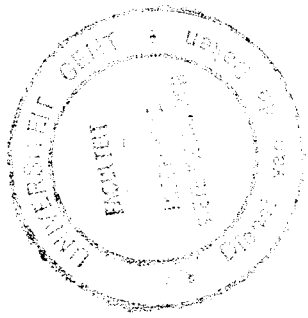
9. Th 10253

Bayesiaanse beeldreconstructie in positron-emissietomografie

Paul Desmedt



Promotor: Prof. Dr. I. Lemahieu

Proefschrift ingediend tot het behalen van de graad van
Doctor in de Toegepaste Wetenschappen

Vakgroep Elektronica en Informatiesystemen
Voorzitter: Prof. Dr. ir. M. Vanwormhoudt
Faculteit van de Toegepaste Wetenschappen
Academiejaar 1994-1995

UNIVERSITEIT GENT

1B1995729

RIJKSUNIVERSITEIT GENT

Faculteit Toegepaste Wetenschappen **6 maart 1995**

DOCTORAAT

Titel proefschrift : "Bayesiaanse reconstructietechnieken in Positron-Emissietomografie"

Aantal delen : 1

Ingediend door : **ir.Paul DESMEDT**

Promotor : Prof.I.LEMAHIEU

Datum verdediging : 2 maart 1995

Datum openbare les :///

Behaalde graad : de grootste onderscheiding

Dankwoord

Dit werk is het resultaat van een samenwerking met veel verschillende onderzoekers. Het past dan ook om hier de voornaamste medewerkers te bedanken voor hun bijdragen.

Op de eerste plaats komt natuurlijk Prof. Dr. Ignace Lemahieu, de promotor van dit proefschrift, voor het kritisch nalezen van de vele teksten. Prof. Lemahieu heeft mij ook steeds de vrijheid gelaten om eigen ideeën uit te proberen en hij heeft mij de mogelijkheid geboden om via conferenties in contact te komen met buitenlandse onderzoekers.

Voorts bedank ik Prof. Dr. ir. Marc Vanwormhoudt voor de boeiende gesprekken. Zijn enthoesiasme voor nieuwe ideeën is een bewonderingswaardig voorbeeld. Prof. Dr. ir. Jan Van Campenhout heeft door zijn grondige aanpak en oog voor detail mijn wetenschappelijk niveau op peil gebracht. Beide hebben geholpen bij het verbeteren van proefversies van dit werk.

Prof. Dr. ir. Johan Nuyts heeft ook bijzonder nauwgelet proefversies van deze tekst nagelezen. Hem dank ik ook voor de (spijtig genoeg) te zeldzame discussies i.v.m. dit werk.

Prof. Dr. ir. Franklin Vermeulen heeft mijn eerste stappen in beeldreconstructie in PET begeleid.

Dit onderzoek werd verricht in het kader van een IWONL-beurs. De laatste drie maanden werd deze taak overgenomen door het IWT [1]. Zonder deze financiële steun zou dit werk nooit uitgevoerd zijn.

Bij de praktische verwezenlijking van het werk hebben verschillende mensen mij bijgestaan. In (benaderd) chronologische volgorde zijn dit: ing. Ronny Demaeschalck voor de ontwikkeling van de computerfantoomgenerator; ir. Karl Vandenweyngaerde en ir. Wim Janin voor de implementatie van het MART-algoritme; Dr. Ir. Koen Bastiaens voor de parallelle implementatie van het ML-EM-algoritme en het Green-algoritme, het nalezen van enkele hoofdstukken van de thesis en de technische ondersteuning bij de realisatie van dit boekje; Dr. Kris Thielemans voor de eerste en grootste stappen bij de verwezenlijking van

[1] Onderzoek gefinancierd met een specialisatiebeurs van het Vlaams Instituut voor de bevordering van het wetenschappelijk-technologisch onderzoek in de industrie (IWT).

`BayesCalc`; ing. Johan Keppens (en ir. Paul Vernemmen) voor de realisatie van een visualisatiepakket voor beelden; Dr. Tom Loredo voor het met veel geduld beantwoorden mijn vragen i.v.m. het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen; ir. Erik Sundermann voor de implementatie van het gesimuleerd-uitgloeien; Dr. Ali Mohammad-Djafari voor het beschikbaar stellen van het gradiënten- en toegevoegde-gradiënten-algoritme en voor verschillende discussies; de groep uit Cambridge (Dr. S.F. Gull, Dr. M. Charter, e.a.) voor de uitnodiging voor een werkbezoek en voor het beschikbaar stellen van het **`Memsys 5`**-algoritme; Dr. Danny De Coo voor het tijdig leveren van medische informatie; Jean Bekaert voor het verzorgen van de illustraties; en Yves Vander Haegen voor het nalezen van de finale versie van dit werk.

Tenslotte is er natuurlijk nog Malt voor het gezelschap.

19 December 1994

Inhoud

1 Inleiding **1**

1.1 Positron-emissietomografie 1
1.2 Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen 4
1.3 Het reconstructieprobleem 6
1.4 Bayesiaanse reconstructiemethoden 9
1.5 Originele bijdragen 11
1.6 Overzicht van werk 13

2 Positron-emissietomografie **15**

2.1 Inleiding 15
2.2 De PET-meetprocedure 15
2.3 De beeldreconstructiemethoden 18
2.4 De simulaties 19

3 Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen **21**

3.1 Inleiding 21
3.2 Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen en inductie 22
3.3 Notaties 23
3.4 De basisregels voor het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen 24
3.5 Het toekennen van waarschijnlijkheden 27
3.5.1 De kennis van de verschillende hypothesen 28
3.5.2 De kennis van fysische eigenschappen 30
3.5.3 De kennis van verwachtingswaarden 31
3.6 De basisprocedure 32
3.7 De parameterschatting 33
3.8 De modeltoetsing 37
3.9 De besliskunde 40
3.10 Het maximum-entropieprincipe 42
3.11 Bespreking van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen 45
3.11.1 De relatie tussen de werkelijke wereld en waarschijnlijkheden 45

3.11.2 De invloed van a priori waarschijnlijkheden 45
3.11.3 De regel van Bayes en het maximum-entropieprincipe 46
3.12 Andere interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen 47
3.12.1 Het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen 48
3.12.2 De Dempster-Shafertheorie 51
3.12.3 De vaag-verzamelingenleer 55
3.13 Besluit 56

4 Het ML-EM-algoritme 59
4.1 Inleiding 59
4.2 Het principe van het ML-EM-algoritme 59
4.2.1 De afleiding van het ML-EM-algoritme 59
4.2.2 Bespreking van het ML-EM-algoritme en zijn afleiding 61
4.2.3 Enkele nadelen van het ML-EM-algoritme 63
4.3 De studie van enkele versnellingstechnieken 67
4.3.1 De parallelle implementatie van het ML-EM-algoritme 67
4.3.2 Een multirooster-implementatie van het ML-EM-algoritme 71
4.3.3 Reconstructiemethoden met partiële metingen 75
4.4 Een Bayesiaanse modeltoetsing als stopcriterium 80
4.4.1 Inleiding 80
4.4.2 Poissonmetingen zonder attenuatie 84
4.4.3 Poisson data met attenuatiecorrectie 87
4.4.4 Experimenten zonder attenuatiefactor 89
4.4.5 Experimenten met attenuatiefactor 90
4.4.6 Bespreking 93
4.5 Het berekenen van attenuatiefactoren met het ML-EM-algoritme 95
4.5.1 Theoretische beschouwingen 95
4.5.2 Experimenten en bespreking 97
4.6 Besluit 99

5 De studie van maximalisatie-algoritmen 101
5.1 Inleiding 101
5.2 Nulpunt-algoritmen 103
5.3 Gradiënten-methoden 105
5.3.1 Het gradiëntenalgoritme 105
5.3.2 Het toegevoegde-gradiëntenalgoritme 106
5.3.3 De praktische implementatie 108
5.3.4 Experimenten en bespreking 109
5.4 De MART 111
5.4.1 Theoretische achtergrond 111
5.4.2 Experimenten en bespreking 113

5.5 Gesimuleerd-uitgloeien 116
5.5.1 Theoretische achtergrond 116
5.5.2 Experimenten en bespreking 120
5.6 Besluit 123

6 A priori waarschijnlijkheidsdistributies in PET 125
6.1 Inleiding 125
6.2 Vormen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies 126
6.2.1 Inleiding 126
6.2.2 Het gebruik van gekende momenten 128
6.2.3 Het gebruik van Gibbsenergie 129
6.2.4 Het gebruik van structurele informatie 129
6.3 De entropiepriors 130
6.3.1 Inleiding 130
6.3.2 Entropiepriors volgens Djafari 133
6.3.3 Entropiepriors volgens Skilling en Gull 134
6.4 De regularisatieparameters 137
6.4.1 De momentenmethode 138
6.4.2 De marginalisatiemethode 139
6.5 Experimenten 144
6.5.1 Inleiding 144
6.5.2 Het bepalen van de regularisatieparameter 145
6.5.3 De invloed van het model in het Klassieke-MaxEnt-algoritme 150
6.5.4 Het `Memsys 5`-algoritme 152
6.5.5 Bespreking 156
6.6 Besluit 158

7 Besluit 159

A De computerfantoomgenerator 163
A.1 Inleiding 163
A.2 Het algemeen programmeerschema 164
A.3 Specifieke eigenschappen 165

B Het *Mathematica*-pakket `BayesCalc` 171
B.1 Inleiding 171
B.2 De algemene eigenschappen van `BayesCalc` 172
B.3 Een voorbeeld 174

C De statistische onafhankelijkheid van metingen in PET 179

D Modellering van de attenuatie **183**
D.1 Inleiding 183
D.2 De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van de attenuatiefactor 184
D.3 De directe waarschijnlijkheidsdistributie met een ongekende attenuatiefactor 187
D.4 De toepassing in de Bayesiaanse modeltoetsing 189

E Marginalisatie voor de MaxEnt-algoritmen **191**
E.1 Fouriergetransformeerden bij de marginalisatie 191
E.2 De marginalisatie voor het Nieuwe-MaxEnt-algoritme 193
E.3 De eigenwaarden voor projectiemetingen 195

Bibliografie **197**

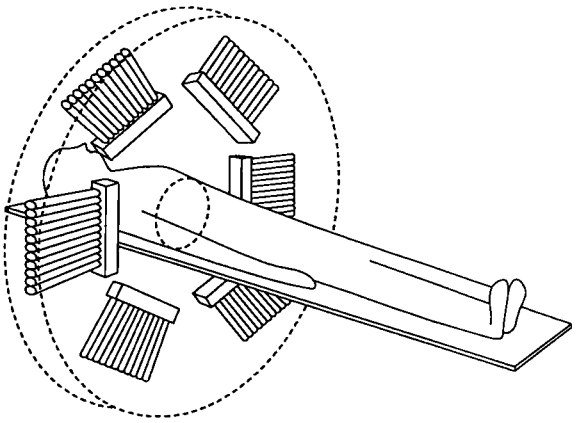
Hoofdstuk 1

Inleiding

1.1 Positron-emissietomografie

Diverse medische onderzoekstechnieken helpen de medicus bij het stellen van een diagnose [Parke90], [Reba83], [Karp88]. Positron-emissietomografie (PET) maakt deel uit van dit gamma onderzoekstechnieken. Door de technologische vooruitgang staan steeds meer onderzoekstechnieken ter beschikking van de medicus. Door zo veel mogelijk informatie over de patiënt te verzamelen verhoogt immers de kwaliteit van de diagnose. Deze informatie kan betrekking hebben op de gebruiken van de patiënt (b.v. roker of niet-roker) evenals zijn huidige fysische (en mentale) toestand.

Gedurende lange tijd beschikten medici slechts over uitwendige tekenen bij de patiënt om een idee te krijgen over zijn interne toestand. Voorbeelden van uitwendige tekenen zijn de temperatuur, het optreden van verkleuringen van de huid, stoffen in de adem (politiecontroles), bloeddruk, enz. Omdat deze technieken enkel onrechtstreeks informatie verschaffen over de toestand van de patiënt zijn tevens invasieve technieken ontwikkeld. De meest courante technieken zijn het nemen van bloedstalen en de kijkoperaties. Een volgende stap bestaat erin het inwendige van de patiënt m.b.v. niet-invasieve technieken te onderzoeken. Deze ontwikkeling werd mogelijk door de ontdekking van de röntgenstralen. Een van de eerste toepassingen van deze stralen is een opname van een hand waarop de beenderen zichtbaar zijn. Met röntgenfoto's wordt het mogelijk om de densiteitsverschillen in een patiënt vast te leggen. Hierdoor kan b.v. de ernst en de vorm van inwendige breuken vastgesteld worden. Een nadeel van dergelijk onderzoek is dat een röntgenstraal het lichaam van de patiënt moet doorlopen vooraleer detectie op de fotografische plaat optreedt. Bijgevolg worden niet de densiteitsverschillen op verschillende plaatsen in de patiënt zichtbaar, maar wel het verschil van de totale densiteiten langs stroken (de weg



Figuur 1.1 Een typische opstelling van een tomografisch toestel.

die de röntgenstraal aflegt) door de patiënt. Zo kunnen twee botten elkaar volledig overlappen op een röntgenfoto. Deze foto bevat dan bijna geen informatie over de densiteiten van de afzonderlijke botten. De volgende belangrijke ontwikkeling is de introductie van computertomografie (CT) [Herma79], [Kak88], zie fig. 1.1. Bij deze techniek wordt m.b.v. een uitwendige röntgenstralenbron en -detector het densiteitsverloop voor tal van stroken in een bepaald vlak van de patiënt opgemeten. Met een computerprogramma worden de metingen omgezet in densiteiten voor de verschillende posities in het onderzochte vlak van de patiënt. Het gereconstrueerde beeld correspondeert dan met een snede door de patiënt waarbij alle structuren in dit vlak zonder overlapping zichtbaar zijn. Deze methode is nu dermate verfijnd dat ook kleine densiteitsverschillen (niet alleen het verschil tussen bot - zacht weefsel) gereproduceerd worden. Dit laat toe om b.v. het onderscheid tussen gezond en beschadigd hersenweefsel aanschouwelijk te maken [Phelp86].

Met CT is evenwel nog niet duidelijk hoe de organen in de patiënt functioneren: enkel anatomische informatie over de patiënt wordt verkregen. Dikwijls is het ook belangrijk om fysiologische informatie te verwerven. Technieken zoals PET en SPECT laten dit toe.

Om de functionering van organen te onderzoeken worden radioactieve tracers gebruikt. Een radioactieve tracer is een molecule waarvan een atoom vervangen is door een radioactief isotoop. Door deze substitutie wordt de werking van de molecule niet veranderd, maar kan de verspreiding van de tracer in het

lichaam gevolgd worden. Het metabolisme van de patiënt zal de tracer naar verschillende organen sturen. Glucose zal b.v. preferentieel terechtkomen in organen die energie verbruiken, thymine (een bouwsteen voor DNA) daarentegen zal zich bevinden waar een deling van cellen optreedt. Technieken die dergelijke methoden gebruiken zijn positron-emissietomografie (PET) en "Single Photon Emission Computed Tomography" (SPECT). Zowel PET als SPECT gebruiken een tomografische methode. Het voornaamste onderscheid tussen deze technieken is het type van radio-isotopen: een positron-emittor voor PET en een gamma-emittor voor SPECT. Het voordeel van PET t.o.v. SPECT is dat de quantificatie van de reconstructies eenvoudiger is. Als belangrijk nadeel van PET geldt evenwel zijn kostprijs (voor het toestel en voor elke afzonderlijke studie). Door zijn lagere kostprijs kent SPECT een beduidend grotere verspreiding dan PET. Deze technieken worden o.m. gebruikt om de functie van het hart te controleren of beschadigingen aan de hersenen op te sporen. Meer fundamenteel onderzoek wordt b.v. verricht op de functionering van de hersenen. Zo heeft PET belangrijke bijdragen geleverd tot het lokaliseren van activiteitscentra in de hersenen (het spraakcentrum, het luistercentrum). Ook voor de studie van tumorenevoluties is PET een belangrijke hulpmiddel.

Een belangrijk nadeel van de bovenstaande tomografische methoden is het gebruik van radioactieve stralen waardoor deze onderzoeken een gevaar inhouden voor de gezondheid van de patiënt. De Nucleaire Magnetische Resonantietechniek (NMR) heeft dit nadeel niet [Parke90]. Bij deze methode worden elektromagnetische golven gebruikt. Door de resonantie van atoomkernen (vooral waterstofkernen) met deze elektromagnetische golven te bestuderen, kan een doorsnede van de patiënt gereconstrueerd worden. Het gereconstrueerde beeld in NMR bevat voornamelijk informatie over de hoeveelheid waterstofkernen op verschillende plaatsen. Pogingen worden ondernomen om NMR toe te passen voor functioneel onderzoek.

Bij de huidige generatie medische toestellen is de technologische inbreng indrukwekkend. Veel technieken bevinden zich aan de spits van de menselijke verworvenheden. De revolutie van de scannertechnieken kan de vergelijking met de spectaculaire verbetering van computers doorstaan. Dikwijls is een fysische achtergrond vereist voor de zinvolle interpretatie van de resultaten. Bij NMR is de omvang van de technische bagage indrukwekkend groot. Maar ook PET (en SPECT) vereisen een gedegen fysische achtergrond.

Het fysisch – niet medisch – onderzoek voor de ontwikkeling van PET betreft de verbetering van de detectoren, het verlagen van de stralingsdosis (3D-PET) [Towns93] en de verbetering van de reconstructietechnieken. Het hier voorgestelde werk concentreert zich op dit laatste probleem: de reconstructietechnieken.

Bij de reconstructietechnieken levert voornamelijk de ruisinhoud van de me-

tingen problemen op. Deze ruis is inherent aan het PET-meetproces. Vooraleer de verschillende reconstructiemethoden bestudeerd worden, zal eerst een alternatieve benadering van het waarschijnlijkheidsrekenen voorgesteld worden: het Bayesiaanse waarschijnlijksrekenen. Het is deze benadering die voortdurend in het werk gebruikt zal worden.

1.2 Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen

Er bestaan verschillende interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen. Voor het verwerken van PET-metingen wordt geopteerd voor het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen (BWR) [Jayne94], [Berna94]. Deze vorm van het waarschijnlijkheidsrekenen is veel minder verspreid dan het algemeen onderwezen klassieke waarschijnlijkheidsrekenen (KWR) [Papou65], [Pfeif65].

Hier wordt een summiere uiteenzetting van de voornaamste verschillen tussen beide methoden gegeven. Eén van de voornaamste problemen bij het vergelijken van beide interpretaties vormt de gelijkaardigheid van de terminologie en het formalisme. Zo moet het centrale begrip "waarschijnlijkheid" in beide theorieën reeds anders geïnterpreteerd worden. Voorts is er een grote overeenkomst tussen de basisregels van beide theorieën. Beide theorieën hebben een "regel van Bayes". Deze regel heeft evenwel een andere toepassing in beide benaderingen en dit geeft aanleiding tot bijkomende verwarring.

Deze verwarring zorgt er dikwijls voor dat aanhangers van beide theorieën ernstige communicatieproblemen hebben. Wat de ene zegt en bedoelt in het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen, wordt door de andere (met een klassieke achtergrond) volledig anders geïnterpreteerd en als absurd bestempeld. Op dit gebied zijn de discussies tussen Jeffreys (BWR) en Fisher (KWR) beroemd [Jeffr39].

Bij het KWR worden waarschijnlijkheden beschouwd als relatieve frequenties bij het herhaald uitvoeren van experimenten. Beschouw b.v. het gooien van een dobbelsteen. De uitspraak "De waarschijnlijkheid dat een drie gegooid wordt is 1/6" betekent "indien de dobbelsteen vele malen gegooid wordt zal één op zes worpen een drie opleveren". Elke waarschijnlijkheid wordt in het KWR geassocieerd met een (oneindige) herhaling van een experiment. Deze theorie heeft zijn nut bewezen voor het verwerken van resultaten van herhaalde experimenten. Het optreden van verschillende uitkomsten bij het herhalen van identieke experimenten is in het KWR een intrinsieke eigenschap van de fysische wereld. Het meest prominente voorbeeld van een dergelijke interpretatie is te vinden in de quantummechanica.

In het BWR daarentegen zijn herhaalde experimenten geen conditio sine qua non om waarschijnlijkheden in te voeren. Aan elke ondubbelzinnige uitspraak,

hypothese, kan een waarschijnlijkheid toegekend worden. Hierdoor is het begrip waarschijnlijkheid in het BWR sterk verwant met de alledaagse begrippen "kans" en "waarschijnlijkheid" (Van Dale: waarschijnlijkheid = vermoedelijke waarheid). Typische hypothesen zijn b.v.:

1. het zal morgen regenen;
2. de kerncentrale van type X in D zal het volgende jaar ontploffen;
3. patiënt Y heeft ziekte Z.

Bij deze voorbeelden is de associatie met een herhaald experiment heel kunstmatig. Het toekennen van waarschijnlijkheden aan dergelijke hypothesen ligt dan ook buiten het terrein van het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen. In het BWR wordt alle beschikbare kennis over het specifieke probleem verzameld. Dan wordt zo veel mogelijk van die beschikbare kennis aangewend om de waarschijnlijkheid van de hypothese te berekenen. Hierbij wordt veelvuldig de regel van Bayes gebruikt. De hoofdbedoeling van het BWR is de omzetting van kennistoestand naar waarschijnlijkheid van een hypothese consistent te laten verlopen. Waarschijnlijkheden bestaan hier enkel in het model van de fysische wereld, niet in de fysische wereld zelf. De processen in de wereld kunnen in deze optiek steeds volledig deterministisch beschreven (maar niet noodzakelijk uitgerekend) worden.

Het BWR wordt ook dikwijls als "subjectief" en het KWR als "objectief" aangeduid. Met deze benaming wordt evenwel geen oordeel geveld over de waarde van de beide theorieën. Het KWR is objectief omdat de waarschijnlijkheden relatieve frequenties zijn en dus vastliggen door de specificatie van het experiment. Twee onderzoekers die onafhankelijk van elkaar hetzelfde experiment uitvoeren zullen dezelfde waarschijnlijkheden observeren. Het BWR is subjectief omdat de kennistoestand bepaalt wat de waarden van de waarschijnlijkheden zijn. Een doctor A die de bloeddruk en de temperatuur van een patiënt Y kent, kan een andere waarschijnlijkheid toekennen aan "patiënt Y heeft ziekte Z" dan een doctor B, die bovendien de resultaten van een bloedanalyse kent. Natuurlijk moet steeds alle beschikbare informatie gebruikt worden. Maar de resulterende waarschijnlijkheden zijn steeds voorwaardelijk aan de gebruikte informatie en hebben geen absolute waarde. Waarschijnlijkheden zijn in het BWR slechts een quantificatie van een kennistoestand.

Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen heeft het voordeel van zijn relatieve eenvoud en de associatie met het colloquiale begrip "waarschijnlijkheid". Bovendien is het BWR toepasbaar op een grotere klasse van problemen dan het KWR. Het KWR kan terugvallen op een sterke wiskundige fundering en het werk van vele toponderzoekers. Er kan bovendien aangetoond worden dat het BWR naar de resultaten van het KWR convergeert voor uitspraken over herhaalde experimenten.

Heel merkwaardig is ook dat beide methoden niet zelden gelijkaardige resultaten opleveren. Dit treedt zelfs op bij berekeningsmethoden waarover beide benaderingen het grondig oneens zijn. Deze overeenkomst is soms enkel het gevolg van een toeval (zoals het gebruik van de Gausswaarschijnlijkheidsdistributie). Veel tijd en moeite wordt door prominente aanhangers van beide theorieën (ten onrechte) besteed aan het bestrijden van elkaar. Indien ook nog de andere benaderingen van het waarschijnlijkheidsrekening in rekening gebracht worden (Dempster-Shafer, vaag-verzamelingenleer) dan wordt de situatie nog onoverzichtelijker.

In deze thesis zal resoluut gekozen worden voor het Bayesiaans waarschijnlijkheidsrekenen. In PET is het immers zo dat een patiënt slechts éénmaal een scanner-onderzoek ondergaat en dat met deze onvolledige informatie toch de tracerconcentratie in de patiënt gereconstrueerd moet worden. Het zal evenwel blijken dat een volledig consistente toepassing van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen in dergelijke complexe situaties heel moeilijk wordt.

