

一种基于全局最小乘方法的磁共振波谱目标 频率选择的量化方法

曾卫明^{1,2}, 梁晓云², 罗立民², 方志军¹, 王正友¹, 伍世虔¹

(1. 江西财经大学计算机应用系, 江西南昌 330013; 2. 东南大学影像科技实验室, 江苏南京 210096)

摘 要: 磁共振波谱中, 感兴趣成分的单独量化不但符合许多实际应用的要求, 而且同时也提高了量化的速度和精度. 为此本文提出了一种基于频率选择的波谱信号量化方法, 该方法通过全局最小乘方法来估计波谱信号的非线性参数, 又结合前向和后向的 APES 方法来估计其线性参数. 文中的模拟和活体数据实现表明, 本文方法在计算速度和参数估计的稳健性上要明显优于经典的 HSVD 和 HTLS 方法, 同时其综合性能比 Stoica 等提出的频率选择方法 SELF-SVD 还好.

关键词: 全局最小乘方; 磁共振波谱; 频率选择方法; 量化

中图分类号: TP391 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2005) 07-1209-04

One Quantitative Method Based on Total Least Squares for Frequency-Selective Magnetic Resonance Spectroscopy

ZENG Wei ming^{1,2}, LIANG Xiao-yun², LUO Li-min², FANG Zhi-jun¹, WANG Zheng-you¹, WU Shi-qian¹

(1. Dept. of computer Application, Jiangxi University of Finance & Economics, Nanchang, Jiangxi 330013, China;

2. Lab of Image Tech., Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract: Frequency-selective quantification can not only apply to many applications of magnetic resonance spectroscopy (MRS) but also improve the speed and accuracy of parameters estimation of selected spectral components. Thus, we presented a new frequency selective method for MRS quantification, which estimated the nonlinear and linear parameters of the selected components based on total least squares and forward backward APES respectively. From the experiments on both simulate data and MRS data in vivo, we can see that the computing speed and estimation stabilization of our method are obviously superior to those of the classical quantitative methods HSVD and HTLS; furthermore, its performance of parameters estimation is better than that of the frequency selective method SELF-SVD proposed by Stoica et al.

Key words: total least squares; magnetic resonance spectroscopy; frequency selective method; quantification

1 引言

磁共振波谱(MRS)可以用于无创伤性地检测身体的主要代谢产物. 对预防和控制疾病, 探测大脑等许多方面都有很重要的作用^[1,2]. 然而, 由于涉及面非常广泛, 实际中要获取 MRS 的定量信息则相当困难. 一般的方法有基于时域的方法, 如常规的 HSVD、HTLS 等方法^[3,4], 以及基于频域的曲线拟合方法等. 时域方法可以直接对测量的信号进行分析, 波谱线型一般也可以由具体的解析函数来表示, 但分析的往往是整个波谱数据, 不能首先利用先验知识分割开感兴趣的目标成分, 因此影响了计算速度和精度; 而频域方法不易有具体的线型表达式, 且易产生震铃效应, 但其主要的优点是能够事先选择一定区域的感兴趣成分来量化分析, 从而可以节约计算时间,

同时也有针对性地提高了该感兴趣成分的量化精度. 可以看出, 时域方法的缺点不易克服, 而频域方法的缺点可以通过线型校正等预处理办法来较大地克服, 所以, 频域方法一直是研究的热点. 最近, Stoica 等提出了一种基于奇异值分解的频率选择量化方法(定义为 SELF-SVD)^[6], 该方法有效地利用频域方法的优点, 提高了参数量化速度以及信噪比较低情况下的量化精度. 实验证明其综合性能显然要优于 HSVD 方法以及 ER-SVD 方法^[7]. 针对频率选择方法这一良好的特性, 我们在 MRS 信号量化中, 也提出了一种基于全局最小乘方的频率选择方法(定义为 SELF-TLS), 该方法有效地发挥了 Stoica 方法的良好特性, 同时, 在关键的参数估计部分又有三个突出的优点: 1. 在估计非线性参数的过程中, 应用全局最小乘方的方法, 而 Stoica 利用的是最小乘方的方法, 显然, 前者在超定

方程系数估计中精度更高^[3]; 2. 在线性参数估计中, 采用的方法是前后两个方向相联合的 APES 方法(FBAPES), 而不仅仅是 SELF_SVD 方法中的前向 APES 方法, 理由是 FBAPES 方法比单纯的前向 APES 方法有更好的估计^[8,9]; 3. 考虑到实际中 MRS 信号往往容易发生相位偏移, 即非零相位, 所以我们在 SELF_TLS 方法中也对相位参数的量化进行了有关的研究, 显然这对 MRS 线型的校正和描述等都很有必要。

