

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ В ЗАДАЧЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ДИАГНОСТИКИ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИТИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

Г.М. Агаян, С.Ю. Романов

1. Введение. Работа посвящена изучению распространения ультразвукового излучения в среде и решению обратной задачи ультразвуковой томографии. Взаимодействие излучения с неоднородностями среды моделируется двумя различными подходами. Это позволяет оценить границы применимости рассматриваемых моделей и оценить точность вычислений для различных значений параметров. Использование двух независимых методов расчета распространения волн позволяет удостовериться в надежности методов решения обратной задачи. Одним из параметров, влияющих на распространение ультразвуковых волн, является плотность среды. В настоящем проекте предполагается изучить методами математического моделирования влияние плотности на возможность реконструкции неоднородностей для медицинских сред, имеющих вариацию плотности в 10%-20%.

Отметим, что значительный интерес в настоящее время представляет создание ультразвуковых томографов [1-3] для дифференциальной диагностики заболеваний молочной железы. Выбор параметров математических моделей в настоящей работе ориентирован именно на решение этой практически важной задачи.

Для решения прямой и обратной задачи ультразвуковой томографии в общем случае нами использовались конечно-разностные методы. В случае неоднородности в виде бесконечного цилиндра помещенного в однородную среду поле прямой задачи рассеяния вычисляется с помощью аналитического решения в виде рядов по специальным функциям. Этот подход хорошо исследован в литературе [4-6]. Используя разработанную в этих публикациях технологию, можно рассчитать волновое поле в любой точке пространства для любой формы импульса через ряды по специальным функциям. Полученное аналитическое решение использовалось для сравнения с конечно-разностным решением, а также в качестве данных прямой задачи для реконструкции неоднородности. Решив обратную задачу в этой плоскости, мы можем сравнить полученный результат с соответствующим сечением цилиндра.

Решение обратных задач УЗ томографии как коэффициентных обратных задач с высокой точностью само по себе является сложной задачей. Используемые алгоритмы базируются на прямом вычислении градиента функционала невязки [7-10]. Естественно, что математическая модель должна учитывать явление дифракции, рефракции, переотражения излучения от границ и т.п.

Проблема большого объема вычислений при решении обратной задачи преодолевается использованием суперкомпьютеров кластерного типа на основе технологии MPI. Используемые явные конечно-разностные схемы идеально подходят для распараллеливания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований проект №. 13-07-00824 А.

2. Постановка и методы численного решения прямой и обратной задачи. Скалярное уравнение линейной акустики в среде с переменной плотностью $\rho(r)$ и фазовой скоростью $c(r)$, получающееся из уравнений движения, состояния и непрерывности, имеет вид [11]:

$$\Delta p(r,t) - \frac{1}{c^2(r)} \frac{\partial^2}{\partial t^2} p(r,t) = -\nabla \cdot f_0(r,t) + \frac{\nabla \rho(r)}{\rho(r)} (\nabla p(r,t) + f_0(r,t)) \quad (1)$$

где $p(r,t)$ описывает малые колебания давления около равновесного состояния. В случае постоянной плотности это уравнение примет вид скалярного волнового уравнения. Существуют различные постановки коэффициентных обратных задач для волнового уравнения [12-16]. В настоящей работе обратная задача рассматривается в следующей постановке. Рассмотрим волновое уравнение, которое описывает поле $p(r,t)$ в течение времени $(0,T)$ в области $P \subset R^N$ ($N=2, 3$), ограниченной поверхностью S , с точечным источником, располагающимся в точке r_0

$$\begin{aligned} v(r)p_{tt}(r,t) - \Delta p(r,t) &= \delta(r - r_0) \cdot f(t), \\ p(r,t=0) &= p_t(r,t=0) = 0, \\ \partial_n p|_{ST} &= q(r,t). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $v^{-0.5}(r) = c(r)$ - является скоростью волны в среде, $r \in R^N$ - положение точки в пространстве, Δ - оператор Лапласа по переменной r . Генерируемый источником импульс описывается функцией $f(t)$,

$\partial_n p|_{ST}$ - производная вдоль нормали к поверхности S в области $S \times (0, T)$, $q(r, t)$ - некоторая известная функция. Будем предполагать, что неоднородность среды вызвана только изменениями скорости, а вне области неоднородности $c(r) \equiv const$ - известна.

