la Figura 4.7.

Figura 4.5: Distribución estacionaria para caminantes aleatorios guiados por la exprexión (4.25) con el fin de analizar diferentes valores umbral. (a) $\overline{V} = 10$ (b) $\overline{V} = 30$ (c) $\overline{V} = 51$ (d) Imagen original tomada de la base de datos de Mathematica 9. Se observa que para (a) y (b) el umbral no es lo suficientemente sutil y no permite observar objetos en la imagen. Por el contrario para (c) el umbral es lo suficientemente leve para observar objetos en la imagen y excluir ruido. Fuente: Esta investigación.



En cuanto a el parámetro de resolución γ tal como se mencionó, favorece la formación de comunidades en un grafo; así pues, para un valor de γ alto los pixeles de la imagen tratan de incluirse en una comunidad, mientras que para un valor de γ cercano a cero la minimización del sistema no va a sugerir una buena segmentación de la imagen. Esto se puede observar en la Figura 4.7 en la que para $\gamma = 0.8$ los contornos de los objetos de la imagen no se definen de manera clara. La elección de un parámetro de resolución adecuado para cada imagen es un problema abierto que hasta el momento solo se ha tratado en [20] mediante medidas de entropía e información mutua.

Figura 4.6: Segmentación de imágenes con el modelo de Potts para detección de comunidades (4.23), mediante el algoritmo de baños térmicos. La imagen es modelada como una red sin pesos en función de la relación (4.25). En este caso $\beta = 10J^{-1}$, $\overline{V} = 51$, $q = 2$, $\gamma = 0.8$. Las gráficas fueron tomadas a los barridos 1, 5, 10, 20, 25, 30, 40, 50, 100. Fuente: Esta investigación.