2 非线性参数的估计

通常, MRS 时域信号可以用 Lorentzian 模型函数表达为:

$$y_n = \sum_{k=1}^K a_k e^{j\phi_k} e^{(-d_k + j2\pi f_k)t_n} + e_n, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1)$$

其中 $j = \sqrt{-1}$, $t_n = n\Delta t$, Δt 为抽样间隔, N 和 K 分别为总的抽样点数和波峰数, e_n 是高斯噪声, f_k , d_k , a_k 及 ϕ_k 为 MRS 信号的四个重要参数, 分别对应谱中 k 峰的频率、衰减系数两个非线性参数以及幅度、相位两个线性参数。为方便下面论述, 式(1)可改写为

$$y_n = \sum_{k=1}^K \rho_k \lambda_k^n + e_n, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2)$$

其中, $\rho_k = a_k e^{j\phi_k}$, $\lambda_k = e^{(-d_k + j2\pi f_k)\Delta t}$ 。

定义 $Y = [Y_1 \ Y_2 \ \dots \ Y_N]$ 为时域 $y = \{y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n\}$ 对应的频域数据。根据先验知识, 我们选择的一段待研究的频率区域数据为

$$\bar{Y} = \{Y_m \ Y_{m+1} \ \dots \ Y_{m+M}\} \quad (3)$$

则可以证明^[6]:

$$Z = AX + \Gamma U + \bar{A}X + \varepsilon \quad (4)$$

其中

$$Z = \begin{bmatrix} w_m^1 Y_m & \dots & w_{m+M}^1 Y_{m+M} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ w_m^S Y_m & \dots & w_{m+M}^S Y_{m+M} \end{bmatrix}, w_k = e^{j2\pi f_k / N}, k = 0, \dots, N-1 \quad (5)$$

$$A = \begin{bmatrix} \lambda_1^1 & \dots & \lambda_n^1 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \lambda_1^S & \dots & \lambda_n^S \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} \rho_1 w_m^* b(\lambda_1) & \dots & \rho_1 w_{m+M}^* b(\lambda_1) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \rho_n w_m^* b(\lambda_n) & \dots & \rho_n w_{m+M}^* b(\lambda_n) \end{bmatrix} \quad (6)$$

上式中, 符号 $*$ 表示共轭转置, 而

$$v_k = [w_k^0 \ w_k^1 \ \dots \ w_k^{N-1}]^T, b(\lambda_k) = [\lambda_k^0 \ \lambda_k^1 \ \dots \ \lambda_k^{N-1}]^T \quad (7)$$

$$U = \begin{bmatrix} w_m^1 & \dots & w_{m+M}^1 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ w_m^S & \dots & w_{m+M}^S \end{bmatrix} \quad (8)$$

式(4)中, Γ 式子比较复杂; \bar{A} , X 对应所选区域外的成分, 表达式与 A , X 相似; ε 对应噪声, 它们都与后面的论述关系不大, 这里不用具体的式子来描述。另外, S 是一个用户参数, 条件是 $M \geq n + S$, n 为所选择区域的感兴趣成分的数量, 本文取 $n = 1$, $s = \lfloor M/3 \rfloor$ 。

定义 $\Pi_{\bar{U}}^\perp$ 为 U 的零空间上的正交投影, 则

$$\Pi_{\bar{U}}^\perp = I - U^* (UU^*)^{-1} U \quad (9)$$

所以, 式(4)两边乘以 $\Pi_{\bar{U}}^\perp$ 可得^[6]:

$$Z \Pi_{\bar{U}}^\perp \approx A X \Pi_{\bar{U}}^\perp \quad (10)$$

设 $V \in \mathbb{C}^{S \times n}$ 由 $Z \Pi_{\bar{U}}^\perp$ 左奇异阵中的前 n 列向量组成, V_T 是 V 的前 $S-1$ 行矩阵, V_B 是 V 的后 $S-1$ 行矩阵, 则

$$V_B = V_T \Lambda \quad (11)$$

其中 Λ 对应式(2)中所选区域的 n 个 λ_k , 即 λ^{1-n} 为 Λ 矩阵的特征值。考虑到 V_B 和 V_T 在实际中都不存在噪声, 所以更加符合实际的表达应为

$$V_B \approx V_T \Lambda \quad (12)$$

这里采用精度较高的全局最小乘方来估计 Λ , 即

$$\min \| \Delta V_T \ \Delta V_B \|_F^2 \quad \text{在 } (V_T + \Delta V_T) = V_B + \Delta V_B \text{ 条件下} \quad (13)$$

