

一种冷冻电子断层三维重构的并行迭代算法

万晓华^{1,2}, 张 法¹, 刘志勇¹

(1 中国科学院 计算技术研究所, 北京 100190; 2 中国科学院 研究生院, 北京 100190)

摘 要: 迭代重构算法是当前解决冷冻电子断层三维重构问题的有效算法, 但其海量计算需求限制了其广泛应用. 提出了一种冷冻电子断层三维重构的并行迭代算法, 在曙光 4000H 高性能计算机上的实验结果表明并行迭代算法不仅能够获得较好的加速性能, 而且能够有效提高重构结果的精度.

关键词: 冷冻电子断层; 迭代算法; 并行计算

中图分类号: TP301

文献标识码: A

文章编号: 1000-7180(2009)08-0101-03

A Parallel Iterative Algorithm for Three dimensional Reconstruction of Cryo electron Tomography

WAN Xiaohua^{1,2}, ZHANG Fa¹, LIU Zhiyong¹

(1 Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

2 Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: In Cryo electron tomography (Cryo ET), iterative algorithms are the most effective methods to obtain 3D reconstruction models. However, their huge computational costs limit their applications in practical. This paper presents a parallel iterative 3D reconstruction algorithm to solve the problem. Experimental results on Dawning 4000H cluster reveal that our algorithm can not only achieve the high speedups, but also improve the resolution of 3D reconstruction images.

Key words: cryo electron tomography; iterative algorithm; parallel computing

1 引言

冷冻电子断层 (Cryo Electron Tomography, Cryo ET) 三维重构技术是近年来快速发展起来的研究生物大分子三维结构的前沿技术^[1]. 其三维重构需要大量数据, 但现有的方法无法进行及时有效的处理, 这已经成为 Cryo ET 三维重构的一个瓶颈^[2]. 因此, 利用高性能计算技术研究高效的三维重构算法成为解决这一问题的关键.

加权背投影 (WBP) 算法是最常用的电子断层三维重构算法. 但是, 由于 Cryo ET 有限倾斜角和高噪声的限制, WBP 往往无法获得高分辨率的重构结果. 迭代算法由于在数据缺失和高噪声条件下能够获得较好的重构效果, 已成为研究 Cryo ET 三维

重构的热点. 然而, 迭代算法的海量计算需求限制了它的进一步应用, 因此借助高性能计算技术解决迭代算法中的计算问题就显得尤为关键^[3].

文中分析了四种主要的迭代重构算法, 采用反投影重建算法 (BPT) 估计像素初值, 以加快算法的收敛速度, 还提出了三维重构算法的并行化策略, 并在曙光 4000H 高性能计算机上得以实现, 获得了较高的加速性能. 此外, 实验结果表明采用 BPT 算法的并行迭代重构算法不仅能够明显加快收敛速度, 而且能够有效提高重构结果的精度.

2 三维重构算法

在 Cryo ET 中, 样品沿旋转轴旋转, 每间隔固定角度拍摄一张投影图片. 因此, 三维重构可分解为多

收稿日期: 2009-03-18

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (900612019); 中科院知识创新工程重大项目 (KGGX1-YW-13)

个垂直于旋转轴的独立单片二维重构, 每个单片由多个体素构成^[4-5]. 每个二维平面采用迭代算法进行重构, 且重构过程相互独立. 每个二维平面划分为 N 个像素, 每个像素拥有一个灰度值 x_j . 二维平面在不同倾斜角下的投影值用 p_i 表示. 每条射线的投影值可以看成该射线经过的像素点灰度值的加权和, 则二维重构问题可表示:

$$WX = P \tag{1}$$

式中, W 为加权矩阵, w_{ij} 代表像素值 x_j 对射线投影 p_i 的贡献. 文中将采用迭代算法根据测量所得的 P 值和计算得到的 W 值估计各个像素点灰度值 X .

2.1 顺序迭代重建法 ——ART

ART 是图像重构中最基本的一种顺序迭代算法^[6], 其迭代公式为

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda w_{ij} (p_i - \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j^k) / \sum_{j=1}^N w_{ij}^2 \tag{2}$$

式中, λ 为松弛参数. ART 每次校正过程只考虑一条射线的投影和该射线所经过的像素点, 更新原则为逐线校正. 所以收敛速度快, 但随机误差较大.

2.2 同时迭代重建法 ——SIRT

SIRT 算法中每个像素点的校正值是通过该像素所有射线和的误差值之累加^[7], 其迭代公式为

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda (\sum_{i=1}^N w_{ij} (p_i - \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j^k)) / \sum_{j=1}^N w_{ij}^2 \tag{3}$$

迭代过程中, 每个像素点的更新都用到所有的射线, 所以 SIRT 的校正过程为逐点校正, 能有效抑制单条射线引入的随机误差, 但收敛速度较慢.