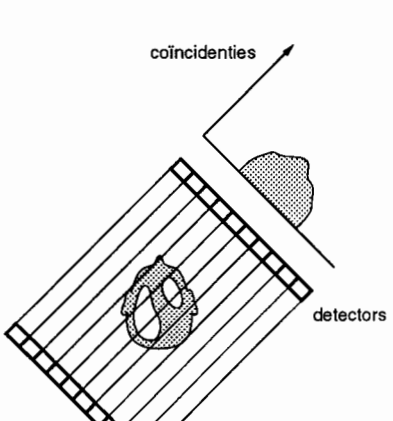
1.3 Het reconstructieprobleem

Het reconstructieprobleem in PET heeft twee aspecten:

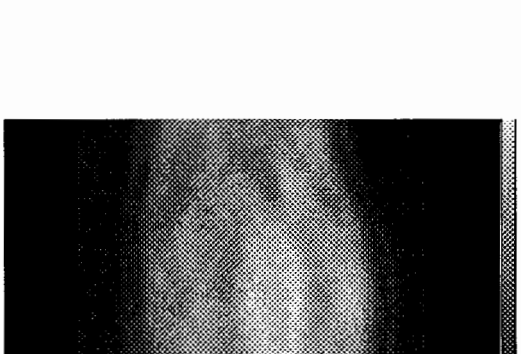
1. de metingen zijn projectiemetingen;

2. het ruisniveau van de metingen is groot.

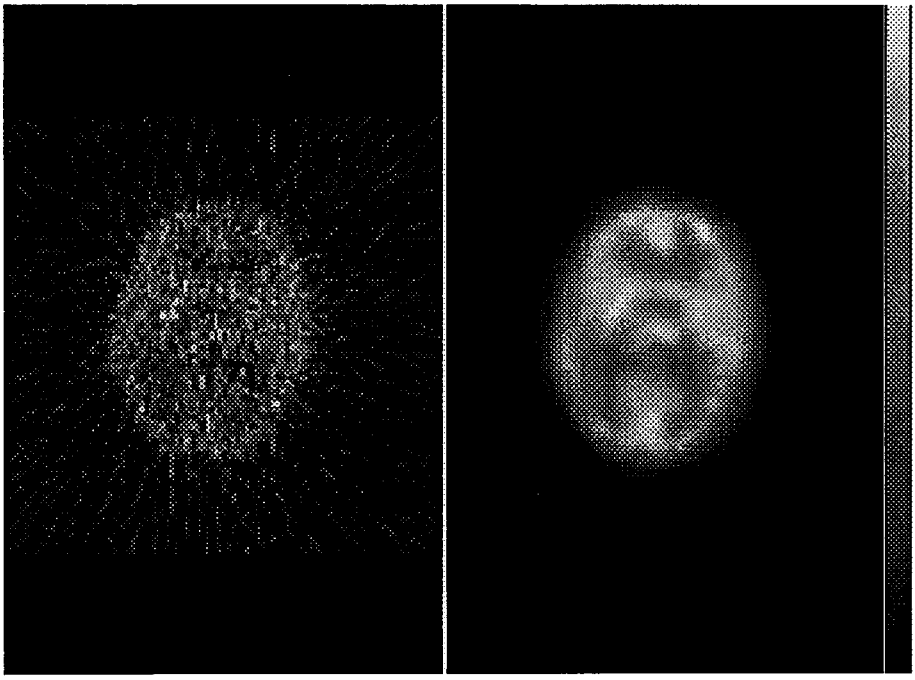
Door de bouw van de PET-scanner worden enkel projectiemetingen opgemeten. Een projectiemeting bevat informatie over de som van de tracerconcentraties in een strook door de patiënt (zie fig. 1.2). Nergens wordt de tracerconcentratie op één enkele locatie in de patiënt opgemeten. Er worden tal van verschillende projectiestroken opgemeten. De stroken door de patiënt die corresponderen met deze metingen bevinden zich op verschillende plaatsen en hebben verschillende hoeken met het horizontale vlak. De medicus zal er niet in slagen rechtstreeks diagnostische informatie te extraheren uit de verzameling van de gemeten fotonen. Ter illustratie wordt een verzameling projectiemetingen (een zogenaamd sinogram) getoond in fig. 1.3. Indien de metingen beschikbaar zijn voor alle stroken voor de hoeken tussen 0 en 180 graden (continu verloop) en laterale posities door de patiënt (eveneens continu verloop), dan kan het beeld uit de projectiemetingen gereconstrueerd worden met de inverse-Radontransformatie. Indien het sinogram (zoals in de praktijk) enkel bestaat uit een discreet aantal meetpunten, dan kan nog steeds een exacte reconstructie bij ruisvrije metingen gerealiseerd worden m.b.v een aanpassing van de inverse-Radontransformatie: de gefilterde-terugprojectietechniek (FB-methode) [Kak88], [Herma79]. Deze techniek is de standaard reconstructie-



Figuur 1.2 Bij projectiemetingen (coïncidenties) wordt slechts de totale activiteit in een strook gemeten.



Figuur 1.3 Het sinogram bevat de opgemeten tellen voor verschillende laterale posities (horizontale as) en hoekposities (verticale as).



(a) (b)

Figuur 1.4 Reconstructies met verschillende technieken: (a) FB-reconstructie, (b) ML-EM-reconstructie.

techniek voor PET. De grootste troef van de gefilterde-terugprojectietechniek is zijn snelheid.

Het tweede probleem bij PET is het inherent optreden van ruis. Deze ruis is o.a. afkomstig van het radioactief verval van de isotopen. Naast het statistisch karakter van het radioactief verval hebben o.a. de attenuatie van de stralen (Compton-verstrooiing) en de detectorefficiënties ook een invloed op het reconstructieprobleem. Deze effecten hebben tot gevolg dat het onmogelijk wordt om bij een gegeven tracerconcentratie exact te voorspellen hoeveel fotonen door de verschillende detectoren geobserveerd zullen worden. Het inverse probleem – bepaal uit een aantal projectiemetingen de tracerverdeling – is nog moeilijker. Het statistisch karakter van de metingen leidt tot het optreden van streepvormige artefacten bij de gefilterde-terugprojectietechniek, zie fig. 1.4. Door deze strepen kan belangrijke informatie voor het oog van de medicus verborgen blijven. Bayesiaanse reconstructiemethoden trachten rekening te houden met het statistisch karakter van de metingen om aldus de streepvormige artefacten te vermijden. Het populairste statistische reconstructie-algoritme in PET is het "Maximum Likelihood-Expectation Maximisation"-algoritme (ML-

EM-algoritme). Dit algoritme is afgeleid voor metingen die ontstaan door een Poissonproces (dit in overeenstemming met het Poissonkarakter van het radioactief verval). Het is duidelijk uit fig. 1.4 dat de reconstructies van het ML-EM-algoritme minder last hebben van de streepvormige artefacten.

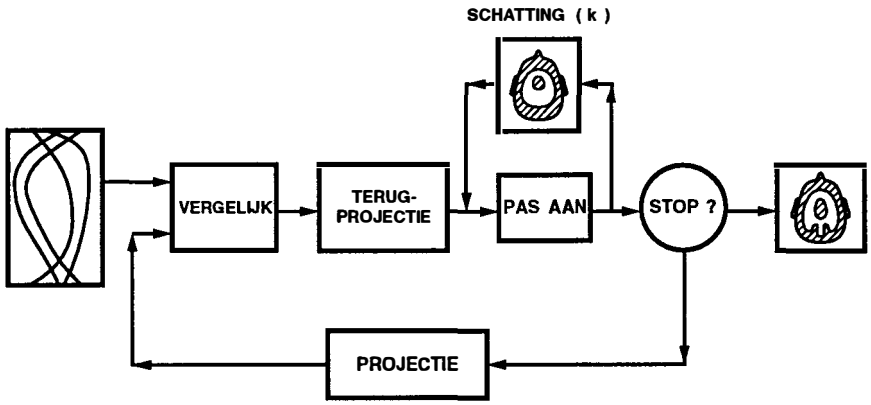
1.4 Bayesiaanse reconstructiemethoden

Een aantal verschillende problemen verhinderen de doorbraak van het ML-EM-algoritme:

1. de kwaliteit van de ML-EM-reconstructie;
2. de traagheid van het ML-EM-algoritme;
3. de ruisdegeneratie.

Ten eerste is het niet duidelijk of de kwaliteit van het ML-EM-algoritme even groot is als de kwaliteit van de FB-methode. Onder kwaliteit van een beeld wordt hier de overeenkomst tussen de gereconstrueerde en werkelijke tracerconcentratie in bepaalde gebieden verstaan. Alhoewel diverse studies aantonen dat de ML-EM-reconstructies minstens dezelfde kwaliteit hebben als de FB-reconstructies [Bidau92], [Meikl94], bestaat er nog een zekere terughoudendheid van de medici t.o.v. ML-EM-reconstructies. Door de dagelijks omgang met FB-gereconstrueerde beelden met streepvormige artefacten slagen medici er immers in deze beelden vrij goed te interpreteren. Het interpreteren van beelden zonder streepvormige artefacten vereist een andere ingesteldheid. Bij de reconstructie met het ML-EM-algoritme worden b.v. scherpe overgangen in tracerconcentratie slechts moeizaam gereproduceerd. Door de specifieke eigenschappen van de methode te onderkennen, kan de interpretatie van de ML-EM-reconstructies geoptimaliseerd worden. Niets verhindert trouwens het gelijktijdig gebruiken van reconstructies van de beide technieken.

De tweede belangrijke struikelblok is de verhoogde rekentijd voor de reconstructies van het ML-EM-algoritme. Het ML-EM-algoritme is immers een iteratief algoritme [Shepp82], zie fig. 1.5. Vertrekkend van een initiële schatting van de tracerconcentratie wordt een aanpassing voor deze schatting vooropgesteld. Aldus wordt een nieuwe schatting bekomen. Deze nieuwe schatting zal op zijn beurt aangepast worden. Vertrekkende van de huidige schatting van het beeld, kan door het meetproces van de scanner te simuleren, de meest waarschijnlijke meetwaarde berekend worden: de pseudometing. Door de echte meting te vergelijken met deze pseudometing wordt een aanpassing voor de huidige schatting voorgesteld. Door het uitvoeren van deze aanpassing zal (bij het ML-EM-algoritme) de overeenkomst tussen echte metingen en pseudometingen vergroten. Door dit proces te herhalen (geïtereerd) wordt het beeld dat de waarschijnlijkheid van de metingen maximaliseert, gevonden.



Figuur 1.5 Een iteratief schema zoals gebruikt door Bayesiaanse reconstructiemethoden.

Het derde probleem is het optreden van ruisdegeneratie [Snyde87]. Het ML-EM-algoritme blijkt toch een negatieve invloed te ondervinden van de ruis indien teveel iteraties uitgevoerd worden. Door de ruisdegeneratie maakt de reconstructie een grillige indruk. Pixelintensiteiten van naburige pixels kunnen dan sterk verschillen. Een dergelijke tracerverdeling zal in werkelijkheid niet optreden. Dit probleem kan op twee manieren aangepakt worden:

1. voer a priori informatie over het beeld in;

2. stop het ML-EM-algoritme voordat de ruisdegeneratie optreedt.

Het invoeren van a priori informatie over de beelden resulteert in Bayesiaanse reconstructiemethoden [Hanso87], [Demom89]. De maximum-likelihood-methoden kunnen beschouwd worden als Bayesiaanse methoden waarbij geen a priori informatie gebruikt wordt. Bij Bayesiaanse methoden zijn niet alle beelden a priori (vooraleer de metingen verricht worden) even waarschijnlijk. Een a priori vereiste voor de reconstructie kan b.v. de vlakheid van het beeld zijn. Een vlakheidsterm kan verhinderen dat naburige pixelintensiteiten te sterk verschillen. Het introduceren van een vlakheidseis is dus duidelijk een poging om deze invloed van de ruis te beperken. De entropie van een beeld is een mogelijkheid om een vlakheid uit te drukken. Diverse vormen van entropie van het beeld [Gull85] zijn reeds voorgesteld en zullen hier bestudeerd worden.

De algoritmen voor de Bayesiaanse reconstructiemethoden zijn evenals het ML-EM-algoritme iteratief en vereisen bijgevolg veel rekentijd.

Bij het gebruik van Bayesiaanse reconstructiemethoden treedt er bijna altijd een regularisatieparameter op. Deze parameter weegt de belangrijkheid

van de informatie van de metingen af t.o.v. de belangrijkheid van de a priori informatie. Indien de regularisatieparameter bijzonder groot gekozen wordt, zullen bij de reconstructie de metingen verwaarloosd worden. Wordt de regularisatieparameter klein gekozen, dan zal de a priori informatie van het beeld bijna niet meespelen in de reconstructie. De reconstructie zal in dit geval sterk aanleunen bij de ML-EM-reconstructie.

Een alternatieve manier om de ruisdegeneratie te verhinderen, is het invoeren van een stopcriterium [Llace89]. Het stoppen van het iteratief proces is algemeen ingeburgerd in numerieke methoden en heeft tot doel het iteratief proces te onderbreken wanneer de veranderingen van de oplossing verwaarloosbaar zijn. Aldus worden onnodige berekeningen vermeden. De toepassing van het stopcriterium bij het ML-EM-algoritme verschilt hier echter grondig van. Het stopcriterium bij het ML-EM-algoritme tracht te verhinderen dat substantiële veranderingen aan de schatting van het beeld gebeuren omdat deze veranderingen nadelige gevolgen hebben voor de interpreteerbaarheid van de reconstructie. Het gebruik van een stopcriterium voor het ML-EM-algoritme is dan ook controversieel. Er kan immers aangetoond worden dat het ML-EM-algoritme convergeert naar de Maximum-Likelihood-oplossing. De vraag die velen zich stellen is: "Waarom wordt een algoritme dat convergeert naar de gevraagde oplossing door een stopcriterium verhinderd deze oplossing te bereiken?" Het invoeren van a priori informatie is in deze optiek gefundeerder.

De traagheid van het iteratief proces is een andere belangrijke hinderpaal voor het dagelijks gebruik van de Bayesiaanse en ML-EM-reconstructiemethoden. Alhoewel de snelheid van computers blijft toenemen, stijgt de complexiteit van de reconstructieproblemen eveneens. Deze twee effecten heffen elkaar voorlopig op. Daarom wordt nog steeds gezocht naar versnellingstechnieken. Een versnelling van de algoritmen treedt onder meer op door de opsplitsing van de berekeningen over verschillende processoren (parallelle implementatie). Een andere mogelijkheid is het bedenken van een ander iteratief schema. Door efficiënte aanpassingen van de huidige schattingen te bedenken kan een snellere convergentie naar de gezochte reconstructie optreden. Dit is de studie van de reconstructie-algoritmen.

1.5 Originele bijdragen

De belangrijkste bijdragen van dit werk zijn:

1. *de studie van het BWR*: omdat het BWR niet algemeen verspreid is, zijn goede overzichtswerken schaars. Het bestuderen van deze technieken is hierdoor niet evident.

2. *het* `BayesCalc`-*pakket*: met deze uitbreiding van het Mathematica- programma kunnen de meeste berekeningen van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen automatisch uitgevoerd worden. Het betreft hier zowel numerieke als symbolische berekeningen;

3. *de computerfantoomgenerator*: dit hulpmiddel laat toe scanner-metingen te simuleren. Met behulp van deze computer-gegenereerde metingen kan de prestatie van de verschillende reconstructie-algoritmen eenvoudig geëvalueerd worden;

4. *aanpassingen voor het ML-EM-algoritme*: diverse verbeteringen voor het ML-EM-algoritme worden gesuggereerd. Een aantal aanpassingen hebben tot doel de reconstructiesnelheid op te drijven. Deze methoden zijn de parallelle implementatie van het algoritme, een multirooster-implementatie en de reconstructie met partiële metingen. De versnelling die optreedt bij de parallelle implementatie is ongeveer gelijk aan het aantal gebruikte processoren. De multirooster-implementatie levert geen duidelijke snelheidswinst op. Het reconstrueren met partiële metingen biedt perspectieven en wordt in een gewijzigde vorm reeds in meerdere PET-centra toegepast. Een andere aanpassing van het ML-EM-algoritme bestaat uit de introductie van een stopcriterium. Het voorgestelde stopcriterium maakt gebruik van een Bayesiaanse modeltoetsing. Tenslotte wordt een verbeterde attenuatiecorrectie opgesteld. Bij deze laatste methode worden de attenuatiefactoren voor de verschillende projectiestroken berekend aan de hand van de ML-EM-reconstructie van de attenuatiecoëfficënten van de patiënt;

5. *de theoretische studie van de attenuatiefactoren*: door het gebruik van het BWR kan de nauwkeurigheid van de attenuatiefactor berekend worden. Deze hangt af van het aantal tellen in de blanco- en transmissie-meting;

6. *de studie van maximalisatie-algoritmen*: diverse maximalisatie-algoritmen (gradiënten-algoritme, toegevoegde-gradiëntenalgoritme, MART, gesimuleerd-uitgloeien) worden vergeleken met het standaard-ML-EM-algoritme. Het blijkt dat het ML-EM-algoritme, ondanks zijn relatieve eenvoud, toch een bijzonder goed reconstructie-algoritme is. Het interessantste resultaat uit deze vergelijking is dat het MART-algoritme er heel snel in slaagt om een degelijke reconstructie te presenteren.

7. *de studie van a priori waarschijnlijkheidsdistributies:* een aantal a priori waarschijnlijkheidsdistributies worden bestudeerd. Deze zijn steeds gebaseerd op entropie-uitdrukkingen. Voorts worden een aantal verschillende methoden om de regularisatieparameter(s) automatisch te bereke-

nen, getest. Hierbij wordt een bestaande procedure uitgebreid voor PET-metingen.

Dit werk heeft aanleiding gegeven tot de internationale publicaties [Desme91d], [Desme93b], [Desme93c], [Desme93d], [Desme93e], [Desme94a], [Desme94b], [Desme94c], [Desme94d], [Desme94e], [Desme94f] (eerste auteur) en (als co- auteur) [Basti93], [Basti94a], [Basti94b], [Sunde94a], [Sunde94b], [Thiel90]. Voorts zijn delen van dit werk onder de vorm van technische rapporten [Desme91b], [Desme91c], [Desme92b], [Desme93e], [Desme94g] en IWONL-verslagen [Desme91a], [Desme92a], [Desme93a] beschikbaar.

1.6 Overzicht van werk

In dit werk worden verscheidene problemen van Bayesiaanse reconstructiemethoden in PET behandeld. Daartoe worden eerst een overzicht van de PET-meetprocedure gegeven in hoofdstuk 2. In hoofdstuk 2 worden tevens het meest gebruikte computerfantoom (in dit werk) en de diverse foutcriteria voor de evaluatie van de reconstructies geïntroduceerd.

Omdat in dit werk regelmatig Bayesiaanse technieken aangewend worden en deze technieken niet algemeen gekend of aanvaard zijn, wordt een uitgebreid overzicht van het BWR aangeboden in hoofdstuk 3.

Het volgende hoofdstuk behandelt enkele verbeteringen voor het ML-EM-algoritme. Enkele aanpassingen hebben tot doel om de snelheid van het algoritme te verhogen. Het stopcriterium uit dit hoofdstuk tracht de ruisdegeneratie te verhinderen. Een verbeterde attenuatiecorrectie, die toelaat om de kwaliteit van de reconstructies te verbeteren, wordt gepresenteerd.

In hoofdstuk 5 worden verschillende iteratieve schema's voorgesteld. Het onderzoek van de verschillende iteratieve schema's heeft twee doelstellingen: (1) een snelle reconstructie realiseren; (2) de convergentie-eigenschappen van de algoritmen bestuderen.

In het laatste hoofdstuk (voor het besluit) wordt de prestatie van verschillende a priori waarschijnlijkheidsdistributies onderzocht. Het betreft hier a priori waarschijnlijkheidsdistributies waarin een "entropie"-formule optreedt. In hoofdstuk 6 worden ook een aantal methoden onderzocht om de regularisatieparameters automatisch te berekenen. De besluiten van dit werk zijn gebundeld in hoofdstuk 7.

Bovendien zijn nog een aantal appendices opgenomen in dit werk. In app. A wordt de implementatie van een computerfantoomgenerator voorgesteld. Een bespreking van een *Mathematica*-pakket dat toelaat om bijna alle Bayesiaanse berekeningen automatisch uit te voeren is te vinden in app. B. De onafhankelijkheid van de Poissonmetingen in PET wordt aangetoond in app. C. Een theoretisch behandeling van de attenuatiefactoren in een Bayesiaanse context

wordt gegeven in app. D. Een aantal berekeningen i.v.m. de marginalisatiemethoden worden samengebracht in app. E.

Hoofdstuk 2

Positron-emissietomografie

2.1 Inleiding

In dit hoofdstuk worden enkele basisprincipes van positron-emissietomografie (PET) uitgelegd. Enkel de aspecten noodzakelijk voor het begrijpen van de uiteenzettingen van dit werk komen aan bod. De werking van de PET-camera's van de Universiteit Gent wordt uitgebreid beschreven in [Pleti84].

Eerst wordt de meetprocedure van PET besproken. Daarna volgt een algemene inleiding over beeldreconstructiemethoden. Hierbij worden een aantal notaties ingevoerd. Tenslotte worden een paar aspecten van de simulaties toegelicht. Het betreft het veelvuldig gebruikte computerfantoom "het `DDC-fantoom`" en de diverse aangewende foutcriteria om de kwaliteit van een reconstructie te evalueren.

2.2 De PET-meetprocedure

Het hoofddoel van PET is het quantitatieve onderzoek van de werking van verschillende organen of weefsels in het menselijk lichaam [Herma79], [Karp88], [Reba83], [Parke90], [Kak88]. Een molecule (tracer) wordt gemerkt en de verspreiding van de tracer verschaft informatie over het metabolisme van de patiënt.

In PET worden de moleculen gemerkt met positronemittors. De meest voorkomende positronemittors zijn, samen met hun halveringstijden, weergegeven in tabel 2.1. Bemerk dat de levensduur van de meeste isotopen slechts enkele minuten is. De isotopen worden meestal lokaal aangemaakt. Dit vereist de aanwezigheid van een cyclotron in de nabijheid van de PET-camera.

De radio-isotopen worden eerst ingebouwd in een tracermolecule. Deze tracermolecule is een molecule die in het lichaam een bepaalde functie vervult.

Isotoop	Halveringstijd
^{11}C	20.4 min
^{13}N	10.0 min
^{15}O	2.5 min
^{18}F	109.6 min

Tabel 2.1 Enkele relevante positronemittors met corresponderende halveringstijden.

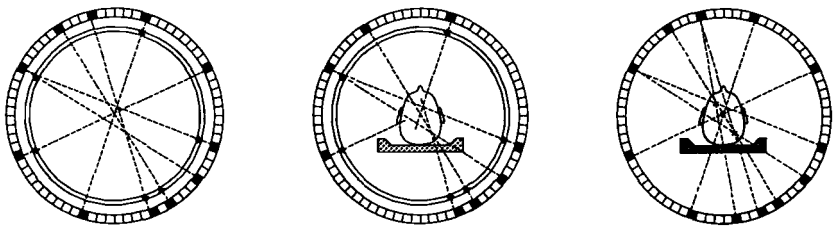
Veel gebruikte tracermoleculen zijn O_2, CO_2, glucose, thymine en diverse geneesmiddelen. Zo zal b.v. zuurstof voornamelijk getransporteerd worden naar organen met verhoogde biologische activiteit.

De isotoop vervalt door het uitzenden van een positron. Dit positron annihileert met een naburig elektron en geeft aanleiding tot twee fotonen die worden uitgezonden in een hoek van (bijna) 180 graden. Rond de patiënt is een ring van detectoren aanwezig. Indien tegenoverliggende detectoren terzelfdertijd een foton detecteren, treedt een coïncidentiemeting op. Eén detectorpaar telt alle annihilaties in een volledige strook door de patiënt. Een coïncidentiemeting bevat geen informatie over de plaats van de annihilatie in de projectiestrook. Bij gesofisticeerde versies van de PET-camera, "Time-of-Flight"-PET [Karp88], wordt wel informatie over de diepte van de annihilatie verkregen. De elektronika van dit toestel houdt de aankomsttijden van de fotonen bij. Het verschil tussen de aankomsttijden laat dan toe om de diepte van de annihilatie bij benadering vast te stellen. Bij de standaard PET-toestellen is deze informatie niet aanwezig.

Met behulp van de metingen van een groot aantal stroken, op verschillende laterale en angulaire posities, wordt voldoende informatie ingewonnen om de tracerverdeling te reconstrueren. Het standaard reconstructie-algoritme in PET is het FB-algoritme [Kak88]. Maar door de ruis op de metingen vertoont deze reconstructie streepvormige artefacten. De ruis op de metingen is o.a. afkomstig van het Poissonkarakter van het radioactief verval.

Voor het uitvoeren van quantitatief onderzoek heeft PET een aantal voordelen t.o.v. "Single Photon Emisson Computed Tomography" (SPECT) [Karp88]. Bij SPECT zendt de radio-actieve isotoop een foton uit dat gedetecteerd wordt door één uitwendige detector. Hierdoor onstaat er een onzekerheid over de hoek waaronder het foton bij de detector aankomt. Bij PET is de strook waarin de annihilatie plaatsgrijpt eenduidig vastgelegd door het detectorpaar waarin de coïncidentie optreedt.