其中, ΔV_T , ΔV_B 分别为 V_T 和 V_B 的噪声负偏差。

对增广矩阵 $[V_T \ V_B]$ 进行奇异值分解得:

$$[V_T \ V_B] = U \Lambda V^* \quad (14)$$

其中

$$V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix} \quad (15)$$

从而得^[3]:

$$\Lambda = -V_{12} V_{22}^{-1} \quad (16)$$

再求出特征值 λ^{1-n} 的估计, 并根据式(2)求得非线性系数 d_{1-n} 和 f_{1-n} 的估计分别为

$$f_k = \arg \tan(\operatorname{imag}(\lambda_k) / \operatorname{real}(\lambda_k)) / (2\pi \Delta t),$$

$$d_k = -\log(|\lambda_k|) / \Delta t \quad (17)$$

上式中, imag 和 real 分别代表复数的虚部和实部。

3 线性参数的估计

Jian Li 等^[8]提出了一种估计幅度和相位参数的自适应 FIR 滤波方法(简称 APES 方法), 该方法通常比 FFT 及 Capon 方法^[10]产生更加精确的谱估计, 特别是前向和后向联合的 APES 方法(简称 FBAPES), 它的估计精度通常还要比单纯的 APES 的估计精度更高^[8,9]。因此, 我们在估计非线性参数的基础上, 决定在 MRS 量化中引进 FBAPES 方法进行研究。下面, 我们对该方法进行论述。

定义 y_F 为从 MRS 信号 $\{y(t)\}$ 中构造的前向数据向量, 公式表示为

$$y_F(l) = [y(l) \ y(l+1) \ \dots \ y(l+I-1)]^T \quad (18)$$

其中, $l = 0, 1, \dots, L-1$, $L = N-1+1$, I 是用户参数。设 FIR 滤波器的传递函数为 $h(\lambda)$, 要求 $\{y(t)\}$ 通过该滤波器时, 我们选择的感兴趣成分(设其参数对应为 ρ 和 λ)完全通过滤波器, 而其他的成分则尽量过滤掉。令:

$$s(\lambda) = [1 \ \lambda^1 \ \dots \ \lambda^{L-1}]^T \quad (19)$$

则为了满足上述的滤波要求, 必须^[6,11]:

$$h^*(\lambda) s(\lambda) = 1, \quad \min \sum_{l=1}^L h^*(\lambda) y_F(l) - \rho |\lambda|^2 \quad (20)$$

由此解得:

$$\rho = h^*(\lambda) Y(\lambda) \quad (21)$$

其中

$$Y(\lambda) = \sum_{l=1}^L y(l) \lambda^{-l} \quad (22)$$

$$h(\lambda) = \frac{Q^{-1}(\lambda)s(\lambda)}{s^*(\lambda)Q^{-1}(\lambda)s(\lambda)} \quad (23)$$

$$Q(\lambda) = R - G(d)Y(\lambda)Y^*(\lambda) \quad (24)$$

$$R = \sum_{l=1}^L y(l)y^*(l) \quad (25)$$

$$G(d) = \sum_{l=1}^L e^{(-2dl)} \quad (26)$$

实质上上面所述的是前向 APES 方法, d, ρ, λ 含义对应式(1)~(2)中的定义. 而要获得更高精度的估计, 必要还要结合后向 APES 方法. 令 y_B 为从 MRS 信号 $\{y(t)\}$ 中构造的后向数据向量, 则:

$$y_B(l) = y^*(N-l-1) \quad y^*(N-l-2) \quad \dots \quad y^*(N-l-I) \quad (27)$$

可以推得^[9]:

$$y_B(l) = Hy_F^*(L-l-1) \quad (28)$$

并结合式(25), 得后向向量的协方差矩阵 R_B 为:

$$R_B = HR^TH \quad (29)$$

式中 H 为反对角矩阵. 因此, 前后向向量的协方差矩阵 R_{FB} 可以表示为:

$$R_{FB} = \frac{1}{2}(R + R_B) = \frac{1}{2}(R + HR^TH) \quad (30)$$

从而, 对应式(24), 前后向的 Q_{FB} 可表示为:

$$Q_{FB} = \frac{1}{2}(Q + HQ^TH) \quad (31)$$

则 FBAPES 的传递函数可以通过前向 APES 的传递函数来获得,

$$\text{即: } h_{FB}(\lambda) = \frac{Q_{FB}^{-1}(\lambda)s(\lambda)}{s^*(\lambda)Q_{FB}^{-1}(\lambda)s(\lambda)} \quad (32)$$

