

基于动态后验模拟的 PET 图象重建

龚铁柱 汪元美

(浙江大学生医系, 杭州 310027)

摘要 正电子发射成像是一种有效的生理功能性成像手段,但是由于投影数据中噪声大而给重建带来困难,为此提出了利用其他高质量的解剖成像结果构造的分割模板先验来进行完全 Bayesian 重建以提高重建效果. 分割模板先验可以表示为包含超验参数的 Markov 场形式,但是它的非凸性和超验参数的存在使得无法用常规的方法得到最大后验估计,为此采用动态后验模拟算法计算后验平均估计. 基于满足条件分布的动态后验模拟法可以同时更新象素的密度和超验参数,并且容易得到重建的方差和置信区间. 将这种方法和似然估计、最大后验估计结果进行比较,重建的结果无论在空间分辨率和抑制噪声方面都有取得了好的效果.

关键词 正电子发射成像 Bayesian 重建 动态随机模拟法 分割模板先验

中图法分类号: TP391 文献标识码: A 文章编号: 1006-8961(2002)04-0346-05

A PET Imaging Reconstruction Based on Dynamic Posterior Simulation

GONG Tie-zhu, WANG Yuan-mei

(The biomedical department of Zhejiang University, Hangzhou 310027)

Abstract Positron emission tomography(PET) is a noisy functional medical imaging model. In this paper a fully Bayesian PET reconstruction method is presented for combining a segmented anatomical membrane a priori. The segmented anatomical membrane a priori is based on the fact that the radiopharmaceutical activity is similar throughout each region and the anatomical information can be obtained from other imaging modalities such as CT or MRI. The prior distributions are formed as some kind of Markov random field. Due the non-convex and the hyper-parameters in the prior, it is difficult to use point estimator such as maximum a posteriori(MAP). So we used Dynamic Markov chain Monte Carlo posterior simulation method to get a minimum mean square error (MMSE) estimator which update the hyper-parameters as well as density data. The variances and credit area of the reconstruction results can be easy gotten by MMSE. We compared the reconstruction result of ML, MAP and MMSE, and find that the segmented anatomical membrane a priori exhibit improved the noise and resolution properties and Dynamic Markov chain Monte Carlo is mostly suitable for fully Bayesian reconstruction.

Keywords Positron emission tomography, Bayesian reconstruction, Dynamic posterior simulation, Segmented membrane priors

0 引言

正电子发射成像 (Positron Emission Tomography, PET) 是一种有效的功能图象获取方法,一般用于血流及代谢功能行为的研究. 正电子成像的原理是根据成像的具体要求将特定的放射性药品注入人体,不同的体素对其具有不同的吸收性. 放射性核素的衰减产生正电子,它与人体组织中的负

电子发生湮灭并发出一对反向传播的光子,成像的过程就是利用环绕在人体周围的探测器阵列进行发射光子的测量. 重建的目的是根据光子计数信息,重建放射性药品在人体中的密度分布.

正电子成像可以看作是有限光子的计数过程. 实际图象重建总是对连续密度分布进行离散化,并假设每个象素的密度独立且服从 Poisson 分布. 光子记数过程可以用一个线性模型表示,因而测量结果也是服从 Poisson 分布的随机量. Poisson 分布数据的特点

是它的方差与均值相等, 也即噪声与数据本身是联系在一起的, 测量值越大, 其包含的随机噪声越大, 因而正电子成像数据的噪声特性相对 MRI、CT 数据要差得多, 这给重建带来了很大的困难。