2.3 分块迭代重建法 ——SART 和 ASS

分块迭代重建法的更新原则是将所有射线分块, 按块进行校正^[8]. SART 和 ASS 是两个典型分块迭代算法, 但两者块更新原则各不相同.

在 SART 中, 每次迭代像素值是通过同一个方向上所有射线投影同时进行更新, 块更新原则为块内并行, 块间串行, 校正原则为逐角度, 每个像素值更新如下所示:

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda (\sum_{s=1}^S w_{sj} (p_s - \sum_{j=1}^N w_{sj} x_j^k)) / \sum_{s=1}^S w_{sj}^2 \tag{4}$$

式中, S 表示一个投影方向上投影个数, B 表示投影方向的个数.

ASS 的每次迭代中像素值通过同一个投影位置上所有方向的射线投影同时进行更新, 块更新原则

为块内串行, 块间并行. 其每个像素值更新如下:

$$x_j^{k+1} = x_j^k + \lambda (\sum_{b=1}^B w_{bj} (p_b - \sum_{j=1}^N w_{bj} x_j^k)) / \sum_{b=1}^B w_{bj}^2 \tag{5}$$

分块迭代算法在每次迭代过程中考虑一个块的大小, 收敛速度介于 ART 和 SIRT 之间, 并且随着块大小的增加收敛速度逐渐下降.

3 并行算法设计

3.1 3D 重构并行化策略

文中将三维重构问题分解成多个独立单片二维重构问题, 以进行并行优化处理. 重构的三维模型分成多个由单片组成的块 (slab), 一个 slab 分配到机群的一个节点上. 每个节点能够独立并发地处理各自的 slab, 得到重构的部分结果, 实现进程级并行. 而且, 每个 slab 中的 slices 可以按照每个节点的处理器个数平均分配到每个处理器上运行, 实现线程级并行. 最后, 所有的节点将各自完成的重构部分结果进行通信, 实现最终的三维重构模型.

3.2 2D 重构策略

每个 slice 采用迭代算法进行 2D 重构. 为了能够减少迭代次数, 文中采用 BPT 估计像素点初值: 每个像素点的灰度值是所有通过该点的射线投影加权之和. 因此, 像素点灰度初值 $X^{(0)}$ 可表示为

$$x_j^0 = (\sum_{i=1}^M w_{ij} p_i) / \sum_{i=1}^M w_{ij} \tag{6}$$

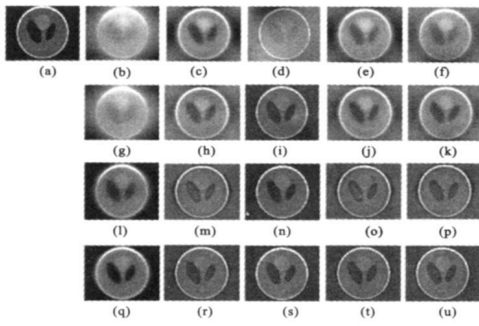
整个迭代过程首先进行初始化, 得到像素灰度初值 $X^{(0)}$ 和加权矩阵 W 后进入迭代循环, 依次执行重投影、比较、反投影和修正四个过程. 不同的迭代算法计算 ΔX 原则不同, 实现不同的更新策略.

4 实验结果及其分析

4.1 2D 仿真数据重构

文中选用 Shepp Logan 头部模型图像作为仿真数据进行 2D 重构实验. 分别使用了未采用 BPT 的 SIRT 算法和采用 BPT 的 SIRT、ART、SART 和 ASS 算法进行 5 组重构实验, 结果如图 1 所示. 从图中可以看出, 采用 BPT 估计初始值的迭代算法能够加快收敛速度, 提高重构精度.

此外, 我们采用峰值信噪比 (PSNR) 对上述五种重构方法进行了比较. PSNR 是指最大值信号与背景噪音之间的比值. 假定有两张大小均为 $m \times n$ 的原始图像 I 和重构图像 K , 其 PSNR 表示为



(a) 原始图像; (b) - (f), (g) - (k), (l) - (p) 和 (q) - (u) 分别表示未使用BPT的SIRT算法, 使用BPT的SIRT、ART、SART、ASS迭代5次、10次、50次和100次的结果。

图 1 Shepp Logan 头颅图像四种迭代算法仿真重构结果

$$PSNR = 10\lg\left(\frac{mn \text{MAX}_i^2}{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n I(i, j) - K(i, j)}\right)^2 \quad (7)$$

