

## 快速多极边界元法用于扩散光学断层成像研究\*

许军 谢文浩 邓勇<sup>†</sup> 王侃 罗召洋 龚辉

(华中科技大学, 武汉光电国家实验室(筹)-华中科技大学 Britton Chance 生物医学光子学研究中心,

生物医学光子学教育部重点实验室, 武汉 430074)

(2012年10月29日收到; 2012年11月26日收到修改稿)

在求解扩散光学断层成像中的正向问题时, 目前普遍采用有限元法, 但是随着实际模型规模的增大, 有限元法的计算量问题日益显著, 而边界元法则由于可以降低计算维度使计算量减少而备受关注. 本文以均匀的高散射介质为模型, 研究了将快速多极边界元法用于扩散光学断层成像的正向问题. 快速多极边界元法利用核函数的多极展开, 将常规边界元法中系数矩阵和迭代矢量的乘积项等价于相应四叉树结构的一次递归, 再结合广义最小残量法进行迭代求解. 将计算结果和蒙特卡罗法的模拟结果进行了比较, 表明利用快速多极边界元法的模拟结果和蒙特卡罗法的结果有很好的—致性. 研究结果验证了快速多极边界元法可以用于扩散光学断层成像, 为其大规模和实时成像带来可观的前景.

**关键词:** 扩散光学断层成像, 边界元法, 快速多极边界元法**PACS:** 42.30.Wb, 87.57.nf**DOI:** 10.7498/aps.62.104204

## 1 引言

扩散光学断层成像是利用穿过组织的漫射光重建内部吸收系数和散射系数的一种成像技术, 由于属于漫射光成像方式, 它具有较光学相干断层成像 (optical coherence tomography, OCT) 等其他成像技术更大的成像深度. 越来越多的成果表明扩散光学断层成像技术具有极大的实际应用潜力, 其重要应用包括乳房肿瘤早期诊断<sup>[1]</sup>、新生儿脑发育监护<sup>[2]</sup>等.

扩散光学断层成像分为正向和逆向问题两部分. 正向问题基于组织内的光传输模型, 如辐射传输方程 (radiative transfer equation, RTE) 或扩散近似条件下的扩散方程 (diffusion equation, DE) 等, 主要用来获得源和探测的映射关系——雅可比矩阵 (Jacobi matrix); 逆向问题是一个反演问题, 其处理方法分为两种, 一种是基于将问题线性化成方程组的求解, 而另一种则是将问题变分化, 再利用最小二乘的方法来迭代求解.

正向问题中, 无论针对辐射传输还是扩散近似等模型, 有限元法都被广为采用<sup>[3]</sup>. 有限元法利用变分原理, 建立与扩散方程初值问题等价的积分方程, 然后对整个高散射介质进行整体离散以获得等价的有限元方程组, 最后求解该方程组获得相应解. 有限元法在整体离散后将每个单元都作为独立变量, 要获得合适精度则意味着需要使用足够精细的剖分网格, 即更大的变量规模, 这将极大地增加前逆向问题中的计算量和病态性. 随着越来越复杂的实际介质和几何模型的出现, 有限元法不得不在精度和计算量间取舍, 这给边界元法在该领域的发展带来了契机.

边界元法作为有限元法的衍生, 使用时无需剖分整个兴趣区域, 而只对该区域的边界进行剖分, 结合基本解和格林公式建立边界积分方程, 求解此方程即可获得边界处的解, 对于感兴趣区域的内部值则使用一种解析的格林函数方式求解. 相对于有限元法, 显然这种能够降低计算维度的方法将大大缩小计算规模. 目前, 该领域学者们的关注方向多为有限元-边界元耦合<sup>[4,5]</sup>和快速多极边界元法<sup>[6]</sup>

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61078072)、国家科技支撑计划 (批准号: 2012BAI23B02) 和国际科技合作与交流专项 (批准号: 2010DFR30820) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: ydeng@mail.hust.edu.cn

(fast multipole boundary element method, FM-BEM), 其中, 快速多极边界元法结合了边界元法和快速多极子法 (fast multipole method, FMM), 它可以很大程度提高边界元方程的求解速率, 毋庸置疑具有卓越的优势, 也受到了多数学者的青睐 [7]. 本文以均匀高散射介质为组织模型, 研究了将快速多极边界元法用于扩散光学断层成像的正向问题.

