

文章编号: 0253-2239(2006)03-0443-8

荧光分子断层成像正向问题的并行计算*

邹 玮^{1,3} 王加俊^{1,2,3} 冯大淦^{2,3}

1 苏州大学电子信息学院, 苏州 215021
2 悉尼大学信息技术学院, 澳大利亚 悉尼
3 香港理工大学电子及资讯工程学系, 香港

摘要: 针对荧光分子断层成像中相应于激发光和发射光的两个正向方程必须串行求解的实际情况, 提出了一种可同时对两个扩散方程进行求解的并行算法。其思想是通过引入乘子矩阵对耦合方程进行解耦来实现并行计算, 并利用有限元方法进行了二维数值模拟, 将算法求解所得结果与基于串行方法, 以 Ralf B. Schulz 等提出的并行算法所得到的数值模拟结果进行了综合比较。实验表明, 该算法一方面适合于任何大小的斯托克斯频移条件, 具有更广泛的适应性; 另一方面提高了荧光分子断层成像正向问题的求解速度和精度, 从而有利于整个荧光分子断层成像的快速精确求解。

关键词: 成像系统; 荧光分子断层成像; 正向问题; 并行计算; 数值模拟

中图分类号: TP381.1 文献标识码: A

Parallel Computation of Forward Problem for Fluorescent Molecular Tomography

Zou Wei^{1,3} Wang Jiajun^{1,2,3} Feng Dagan^{2,3}

1 School of Electronics and Information Engineering, Soochow University, Suzhou 215021
2 School of Information Technologies, The University of Sydney, Sydney, Australia
3 Department of Electronic and Information Engineering, The Hong Kong Polytechnic University, Hong Kong

Abstract: For the forward problem of excitation photon and emission photon in the fluorescent molecular tomography, which is usually solved in the sequential manner, a parallel algorithm which can simultaneously solve two forward diffusion equations is proposed. The algorithm realizes parallel computation through introducing multiplier matrix and decoupling the coupled equations. Two-dimensional numerical simulation is presented with the finite element method. Then the algorithm proposed is compared with the sequential method and the parallel algorithm proposed by Ralf B. Schulz *et al.*. Experimental results show that both the speed of the forward computation and precision of the forward solutions can be improved by using the proposed algorithm, which is adaptive to any Stokes shift and has more broad application. As a result, the whole process of fluorescent molecular tomography will also benefit from it.

Key words: imaging system; fluorescent molecular tomography; forward problem; parallel computation; numerical simulation

1 引 言

荧光分子断层成像 (Fluorescent molecular tomography, FMT) 是分子成像中的一种非常重要的成像方式, 它利用波长为 650~900 nm 的近红外光进行成像^[1,2]。由于近红外光在生物组织中具有相对较低的组织吸收系数, 可以穿透数厘米。因此,

该波段的光可以用来产生断层成像所必需的投影数据。在这种成像方式中一般要使用一种荧光生化标记物 (荧光染料, 如 ICG 等) 作为对比剂, 并将其注射到生物系统中, 在外部光源 (正弦调制光、连续波、或脉冲激发光) 的激发下, 上述标记物将发出近红外光。通过对组织表面的光强的测量, 可以确定标记

* 国家自然科学基金 (30300088)、江苏省“六大人才高峰”项目和 ARC 资助课题。

作者简介: 邹 玮 (1981—), 男, 江苏苏州人, 硕士研究生, 主要从事医学成像的研究。E-mail: zouwei_198107@163.com

导师简介: 王加俊 (1969—), 男, 江苏如东人, 教授, 主要从事图像重建, 图像处理方面的研究。E-mail: jjwang@suda.edu.cn

收稿日期: 2006-04-04; 收到修改稿日期: 2006-07-03

物在组织中的分布。由于肿瘤组织中的毛细血管比正常组织丰富且新陈代谢旺盛,使得通过血管壁泄漏到细胞外空间的荧光染料更多地分布于肿瘤组织中。对于特异性荧光分子探针来说,荧光探针将更加集中地分布于探针特异性分子上。所以从荧光染料的分布就可以对肿瘤等疾病进行诊断。相对于普通的近红外光学断层成像,由于荧光对比剂的引入大大改善了所成图像的衬比度,从而大大提高了早期诊断的准确性。这种成像方式由于其没有放射性损伤以及所需的仪器相对低廉等原因,已被考虑用来进行乳腺癌和睾丸畸形的检测,以及用来对大脑皮层进行研究。