Bovendien kan PET een goede correctie van de attenuatie uitvoeren. De attenuatie van fotonen treedt op door verstrooiing of absorptie in de patiënt. Door deze verstrooiing zal de detectie van het fotonenpaar verloren gaan. De



(a) (b) (c)

Figuur 2.1 De drie metingen van een PET-meetprocedure: (a) de blanco-scan, (b) de transmissie-scan, (c) de emissie-scan.

attenuatiefactor a_i geeft de verhouding van het aantal coïncidenties voor het detectorpaar i bij een meting met attenuatie t.o.v. een meting zonder attenuatie. Door het gebruik van een positronemittor kan de attenuatiefactor effectief gemeten worden. De attenuatie van een fotonenpaar voor een bepaalde projectiestrook is immers onafhankelijk van de diepte waarop de annihilatie optreedt. De kans op attenuatie van een fotonenpaar voor de volgende annihilaties is identiek: (1) een annihilatie die optreedt buiten de patiënt (in een uitwendige stralingsbron); (2) een annihilatie in de patiënt. De kans op attenuatie van een fotonenpaar hangt immers enkel af van de totale afstand die door de fotonen wordt afgelegd langs de projectiestrook. Om dit in te zien moet enkel de formule van de attenuatiefactor a_i beschouwd worden:

$$\begin{aligned} a_i &= \exp\left(-\int_L \alpha(x)\mathrm{d}x\right) \\ &= \exp\left(-\int_{L_1} \alpha(x)\mathrm{d}x - \int_{L_2} \alpha(x)\mathrm{d}x\right). \end{aligned} \tag{2.1}$$

Hierbij stelt L de totale lengte van de projectiestrook i voor, L_1 en L_2 de lengten van de afgelegde weg van elk foton afzonderlijk en $\alpha(x)$ is de attenuatiecoëffiënt op de verschillende plaatsen. Uit (2.1) is duidelijk dat de individuele afstanden L_1 en L_2 geen rol spelen bij de attenuatie, enkel de totale afstand L is belangrijk.

De PET-meetprocedure bestaat uit drie metingen: de blanco-scan, de transmissie-scan en de emissie-scan, zie fig. 2.1. Bij de blanco-scan wordt enkel een ringbron gemeten zonder patiënt. Bij de transmissie-scan wordt dezelfde ringbron gemeten, maar nu bevindt de patiënt zich in de scanner. Door de aanwezigheid van de patiënt (zonder tracer) zullen fotonen geattenueerd (verstrooid, geabsorbeerd) worden. Met deze twee metingen worden de attenuatiefactoren berekend. De derde meting geschiedt na toediening van een radioactieve tracer

aan de patiënt. Bij de de emissie-scan wordt de ringbron verwijderd. Deze meting bevat informatie over de werking van de organen in de patiënt.

2.3 De beeldreconstructiemethoden

Om het reconstructieprobleem op te lossen wordt een quantisatie van de tracerverdeling over een aantal pixels ingevoerd. Bij de standaard reconstructiemethoden wordt het aantal pixels van het beeld ongeveer gelijk gesteld aan het aantal projectiestroken. Indien het probleem ruisvrij verondersteld wordt zijn de metingen gegeven door

$$\mathbf{d} = \mathbf{\Psi}\,\mathbf{f}. \tag{2.2}$$

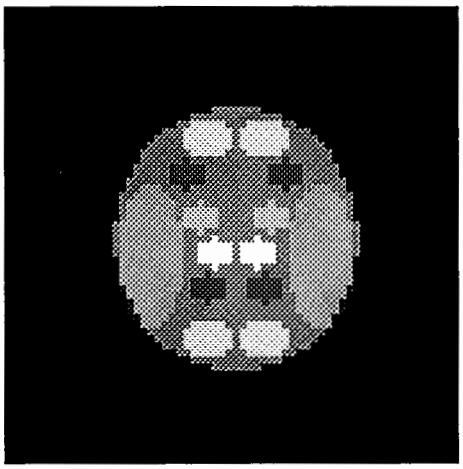
Hierbij is het beeld $\mathbf{f}$ een N-dimensionale matrix, de metingen $\mathbf{d}$ zijn een M-dimensionale matrix. De matrix $\mathbf{\Psi}$ is de transfermatrix en stelt de scanneropstelling voor. Deze kan ontbonden worden in verschillende termen [Verme83]:

$$\mathbf{\Psi} = \mathbf{N}\,\mathbf{C}\,\mathbf{A}\,\mathbf{G}\,\mathbf{S}, \tag{2.3}$$

De matrix $\mathbf{S}$ houdt rekening met de kleine afstand die het positron aflegt vooraleer annihilatie optreedt. Deze afstand hangt af van de vrije weglengte van het positron in het weefsel [Karp88]. In dit werk zal deze factor steeds verwaarloosd worden. De matrix $\mathbf{G}$ stelt de geometrische projectie voor. De elementen G_{ij} van deze matrix berekenen de overlap tussen de projectiestrook i en de pixel j. De attenuatiefactoren a_i maken deel uit van de matrix $\mathbf{A}$. De matrix $\mathbf{C}$ bevat een convolutie die het gevolg is van de breedte van de detectoren. De laatste matrix, $\mathbf{N}$, berekent de abondanties van de verschillende elementen van het sinogram. Elke projectiestrook wordt door een verschillend aantal detectorparen onderzocht gedurende het meetproces. De abondantie corrigeert hiervoor.

In dit werk zal de matrix $\mathbf{\Psi}$ ook wel de projectiematrix genoemd worden. De getransponeerde van deze matrix, $\mathbf{\Psi}^T$, is de terugprojectiematrix. Het uitvoeren van de projectie/terugprojectie is in de diverse algoritmen de CPU-tijdsbepalende operatie.

De standaard reconstructiemethode in PET is het gefilterde-terugprojectie-algoritme (FB-algoritme) [Herma79], [Kak88]. Deze methode voert een pseudoinversie van de transfermatrix $\mathbf{\Psi}$ uit, waarbij eerst een convolutie op de metingen teogepast wordt. De aldus bewerkte metingen leveren na terugprojectie een schatting voor de tracerverdeling op.



Figuur 2.2 Het `DDC-fantoom`.

2.4 De simulaties

In de volgende hoofdstukken zullen tal van simulaties uitgevoerd worden met het `DDC-fantoom` (zie fig. 2.2). De activiteiten in dit fantoom stemmen overeen met een typische PET-meting [DeReu92]. De volledige configuratie wordt beschreven in fig. A.2 uit app. A. Dit computerfantoom wordt vervaardigd met de computerfantoomgenerator **phg**, welke ontworpen is in het kader van deze thesis en uitgebreid beschreven wordt in app. A.

De kwaliteit van de reconstructies moet nog beoordeeld worden. Hiervoor zijn reeds verschillende criteria geïntroduceerd [Hanso91], [Herma89]. In dit werk worden slechts eenvoudige foutcriteria gebruikt. Het is evenwel belangrijk te beseffen dat het foutcriterium moet afhangen van de taak waarvoor het beeld voorbestemd is.

Het meest gebruikte foutcriterium is het *scDist*-foutcriterium:

$$scDist = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{1}{(f_j^{(ref)})^2}(f_j^{(n)} - f_j^{(ref)})^2\right) \text{ met } f_j^{(ref)} \neq 0, \tag{2.4}$$

met $f_j^{(ref)}$ de pixelintensiteiten in het referentiebeeld en $f_j^{(n)}$ de pixelintensiteiten voor de n-de schatting van het beeld. Een ander foutcriterium is de kwadratische afstand:

$$DistError = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left((f_j^{(n)} - f_j^{(ref)})^2\right) \tag{2.5}$$

Elk van deze foutcriteria test slechts één aspect van de "kwaliteit" van het

beeld. Het *scDist*- en het *DistError*-foutcriterium houden bovendien rekening met een gelijkaardig aspect van deze kwaliteit. Alternatieve foutcriteria houden rekening met de mate waarin de verschillende eigenschappen van de tracerconcentratie gereconstrueerd worden. Deze eigenschappen kunnen zijn [Desme93e]:

1. de randen van de tracerconcentraties;
2. de gemiddelde intensiteiten in verschillende gebieden;
3. de vlakheid van de tracerverdeling.

Voor de evaluatie van reconstructiemethoden worden bijna steeds computerfantomen gebruikt. Hierbij moet de onderzoeker wel beseffen dat resultaten verkregen voor een bepaald fantoom niet noodzakelijk geldig zijn voor een ander fantoom. Het extrapoleren van resultaten van fantoomstudies naar studies met echte scannermetingen is nog minder evident.

Hoofdstuk 3

Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen

3.1 Inleiding

Dit hoofdstuk behandelt de basisbegrippen van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen (BWR). Het BWR vormt slechts één van de gangbare interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen. Het gebruik van het BWR is algemeen verspreid noch aanvaard.

De algemeen verspreide interpretatie van het waarschijnlijkheidsrekenen wordt hier het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen (KWR) genoemd. Omdat het BWR een volledig andere interpretatie aanhangt, is het aangeraden dat de lezer zijn (op het KWR gebaseerde) voorkennis over statistische behandelingen tijdelijk onderdrukt.

In de eerste paragrafen van dit hoofdstuk wordt het BWR ingevoerd. Hierbij wordt elke vergelijking met andere vormen van het waarschijnlijkheidsrekenen vermeden. Een uitgebreide vergelijking wordt uitgesteld tot de voorlaatste paragraaf van dit hoofdstuk. De vergelijking van het BWR met het KWR neemt hierbij een bijzondere plaats in. Daarnaast worden ook nog minder algemene zienswijzen aangehaald: de Dempster-Shafertheorie en de vaagverzamelingenleer.

Het invoeren van het BWR gebeurt in verschillende stappen. De specificatie van de problemen die door het BWR aangepakt worden, vormt de eerste stap. Nadien worden de basisregels voor de waarschijnlijkheden onderzocht. Om de basisregels toe te passen, is het beschikken over de waarden van de waarschijnlijkheden vereist. Een aantal methoden om deze waarden op te stellen, zijn beschikbaar. Door de kennis van de basisregels kan de basisprocedure opgesteld worden. In principe laat de basisprocedure toe om elk statistisch probleem

op te lossen. Enkele toepassingen van het BWR, de parameterschatting en de modeltoetsing, zullen de basisprocedure illustreren. In een latere paragraaf wordt een uitbreiding van het BWR besproken: de besliskunde. Vooraleer de confrontatie met andere interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen aan te gaan, worden eerst de meest courante misvattingen omtrent het BWR aangehaald.

3.2 Het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen en inductie

Het BWR doet uitspraken over "hypothesen". Een hypothese is een stelling waarvan de juistheid (in principe) gecontroleerd kan worden [Lored90]. Voorbeelden van hypothesen zijn "de hoeveelheid neerslag op 10/10/93 in Brussel was 10 ml per m^2", "het zal morgen regenen in Brussel", "het aantal vogels op de Shetland eilanden vertoont een jaarlijkse cyclus", "meisje A is groter dan meisje B",... Een voorbeeld van een stelling die geen hypothese vormt, is "meisje A is mooier dan meisje B". Hier is het begrip "mooi" geen meetbaar criterium. De andere hypothesen zijn éénduidig waar of vals. Soms is de beschikbare kennis echter onvoldoende om een hypothese als waar of vals te bestempelen. Een hypothese heeft dan slechts een graad van "aannemelijkheid".

De bedoeling van het BWR is om aan een hypothese een bepaalde aannemelijkheid toe te kennen. Deze aannemelijkheid varieert naarmate de kennis over de hypothese verandert. Neem bijvoorbeeld de hypothese "de hoeveelheid neerslag op 10/10/93 in Brussel was 10 ml per m^2". Bekijk hoe de aannemelijkheid van deze hypothese wijzigt met de veranderende kennistoestand. In eerste instantie beschikt de onderzoeker over een kaart met de neerslag per land en per seizoen. Door de locatie van Brussel op zijn kaart te bepalen, zal hij er al snel achter komen dat de aannemelijkheid van slechts 10 ml per m^2 neerslag heel klein is. Nu gaat de onderzoeker dieper graven in de archieven over België. Hij haalt de neerslaggegevens van het jaar 1993 per maand voor België boven. Daaruit blijkt dat de maand oktober 1993 een uitzonderlijk droge maand was: gemiddelde neerslag 15 ml. Plots wordt de hypothese veel aannemelijker. De laatste gegevens die de onderzoeker kan bemachtigen, betreffen de neerslag per dag voor Brussel in de maand oktober 1993. Daaruit blijkt dat er op 10/10/1993 30 ml neerslag was. Nu kan hij besluiten dat de hypothese fout is.

Merk op hoe de aannemelijkheid van de hypothese varieert naargelang van de kennis over het probleem verandert. Dit kan absurd lijken, maar dit is in overeenstemming met het proces van wetenschappelijk onderzoek. Door de steeds toenemende kennis over een hypothese kan de aannemelijkheid van een hypothese veranderen naargelang de kennistoestand – de stand van de

wetenschap – evolueert.

Wanneer de kennistoestand toelaat om een bepaalde hypothese met zekerheid als fout of waar te bestempelen, dan is er sprake van deductie. Bij deductie is de nood aan aannemelijkheden beperkt. Maar in het geval van een onvolledige kennistoestand worden aannemelijkheden een essentieel hulpmiddel. Bij onvolledige kennistoestanden wordt het deductieproces vervangen door een inductieproces. Merk op dat een aannemelijkheid steeds afhangt van de gebruikte kennistoestand. De aannemelijkheden zullen dan ook steeds voorwaardelijk zijn. De hoofdbedoeling van het BWR is een formalisme op te stellen dat toelaat om een kennistoestand om te zetten in aannemelijkheden.

3.3 Notaties

In deze paragraaf worden enkele notaties ingevoerd. Een hypothese wordt voorgesteld door een hoofdletter. Een hypothese kan samengesteld zijn uit een aantal andere hypothesen. Zo kan hypothese A staan voor "morgen zal het regenen" of "het zal morgen regenen en het heeft vandaag geregend". De kennistoestand bestaat zelf uit een hypothese of een set van hypothesen. De voorwaardelijke hypothese $A \mid B$ staat voor "de hypothese A in de veronderstelling dat B waar is" of "op voorwaarde dat B waar is". Het teken "|" kan het best gelezen worden als "in de veronderstelling dat". Dikwijls wordt dit afgekort tot het iets minder correcte "gegeven dat". De aannemelijkheid van een hypothese A in de veronderstelling dat B waar is, wordt voorgesteld door de functie $a(A \mid B)$. Deze functie associeert een reëel getal met een conditionele hypothese:

$$a(\ A\ \mid\ B\ ) : \mathcal{A} \rightarrow \Re, \tag{3.1}$$

met $\mathcal{A}$ de verzameling van de hypothesen. Aannemelijkheden zijn enkel gedefinieerd voor conditionele of voorwaardelijke hypothesen.

Het samenstellen van hypothesen kan leiden tot nieuwe hypothesen. Hypothesen kunnen op twee manieren samengesteld worden. Bij de eerste samenstelling wordt gebruik gemaakt van de logische "of", genoteerd door "+". Zo staat $a(A + B \mid C)$ voor: de aannemelijkheid dat hypothese A of hypothese B waar is in de veronderstelling dat C waar is. De tweede operatie op hypothesen is de logische "en" operatie. De aannemelijkheid dat A en B gezamenlijk waar zijn in de veronderstelling dat C waar is, wordt genoteerd door $a(AB \mid C)$. De negatie van een hypothese A is $\bar{A}$. Later in dit hoofdstuk zal een verband opgesteld worden tussen aannemelijkheden en Bayesiaanse waarschijnlijkheden. Bayesiaanse waarschijnlijkheden zullen voorgesteld worden door $bp(A \mid B)$.

Bayesiaanse waarschijnlijkheden kunnen ook geassocieerd worden met hypothesen die bepaalde waarden toekent aan een veranderlijke. Een dergelijke veranderlijke is dan een parameter. De mogelijke waarden van een parameter

kunnen een discrete set of een continu interval vormen. Parameters worden voorgesteld door kleine letters met daarboven een omgekeerd hoedje, b.v. $\check{a}$. Een voorbeeld van een parameter is de hoeveelheid neerslag $\check{x}$. De uitdrukking $bp(x \mid I)$ is een verkorte notatie voor de waarschijnlijkheid van de hypothese $X =$ "de parameter $\check{x}$ neemt de waarde x aan", in de veronderstelling dat I waar is. De werkelijke waarde van de parameter $\check{x}$ zal voorgesteld worden door $\tilde{x}$. Een schatting van een parameter $\check{x}$ wordt voorgesteld door $\hat{x}$.

De Bayesiaanse waarschijnlijkheden zijn steeds voorwaardelijk. De (algemene) kennistoestand zal voorgesteld worden door de hypothese I. Meestal zal de expliciete uitdrukking voor deze hypothese niet gegeven worden. Indien de kennistoestand I niet expliciet vermeld wordt, zal deze bestaan uit de hypothesen die bij de specificatie van het probleem opgesomd werden. Het expliciet uitschrijven van de hypothese I zou in dit geval slechts leiden tot een herhaling van deze hypothesen.

3.4 De basisregels voor het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen

De bedoeling van het BWR is de kwantificatie van het inductieproces. De aannemelijkheden van hypothesen zijn het resultaat van de omzetting van een kennistoestand naar reële getallen. Door deze kwantificatie wordt het o.m. eenvoudig om de aannemelijkheden van verschillende hypothesen te vergelijken.

Aan welke regels moeten de aannemelijkheden voldoen? Het blijkt dat de regels voor de aannemelijkheden afgeleid kunnen worden uit slechts drie eenvoudige basisveronderstellingen. Deze basisveronderstellingen worden de desiderata genoemd. De drie desiderata zijn:

1. de aannemelijkheden worden voorgesteld door reële getallen;
2. de aannemelijkheden gedragen zich in overeenstemming met de humane redeneringen;
3. de aannemelijkheden voldoen aan bepaalde consistentie-voorwaarden.

Eerst wordt verondersteld dat aannemelijkheden te representeren zijn door reële getallen. Alhoewel het denkbaar is om multidimensionale aannemelijkheden te introduceren, beperkt het BWR zich tot ééndimensionale aannemelijkheden [Jayne94]. De ordening van hypothesen is immers enkel in een ééndimensionale ruimte eenvoudig.

Het tweede desideratum is vrij vaag. Met dit desideratum wordt gestreefd naar een kwalitatieve overeenkomst met de humane redeneringen. Hier volgen twee voorbeelden van het gebruik van logische regels in de afleiding van de regels voor aannemelijkheden [Cox46], [Jayne94], [Lored90], [Smith90], [Tribu69],

[Aczel66]. Indien de aannemelijkheid van een hypothese toeneemt dan moet de aannemelijkheid van de negatie van de hypothese afnemen. Het tweede voorbeeld is iets minder evident. Veronderstel dat de aannemelijkheid van een hypothese A toeneemt wanneer de kennistoestand verandert van C naar C':

$$a(A|C') > a(A|C). \tag{3.2}$$

Stel dat de aannemelijkheid van de hypothese B gegeven A niet verandert bij de actualisering van de kennistoestand:

$$a(B|AC') = a(B|AC). \tag{3.3}$$

Dan kan de verandering van kennistoestand van C naar C' enkel een toename van de gezamenlijke aannemelijkheid van hypothesen A en B tot gevolg hebben:

$$a(AB|C') > a(AB|C). \tag{3.4}$$

M.a.w., een verandering van de kennistoestand zal zeker leiden tot een toenemende aannemelijkheid van het gezamenlijk optreden van twee hypothesen indien deze verandering van kennistoestand:

1. de aannemelijkheid van één van de hypothesen vergroot;
2. de voorwaardelijke aannemelijkheid van de andere hypothese ongewijzigd laat.

Vermits de gezamenlijke aannemelijkheid van twee hypothesen enkel kan afhangen van de aannemelijkheid dat één van de hypothesen optreedt en de aannemelijkheid van het voorwaardelijk optreden van de tweede hypothese, is ook de noodzaak van de tweede veronderstelling duidelijk.

Het laatste desideratum wordt in drie delen opgesplitst:

1. de interne consistentie;
2. de compleetheid;
3. de consistente toekenning van aannemelijkheden bij equivalentie van kennistoestanden.

De interne consistentie betekent dat twee verschillende berekeningswijzen van dezelfde aannemelijkheden dezelfde getalwaarden moeten opleveren. De compleetheidsvoorwaarde veronderstelt dat bij het berekenen van aannemelijkheden alle relevante kennis aangewend wordt. Het laatste desideratum eist dat bij eenzelfde (of equivalente) kennistoestand er steeds dezelfde aannemelijkheden worden toegekend.

Bemerk de trivialiteit van de desiderata. Bij normale bewijsvoeringen worden dergelijke desiderata gebruikt zonder dat een expliciete vermelding ervan noodzakelijk geacht wordt. Het is dan ook verwonderlijk dat de regels voor aannemelijkheden uit deze desiderata afgeleid kunnen worden. In [Cox46], [Jayne94], [Tribu69], [Lored90] kan deze afleiding opgezocht worden. De basisregels voor het BWR zijn:

$$a^m(A|B) + a^m(\bar{A}|B) = 1 \tag{3.5}$$

en

$$a^m(AB|C) = a^m(A|C)\ a^m(B|AC), \tag{3.6}$$

waarbij A, B, C hypothesen zijn, en m een willekeurig positief reëel getal is. Deze bovenstaande regels (3.5) en (3.6) zijn de oplossing van functionaalvergelijkingen waartoe de desiderata (interne consistentie, compleetheid en consistente toekenning) aanleiding geven.

De waarde van m kan beschouwd worden als een herschalingsfactor en wordt onbelangrijk geacht [Tribu69]. Een geschikte keuze van m zal aanleiding geven tot de vertrouwde basisregels van het waarschijnlijkheidsrekenen. Bovendien geldt dat de aannemelijkheid van een onmogelijke hypothese nul is en de aannemelijkheid van een hypothese die zeker optreedt één is.

Definiëer de (Bayesiaanse) waarschijnlijkheid door $bp(A|B) \equiv a^m(A|B)$. De waarschijnlijkheden voldoen dan aan

$$bp(A|B) + bp(\bar{A}|B) = 1 \tag{3.7}$$

en

$$bp(AB|C) = bp(A|C)\ bp(B|AC). \tag{3.8}$$

De eerste regel (3.7) eist dat de som van de waarschijnlijkheden van een hypothese en zijn negatie steeds 1 is. De tweede regel (3.8) is de produktregel of kettingregel. Deze twee regels zijn voldoende om de somregel af te leiden :

$$bp(A + B|C) = bp(A|C) + bp(B|C) - bp(AB|C). \tag{3.9}$$

De som- en produktregel laten toe om alle waarschijnlijkheden van samenstellingen van hypothesen te herleiden naar waarschijnlijkheden van enkelvoudige hypothesen.

Merk op dat de aannemelijkheden omgevormd zijn tot Bayesiaanse waarschijnlijkheden. Een Bayesiaanse waarschijnlijkheid is enkel een herschaalde versie van de aannemelijkheid waarbij de geschikte keuze van herschaling de bekende som- en produktregel oplevert.

De gezamenlijke waarschijnlijkheid van de hypothesen AB kan door de produktregel op twee verschillende manieren herschreven worden:

$$bp(AB|C) = bp(A|C)\ bp(B|AC) = bp(B|C)\ bp(A|BC). \tag{3.10}$$

Door de termen van deze vergelijking te herschikken wordt de regel van Bayes opgesteld:

$$bp(B|AC) = bp(B|C)\ \frac{bp(A|BC)}{bp(A|C)}. \tag{3.11}$$

De waarschijnlijkheden die optreden in de regel van Bayes krijgen in deze context de volgende namen. De waarschijnlijkheid van het linkerlid, $bp(B|AC)$, is de a posteriori waarschijnlijkheid; $bp(B|C)$, is de a priori waarschijnlijkheid van de hypothese B en $bp(A|BC)$ is de direkte waarschijnlijkheid of voorwaartse waarschijnlijkheid. Indien $bp(A|BC)$ beschouwd wordt als een functie van B wordt deze waarschijnlijkheid ook wel eens de "likelihood" of "kans" genoemd. De waarschijnlijkheid in de noemer speelt de rol van normalisatieconstante en wordt als de globale likelihoodfunctie aangeduid.

De regel van Bayes kan geïnterpreteerd worden als een herziening van de waarschijnlijkheden bij een uitbreiding van de kennistoestand C met de hypothese A. De a priori waarschijnlijkheid is de waarschijnlijkheid van de hypothese B voordat de hypothese A gegeven wordt. De a posteriori waarschijnlijkheid is de waarschijnlijkheid van hypothese B waarbij ook de nieuwe hypothese A tot de kennistoestand behoort. De a priori waarschijnlijkheid wordt omgezet in de a posteriori waarschijnlijkheid door te vermenigvuldigen met de term $bp(A|BC)$ (en een normalisatieterm $bp(A|C)$). Deze term geeft aan hoe goed de hypothese A "verklaard" wordt door hypothese B.

