

doi: 10.3788/gzxb20154402.0217003

基于矩变换的生物组织光学特性参量反演

何春柳, 朱启兵, 黄敏

(江南大学 轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江苏 无锡 214122)

摘要: 针对漫射模型在近光源区具有较大模型误差, 导致光学特性参量反演准确度较低的问题, 提出了一种利用矩变换, 改变原始数据形态, 提高反演准确度的方法, 比较了不同阶次条件下的光学特性参量反演准确度和拟合残差的统计分布状况, 分析了不同信噪比下重构系数的相对误差。对 25 组数据的研究结果表明: 3 阶矩变换可显著提高两个光学参量(μ_a, μ_s)的估计准确度。在无噪音条件下, 吸收系数 μ_a 重构的平均相对误差为 7.04%; 有效散射系数 μ_s 重构的平均相对误差为 5.55%, 相比于自然对数变换, μ_a 降低了 8.57%; μ_s 降低了 32.73%。在信号噪音满足一定条件情况下(大于 50 dB), 3 阶矩变换仍然能获得较高的光学参量反演准确度。矩变换方法能有效地提高光学特性参量反演估计准确度。

关键词: 生物组织; 漫射模型; 光学特性参量; 数据变换; 置信区间

中图分类号: O436.2

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)02-0217003-7

Inversion of the Optical Properties Parameters of Biological Tissue Based on Moment Transformation

HE Chun-liu, ZHU Qi-bing, HUANG Min

(Key Laboratory of Advanced Process Control for Light Industry (Ministry of Education),
Jiangnan University, 214122 Wuxi, Jiangsu 214122, China)

Abstract: Diffusion model has a disadvantage that exist a large model error in the near light source which lead to a lower accuracy for inversion of optical properties parameters. Therefore, the article proposed a moment-transformation method, which change the form of raw data and improve inverse accuracy. The article compared inverse accuracy of the optical properties under different orders conditions and statistical distribution of fit residuals and analyzed relative error of the reconstruction coefficient under different signal to noise ratio. The results of all set data indicate: 3 order moment-transformation can significantly improve estimation accuracy both optical parameters that 7.04% for μ_a and 5.55% for μ_s under the no noise condition. three order moment-transformation compared to original and the natural logarithm data transformation, the relatively error decrease 57.59%, 8.57% for μ_a and 42.55%, 32.73% for μ_s , respectively. In the case of the certain signal to noise ratio (greater than 50 dB), three order moment-transformation still get high inversion accuracy of optical parameter. Therefore, based on the distance weighted data transformation is an effective means of measuring optical parameters.

Key words: Biological tissue; Diffusion models; Optical properties; Data transformation; Confidence intervals

OCIS Codes: 170.0170; 170.6930; 170.6935; 170.7050

0 引言

生物组织的光学特性参量是反映生物组织自身结

构和生理、病理状态的重要参量^[1-3]。生物组织光学特性参量的测量, 对于研究生物结构成像规律, 分析组织化学特性和物理结构, 建立组织内部品质(状态)的检

基金项目: 国家自然科学基金(Nos. 61271384, 61275155)资助

第一作者: 何春柳(1988-), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为组织光学特性研究。Email: chunliu_he@163.com

导师(通讯作者): 朱启兵(1973-), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为组织光学。Email: zhuqib@163.com

收稿日期: 2014-07-14; 录用日期: 2014-09-12

<http://www.photon.ac.cn>

测和评价模型等具有重要意义。

生物组织的光学特性参量测量技术可分为直接测量和间接测量。直接测量是一种不依赖于特定光学传输模型的测量方法,通常需要对组织体进行切片,是一种有损测量方法。间接测量方法利用获得的光子在生物组织表面的分布数据、依据给定的光学传输模型、通过反演算法获得光学特性参量,是一种无损测量方法^[4]。由于间接测量具有无损、便于在体外测量的优点,已成为生物组织光学特性参量测量的最为重要的手段。生物组织光学特性参量的间接测量本质上是一个光学特性参量的逆向反演过程,其反演准确度受到测量数据质量、光学传输模型、反演算法三方面的影响。由于能获得介质内部及其表面光分布的解析解,漫射模型被广泛应用到光学特性参量逆向反演中。作为一种近似模型,漫射方程在近光源区与真实模型存在较大的误差,导致在光学特性参量逆向反演时存在较大的反演误差。