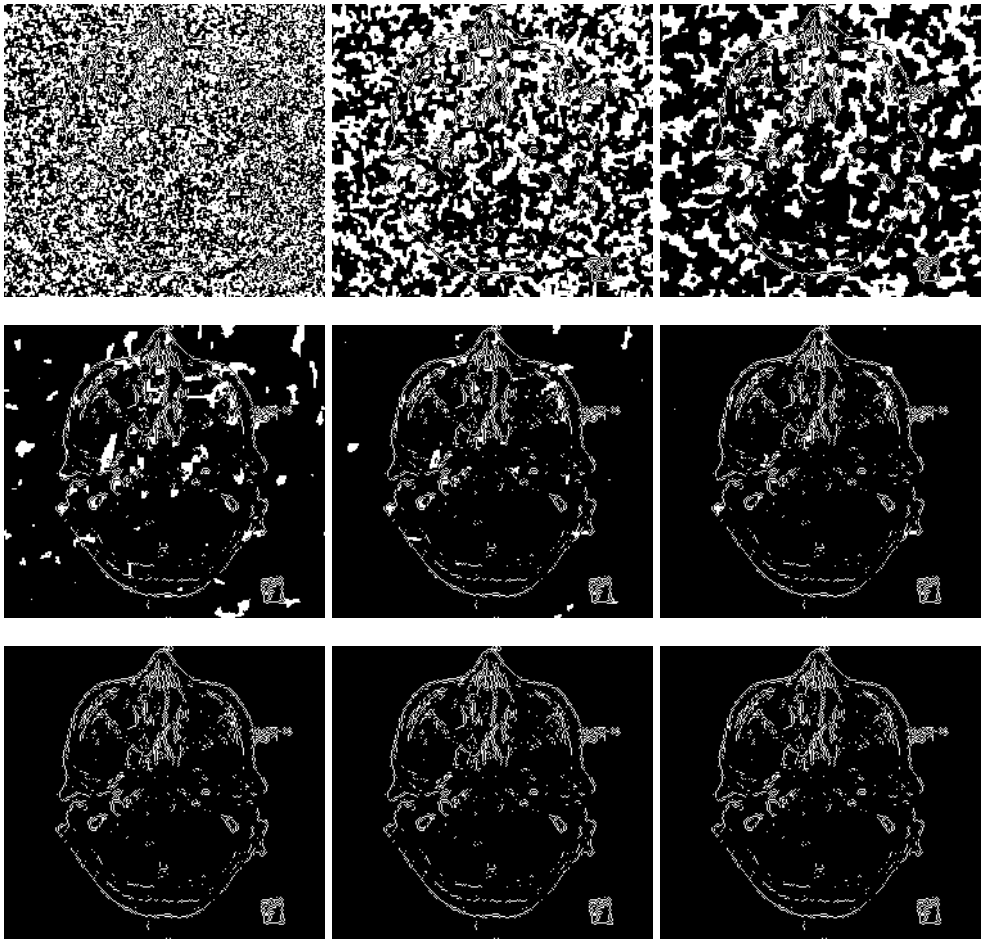


Figura 4.7: Segmentación de imágenes con el modelo de Potts, mediante el algoritmo de baños térmicos. (a) Se observa el efecto de aumentar la temperatura del deposito térmico. En este caso los parámetros son (a) $\gamma = 10$, $\beta = (3J^{-1})$ y $\overline{V} = 51$. (b) Efecto de un valor del parámetro de resolución γ muy bajo. En este caso los paramentros son $\gamma = 0.8$, $\beta = (10J^{-1})$ y $\overline{V} = 51$. Cada imagen es tomada al barrido 100. Fuente: Esta investigación.

(a) (b)

Sumando a la segmentación de imágenes mediante el algoritmo de Potts y con la finalidad de hacer de este proceso un método más viable computacionalmente, se propone un algoritmo llamado algoritmo a temperatura cero [20]. En este algoritmo se busca segmentar una imagen digital sin la interacción del Hamiltoniano (4.23) y (4.24) con un depósito térmico. Este algoritmo propone entonces, llegar a una configuración del sistema en la que ocurra la mínima fluctuación de energía de la siguiente manera:

- Se inicializa el sistema con la identificación aleatoria de cada pixel con una etiqueta q, donde q es el número de comunidades. En principio cada pixel puede ser miembro de su propia comunidad, es decir que en total habrán N comunidades de las cuales el algoritmo decidirá la cantidad óptima de comunidades. Otra opción es que el número q puede ser fijado para que el algoritmo no forme más de las q comunidades que se especifiquen. En este trabajo q siempre va a ser un número que se especifica al iniciar el algoritmo puesto que dejar que el algoritmo decida el total de comunidades posee un costo computacional mayor.
- A continuación se recoge cada nodo y se posiciona en la comunidad que disminuye la energía de las ecuaciones (4.23) y (4.24) de acuerdo al estado actual del sistema.
- Se repite este proceso para todos los nodos y se continúa iterando hasta que la energía del sistema ha alcanzado un mínimo global.

De este modo, se presentan en la Figura 4.8 las imágenes del algoritmo de detección de comunidades a temperatura $T = 0$ hasta alcanzar la minimización de la energía. Este algoritmo es mucho más rápido que el algoritmo de baños térmicos aunque su eficiencia es aún motivo de estudio. Adicionalmente, en la Figura 4.9 se presenta el algoritmo de análisis de caminatas aleatorias en imágenes y el algoritmo de detección de comunidades a temperatura $T = 0$ para diferentes imágenes. En comparación con los dos algoritmos se puede deducir que el algoritmo de caminatas aleatorias es mucho más eficiente en la detección de bordes de una imagen y posee un costo computacional menor.