Обратная задача состоит в нахождении функции $c(r)$, описывающей неоднородность, по экспериментальным данным измерения волны $U(s, t)$ на границе S области P за время $(0, T)$ при различных положениях r_0 источника.

Введем функционал невязки

$$\Phi(p(v)) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_S (p(s, t) - U(s, t))^2 ds dt. \quad (3)$$

В рамках настоящей постановки выражения для градиента функционала невязки получены в работах [7-10, 16]. Градиент функционала (3) имеет вид

$$\Phi'_v(p(v)) = \int_0^T w_t(r, t) p_t(r, t) dt. \quad (4)$$

Здесь $p(r, t)$ - есть решение основной задачи (2), а $w(r, t)$ - есть решение «сопряженной» задачи [10] при заданном $c(r)$. Таким образом, для вычисления градиента (4) функционала необходимо решить основную и «сопряженную» задачи. Отметим еще раз, что методы решения прямой и обратной задачи приведены в предположении, что плотность среды вне и внутри неоднородности постоянна.

3. Постановка и аналитические решения прямой задачи рассеяния для цилиндрической неоднородности. Рассмотрим поставленную выше задачу в случае неоднородности в виде бесконечного цилиндра. Выпишем аналитическое решение прямой задачи в виде рядов по специальным функциям для этого случая. Будем предполагать, что неоднородность среды вызвана изменениями скорости $c(r)$ и плотности $\rho(r)$ среды в ограниченной области $\Omega \subset R^3$ с границей S , а вне области неоднородности скорость $c(r) \equiv c_0 = const$ и $\rho(r) \equiv \rho_0 = const$, где c_0 и ρ_0 - известны.

Для волн гармонических по времени мы имеем уравнение Гельмгольца относительно амплитуды волны $u(r)$

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad (5)$$

где волновое число $k = \omega/c$, ω - частота колебаний.

Рассмотрим простейшую задачу рассеяния на теле $\Omega \subset R^3$ падающей звуковой волны. Предположим, что внутри тела Ω , имеющего границу S , скорость распространения звука равна $c(r) \equiv c_\Omega = const$ и плотность $\rho(r) \equiv \rho_\Omega = const$. Предположим, что падающее поле $u^i(r)$ ($r \notin \Omega$) представляет собой плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси OZ: $u^i(r) = e^{-ikz} = e^{-ik|r|\cos\theta}$. Полное поле вне области Ω обозначим через $u(r)$. Оно представляет собой сумму падающей волны и неизвестного рассеянного поля $u^s(r)$, т.е. $u(r) = u^i(r) + u^s(r)$, где $r \notin \Omega$. Эти функции вне области Ω удовлетворяют уравнению Гельмгольца с волновым числом $k = \omega/c_0$. Внутри области Ω полное поле обозначим через $u^\Omega(r)$. Оно удовлетворяют уравнению Гельмгольца внутри области Ω с волновым числом $k_\Omega = \omega/c_\Omega$. На границе S поле $u(r)$ и поле $u^\Omega(r)$ удовлетворяют условиям сопряжения

$$u = u^\Omega \quad \text{и} \quad \frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{1}{\rho_\Omega} \cdot \frac{\partial u^\Omega}{\partial \nu}, \quad (6)$$

где $\frac{\partial}{\partial \nu}$ - производная по внешней нормали на границе S .

Задача рассеяния на теле Ω , состоит в нахождении рассеянного поля $u^s(r)$ вне тела, удовлетворяющего условиям излучения Зоммерфельда на бесконечности.

Для областей Ω , имеющих простую форму, решение поставленной задачи может быть выписано в аналитическом виде [4]. Рассмотрим Ω в виде бесконечного цилиндра радиуса R , см. рисунок 1. Введем цилиндрические координаты, т.ч. точка с координатами (x, y, z) будет иметь координаты $(|r|, \theta, z)$.