用于图象重建的方法可以归为确定性方法和基于概率的估计方法^[2]两大类. 对于正电子成像这种随机性很强的情况, 基于概率的重建方法准确性更高^[1,3]. 最早用于正电子成像重建的是最大似然法^[1], 但利用 Bayes 公式引入各种先验分布的 Bayesian 重建更为有效^[3,4], 因为重建结果的空间分辨率和噪声特性都要好一些. 使用 Bayesian 方法需要考虑的问题: 一是如何选择一个合理的选择规则, 因为不恰当的先验会得到完全错误的重建结果; 二是如何计算后验估计. 一般的诸如最大后验估计(maximum a posteriori)^[3,4]或后验平均估计可以看成是某种代价函数下的点估计. 由于先验函数中存在超验参数(Hyper-parameter), 所以上述那些方法都不能解决如何合理地选择超验参数的问题. 本文提出了解决这两个问题的方法, 即利用其他的高质量成像方法如 MRI 所提供的人体形态学结构图象来构造一种分割模板先验, 以保证先验的可靠性; 重建结果采用基于动态模拟(Markov chain Monte Carlo, MCMC)来计算, 这种方法不仅能够很好地解决超验参数的选择, 而且可以得到对于估计结果的诸如信任域等统计特性的估计.

1 分割模板先验的构造

任何一种 Bayesian 重建方法都需要首先确定先验分布函数, 因为采用何种先验对于重建结果起着至关重要的影响. 分层 Bayes 公式形式如下

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}) \quad (1)$$

上式中, \mathbf{x} 、 \mathbf{y} 分别代表图象密度数据和测量数据, $\boldsymbol{\theta}$ 是图象先验密度函数中的超验参数向量; $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ 是似然函数; $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ 是图象的先验分布, $p(\boldsymbol{\theta})$ 是超验参数的分布. 先验分布函数一般利用定义在某种邻域结构上的 Markov 随机场表示, 其形式如下

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\theta})} \exp(U(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})) \quad (2)$$

其中 $U(\mathbf{x})$ 被称为 Gibbs 能量函数(势函数); $Z(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{x}} \exp(U(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}))$ 是配分函数, 当能量函数和邻域结构确定以后, 它仅与 $\boldsymbol{\theta}$ 有关.

根据图象的局部相关性和连续性假设, 先验大多定义在基于相邻像素对间的邻域结构上, 如二维

情况下的 8 邻域, 三维的 26 邻域. Markov 场的势函数多采用指数函数形式, 由于二次先验会产生全局的平滑, 使得图象的边界变得模糊, 因而有一些先验取指数系数为 1~2 之间的值; 另一种弥补的方法是采用非线性的能量函数, 使得势函数超过一定的阈值以后饱和^[4]. 因这些先验都不能直接描述图象边界的存在, 为此有人采用复合 Markov 场, 这种复合 Markov 场定义了象素之间的一种线性过程, 以表示两个相邻象素之间是否有边界存在. 线性过程的值可以取离散的 0、1, 也可以在 0、1 之间连续取值. 采用线性过程处理将加大计算量, 同时如何确定线性过程的取值也是一个难题.

根据正电子成像的原理, 每个象素的密度均值主要取决于其所属的体素类型, 从视觉效果而言, 不同体素的灰度不同. 采用邻域 Markov 场来表示先验, 并要求先验满足下面的一些条件:

(1) 对于同一种组织内部, 先验分布应当保证重建结果的连续性;

(2) 对于不同的组织之间, 先验分布应当允许重建密度数据有跃变;

(3) 由于连续密度函数离散化时, 受有限分辨率影响, 部分位于不同组织之间的象素属于中间过渡(partial pixels), 对于这种情况应当允许渐变的密度过渡.

为了满足这些要求, 故考虑利用高质量的解剖结构性图象, 如 MRI 成像结果, 来构造对所成像部位的解剖先验, 即基于分割的图象分类信息. 以脑部成像为例, 大脑的组织包括灰质、白质、脑脊液, 所以可以将 MRI 图象分割并标记为上述的 3 类和过渡象素. 对于二维重建, 采用 8 邻域二次先验, 构造先验的方法为: 首先定义一个计算象素(i, j) 邻域点(m, n) 密度数值时, 所使用的选择函数

$$s_{i,j}(x_{mn}) = \begin{cases} x_{mn} & l_{ij} = l_{mn} \\ x_{ij} & \text{其他} \end{cases} \quad (3)$$