数据变换^[5-7]技术是减少反演误差的有效途径。其基本思想是改变原始数据的分布形态,从而改变原始数据对反演算法中拟合残差的贡献率,最终达到提高反演准确度的目的。Cen等以漫射模型为研究对象,比较了原始数据、积分变换、自然对数变换下的光学特性参量反演准确度,得出自然对数变换可显著提高光学特性参量的反演准确度。本文在其研究基础上^[8],在分析漫射模型的误差基础上,提出了一种矩变换的数据变换方法,用于漫射模型的光学特性参量反演。仿真研究表明,矩变换能够显著提高光学特性参量的反演准确度,具有一定的实用性。

1 漫射近似模型

漫射近似模型是描述光子在生物组织中传播的最为常用的模型。其计算公式为^[9-10]

$$R(r) = C_1 \Phi(r, z=0) + C_2 R_{\text{flux}}(r) \quad (1)$$

$$\Phi(r, z=0) = \frac{1}{4\pi D} \left[\frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_1)}{r_1} - \frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_2)}{r_2} \right] \quad (2)$$

$$R_{\text{flux}}(r) = \frac{1}{4\pi} \left[z_0 \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_1} \right) \frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_1)}{r_1} + (z_0 + 2z_b) \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_2} \right) \frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_2)}{r_2} \right] \quad (3)$$

在折射率 $n = 1.35$ 的情况下^[12], $R_{\text{ires}} = 0.449$, $C_1 = 0.1227$, $C_2 = 0.3269$ ^[11]。 D 是漫射常量, μ_{eff} 是有效的衰减系数, μ_a 和 μ'_s 为表示组织吸收系数和有效散射系数的光学特性参量。 r_1, r_2 和 r 为信号源与检测器的距离。 z_0 和 z_b 是外推边界条件。 $R(r)$ 为组织表面的漫反射光强分布。从公式中可以看出,其是光源-检测器距

离 r 和两个未知光学参量 μ_a, μ'_s 的函数。

2 逆问题求解与数据变换

在已知测量数据 $R(r)$ 和给定光学传输模型条件下,选择合适的逆问题求解算法对参量的反演准确度有着重要的影响。考虑到漫反射模型是一个典型的非线性方程,本文选择基于内部映射牛顿方法(interior-reflectance Newton method)的子空间信赖域法(subspace trust-region)作为反演辨识算法^[13]。信赖域法首先构造一个受椭球约束的二次函数;在此基础上,内部映射牛顿方法在可行域内利用仿射变换进行迭代,并且通过线搜索技术加快收敛速度。

理论研究表明,漫反射近似理论模型适用于光源-检测器之间距离远大于一个输运平均自由程的情形^[10]。图1是由 $\mu_a = 0.06 \text{ cm}^{-1}$, $\mu'_s = 4 \text{ cm}^{-1}$ 得到的漫反射方程和 Monte Carlo (MC) 模拟曲线的误差与光源-探测器距离的分布状况。从图中可以看出,在近光源区,MC 模拟曲线和漫反射曲线存在着较大的模型误差。反演算法本质上是求取拟合残差最小化的过程,为了保证拟合残差最小化,当采用漫反射模型结合反演算法重构模型参量时,过大的近光源区模型误差的引入,导致在反演算法中拟合残差的贡献率占支配地位,必然导致模型参量偏离真实值,从而产生较大的参量反演误差。为了减少近光源区模型误差对拟合残差的贡献率,本文引入距离加权的方法,定义的矩变换方法为

$$R_n(r) = r^n R(r) \quad n = 0, 1, 2 \quad (4)$$

式中, n 表示阶矩变换,0 阶矩变换是指原始数据。从式(4)中可以看出,矩变换法本质上是通过对不同距离 r 下的漫射光强 $R(r)$ 乘以距离权重 r^n 。在近光源区,由于 r 较小, $r^n R(r)$ 降低了原始反射光强的幅值,最终达到了降低近光源区模型误差贡献率的目的。图1为给

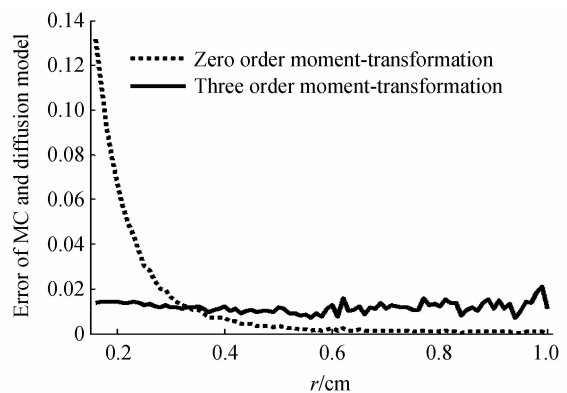


图1 漫射模型与蒙特卡洛仿真漫反射误差曲线 ($\mu_a = 0.06 \text{ cm}^{-1}$, $\mu'_s = 4 \text{ cm}^{-1}$)

Fig. 1 Error curve for diffuse reflectance obtained by diffusion model and MC simulation ($\mu_a = 0.06 \text{ cm}^{-1}$, $\mu'_s = 4 \text{ cm}^{-1}$)

出0阶和3阶矩变换后,MC模拟曲线和漫射曲线的误差随光源探测器距离的分布状况.当采用3阶矩变换后,改变了近光源区模型误差占拟合残差支配地位的现状,MC模拟曲线和漫射曲线的误差与光源探测器距离呈现较为随机的状态,调节了 $R(r)$ 对反演拟合残差的贡献率,提高了反演准确度.