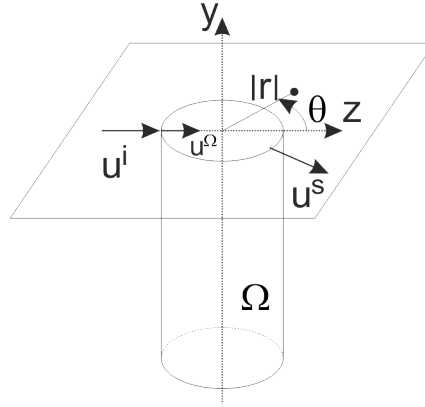


Рис. 1. Схема численного эксперимента

В нашем случае падающая плоская волна не зависит от координаты y и может быть представлена в виде ряда

$$u^i(|r|, \theta) = e^{-ik|r|\cos\theta} = \sum_{m \geq 0} \delta_m \cdot (-i)^m \cdot T_m \cdot J_m(k|r|),$$

где

$$T_m = \cos(m\theta), \quad \delta_m = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 2, & m > 0 \end{cases}, \quad J_m(x) \text{- функция Бесселя первого рода.}$$

Внутри области Ω решение уравнения Гельмгольца, удовлетворяющее условию сопряжения (6), имеет вид

$$u^\Omega(|r|, \theta) = \sum_{m \geq 0} F_m \cdot \delta_m \cdot (-i)^m \cdot T_m \cdot J_m(k|r|),$$

где

$$F_m = \frac{J_m(kR) \cdot H'_m(kR) - J'_m(kR) \cdot H_m(kR)}{J_m(k_\Omega R) \cdot H'_m(kR) - C \cdot J'_m(k_\Omega R) \cdot H_m(kR)}.$$

Решение поставленной задачи волна $u^s(r)$ (которая является решением уравнения Гельмгольца вне области Ω , удовлетворяющая условию излучения и такая, что $u^i(r) + u^s(r)$ удовлетворяет условию сопряжения (6)) будет иметь вид

$$u^s(|r|, \theta) = \sum_{m \geq 0} D_m \cdot \delta_m \cdot (-i)^m \cdot T_m \cdot H_m(k|r|), \quad (7)$$

где

$$D_m = \frac{C \cdot J_m(kR) \cdot J'_m(k_\Omega R) - J'_m(kR) \cdot J_m(k_\Omega R)}{J_m(k_\Omega R) \cdot H'_m(kR) - C \cdot J'_m(k_\Omega R) \cdot H_m(kR)}, \quad C = \frac{k_\Omega \rho_0}{k \rho_\Omega} = \frac{c_0 \rho_0}{c_\Omega \rho_\Omega},$$

$H_m(x)$ - функция Ханкеля второго рода. Коэффициент C , равняется отношению акустических сопротивлений внутри неоднородности и вне ее. Он определяет величину и фазу отраженной волны.

Предположим теперь, что падающее поле $p^i(r, t)$ представляет собой плоскую волну в виде короткого импульса $f(t)$, распространяющегося вдоль оси OZ . Будем рассматривать функцию $f(t)$ в виде конечного ряда Фурье (8) на отрезке $(-T, T)$, где T - выбирается из условия полного прохождения импульса интересующей нас области. $t=0$ - соответствует началу прохождения импульса через точку $x=y=z=0$.

$$f(t) = \sum_{n=-N}^N f_n \exp(i\omega_n t), \quad \omega_n = \frac{\pi n}{T}, \quad (8)$$

Пользуясь линейностью уравнения Гельмгольца и условий сопряжения, можно решать задачу рассеяния по формулам (7) ($k_n = \omega_n/c_0$) отдельно для каждой гармоники ω_n соотношения (8) и получать решения $u^s(r, \omega_n)$. Общим решением поставленной задачи на интервале $(-T, T)$ будет сумма решений, полученных для рассматриваемых гармоник. Заметим, что, т.к. $f(t)$ действительная функция, проводить расчеты можно только для половины слагаемых. Полученное решение является периодической функцией по

времени с периодом $2T$. На интервале $(-T, T)$ $p(r, t)$ будет совпадать с искомым решением. Сходимость рядов, представляющих решение задачи рассеяния, исследована, например, в [5].