荧光断层图像的重建包含两个过程:正向过程和逆向过程^[3]。在正向过程中,根据一定的光子输运模型得出组织边界测量的理论估计值。目前,广泛用于荧光断层成像的正向模型是两个相互耦合的偏微分方程(扩散方程),其中一个相应于激发光,另一个相应于发射光。通常使用有限元法并结合一定的边界条件和初始条件来获得扩散方程的解^[4]。在逆向过程中,从一个初始分布出发,通过将理论与实际测量值间的误差进行反向传播,对光学参量(散射和吸收系数)、荧光色素的分布、以及荧光染料的寿命等量进行不断迭代更新,直到满足某种收敛准则为止。此时的光学参量、荧光色素的分布及其寿命按空间位置排列成图像即为所要重建的结果。由于在图像重建过程中要不断地对正向方程进行重复求解,因此其计算速度直接关系到图像重建的速度。另一方面,由于两个方程的耦合性,通常情况下必须先解相应于激发光的偏微分方程,然后才能解相应于发射光的方程,即两个方程必须以串行的方式求解,这就影响到正向问题求解的速度。为了提高图像重建的速度,本文提出了一种对两个方程进行并行求解的新方法。通过与传统的串行方法、Ralf B. Schulz 等^[5]提出的并行算法的比较,证明了该方法的高效性和精确性。

2 近红外荧光成像的正向模型

当把荧光染料(如 ICG)注入人体后,在外部光源所发出的激发光的照射下,组织内的荧光分子吸收了激发光子从基态跃迁到激发态,也就是从低能级跃迁到高能级。由于荧光分子在高能级上并不稳定,所以它将最终从高能级跃迁到低能级并释放出比所吸收能量稍低的光子,这就形成了荧光^[6]。利用探测器可以对上述荧光进行检测并进行成像。由于发射光子

的能量低于激发光子的能量,所以相应的发射光的频率要低于激发光的频率,也就是发射光和激发光的波长有个偏差,这就是斯托克斯(Stokes)频移^[6]。图 1 是荧光分子断层成像原理示意图。

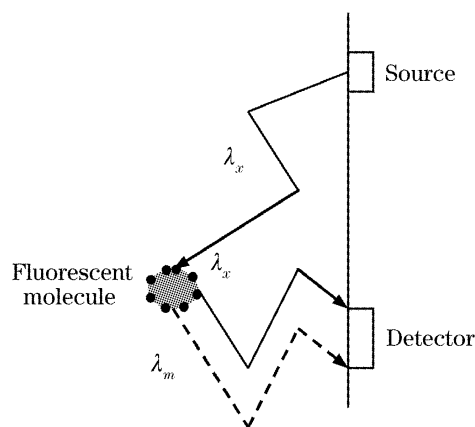


图 1 荧光分子断层成像原理示意图

Fig. 1 Schematic illustration of the principles of fluorescent molecular tomography

荧光断层成像的正向问题可归结为:已知组织体表面的光源分布,组织内部的光学参量和荧光参量的空间分布,求给定模型下的激发光和荧光的测量值^[5]。由于多重散射,光在组织中传播时将会很快丧失其相位信息,因此光在组织中更多地表现出粒子性并可以用辐射传输方程(Radiative transfer equation, RTE)来描述,该方程是对麦克斯韦方程的一种近似^[7]。辐射传输方程的计算代价非常大,在高散射、低吸收的介质中,通常采用扩散方程来描述光子在组织中的传播行为,它是辐射传输方程的 P_1 近似^[7]。即用两个扩散方程来分别描述激发光子和发射光子在组织中的输运过程^[4]:

$$-\nabla \cdot (D_x \nabla \Phi_x) + k_x \Phi_x = S_x, \quad (1)$$

$$-\nabla \cdot (D_m \nabla \Phi_m) + k_m \Phi_m = \beta \Phi_x, \quad (2)$$

其中第一个方程描述了激发光(外部光源)的传播过程,用下标 x 表示;第二个方程描述了荧光的产生和传播过程,用下标 m 表示。 ∇ 是梯度算子, S_x 是激发光源, $\Phi_{x,m}$ 是光子密度, $D_{x,m}$, $k_{x,m}$, β 分别是扩散系数,衰减系数和荧光光源系数。它们的具体定义为(频域)

$$\begin{cases} D_x = 1/3(\mu_{axi} + \mu_{axf} + \mu'_{sx}), \\ D_m = 1/3(\mu_{ami} + \mu_{amf} + \mu'_{sm}), \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} k_x = i\omega/c + \mu_{axi} + \mu_{axf}, \\ k_m = i\omega/c + \mu_{ami} + \mu_{amf}, \end{cases} \quad (4)$$

$$\beta = \eta \mu_{axf} / (1 - i\omega \tau), \quad (5)$$

其中 μ_{axi} , μ_{ami} (cm^{-1}) 是载色团的吸收系数, μ_{axf} , μ_{amf} (cm^{-1}) 是荧光团的吸收系数, μ'_{sx} , μ'_{sm} (cm^{-1}) 是

各向同性(约化)的散射系数,下标“ a ”表示吸收,“ i ”表示载色团,“ f ”表示荧光团,“ s ”表示散射, η 是荧光量子产额, τ 是荧光寿命(s), c 是光在介质中的传播速度(cm/s)。