In deze paragraaf werden de basisregels van het BWR afgeleid uit drie elementaire basisveronderstellingen (desiderata). Indien andere regels (verschillend van de som- en productregel) gebruikt worden, kan de overeenstemming met menselijke redeneringen (welke de desiderate incorporeren) niet meer gewaarborgd worden. Maar de desiderata zijn zo fundamenteel, dat een afwijking van de som- en produktregel aanleiding zal geven tot logische anomalieën.

Loredo [Lored90] noemt de som- en produktregels de grammatica van het BWR. De woordenschat van het BWR bestaat uit de waarden van de waarschijnlijkheden. Hoe deze waarden aan de waarschijnlijkheden toegekend worden is het onderwerp van de volgende paragraaf.

3.5 Het toekennen van waarschijnlijkheden

Bij het toekennen van waarschijnlijkheden wordt getracht alle beschikbare kennis om te zetten in getalwaarden. Deze omzetting van kennis naar waarschijnlijkheden is geen triviale taak en vormt nog steeds een belangrijk onderzoeksonderwerp. Bij de omzetting mag er immers geen kennis verloren gaan, noch mag er kennis toegevoegd worden. Hier volgen een aantal klassen van kennistoestanden waarvoor een omzettingsmethode ontwikkeld werd:

1. de kennis van de verschillende mogelijke hypothesen;

2. de kennis van fysische eigenschappen van hypothesen;

3. de kennis van verwachtingswaarden van een functie van de hypothesen;

4. de kennis van frequenties van optreden van de hypothesen.

Wanneer enkel de kennis van de verschillende mogelijke hypothesen beschikbaar is, worden de afgeleide waarschijnlijkheden niet-informatief genoemd. Deze kennistoestand vormt het noodzakelijke vertrekpunt voor de oplossing van elk probleem in het BWR.

Soms kunnen de "fysische" eigenschappen van een hypothese helpen bij het toekennen van waarschijnlijkheden. Indien de hypothese b.v. een parameter betreft die een plaatsaanduiding inhoudt, dan kan hierdoor een a priori waarschijnlijkheidsdistributie voor die parameter afgeleid worden. Zo kan uit de vorm van de Gaussdistributie de a priori waarschijnlijkheidsdistributie voor de parameters (de gemiddelde $\tilde{\mu}$ (aanduiding van locatie van distributie) en de spreiding $\tilde{\sigma}$ (aanduiding van schaal van Gaussdistributie)) bepaald worden. Deze vorm van kennis wordt uitgebreider besproken in par. 3.5.2.

De kennis van de verwachtingswaarden van een functie van een hypothese leidt tot het toekennen van waarschijnlijkheden door gebruik te maken van het maximum-entropieprincipe. De kennis van de verwachtingswaarden van een functie van de hypothesen is slechts theoretisch haalbaar. Maar in de praktijk kan dikwijls een goede benadering voor de verwachtingswaarde opgesteld worden.

Wanneer de frequenties van optreden van hypothesen gekend zijn, kunnen de waarschijnlijkheden van de hypothesen gelijk gesteld worden aan die frequenties. Deze kennistoestand is eveneens slechts theoretisch mogelijk omdat een oneindige herhaling van het experiment vereist is. In sommige situaties (indien b.v. het gebruik van de centrale limietstelling gerechtvaardigd is) kunnen evenwel werkbare benaderingen gevonden worden.

Hierna worden enkel de omzetting van de eerste drie vormen van kennis besproken. De omzetting van frequentie-informatie naar waarschijnlijkheden is immers algemeen gekend. Het maximum-entropieprincipe wordt in deze paragraaf slechts summier besproken. Een gedetailleerde beschrijving van het maximum-entropieprincipe wordt uitgesteld tot par. 3.10.

3.5.1 De kennis van de verschillende hypothesen

De kennis van de verschillende hypothesen is een vereiste om een probleem op te lossen in het BWR. Veronderstel dat de beschouwde hypothesen exclusief en exhaustief zijn. Deze hypothesen definiëren de hypotheseruimte. Beschouw een hypotheseruimte met N hypothesen: $\{H_1, \ldots, H_N\}$. Met deze gegevens

moet aan de hypothesen een waarschijnlijkheid toegekend worden. De waarschijnlijkheden voor de verschillende hypothesen vormen dan een waarschijnlijkheidsdistributie.

Om waarschijnlijkheden aan hypothesen toe te kennen gebruikte Laplace reeds het onverschilligheidsprincipe [Lapla14]. Dit principe stelt dat indien de kennistoestand enkel bestaat uit een opsomming van een set exhaustieve, exclusieve hypothesen, aan al deze hypothesen dezelfde waarschijnlijkheid toegekend wordt. Vermits de som van de waarschijnlijkheden van alle hypothesen 1 is, zijn de waarschijnlijkheden van de hypothesen éénduidig bepaald. Voor de N hypothesen geldt er

$$H_i = \frac{1}{N},\ i = 1, \ldots, N. \tag{3.12}$$

De geldigheid van dit principe is intuïtief duidelijk. Hier volgt toch nog een "bewijsje" van het onverschilligheidsprincipe. Vermits de kennis slechts bestaat uit de opsomming van de hypothesen, is de nummering van de hypothesen onbelangrijk. Stel b.v. dat er twee verschillende nummeringen voor de hypothesen bestaan: $\{H_1, \ldots, H_N\}$ en $\{H'_1, \ldots, H'_N\}$. Stel dat deze nummeringen overeenkomen met de representaties van deze hypothesen in twee afzonderlijke laboratoria. In elk van deze laboratoria is er een onderzoeker werkzaam, die onafhankelijk werkt van de andere. Stel dat de nummering van de hypothesen verschillen door een cyclische permutatie van de indices. In de echte wereld zijn de hypothesen uit de twee laboratoria nog steeds gelijk aan elkaar. Beschouw b.v. de cyclische permutatie waarvoor geldt:

$$H_i \equiv H'_{i+1},\ 1 \leq i < N \tag{3.13}$$

$$H_N \equiv H'_1. \tag{3.14}$$

Deze vergelijkingen volgen uit de "fysische" identiteit van de hypothesen.

De twee onderzoekers kennen de waarschijnlijkheden $bp(H_1|I), \ldots, bp(H_N|I)$ en $bp(H'_1|I), \ldots, bp(H'_N|I)$ toe aan de hypothesen. Door de fysische identiteit van de hypothesen geldt er:

$$bp(H_i|I) = bp(H'_{i+1}|I),\ 1 \leq i < N \tag{3.15}$$

$$bp(H_N|I) = bp(H'_1|I). \tag{3.16}$$

Maar merk op dat de twee onderzoekers zich in dezelfde kennistoestand bevonden. De hypothese I veronderstelt enkel dat er N hypothesen zijn. Het consistentiebeginsel eist dan dat beide onderzoekers dezelfde waarschijnlijkheden toekennen in hun respectievelijke laboratoria. Bijgevolg geldt er

$$bp(H_i \mid I) = bp(H'_i \mid I),\ 1 \leq i \leq N. \tag{3.17}$$

Wanneer deze vergelijking gecombineerd wordt met de vergelijkingen afkomstig van de fysische identiteit, is het duidelijk dat de waarschijnlijkheden voor alle

hypothesen dezelfde moet zijn. Hierdoor is de geldigheid van het onverschilligheidsprincipe aangetoond.

Dit bewijsje is een illustratie van het groepsinvariantieprincipe, dat uitgebreid besproken wordt in de volgende paragraaf.

3.5.2 De kennis van fysische eigenschappen

De kennis van "fysische" eigenschappen vormt een heel vage vorm van kennis die toch toelaat om een a priori waarschijnlijkheidsdistributie af te leiden. Onder fysische eigenschappen wordt hier het gedrag onder parametertransformatie bedoeld.

Beschouw ter illustratie de bepaling van de a priori waarschijnlijkheden voor de parameters $\check{\mu}$ en $\check{\sigma}$ die optreden in een waarschijnlijkheidsdistributie van de vorm:

$$bp(\mathrm{d}x \mid \mu\ \sigma\ I) = h(\frac{x-\mu}{\sigma})\ \frac{\mathrm{d}x}{\sigma}. \tag{3.18}$$

Hierbij is h een willekeurige genormeerde functie die overal positief is. De a priori informatie I bevat hier de kennis van de directe waarschijnlijkheid (3.18) en de gebieden waarin de parameters $\check{\mu}$ en $\check{\sigma}$ gedefinieerd zijn. De a priori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\mathrm{d}\mu\ \mathrm{d}\sigma \mid I)$ voor de parameters $\check{\mu}, \check{\sigma}$ van de distributiefunctie wordt gezocht. Een waarschijnlijkheid van de vorm $bp(\mathrm{d}\alpha \mid I)$ staat voor de waarschijnlijkheid dat de bepaalde parameter $\check{\alpha}$ zich in het elementair interval $\mathrm{d}\alpha$ bevindt. De parameter $\check{\mu}$ wordt de locatieparameter genoemd. De waarde van deze parameter bepaalt de locatie op de reële as van de waarschijnlijkheidsdistributie. De parameter $\check{\sigma}$ wordt de schaalparameter genoemd. Het veranderen van deze parameter verbreedt of versmalt immers de distributie. Een voorbeeld van een waarschijnlijkheidsdistributie met dergelijke parameters is de Gaussdistributie.

Veronderstel eerst dat de gezochte a priori waarschijnlijkheidsdistributie voor de parameters $\check{\mu}, \check{\sigma}$ gegeven is door de onbekende functie f

$$bp(\mathrm{d}\mu\,\mathrm{d}\sigma \mid I) = f(\mu, \sigma)\ \mathrm{d}\sigma\,\mathrm{d}\mu. \tag{3.19}$$

Voer de volgende coördinatentransformatie uit:

$$\begin{aligned} \mu' &= \mu + b \\ \sigma' &= a\ \sigma \\ x' - \mu' &= a\ (x - \mu), \end{aligned} \tag{3.20}$$

met $0 < a < \infty$ en $-\infty < b < +\infty$. Deze transformatie (3.20) laat de vorm van de distributie (3.18) onveranderd:

$$bp(\mathrm{d}x' \mid \mathrm{d}\mu'\ \mathrm{d}\sigma'\ I) = h(\frac{x'-\mu'}{\sigma'})\ \frac{\mathrm{d}x'}{\sigma'} \tag{3.21}$$

Bemerk dat de transformaties uit (3.20) overeenkomen met een translatie van de parameter $\check{\mu}$ en een schaling van de parameter $\check{\sigma}$. Stel de a priori distributie in het nieuwe coördinatenstelsel gelijk aan $g(\mu', \sigma')\ \mathrm{d}\mu'\ \mathrm{d}\sigma'$. Door de coördinatentransformatie toe te passen op de a priori waarschijnlijkheid van de schaal- en locatieparameters blijkt dat

$$g(\mu', \sigma') = \frac{1}{a}\ f(\mu, \sigma). \tag{3.22}$$

Veronderstel dat een andere onderzoeker onmiddellijk in het tweede coördinatenstelsel de a priori waarschijnlijkheid moet toekennen. Vermits hij over dezelfde kennistoestand beschikt als de eerste onderzoeker, is de a priori waarschijnlijkheidsdistributie in dit coördinatenstelsel gegeven door

$$bp(\mathrm{d}\mu'\,\mathrm{d}\sigma' \mid I) = f(\mu', \sigma')\ \mathrm{d}\mu'\,\mathrm{d}\sigma'. \tag{3.23}$$

Deze a priori waarschijnlijkheidsdistributie moet gelijk zijn aan de getransformeerde waarschijnlijkheidsdistributie $g(\mu', \sigma')$ van de eerste onderzoeker. Het gebruik van (3.22) levert de volgende functionaalvergelijking op:

$$f(\mu, \sigma) = a\ f(\mu + b, a\ \sigma). \tag{3.24}$$

De algemene oplossing van deze vergelijking is [Aczel66]:

$$f(\mu, \sigma) = \frac{const}{\sigma}. \tag{3.25}$$

Hieruit wordt dan afgeleid dat de a priori waarschijnlijkheidsdistributie voor een locatieparameter de uniforme distributie is. Voor een schaalparameter wordt de distributie $\mathrm{d}\sigma/\sigma$ vooropgesteld. Deze a priori waarschijnlijkheidsdistributie is de Jeffreysdistributie. Jeffreys was de eerste om deze distributie regelmatig te gebruiken [Jeffr39].

Voor meer toepassingen van de groepsinvariantiemethode zie [Jayne68]. Een alternatieve methode om a priori waarschijnlijkheden op te stellen bij een heel vage kennistoestand, steunt op het marginalisatieprincipe [Jayne83b]. Voor het marginalisatieprincipe wordt verwezen naar par. 3.6.

3.5.3 De kennis van verwachtingswaarden

Opnieuw worden de waarschijnlijkheden voor een set exclusieve, exhaustieve hypothesen gezocht. De hypothesen betreffen nu een aantal mogelijke waarden voor de parameter $\check{x}$: $\{x_1, \ldots, x_N\}$. De kennistoestand bestaat uit de verwachtingswaarde van een functie g van de hypothesen $x_i, 1 \leq i \leq N$. De bovenstaande kennistoestand staat dan gelijk met de kennis van de verwachtingswaarde $< g >$:

$$< g > = \sum_{i=1}^{N} g(x_i)\ bp(x_i \mid I), \tag{3.26}$$

Het probleem bestaat erin de meest geschikte waarschijnlijkheidsdistributie voor x te selecteren die aan (3.26) voldoet. Het criterium dat gebruikt wordt is het maximum-entropieprincipe. De entropie meet de informatie-inhoud van een distributie [Shann49]. Door de distributie te selecteren met de hoogste entropie wordt gekozen voor de distributie met de kleinste informatie-inhoud die nog aan voorwaarde (3.26) voldoet.

Een uitgebreide uiteenzetting van het maximum-entropieprincipe kan gevonden worden in par. 3.10.

3.6 De basisprocedure

De eerste vereiste in het BWR is de specificatie van de beschouwde hypothesen. De hypothesen kunnen in twee klassen ingedeeld worden: de gekend veronderstelde hypothesen B en de onbekende hypothesen A. Het voornaamste onderscheid tussen deze typen hypothesen is hun plaats t.o.v. het conditioneel teken "|" voor het bestudeerde probleem.

Het hoofddoel van het BWR is het bestuderen van de waarschijnlijkheid van alle onbekende hypothesen A in de veronderstelling dat de gekende hypothesen B waar zijn:

$$bp(A \mid B). \tag{3.27}$$

De uitdrukking van deze waarschijnlijkheid is meestal niet onmiddellijk beschikbaar. Maar door het herhaaldelijk toepassen van de regel van Bayes kan bij een geschikte kennistoestand eenvoudig de expliciete gedaante van $bp(A \mid B)$ gevonden worden.

Een complicatie kan optreden wanneer er twee soorten onbekende hypothesen bestaan. De eerste soort, A_1, zijn de hypothesen waarvoor de waarschijnlijkheid bestudeerd wordt. De oplossing van het probleem bestaat uit het berekenen van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor die hypothese A_1. De tweede soort hypothesen, A_2, zijn de hypothesen waarvan het gedrag niet expliciet onderzocht wordt. Indien bijvoorbeeld wordt nagegaan of een rechte lijn ($y = ax + b$) een goede overeenkomst heeft met de data, dan kan de "interessante" onbekende hypothese A_1 zijn: "een rechte is een gepaste voorstelling voor de data". De tweede soort hypothese, A_2, correspondeert hier met: "de waarde van de parameter $\check{a}$ is a en de waarde van parameter $\check{b}$ is b". De tweede soort hypothesen hebben meestal betrekking op parameters en worden lastparameters ("nuisance parameter") genoemd. De waarschijnlijkheid $bp(A \mid B)$ kan geschreven worden als

$$bp(A_1\ A_2 \mid B). \tag{3.28}$$

Voor dit probleem is de "interessante" waarschijnlijkheid

$$bp(A_1 \mid B). \tag{3.29}$$

Het hulpmiddel om van (3.28) naar (3.29) over te gaan is de marginalisatieprocedure. De marginalisatieprocedure bestaat erin om waarschijnlijkheid $bp(A_1\ A_2 \mid B)$ te integreren over het totale gebied Ω_{A_2} waarover de lastparameters gedefinieerd zijn:

$$bp(A_1 \mid B) = \int_{\Omega_{A_2}} bp(A_1\ A_2 \mid B)\ \mathrm{d}\Omega. \tag{3.30}$$

Hierbij is $\mathrm{d}\Omega$ een elementair volume-element in de lastparameterruimte. Indien de lastparameter enkel discrete waarden kan aannemen, zal de integratie vervangen worden door een sommatie.

In de volgende twee paragrafen worden de meest gebruikte toepassingen geïllustreerd: de parameterschatting en de modeltoetsing. In de paragraaf over de besliskunde wordt een uitbreiding van het BWR gegeven. Deze uitbreiding laat toe om uit onbekende hypothesen één hypothese als de optimale hypothese voorop te stellen.

Het is mogelijk gebleken om al de berekeningen die nodig zijn voor het BWR, te incorporeren in een *Mathematica*-pakket `BayesCalc`. Met dit pakket kunnen bijna alle operaties van het BWR automatisch uitgevoerd worden. De voorbeelden uit de volgende paragrafen (de parameterschatting, de modeltoetsing en de besliskunde) werden trouwens met *Mathematica* uitgewerkt. Voor een uitgebreidere uiteenzetting van `BayesCalc` wordt verwezen naar app. B en de publicaties [Desme93d], [Desme94e], [Desme94f].

3.7 De parameterschatting

Bij de parameterschatting worden de waarschijnlijkheden van een aantal hypothesen berekend. De verschillende hypothesen komen overeen met de verschillende waarden die de parameter kan aannemen.

Noem de onbekende parameter $\check{x}$ en veronderstel dat de bekende hypothese bestaat uit de waarde van de parameter $\check{d}$ en de algemene kennistoestand I. In het algemeen is de parameter $\check{x}$ de onbekende uit een model en de parameter $\check{d}$ een meting. De benodigde waarschijnlijkheden worden berekend met de regel van Bayes:

$$bp(x \mid d\ I) = bp(x \mid I)\ \frac{bp(d \mid x\ I)}{bp(d \mid I)}. \tag{3.31}$$

De a posteriori waarschijnlijkheid van de waarde van een parameter is bijgevolg evenredig met de a priori waarschijnlijkheid van die waarde vermenigvuldigd met de mate waarin de meting overeenkomt met die parameterwaarde.

Beschouw ter illustratie twee onafhankelijke metingen d_1, d_2. Veronderstel dat deze metingen waarden zijn voor de parameter $\check{d}$ bij twee onafhankelijke

metingen. Voor de waarschijnlijkheidsdistributie van de metingen wordt een Gaussdistributie ondersteld:

$$bp(d \mid \mu\, \sigma\, I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-\frac{(d-\mu)^2}{2\sigma^2}). \tag{3.32}$$

Aan de hand van deze twee metingen wordt de a posteriori waarschijnlijkheid voor de spreiding $\check{\sigma}$ en de gemiddelde waarde $\check{\mu}$ van de Gaussdistributie bepaald. Dit gebeurt door de waarschijnlijkheid $bp(\mu\, \sigma \mid d_1\ d_2\ I)$ te berekenen. De spreiding is een schaalparameter en de gemiddelde waarde is een locatieparameter. Door enkel deze kennis over $\check{\mu}$ en $\check{\sigma}$ in rekening te brengen ligt de vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie ervoor vast (zie par. 3.5.2). Het interval waarover deze parameters gedefinieerd zijn, zal voorgesteld worden door $[\sigma_{min}, \sigma_{max}]$ voor $\check{\sigma}$ en $[\mu_{min}, \mu_{max}]$ voor $\check{\mu}$. De a posteriori waarschijnlijkheid is dan eenvoudig te berekenen en is gegeven door

$$bp(\mu\, \sigma \mid d_1\, d_2\, I) \propto \sigma^{-3} \exp\left[-\frac{(d_1-\mu)^2 + (d_2-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]. \tag{3.33}$$

Voor de studie van de vorm van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie zijn de absolute waarden van deze distributie niet vereist. De normalisatieconstante $bp(d_1\, d_2 \mid I)$ hoeft niet berekend te worden. De a posteriori distributie (3.33) wordt voorgesteld in de fig. 3.1. Deze figuur geeft de a posteriori waarschijnlijkheid weer voor:

$$d_1 = 10, d_2 = 30, \mu_{min} = 0, \mu_{max} = 1000, \sigma_{min} = 1, \sigma_{max} = 100.$$

Bij het bestuderen van deze figuur vallen de volgende eigenschappen onmiddellijk op. Het maximum van deze functie bevindt zich op de intuïtief aanvaardbare plaats

$$\hat{\mu} = 20, \text{ waarbij } \frac{d_1 + d_2}{2} = 20 \tag{3.34}$$

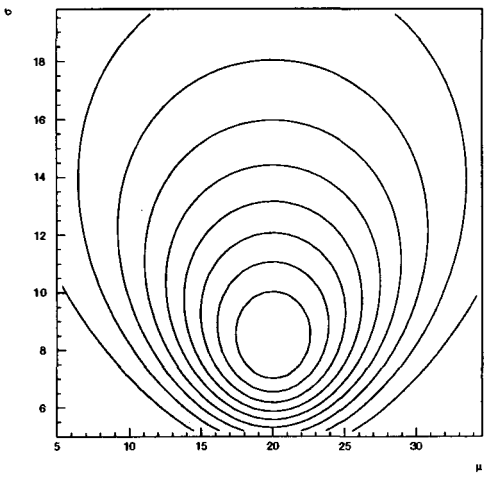
en

$$\hat{\sigma} = 8, \text{ waarbij } \sqrt{(d_1-\mu)^2 + (d_2-\mu)^2} = 14. \tag{3.35}$$

Daarnaast is het ook duidelijk dat de uitgestrektheid van de functie over de μ-waarden vermindert naarmate de σ-waarden kleiner worden.

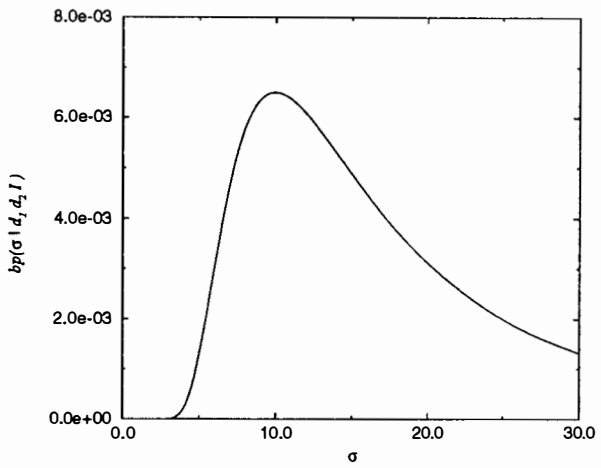
De a posteriori waarschijnlijkheid voor de parameter $\check{\sigma}$ wordt verkregen door marginalisatie van de waarschijnlijkheid $bp(\mu\, \sigma \mid d_1\ d_2\, I)$ voor de locatieparameter $\check{\mu}$,

$$\begin{aligned} bp(\sigma \mid d_1\, d_2\, I) \propto & \\ & \left(\text{Erf}\left[\frac{\mu_{max} - (d_1+d_2)/2}{\sigma}\right] - \text{Erf}\left[\frac{\mu_{min} - (d_1+d_2)/2}{\sigma}\right]\right) \times \\ & \sigma^2 \exp\left[-\frac{((d_1+d_2)/2)^2}{2\sigma^2}\right] \end{aligned} \tag{3.36}$$



Figuur 3.1 De gezamenlijke a posteriori waarschijnlijkheid $bp(\mu\,\sigma|d_1\,d_2\,I)$ voor de locatieparameter $\tilde{\mu}$ en de spreiding $\tilde{\sigma}$. Deze waarschijnlijkheidsdistributie wordt afgeleid uit twee onafhankelijke metingen: $d_1 = 10, d_2 = 30$.