这样, 我们可以估计出 FBAPES 方法中的 MRS 线性参数,

$$\text{即: } \rho_{FB} = h_{FB}^*(\lambda)Y(\lambda) \quad (33)$$

$$\hat{a}_k = |\rho_{FB}|, \quad \phi_k = \arg \left[\frac{\text{imag}(\rho_{FB})}{\text{real}(\rho_{FB})} \right] \quad (34)$$

4 实现结果

4.1 模拟数据

根据式(1), 设模拟信号的抽样点数为 512, 抽样间隔 Δt 为 1ms. 该信号由三个波峰组成, 各参数值由表 1 所示. 令表 1 模拟数据各谱线的参数值

Label	Amplitude (a. u.)	Phase (deg)	Frequency (Hz)	Damping (Hz)
Peak1	60	0	125	10
Peak2	20	30	170	10
Peak3	80	0	300	10

中 Peak2 为我们待研究的感兴趣成分, 即选择的目标成分. 我们分别实现本文的 SELF-TLS 以及 SELF-SVD、HSVD、HTLS 等四种不同的 MRS 量化方法. 然后, 为比较结果, 再分别统计出各种方法估计的不同参数的相对均方差, 结果如图 1~4 所示. 其中, 相对均方差(RRMSE)定义为:

$$\text{RRMSE} = 100 * \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(1 - \frac{\hat{x}}{x} \right)^2} \quad (35)$$

式中, N 为一定噪声方差下的运行次数, x 和 \hat{x} 分别为某一参数的真值以及它的估计值. 在实验中, 运行次数为 50, 噪声标准差分别为 1~28, 感兴趣成分区间取 150~210Hz.

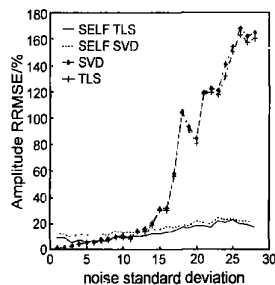


图 1 幅度参数估计的 RRMSE 对比结果

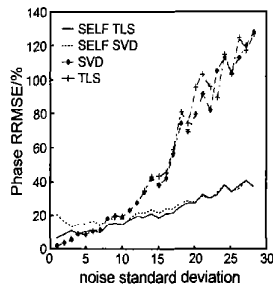


图 2 相位参数估计的 RRMSE 对比结果

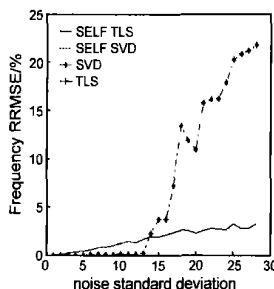


图 3 频率参数估计的 RRMSE 对比结果

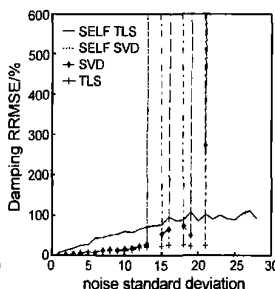


图 4 衰减系数估计的 RRMSE 对比结果

从图 1~4 的实现结果可以分析出, 在噪声标准差较低时, SELF-TLS、SELF-SVD 方法的估计精度比经典的 HSVD、HTLS 方法要略低, 但是, 随着噪声标准差的增大, HSVD、HTLS 方法参数估计的 RRMSE 呈现跳跃式的变化, 几乎失去了估计的应用价值, 而 SELF-TLS、SELF-SVD 方法的估计还比较稳健. 所以, SELF-TLS、SELF-SVD 两种方法的综合性能要优于经典的 HSVD、HTLS 方法; 同样, 我们可以看出, 在频率和衰减系数两个参数的估计上, SELF-TLS 方法与 SELF-SVD 方法效果几乎一样, 而对于幅度和相位的估计, 本文提出的 SELF-TLS 方法精度要高.

4.2 活体 MRS 信号

图 5 为活体 MRS 数据实部的频率域显示, 其中采样的点数为 1024, 间隔为 1msec, 由 1.5T Siemens Vision system 获取(SISTA 的 Leentje Vanhamme 博士提供). 为进一步比较方法, 我们分别实现了各种方法对该数据的处理, 实验结果参见表 2. 其中,

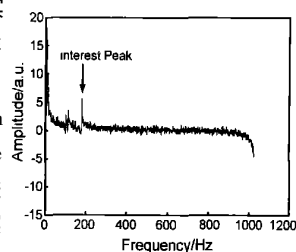


图 5 活体 MRS 数据显示图

我们选取的感兴趣成分如图 5 箭头所示, 范围取为 150~218Hz.