为了确定光子的输运行为,还必须给定一定的边界条件。通常利用罗宾(Robin)边界条件:

$$\mathbf{n} \cdot (D_x \nabla \Phi_x) + b_x \Phi_x = 0, \quad (6)$$

$$\mathbf{n} \cdot (D_m \nabla \Phi_m) + b_m \Phi_m = 0, \quad (7)$$

其中 \mathbf{n} 是边界的单位外法线矢量, b_x, b_m 是 Robin 边界系数,由反射系数 R_x, R_m 来决定(无反射时为 0,全反射时为 1),当不考虑折射情况时, b_x, b_m 均为 1/2。

3 正向问题的并行求解算法

目前,求解光学层析成像通常采用的方法是基于模型的迭代图像重建(MOBIIR)^[8]。主要分为三步:1)基于一个假定的参量空间分布和正向模型来预测探测器的测量值;2)产生一个比较预测值与实际测量值的目标函数;3)调整参量空间分布直到目标函数达到最小值。因此,正向模型快速而有效的求解对于光学层析成像而言至关重要。尤其是在荧光断层成像中,涉及两个扩散方程。因此,更需要采用一种行之有效的方法进行计算。

由(1)式和(2)式可知,(1)式的解即激发光光子密度是(2)式的光源项。传统的求解方法是采用串行方式:先求解第一个方程,再把所得解代入第二个方程来求解发射光光子密度。这种方法严重影响求解正向过程的速度,从而也影响整个荧光断层成像的速度。Ralf B. Schulz 等^[5]提出了一种改进算法。首先忽略荧光团吸收系数,其次假设斯托克斯频移很小,那么在激发光和发射光波长的光学参量就近似相等,也就是 $D_x = D_m = D, \mu_{ax} = \mu_{am} = \mu_a$,从而可消除(1)式和(2)式的耦合性,使其变为独立的两个方程,易于并行计算。但这种假设通常会产生一定的误差,而且随着斯托克斯频移的增大,误差将逐步增大。因此这种算法具有一定的局限性。

本文提出了一种新的并行算法,适用于任何大小的斯托克斯频移情况,从而消除了上述方法的局限性。首先根据(1)式和(2)式中算子的线性特点,把作用在 Φ_x 和 Φ_m 上的算子视为一个整体并改写(1)式和(2)式成如下形式^[9]:

$$(-\nabla D_x \nabla + k_x) \Phi_x = S_x, \quad (8)$$

$$(-\nabla D_m \nabla + k_m) \Phi_m = \beta \Phi_x. \quad (9)$$

为了使(8)式和(9)式解耦,可设法先消除(9)式中光源项里面的因子 Φ_x 。设存在 Φ 满足

$$(-\nabla D_m \nabla + k_m) \Phi = 1, \quad (10)$$

对于(10)式,两边同乘以 $\beta \Phi_x$,可得

$$(-\nabla D_m \nabla + k_m) \Phi \cdot \beta \Phi_x = \beta \Phi_x. \quad (11)$$

根据(9)式和(11)式可知, Φ_m 是 Φ 和 Φ_x 的函数。这里令

$$\Phi_m = f(\Phi, \Phi_x), \quad (12)$$

该函数由(9)式和(11)式确定。所以整个并行模型可表示如下:

$$(-\nabla D_x \nabla + k_x) \Phi_x = S_x, \quad (13)$$

$$(-\nabla D_m \nabla + k_m) \Phi = 1, \quad (14)$$

这样,(13)式和(14)式就成为了两个独立的方程,可以并行计算。再把所得解代入(12)式求出发射光光子密度。整个求解过程避免了按先后顺序来计算两个方程所造成的时间上的大量消耗,提高了求解荧光断层成像正向问题的速度。在接下来的数值模拟中,利用矩阵方程可以很容易地求解出(12)式中的 Φ_m 。

在数值模拟时,对求解区域进行剖分,产生 N 个节点。节点光子密度和形状函数分别为

$$\Phi = [\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N]^T, \quad (15)$$

$$U = [\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N]^T, \quad (16)$$

设 V_0^h 是由 $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ 所张成的空间^[10],即 $V_0^h = \text{span}\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ 。 h 表示对原求解区域进行剖分后的近似。对任一 $v_h \in V_0^h$,有

$$v_h = \sum_{k=1}^N c_k \varphi_k, \quad (17)$$

设 $u_h = \sum_{j=1}^N \Phi_j \varphi_j$,为了在给定边界条件(6)式和(7)式的条件下,求得微分方程组(8)和(9)的弱解,将它们写成如下的积分形式^[10]:

$$a_{\Omega_h}(u_h, v_h)_{x,m} = (f_{x,m}, v_h)_{\Omega_h}, \quad (18)$$

其中

$$a_{\Omega_h}(u_h, v_h)_{x,m} = \iint_{\Omega_h} [D_{x,m}(\nabla u_h \cdot \nabla v_h) + k_{x,m} u_h v_h] d\Omega + \int_{\Gamma_h} b_{x,m} u_h v_h ds, \quad (19)$$

$$(f_{x,m}, v_h)_{\Omega_h} = \iint_{\Omega_h} f_{x,m} v_h d\Omega, \quad (20)$$

$$f_x = S_x, \quad f_m = \beta \Phi_x, \quad (21)$$

Ω_h 是平面有界区域, Γ_h 是平面有界区域 Ω_h 的边界,(18)式可写成如下的矩阵形式^[10]:

$$\mathbf{A}_{x,m} \Phi_{x,m} = \mathbf{S}_{x,m}, \quad (22)$$

其中

$$\mathbf{S}_{x,m} = \begin{bmatrix} (f_{x,m}, \varphi_1)_{\Omega_h} \\ \vdots \\ (f_{x,m}, \varphi_N)_{\Omega_h} \end{bmatrix}, \quad (23)$$

$$\mathbf{A}_{x,m} = \begin{bmatrix} a_{\Omega_h}(\varphi_1, \varphi_1)_{x,m} & \cdots & a_{\Omega_h}(\varphi_N, \varphi_1)_{x,m} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{\Omega_h}(\varphi_1, \varphi_N)_{x,m} & \cdots & a_{\Omega_h}(\varphi_N, \varphi_N)_{x,m} \end{bmatrix}, \quad (24)$$

称为刚度矩阵,其矩阵元由下式计算:

$$a_{\Omega_h}(\varphi_i, \varphi_j)_{x,m} = \iint_{\Omega_h} D_{x,m} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j d\Omega + \iint_{\Omega_h} k_{x,m} \varphi_i \varphi_j d\Omega + \int_{\Gamma_h} b_{x,m} \varphi_i \varphi_j ds, \quad (25)$$

由于(25)式中包含三项,因此(22)式可写成如下矩阵方程:

$$(\mathbf{D}_x + \mathbf{K}_x + \mathbf{B}_x) \Phi_x = \mathbf{S}_x, \quad (26)$$

$$(\mathbf{D}_m + \mathbf{K}_m + \mathbf{B}_m) \Phi_m = \mathbf{S}_m, \quad (27)$$

其中,总刚度矩阵 $\mathbf{A}_{x,m} = (\mathbf{D}_{x,m} + \mathbf{K}_{x,m} + \mathbf{B}_{x,m})$, $\mathbf{D}_{x,m}$, $\mathbf{K}_{x,m}$ 和 $\mathbf{B}_{x,m}$ 均为 $N \times N$ 维的矩阵, $\Phi_{x,m}$ 和 $\mathbf{S}_{x,m}$ 均为 $N \times 1$ 维的矩阵,矩阵 $\mathbf{D}_{x,m}$, $\mathbf{K}_{x,m}$ 和 $\mathbf{B}_{x,m}$ 的元素计算公式如下:

$$D_{ij} = \iint_{\Omega_h} D_{x,m} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j d\Omega, \quad (28)$$

$$K_{ij} = \iint_{\Omega_h} k_{x,m} \varphi_i \varphi_j d\Omega, \quad (29)$$

$$B_{ij} = \int_{\Gamma_h} b_{x,m} \varphi_i \varphi_j ds. \quad (30)$$

可以证明(见附录)矩阵 $\mathbf{A}_{x,m}$ 是对称且正定的,所以矩阵 $(\mathbf{D}_m + \mathbf{K}_m + \mathbf{B}_m)$ 是对称且正定的,因此存在确定的矩阵 \mathbf{H} 满足^[11]

$$(\mathbf{D}_m + \mathbf{K}_m + \mathbf{B}_m) \mathbf{H} = \mathbf{E}, \quad (31)$$

其中 \mathbf{E} 是 $N \times N$ 维的单位阵, \mathbf{H} 是 $N \times N$ 维矩阵。结合(26)式和(31)式,最终并行模型所对应的矩阵方程为:

$$(\mathbf{D}_x + \mathbf{K}_x + \mathbf{B}_x) \Phi_x = \mathbf{S}_x, \quad (32)$$

$$(\mathbf{D}_m + \mathbf{K}_m + \mathbf{B}_m) \mathbf{H} = \mathbf{E}. \quad (33)$$

求解发射光光子密度 Φ_m 可根据 $\Phi_m = \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_m$, 这是矩阵和向量相乘,易于计算,且耗时极短。(33)式的求解则转化为求矩阵的逆,由于矩阵 $(\mathbf{D}_m + \mathbf{K}_m + \mathbf{B}_m)$ 对称且正定,这种特殊矩阵可采用

相应的快速求解方法来计算。因此,整个计算过程节省了大量时间。和文献[5]不同,本文所提出的算法没有基于任何近似假设,所以可达到很高的精度。

4 实验结果和讨论

在进行数值模拟时,正向问题利用有限元方法(Finite element method, FEM)进行求解。在三角元网格剖分时,需满足如下条件:1)不同小三角形之间内部不重叠;2)任一顶点不是其他小三角形边上的内点^[10]。

本文采用如图2所示的二维圆形组织体进行数值模拟,利用三角元进行网格剖分,从原点中心向四周辐射状剖分圆环,节点数随剖分圆环的半径线性递增。这样既满足了上述条件,又可达到一定精度。