## 2 方法

### 2.1 边界元方程的建立

扩散光学断层成像的正向模型多使用扩散方程, 其稳态形式为

$$-\nabla \cdot \kappa(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) + \mu_a(\mathbf{r}) \cdot \Phi(\mathbf{r}) = q(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中,  $\Phi(\mathbf{r})$  为  $\mathbf{r}$  处的光子密度,  $\mu_a(\mathbf{r})$  为该处的吸收系数, 而  $q(\mathbf{r})$  为光源项.  $\kappa(\mathbf{r})$  为扩散系数, 其表达式为

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{3(\mu_a(\mathbf{r}) + \mu_s(\mathbf{r}) \cdot (1-g))}, \quad (2)$$

其中,  $\mu_s(\mathbf{r})$  为  $\mathbf{r}$  处的散射系数,  $g$  为散射各向异性因子. 边界处应用 Robin 边界条件, 表达式如下:

$$\Phi(\mathbf{r}) + 2\kappa(\mathbf{r}) \cdot \frac{1+R_f}{1-R_f} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad \forall \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (3)$$

其中,  $R_f$  为扩散传输内反射系数, 根据 Egan 和 Hilgeman 从菲涅耳反射定律得到曲线的多项式拟合近似为 [8]:  $R_f \approx -1.4399n^{-2} + 0.7099n^{-1} + 0.6681 + 0.0636n$ , 公式当中的  $n$  为组织体相对环境的相对折射率. (3) 式可进一步整理写成:

$$\Phi(\mathbf{r}) + 2\alpha \cdot \kappa(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (4)$$

其中  $\alpha = \frac{1+R_f}{1-R_f}$  是一个与边界折射率失配程度有关的常系数. 在此散射介质中, 对于均匀的高散射的圆形组织模型  $\Omega$ , 边界为  $\Gamma$ , 其组织光学参数分别为  $\mu_a$  和  $\mu_s$ , (1) 式可具体写成如下亥姆霍兹方程形式:

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) - \omega^2 \cdot \Phi(\mathbf{r}) = -q, \quad (5)$$

其中,

$$\begin{cases} \omega^2 = \frac{\mu_a}{\kappa}, \\ q = \frac{q(\mathbf{r})}{\kappa(\mathbf{r})}, \end{cases} \quad (6)$$

(5) 式的基本解满足如下方程:

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \omega^2 \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7)$$

将 (5) 式中  $\mathbf{r}$  换成  $\mathbf{r}'$ , 并让 (7) 式乘以  $\Phi(\mathbf{r}')$ , (5) 式乘以  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , 然后两式左右分别相减, 得

$$\begin{aligned} & \Phi(\mathbf{r}') \cdot \nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}') \\ &= -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \Phi(\mathbf{r}') + \frac{q(\mathbf{r}')}{\kappa(\mathbf{r}')} \cdot G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (8)$$

定义如下变量  $U$  和  $V$ , 其物理意义为光子密度和光流量:

$$\begin{cases} U(\mathbf{r}) = \Phi|_{\Gamma}(\mathbf{r}), \\ V(\mathbf{r}) = \kappa(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial \Phi|_{\Gamma}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}}. \end{cases} \quad (9)$$

于是边界  $\Gamma$  上满足的 Robin 边界条件 (4) 式可以写成:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\alpha} \cdot U(\mathbf{r}). \quad (10)$$

将 (8) 式在区域  $\Omega$  内对  $\mathbf{r}'$  积分, 结合格林第二公式可得如下积分方程:

$$\begin{aligned} & \Phi(\mathbf{r}) + \int_{\Gamma} \left( \partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot U(\mathbf{r}') \right. \\ & \left. - \frac{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\kappa(\mathbf{r}')} \cdot V(\mathbf{r}') \right) dS(\mathbf{r}') = Q|_{\Gamma}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (11)$$

其中, 光源项  $Q|_{\Gamma}(\mathbf{r})$  的表达式为

$$Q|_{\Gamma}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} \frac{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\kappa(\mathbf{r}')} \cdot q(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \in \Gamma. \quad (12)$$