3 算法性能评价

本文采用光学特性参量的真实值与反演估计值之间的相对误差以及拟合残差的分布统计来比较算法的性能.其中相对误差定义为

$$\left| \frac{\hat{\beta} - \beta}{\beta} \right| \times 100\% \quad (5)$$

$\hat{\beta}$ 是光学特性参量 μ_a 或 μ_s 的估计值, β 是 μ_a 或 μ_s 的真实值.

$$\text{res}_i = R_{\text{obs},i} - R_{\text{pred},i} \quad (6)$$

是拟合残差.

4 仿真结果与讨论

4.1 仿真参量

参考已发表的水果和其他食物产品的光学特性参量^[14-15],本文共设置如表1所示的25种光学特性参量作为仿真参量用来验证矩变换的有效性.这25种光学特性参量根据 μ_s'/μ_a 的比值分为5组(从左到右的顺序标号依次增大),每组输运平均自由程依次减小.在光学特性参量确定后,利用Monte Carlo模拟获得的光子在组织表面的统计分布^[16-18],作为逆问题求解过程中的已知测量数据.考虑到Monte Carlo模拟具有随机性,每种光学特性参量共进行10次随机实验,并对10次反演后估计值进行平均.

表1 MC模型中25种光学特性参量及相应的输运自由程

Table 1 Twenty-five combinations of μ_a and μ_s' and their corresponding transport mean free path used in MC simulations

	μ_s'/μ_a	4	7	10	20	30
$\mu_s'/\mu_a = 10$	μ_a/cm^{-1}	0.4	0.7	1	2	3
	$mf\bar{p}'/\text{mm}$	2.27	1.3	0.91	0.41	0.3
$\mu_s'/\mu_a = 20$	μ_a/cm^{-1}	0.2	0.35	0.5	1	1.5
	$mf\bar{p}'/\text{mm}$	2.38	1.36	0.95	0.48	0.32
$\mu_s'/\mu_a = 50$	μ_a/cm^{-1}	0.08	0.14	0.2	0.4	0.6
	$mf\bar{p}'/\text{mm}$	2.45	1.4	0.98	0.49	0.33
$\mu_s'/\mu_a = 70$	μ_a/cm^{-1}	0.06	0.1	0.14	0.29	0.43
	$mf\bar{p}'/\text{mm}$	2.46	1.41	0.99	0.49	0.33
$\mu_s'/\mu_a = 100$	μ_a/cm^{-1}	0.04	0.07	0.1	0.2	0.3
	$mf\bar{p}'/\text{mm}$	2.48	1.41	0.99	0.5	0.33

4.2 光学特性参量的反演误差

图2(a)和2(b)为自然对数变换和矩变换条件下25组数据的光学特性参量估计准确度.所有数据中,

光源-检测器的最小和最大距离分别设置为1.55 mm和9.95 mm,分辨率为0.1 mm,涵盖了85个数据点.所有数据的自然对数变换和矩变换吸收系数平均相对误差分别为7.70%、16.60%、9.79%、8.42%、7.04%、6.71%,有效散射系数的相对误差分别为8.25%、9.66%、7.96%、6.09%、5.55%、6.58%.由此可以看出,矩变换的吸收系数和有效散射系数的相对误差依次降低直到阶次大于3. Cen等通过残差分析和参量评价证明自然对数变换是最优的变换方式.而本文提出的矩变换,3阶次变换相比于原始数据和自然对数变换,吸收系数的重构误差降低了57.59%、8.57%,有效散射系数的重构误差降低了42.55%、32.73%.

由图2可以看出原始数据(0阶矩变换),当 $\mu_s' = 4$,输运平均自由程为2.27、2.38、2.45、2.46和2.48时(对应于图2中的Group number为1、6、11、16、21),吸收系数和有效散射系数的重构误差都呈现了明显的误差峰值.造成这一结果的原因是漫反射方程最优光源-检测器距离应大于1-2倍输运平均自由程,而本仿真给出的最小1.55 mm的光源-检测器距离不足以满足这一条件,导致较大的重构误差.当采用log变换或矩变换后,重构误差都得到了有效改善,说明数据变换可有效地抑制近光源处的模型误差,提高重构准确度.