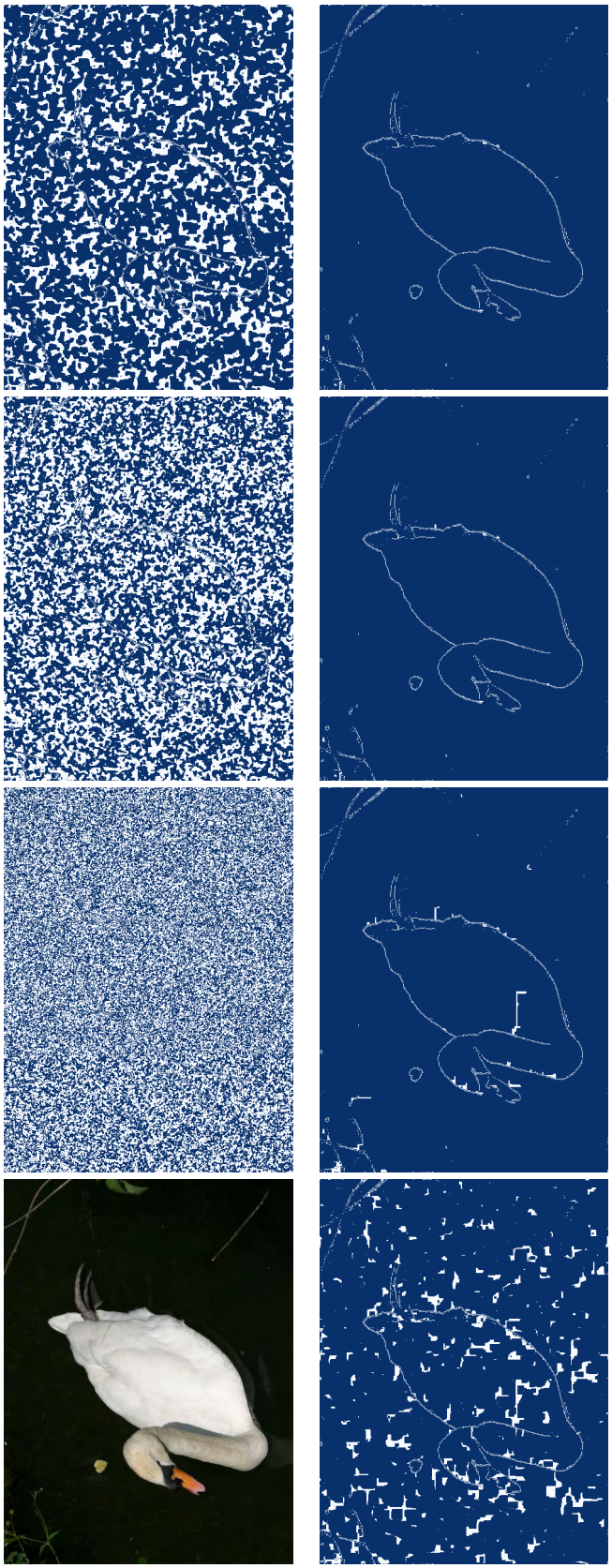


Figura 4.8: Imágenes del proceso de segmentación de una imagen digital modelada como una red sin pesos, mediante el algoritmo de detección de comunidades a temperatura cero. En este caso $\overline{V} = 51$, $q = 2$, $\gamma = 50$. Las gráficas fueron tomadas a los barridos 1, 5, 10, 15, 20, 30, 40. El reulstado final de la segmentación se logra en la ultima imagen. Fuente: Esta investigación. Imagen original obtenida de la base de datos de Microsoft Research `http://research.microsoft.com/en-us/projects/objectclassrecognition/`