De distributie $bp(\,\sigma\,|\,d_1\,d_2\,I)$ is voorgesteld in fig. 3.2 en is duidelijk niet symmetrisch rond een bepaalde waarde. De waarschijnlijkheid van kleine spreidingen σ is beduidend kleiner dan de waarschijnlijkheid van grote spreidingen. De distributie $bp(\,\sigma\,|\,d_1\,d_2\,I)$ is maximaal voor de spreiding $\sigma = 10$. Bij de gezamenlijke waarschijnlijkheidsdistributie (zie fig. 3.1) bevindt het maximum zich bij een spreiding $\sigma = 8$. De verschuiving van de optimale spreiding naar hogere waarden is het gevolg van de marginalisatieprocedure. Voor grotere waarden van de spreiding σ zullen meer gemiddelde waarden nog een redelijke waarschijnlijkheid hebben. De marginalisatieprocedure integreert de gezamenlijke waarschijnlijkheidsdistributie voor een bepaalde spreidingswaarde over alle gemiddelde waarden. Alhoewel de piekwaarde van de waarschijnlijkheden kleiner is voor grotere spreidingen zal de gezamenlijk bijdrage van de waarschijnlijheden van de vele gemiddelde waarden dit opheffen. Bijgevolg wordt de locatie van de piek voor de spreiding verschoven naar hogere waarden.



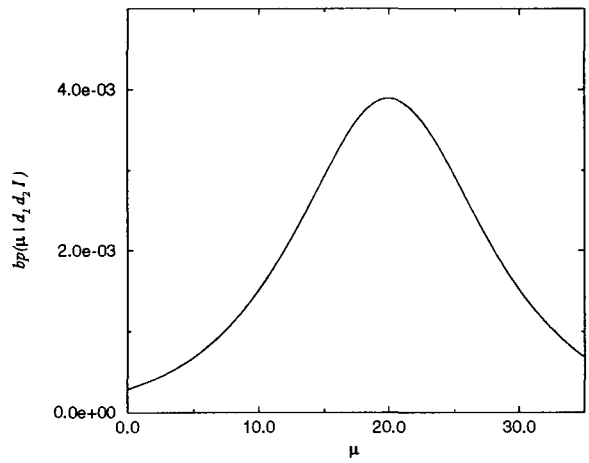
Figuur 3.2 De a posteriori distributie $bp(\sigma \mid d_1\ d_2\ I)$. Deze distributie werd verkregen door de marginalisatie van de gezamenlijke distributie $bp(\sigma\ \mu \mid d_1\ d_2\ I)$ over μ. De waarden van de twee onafhankelijke metingen zijn: $d_1 = 10, d_2 = 30$.

De a posteriori waarschijnlijkheid voor de locatieparameter is

$$\begin{aligned} bp(\mu \mid d_1\ d_2\ I) \propto \\ &\left[\exp\left(-2\,\frac{(\mu - ((d_1+d_2)/2))^2 + ((d_1^2-d_2^2)/2)^2}{\sigma_{max}^2}\right) - \right. \\ &\left.\exp\left(-2\,\frac{(\mu - ((d_1+d_2)/2))^2 + ((d_1^2-d_2^2)/2)^2}{\sigma_{min}^2}\right)\right] \times \\ &((\mu - ((d_1+d_2)/2))^2 + ((d_1^2-d_2^2)/2)^2)^{-1} \end{aligned} \tag{3.37}$$

Deze functie is voorgesteld in fig. 3.3 en bereikt een maximale waarde voor de gemiddelde waarde $\mu = 20$. Merk op dat het maximum van de gezamenlijke waarschijnlijkheidsdistributie eveneens optreedt bij $\mu = 20$.

In de parameterschatting is de hoofdbedoeling de studie van de gezamenlijke a posteriori waarschijnlijkheden voor alle onbekende parameters. Door de marginalisatieprocedure kunnen lastparameters uitgeschakeld worden. De marginalisatieprocedure kan leiden tot een verschuiving van de piek in de waarschijnlijkheidsdistributie. De invloed van het domein van de parameters op de uiteindelijke a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie wordt dikwijls overschat. In app. D wordt een uitgebreid voorbeeld gegeven. De invloed van het domein van de parameters (evenals de vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie) op de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie is bijna steeds



Figuur 3.3 De a posteriori distributie $bp(\mu \mid d_1\ d_2\ I)$ voor de locatieparameter. Deze distributie werd verkregen door de marginalisatie van de gezamenlijke distributie $bp(\sigma\ \mu \mid d_1\ d_2\ I)$ over σ. De waarden van de twee onafhankelijke metingen zijn: $d_1 = 10, d_2 = 30$.

verwaarloosbaar [Lored90].

3.8 De modeltoetsing

Vaak moet een onderzoeker kiezen tussen verschillende mogelijke modellen om metingen te verklaren. Veronderstel dat een reeks metingen in functie van de tijd verricht werden. Dan kan b.v. zowel een kwadratische als een lineaire wet de metingen voorspellen. De overeenkomst van een kwadratische wet met de metingen zal steeds minstens even goed zijn als de overeenkomst met een lineaire wet. Trouwens, bij het meten van N punten zal er steeds een polynoom van de graad $N-1$ bestaan die door alle meetpunten gaat. Maar een wetenschapper zal bijna nooit het meest ingewikkelde model selecteren. Het blijkt dat de modeltoetsing van het BWR ook een dergelijke aversie voor ingewikkelde modellen vertoont.

In modeltoetsing is het model de onbekende hypothese. De bekende hypothese bestaat b.v. uit de waarden d van een aantal metingen. Veronderstel dat het model M_0 vergeleken wordt met een alternatief model M_1. De kennistoestand wordt weergegeven door de meting d en de achtergrondkennis door I.

De waarschijnlijkheid van het model M_0 wordt berekend met de regel van

Bayes:

$$bp(\, M_0 \,|\, d\, I\,) = \frac{bp(\, M_0 \,|\, I\,)\; bp(\, d \,|\, M_0\, I\,)}{bp(\, d \,|\, I)}. \tag{3.38}$$

Het berekenen van de noemer is niet eenvoudig. Deze noemer kan verwijderd worden door de verhouding van waarschijnlijkheden van verschillende modellen te berekenen:

$$K = \frac{bp(\, M_1 \,|\, d\, I\,)}{bp(\, M_0 \,|\, d\, I\,)} = \frac{bp(\, M_1 \,|\, I\,)}{bp(\, M_0 \,|\, I\,)}\;\; \frac{bp(\, d \,|\, M_1\, I\,)}{bp(\, d \,|\, M_0\, I\,)} \tag{3.39}$$

De verhouding K van de a posteriori waarschijnlijkheden van de modellen is dus gelijk aan het produkt van de verhouding van de a priori waarschijnlijkheden van de modellen vermenigvuldigd met een term die aangeeft in welke mate de modellen de data kunnen voorspellen.

Ter illustratie wordt hier een heel eenvoudig voorbeeld van modeltoetsing gepresenteerd. Veronderstel dat er twee modellen (M_0 en M_1) bestaan om een enkele meting te verklaren. Beide modellen stellen een Gaussdistributie voorop voor de directe waarschijnlijkheid van de meting:

$$bp(\, d \,|\, \alpha\, M_0\, I\,) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, \exp(-\frac{(d-\alpha)^2}{2\sigma^2}) \tag{3.40}$$

$$bp(\, d \,|\, \beta\, M_1\, I\,) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, \exp(-\frac{(d-\beta)^2}{2\sigma^2}). \tag{3.41}$$

De parameters $\check{\alpha}$ en $\check{\beta}$ zijn de locatieparameters voor de respectievelijke modellen M_0 en M_1. De spreiding σ is dezelfde voor beide modellen en wordt gekend verondersteld. Het enige verschil tussen beide modellen is het gebied waarover de respectievelijke locatieparameters $\check{\alpha}$ en $\check{\beta}$ variëren. Veronderstel dat de parameter $\check{\alpha}$ beperkt is tot het gebied $[0, 2 \times L]$ en de parameter $\check{\beta}$ ligt in een tweemaal kleiner gebied : $[0, L]$.

Bij het berekenen van de verhouding K met (3.39) moet de marginalisatie over de lastparameters uitgevoerd worden. Vermits het hier locatieparameters betreft, kan de waarde van de a priori waarschijnlijkheid (deze is constant) buiten de integratie gebracht worden. De waarde van de a priori waarschijnlijkheid voor de parameters $\check{\alpha}$ en $\check{\beta}$ is A_α resp. A_β. De factor A_β / A_α afkomstig van de a priori waarschijnlijkheden van de parameters is bijgevolg

$$\frac{A_\beta}{A_\alpha} = \frac{2 \times L}{L} = 2. \tag{3.42}$$

Veronderstel ook dat beide modellen a priori even waarschijnlijk zijn:

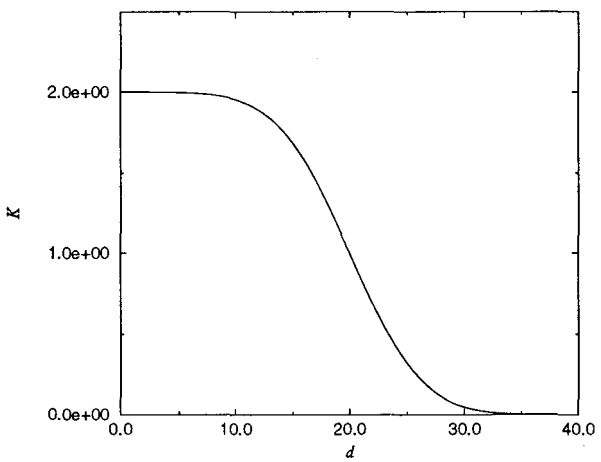
$$bp(\, M_0 \,|\, I\,) = bp(\, M_1 \,|\, I\,). \tag{3.43}$$

Indien de beide modellen er even goed in slagen een meting te verklaren, dan zal het tweede model de voorkeur genieten. Dit model is immers het meest

specifieke. Beschouw nu een meting in het gebied tussen 0 en $L - 2\sigma$. In dit gebied is de meting door beide modellen even goed te verklaren. Bijgevolg zal de modeltoetsing het model M_1 kiezen. Wanneer het meetpunt een waarde heeft die veel groter is dan L, dan zal enkel het eerste model de meting kunnen verklaren. Bijgevolg zal in dit laatste interval de hypothesetest het model M_0 bevoordeligen. De verhouding K wordt gegeven door

$$K = 2\,\frac{Erf\left[(L-d)\,\sigma/\sqrt{2}\right] + Erf\left[d\,\sigma/\sqrt{2}\right]}{Erf\left[(2L-d)\,\sigma/\sqrt{2}\right] + Erf\left[d\,\sigma/\sqrt{2}\right]}, \tag{3.44}$$

en is voorgesteld in fig. 3.4 voor $\sigma = 5$ en $L = 20$. Het is duidelijk dat de modeltoetsing de voorkeur zal geven aan het meest specifieke model dat de meting kan verklaren.



Figuur 3.4 De verhouding K van de a posteriori waarschijnlijkheden van de modellen in functie van de waarde van de meting.

De Bayesiaanse modeltoetsing bevat bijgevolg een mechanisme dat het meest specifiek model bevoordeligt. Dikwijls komt het meest specifieke model overeen met het model met het laagste aantal parameters. Voor uitgebreidere voorbeelden zie [Jeffe92],[Jayne94].

Verliesfunctie	Optimale schatting
$\delta(\alpha - \hat{\alpha})$	$\arg(\max_\alpha(bp(\alpha\|I)))$
$-\|\alpha - \hat{\alpha}\|$	mediaan $(bp(\alpha\|I))$
$-(\alpha - \hat{\alpha})^2$	$< \alpha >$
$-\alpha(\alpha - \hat{\alpha})^2$	$< \alpha^2 > / < \alpha >$

Tabel 3.1 Verschillende verliesfuncties met de corresponderende optimale schatting.

3.9 De besliskunde

Het uiteindelijke resultaat van het BWR is de toekenning van een waarschijnlijkheid aan een bepaalde hypothese. Eventueel kan voor een hele set hypothesen waarschijnlijkheden berekend worden. Hierdoor is er een waarschijnlijkheidsdistributie gedefinieerd op de hypotheseruimte. De studie van die waarschijnlijkheidsdistributie komt overeen met de studie van de kennistoestand. De taak van de besliskunde bestaat erin de "beste" hypothese te selecteren. In deze optiek is de besliskunde een uitbreiding van het BWR [Tribu69], [Jayne94].

De behandeling van de besliskunde in deze paragraaf is gebaseerd op het werk van Wald [Wald47]. De besliskunde kan enkel toegepast worden nadat het begrip de "beste" hypothese nader gespecifieerd werd. Hiertoe wordt een verliesfunctie ingevoerd. De verliesfunctie geeft het verlies (winst) bij het kiezen van een bepaalde hypothese. De verliesfunctie is een functie van de geselecteerde hypothese en van de hypothese die in werkelijkheid optreedt. Veronderstel hier dat de hypothese de waarde van een parameter $\check{\alpha}$ betreft. De waarde die de parameter in werkelijkheid heeft wordt voorgesteld door $\tilde{\alpha}$, de schatting van de parameter is $\hat{\alpha}$. Het verlies voor de schatting $\hat{\alpha}$ wordt voorgesteld door $L(\tilde{\alpha}, \hat{\alpha})$. De toepassing van de besliskunde is evenwel enkel interessant indien de echte waarde voor de parameter $\check{\alpha}$ niet gekend is. Veronderstel dat er een waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\alpha|I)$ berekend werd voor de parameter $\check{\alpha}$. Met deze waarschijnlijkheidsdistributie kan dan de verwachtingswaarde van het verlies $< L > (\hat{\alpha})$ berekend worden:

$$< L > (\hat{\alpha}) = \int_\alpha bp(\alpha \mid I)\ L(\alpha, \hat{\alpha})\, d\alpha. \tag{3.45}$$

De "beste" schatting van de parameter minimaliseert het verwachte verlies. De beste schatting van de parameter wordt gevonden door

$$\frac{\partial L(\hat{\alpha})}{\partial \hat{\alpha}} = 0, \tag{3.46}$$

op te lossen voor $\hat{\alpha}$.

Bijgevolg kan eenzelfde waarschijnlijkheidsdistributie aanleiding geven tot verschillende optimale schattingen. Inderdaad, verschillende verliesfuncties zul-

len meestal andere optimale schattingen opleveren. In tabel 3.1 worden enkele verliesfuncties opgesomd met de corresponderende optimale schatting. Indien de verliesfunctie een deltafunctie is, is het verlies onafhankelijk van de grootte van de fout die gemaakt wordt bij de schatting. De optimale schatting komt in dit geval overeen met de waarde van de parameter waarvoor de a posteriori waarschijnlijheidsdistributie een maximum bereikt. Indien de verliesfunctie evenredig is met de absolute waarde van het verschil tussen de schatting en de werkelijke waarde, dan vormt de mediaan van de distributie de optimale schatting. Een kwadratische verliesfunctie correspondeert met het selecteren van de verwachtingswaarde van de parameter. Ten slotte wordt een verliesfuntie gegeven die niet symmetrisch is in de parameter en de schatting van die parameter. Er is inderdaad geen enkele reden om steeds een dergelijke symmetrie aan te nemen.

Ter illustratie worden de verschillende verliesfuncties toegepast op de a posteriori waarschijnlijkheid bij een Poissonmeting. Veronderstel dat de emissiesnelheid $\check{\lambda}$ van een radio-actieve bron onderzocht wordt. Om deze emissiesnelheid te bepalen wordt gedurende een eenheid-tijdsinterval het aantal geëmitteerde stralen $\check{d}$ gedetecteerd. Voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van de emissiesnelheid wordt een Jeffreysprior gekozen waarbij de emissiesnelheid mag variëren tussen 0 en oneindig [Jayne68]. De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie wordt dan gegeven door

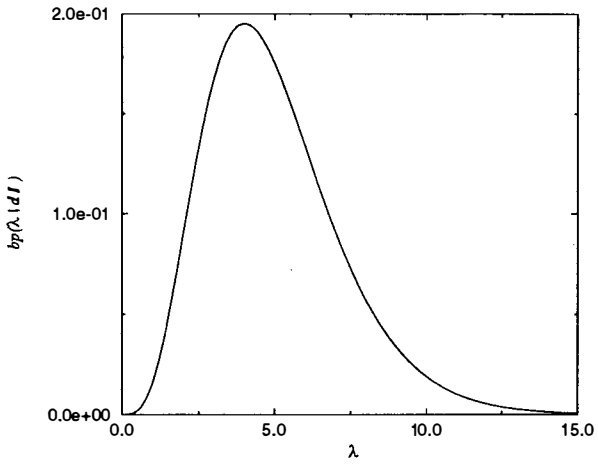
$$bp(\lambda \mid d\, I) = \frac{\lambda^{d-1} e^{-\lambda}}{\Gamma(d)}. \tag{3.47}$$

Deze a posteriori waarschijnlijkheid is voorgesteld in fig. 3.5 voor $d = 5$.

Deze functie is duidelijk niet symmetrisch. Bijgevolg zullen de vier verliesfuncties uit tabel 3.1 verschillende waarden opleveren. De waarden die corresponderen met de verschillende schattingen worden in tabel 3.2 weergegeven. Merk op dat de laatste verliesfunctie leidt tot een duidelijk hogere schatting dan de andere schattingen. Dit kan verklaard worden doordat de laatste verliesfunctie het onderschatten van een parameter sterker benadeeld dan het overschatten ervan.

Bedenk ook dat onderscheid tussen de drie eerste verliesfuncties zal verdwijnen wanneer de a posteriori waarschijnlijkheid symmetrisch is rond een enkelvoudig maximum. Een voorbeeld van een dergelijke distributiefunctie is een Gaussdistributie.

Ten laatste moet er nog opgemerkt worden dat het opstellen van een verliesfunctie niet eenvoudig is. Dikwijls wordt een kwadratische verliesfunctie vooropgesteld. Maar deze verliesfunctie wordt meestal enkel gekozen omdat de berekeningen in dit geval eenvoudig blijven. In werkelijkheid moet de verliesfunctie voor elk afzonderlijk probleem opnieuw bestudeerd worden. Deze functie kan immers van essentieel belang zijn voor de uiteindelijke beslissing.



Figuur 3.5 A posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van de emissiesnelheid wanneer 5 tellen gemeten worden in een eenheid-tijdsinterval.

3.10 Het maximum-entropieprincipe

Het maximum-entropieprincipe wordt gebruikt wanneer de kennistoestand bestaat uit de verwachtingswaarden van een functie van een parameter. Dit type van kennistoestand is natuurlijk enkel in theorie beschikbaar. Maar regelmatig is een goede benadering voor de verwachtingswaarde aanwezig. Bijvoorbeeld: van een vrachtwagen geladen met N kratten fruit kan eenvoudig de gemiddelde massa fruit per krat bepaald worden. Eén enkele meting volstaat om de verwachtingswaarde te bepalen. Uit deze meting kan dan met het maximum-entropieprincipe een verdeling van de massa over de verschillende kratten be-

Verliesfunctie	Optimale schatting	Optimale schatting met $d = 5$
$\delta(\alpha - \hat{\alpha})$	$d - 1$	4
$-\lvert\alpha - \hat{\alpha}\rvert$	–	4.67
$-(\alpha - \hat{\alpha})^2$	d	5
$-\alpha(\alpha - \hat{\alpha})^2$	$d + 1$	6

Tabel 3.2 Verschillende verliesfuncties met de corresponderende optimale schatting voor de emissiesnelheid. Voor de tweede verliesfunctie werd geen analytische uitdrukking gevonden voor de optimale schatting. Merk op hoe de optimale schatting verandert bij de verschillende verliesfuncties.

paald worden. Een ander voorbeeld: de gemiddelde energie van een gasmolecule kan bekend verondersteld worden. Dit laat dan toe om de energiedistributie te bepalen voor dat gas.

In de communicatietechniek wordt entropie ingevoerd als een maat voor de informatie-inhoud van een distributie. Dit werd gedaan door Shannon in [Shann49]. Dit principe werd door Jaynes overgenomen en toegepast op de statistische mechanica [Jayne57]. Later gebruikte Jaynes het maximum-entropieprincipe om a priori waarschijnlijkheden te bepalen [Jayne68]. Een uitstekende uiteenzetting is te vinden in [Tribu69]. Hier wordt het maximum-entropieprincipe uitgelegd en toegepast op het opstellen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies. Ook worden enkele eigenschappen van distributies verkregen met het maximum-entropieprincipe bestudeerd.

In eerste instantie wordt het maximum-entropieprincipe toegepast voor het vinden van waarschijnlijkheden voor een parameter $\check{x}$ die enkel de discrete waarden $x_1, \ldots, x_N$ kan aannemen. De entropie van een discrete distributie $bp(x_i \mid I), i = 1, \ldots, N$ is gegeven door

$$S = -\sum_{i=1}^{N} bp(\, x_i \mid I\,)\ \ln(\, bp(\, x_i \mid I)\,), \tag{3.48}$$

indien $bp(\, x_i \mid I\,) = 0$ is $bp(\, x_i \mid I\,) \ln(\, bp(\, x_i \mid I)\,) = 0$. Deze entropie geeft dan de informatie-inhoud van de waarschijnlijkheidsdistributie weer. Hoe groter de waarde van de entropie S hoe kleiner de informatie-inhoud van de distributie. Bij het opstellen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies is het belangrijk enkel de beschikbare kennis – informatie – in de distributie te incorporeren. Daarom wordt gezocht naar distributies met maximale entropie die aan de opgelegde voorwaarden voldoet. Het maximum-entropieprincipe selecteerd uit alle mogelijke distributies die aan de voorwaarden voldoen, deze distributie met minimale informatie-inhoud.

Indien de kennistoestand bestaat uit de verwachtingswaarden van de functies $g_k, k = 1, \ldots, M$ van de parameter $\check{x}$ kan het maximum-entropieprincipe gebruikt worden. De verwachtingswaarden $< g_k >$ zijn gegeven door

$$< g_k >= \sum_{i=1}^{N} g_k(x_i)\ bp(\, x_i \mid I),\ \ k = 1, \ldots, M. \tag{3.49}$$

De distributie $bp(\, x_i \mid I\,), i = 1, \ldots, N$; die aan deze voorwaarden voldoet en een maximale entropie heeft, wordt dan de waarschijnlijkheidsdistributie voor de parameter $\check{x}$. Deze a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt gevonden door het gebruik van Lagrange-multiplicatoren λ_k. Bij deze methode wordt de

De standaard gedaante	$bp(x_i\|I)$	$g(x_i)$
de uniforme distributie $1/N$	$1/N$	1
de exponentiële distributie $\lambda \exp(-\lambda x_i)$	$\lambda \exp(-\lambda x_i)$	$1, x_i$
de Gaussdistributie $\sqrt{2\pi\sigma^2}^{-1} \exp(-(x-\mu)^2/(2\sigma^2))$	$Z^{-1} \exp(-\lambda_1 x_i - \lambda_2 x_i^2)$	$1, x_i^2, x_i$
de gammadistributie $\Gamma(\alpha)^{-1} \beta^{-\alpha} x_i^{(\alpha-1)} \exp(-x_i/\beta)$	$Z^{-1} \exp(-\lambda_1 x_i)\ x_i^{\lambda_2}$	$1, x_i, \ln(x_i)$
de betadistributie $B(\alpha,\beta)^{-1} x_i^{(\alpha-1)}(1-x_i)^{(\beta-1)}$	$Z^{-1} x_i^{\lambda_1}(1-x_i)^{\lambda_2}$	$1, \ln(x_i), \ln(1-x_i)$

Tabel 3.3 De correspondentie tussen de verschillende verwachtingswaarden en de waarschijnlijkheidsdistributies verkregen met het maximum-entropieprincipe.

volgende uitdrukking gemaximaliseerd

$$-\sum_{i=1}^{N} bp(x_i \mid I)\ \ln(\, bp(x_i \mid I)\,) - \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \left[\sum_{i=1}^{N} g_k(x_i)\ bp(\, x_i \mid I\,) - < g_k >\right]. \tag{3.50}$$

Er kan aangetoond worden dat de maximum-entropie-oplossing uniek is [Tribu69].

Het maximum van de uitdrukking (3.50) is

$$bp(x_i \mid I) = \frac{1}{Z(\lambda_1, \ldots, \lambda_M)}\ \exp\left[\sum_{k=1}^{M} -\lambda_k g_k(x_i)\right], \tag{3.51}$$

met $Z(\lambda_1, \ldots, \lambda_M)$ de z.g. partitiefunctie:

$$Z(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = \sum_{i=1}^{N} \exp\left[-\sum_{k=1}^{M} \lambda_k g_k(x_i)\right]. \tag{3.52}$$

De waarden van de Lagrange multiplicatoren worden gevonden door te eisen dat de oplossingen (3.51) voldoen aan de beperkingen (3.49).

In tabel 3.3 wordt een overzicht gegeven van a priori waarschijnlijkheidsdistributies met de corresponderende verwachtingswaarden. Indien de verwachtingswaarden bestaan uit de momenten worden met het maximum-entropieprincipe de distributies van de exponentiële familie verkregen [Fergu67].