为了获得边界积分方程, 需要将  $\mathbf{r}$  移至边界处, 这时会出现畸点问题, 可以将 (11) 式写成如下边界积分方程式 [9]:

$$\begin{aligned} & C^+(\mathbf{r}) \cdot U(\mathbf{r}) + \int_{\Gamma-\sigma^+} \left( \partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot U(\mathbf{r}') \right. \\ & \left. - \frac{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\kappa(\mathbf{r}')} \cdot V(\mathbf{r}') \right) dS(\mathbf{r}') = Q|_{\Gamma}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (13)$$

$C^+(\mathbf{r})$  为与边界形状相关的常数, 对于光滑边界取 0.5,  $\sigma^+$  为半径趋向于 0 的半圆, 而  $Q|_{\Gamma}(\mathbf{r})$  为光源于边界上  $\mathbf{r}$  处的积分响应. 结合 (10) 和 (13) 式可以获得如下边界元方程:

$$\begin{cases} \left[ \frac{1}{2} \mathbf{I} + \mathbf{A} + \frac{1}{2\alpha} \mathbf{B} \right] \cdot \mathbf{U} = \mathbf{Q}|_{\Gamma}, \\ \mathbf{V} = -\frac{1}{2\alpha} \cdot \mathbf{U}, \end{cases} \quad (14)$$

其中,  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$  为定义的辅助矩阵:

$$\begin{cases} \mathbf{A} = \int_{\Gamma} \partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dS(\mathbf{r}'), \\ \mathbf{B} = \int_{\Gamma} \frac{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\kappa(\mathbf{r}')} dS(\mathbf{r}'). \end{cases} \quad (15)$$

### 2.2 快速多极边界元法基本思想

快速多极边界元法的基本思想是利用快速多极子法来加速计算边界积分方程中包含核函数和边界变量的积分, 如 (13) 式.

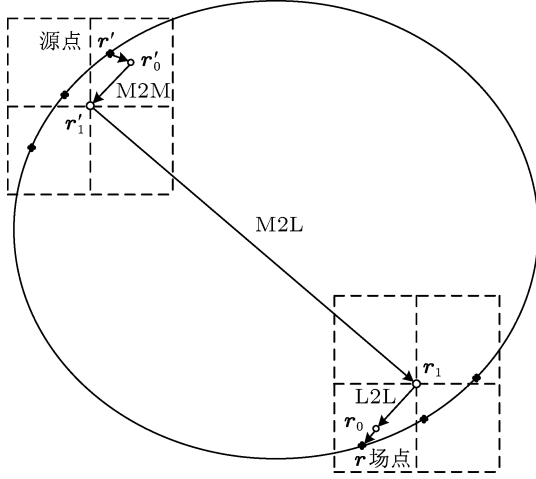


图1 快速多极边界元法原理图

如图 1 所示, 源点  $r'$  对场点  $r$  的响应形式为基本解  $G(r, r')$ , 可做如下展开 [10]:

$$G(r, r') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\omega\gamma) = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} O_n(r - r'_0) I_{-n}(r' - r'_0), \quad (16)$$

该式的展开条件为  $|r' - r'_0| < |r - r'_0|$ , 其中  $\omega$  为波数,  $r'_0$  为邻近  $r'$  的展开点.  $H_0^{(1)}$  为第一类汉克尔函数, 其中辅助函数  $O_n$  和  $I_n$  定义如下:

$$\begin{cases} I_n(r) = (-i)^n J_n(\omega\gamma) e^{in\theta} \\ O_n(r) = i^n H_0^{(1)}(\omega\gamma) e^{in\theta} \end{cases} \quad (17)$$

函数中的  $(\gamma, \theta)$  为点  $r$  的极坐标. 由此可以推导出法向倒数  $\partial G / \partial n$  ( $F$  核函数) 为

$$F(r, r') = \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} O_n(r - r'_0) \frac{\partial I_{-n}(r' - r'_0)}{\partial n(r')}, \quad (18)$$