式中, MAX_i 表示图像中像素点灰度值最大值。一般而言, PSNR 值越大, 表示失真越少, 重构效果越好。表 1 给出了以上五种迭代重构算法不同迭代次数获得重构结果的 PSNR 值。可以看出, 相同迭代次数下改进后 SIRT 算法的重构结果有显著的提高。

表 1 改进迭代算法在不同迭代次数下重构结果的 PSNR 值

迭代次数	未使用 BPT 的 SIRT	改进的 SIRT	改进的 ART	改进的 SART	改进的 ASS
5	-11.256 4	-1.615 8	9.883 5	-2.701 1	-3.271 7
10	-5.582 3	2.658 8	11.366 0	1.548 2	1.460 3
50	1.854 3	9.981 0	11.489 0	9.936 0	9.941 6
100	4.238 0	11.127 0	11.366 0	11.120 0	11.122 0

4.2 3D 真实数据重构

本实验样品为 56 张尺寸为 512×512 的猪动脉内皮细胞胞膜窗投影图片。利用并行迭代算法在曙光 4000H 高性能计算机(36 个节点, 2 个处理器/节点)上实现了三维重构。图 2 分别给出了采用 BPT 的四种并行迭代算法的加速比曲线。从图中可以看出迭代次数越高, 所获得的加速比越大。另外, 随着节点个数的增加, 节点间的通信会剧增, 从而导致加速比的降低, 从而影响程序并行速度。

图 3 对比了采用 BPT 的 SIRT 算法同 WBP 算法的重构结果, 其图片为三维重构结果中沿 Z 轴方向同一厚度的切片图像。图 3(a) 为 WBP 算法的结果, 图 3(b) 为并行 SIRT 的结果。可以看出, 图 3(b) 能更清楚地看到样品中的胞膜窗组织。因此, 在有限投影角度和高噪声的条件下, 采用 BPT 技术的并行迭代算法能够得到比 WBP 质量更好的重构结果。

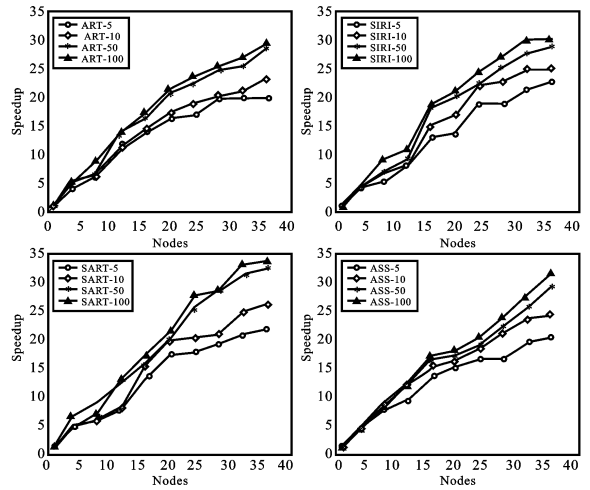
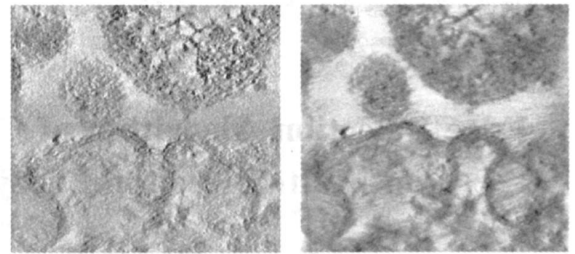


图 2 并行 ART/SIRT/SART/ASS 在不同节点上加速比



(a) WBP 重构结果 (b) SIRT 迭代 100 次重构结果

图 3 重构结果比较

5 结束语

Cryo-ET 三维重构技术作为研究超大分子的先进技术, 具有广泛的研究前景。迭代算法非常适合电子断层中有限角度投影情况下的三维重构, 但其计算量限制了其应用。针对这一问题, 文中采用反投影重建算法(BPT)估计像素点的初值, 以加快算法的收敛速度, 并且提出了三维重构的并行化策略, 在曙光 4000H 高性能计算机上的实验结果表明采用 BPT 技术的并行迭代算法不仅能够明显加快收敛速度, 而且能够有效提高重构结果的精度。

参考文献:

[1] Fernandez J J. High performance computing in structural determination by electron cryomicroscopy[J]. Struct. Biol., 2008(164): 1-6.
 [2] Frank J. Three dimensional electron microscopy of macromolecular assemblies [M]. Oxford: Oxford University Press, 2005.
 [3] Castano Diez D, Mueller H, Frangakis A S. Implementation and performance evaluation of reconstruction algorithms on graphics processors [J]. Struct. Biol., 2007