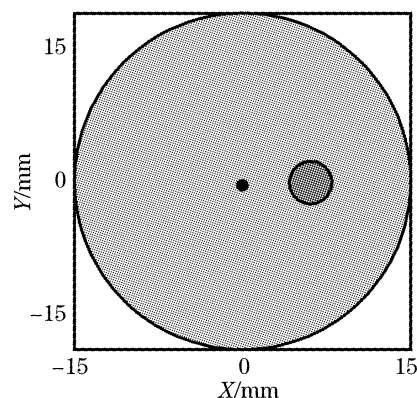


图2 组织体模型

Fig. 2 Model of tissue

圆形组织体半径为 15 mm, 在距离圆心 6 mm 的零度角位置插入一个半径为 2 mm 的圆形非均匀体,这里剖分的圆环数取 15,则相应的总节点数为 721,边界节点数为 90。整个实验利用中心激发光源,在主频 1.6 GHz 的 Pentium 4 CPU, 256 MB 内存的计算机上进行模拟,其中采用的数据类型是时间累积光子密度(即 $\omega=0$ 时,所对应的 Φ)。

仿真模型中光学参量和荧光参量的分布如表 1 所示。

图 3 为中心激励下激发光的时间累积光子密度分布,图 4 为发射光的时间累积光子密度分布。由于荧光分子大量聚集在半径为 6 mm 的零角度位置附近,它们受激发光的激发而形成了荧光光源,相当于二次光源,因此从图 4 中可看出具有峰值。而由于发射光光子密度与激发光光子密度成正比,所以在中心位置也存在峰值。由此可见,发射光光子密度的分布呈现出多峰值的特点,而在单光源情况下的激发光光子密度分布则表现为单峰值。

表 1 光学参量和荧光参量
Table 1 Optical parameter and fluorescent parameter

Excitation light	$\mu_{axi} / \text{mm}^{-1}$	$\mu_{axf} / \text{mm}^{-1}$	$\mu'_{sx} / \text{mm}^{-1}$	η	τ / ns
Background	0.0313	0.0039	3.0	0.16	0.6
Heterogeneity	0.0313	0.39	3.0	0.16	0.6
Fluorescent light	$\mu_{ani} / \text{mm}^{-1}$	$\mu_{anf} / \text{mm}^{-1}$	$\mu'_{sn} / \text{mm}^{-1}$	η	τ / ns
Background	0.025	0.00253	2.0	0.16	0.6
Heterogeneity	0.025	0.0253	2.0	0.16	0.6

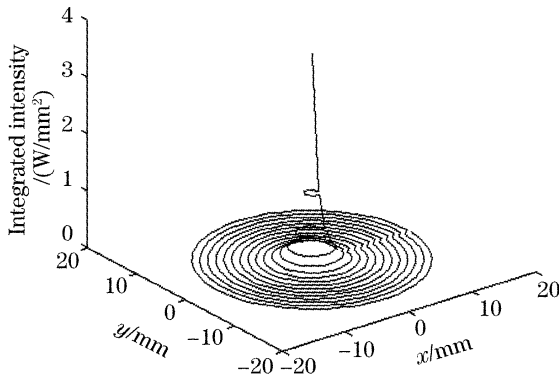


图 3 激发光时间累积光子密度分布

Fig. 3 Distribution of time integrated intensity of excitation photon

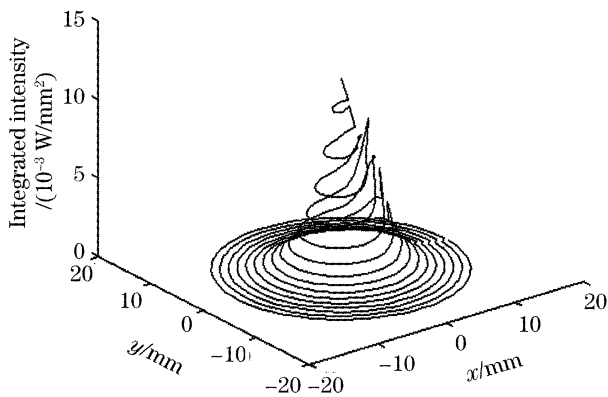


图 4 发射光时间累积光子密度分布

Fig. 4 Distribution of time integrated intensity of emission photon

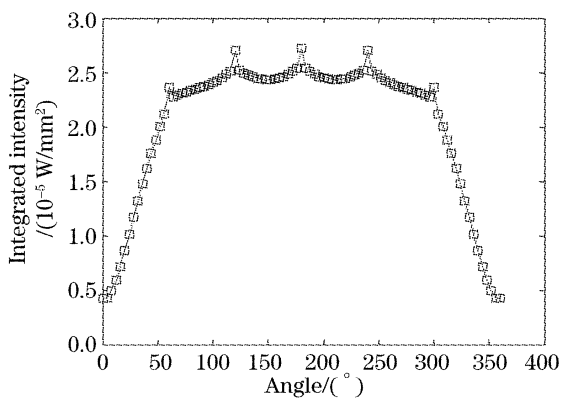


图 5 激发光在边界上的时间累积光子密度分布

Fig. 5 Distribution of time integrated intensity of excitation photon on the boundary