其中,

$$\frac{\partial I_{-n}(r' - r'_0)}{\partial n(r')} = \frac{(-i)^n \omega}{2} \left[ J_{n+1}(\omega\gamma) e^{i\delta} - J_{n-1}(\omega\gamma) e^{-i\delta} \right] e^{in\theta}, \quad (19)$$

其中,  $\delta$  为从  $r'_0$  到  $r'$  的向量  $r$  同  $r'$  点外法向量  $n(r')$  的夹角,  $J$  为第一类贝塞尔函数. 结合 (16) 式, 将 (13) 式中关于核函数和边界变量的积分写成如

下形式:

$$\begin{cases} \int_{S_c} G(r, r') V(r') dS(r') \\ = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} O_n(r - r'_0) \cdot M_n(r'_0), \\ \int_{S_c} F(r, r') U(r') dS(r') \\ = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} O_n(r - r'_0) \cdot \tilde{M}_n(r'_0), \end{cases} \quad (20)$$

其中,  $U(r')$  为  $r'$  点处的光子密度,  $V(r')$  为相应法向导数,  $M_n(r'_0)$  和  $\tilde{M}_n(r'_0)$  称为  $r'_0$  点的多极扩展系数, 分别对应不同边界类型, 表达式为:

$$\begin{cases} M_n(r'_0) = \frac{i}{4} \int_{S_c} I_{-n}(r' - r'_0) \cdot V(r') dS(r'), \\ \tilde{M}_n(r'_0) = \frac{i}{4} \int_{S_c} \frac{\partial I_{-n}(r' - r'_0)}{\partial n(r')} \cdot U(r') dS(r'), \end{cases} \quad (21)$$

(21) 式计算完  $r'_0$  点的多极扩展系数后, 通过多极扩展系数的展开传递 (M2M) 可求得  $r'_1$  点的多极扩展系数. 多极展开传递直至展开的距离条件不再满足, 图中以  $r'_1$  点示意传递的终点. 传递公式如下:

$$M_n(r'_1) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} I_{n-m}(r'_0 - r'_1) \cdot M_m(r'_0), \quad (22)$$

求得  $r'_1$  点的多极扩展系数后, 利用多极扩展系数向局部扩展系数的传递 (M2L) 公式传递其贡献至  $r$  的邻近  $r_1$  点:

$$L_n(r_1) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (-1^m) O_{n-m}(r_1 - r'_1) \cdot M_m(r'_1). \quad (23)$$

为了求解  $r$  点处的局部扩展系数, 将  $r_1$  向  $r_0$  传递, 传递使用到局部扩展系数的传递公式 (L2L):

$$L_n(r_0) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} I_m(r_0 - r_1) \cdot L_{n-m}(r_1). \quad (24)$$

同样, 若以  $r_0$  点为最终传递点, 求得  $r_0$  点的局部扩展系数后利用该局部扩展系数针对不同边界类型, 可以按下式计算 (13) 式中包含核函数和边界变量的积分:

$$\begin{cases} \int_{S_c} G(r, r') \cdot V(r') dS(r') \\ = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} L_n(r_0) \cdot I_{-n}(r - r_0), \\ \int_{S_c} \partial G(r, r') \cdot U(r') dS(r') \\ = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} L_n(r_0) \cdot I_{-n}(r - r_0), \end{cases} \quad (25)$$

到此求得了源点  $r'$  对场点  $r$  的积分贡献, 即 (14) 式左边系数矩阵同迭代矢量乘积项中的一个元素, 而对场点  $r$  沿剖分单元遍历后可获得整个系数矩阵同迭代矢量的乘积项.

### 2.3 快速多极边界元法计算步骤

快速多极边界元法在使用广义最小残量法等迭代求解边界元方程 (14) 式时, 在其每一次迭代过程中, 使用树结构来传递求解系数矩阵与迭代矢量的乘积, 因此系数矩阵无需使用数组显示存储, 而只要通过对树结构的一次递归操作, 就可以得到乘积矢量, 而且精度可以控制 [11].