4. Численные расчеты на суперкомпьютере. Расчеты прямой задачи на основе аналитических формул (7) проводились в однопроцессорном варианте, поскольку требуется найти волновое поле только в точках границы квадрата и в вычислительном плане эта задача не является объемной. Решение обратных задач проводилось на основе формул (2-4) с использованием экспериментальных данных, полученных независимым методом расчетов на основе аналитических формул (7). Расчеты обратных задач с помощью разработанных ранее алгоритмов и программ [17-18] были проведены на суперкомпьютерах СКЦ МГУ «Чебышёв» и «Ломоносов» с помощью технологии MPI.

Волновое уравнение (2) аппроксимировалось явной трехслойной по времени разностной схемой со вторым порядком точности. Явная схема сравнительно легко распараллеливается на многопроцессорной системе, например, с помощью метода распараллеливания по пространству, поскольку вычисление значения в точке на новом слое по времени зависит только от ближайших соседних точек на текущем и предыдущем слоях. Предлагаемый способ распараллеливания по пространству состоит в том, что общее квадратное поле вычислений разбивается на одинаковые квадратные подобласти, вычисления в которых производятся различными вычислительными ядрами. Было выделено $9=3 \times 3$ подобластей, по границам которых на каждом шаге по времени выполнялся обмен данными.

Следующий уровень распараллеливания связан с тем, что расчеты надо проводить для четырех источников, вычисления для каждого из которых в значительной степени независимы. Таким образом, обратная задача решалась на 36 узлах = 4 источника \times 3×3 подобластей. Ускорение по сравнению с однопоточным вариантом составило около 25 раз. Время расчета одной обратной задачи — около 20 ч.

Использование численных методов для расчета распространения волн по необходимости предполагает использование ограниченных по пространству областей расчетов, что противоречит реальной постановке задачи. Поэтому приходится ставить искусственные граничные условия по периметру области расчетов. Ранее авторы ставили условия «неотражения» на границе, что выполняется лишь приближенно с некоторой погрешностью. Существуют и другие методы устранения эффектов, связанных с ограничением области расчетов, например, метод PML или его модификация CFS-PML. В настоящей работе ставилась задача выявления возможных погрешностей, вносимых в расчеты только разностными методами, поэтому эффекты связанные с границей были полностью исключены простым способом — к исходной области расчетов были добавлены дополнительные буферные полосы с каждой стороны, т. е. границы были отодвинуты. Ширина буферных полос составила 500 точек и выбиралась из условия, чтобы волна, пересекая наружу границу области, не успела за время T из формулы (4) решения прямой задач пересечь границу обратно. Это позволило полностью исключить влияние граничных эффектов на внутренних границах представляющих интерес. Проблема увеличения общего объема расчетов (размер области расчетов составил 2000×2000 точек) преодолевалась увеличением числа вычислительных ядер. Такой подход заметно увеличивает объем вычислений и представляется оправданным только в данном случае проведения небольшого числа модельных расчетов.

Одна из проблем возникших при расчетах — это нехватка памяти для хранения данных, поскольку расчеты одним ядром проводятся на области 667×667 точек, а экспериментальные данные требуется хранить для 6000 шагов по времени. Для уменьшения объема данных экспериментальные данные были переведены в формат float. Тестовые расчеты не показали заметного ухудшения точности расчетов.

Рассмотрим неоднородность, имеющую вид бесконечного цилиндра, с осью вдоль ОУ и диаметром 12 см. Скорость и плотность внутри цилиндра постоянны, $c_0 = 1600$ м/с. В качестве источника излучения использовалась плоская волна, падающая на неоднородность перпендикулярно оси цилиндра (Рис1). Выделив приемники, расположенные на сторонах квадрата 20×20 см вокруг неоднородности в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра, в них были проведены расчеты волнового поля (прямой задачи) по формуле (7). Скорость распространения звука вне неоднородности равнялась 1500 м/с. Размер шага сетки выбирался достаточным для хорошей аппроксимации распространения импульса волны длиной 7 мм явной разностной схемой, что привело к размеру сетки расчетов 1000×1000 точек для рассматриваемого квадрата.