图 5 为激发光在组织体边界上的时间累积光子密度分布。由于在零度角位置存在一个非均匀体，具有较大的散射性，在散射处会形成堆积，因此，在靠近其边界处，相应的时间累积光子密度会增加，形成峰值，而在远离其边界处，则相应减少。

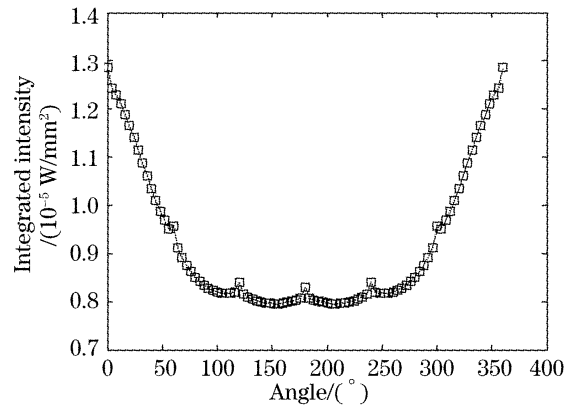


图 6 发射光在边界上的时间累积光子密度分布

Fig. 6 Distribution of time integrated intensity of emission photon on the boundary

利用本文提出的并行算法与串行算法计算发射光时间累积光子密度理论上不存在误差，通常误差是由数值计算引起的。而利用 Schulz 并行算法与串行算法计算发射光时间累积光子密度则存在一定的理论误差，即

$$\Delta \Phi_m = \frac{(D_x + K'_x + B_x)^{-1} \cdot S_x \cdot \eta}{1 - i\omega \tau} - \frac{\Phi_x \cdot \eta}{1 - i\omega \tau} - (D_m + K_m + B_m)^{-1} \cdot \beta \Phi_x,$$

其中 K'_x 是忽略荧光团吸收系数后所形成的刚度矩阵。利用相对误差进行误差分析，即 $\epsilon = \frac{x - x_0}{x_0} \times 100\%$ ，其中 ϵ 是相对误差， x 是测量值， x_0 是真实值。

图 7 为利用本文所提出的并行算法与传统串行算法计算所得到的边界上时间累积光子密度的误差曲线图。其中，最大相对误差不超过 $\pm 0.001\%$ 。在

靠近非均匀体的区域,相应的误差较大。图 8 为利用 Ralf B. Schulz 等所提出的并行算法与传统串行算法计算所得到的边界上时间累积光子密度的误差曲线图。最大相对误差约 -69%。其中,在靠近非均匀体的区域,相应的误差较小。从另外一个角度也可以看出,Ralf B. Schulz 算法仅适合于斯托克斯频移较小的情况。对于较大的斯托克斯频移,则会产生很大误差。

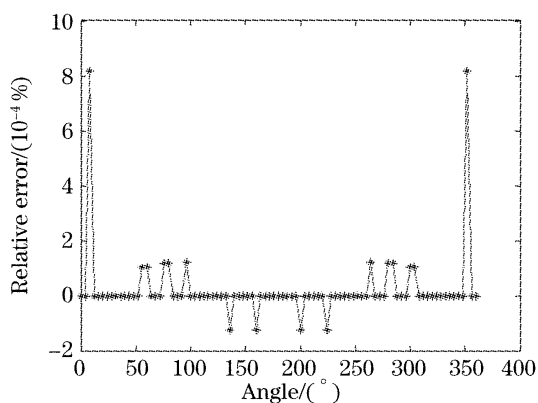


图 7 本算法与串行方法的比较

Fig. 7 Result comparison of this algorithm and sequential algorithm

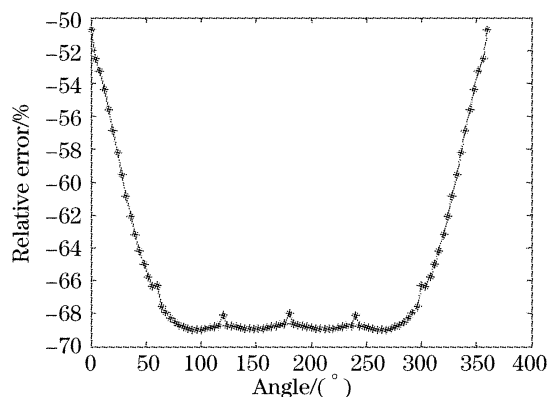


图 8 Schulz 并行算法与串行方法的比较

Fig. 8 Result comparison of Schulz's parallel algorithm and sequential algorithm

本文对串行方法,Ralf B. Schulz 等所提出的并行算法以及本文所提出的并行算法进行了综合比较和分析,各项性能指标见表 2。

表 2 算法的性能比较

Table 2 Comparison for performance of the algorithms

	Computation time / s	Maximum relative error / %	Validation condition
Sequential algorithm	167	0	For any case
Schulz's parallel algorithm	87	-69	With small Stokes shift
This algorithm	109	0.0008	For any case