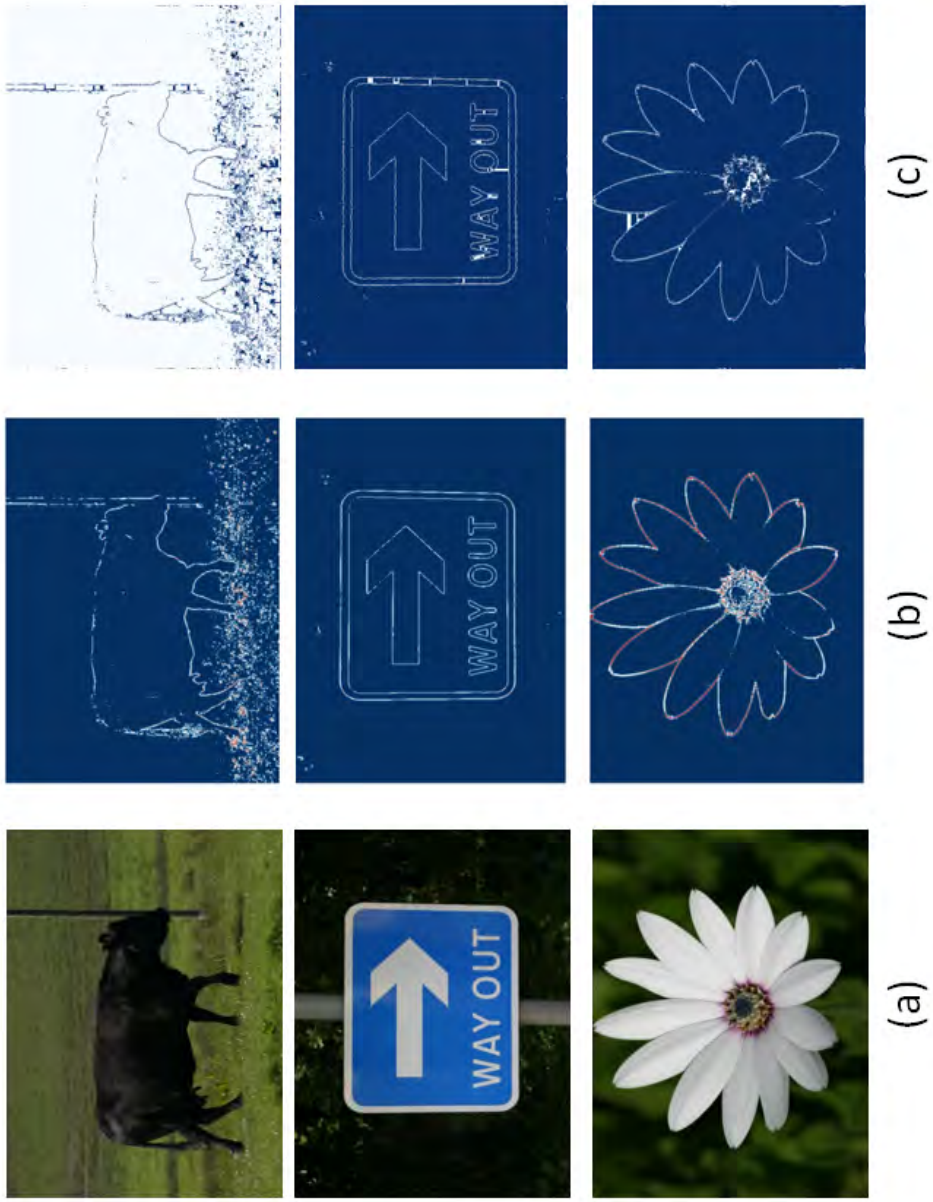
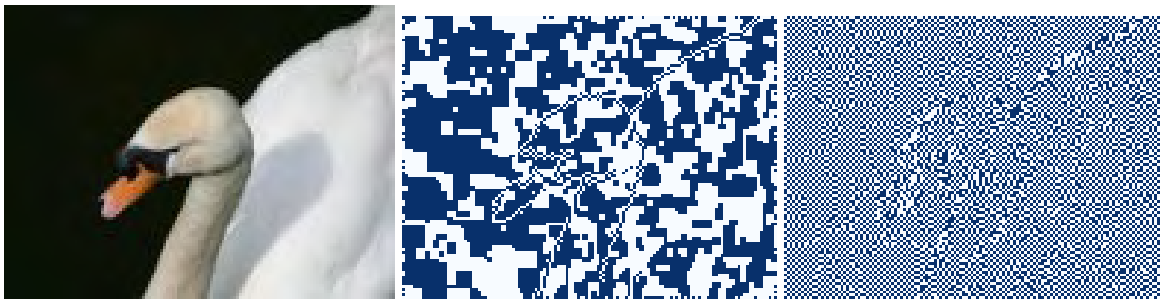


Figura 4.9: (a) Imágenes descargadas de la base de datos de Microsoft Research `http://research.microsoft.com/en-us/projects/objectclassrecognition/`. (b) Análisis de imágenes mediante el algoritmo de caminatas aleatorias. (c) Resultado del algoritmo de segmentación a temperatura cero. Fuente: Esta investigación.

Figura 4.10: Segmentación de imágenes en el modelo de Potts con pesos dado por la ecuación 4.24. En la imagen del centro los pesos están definidos por la ecuación 4.26 y $\overline{V} = 48$. En la imagen de la izquierda los pesos son una distribución exponencial tal como en los capítulos 2 y 3, $V_{ij} = \exp(-0.2||g_i - g_j||^{0.8} A_{ij})$ y $\overline{V} = 0.0096$. Fuente: Esta investigación.