Обратная задача решалась по данным зондирования неоднородности с четырех перпендикулярных направлений плоской волной (четыре источника). Фронт падающей волны параллелен сторонам квадрата. Поскольку задача, очевидно, симметрична относительно поворота на 90 градусов, то расчеты прямой задачи проводились только для одного источника.

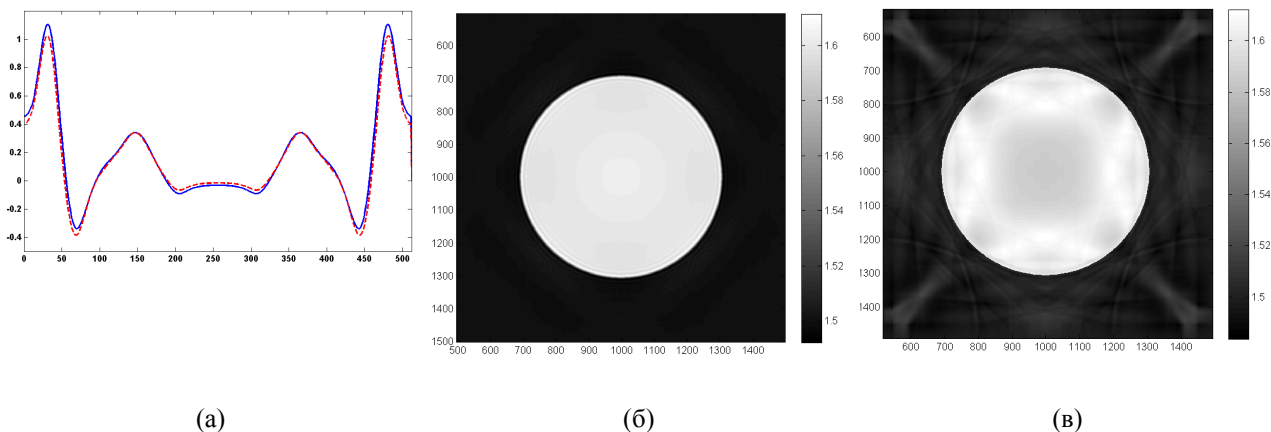


Рис. 2. Решение задачи в предположении, что плотность среды одинакова во всем пространстве. а) Графики волны, полученные численным и аналитическим решением прямой задачи б) Поле скоростей, восстановленное по данным численного решения прямой задачи. в) Поле скоростей, восстановленное по данным аналитического решения прямой задачи.

Одна из задач, стоявшая в работе, - оценить точность вычислений на основе разностных схем. Для этого независимым методом по аналитическим формулам (7) была решена прямая задача. На Рис. 2(а) приведены графики поля на дальней по направлению падающей волны границе, полученные численными и аналитическими методами для случая одинаковой плотности внутри и вне цилиндра. Видно очень хорошее согласие в расчетах.

Другая задача, которая ставилась в работе, проверить надежность методов решения обратной задачи. Для этого обратная задача решалась на основе модельных экспериментальных данных, полученных независимым методом по аналитическим формулам. На Рис. 2(б) приведены результаты реконструкции по данным численного решения прямой задачи, а на Рис.2 (в) - по данным аналитического решения прямой задачи. Не удивительно, что результаты хорошо согласуются, т. к. результаты решения прямой задачи практически совпали.