从计算所需时间上来看,本文算法虽然比 Schulz 算法的耗时稍长,但相对于传统的串行方法而言,已大为减少。从计算精度上来看,在斯托克斯频移较大的情况下,本文算法的计算精度远高于 Schulz 算法,因此本文的算法具有更广泛的适应性。

5 结 论

本文通过乘子矩阵的引入消除了两个扩散方程的耦合性,实现了并行计算,并基于有限元方法进行数值模拟。与传统的串行方法相比,该算法使求解过程所花的时间明显减少,同时计算精度也得到很好保证,能将误差控制在一个很小的范围内;由于 Ralf B. Schulz 所提出的并行算法更适用于斯托克斯频移较小的情况,当斯托克斯频移增大时,其求解误差也随之增加。与之相比较,本算法具有更加广泛的适应性。因而,本算法对于提高整个荧光分子断层成像的速度和精度都是大有裨益的。在今后的工作中,将该并行算法应用于荧光分子断层图像的重建,从而有效提高图像重建的质量和速度。

参 考 文 献

- Ralf B. Schulz, Jorge Ripoll, Vasilis Ntziachristos. Experimental fluorescence tomography of tissues with noncontact measurements[J]. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 2004, **23**(4): 492~500
- Edward E. Graves, Jorge Ripoll, Ralph Weissleder *et al.*. A submillimeter resolution fluorescence molecular imaging system for small animal imaging[J]. *Med. Phys.*, 2003, **30**(5): 901~911
- D. Y. Paithankar, A. U. Chen, B. W. Pogue *et al.*. Imaging of fluorescent yield and lifetime from multiply scattered light reemitted from random media[J]. *Appl. Opt.*, 1997, **36**(10): 2260~2272
- Francesco Fedele, Margaret J. Eppstein, Jeffrey P. Laible *et al.*. Fluorescence photon migration by the boundary element method[J]. *J. Computational Physics*, 2005, **210**(1): 109~132
- Ralf B. Schulz, Jorg Peter, Wolfhard Semmler *et al.*. Independent modeling of fluorescence excitation and emission with the finite element method [J]. in Proceedings of OSA Biomedical Topical Meetings, Miami, Fla, USA, April, 2004
- Moinuddin Hassan, Brenda A. Klaunberg. Biomedical applications of fluorescence imaging in vivo [J]. *Comparative Medicine*, 2004, **54**(6): 635~644
- A. P. Gibson, J. C. Hebden, S. R. Arridge. Recent advances in diffuse optical imaging [J]. *Phys. Med. Biol.*, 2005, **50**(4): R1~R43
- A. Y. Bluestone, M. Stewart, J. Lasker *et al.*. Three-dimensional optical tomographic brain imaging in small animals, part 1: hypercapnia[J]. *J. Biomedical Optics*, 2004, **9**(5): 1046~1062
- Alexander D. Klose, Uwe Netz, Jurgen Beuthan *et al.*. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer-Part 1: forward model[J]. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2002, **72**(5): 691~713
- Lin Qun. *Basic Textbook of Numerical Solution Method for Differential Equation* [M]. the second edition, Beijing: Science Press, 2003. 120~129 (in Chinese)

林 群. 微分方程数值解法基础教程[M]. 第二版, 北京: 科学出版社, 2003. 120~129

11 Li Junjie. Research on positive definiteness of matrix[J]. *Practice and Cognition of Mathematics*, 1995, (2): 59~63 (in Chinese)

李俊杰. 论复矩阵的正定性[J]. *数学实践与认识*, 1995, (2):

59~63

12 Pang Xinqin. The research on positive definite complex matrix[J]. *J. Shandong University*, 2003, **38**(3): 66~69 (in Chinese)

庞新琴. 半正定复矩阵的研究[J]. *山东大学学报*, 2003, **38**(3): 66~69

附录：关于矩阵 $A_{x,m}$ 对称正定性的证明

1 对称性

根据(24)式,总刚度矩阵为

$$A_{x,m} = \begin{bmatrix} a_{\Omega_h}(\varphi_1, \varphi_1)_{x,m} & \cdots & a_{\Omega_h}(\varphi_N, \varphi_1)_{x,m} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{\Omega_h}(\varphi_1, \varphi_N)_{x,m} & \cdots & a_{\Omega_h}(\varphi_N, \varphi_N)_{x,m} \end{bmatrix},$$

其中,

$$a_{\Omega_h}(\varphi_i, \varphi_j)_{x,m} = \iint_{\Omega_h} D_{x,m} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j \, d\Omega + \iint_{\Omega_h} k_{x,m} \varphi_i \varphi_j \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} b_{x,m} \varphi_i \varphi_j \, ds.$$

由该定义,显然有

$$a_{\Omega_h}(\varphi_i, \varphi_j)_{x,m} = a_{\Omega_h}(\varphi_j, \varphi_i)_{x,m},$$