Ahora, en el modelo de Potts con pesos descrito por la ecuación (4.24), el conjunto de pesos V_{ij} se puede definir arbitrariamente y observar su comportamiento en la segmentación de la imagen, tal como se hizo con el algoritmo de caminatas aleatorias en imágenes propuesto en el capítulo 2 en el que se analizaron diferentes formas de navegación en imágenes. Por el momento se tratará un caso particular en el que V_{ij} se define como la diferencia en la intensidad de los pixeles i y j respectivamente de la siguiente manera:

$$V_{ij} = ||g_i - g_j||A_{ij}. \tag{4.26}$$

Minimizando la ecuación (4.24) con V_{ij} dado por la ecuación (4.26) mediante el algoritmo de detección de comunidades se obtiene el resultado mostrado en la Figura 4.10. Estos resultados aún no permiten observar de manera clara la formación de estructuras en la imagen, esto sugiere que la definición de un Hamiltoniano apropiado, así como la forma de representar la imagen en un grafo con el fin de la segmentación por el modelo de Potts, es un tema abierto que en principio requiere de más análisis.

4.7. Resultados

Este capítulo analizó el modelo que estudia el comportamiento de materiales ferromagnéticos en el contexto de segmentación de imágenes. Inicia con una revisión del modelo de Ising para el cual se diseño un código Monte Carlo del algoritmo de Metropolis, el cual simula la interacción del Hamiltoniano del modelo con un depósito térmico tal como en un experimento de laboratorio. Los resultados obtenidos mediante el algoritmo que se diseñó están de acuerdo a los resultados que se encuentran en la literatura. Las siguientes secciones introdujeron de manera teórica el modelo de Potts de física estadística para el cual se estudió el algoritmo de baños

térmicos; método Monte Carlo que se emplea por su agilidad y eficiencia a la hora de simular el equilibrio térmico en este modelo. Se diseñó un código en lenguaje de programación Python que implementa el algoritmo de baños térmicos en un enrejado que es definido por el usuario, al igual que todos sus parámetros tales como la energía, el número de iteraciones, entre otros. El algoritmo diseñado tiene como salidas la energía del sistema y las imágenes que muestran al sistema en diferentes momentos durante el proceso de simulación. Al igual que con el algoritmo de Metropolis, los resultados obtenidos mediante el algoritmo de baños térmicos que se diseñó, obedecen las predicciones teóricas que se encuentran en la literatura. Con estos resultados en mente, las últimas secciones abordan el problema de detección de comunidades en grafos mediante el modelo de Potts.

En el campo de la segmentación de imágenes el modelo de Potts se utilizó para encontrar comunidades en una imagen digital. Se propuso Hamiltonianos tanto para imágenes modeladas como redes sin pesos como redes con pesos. En cuanto a las imágenes modeladas como redes sin pesos, la segmentación de la imagen se produce por medio de la minimización del Hamiltoniano. La única forma de minimizar las ecuaciones (4.23) y (4.24) en imágenes, es mediante métodos numéricos. Como primera instancia se hizo una adaptación de las técnicas del algoritmo de baños térmicos con el fin de segmentar imágenes mediante el Hamiltoniano dado por la ecuación (4.23). Los resultados obtenidos muestran que el algoritmo computacional propuesto, logra la segmentación de la imagen. Un parámetro importante en el diseño teórico de este método de segmentación es el valor umbral $\overline{V}$, este parámetro se analizó con el método de caminatas aleatorias en imágenes propuesto en el capítulo 2. En cuanto al parámetro de resolución adecuado para cada imagen aun se requiere de estudio adicional. Si bien el algoritmo de baños térmicos logra segmentar una imagen digital, su costo computacional no permite extenderlo para imágenes VGA (640$\times$480 pixeles) o superiores de manera práctica. Por tal razón se implementa un nuevo algoritmo para segmentar imágenes mediante el modelo de Potts. Este algoritmo se denomina a temperatura cero y minimiza las ecuaciones (4.23), (4.24) sin la interacción con un deposito térmico. Los resultados de este método muestran que efectivamente segmenta cualquier imagen digital modelada como una red sin pesos, con V_{ij} dado por la ecuación (4.26) con un costo computacional 10 veces menor que el algoritmo de baños térmicos. Por otra parte, la evaluación de la calidad de una segmentación, o la validación de cada segmentación en particular requiere de nuevas técnicas y herramientas que se pueden analizar en un nuevo trabajo como complementación a éste. Pero, en comparación del algoritmo de caminatas aleatorias con el algoritmo de segmentación de Potts, se pude concluir que la distribución estacionaria es una