Het maximum-entropieprincipe laat dus toe om veel standaarddistributies af te leiden. Voor andere standaarddistributies bestaat er ook dikwijls een afleiding in een Bayesiaanse kontekst. Zo is de afleiding van de Poissondistributie niet gebaseerd op het maximum-entropieprincipe [Jayne90]. De afleiding

van de binomiale distributie en multinomiale distributie is te vinden in alle standaardwerken over waarschijnlijkheidsrekenen. Voor een behandeling van de Cauchydistributie zie [Tribu69], [Jayne76], [Gull88].

De (relatieve) entropie van een continue distributie is gedefinieerd door

$$S = -\int bp(x \mid I) \ln\left(\frac{bp(x \mid I)}{m(x)}\right) dx. \tag{3.53}$$

Hierbij zorgt de Lebesgue-maat $m(x)$ ervoor dat de entropie invariant blijft onder een coördinatentransformatie [Jayne68].

De uitdrukking (3.53) zonder minteken wordt ook wel de kruisentropie genoemd. Een andere benaming voor het maximum-entropieformalisme in het continue geval is het minimum cross-entropieformalisme.

Voor meer eigenschappen van het maximum-entropieprincipe zie [Jayne83a], [Tribu69].

3.11 Bespreking van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen

In de voorgaande paragrafen werd het principe van het BWR uitgebreid uiteengezet. In deze paragraaf worden enkele van de voornaamste misvattingen i.v.m. het BWR behandeld.

3.11.1 De relatie tussen de werkelijke wereld en waarschijnlijkheden

De waarschijnlijkheden uit het BWR zijn een kwantitatieve vertaling van een kennistoestand. Vermits de kennistoestand over de wereld nooit perfect is, zullen de waarschijnlijkheden ook niet noodzakelijk juist zijn. Stel dat de correctheid van waarschijnlijkheden nagegaan kan worden. Soms kan dit gebeuren door relatieve frequenties te meten in herhaalde experimenten. Deze relatieve frequenties moeten dan overeenstemmen met de berekende waarschijnlijkheden. In het BWR kan het voorkomen dat de berekende waarschijnlijkheden niet corresponderen met de gemeten frequenties. Een groot verschil tussen theorie en experiment duidt dan op een verkeerde kennistoestand. Een dergelijke discrepantie kan de aanzet zijn tot het corrigeren van de kennistoestand. De veronderstelling dat de berekende waarschijnlijkheden ook in werkelijkheid optreden wordt door Jaynes de "Mind Projection Fallacy" genoemd [Jayne90].

3.11.2 De invloed van a priori waarschijnlijkheden

Eén van de opvallende eigenschappen van het BWR is het gebruik van a priori waarschijnlijkheden. Bij parameterschatting wordt aan de parameter een

waarschijnlijkheidsdistributie toegekend alvorens ook maar één meting verricht werd. Daarbij verschilt de a priori waarschijnlijkheid ook nog naargelang van de parameter een schaal- of locatieparameter is.

Dikwijls wordt de invloed van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie op het resultaat van de berekeningen overschat. De vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie is echter slechts uitzonderlijk bepalend voor de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. De vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt belangrijk wanneer de informatie-inhoud van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie groot is t.o.v. de informatie-inhoud van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. Dit betekent dat de a priori waarschijnlijkheidsdistributie meer informatie bevat dan de direkte waarschijnlijkheidsdistributie. In dit geval dragen de metingen nauwelijks bij tot de uitbreiding van de kennistoestand. Bijgevolg zouden meer en/of betere metingen verricht moeten worden om de invloed van de vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie te verminderen [Lored90]. Doorgaans zal de invloed van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie echter klein zijn. Een vuistregel in het BWR is dat het verschil tussen een uniforme distributie en een Jeffreysdistributie enkel duidelijk wordt wanneer één meetpunt meer of minder belangrijk is [Jayne94].

3.11.3 De regel van Bayes en het maximum-entropieprincipe

Uit de voorgaande paragrafen is het verschil tussen de regel van Bayes en het maximum-entropieprincipe wel duidelijk. Om elke verwarring te vermijden wordt in deze paragraaf het verschil tussen beide methoden nog eens uitvoerig behandeld [Jayne88].

Uit par. 3.10 blijkt dat het maximum-entropieprincipe gebruikt wordt om een distributie te bepalen op een hypotheseruimte mits bepaalde verwachtingswaarden gekend zijn. De regel van Bayes daarentegen dient in zijn elementaire vorm om de waarschijnlijkheid van een hypothese A voorwaardelijk aan de hypothese B en de kennistoestand I te berekenen:

$$bp(A|B\,I) = \frac{bp(A|I)\;bp(B|A\,I)}{bp(B|I)}. \tag{3.54}$$

Bij de enkelvoudige toepassing van het theorema van Bayes is de uitkomst één getal. De toepassing van maximum-entropieprincipe levert steeds een distributie op. Er bestaan twee redenen voor de verwarring tussen beide technieken.

Ten eerste: beide technieken hebben gemeenschappelijk dat ze kunnen gebruikt worden voor het progressief aanpassen van de waarschijnlijkheden aan de kennistoestand. Voor de Bayesiaanse methode wordt de waarschijnlijkheid

van een hypothese $p(A|I)$ veranderd naar $p(A|B\,I)$: de waarschijnlijkheid dat de hypothese A optreedt in de veronderstelling dat een hypothese B waar is.

Met het maximum-entropieprincipe kan een distributiefunctie $p(\,x\mid X\,I\,)$ berekend worden. D.i. de waarschijnlijkheden van optreden van de verschillende waarden x gegeven de voorwaarde X en de informatie I. Indien de kennistoestand uitgebreid wordt met de hypothese Y, dan kan met het maximum entropieformalisme de distributie $p(\,x\mid X\,Y\,I\,)$ berekend worden. De distributie $p(\,x\mid X\,Y\,I\,)$ kan beschouwd worden als de aanpassing van $p(\,x\mid X\,I\,)$ aan de nieuwe hypothese Y.

Ten tweede: in bepaalde gevallen kan de ekwivalentie tussen de distributie verkregen met het maximum-entropieprincipe en de distributie verkregen bij het herhaaldelijk gebruik van de regel van Bayes, aangetoond worden. In [Willi80] wordt het geval bekeken waarin de hypotheseruimte bestaat uit een set van N mogelijkheden $(H_1, ..., H_N)$. Nieuwe informatie zal een subset van hypothesen uit de hypotheseruimte selecteren. Dergelijke uitbreidingen van de kennistoestand kunnen zowel met het BWR als met het maximum-entropieprincipe behandeld worden. Wegens de consistente opbouw van het BWR leveren ze hetzelfde resultaat op.

In [VanCa81] wordt een andere vorm van ekwivalentie aangetoond. Indien de regel van Bayes toegepast wordt op een oneindig herhaald experiment (waarbij een moment vast ligt) dan zal de resulterende conditionele distributie voor de toevalsgrootheid gelijk zijn aan de maximum-entropiedistributie gegeven dat moment.

Beide zienswijzen tonen aan dat wanneer het maximum-entropieprincipe en het BWR toepasbaar zijn op hetzelfde specifiek probleem, ze hetzelfde resultaat opleveren. Ze tonen dus de consistentie aan van beide methoden in die bijzondere gevallen.

Voor bijkomende relaties tussen maximum-entropiemethoden, Bayesiaanse methoden en klassieke statistische methoden wordt verwezen naar [Seth90].

3.12 Andere interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen

Het BWR is slechts één van de mogelijke interpretaties van het waarschijnlijkheidsrekenen. Hier wordt het BWR vergeleken met drie andere werkwijzen: het KWR, de Dempster-Shafertheorie en de vaag-verzamelingenleer. Het KWR is de meest verspreide theorie.

3.12.1 Het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen

De aanhangers van het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen (KWR) en het BWR zijn in de loop der jaren steeds verder uit elkaar gegroeid. Tussen de vertegenwoordigers van beide strekkingen ontstaat er niet zelden een twistgesprek. Vreemd genoeg gaan de discussies meestal terug op de filosofische grondslag van de beide methoden: wat zijn waarschijnlijkheden en aan welke entiteiten worden waarschijnlijkheden toegekend? Sommige discussies zijn ook enkel het gevolg van een spraakverwarring. Dezelfde symbolen en termen betekenen iets anders naargelang van de gebruikte theorie. Daarom worden hier eerst de grondslagen van het KWR geschetst [Papou65], [Pfeif65].

Het KWR is een theorie die toelaat om experimenten met onzekere uitkomst te interpreteren. Stel dat bij het herhaald uitvoeren van eenzelfde experiment verschillende uitkomsten ("outcomes") verkregen worden. Een toevalsgrootheid is een functie die de verschillende mogelijke verzamelingen van uitkomsten ("gebeurtenissen") afbeeldt op de reële as. Waarschijnlijkheden worden enkel geassocieerd met toevalsgrootheden. In het KWR corresponderen waarschijnlijkheden met de relatieve frequentie van het optreden van een uitkomst ("gebeurtenis") bij een oneindige onafhankelijke herhaling van het experiment.

Beschouw b.v. het gooien van een dobbelsteen. Er zijn zes verschillende uitkomsten ("outcomes") voor dit experiment. Elk van deze uitkomsten correspondeert met één van de zes zijden van de dobbelsteen. Een toevalsgrootheid is een functie die verzamelingen van uitkomsten afbeeldt op een reëel (of geheel) getal: de waarschijnlijkheid van die verzameling van uitkomsten. De waarschijnlijkheid van een verzameling van uitkomsten is gelijk aan de relatieve frequentie van het optreden van de corresponderende zijde(n) bij het oneindig herhalen van het experiment.

Door de sterke wiskundige fundering van deze theorie is het vertrouwen erin groot. De eerste kritiek van de aanhangers van het KWR op het BWR is dat de Bayesiaanse waarschijnlijkheden niet enkel toegekend worden aan mogelijke uitkomsten van experimenten. Inderdaad, de hypothesen in het BWR horen niet noodzakelijk bij herhaalde experimenten. In dit geval wordt dan ook beweerd dat de stevige wiskundige ondergrond verdwijnt.

Daarbij wordt dan meestal voorbijgegaan aan de afleidingen uit het begin van dit hoofdstuk en wordt over het hoofd gezien dat de correspondentie met relatieve frequenties helemaal niet de bedoeling in het BWR. De betekenis van het woord "waarschijnlijkheid" verschilt dan ook grondig in beide interpretaties. Om de Babylonische spraakverwarring te vermijden worden hier de waarschijnlijkheden met een ander symbool aangeduid: "fp" voor waarschijnlijkheden in het KWR en "bp" voor waarschijnlijkheden in het BWR.

Het KWR lijkt wiskundig beter gefundeerd te zijn dan het BWR. De afleiding van Cox voor het BWR is immers reeds onderhevig geweest aan kritiek

[Garre93]. Ook is de definitie van waarschijnlijkheden als kwantificatie van een kennistoestand niet evident. De identificatie van waarschijnlijkheden met relatieve frequenties schijnt ondubbelzinnig. Maar wat betekent in het KWR: het herhaald uitvoeren van *identieke* experimenten? Waar staat identiek voor? Indien eenzelfde dobbelsteen onder exact dezelfde omstandigheden geworpen wordt, zal steeds dezelfde zijde bovenaan liggen. Maar misschien is het praktisch onmogelijk om het experiment in precies dezelfde omstandigheden te herhalen. Dan is er natuurlijk geen sprake meer van een herhaling van identieke experimenten. De hamvraag wordt dan: "Waarin verschillen identieke experimenten?"

Bovendien worden experimenten nooit oneindig herhaald. Hierdoor zijn klassieke waarschijnlijkheden nooit echt gekend. Natuurlijk kan een experiment voldoende herhaald worden totdat een goede benadering voor de waarschijnlijkheden gevonden wordt. Maar wordt dit in praktijk gedaan? Bij het gooien van een dobbelsteen wordt er steeds verondersteld dat de relatieve frequentie van het optreden van de verschillende zijden 1/6 is. Dit wordt gedaan vooraleer ook maar één keer met de dobbelsteen gegooid werd. Gaat het hier dan niet eerder om een vertaling van een kennistoestand? Wordt aan de dobbelsteen geen symmetrieëigenschappen toegekend? Dit wordt ook nog bevestigd door experimenten met dobbelstenen. In deze experimenten wordt de relatieve frequentie van de verschillende uitkomsten van het gooien van een dobbelsteen nagegaan. Ondanks de voorzorgen om identieke experimenten te produceren, trad de relatieve frequentie 1/6 niet op. Dit is niet verwonderlijk omdat de veronderstelling dat een dobbelsteen symmetrieëigenschappen heeft al verkeerd is. Het aantal ogen (en de daarbij horende uithollingen) op de verschillende zijden verbreekt de symmetrie [Jayne83c],[Jeffr39], [Fouge89].

Het verschil in definitie van het begrip waarschijnlijkheid beïnvloedt ook de verdere analyse van de gegevens. Ter illustratie wordt hier het concept van betrouwbaarheidsinterval behandeld. Een typisch voorbeeld betreft het schatten van de locatieparameter van een Gaussdistributie. Veronderstel dat N onafhankelijke meetpunten $\{x_1, \ldots, x_N\}$ van deze Gaussdistributie opgemeten werden. Een schatting $\hat{\mu}$ van de locatieparameter $\check{\mu}$ wordt dan gegeven door

$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i. \tag{3.55}$$

Een betrouwbaarheidsinterval laat toe de "betrouwbaarheid" van een schatting te kwantificeren. In het KWR wordt een betrouwbaarheidsinterval berekend door de waarschijnlijkheidsdistributie voor de schatting te berekenen: $fp(\hat{\mu})$. Op de as van de schatting wordt een interval $]\mu + c, \mu + d[$ gedefinieerd waarvoor geldt:

$$\gamma = fp(\mu + c < \hat{\mu} < \mu + d). \tag{3.56}$$

De waarde van γ stelt dus de relatieve frequentie voor van de gebeurtenis dat de schatting $\hat{\mu}$ in het interval $]\mu + c, \mu + d[$ ligt bij een oneindig herhalen van hetzelfde experiment. Typische waarden voor γ zijn 0.68 en 0.95. Deze waarden komen overeen met de 1 σ en 2 σ intervallen bij een Gaussdistributie. Veronderstel dat het symmetrisch interval rond μ gezocht wordt waarvoor de $\gamma = 68$. Dit interval blijkt $]\mu - \sigma/\sqrt{N}, \mu + \sigma/\sqrt{N}[$ te zijn. Hierbij is σ de spreiding van de Gaussdistributie voor één meting. De breedte van dit interval vermindert met het aantal metingen volgens een $1/\sqrt{N}$ wet. De schatting zal bijgevolg beter de werkelijke waarde μ benaderen bij een toenemend aantal metingen.

De Bayesiaanse interpretatie is totaal verschillend. Eerst wordt de a posteriori waarschijnlijkheid van de locatieparameter berekend

$$bp(\mu \mid \{x_1, \ldots, x_N\}\, I). \tag{3.57}$$

Het ekwivalente van een betrouwbaarheidsinterval wordt gegeven door

$$\gamma_B = bp(\hat{\mu} + c < \mu < \hat{\mu} + d \mid \{x_1, \ldots, x_N\}\ I\ ). \tag{3.58}$$

Het verschil tussen vergelijkingen (3.56) en (3.58) is vooral duidelijk wanneer gekeken wordt naar de veranderlijke. In de Bayesiaanse interpretatie varieert de mogelijke waarde voor de locatieparameter. In de klassieke interpretatie verandert de schatting voor de locatieparameter $\hat{\mu}$. In vergelijking (3.58) wordt berekend hoe waarschijnlijk het is dat de locatieparameter in het interval $]\hat{\mu} + c, \hat{\mu} + d[$ ligt. Het symmetrische interval rond $\hat{\mu}$ waar 68% van deze waarschijnlijkheidsdistributie gesitueerd is, blijkt het interval $]\hat{\mu} - \sigma/\sqrt{N}, \hat{\mu} + \sigma/\sqrt{N}[$ te zijn. Dit interval wordt eveneens kleiner volgens een $1/\sqrt{N}$ wet.

Bijgevolg lijkt de overeenkomst tussen het KWR en het BWR perfect. Er schijnt enkel een interpretatieverschil te bestaan. Maar deze overeenkomst is louter toeval [Lored90]. Dit toeval berust op speciale eigenschappen van de Gaussdistributie. Merk bijvoorbeeld op dat de Gaussdistributie symmetrisch is in de parameters $\check{x}$ en $\check{\mu}$. Bijgevolg is het ook niet verwonderlijk deze symmetrie terug te vinden in de betrouwbaarheidsintervallen. Voor waarschijnlijkheidsdistributies die geen dergelijke symmetrie vertonen zal de overeenkomst verdwijnen [Jayne76].

Merk op dat het belang van de geobserveerde meetpunten sterk verschilt in beide methoden. In het betrouwbaarheidsinterval van het KWR zijn de echte metingen slechts één van de mogelijke realisaties van het experiment. De metingen die nooit gemeten werden, maar toch voorkomen bij het in gedachten herhalen van identieke experimenten, kunnen belangrijker worden voor de bepaling van het betrouwbaarheidsinterval dan de werkelijk gemeten waarden. Dit kan leiden tot flagrant verkeerde intervallen [Jayne76]. In het BWR treden enkel de werkelijke metingen op. Dit is erg geruststellend omdat de enige informatie die beschikbaar is over de werkelijke wereld deze metingen zijn. Andere

voorbeelden van vergelijking tussen het BWR en het KWR kunnen gevonden worden in [Jeffe92].

Bij het berekenen van de betrouwbaarheidsintervallen heeft het BWR het voordeel eenvoudiger te zijn. Bovendien kan het BWR ook rekening houden met lastparameters.

3.12.2 De Dempster-Shafertheorie

De Dempster-Shafertheorie vormt een alternatief voor het KWR en het BWR. Hier volgt een summiere uiteenzetting van de theorie. Voor een uitgebreidere behandeling wordt verwezen naar [Voorb90], [DeLae92]. Enkele van de gebruikelijke kritieken op de Dempster-Shafertheorie worden hier herhaald. Bovendien wordt d.m.v. een voorbeeld aangetoond dat het BWR gelijkaardige problemen kan oplossen.

In de Dempster-Shafertheorie wordt eerst een volledige verzameling elkaar uitsluitende hypothesen gedefiniëerd. Noem deze verzameling de onderscheidsverzameling V. Aan alle mogelijke deelverzamelingen van deze onderscheidsverzameling wordt een waarschijnlijkheidsmassa w toegekend. Deze waarschijnlijkheidsmassa associeert met elke deelverzameling v van V een waarde tussen 0 en 1. De waarschijnlijkheidsmassa voldoet aan

$$w(\emptyset) = 0 \text{ en } \sum_{v \subset V} w(v) = 1. \tag{3.59}$$

Naast de waarschijnlijksmassa worden nog twee functies gedefinieerd op de deelverzamelingen van V: de geloofsfunctie Bel en de plausibiliteitsfunctie Pl:

$$Bel(v) = \sum_{v_i \subseteq v} w(v_i) \tag{3.60}$$

$$Pl(v) = \sum_{v_i \cap v \neq \emptyset} w(v_i) \tag{3.61}$$

De geloofsfunctie Bel telt de waarschijnlijkheidsmassa's van alle deelverzamelingen van v op. De plausibiliteitsfunctie sommeert de waarschijnlijkheidsmassa's van alle verzamelingen die een niet-ledige doorsnede met v hebben. Deze drie functies bevatten dezelfde informatie: specificatie van de waarden van één van deze functie legt de functiewaarden van de andere twee functies vast. Het geloof in een verzameling v wordt weergegeven door een geloofsinterval $[Bel[v], Pl[v]]$.

Er bestaan belangrijke verschillen tussen de waarschijnlijkheidsmassa en de waarschijnlijkheden uit het KWR en het BWR. Zo moeten de waarschijnlijkheidsmassa's niet voldoen aan de somregel. De waarschijnlijkheidsmassa

$w(v_1 \cup v_2)$ is dus niet noodzakelijk gelijk aan $w(v_1) + w(v_2) - w(v_1 \cap v_2)$. Bovendien is er een eigen versie van de produktregel: de combinatieregel van Dempster.

$$w \oplus w'(v) = \frac{\sum_{v_i \cap v_j = v} w(v_i)\ w'(v_j)}{\sum_{v_i \cap v_j \neq \emptyset} w(v_i)\ w'(v_j)}. \tag{3.62}$$

met

$$\emptyset \neq v \subseteq V \tag{3.63}$$

In de combinatieregel van Dempster wordt de waarschijnlijkheidsmassa van een verzameling v gelijk gesteld aan de som van het produkt van de waarschijnlijkheidsmassa's van alle verzamelingen waarvan de doorsnede aanleiding geeft tot de verzameling v. De term in de noemer van vergelijking (3.62) is een normalisatieconstante. Merk op dat de regel van Dempster duidelijk afwijkt van de vertrouwde produktregel.

Maar de som- en produktregel zijn een gevolg van de drie desiderata. Een afwijking van deze basisregels kan bijgevolg leiden tot een inbreuk op de desiderata. Vermits de basisregels van de Dempster-Shafertheorie zondigen tegen de normale produkt- en somregel, is het niet verwonderlijk dat er eenvoudig absurde resultaten gegenereerd kunnen worden. De produktregel van Dempster verschilt van de normale produktregel doordat er geen conditionele termen optreden. Inconsistenties zullen dan ook optreden wanneer conditionele termen vereist zijn. Veronderstel b.v. dat tweemaal dezelfde conditionele hypothese D gebruikt wordt. De regel van Bayes levert dan onmiddellijk op dat

$$bp(A \mid D\,D\,I) = \frac{bp(A\,D\,D \mid I)}{bp(D\,D \mid I)} = \frac{bp(D \mid I)\ bp(A\,D \mid D\,I)}{bp(D \mid I)\ bp(D \mid D\,I)} = bp(A \mid D\,I). \tag{3.64}$$

De conditionele waarschijnlijkheid blijft onveranderd door een hypothese twee maal te beschouwen. Bij de toepassing van de regel van Dempster verandert de waarschijnlijkheidsmassa wel indien tweemaal dezelfde hypothese gebruikt wordt. Het wordt dan ook aangeraden om de waarschijnlijkheidsmassa's enkel te combineren voor onafhankelijke waarschijnlijkheden.

Bovendien kunnen de problemen die met de Dempster-Shafertheorie aangepakt worden eveneens in het BWR opgelost worden. Beschouw ter illustratie het voorbeeld van het determineren van planten met een dichotomische tabel [DeLae92]. Een dichotomische tabel bestaat uit een reeks vragen omtrent de eigenschappen van een plant [Heima83]. Meestal is een vraag tweeledig. Het eerste deel beschrijft dan een eerste set van mogelijke eigenschappen van de plant en de tweede vraag een andere set eigenschappen. Door een van de twee mogelijke oplossingen te kiezen wordt de (amateur) bioloog verwezen naar een bijkomende vraag. Dit proces wordt herhaald totdat de plant gedetermineerd wordt bij het beantwoorden van de laatste vraag. Hier wordt het voorbeeld beschouwd van een sleutel die toelaat om een plant te determineren uit de vijf

Eigenschap	Test	Massa	Set van plantesoorten
stengelhoogte	$\geq$ 120 cm	0.9	{A, B}
	< 120cm	1	{A, C, D, E}
bloeitijd	voorjaar	0.9	{A,B,D}
	zomer	0.8	{C,E}
bloemkleur	groen	0.95	{A,C,E}
	wit	0.95	{B,D}

Figuur 3.6 Dichotomische tabel voor het determineren van een plant uit de soorten {A,B,C,D,E}.

Set van plantesoorten	Geloofsinterval
{C, E}	[0.29, 0.35]
{A}	[0.6, 0,71]
{A, B}	[0.65, 0.71]
{A,C,E}	[0.97, 1]

Figuur 3.7 Geloofsintervallen voor de verschillende sets van plantesoorten.

mogelijke plantesoorten: A, B, C, D, E. De eigenschappen voor de verschillende plantesoorten zijn weergegeven in tabel 3.6.

Hierbij slaan de getallen in de voorlaatste kolom op de waarschijnlijkheidsmassa die toegekend wordt aan de corresponderende deelverzamelingen van de laatste kolom. Veronderstel dat een plant de volgende eigenschappen heeft: de lengte van de stengel is 150 cm, de plant bloeit in de zomer, de bloemkleur is groen. In de Dempster-Shafertheorie worden dan de geloofsintervallen uit tabel 3.7 toegekend [DeLae92].

De getallen uit deze tabel duiden aan dat de plant "waarschijnlijk" tot de verzameling $\{A, C, E\}$ behoort.