由于我们不知道实际波谱参数的真值, 所以不便比较各种方法的实现效果. 但是, 从上面模拟数据的分析可知, 在噪声方差不大的情况下, HSVD 和 HTLS 方法通常都有较好的估计, 显然本例中, 我们可以参照 HSVD、HTLS 方法量化的结果

来评价 SELF_SVD 和 SELF_TLS 方法量化估计的好坏.

因此,由表 2 中各种方法估计的参数值对比,我们可以认为四种方法都较好地实现了该活体 MRS 参数的量化;同样,SELF_TLS 方法在幅度和相位两参数的量化上,要明显优于 SELF_SVD 方法.另外,从表中所示的计算时间考虑,HTLS 和 HSVD 方法都比较费时,而 SELF_SVD 和 SELF_TLS 方法在这方面的优势明显.

表 2 四种方法参数量化的估计值以及各方法实现的时间

Method	Amplitude (a. u)	Phase (degree)	Frequency (Hz)	Damping (Hz)	Compute Time(s)
HSVD	0. 0514	49. 7039	176. 0219	8. 3637	59. 26
HTLS	0. 0514	49. 2860	176. 0252	8. 2904	58. 92
SELF_SVD	0. 0384	23. 0743	176. 4650	5. 3287	12. 19
SELF_TLS	0. 0501	53. 0793	176. 4650	5. 3070	12. 23

5 结论

本文提出了一种频率选择的 MRS 量化方法,该方法应用全局最小乘方法和前后两向结合的 APES 方法来分别估计波谱的非线性参数和线性参数,较好地实现了 MRS 四个重要参数的量化.实验证明,本文的 SELF_TLS 方法与 SELF_SVD 方法一样,要比经典的 HSVD 和 HTLS 方法计算速度快,同时估计也较稳健.另外,SELF_TLS 方法在参数估计的综合性能上要明显优于 SELF_SVD 方法.

参考文献:

[1] Lenkinski, R E. MR Spectroscopy: Clinical Tool or Research Probe? (Revisited) [J]. Academic Radiology, 2001, 8(7): 567- 570.

[2] Ross B, Bluml S. Magnetic resonance spectroscopy of the human brain [J]. The Anatomical Record (New Anat.), 2001, 265(2): 54- 84.

[3] Van Huffel S, Decanniere C, Chen H, Van Hecke P. Algorithm for time domain NMR data fitting based on total least squares[J]. Journal of Magnetic Resonance Series A, 1994, 110(2): 228- 237.

[4] Van Huffel S, et al. Advanced time domain quantitation methods for

MR spectroscopy and metabolite imaging[A]. 18th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society [C]. Amsterdam: IEEE, 1996: 2124- 2126.

[5] Mierisova S, et al. MR spectroscopy quantitation: a review of frequency domain methods[J]. NMR in Biomedicine, 2001, 14(4): 247- 259.

[6] Stoica P, et al. Frequency domain method based on the singular value decomposition for frequency selective NMR spectroscopy[J]. Journal of Magnetic Resonance, 2003, 165(16): 80- 88.

[7] Cavassila S, et al. ER Filter: a preprocessing technique to improve the performance of SVD based quantitation methods [J]. J Magn Reson Anal, 1997, 3: 87- 92.

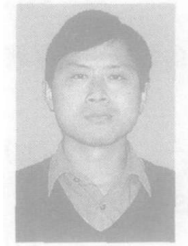
[8] Li J, Stoica P. An adaptive filtering approach to spectral estimation and SAR imaging [J]. IEEE Transactions on signal processing, 1996, 44(6): 1469- 1484.

[9] Li H, Li J, Stoica P. Performance analysis of forward - backward matched filterbank spectral estimators[J]. IEEE Transactions on signal processing, 1998, 46(7): 1954- 1966.

[10] Capon J. High resolution frequency wavenumber spectrum analysis[J]. Proc IEEE. 1969, 57(8): 1408- 1418.

[11] Stoica P, Sundin T. Nonparametric NMR spectroscopy[J]. Journal of Magnetic Resonance, 2001, 152(1): 57- 69.

作者简介:



曾卫明 男, 1971 年出生于安徽宿松, 博士生, 主要研究方向为功能成像和 MRS、图像处理及模式识别, e-mail: wmz86@ hotmail. com.

梁晓云 男, 1973 年出生于江苏南通, 博士生, 主要研究方向为运动分析、图像处理及模式识别.

罗立民 男, 1956 年出生于江西九江, 博导, 长期从事医学图像处理 and 生物医学工程领域的研究工作.