其中, x_{ij} 、 l_{ij} 分别代表坐标(i, j) 处的象素值和分割后的标记类别. 为了满足使先验所需的条件, 在计算每个象素势函数的值时, 进行如下处理:

(1) 对位于某个区域(包括部分象素组成的区域)内部的象素点, 在计算势函数时, 使用选择函数, 以保证区域内部的连续性;

(2) 对位于两个纯区域(灰质、白质、脑脊液)边界上的象素点, 在计算势函数时, 同样使用选择函数, 这样可以允许密度值的突变;

(3) 对位于由纯区域与部分象素组成的区域, 以及部分象素区域相互之间边界上的象素点, 计算势函数时, 不使用选择方法, 以保证渐变的边界。

利用这种方法, 先验分布函数可以定义为如下的势函数: 对位于某种区域内部的点, 以及两种纯区域之间的边界点, 势函数为

$$U(\mathbf{x}) = - \sum_{(i,j) \sim (m,n)} \beta(x_{ij} - s_{ij}(x_{mn}))^2 - \delta \sum_{i,j} x_{ij}^2 \quad (4)$$

其中, $(i,j) \sim (m,n)$ 表示象素 (i,j) 的 8 邻域象素, β 是超验参数. 先验分布函数的第 2 项是用来保证密度数据非负性, δ 是一个非常小的系数, 保证第 2 项比第 1 项要小得多. 对部分象素区域之间, 以及部分象素区域与纯区域之间的边界象素点, 直接使用原象素值, 势函数为

$$U(\mathbf{x}) = - \sum_{(i,j) \sim (m,n)} \beta(x_{ij} - x_{mn})^2 - \delta \sum_{i,j} x_{ij}^2 \quad (5)$$

对于如何利用这些解剖的知识先验, 文献[6]采用了在重建的同时, 进行动态分类的多层先验, 其计算相当复杂, 因为它要求在重建的同时, 进行区域的分割和多层先验的更新。

2 重建图象后验估计

常用的后验估计方法, 如最大后验估计和后验均方估计都可以看成是采用某种代价函数下的点估计, 这种点估计方法的缺陷在于: (1) 不能对估计结果的统计特性, 如置信度和方差等, 给出相应的信息; (2) 对于先验函数中的超验参数没有好的计算方法, 一般是采用伪最大期望或是交叉验证的方法进行预先计算, 这种计算非常耗时。^[7]

满足条件分布的动态后验模拟方法(Markov chain Monte Carlo, MCMC) 能够很好地克服点估计方法的这些缺点^[8,9]. 首先对于超验参数问题, 这

$$\begin{aligned} \frac{p(x'_{ij} | \mathbf{x}_{-ij}, \mathbf{y}) p(x'_{ij} | x_{ij})}{p(x_{ij} | \mathbf{x}_{-ij}, \mathbf{y}) p(x_{ij} | x_{ij})} &= \frac{p(\mathbf{y} | x'_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) p(x'_{ij}, \mathbf{x}_{-ij} | \beta) p(\beta)}{p(\mathbf{y} | x_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) p(x_{ij}, \mathbf{x}_{-ij} | \beta) p(\beta)} \times \frac{G(x_{ij}; x'_{ij}, 1)}{G(x_{ij}; x_{ij}, 1)} \\ &= \frac{p(\mathbf{y} | x'_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) p(x'_{ij}, \mathbf{x}_{-ij} | \beta)}{p(\mathbf{y} | x_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) p(x_{ij}, \mathbf{x}_{-ij} | \beta)} \times \frac{G(x_{ij}; x'_{ij}, 1)}{G(x_{ij}; x_{ij}, 1)} \\ &= \prod_t \exp\{-d'_{ij}(x'_{ij} - x_{ij})\} \left| \frac{\sum_{(m,n)} p'_{mn} x_{mn} + p'_{ij}(x'_{ij} - x_{ij})}{\sum_{(m,n)} p'_{mn} x_{mn}} \right| \times \\ &\quad \exp\left| \sum_{(i,j) \sim (m,n)} U(x_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) - \sum_{(i,j) \sim (m,n)} U(x'_{ij}, \mathbf{x}_{-ij}) - \delta((x'_{ij})^2 - x_{ij}^2) \right| \times \\ &\quad \frac{\Gamma(x_{ij}) x_{ij}^{x'_{ij}-1}}{\Gamma(x'_{ij}) x'_{ij}^{x_{ij}-1} \exp(x'_{ij} - x_{ij})} \end{aligned} \quad (7)$$