所以 $A_{x,m}^T = A_{x,m}$, 即矩阵 $A_{x,m}$ 是对称的。

2 正定性

为了证明矩阵 $A_{x,m}$ 的正定性,首先引进范数^[10]:

$$\|f\|_{1,\Omega_h} = \left\{ \iint_{\Omega_h} [f^2 + (f'_x)^2 + (f'_y)^2] \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} f^2 \, ds \right\}^{1/2}.$$

其次引进正定复矩阵的概念^[12]:即对于复矩阵 $A \in C^{N \times N}$,若对任意 $X \in C^N, X \neq 0$, 都有 $Re(X^H A X) > 0$, 则称矩阵 A 为正定复矩阵。

设 $V = (c_1, \dots, c_N)^T \in C^N$, 且 $V \neq 0, V^H$ 表示 V 的共轭转置矩阵, \bar{c} 表示复数 c 的共轭复数, $Re(x)$ 表示复数 x 的实部, 则有

$$Re(V^H A_{x,m} V) = Re \left[\sum_{i,j=1}^N a_{\Omega_h}(\varphi_i, \varphi_j)_{x,m} \bar{c}_i c_j \right] = Re \left[a_{\Omega_h} \left(\sum_{i=1}^N \bar{c}_i \varphi_i, \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j \right)_{x,m} \right] = Re[a_{\Omega_h}(\bar{v}_h, v_h)_{x,m}],$$

$$Re[a_{\Omega_h}(\bar{v}_h, v_h)_{x,m}] = Re \left\{ \iint_{\Omega_h} \left\{ D_{x,m} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] + k_{x,m} |v_h|^2 \right\} \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} b_{x,m} |v_h|^2 \, ds \right\} \geq$$

$$\gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 \, ds \right\} =$$

$$\frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 \, ds \right\} + \frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 \, ds \right\},$$

其中 $\gamma_1 = \min[1, (b_{x,m}/D_{x,m})_{\min}] D_{x,m, \min}$ 。

令 $v_h = a + bi, a, b \in R$, 则

$$\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 = \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[4a^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 + 4b^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + 4a^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + 4b^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 \right] \geq$$

$$\frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[4a^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 + 4b^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + 8 \left| ab \frac{\partial b}{\partial x} \cdot \frac{\partial a}{\partial x} \right| \right] \geq$$

$$\frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[4a^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 + 4b^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + 8ab \frac{\partial b}{\partial x} \cdot \frac{\partial a}{\partial x} \right],$$

$$\left(\frac{\partial |v_h|}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{\partial \sqrt{a^2 + b^2}}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[\frac{\partial(a^2)}{\partial x} + \frac{\partial(b^2)}{\partial x} \right]^2 = \frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[2a \frac{\partial a}{\partial x} + 2b \frac{\partial b}{\partial x} \right]^2 =$$

$$\frac{1}{4(a^2 + b^2)} \left[4a^2 \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)^2 + 4b^2 \left(\frac{\partial b}{\partial x} \right)^2 + 8ab \frac{\partial b}{\partial x} \cdot \frac{\partial a}{\partial x} \right],$$

所以

$$\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 \geq \left(\frac{\partial |v_h|}{\partial x} \right)^2,$$

同理可得

$$\left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \geq \left(\frac{\partial |v_h|}{\partial y} \right)^2,$$

根据 Friedrichs 不等式^[10]:

$$\iint_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma} v^2 ds \geq c \iint_{\Omega} v^2 d\Omega,$$

其中 c 为常数且大于零, 所以

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[a_{\Omega_h}(\bar{v}_h, v_h)_{x,m}] &\geq \frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left(\frac{\partial |v_h|}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial |v_h|}{\partial y} \right)^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 ds \right\} + \\ &\frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 ds \right\} \geq \\ &\frac{1}{2} \gamma_1 c \iint_{\Omega_h} |v_h|^2 d\Omega + \frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 ds \right\} = \\ &\frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ c \iint_{\Omega_h} |v_h|^2 d\Omega + \iint_{\Omega_h} \left[\left| \frac{\partial v_h}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial v_h}{\partial y} \right|^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 ds \right\} \geq \\ &\frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ c \iint_{\Omega_h} |v_h|^2 d\Omega + \iint_{\Omega_h} \left[\left(\frac{\partial |v_h|}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial |v_h|}{\partial y} \right)^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma_h} |v_h|^2 ds \right\} \geq \gamma \|v_h\|_{1,\Omega_h}^2 \end{aligned}$$

其中 $\gamma = \frac{1}{2} \gamma_1 \min(1, c)$.

所以 $\operatorname{Re}(\mathbf{V}^H \mathbf{A}_{x,m} \mathbf{V}) = \operatorname{Re}[a_{\Omega_h}(\bar{v}_h, v_h)_{x,m}] \geq \gamma \|v_h\|_{1,\Omega_h}^2 > 0, \forall \mathbf{V} \neq 0$, 所以矩阵 $\mathbf{A}_{x,m}$ 是正定的。
证毕。