cantidad que permite ver bordes y estructuras en cualquier imagen y con cualquier forma de navegación, a diferencia del algoritmo de segmentación de imágenes tal como se define en [20], el cual funciona solo en ciertos casos y solo para ciertas definiciones, esto se comprueba en los resultados encontrados para imágenes en redes con pesos, en la Figura 4.9 y en la Figura 4.10 en donde la detección de bordes de objetos en la imagen es más precisa en el algoritmo de caminatas aleatorias. Finalmente, la segmentación de imágenes mediante el algoritmo de Potts con el diseño computacional propuesto aún requiere de más estudio para hacerlo un método viable, preciso y ágil para segmentar imágenes.

Conclusiones y recomendaciones

En este trabajo se estudiaron procesos dinámicos en imágenes digitales modeladas como redes con pesos. Se presentó la segmentación de imágenes mediante la difusión de caminatas aleatorias y el modelo de Potts. Como resultado de este estudio:

- Se observa que el cálculo de la distribución estacionaria del caminante aleatorio es un método que permite caracterizar este proceso dinámico en imágenes digitales. Esta técnica permite estudiar diferentes tipos de estrategias que definen el movimiento en la imagen, se encuentra que la distribución estacionaria posibilita identificar fronteras y bordes de objetos de una imagen. Los caminantes aleatorios analizados en este trabajo son conocidos en otros problemas de análisis de imágenes, aunque en el contexto en el que se mencionan no se explica el porqué de su elección en particular, siendo el método propuesto una herramienta que permite determinar si una navegación en particular es especialmente buena para segmentar una imagen.

- Se analiza la difusión de caminantes aleatorios en imágenes con condiciones de contorno dadas por pixeles marcados en ciertas regiones de la misma con el fin de segmentar una imagen digital. De esta manera, se proponen caminantes aleatorios los cuales fueron analizados mediante la distribución estacionaria, lo que dio una herramienta sencilla y práctica a la hora de escoger las definiciones de caminantes aleatorios adecuadas en función de detectar objetos en la misma. Mediante la implementación numérica de este algoritmo se logra segmentar objetos de interés dentro de una imagen digital.

- Se estudia el modelo de Potts al igual que el modelo de Ising con configuraciones que minimizan la energía del sistema mediante simulaciones Monte Carlo. En el contexto de redes, el modelo de Potts se utiliza en la detección de comunidades permitiendo establecer conjuntos de nodos que son el equivalente en redes de los dominios magnéticos. Con esto en mente se aplica este esquema con el fin de detectar estructuras y patrones en imágenes digitales. Para esto, se diseñó simulaciones Monte Carlo del modelo de Potts que buscan segmentar imágenes digitales como resultado de configuraciones de mínima energía del sistema.

Con esto se han presentado resultados generales del trabajo. Por otra parte, debido a que el problema de segmentación de imágenes busca constantemente nuevos métodos que hagan de

este proceso una tarea sencilla, precisa y práctica, se recomienda para futuras investigaciones:

- Desarollar una extensión de las herramientas expuestas en este trabajo para imágenes médicas en tres dimensiones definidas con vóxeles con el fin de incorporar los resultados obtenidos, por ejemplo, en la tomografía axial computarizada o para las resonancias magnéticas [5].

- Investigar y proponer otros procesos dinámicos propios de la física con el fin de analizar imágenes digitales, es de interés la incorporación de efectos de memoria en el sistema con el fin de analizar texturas en imágenes.

- Desarrollar métodos computacionales que involucren programación en paralelo y manipulaciones numéricas con tarjetas de video para mejorar los códigos diseñados en el desarrollo de este trabajo con el fin de hacerlos más eficientes y prácticos computacionalmente.

Bibliografía

[1] Alain Barrat, Marc Barthélemy, and Alessandro Vespignani. *Dynamical processes on complex networks*. Cambridge University Press, Cambridge, 2008.

[2] Reinhard Diestel. *Graph Theory*, volume 173 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, Heidelberg, third edition, 2005.

[3] S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez, and D.-U. Hwang. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports*, 424(4-5):175 – 308, 2006.

[4] A. Ricardo Backes, Wesley Nunes Gonçalves, Alexandre Souto Martinez, and Odemir Martinez Bruno. Texture analysis and classification using deterministic tourist walk. *Pattern Recognition*, 43(3):685 – 694, 2010.