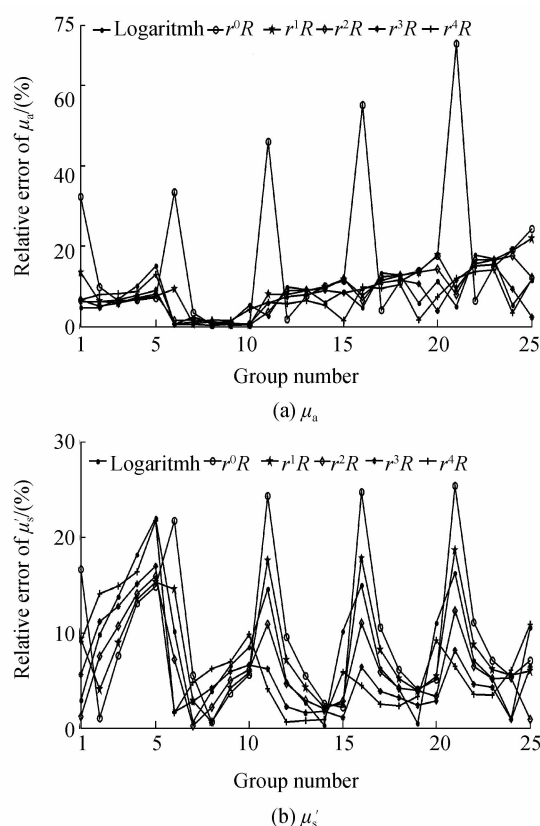


图2 25组数据不同数据变换下的相对误差

Fig. 2 Relative errors of estimating 25 groups by all the data transformation

4.3 不同信噪比噪音下的 0 阶矩和 3 阶矩变换

由于真实的实验数据都是有噪音的,图 3 给出了不同信噪比条件下的 0 阶矩变换和 3 阶矩变换 25 组数据的 μ_a 和 μ_s' 相对误差值(每次加噪的随机噪音都重复 10 次).从图中可以看出,随着噪音的加大,吸收系数和散射系数的重构误差都呈现增加的趋势.相比于 0 阶矩变换的重构误差,3 阶矩变换的重构误差对噪音更为敏感.在信噪比低于 50 dB 时,3 阶矩变换的重构误差要大于 0 阶矩变换,但是当信噪比超过 50 dB 时,3 阶矩变换的重构误差都要远小于 0 阶矩变换.造成这一现象的主要原因是当噪音较大时,3 阶矩变换的权重因子 r^3 相对 0 阶矩变换 r^0 ,放大了远光源处的噪音,增大了噪音对拟合残差的贡献率.尽管仿真结果表明 3 阶矩变换对噪音更为敏感,但是只要探测装置获得的信号信噪比大于 50 dB(这一信噪比要求是光学精密测量仪器所具备的),3 阶矩变换仍然可以降低光学特性参量的重构误差.

4.4 拟合残差统计分析

一个好的非线性最小二乘参量估计算法应保证拟合残差满足零均值不相关正态分布.图 4 以 $\mu_a = 0.06 \text{ cm}^{-1}$ 、 $\mu_s' = 4 \text{ cm}^{-1}$ 为例给出了对数变换、以及 0 阶至 4 阶矩变换下的残差分布直方图(其中 0 阶估计等同于未经变换的原始数据).从图中可以看出,相比于

