基于冷冻电镜技术三维重构问题的算法研究

李 明

摘 要

本文旨在研究基于冷冻电镜技术生物大分子的三维重构问题. 针对有限角度投影和随机定向投影的测量数据, 使用几何正则化算子和保边算子, 在体积约束条件下分别建立了两个能量泛函极小化模型. 在模型的求解上, 基于水平集变分法, 提出了两种使用 $\mathcal{L}^2$ 梯度流重构三维函数的算法. 两种算法都基于有限维 B-样条基函数构成的空间, 在时间方向使用向前欧拉格式, 空间方向使用有限元离散化. 同时, B- 样条基函数的施密特正交化, 避免了刚度矩阵的存储以及方程组的求解. 另外, 在时间步长的选取上, 我们给出了计算时间步长的公式, 实现了时间步长的自动选取. 根据对重构细节要求的不同, 使用参数 h 来控制 B- 样条基函数的尺度. 在有限角度投影的三维重构算法中, 针对目标所具有的薄片形状, 设计了可伸缩的 z 轴维数, 减少了算法的运算量, 并且证明了有限角度投影三维重构变分模型解的存在唯一性.

在算法实现上, 利用 B- 样条基函数的平移性质和局部支集性质, 将图像的投影转化为 B- 样条基函数支集上的投影; 使用快速傅里叶变换提高算法的效率. 计算复杂性分析表明我们的算法是有效的. 我们在 Fedora 10 平台上使用 C/C++ 基于两种三维重构算法开发了相应的三维重构软件. 在算法的并行上进行了初步的尝试, 使用 Pthreads 库开发了相应的多线程版本. 另外, 基于 CUDA 架构对部分代码使用 GPU 进行了加速.

为了验证两种三维重构算法有效性, 我们使用不同类型的数据设计了相应的数值实验, 并将重构结果与现有的 WBP 方法、傅里叶重构方法和代数重构方法 (ART, SIRT) 进行了比较. 实验结果表明我们的算法重构的生物大分子三维结构图具有更高的对比度和更好的分辨率.

本文最后针对二维投影图像的分类问题, 使用相似性度量关联熵 (correntropy) 以及新的鲁棒聚类标准给出了一种新的多参考对齐与分类的方法. 该聚类标准尤其适合类中心之间的信噪比差极低的情形. 模拟数值实验表明该分类方法是有效的.

关键词: 冷冻电镜, 正则化, $\mathcal{L}^2$ 梯度流, 有限元方法, 多线程, GPU, 聚类, 关联熵