Как следует из формулы (1) одним из параметров, влияющих на распространение ультразвуковых волн, является плотность среды. В настоящем работе методами математического моделирования исследовано влияние плотности на возможность реконструкции неоднородностей для медицинских сред, имеющих вариацию плотности в 10%-20%. На Рис. 3(а) приведены графики поля на боковой по направлению падающей волны границе, полученные аналитическими методами для случаев: 1) плотности внутри и вне цилиндра равны, акустическое сопротивление внутри больше $c_{\Omega} \rho_{\Omega} > c_0 \rho_0$ (зеленый пунктир), 2) плотность внутри меньше, чем вне цилиндра, акустические сопротивления равны $c_{\Omega} \rho_{\Omega} = c_0 \rho_0$ (синие точки), 3) плотность и акустическое сопротивление внутри меньше, чем вне цилиндра $c_{\Omega} \rho_{\Omega} < c_0 \rho_0$ (красная сплошная). Видно, что отраженная волна имеет разную фазу, а при равных акустических сопротивлениях отражение исчезает при приближении к нормальному углу падения к поверхность цилиндра. Однако преломленные волны (крайние справа на графике) имеют амплитуду в 10-20 раз большую и практически совпадают. На Рис. 3(б-в) приведены результаты реконструкции методами (2-4) по экспериментальным данным полученным из аналитических формул для разных плотностей внутри и снаружи цилиндра. На Рис. 3(б) приведены результаты при равных акустических сопротивлениях, на Рис. 3(в) — когда акустическое сопротивление внутри меньше, чем вне цилиндра, на Рис. 2(в) — плотности внутри и вне цилиндра равны, акустическое сопротивление внутри больше. Видно, что во всех трех случаях получаются похожие результаты, что связано с тем, что преломленные волны, в которых содержится основная часть энергии практически совпадают. На Рис. 3(в) появилась дополнительная граница круга, т. к. отражение в противофазе, а на Рис. 3(б) — граница размыта, т. к. отражение слабое.

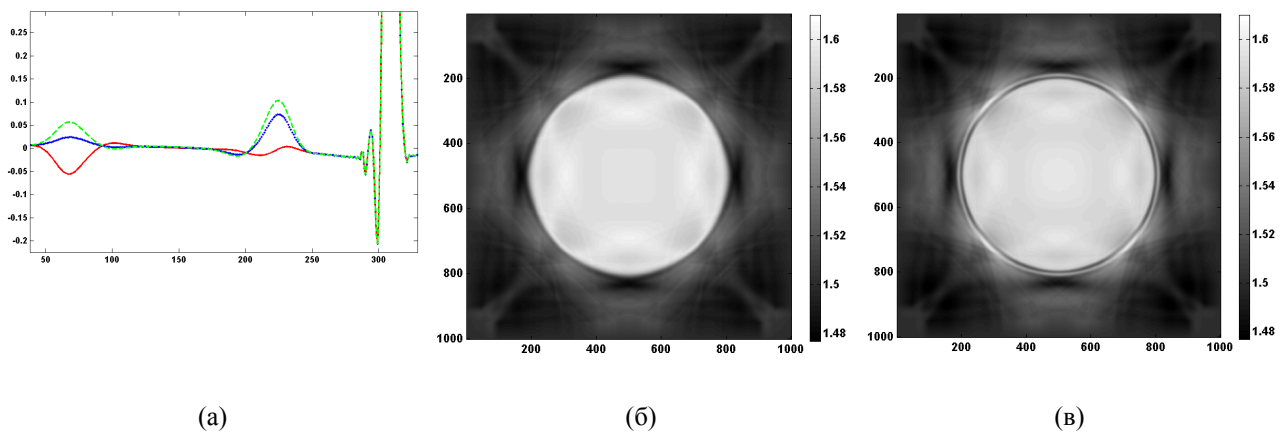


Рис. 3. Решение задачи в предположении, что плотности внутри и вне цилиндра различны. (а) Вид отраженной и преломленной волн для $\rho_\Omega = 1 \text{ г/см}^3$ (зеленый пунктир), $\rho_\Omega = 0.9375 \text{ г/см}^3$ (синие точки), $\rho_\Omega = 0.8 \text{ г/см}^3$ (красная сплошная), б) Восстановленное поле скоростей для $\rho_\Omega = 0.9375 \text{ г/см}^3$; в) Восстановленное поле скоростей для $\rho_\Omega = 0.8 \text{ г/см}^3$

5. Выводы.