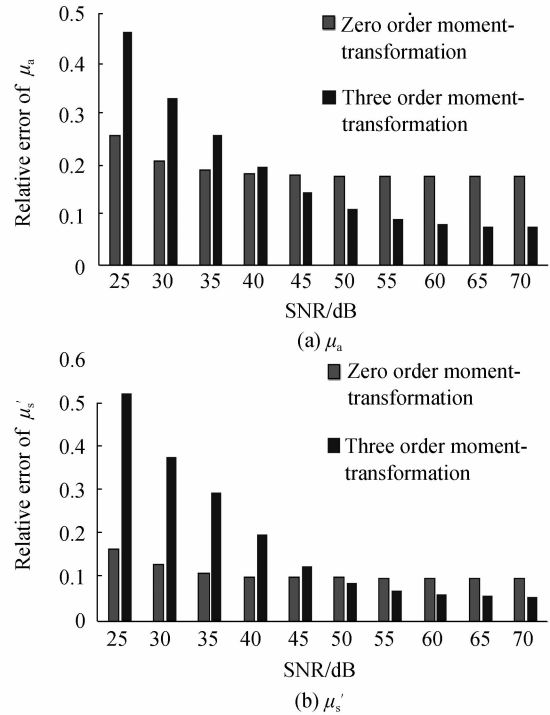
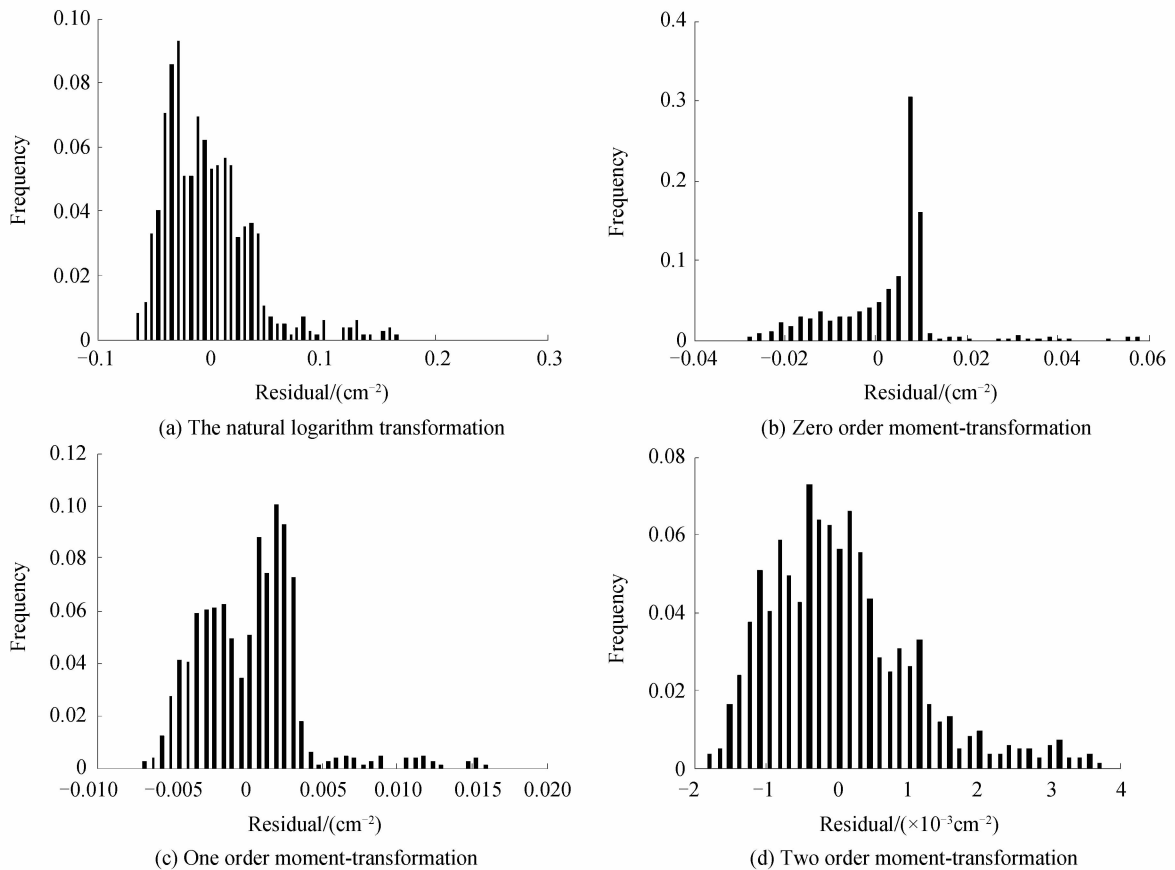


图 3 不同信噪比下所有数据的相对误差分布直方图(每一个信噪比的噪音随机 10 次)
Fig. 3 Relative error histograms for the reflectance data from withall data for SNR (each noise includes 10 replications)