圆形模型的快速多极边界元法处理有如下步骤:

- ① 边界剖分为 16 个单元, 基于此建立层深度为 4 的树结构, 如图 2 和 4 所示;
- ② 利用边界值迭代矢量, 求解树结构中各叶子结点, 如 a 和 b 点处的多极扩展系数;
- ③ 向下遍历, 利用传递公式求得各树结点, 如 c 点处的多极扩展系数;
- ④ 向上遍历, 结合传递条件和公式求得叶子结点, 如 d 点和 e 点处的局部扩展系数, 对于所有结点的传递, 按距离条件分成三部分, 循环求解后相加, 如图 3 所示; 对于不满足传递条件等结点的贡献仍使用传统积分形式求解;
- ⑤ 利用局部扩展系数求解最终的贡献, 最后加上④中出现的不能满足传递条件结点的贡献部分获得系数矩阵同迭代向量的乘积;
- ⑥ 在迭代法中不断重复上述 5 步获得系数矩阵同迭代向量的乘积矢量, 直至迭代判据满足获得

最终解.

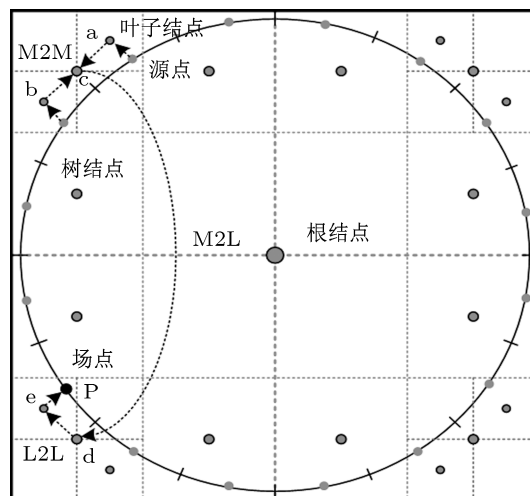


图 2 四叉树结构下的边界元模型

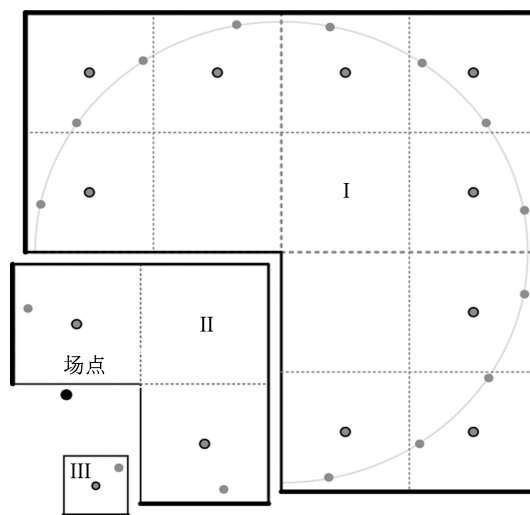


图 3 分三部分求解积分贡献

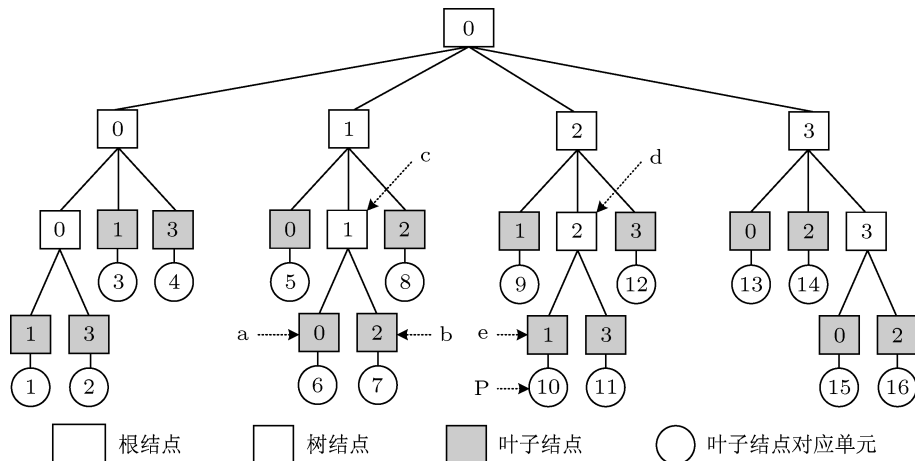


图 4 剖分后建立的四叉树结构