- Проведенные расчеты в прямой задаче в двумерном случае в аналитической и в конечно-разностной постановках показали хорошее согласие в расчетах волнового поля в неоднородной среде.
- В предположении, что плотность среды одинакова для неоднородности и окружающего пространства, решения задачи восстановления поля скоростей для входных данных, полученных аналитически и численно - практически не отличаются. Полученные результаты являются независимым тестом программного обеспечения для решения обратных задач УЗ томографии.
- Проведенные модельные расчеты показали, что восстановление поля скоростей не очень чувствительно к наличию разницы в плотности вещества. Это оправдывает применение волновой модели (не учитывающей плотность) в задаче волновой томографии.
- Использование суперкомпьютера ускорило расчеты по сравнению с однопоточным вариантом примерно в 25 раз, что позволило провести большой объем модельных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА:

1. J. Wiskin, D. T. Borup, S. A. Johnson, and M. Berggren. Non-linear inverse scattering: High resolution quantitative breast tissue tomography, - J. Acoust. Soc. Am. Volume 131, Issue 5, pp. 3802-3813 (2012);
2. Glide-Hurst CK, Duric N, Littrup P. Volumetric breast density evaluation from ultrasound tomography images. Medical Physics 2008; 35:3988-3997.
3. R. Jiřík, I. Peterlík, N. Ruiter, J. Fousek, R. Dapp, M. Zapf, J. Jan "Sound-Speed Image Reconstruction in Sparse-Aperture 3-D Ultrasound Transmission Tomography" // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2012. 59, N 2, с.254-264.
4. Varadan V.V., Ma Y., Varadan V.K., Lakhtakia A. Scattering of waves by spheres and cylinders, in: Field representations and Introduction to Scattering.,(North-Holland), Amsterdam 1991, p. 211-324
5. Korneev V.A., Johnson L.R. Scattering of elastic waves by a spherical inclusion. 1. Theory and numerical results, Geophys. J. Int., 1993, no. 115, p. 230-250
6. Pike R., Sabatier P., Scattering: scattering and inverse scattering in pure and applied science San Diego :Academic Press 2008, p.2002 ISBN: 0126137625 ISBN13: 9780126137620
7. Chavent G. Deux resultats sur le probleme inverse dans les equations aux derivees partielles du deuxieme ordre an t et sur l'unicite de la solution du probleme inverse de la diffusion // Paris. C.R.Acad.Sc. 1970. Vol.270. P.25-28.
8. Natterer F., Wubbeling F., A propagation-backpropagation method for uzltrasound tomography. Inverse Problems 11, 1225-1232 (1995) IOP Publishing Ltd.
9. L. Beilina, M.V. Klivanov "Approximate global convergence and adaptivity for coefficient inverse problems". New York: Springer, 2012.
- A.V. Goncharsky, S.Y. Romanov, Supercomputer technologies in inverse problems of ultrasound tomography Inverse Probl. 2013, V. 29, № 7, 075004.
- Горюнов А.А., Сасковец А.В. Обратные задачи рассеяния в акустике. Москва. Изд-во Моск. Ун-та. 1989.
12. A.Backushinsky, A.Goncharsky, S.Romanov, S.Seatzu,- On the identification of velocity in seismics and in acoustic sounding,-Pubblicazioni dell'istituto di analisa globale e applicazioni, Serie "Problemi non ben posti ed inversi», N 71, Firenze, November 1994.

13. С.Г. Головина, С.Ю. Романов, В.В. Степанов "Об одной обратной задаче сейсмологии" // Вестн. МГУ. Сер. 15. Выч. мат. и киб. 1994. № 4, с.16–21.
14. Гончарский А.В., Романов С.Ю. Об одной трехмерной задаче диагностики в волновом приближении.- ЖВМиМФ, 2000 , Т40, №9. С. 1364-1367
15. А.Б. Бакушинский, А.И. Козлов, М.Ю. Кокурин "Об одной обратной задаче для трехмерного волнового уравнения" // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2003. 43, № 8, с.1201–1209.
16. А.В. Гончарский, С.Ю. Романов "О двух подходах к решению коэффициентных обратных задач для волновых уравнений" // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2012. 52, № 2, с.1–7.
17. А.В. Гончарский, С.Ю. Романов "Суперкомпьютерные технологии в разработке методов решения обратных задач в УЗИ-томографии" //Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. с.235-238.
18. Вад. В.Воеводин, С.Л. Овчинников, С.Ю. Романов "Разработка высокоэффективных масштабируемых программ в задаче ультразвуковой томографии" // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. №1, с.307-315.