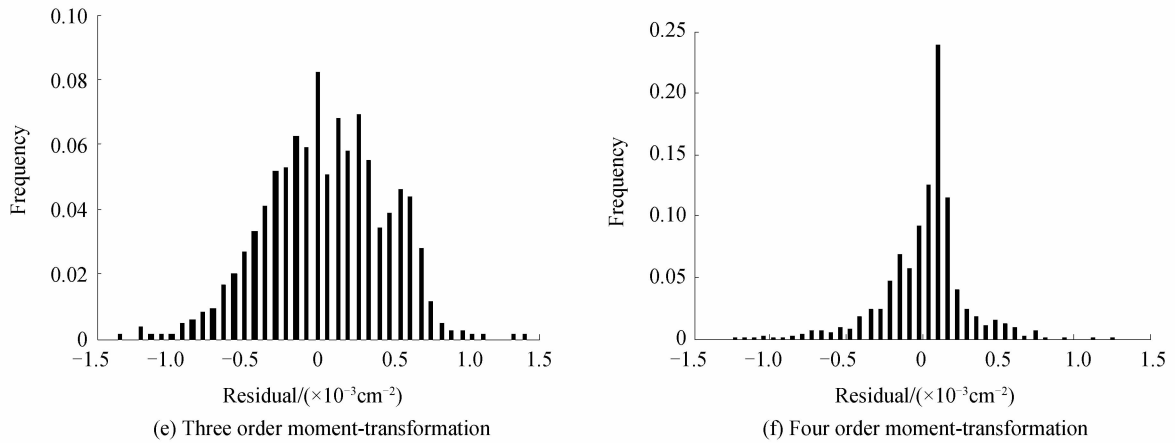


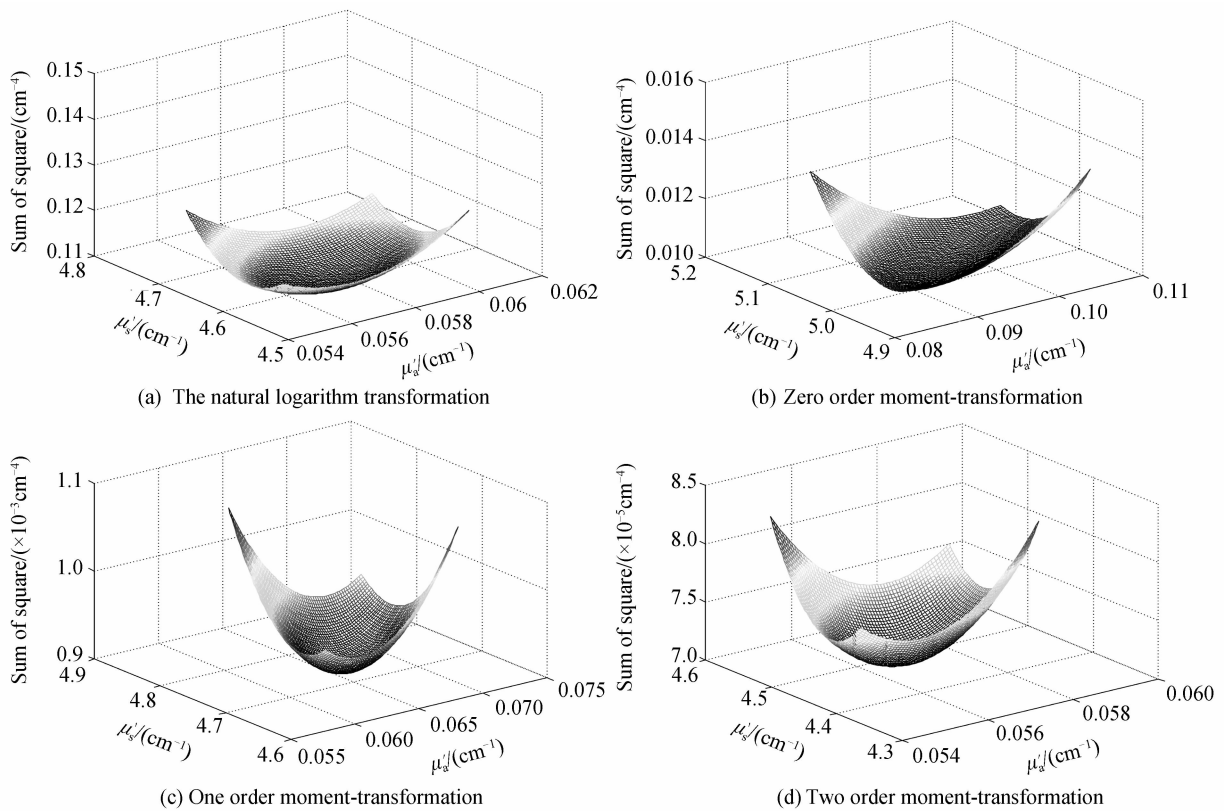
图 4 $\mu_a=0.06 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s=4 \text{ cm}^{-1}$ 的残差分布直方图

Fig. 4 Residual histograms for the reflectance data with $\mu_a=0.06 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_s=4 \text{ cm}^{-1}$

其它数据变换,3阶和4阶矩变换的数据残差表现出更为明显的零均值正态分布.这六种变换条件下的游程数(符号的变化加1)分别为:13.6、5.4、9.4、22.8、31.9和31.1.可以发现3阶矩变换和4阶矩变换的游程最为接近测量数据点的一半($85/2=42.5$),说明3阶矩变换和4阶矩变换残差的相关性最小.综合残差分布直方图和游程检验结果表明:3阶和4阶矩变换相比于自然对数变换,拟合残差更为符合非线性最小

二乘参量估计算法的统计假设检验.