### 3 结果

以上述均匀高散射圆形介质为模型, 采用快速多极边界元法程序计算, 模型取参数值如下: 均匀背景吸收和散射系数分别为  $0.002 \text{ mm}^{-1}$  和  $1 \text{ mm}^{-1}$ , 各向异性因子  $g$  为  $0.01$ , 介质折射率为  $1.5$ , 半径为  $30 \text{ mm}$ , 准直光从如图 5 右方沿径向入射. 为了提高速度, 采用块对角预处理矩阵进行预处理 [12]. 快速多极边界元法计算出的光子密度分布结果如图 5 所示. 作为比较, 使用蒙特卡罗法模拟来获得参考值, 两种方法获得的结果对比如图 6 和图 7, 其中图 6 对应图 5 中剖线上的光子密度分布, 以沿入射径向的距离为横坐标, 以光子密度对数为纵坐标.

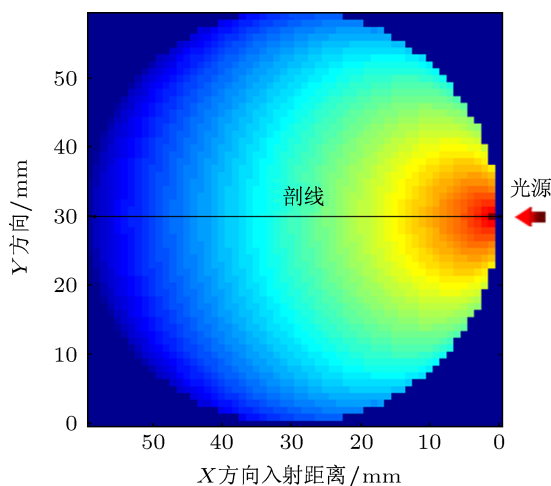


图 5 快速多极边界元法计算的光子密度 (取对数) 分布图

从图 6 可以看出, 组织模型内远离边界处的两种方法的结果符合得很好. 图 7 为等高线图比较, 同样可以看出, 两种方法的结果符合得很好.

### 4 结论

本文在二维均匀高散射介质下研究了将快速多极边界元法用于扩散光学断层成像的正向问题,

并将计算结果同蒙特卡罗方法模拟的结果做了比较. 从比较的结果来看, 在高散射介质中快速多极边界元法的计算结果同蒙特卡罗模拟结果具有高度一致性. 这表明快速多极边界元法可以用于扩散光学断层成像, 为成像的实时处理带来可观的前景.