种方法可以同时更新图象密度数据和超验参数值, 因而超验参数可以在计算开始时赋予任意的初始值; 其次, 其最终的重建结果是用各次抽样的时间平均来近似后验分布的统计平均, 同样可以利用这些结果来得到关于估计结果的方差、置信度等参数。

动态模拟方法的基本原理是对后验分布进行抽样, 根据所采用的判决准则, 可以分为 Gibbs 采样和 Metropolis-Hastings 采样, 而后一种方法的效果要更好. 利用 Metropolis-Hastings 公式的抽样方法如下: 假设是一维情况, 后验分布概率为 $p(m|n)$, 每步从当前的 m 值按照一个预先指定的产生概率 $g(m, m')$ 得到一个新的备选值 m' , 然后按下面的概率决定是否接受这个值

$$\min\left| 1, \frac{p(m'|n)g(m, m')}{p(m|n)g(m', m)} \right| \quad (6)$$

式中第 2 项称为接受概率。

采用 Metropolis-Hastings 公式(式(6)), 正电子重建中每个更新循环可以分成两步实现:

(1) 更新象素密度值. 对每个象素点, 根据当前的密度值产生一个新的备选值. 根据共轭先验的原理, 采用形状参数为当前的密度值, 尺度参数为 1 的 Gamma 分布, 利用 Metropolis-Hastings 公式判断是否接受新的备选值;

(2) 完成全部的象素更新以后, 用同样方法更新超验参数。

对于电子成像, 更新步骤如下: 假设图象密度数据估计值为 $\mathbf{x} = \{x_{ij}\}$, 测量数据为 $\mathbf{y} = \{y_t\}$, 描述实际成像系统的概率矩阵记为 $\mathbf{P} = \{p'_{ij}\}$. 首先对于图象密度数据, 可以按照行、列的次序来进行处理, 每次只更新一个象素点的密度数据值, 而保持其他各点的数值不变. 坐标 (i,j) 处的象素点的密度数据的接受概率为

上式中, \mathbf{x}_{-ij} 表示除 (i, j) 坐标以外的其他全部象素密度向量, G 代表 Gamma 分布.

其次是对超验参数 β 值的更新. 假设超验分布处于以当前值为中心的一个均匀分布, 其产生概率也是从这个均匀分布得到, 则超验参数的接受概率为

$$\frac{p(\beta' | \mathbf{x}, \mathbf{y}) p(\mathbf{x} | \beta') p(\beta | \beta')}{p(\beta | \mathbf{x}, \mathbf{y}) p(\mathbf{x} | \beta) p(\beta' | \beta)} = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}) Z(\beta')}{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}) Z(\beta)} \sum_x (\beta - \beta') U(x) = \frac{Z(\beta')}{Z(\beta)} \sum_x (\beta - \beta') U(x) \quad (8)$$

上式计算中, 要求知道配分函数在两个超验参数点的比率, 这是可以预先计算的, 例如采用文献[9]的方法.

以上的两步组成一次迭代. 对于算法的收敛性判断方法有多种, 包括后验分布函数值, 超验参数变化, 分布象素更新的接受率. 由于最终的结果是利用时间平均来近似统计平均, 因而对于收敛性的判断首先根据超验参数的变化, 然后根据后验分布函数

值的变化来终止迭代. 实验结果表明, 在一定范围内超验参数影响变化不大.