图5为95%置信区间^[19]范围内, $\mu_a=0.06 \text{ cm}^{-1}$ 、 $\mu_s=4 \text{ cm}^{-1}$ 相对应的残差平方和的3维分布图.从图中可以看到:3阶矩变换的置信区间范围最接近真实值,且 μ_a 和 μ_s 的相对拟合误差远远小于自然对数变换和其他阶矩变换;另一方面,从曲面的形态来看,3阶矩的曲面形态更为陡峭,表示其具有最好的收敛性,能够更加直观地得到最优的 μ_a 和 μ_s 评价价值.



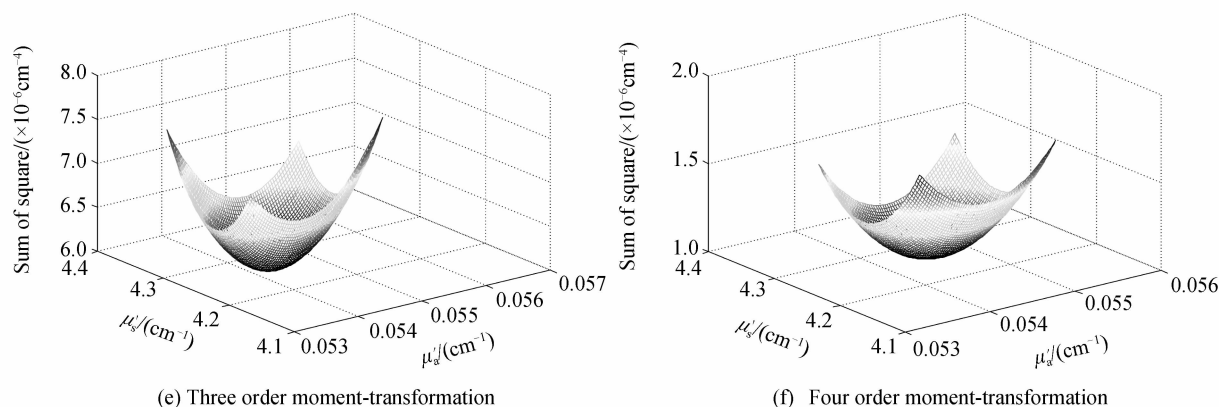


图5 $\mu_a=0.06\text{ cm}^{-1}$, $\mu_s'=4\text{ cm}^{-1}$ 残差平方和的3D图
Fig. 5 3-D plot of sum of squares for residuals with $\mu_a=0.06\text{ cm}^{-1}$, $\mu_s'=4\text{ cm}^{-1}$

5 结论

针对漫射模型在近光源区具有较大模型误差,导致光学特性参量反演准确度较低的问题,提出了一种利用矩变换方法,改变原始数据形态,提高反演准确度的方法.比较了不同阶次条件下的光学特性参量反演准确度.研究表明,在无噪音条件下,3阶矩变换取得了最佳的光学特性参量估计准确度.其中,吸收系数 μ_a 重构的相对误差为 7.04%;有效散射系数 μ_s' 重构的相对误差为 5.55%,相比于自然对数变换, μ_a 估计误差降低了 8.57%; μ_s' 降低了 32.73%.在信号噪音满足一定条件情况下(大于 50 dB),3阶矩变换仍然能获得较高的光学参量反演准确度.