Bekijk nu de Bayesiaanse behandeling. De hypotheseruimte bestaat uit de vijf plantesoorten. Bijgevolg zal de initiële waarschijnlijkheid voor elke plant 1/5 zijn. Door het bekijken van de verschillende eigenschappen worden de waarschijnlijkheden voor de verschillende plantesoorten gecorrigeerd. Dit gebeurt met de regel van Bayes:

$$bp(P \mid K\, I) \propto bp(P \mid I)\; bp(K \mid P\, I), \tag{3.65}$$

waarbij P staat voor een plantesoort, I voor de reeds behandelde eigenschappen van de plant en K voor de eigenschap van de plant die nu beschouwd wordt. Door na deze operatie de a posteriori waarschijnlijkheid te normaliseren zijn de waarschijnlijkheden voor de verschillende plantesoorten vastgelegd. Het enige probleem bij het toepassen van regel (3.65) is dat de waarschijnlijkheden van de vorm $bp(K \mid P\, I)$ nog onbekend zijn. Hier worden deze waar-

schijnlijkheden afgeleid uit de waarschijnlijkheidsmassa's van tabel 3.6. Deze afleiding is intuïtief omdat de overeenkomst tussen waarschijnlijkheidsmassa's en Bayesiaanse waarschijnlijkheden niet duidelijk is. Wat betekent b.v. dat de waarschijnlijkheidsmassa 0.9 is voor de deelverzameling $\{A, B\}$ wanneer de stengellengte groter of gelijk is aan 120 cm. Hier wordt verondersteld dat deze waarschijnlijkheidsmassa overeenkomt met de waarschijnlijkheden (mits enkele afrondingen):

$$bp(A \mid K_S\, I) = bp(B \mid K_S\, I) = 0.425,$$
$$bp(C \mid K_S\, I) = bp(D \mid K_S\, I) = bp(E \mid K_S\, I) = 0.05, \tag{3.66}$$

waarbij K_S er rekening mee houdt dat de stengel langer is dan 120cm. Merk hierbij op dat de waarschijnlijkheid van een plantesoort die voldoet aan de eigenschap K_S ongeveer negen keer zo groot is als voor een plantesoort die niet aan deze eigenschap voldoet.

Na het toepassen van het BWR voor alle beschikbare eigenschappen worden de waarschijnlijkheden voor de plantesoorten:

$$bp(A \mid I') = 0.44,\ bp(B \mid I') = 0.03,\ bp(C \mid I') = 0.26,$$
$$bp(D \mid I') = 0.01,\ bp(E \mid I') = 0.26, \tag{3.67}$$

hierin bevat I' al de gecontroleerde eigenschappen van de plant. Hieruit blijkt dat het BWR de plant ook klasseert in de set plantesoorten $\{A, C, E\}$. Deze berekening bevestigt dus het resultaat van de Dempster-Shafertheorie.

Beschouw nu een uitbreiding van de dichotomische tabellen: bij de beoordeling van de eigenschap van een plant kan de bioloog ook specifiëren hoe zeker hij is omtrent die bepaalde eigenschap. De eigenschap dat de plant in het voorjaar bloeit kan b.v. in twijfel getrokken worden. Het is misschien een abnormaal warm voorjaar. Hier komt een nieuwe probabilistische relatie op de proppen: $bp(K \mid Z_K\, I)$. Deze relatie staat voor de waarschijnlijkheid dat eigenschap K waar is, wanneer de onderzoeker veronderstelt dat die eigenschap waar is. De hypothese Z_K staat voor: "de onderzoeker zegt dat de plant eigenschap K bezit". Het aanpassingsmechanisme moet dan aangepast worden. De relatie van Bayes (3.65) wordt dan

$$bp(P \mid Z_K\, I) = bp(P\, K \mid Z_K\, I) + bp(P\, \bar{K} \mid Z_K\, I), \tag{3.68}$$

wat dan gelijk is aan

$$bp(P \mid Z_K\, I) = bp(K \mid Z_K\, I)\ bp(P \mid K\, I) + bp(\bar{K} \mid Z_K\, I)\ bp(P \mid \bar{K}\, I). \tag{3.69}$$

De waarschijnlijkheid van een bepaalde plantesoort bij het veronderstellen van een bepaalde eigenschap is dus gelijk aan een gewogen som van de waarschijnlijkheden dat de plantesoort correspondeert met de beschouwde eigenschap en dat de plantesoort correspondeert met de negatie van die eigenschap.

De gewichten $bp(K \mid Z_K\, I), bp(\bar{K} \mid Z_K\, I)$ corresponderen met het vertrouwen van de bioloog in de specificatie van een eigenschap. Veronderstel dat de bioloog niet kan bepalen of de plant een voorjaarsbloeier is. De bioloog stelt de kans dat de plant een voorjaarsbloeier dus gelijk aan 1/2. Intuïtief is het dan duidelijk dat deze eigenschap "zomerbloeier of voorjaarsbloeier" niet meer relevant is voor de determinatie. Bij het berekenen van de correctiefactoren van de vorm (3.69) wordt dan ook steeds bij benadering dezelfde waarde gevonden voor de verschillende plantesoorten. Na een volledige herhaling van de berekening zijn de waarschijnlijkheden van de plantesoorten bij benadering gelijk aan

$$bp(A \mid I'') = 0.77,\ bp(B \mid I'') = 0.02,\ bp(C \mid I'') = 0.1,$$
$$bp(D \mid I'') = 0.01,\ bp(E \mid I'') = 0.1, \tag{3.70}$$

waarbij I'' de informatie aangeeft dat alle eigenschappen gebruikt werden en dat rekening gehouden werd met de onzekerheid i.v.m. de eigenschap "zomerbloeier of voorjaarsbloeier".

Het is nu duidelijk dat plantesoort A de beste determinatiekandidaat is. Bekijk de oorspronkelijke dichotomische tabel opnieuw en bemerk dat plantesoort A inderdaad de enige plant is die aan de twee gestelde eigenschappen voldoet: de stengel is 150 cm lang en de bloemkleur is groen.

In deze paragraaf werd het duidelijk dat problemen die behandeld worden met de Dempster-Shafertheorie ook met het BWR te benaderen zijn. Het BWR vermijdt bovendien de consistentieproblemen die optreden als gevolg van de regel van Dempster. Daarenboven zijn de uiteindelijke waarschijnlijkheden van het BWR eenvoudig te interpreteren.

3.12.3 De vaag-verzamelingenleer

De vaag-verzamelingenleer biedt nog een alternatieve behandeling van onzekerheden aan [Kande78], [Voorb90]. Hier wordt voor de volledigheid heel kort ingegaan op deze theorie.

In de vaag-verzamelingenleer hebben onzekerheden betrekking op de hypothesen. Zo is de stelling "een patiënt heeft hoge koorts" aanvaardbaar in de vaag-verzamelingenleer. Deze stelling is geen hypothese in het BWR. Het begrip "hoge koorts" is immers niet volledig gedefinieerd. In de vaag-verzamelingenleer wordt de onbepaaldheid van het begrip "hoge koorts" opgevangen door het invoeren van vaag-verzamelingen. Veronderstel dat een verzameling X bestaat uit een aantal objecten x. Aan elk object (patiënt) van de verzameling wordt een lidmaatschapsfunctie LM toegekend:

$$LM : \begin{cases} X \rightarrow & [0,1] \\ x \rightarrow & LM(x),\ x \in X \end{cases} \tag{3.71}$$

Deze lidmaatschapsfunctie bepaalt in welke mate een object aan een bepaalde voorwaarde voldoet. De lidmaatschapsfunctie bepaalt b.v. in welke mate een patiënt hoge koorts heeft. De lidmaatschapsfunctie LM beeldt elk object van de verzameling af op het interval $[0, 1]$. Een afbeelding van een object op één betekent dat het object zeker aan de eigenschap voldoet en de afbeelding op nul sluit het bezitten van die eigenschap uit. De objecten die door de lidmaatschapsfunctie een waarde toegewezen krijgen tussen 0 en 1 bevinden zich in de schemerzone. Deze objecten voldoen in een bepaalde mate aan de eigenschap. M.a.w. patiënten hebben een graad van "hoge koorts". Diverse gedaanten kunnen voor de lidmaatschapsfunctie gebruikt worden: een lineaire functie, een kwadratisch functie, ... Hoe deze lidmaatschapsfunctie gekozen moet worden is niet duidelijk. De exacte vorm speelt evenwel een ondergeschikte rol. Het belangrijkste aspect van de lidmaatschapsfunctie is de ordening die erdoor geïnduceerd wordt.

In de vaag-verzamelingenleer bestaan er ook samenstellingsregels. Beschouw b.v. de "intersectie"-operatie. Deze operatie is equivalent met de logische "en". Stel gegeven de twee lidmaatschapsfunctie $LM_1(x)$ en $LM_2(x)$. Met beide lidmaatschapsfuncties correspondeert een eigenschap. Beiden werken in op elementen x van de verzameling X. Wat is de samengestelde lidmaatschapsfunctie $LM_1 \cap LM_2(x)$ die uitdrukt in welke mate een element van de verzameling voldoet aan beide eigenschappen? Eén van de mogelijke regels uit de vaag-verzamelingsleer hiervoor is

$$LM_1 \cap LM_2(x) = \min(LM_1(x), LM_2(x)). \tag{3.72}$$

Deze regel wijkt op twee punten af van de productregel uit het BWR. Ten eerste treedt er geen product op. Maar een recentere manier om de bovenstaande samenstellingsregel te verkrijgen in het vaag-verzamelingenleer, bestaat erin het product $LM_1(x)\ LM_2(x)$ te nemen. Een tweede (en belangrijker) verschil is het ontbreken van de conditionele waarschijnlijkheid. Bijgevolg kan deze regel alleen toegepast worden indien de eigenschappen onafhankelijk zijn van elkaar. Het is dan ook eenvoudig om voorbeelden te bedenken waarin de samenstellingsregel uit (3.72) faalt.

Het is het mogelijk om de lidmaatschapsfunctie te vervangen door Bayesiaanse waarschijnlijkheden. Na deze omzetting kan de verdere behandeling van het probleem gebeuren in het BWR [Chees86].

3.13 Besluit

In dit hoofdstuk werden de voornaamste kenmerken van het BWR overlopen. Eerst werden de basisregels afgeleid uit een beperkt aantal desiderata. Deze desiderata eisen consistentie en een overeenkomst met de humane redeneringen.

De basisregels blijken de gedaante van de klassieke som- en produktregel te hebben. De basisprocedure van het BWR bestaat uit het bestuderen van de a posteriori waarschijnlijkheid van alle onbekende hypothesen. Enkele toepassingen werden gegeven in de paragrafen over parameterschatting en modeltoetsing. Een uitbreiding voor het BWR vormt de besliskunde waardoor een optimale schatting voor een parameter gevonden kan worden. Om de optimale schatting te vinden moet naast de a posteriori waarschijnlijkheden tevens een verliesfunctie gedefinieerd worden. Tenslotte worden andere interpretaties van het omgaan met onzekerheden bestudeerd. Het blijkt dat het BWR een ruimere aanpak toelaat dan het KWR. Tevens kan het BWR ook toegepast worden op problemen die met de Dempster-Shafer of met de vaag-verzamelingenleer behandeld worden. Het voordeel van de Bayesiaanse interpretatie is dat de overeenkomst met de humane redeneringen (in theorie) gewaarborgd is.

Hoofdstuk 4

Het ML-EM-algoritme

4.1 Inleiding

Het ML-EM-algoritme ("Maximum Likelihood-Expectation Maximization algorithm") is het populairste en best bestudeerde statistische reconstructie-algoritme in PET. Dit algoritme tracht het beeld te vinden dat de directe waarschijnlijkheid van de metingen maximaliseert. Er wordt geen enkele veronderstelling gemaakt over de a priori waarschijnlijkheidsdistributie: alle beelden zijn bij afwezigheid van metingen even waarschijnlijk.

Als sterke punten van het ML-EM-algoritme gelden de eenvoud en de theoretische fundering. Het ML-EM-algoritme is immers duidelijk veel eenvoudiger dan b.v. een toegevoegde-gradiëntenalgoritme of een gesimuleerd-uitgloeien. Bovendien bestaat er een bewijs van de convergentie van het algoritme (zie volgende paragraaf). Een aantal belangrijke nadelen, zoals traagheid en ruisgevoeligheid, bemoeilijken echter het dagelijks gebruik van het ML-EM-algoritme. In dit hoofdstuk worden oplossingen onderzocht voor enkele van deze nadelen. In het bijzonder worden enkele versnellingstechnieken en een stopcriterium bestudeerd. Bovendien wordt een verbeterde behandeling van de attenuatiecorrectie voorgesteld.

4.2 Het principe van het ML-EM-algoritme

4.2.1 De afleiding van het ML-EM-algoritme

Het ML-EM-algoritme werd reeds afgeleid in 1976 door Rockmore [Rockm76], [Rockm77]. Deze afleiding is louter theoretisch en een praktische implementatie werd later voorgesteld door [Shepp82], [Shepp84] en [Lange84],[Lange87]. Deze laatste afleidingen gaan terug op een overzichtsartikel van Dempster [Demps77].

In dit hoofdstuk bevat slechts een summiere afleiding van het algoritme gegeven. De notatie uit het artikel van Lange wordt tijdelijk overgenomen.

De afleiding van het ML-EM-algoritme is gebaseerd op het klassieke waarschijnlijkheidsrekenen en maakt gebruik van twee typen toevalsgrootheden:

1. de toevalsgrootheden Y_i voor de metingen van het detectorpaar i;

2. de toevalsgrootheden X_{ij} voor het aantal fotonen uitgezonden in pixel j dat gedetecteerd wordt door het detectorpaar i.

De waarschijnlijkheidsdistributie van beide toevalsgrootheden is een Poissondistributie. Veronderstel dat λ_j de intensiteit (of tracerconcentratie) in pixel j voorstelt. De verwachtingswaarde voor het aantal fotonen uitgezonden op pixellocatie j dat gedetecteerd wordt door het detectorpaar i is dan gelijk aan

$$< X_{ij} >= c_{ij}\lambda_j . \tag{4.1}$$

De coëfficiënt c_{ij} houdt rekening met de meettijd, de attenuatiecorrectie en de scannerconfiguratie. Het totaal aantal fotonen dat geobserveerd wordt in een bepaald detectorpaar is gelijk aan de som van de afzonderlijke pixelintensiteiten die een bijdrage leveren:

$$Y_i = \sum_{j=1}^{N} X_{ij} . \tag{4.2}$$

In het kader van de Expectation-Maximization-procedure (EM-procedure) vormt X_{ij} de complete set toevalsgrootheden. Deze toevalsgrootheden kunnen niet geobserveerd worden, de geobserveerde toevalsgrootheden zijn Y_i.

In het vervolg zal enkele malen een toevalsgrootheid zonder indexen gebruikt worden. Een dergelijke toevalsgrootheid staat voor de volledige set van de corresponderende toevalsgrootheden met indexen. Zo staat de toevalsgrootheid X voor alle mogelijke X_{ij}: $X = \{X_{ij}, i = 1, \ldots, M; j = 1, \ldots, N\}$

De EM-procedure verloopt in twee stappen:

1. de E-stap ("Expectation step"): berekent de conditionele verwachtingswaarde $< \ln(fp(X;\lambda|Y;\lambda^{(n)})) >$. Dit is de verwachtingswaarde van het logaritme van de gezamenlijke waarschijnlijkheidsdensiteit van de toevalsgrootheiden X_{ij}. Deze verwachtingswaarde wordt berekend met de conditionele waarschijnlijkheidsdensiteit $fp(X|Y;\lambda^{(n)})$. D.i. de waarschijnlijkheidsdensiteit van X wanneer de toevalsgrootheden Y en de schatting van de intensiteiten $\lambda^{(n)}$ gegeven zijn;

2. de M-stap ("Maximization step"): de nieuwe schattingen $\lambda^{(n+1)}$ voor de tracerconcentraties zijn dan gelijk aan de intensiteiten die de conditionele verwachtingswaarde maximaliseren.

Deze procedure leidt tot het iteratief schema

$$\lambda_j^{(n+1)} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{M} c_{ij}} \sum_{i=1}^{M} c_{ij} \left(\frac{Y_i}{\sum_{k=1}^{N} c_{ik} \lambda_k^{(n)}} \right) \lambda_j^{(n)}. \tag{4.3}$$

Bemerk dat deze uitdrukking niet lineair is in de intensiteiten $\lambda^{(n)}$.

De bedoeling van dit algoritme is de maximalisatie van de directe waarschijnlijkheid $fp(X;\lambda)$. Van deze directe waarschijnlijkheid wordt aangetoond dat het een strikt opwaarts concave functie is. Bovendien wordt bewezen dat het ML-EM-algoritme de directe waarschijnlijkheid (de likelihood) bij elke iteratie laat toenemen en het ML-EM-algoritme bijgevolg convergeert naar de maximum-likelihood-oplossing [Lange87], [Shepp82].

Alvorens over te gaan naar de volgende paragraaf wordt het ML-EM-algoritme (4.3) herschreven in de standaardnotatie van deze thesis

$$f_j^{(n+1)} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{M} \Psi_{ij}} \sum_{i=1}^{M} \Psi_{ij} \left(\frac{d_i}{\sum_{k=1}^{N} \Psi_{ik} f_k^{(n)}} \right) f_j^{(n)}. \tag{4.4}$$

De intensiteit voor de pixel j tijdens de n-de iteratie wordt voorgesteld door $f_j^{(n)}$. In matrixnotatie wordt (4.4)

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Psi^T 1_M} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \mathbf{f}^{(n)}. \tag{4.5}$$

Hierbij is 1_M een M-dimensionale kolommatrix waarvan elk element één is. De delingen en de vermenigvuldigingen uit (4.5) zijn elementsgewijze operaties.

In de volgende paragraaf bevindt zich de uitleg over de werking van het ML-EM-algoritme. Tevens wordt een kritiek geuit op het convergentiebewijs uit [Lange87] en [Shepp82]. De belangrijkste tekortkomingen van het ML-EM-algoritme komen eveneens aan bod. De overblijvende paragrafen van dit hoofdstuk bevatten verschillende optimalisatiemethoden voor het ML-EM-algoritme.

4.2.2 Bespreking van het ML-EM-algoritme en zijn afleiding

Het ML-EM-algoritme is het populairste recontructie-algoritme in PET. De voornaamste voordelen van dit algoritme zijn:

1. positieve pixelintensiteiten: indien de initiële schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(0)}$ enkel positieve intensiteiten bevat, zullen alle volgende schattingen deze positiviteit van de pixelintensiteiten bezitten;

2. bewijs van convergentie: Shepp [Shepp82] en Lange [Lange87] bewijzen dat de directe waarschijnlijkheid van de metingen gegeven de schatting toeneemt bij elke iteratiestap. De oplossing convergeert dus naar een "Maximum-Likelihood"-oplossing;

3. eenvoudig algoritme: de implementatie van het ML-EM-algoritme is i.v.m. andere maximalisatie-algoritmen eenvoudig.

De werking van het ML-EM-algoritme (4.4) kan het best bestudeerd worden door de opeenvolging van bewerkingen van een praktische implementatie te volgen. Beschouw eerst de centrale term uit (4.4):

$$\frac{d_i}{\sum_{k=1}^{N} \Psi_{ik} f_k^{(n)}}. \tag{4.6}$$

In de noemer wordt hier de pseudometing $p_i^{(n)} = \sum_{k=1}^{N} \Psi_{ik} f_k^{(n)}$ berekend. De pseudometing is de verwachtingswaarde voor de meting bij de gegeven schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$. De getalwaarden van de werkelijke meting d_i en de pseudometing p_i worden vergeleken door een deling.

De verhouding meting-pseudometing wordt vermenigvuldigd met de gewichtsfactor Ψ_{ij} en de verkregen getallen worden dan opgeteld voor alle detectorparen waarop een bepaalde pixel invloed heeft:

$$\sum_{i=1}^{M} \Psi_{ij} \frac{d_i}{p_i}. \tag{4.7}$$

Deze stap wordt de terugprojectie genoemd. Hierdoor wordt een correctiecoëfficënt voor een bepaalde pixel gevonden. De term $1/\sum_{i=1}^{M} \Psi_{ij}$ is een normalisatiefactor: indien alle verhoudingen van meting-pseudometingen één zijn, zorgt deze term ervoor dat de pixelwaarden niet veranderen. Na de vermenigvuldiging met de normalisatiefactor wordt de oude pixelwaarde $f_j^{(n)}$ vermenigvuldigd met de uiteindelijke correctiefactor om de nieuwe schatting $f_j^{(n+1)}$ te verkrijgen Bijgevolg zal convergentie van het ML-EM-algoritme optreden wanneer al de pseudometingen gelijk zijn aan de werkelijke metingen. Deze eigenschap zal later geïdentificeerd worden als een mogelijke oorzaak van de ruisdegeneratie.

Een tweede belangrijk nadeel van het ML-EM-algoritme is de trage convergentie. Deze trage convergentie kan ook enigszins met de voorgaande uiteenzetting verklaard worden. Wat gebeurt er wanneer b.v. een rand gereconstrueerd moet worden? De voornaamste informatie voor een bepaalde rand is beperkt tot een klein aantal projectiestroken. Namelijk deze projectiestroken die loodrecht op de sterkste gradiënt van de rand staan. Stel nu dat een redelijke reconstructie bereikt werd, enkel de weergave van de rand moet nog verbeterd worden. Doordat de reconstructie reeds behoorlijk is, zullen bijna alle pseudometingen overeenkomen met de echte metingen. Er zal enkel een verschil optreden voor die enkele projectiestroken die loodrecht op de wand staan. Bijgevolg zal in de terugprojectie een som gemaakt worden van veel termen die één zijn en slechts enkele termen die daarvan verschillen. De correctiefactor voor de rand zal dan weinig van één verschillen. Hierdoor kunnen randen niet snel gereconstrueerd worden.

Een andere opmerking betreft het strikt-concaaf zijn van de directe waarschijnlijkheidsdistributie. Deze eigenschap steunt op het positief-definiet zijn van de transfermatrix Ψ. In de volgende redenering wordt gesuggereerd dat de determinant van de transfermatrix nul is, waardoor de transfermatrix niet meer positief-definiet is. Beschouw voor de eenvoud enkel de geometrische projectie. De geometrische projectie van een bepaalde strook onder een bepaalde hoek berekent de activiteit langs die strook. Worden de activiteiten van alle stroken van een bepaalde hoek samengeteld, dan moet de totale activiteit in het beeld teruggevonden worden. Maar dit geldt voor elke hoek. Bijgevolg levert de som van alle transfermatrixrijen van een bepaalde hoek dezelfde rij op als de som van alle transfermatrixrijen van een andere hoek. De determinant van de transfermatrix is dus nul. De transfermatrix heeft een niet-ledige nulruimte waarvan de dimensie minstens gelijk is aan het aantal projectiehoeken min één. Elk element van de nulruimte zal bij optelling bij een gegeven beeld de directe waarschijnlijkheid van de metingen niet veranderen. Het beeld met de maximale directe waarschijnlijkheid kan (voor een vierkante transfermatrix) bijgevolg niet uniek zijn.

Het bewijs van convergentie voor het ML-EM-algoritme verliest iets van zijn kracht door bovenstaande opmerkingen. In praktijk wordt een divergentie van het algoritme echter niet waargenomen. Bij de opeenvolgende iteratiestappen neemt de directe waarschijnlijkheid van de metingen steeds toe.

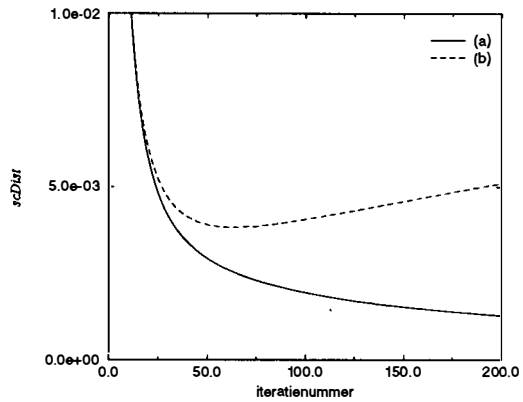
4.2.3 Enkele nadelen van het ML-EM-algoritme

Zoals reeds vermeld zijn de voornaamste nadelen van het ML-EM-algoritme:

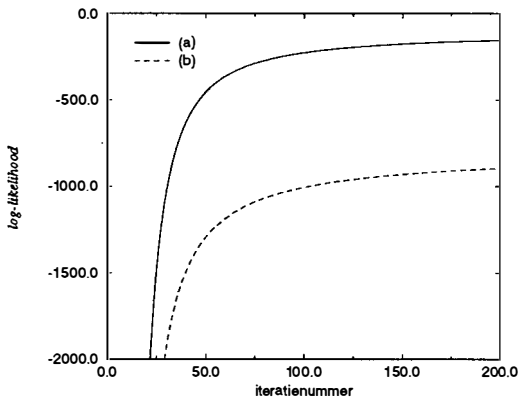
1. de ruisdegeneratie;
2. de lange reconstructietijd.