[5] L. Grady. Random walks for image segmentation. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, 28(11):1768 –1783, nov. 2006.

[6] Michael Small, David M. Walker, and Chi Kong Tse. Scale-free distribution of avian influenza outbreaks. *Phys. Rev. Lett.*, 99:188702, Oct 2007.

[7] M. E. J. Newman. The structure and function of complex networks. *SIAM Review*, 45(2):167–256, 2003.

[8] Barry D. Hughes. *Random Walks and Random Environments: Vol. 1: Random Walks*. Oxford University Press, USA, 1996.

[9] G.H. Weiss. *Aspects and Applications of the Random Walk*. North Holland, Amsterdam, 1994.

[10] Jae Dong Noh and Heiko Rieger. Random walks on complex networks. *Phys. Rev. Lett.*, 92:118701, Mar 2004.

[11] V. Tejedor, O. Bénichou, and R. Voituriez. Global mean first-passage times of random walks on complex networks. *Phys. Rev. E*, 80:065104, Dec 2009.

[12] Wen-Xu Wang, Bing-Hong Wang, Chuan-Yang Yin, Yan-Bo Xie, and Tao Zhou. Traffic dynamics based on local routing protocol on a scale-free network. *Phys. Rev. E*, 73:026111, Feb 2006.

[13] Agata Fronczak and Piotr Fronczak. Biased random walks in complex networks: The role of local navigation rules. *Phys. Rev. E*, 80:016107, Jul 2009.

[14] Sungchul Kwon, Woosik Choi, and Yup Kim. Bimolecular chemical reactions on weighted complex networks. *Phys. Rev. E*, 82:021108, Aug 2010.

[15] Sergey Brin and Lawrence Page. The anatomy of a large-scale hypertextual web search engine. *Comput. Netw. ISDN Syst.*, 30(1-7):107–117, April 1998.

[16] Daniel W Stroock. *An introduction to Markov processes*, volume 230. Springer, 2005.

[17] M. Petrou and C. Petrou. *Image Processing: The Fundamentals*. John Wiley & Sons, 2010.

[18] Rafael C. Gonzalez and Richard E. Woods. *Digital Image Processing (3rd Edition)*. Prentice Hall, 3 edition, August 2007.

[19] Jianbo Shi and Jitendra Malik. Normalized cuts and image segmentation. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, 22(8):888–905, 2000.

[20] Dandan Hu, Peter Ronhovde, and Zohar Nussinov. Replica inference approach to unsupervised multiscale image segmentation. *Phys. Rev. E*, 85:016101, Jan 2012.

[21] Carsten Steger, Markus Ulrich, Christian Wiedemann, et al. *Machine vision algorithms and applications*. wiley-VCH, 2008.

[22] Alexander Pentland, Baback Moghaddam, and Thad Starner. View-based and modular eigenspaces for face recognition. In *Computer Vision and Pattern Recognition, 1994. Proceedings CVPR'94., 1994 IEEE Computer Society Conference on*, pages 84–91. IEEE, 1994.

[23] Paul Wighton, Maryam Sadeghi, Tim K Lee, and M Stella Atkins. A fully automatic random Walker segmentation for skin lesions in a supervised setting. *Medical image computing and computer-assisted intervention : MICCAI ... International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention*, 12(Pt 2):1108–15, January 2009.

[24] Leo Grady and Gareth Funka-Lea. Multi-label image segmentation for medical applications based on graph-theoretic electrical potentials. In *Computer Vision and Mathematical Methods in Medical and Biomedical Image Analysis*, pages 230–245. Springer, 2004.

[25] Hui-Jia Li, Yong Wang, Ling-Yun Wu, Zhi-Ping Liu, Luonan Chen, and Xiang-Sun Zhang. Community structure detection based on potts model and network's spectral characterization. *EPL (Europhysics Letters)*, 97(4):48005, 2012.

[26] Peter Ronhovde and Zohar Nussinov. Local resolution-limit-free potts model for community detection. *Phys. Rev. E*, 81(4):046114, 2010.

[27] P Ronhovde, S Chakrabarty, D Hu, M Sahu, KK Sahu, KF Kelton, NA Mauro, and Z Nussinov. Detection of hidden structures for arbitrary scales in complex physical systems. *Scientific reports*, 2, 2012.