3 实验结果和讨论

利用 Hoffman 人头模型的一个截面进行仿真重建实验. 原图象由灰质、白质和脑脊液组成, 重建过程中采用象素平均得到 128×128 大小的图象, 如图 1(a) 所示. 利用 Poisson 随机数产生算法, 在图 1(a) 中加上 Poisson 噪声, 如图 1(b). 假设 T1 的 MRI 成像, 并假设 MRI 成像过程具有位置不变性, 成像结果的噪声为加性 0 均值 Gaussian 白噪声, 可以用原模型来近似 MRI 成像结果. 因而首先利用未加噪声的原图象将其分割为灰质、白质、脑脊液和部分象素 4 类. 测量数据采用平行投影, 在 360° 方向上生成 192×192 个投影数据.

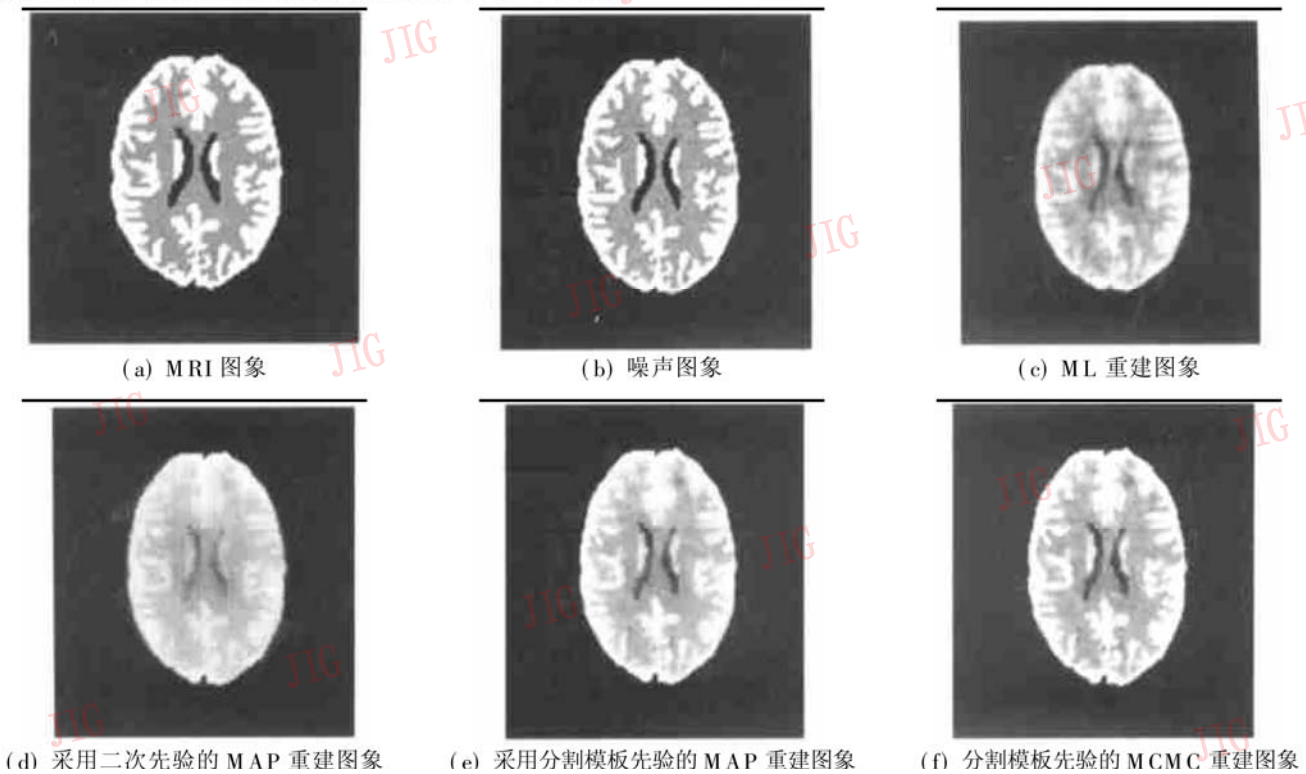


图 1 重建的模型数据和重建图象

为了比较各种方法重建的效果, 分别计算了 ML (最大似然估计)、一般二次先验的 MAP、本文分割模板先验的 MAP (超验参数从 MCMC 方法得到) 和 MCMC 方法后验平均的重建结果, 重建的结果分别如图 1 所示. 模型矩阵是预先计算的. ML 及 MAP 采用 Fletcher-Reeves 公式的共轭梯度法, 迭代次数限制在 50 次以内 (收敛则不到 50 次), 收敛的判别条件是梯度二次累加和小于 0.05.