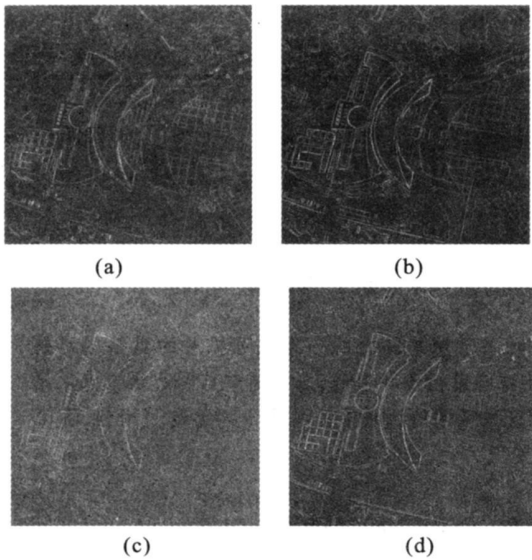


图 4 噪声彩色遥感图像边缘检测

度的彩色遥感图像边缘检测算法,充分考虑了实际图像中的边缘具有方向性,噪声不具有方向性的特点,获得了检测效果和抗噪性能的较好折中,是有一定优势且可行的彩色遥感图像边缘检测算法。

参考文献:

- [1] Makkeasorn A, Chang N B, Li J. Seasonal change detection of riparian zones with remote sensing images and genetic programming in a semi- arid watershed[J]. *Journal of Environmental Management*, 2009, 90(2): 1069-1080.
- [2] 李刚. 基于模糊理论和模糊形态学的遥感图像边缘检测研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2009.

(上接第 103 页)

- [4] Lewitt R M, Alternatives to voxels for image representation in iterative reconstruction algorithms[J]. *Phys. Med. Biol.*, 1992(37): 705-716.
- [5] Andersen A H. Algebraic reconstruction in ET from limited views[J]. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 1989, 8(1): 50-55.
- [6] Jiang M, Wang G, Convergence studies on iterative algorithms for image reconstruction[J]. *IEEE Trans. on Med. Imag.*, 2003, 22(5): 569-579.
- [7] Bilbao Castro J R, Carazo J M, Garcia I, et al. Parallelization of reconstruction algorithms in three- dimensional electron microscopy[J]. *Applied Mathematical Modeling*,

- [3] Demirci R. Similarity relation matrix- based color edge detection[J]. *AEU- International Journal of Electronics and Communications*, 2007, 61(7): 469-477.
- [4] Theoharatos C, Economou G, Fotopoulos S. Color edge detection using the minimal spanning tree[J]. *Pattern Recognition*, 2005, 38(4): 603-606.
- [5] Huntsberger T L, Descalzi M F. Color edge detection[J]. *Pattern Recognition Letters*, 1985, 3(3): 205-209.
- [6] Dony R D, Wesolkowski S. Edge detection on color images using RGB vector angles[C]//*IEEE CCECE' 99 Edmont. Canada*, 1999.
- [7] Di Z S. A note on the gradient of a multi- image[J]. *Computer Vision, Graphics, and Image Processing*, 1986, 33(1): 116-125.
- [8] Sheikh A, Soraghan J. Fuzzy based multiscale edge detection[J]. *Electronics Letters*, 2003, 39(1): 30-32.
- [9] Sinha D, Dougherty E R. Fuzzy mathematical morphology [J]. *Journal of Visual Communication and Image Representation*, 1992, 3(3): 286-302.
- [10] 杨帆, 汪林林, 王佐成. 一种新的多方向模糊形态学边缘检测算法[J]. *微计算机信息*, 2009, 25(3): 299-301.

作者简介:

- 李刚 男, 博士. 研究方向为数字图像处理、智能交通系统。
- 张金荣 男, 博士. 研究方向为传感器网络、控制工程。
- 朱雷 男, 博士研究生. 研究方向为数字图像处理、控制工程。
- 汪林林 男, 教授. 研究方向为地理信息系统、信息安全。

2006(30): 688-701.

- [8] Fernandez J J, Carazo J M, Garcia I. Three- dimensional reconstruction of cellular structures by electron microscope tomography and parallel computing[J]. *J. Parallel Distrib. Comput.*, 2004(64): 285-300.

作者简介:

- 万晓华 女, 博士研究生. 研究方向为生物信息、并行算法。
- 张法 男, 博士, 副研究员. 研究方向为生物信息、高性能算法。
- 刘志勇 男, 博士, 研究员. 研究方向为计算机体系结构、高性能算法。