[28] Fa-Yueh Wu. The potts model. *Reviews of modern physics*, 54(1):235, 1982.

[29] Xiaojin Zhu, Zoubin Ghahramani, and John Lafferty. Semi-supervised learning using gaussian fields and harmonic functions. In *MACHINE LEARNING-INTERNATIONAL WORKSHOP THEN CONFERENCE-*, volume 20, page 912, 2003.

[30] André Ricardo Backes, Wesley Nunes Gonçalves, Alexandre Souto Martinez, and Odemir Martinez Bruno. Texture analysis and classification using deterministic tourist walk. *Pattern Recognition*, 43(3):685–694, March 2010.

[31] Andre L. Barbieri, G.F. de Arruda, Francisco a. Rodrigues, Odemir M. Bruno, and Luciano Da Fontoura Costa. An entropy-based approach to automatic image segmentation of satellite images. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 390(3):512–518, February 2011.

[32] Nikhil R Pal and Sankar K Pal. A review on image segmentation techniques. *Pattern recognition*, 26(9):1277–1294, 1993.

[33] Leo John Grady. *Space-variant computer vision: a graph-theoretic approach*. PhD thesis, Boston, MA, USA, 2004. AAI3101076.

[34] Shizuo Kakutani. Markoff process and the Dirichlet problem. *Proceedings of the Japan Academy, Series A, Mathematical Sciences*, 21(4):227–233, 1945.

[35] Peter G Doyle and J Laurie Snell. *Random walks and electric networks*, volume 22. Mathematical association of America, 1984.

[36] David Gilbarg and Neil S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer, 2001.

[37] Arnold Sommerfeld. *Partial differential equations in physics*. Academic Press, 1949.

[38] Richard Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics, Vol. 2*. Wiley-VCH, 1989.

[39] AP Riascos and José L Mateos. Long-range navigation on complex networks using lévy random walks. *Physical Review E*, 86(5):056110, 2012.

[40] Josef Stoer and Roland Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*, volume 12. Springer, 2002.

[41] Keith D Gremban. *Combinatorial preconditioners for sparse, symmetric, diagonally dominant linear systems*. PhD thesis, Carnegie Mellon University, 1996.

[42] Juanjo. Convolvulus tricolor. `http://machanguito.blogspot.com/2011_04_01_archive.html/`, 2011.

[43] Tranos Zuva, O Olugbara Oludayo, Sunday O Ojo, and Seleman M Ngwira. Image segmentation, available techniques, developments and open issues. *Canadian Journal on Image Processing and Computer Vision*, 2(3):20–29, 2011.

[44] Habib Zaidi and Issam El Naqa. Pet-guided delineation of radiation therapy treatment volumes: a survey of image segmentation techniques. *European journal of nuclear medicine and molecular imaging*, 37(11):2165–2187, 2010.

[45] Santo Fortunato. Community detection in graphs. *Physics Reports*, 486(3):75–174, 2010.

[46] M. Girvan and M. E. J. Newman. Community structure in social and biological networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 99(12):7821–7826, 2002.

[47] Andrea Lancichinetti and Santo Fortunato. Community detection algorithms: a comparative analysis. *Physical review E*, 80(5):056117, 2009.

[48] Jörg Reichardt and Stefan Bornholdt. Statistical mechanics of community detection. *Physical Review E*, 74(1):016110, 2006.

[49] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, USA.

[50] Donald Allan McQuarrie. *Statistical Mechanics*. University Science Books, 2000.

[51] Mark E. J. Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, Oxford, England, 2010.

[52] Mark E. J. Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, Oxford, England, 2010.

[53] Amanda L. Traud, Peter J. Mucha, and Mason A. Porter. Social structure of facebook networks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 391(16):4165 – 4180, 2012.

[54] Kazuyuki Tanaka. Statistical-mechanical approach to image processing. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(37):R81–R150, September 2002.

[55] Frank W. Bentrem. A Q-Ising model application for linear-time image segmentation. *Central European Journal of Physics*, 8(5):689–698, December 2009.

[56] S Peng, B Urbanc, L Cruz, B T Hyman, and H E Stanley. Neuron recognition by parallel Potts segmentation. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 100(7):3847–52, April 2003.