参考文献

- [1] ZHANG Lian-shun, ZHANG Chun-ping, WANG Xin-yu, et al. Simulation study of noninvasive determination of the optical scattering and absorption coefficients of biological tissue [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2002, **19**(4): 318-322.
张连顺, 张春平, 王新宇, 等. 生物组织光学特性参量无损测量的模拟研究[J]. *量子电子学报*, 2002, **19**(4): 318-322.
- [2] ZHANG Hang, YING Jin-pin, ZHOU Bin-he, et al. Reconstructing optical parameters of tissue with genetic algorithm[J]. *Chinese Journal of Biomedical Engineering*, 2001, **20**(5): 430-435.
张航, 应金品, 周斌和, 等. 用遗传算法重构生物组织的光学特性参量[J]. *中国生物医学工程学报*, 2001, **20**(5): 430-435.
- [3] QIN J, LU R. Monte Carlo simulation for quantification of light transport features in apples [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2009, **68**(1): 44-51.
- [4] WANG Xi-cang, HUA Zhen, MENG Zhao-kun. Time domain model of light transport in multi-layer matched biological tissue [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(7): 1060-1064.
王喜昌, 华臻, 孟兆坤. 光在多层匹配生物组织中的时域传输模型[J]. *光子学报*, 2006, **35**(7): 1060-1064.
- [5] SHEN Ji-hong, SHANG Shou-ting, ZHAO Xi-ren. Functional transformation GM(1,1) model constructed for ship pitching [J]. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 2001, **33**(3): 291-294.
沈继红, 尚寿亭, 赵希人. 舰船纵摇运动函数变换 GM(1,1)
- 模型研究[J]. *哈尔滨工业大学学报(自然科学版)*, 2001, **33**(3): 291-294.
- [6] QIAN Wu-yong, DANG Yao-guo. New type of data transformation and its application in GM(1,1) model [J]. *Systems Engineering and Electronics*, 2009, **31**(12): 2879-2883.
钱吴永, 党耀国. 一种新型数据变换技术及其在 GM(1,1) 模型中的应用[J]. *系统工程与电子技术*, 2009, **31**(12): 2879-2883.
- [7] FU Ying, ZHANG Guang-lie, YANG Ru-qing. Date mapping optimization based grey model [J]. *Systems Engineering and Electronics*, 2004, **26**(4): 430-436.
付莹, 张广列, 杨汝清. 基于数列变换优化的灰色系统模型 [J]. *系统工程与电子技术*, 2004, **26**(4): 430-436.
- [8] CEN H, LU R, DOLAN K. Optimization of inverse algorithm for estimating the optical properties of biological materials using spatially resolved diffuse reflectance [J]. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2010, **18**(6): 853-872.
- [9] FARRELL T J, PATTERSON M S, WILSON B. A diffusion-theory model of spatially-resolved, steady-state diffuse reflectance for the noninvasive determination of tissue optical properties vivo [J]. *Medical Physics*, 1992, **19**(4): 879-888.
- [10] KIENLE A, PATTERSON, M S. Improved solutions of the steady-state and the time-resolved diffusion equations for reflectance from a semi-infinite turbid medium [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1997, **14**(1-3): 246-254.
- [11] HASKELL R C, SVAASAND L O, TSAY T T, et al. Boundary conditions for the diffusion equation in radiative transfer [J]. *Journal of the Optical Society of America. A*, 1994, **11**(10): 2727-2741.
- [12] MOURANT J R, FUSELIER, T, BOYER J, et al. Predictions and measurements of scattering and absorption over broad wavelength ranges in tissue phantoms [J]. *Applied Optics*, 1997, **36**(4-6): 949-957.
- [13] THOMAS F C, LI Y Y. On the convergence of interiro-reflective Newton methods for nonlinear minimization subject to bounds [J]. *Mathematical Programming*, 1994, **67**(1-3): 189-224.
- [14] BUDIASTRA I W, IKEDA Y, NISHIZU T. Optical methods for quality evaluation of fruits (part 1)-optical properties of selected fruits using the Kubelka-Munk theory and their relationships with fruit maturity and sugar content [J]. *Journal of the Japanese Society of Agricultural Machinery*, 1998, **60**(2): 117-128.
- [15] CUBEDDU R, D'ANDREA C, PIFFERI A, et al. Time-

- resolved reflectance spectroscopy applied to the nondestructive monitoring of the internal optical properties in apples[J]. *Applied Spectroscopy*, 2001, **55**(10): 1368-1374.
- [16] WANG L, JACQUES S L, ZHENG L. Monte Carlo modeling of light transport in mult-layered tissues [J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 1995, **47**(2): 131-146.
- [17] LIN Lin, ZHANG Lin-na, LI Xiao-xia, *et al.* Monte Carlo simulation based on diffuse hyperspectrum collection with detection fiber [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, **34**(1): 185-190.
林凌, 张林娜, 李晓霞, 等. 基于检测光纤的漫射高光谱采集的 Monte Carlo 仿真[J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, **34**(1): 185-190.
- [18] ZHNAG Tao, BAI Jing. Principle, current status and development of Monte Carlo modeling of migration in biological tissue [J]. *International Journal of Biomedical Engineering*, 2014, **31**(1): 24-28.
张涛, 白净. Monte Carlo 方法在生物组织中的光子迁移的原理、发展及应用[J]. *国际生物医学工程杂志*, 2014, **31**(1): 24-28.
- [19] MISHRA D K, DOLAN K D, YANG L. Confidence intervals for modeling anthocyanin retention in grape pomace during nonisothermal heating[J]. *Journal of Food Science*, 2008, **73**(1): 9-15.