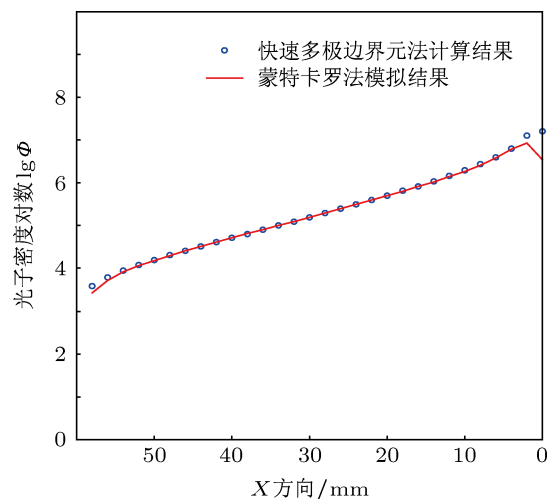


图 6 快速多极边界元法和蒙特卡罗结果剖面处光子密度比较

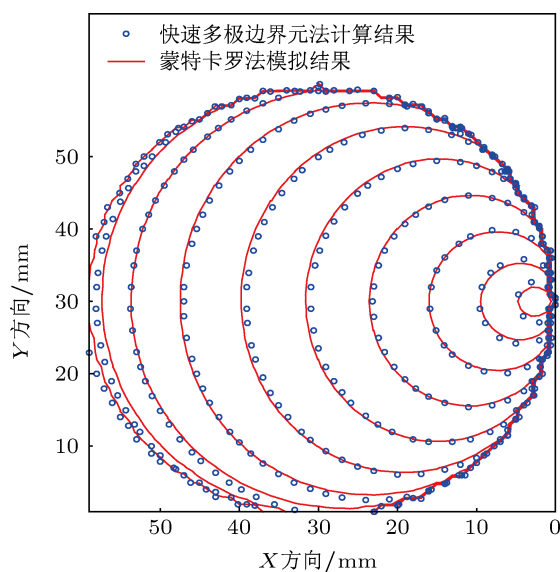


图 7 快速多极边界元法和蒙特卡罗结果的等高线分布比较

[1] Stephanie M W Y, Van de ven S M, Elias S G 2009 *Eur. Radiol.* **19** 1108  
 [2] Hebden J C, Austin T 2007 *Eur. Radiol.* **17** 2926  
 [3] Deng Y, Zhang X X, Luo Z Y, Xu J, Yang X Q, Meng Y Z, Gong H, Luo Q M 2012 *Acta Phys. Sin.* **62** 014202 (in Chinese) [邓勇, 张喧轩, 罗召洋, 许军, 杨孝全, 孟远征, 龚辉, 骆清铭 2012 物理学报 **62** 014202]  
 [4] Srinivasan S, Ghadyani H R, Pogue B W, Paulsen K D 2009 *Biomed. Opt. Express* **1** 398  
 [5] Elisee J P, Gibson A, Arridge S 2010 *IEEE T. Bio-Med. Eng.* **57** 2737  
 [6] Elisee J P, Bonnet M, Arridge S 2011 *Opt. Lett.* **36** 4101  
 [7] Li S D, Huang Q B, Li T Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 064301 (in Chinese) [李善德, 黄其柏, 李天匀 2012 物理学报 **61** 064301]  
 [8] Xu K X, Gao F, Zhao H J 2007 *Biomedical Photonics* (Beijing: Sci-

- ence Press) p53 (in Chinese) [徐可欣, 高峰, 赵会娟 2007 生物医学光子学 (北京: 科学出版社) 第 53 页]
- [9] Sikora J, Zacharopoulos A, Douiri A, Schweiger M, Horesh L, Arridge S, Ripoll J 2006 *Phys. Med. Biol.* **51** 497
- [10] Liu Y J 2009 *Fast Multipole Boundary Element Method* (1st Ed.) (New York: Cambridge University Press) p157
- [11] Yao Z H, Wang H T 2009 *Boundary Element Methods* (Beijing: Higher Education Press) p226 (in Chinese) [姚振汉, 王海涛 2009 边界元法 (北京: 高等教育出版社) 第 226 页]
- [12] Wang H T, Yao Z H, Wang P B 2005 *Eng. Anal. Bound. Elem.* **29** 673

# Fast multipole boundary element method for diffuse optical tomography\*

Xu Jun Xie Wen-Hao Deng Yong<sup>†</sup> Wang Kan Luo Zhao-Yang Gong Hui

(Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Huazhong University of Science and Technology, Britton Chance Center of Biomedical Photonics, Wuhan 430074, China)

(Received 29 October 2012; revised manuscript received 26 November 2012)

## Abstract

The forward problem of diffuse optical tomography (DOT) is commonly solved by the finite element method (FEM) currently. However, with the increase of the model scale, the computational complexity of FEM increases significantly; while the boundary element method (BEM) attracts much attention because of its reduction in calculated dimensions. In this paper, the fast multipole boundary element method (FMBEM) for DOT is studied using a model of highly scattering homogenous medium. In FMBEM, by the multipole expansions of kernel functions, the product of matrix coefficient and iterative vector can be equivalent to the recursion of a quadtree; and then a generalized minimal residual method is used to solve the BEM equation iteratively. The calculations of the FMBEM are compared with Monte Carlo simulations. The results show that the calculations of the FMBEM are in good agreement with Monte Carlo simulations. This demonstrates the feasibility of FMBEM in DOT and indicates that the FMBEM has a bright future for large-scale and real-time imaging.

**Keywords:** diffuse optical tomography, boundary element method, fast multipole boundary element method

**PACS:** 42.30.Wb, 87.57.nf

**DOI:** 10.7498/aps.62.104204

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61078072), National Science and Technology Support Program (Grant No. 2012BAI23B02), and International Science and Technology Cooperation and Exchange Projects, China (Grant No. 2010DFR30820).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: ydeng@mail.hust.edu.cn