一般的, 比较各种重建方法多采用二次均方平

均误差准则 (root mean squared error RMSE), 其公式如下

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n_{\text{pixel}}} \sum_n (x_n - \lambda_n)^2} \quad (9)$$

表 1 是对 RMSE 值归一化的结果.

表 1 对 RMSE 值归一化的结果

ML	二次先验 MAP	模板先验 MAP	后验模拟法
13.4	11.28	8.2	6.4

由此可见,利用本文的方法对重建效果的提高是较显著的.另外,一般为了保证先验信息的有效性,对每个病人应当使用他自己的解剖成像结果来构造分割模板先验.

由于后验模拟的方法是对每个象素进行逐一更新,因而其在计算上耗费比较大.实验表明,ML、MAP的平均计算时间在几分钟左右.而后验模拟的方法在达到超验收敛时,耗时达数小时,因此如何提高这种方法的速度将是今后要解决的问题.但是,我们认为一方面PET成像的独特优点,例如对癌症的早期诊断,有必要设法获得高质量的成像结果;另一方面MRI图象非常的容易得到,所以这里所提出的方法具有一定的使用价值,实际操作也不困难.

参 考 文 献

- 1 Vardi Y, Shepp L A, Kaufman A L. Statistical model for positron emission tomography [J]. J. Amer. Statist. Ass., 1985, 80(389): 8~ 20.
- 2 Djafari M Ali. From deterministic to probabilistic approach to solve inverse problem[A]. In: Proc. of SPIE, Bayesian Inference for inverse problems[C], San Diego, 1998, 3459: 2~ 11.
- 3 Levitan E, Herman G T. A maximum a posterior probability expectation maximization algorithm for image reconstruction in emission tomography[J]. IEEE Trans. Med. Imag., 1987, MI-6(3): 185~ 192.
- 4 Mumcuoglu E, Leachy R, Cherry S R. Fast gradient-based methods for Bayesian reconstruction of transmission and emission PET images [J]. IEEE Trans. Med. Imag., 1994, 13(4): 687~ 701.
- 5 Lee S J, Rangarajan A, Gindi G. Bayesian image reconstruction in SPECT using higher order mechanical models as priors[J]. IEEE Trans. Med. Imag., 1995, 14(4): 669~ 680.
- 6 Bowsler J E, Johnson V E, Timothy T G *et al.* Bayesian reconstruction and use of anatomical a prior information for emission tomography [J]. IEEE Trans. Med. Imag., 1996, 15(5): 673~ 686.
- 7 Thompson A M, Brown J C, Kay J W *et al.* A study of methods of choosing the smoothing parameter in image restoration by regularization[J]. IEEE Trans. PAMI, 1991, 13(4): 326~ 339.
- 8 Smith A F M, Roberts G O. Bayesian computation via gibbs sampler and related Markov chain Monte Carlo methods[J]. J. R. Statist. Soc. B, 1993: 55(1): 3~ 23.
- 9 Weir Iain S. Fully bayesian reconstruction from single-photon emission computed tomography data [J]. J. Amer. Statistic. Assoc., 1997, 92(437): 49~ 60.



龚铁柱 浙江大学生医系博士研究生. 主要研究方向为图象处理和医学成像重建.



汪元美 浙江大学生医系教授, 博士, 博士生导师. 国家自然科学基金委员会信息科学部电子学科评审专家组成员. 主要研究方向为人工神经网络、医学成像和图象处理.