Onder ruisdeterioratie wordt verstaan dat de "kwaliteit" van het beeld vermindert na een bepaalde aantal iteratiestappen [Snyde87]. Doordat het ML-EM-algoritme iteratief is, zal de benodigde rekentijd groot zijn in vergelijking met de standaard-reconstructiemethode in PET: de FB-reconstructie (de gefilterde-terugprojectie-reconstructie uit hoofdstuk 2).

Bij computersimulaties betreft de kwaliteit van het beeld de kwadratische afstand (*scDist*- of *distError*-foutcriterium) tot het referentiebeeld en de visuele impressie van het beeld. De ruisdegeneratie ontstaat doordat de metingen ruis bevatten. In fig. 4.1 wordt het *scDist*-foutcriterium uitgezet in functie van het iteratienummer. De reconstructies worden uitgevoerd met computergegeneerde metingen met en zonder ruis. Het is duidelijk dat de ruistoevoeging ervoor zorgt dat de *scDist*-evolutie een minimum vertoont. Bijgevolg is er een optimale iteratienummer volgens het *scDist*-foutcriterium. Wordt evenwel het



Figuur 4.1 De evolutie van het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor: (a) metingen zonder ruis, (b) metingen met ruis



Figuur 4.2 De evolutie van de log-likelihood in functie van het iteratienummer: voor (a) metingen zonder ruis, (b) metingen met ruis.

logaritme van de directe waarschijnlijkheid, de log-likelihood, in functie van de iteratienummer bekeken (zie fig. 4.2), dan valt geen minimum te bespeuren. De log-likelihood blijft toenemen gedurende de opeenvolgende iteraties, m.a.w. de metingen worden steeds waarschijnlijker. Dit verloop correspondeert met het theoretische voorspelde gedrag.

De iteratie waarop het foutcriterium door een minimum gaat hangt af van het gebruikte foutcriterium, de intensiteiten van de metingen, de beeldconfiguratie, enz. De ruisdegeneratie werd het eerst opgemerkt door Shepp [Shepp84] en een theoretische studie ervan wordt gegeven in [Snyde87], [Llace89]. In [Floyd87] worden experimentele resultaten betreffende de ruisdegeneratie gepresenteerd. Hieruit blijkt dat de optimale iteratie sterk varieert met de gebruikte signaal-ruisverhouding (van enkele tientallen tot meer dan honderd iteraties). In [Floyd87] en [Snyde87] wordt ook de invloed van een verkeerde convolutiekern onderzocht. Wanneer het ML-EM-algoritme gebruik maakt van een verkeerde transfermatrix zal het gereconstrueerde beeld daar ook onder lijden.

De ruisdeterioratie kan verklaard worden doordat er geen mechanisme in het ML-EM-algoritme verhindert dat de metingen exact voorspeld worden door het gereconstrueerde beeld [Nuyts91], [Llace89]. Het doel van het algoritme is immers het maximaliseren van de directe waarschijnlijkheid. Deze directe waarschijnlijkheid bereikt een extremum wanneer alle pseudometingen gelijk zijn aan de werkelijke meetpunten. Het ML-EM-algoritme werkt bijgevolg prima indien er geen ruis op de metingen aanwezig is. Maar het algoritme kan falen bij de aanwezigheid van ruis omdat de ruis in de metingen ook gereproduceerd wordt in de pseudometingen. De ruis van de pseudometingen zal ook in de pixelwaarden terug te vinden zijn.

Indien het aantal metingen en het aantal pixels even groot zijn (zoals bij medische scanners), zal het ML-EM-algoritme trachten een matrixinversie uit te voeren (d.i. de schatting van het beeld voorspelt exact de waarden van de metingen). Deze matrixinversie kan niet steeds verwezenlijkt worden doordat de pixelintensiteiten van de oplossing steeds positief moeten zijn.

Door het aantal pixels te vergroten wordt het ruisdegeratie erger [Snyde87]. Voor hetzelfde aantal meetpunten moeten dan immers meer beeldintensiteiten gereconstrueerd worden.

Om de ruisdegeneratie te verhinderen worden verschillende methoden voorgesteld:

1. het gebruik van een stopcriterium (zie par. 4.4);
2. het gebruik van a priori waarschijnlijkheden voor het beeld (zie hoofdstuk 6);
3. het beperken van de hoge-frequentiecomponenten in het beeld [Snyde85].

De eerste twee methoden komen elders in dit werk uitgebreid aan bod. Door een stopcriterium wordt de ruisdegeneratie vermeden door het iteratief proces in de omgeving van het minimum van een bepaald foutcriterium te stoppen. De a priori waarschijnlijkheden worden gebruikt om het criterium waaraan de uiteindelijke reconstructie moet voldoen te veranderen. Inderdaad, het Maximum Likelihood-criterium is op zichzelf geen geschikt criterium voor het reconstructieprobleem in PET. Het gebruik van a priori waarschijnlijkheidsdistributies wordt besproken in hoofdstuk 6.

Het beperken van de hoge frequentiecomponenten in het beeld is de zeefmethode ("method of sieves") [Snyde85]. In deze methode wordt het beeld niet opgebouwd uit pixels, maar uit een set van basisfuncties met uitsluitend lage frequentiecomponenten. De basisfuncties zijn in dit geval Gausscurven. Door het gebruik van deze functies worden de hoge frequentiecomponenten in het gereconstrueerde beeld vermeden. Het nadeel van deze methode is evenwel dat werkelijke hoge frequentiecomponenten van de tracerconcentratie ook onderdrukt worden. Een gelijkaardige methode met andere basisfuncties is terug te vinden in [Lewit92] en MEMSYS 5 (zie hoofdstuk 6).

Het gebruik van al deze technieken is controversieel. Zo wordt b.v. het gebruik van het stopcriterium in vraag gesteld. Waarom wordt het maximum-likelihood-criterium gebruikt indien het maximum toch vermeden wordt? Bovendien werd recent aangetoond dat het gebruik van andere kwaliteitscriteria de ruisdegeneratie in vraag stellen [Herma91]. Ook kan de optimale iteratie voor verschillende delen van hetzelfde beeld optreden bij verschillende iteratienummers [Meikl94].

Het tweede probleem van het ML-EM-algoritme is de lange reconstructietijd. Veel verschillende methoden werden reeds ontwikkeld om het ML-EM-algoritme te versnellen. Een aantal van deze methoden herschrijven het ML-EM-algoritme als een algoritme dat een stap in een bepaalde richting neemt:

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \frac{1}{\Psi^T 1_M} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d} - \Psi \mathbf{f}^{(n)}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \quad \mathbf{f}^{(n)}. \tag{4.8}$$

Door de stap in die richting te vergroten wordt verondersteld dat een snellere convergentie bereikt kan worden [Lewit86], [Tanak92]. Bij Lewitt wordt de stap b.v. vergroot door het vermenigvuldigen met een relaxatieparameter $\omega^{(n)} \geq 1$:

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \omega^{(n)} \frac{1}{\Psi^T 1_M} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d} - \Psi \mathbf{f}^{(n)}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \quad \mathbf{f}^{(n)}. \tag{4.9}$$

Een andere techniek bestaat erin de correctiefactoren waarmee de beeldpixels vermenigvuldigd worden tot een bepaalde macht te verheffen [Lewit86], [Verme83]. Indien deze macht te groot (≥ 2) gekozen wordt, kan er evenwel een instabiliteit optreden.

Een andere methode om sneller het optimum te bereiken is het gebruik van een ander maximalisatie-algoritme. Dit is het onderwerp van hoofdstuk 5. In de volgende paragraaf worden enkele versnellingstechnieken besproken waarbij het ML-EM-algoritme fundamenteel onveranderd gelaten wordt.

4.3 De studie van enkele versnellingstechnieken

In vergelijking met de standaard-reconstructiemethode in PET, de FB-reconstructie, is het ML-EM-algoritme traag. Het ML-EM-algoritme is iteratief en elke iteratie vereist ongeveer 2 maal zoveel berekeningen als het volledige FB-algoritme. Doordat in de standaardapplicaties ongeveer een 20-tal iteraties van het ML-EM-algoritme doorlopen worden, betekent dit dat het ML-EM-algoritme ongeveer 40 maal trager is dan het FB-algoritme. Bijgevolg is het onderzoek naar verschillende versnellingsalgoritmen belangrijk.

In eerste instantie lijkt de relevantie van versnellingstechnieken te verminderen doordat de snelheid van de beschikbare computers snel toeneemt. Maar doordat de dimensies van het reconstructieprobleem ook vergroten blijven versnellingstechnieken belangrijk. Zo worden in moderne scanners ongeveer 30 bedposities gelijktijdig opgenomen waarbij de dimensies van de beelden 256×256 is. In de ECAT IV-scanner, een scanner van ongeveer twaalf jaar oud, worden drie bedposities simultaan opgenomen en zijn de dimensies van de beelden 100×100. Bijgevolg is het benodigd aantal operaties toegenomen met een factor $170 \approx (2,56)^3 \times 10$. Dit stemt ongeveer overeen met de versnelling van processoren in dezelfde tijdsperiode. Bijgevolg wordt door de versnelling van de processoren geen nettosnelheidswinst geboekt.

In dit hoofdstuk worden de volgende versnellingstechnieken bestudeerd:

1. *de parallelle implementatie*: de berekeningen voor het ML-EM-algoritme worden simultaan door verschillende processoren uitgevoerd;

2. *de multirooster-methode*: de resolutie waarop het beeld gereconstrueerd wordt, verandert naargelang van het iteratienummer;

3. *de reconstructie met partiële metingen*: in de eerste iteraties wordt de reconstructie uitgevoerd met slechts een deel van de metingen.

4.3.1 De parallelle implementatie van het ML-EM-algoritme

Door zijn structuur is het ML-EM algoritme een uitstekende kandidaat voor een parallelle implementatie. Het besproken werk omvat twee aspecten:

1. het ontwikkelen van een geschikt partitioneringsmechanisme (partitionering is het verdelen van de instructies over verschillende processoren);

2. het stockeringsmechanisme voor de transfermatrix.

Het werk uit deze paragraaf werd reeds gepubliceerd in [Basti93], [Basti94a], [Basti94b], [Basti94c] en is ook van toepassing op het algoritme van Green uit par. 5.2.

In de literatuur zijn reeds enkele parallelle implementaties van het ML-EM-algoritme beschreven. In het algoritme uit [Buyuk91] wordt de prestatie beperkt door het gelimiteerde geheugen. Een implementatie op een computer met gemeenschappelijk- en verdeeldgeheugen werd voorgesteld in [Chen91]. De eigen implementatie gebruikt een multiprocessor met gemeenschappelijk geheugen en bevat een geoptimaliseerd partitioneringsschema.

De parallelle implementatie is gebaseerd op een data-parallelle-uitvoering. Bij een data-parallelle-uitvoering wordt de ruimte van de gegevens opgesplitst en op elke dataset werkt hetzelfde algoritme in. Merk hierbij op dat de "data" uit data-parallelle-uitvoering niet noodzakelijk slaat op de meetgegevens van de scanner.

Het ML-EM-algoritme wordt zodanig opgesplitst dat er twee typen datapartitioneringen ingevoerd worden: de meetgegevenpartitionering en de pixelpartitionering. Bij de meetgegevenpartitionering worden de meetgegevens onafhankelijk van elkaar berekend. Elke processor heeft dan tot taak een deel van de meetgegevens (pseudometingen) te berekenen. De tweede manier van partitionering, de pixelpartitionering, laat elke processor een deel van de pixelwaarden berekenen. Elke processor gebruikt hierbij alle meetgegevens, maar berekent enkel de terugprojectie van de metingen voor een beperkt aantal hoeken. Nadat iedere processor zijn terugprojectie berekend heeft, worden de pixelintensiteiten van de verschillende processoren opgeteld om het uiteindelijke beeld te verkrijgen.

Het is duidelijk dat bij de projectie-operatie de meetgegevenpartitionering gebruikt wordt. Bij de terugprojectie-operatie is daarentegen de pixelpartitionering aangewezen. Het ML-EM-algoritme, gegeven door het iteratieschema

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Psi^T 1_M} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \mathbf{f}^{(n)}, \tag{4.10}$$

wordt opgesplitst in de berekeningsstappen:

1. $\Phi = \Psi^T 1_N$: dit is de terugprojectie die zorgt voor de normaliseren van de correcties;

2. $\Pi = \mathbf{d}/\Psi\mathbf{f}^{(n)}$: de vergelijking van de metingen en de pseudometingen;

3. $\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Phi}\Psi^T \Pi \mathbf{f}^{(n)}$: de aanpassing van de schatting van het beeld.

	Beelddimensies	
Aantal processoren	64 × 64	256 × 256
2	1.969	1.988
4	3.782	3.927

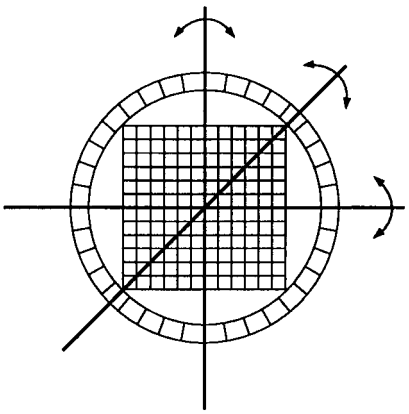
Tabel 4.1 Versnellingscoëfficiënten voor de parallelle implementatie in functie van het aantal parallelle processoren.

Hierbij moet de berekening van stap 1 slechts éénmaal uitgevoerd worden. Stap 2 wordt verricht met een meetgegevenpartitionering en stap 3 met een pixelpartitionering. Zowel voor de meetgegevenpartitionering als de pixelpartitionering is het eenvoudig om taken van gelijke grootte aan de verschillende processoren toe te kennen. Het verlies t.g.v. het synchronisatieproces op het einde van stap 2 en stap 3 is dan ook klein.

In tabel 4.1 wordt de versnellingscoëfficiënt van de parallelle implementatie weergegeven in functie van het aantal gebruikte processoren. Het betreft hier een implementatie op een SUN 630MP model 140 onder Solaris 2.2. Dit is een multiprocessor met gemeenschappelijk geheugen met 4 processoren met een rekenkracht van elk 28.5 Mips, 4.2 MFlops per processor.

De versnellingscoëfficiënt geeft de verhouding van de rekentijd van het normaal ML-EM-algoritme tot de rekentijd van de parallelle implementatie van het algoritme. Bemerk dat de versnellingscoëfficiënt bijna gelijk is aan het aantal gebruikte processoren. Dit betekent dat de parallellisatie een bijna ideale performantiestijging bereikt.

Een bijkomende versnelling van het algoritme wordt verkregen door het opslaan van de transfermatrix. Hierbij wordt getracht het aantal te stockeren elementen minimaal gehouden worden. De bijkomende versnelling treedt op doordat de elementen van de transfermatrix niet bij elke iteratie uitgerekend moeten worden. Indien de detectorgrootten niet sterk verschillen van de pixelgrootten kan een pixel voor een bepaalde projectiehoek hoogstens drie detectorparen beïnvloeden. De geheugenvereiste kan verder beperkt worden door symmetrie-eigenschappen van de scannerconfiguratie te gebruiken [Chen91]. Bekijk hiervoor de meetopstelling uit fig. 4.3. De volgende spiegelingen leveren steeds dezelfde meetopstelling: een spiegeling om de x-as, een spiegeling om de y-as en een spiegeling om de $x = y$ as. Deze symmetrieën beperken de benodigde geheugenruimte met een factor 8 (zie ook [Janin93]). Bij het gebruik van alle symmetrieën zal de efficiëntie van het algoritme evenwel dalen, omdat het toegangspatroon tot de transfermatrix willekeurig wordt. Daarom wordt bij de opslag van de transfermatrix slechts de symmetrie-eigenschap die volgt uit de spiegeling om de x-as gebruikt. De benodigde geheugenruimte wordt bijgevolg



Figuur 4.3 Verschillende symmetrie-assen voor de meetopstelling: de horizontale as (x-as), de verticale as (y-as) en de (x=y)-as.

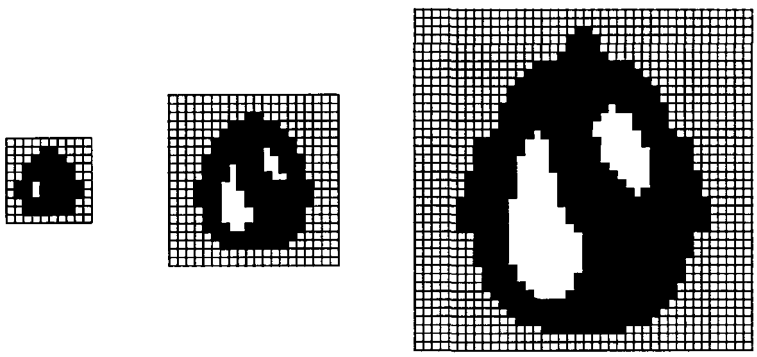
Aantal processoren	Berekend	Gestockeerd	Berekend	Gestockeerd
	64 × 64		256 × 256	
1	32.2	16.0	2088.8	1032.5
4	8.3	4.2	533.7	263.238

Tabel 4.2 Vergelijking van de reconstructietijden in seconden voor 10 iteraties van het ML-EM-algoritme bij het opslaan en de berekening van de transfermatrix.

slechts met een factor 2 verminderd. Maar met deze manier van opslaan blijft een efficiënte berekening van de projectie- en terugprojectie-operaties mogelijk. Voor projectiehoeken groter dan 90 graden wordt de transfermatrix gewoon in omgekeerde volgorde doorlopen.

Een andere manier om de geheugenruimte te verminderen maakt gebruik van een benadering van de projectie-coëffiënten Ψ_{ij} [Nuyts94]. Het blijkt dat veel coëfficiënten Ψ_{ij} bij benadering gelijk zijn aan elkaar. Door gelijke coëfficiënten slecht eenmaal op te slaan, kan de benodigde geheugenruimte verminderd worden.

In tabel 4.2 worden de reconstructietijden vergeleken voor een gestockeerde transfermatrix en een berekende transfermatrix. Het blijkt dat de versnelling ongeveer een factor twee bedraagt. De waarde van de versnelling hangt af van de gebruikte computer. De CPU-tijd voor het berekenen van de coëffiënten t.o.v. de CPU-tijd voor het aanspreken van geheugenlocaties verschilt voor



Figuur 4.4 De verschillende roosters voor de multirooster-methode, v.l.n.r.: het beginrooster, het middenrooster en het finale (fijnste resolutie-) rooster.

de diverse computerarchitecturen. Bij een Sun-werkstation – het meest gebruikte werkstation bij PET-camera's – zou het stockeren van de coëffiënten zelfs resulteren in een vertraging van het algoritme [Byars94].

4.3.2 Een multirooster-implementatie van het ML-EM-algoritme

Inleiding

Het ML-EM-algoritme heeft de neiging om eerst de lage frequenties van het beeld te reconstrueren. Bijgevolg kan de reconstructie in de eerste iteraties op een lage resolutie gestart worden. Hierdoor zal de rekentijd voor één iteratie verminderen. De lage resolutie wordt verkregen door het aantal pixels waarop het beeld gereconstrueerd wordt te beperken (zie ook fig. 4.4). De grootte van de pixels wordt hierbij veranderd. Bij dit onderzoek worden enkel overgangen van de grootte van de pixels met een factor 4 (een factor 2 voor elke zijde) bestudeerd. De pixels met een bepaalde grootte behoren tot eenzelfde rooster. De reconstructies maken gebruik van drie verschillende roosters (pixelgrootten). Het laatste rooster heeft de standaardresolutie van het beeld, het eerste rooster bevat slechts 1/16 en het middelste rooster slechts 1/4 van het finaal aantal pixels. Bij elk rooster zal het aantal meetpunten in overeenstemming gebracht worden met het aantal pixels.

In het artikel van Ranganath [Ranga88] wordt summier een multirooster-

methode beschreven. In dat artikel worden ook drie resolutieniveaus behandeld, maar het artikel blijft vaag over een aantal punten. Zo wordt b.v. aangegeven dat de overgangen tussen de verschillende roosters bepaald worden door de verandering van de directe waarschijnlijkheid. Indien de stijging van de directe waarschijnlijkheid te klein is in de laatste iteratie, dan zal de volgende iteratie met een hoger resolutie-rooster berekend worden. Nergens wordt vermeld wat "klein" betekent. Hier worden enkele experimenten uitgevoerd om een praktische implementatie te verkrijgen. Supplementaire resultaten zijn beschikbaar in [Desme93d].

Natuurlijk zou een theoretische studie van de multirooster-methode een belangrijke bijdrage opleveren. Voor het Landweber-algoritme werd een gelijkaardige studie uitgevoerd m.b.v. een "Singular Value Decomposition" [Pan91]. Pogingen om een dergelijke theoretische studie op te zetten voor het ML-EM-algoritme faalden. De voornaamste problemen treden op doordat het ML-EM-algoritme niet-lineair is in de schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$.

Methodologie

Met de uitgevoerde experimenten zullen verschillende aspecten van de multirooster-implementatie onderzocht worden:

1. de invloed van het transitiecriterium. Dit criterium bepaalt het iteratienummer waarop naar een volgend rooster overgegaan wordt;

2. de invloed van een convolutie van het beeld bij de transitie tussen roosters;

3. de versnelling van het reconstructie-algoritme.

Hier worden twee typen van transitiecriteria onderzocht:

1. *het F-criterium*: de specificatie van het totaal aantal iteraties legt het aantal iteraties uitgevoerd in elk van de drie roosters vast. Het aantal iteraties in een bepaald rooster verdubbelt telkens er naar een fijner rooster overgeschakeld wordt;

2. *het L-criterium*: De mate van verandering van de directe waarschijnlijkheid bepaalt de overgang tussen de roosters. Wanneer de verandering van de directe waarschijnlijkheid voldoende klein is, wordt de reconstructie verder gezet in het volgende rooster. Hier wordt verondersteld dat een verandering van het logaritme van de directe waarschijnlijkheid kleiner dan 0.1% aanleiding zal geven tot de transitie tussen roosters. Het L-criterium is gebaseerd op het principe voorgesteld in [Ranga88].

Verschillende optimalisaties van het voorgestelde schema zijn mogelijk

1. het transitiecriterium: in par. 4.4 worden een aantal verschillende stopcriteria besproken. Elk van deze criteria kan een geschikt transitiecriterium opleveren;

2. de transitiedrempel: voorlopig is deze drempel experimenteel vastgelegd op 0.1% [Desme93a]. Het veranderen van deze drempel naar 5% heeft slechts weinig invloed op de reconstructie. Verder onderzoek is wel aangewezen.

Bij de overgangen van een lage resolutie-rooster naar een hoger resolutie-rooster blijven de pixelranden van de lagere dimensie een aantal iteraties zichtbaar op het gereconstrueerde beeld. Hier wordt bestudeerd of een convolutiestap bij de transitie dit artefact kan wegwerken.

Het *distError*- en *scDist*-foutcriterium worden berekend door het beeld in het lage resolutie-rooster eerst om te zetten naar de finale resolutie. De overgang tussen de pixels van een lage resolutie-rooster naar de hogere resolutie-rooster gebeurt door aan alle hoge resolutie-pixels dezelfde activiteit toe te kennen als aan de corresponderende lage resolutie-pixel. In de finale resolutie wordt de vergelijking tussen de schatting van het beeld en het referentiebeeld uitgevoerd.

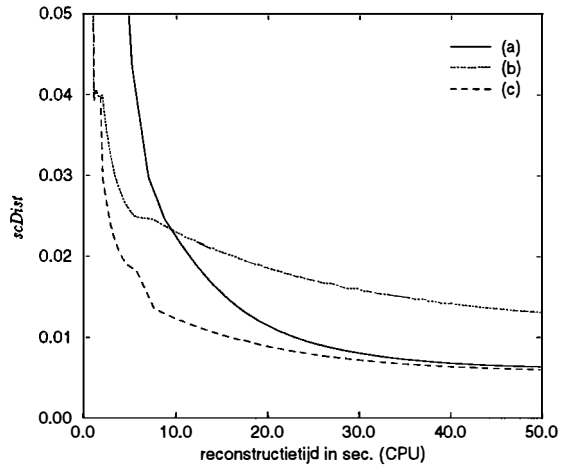
Experimenten

Het gebruikte fantoom is het `DDC-fantoom` (zie hoofdstuk 2) gedigitaliseerd op een 64×64 rooster. Het aantal projectiestroken is eveneens 64×64 en de attenuatie wordt verwaarloosd.

De convolutiestap

In fig. 4.5 wordt de *scDist*-foutcriterium gegeven in functie van de reconstructietijd bij het al dan niet toepassen van een convolutie bij de transitie tussen roosters. De convolutiestap slaagt er blijkbaar in om de reconstructies te verbeteren.

De invloed op de visuele impressie van een convolutie bij de expansie van de beelden naar een rooster met fijnere resolutie wordt nagegaan. In fig. 4.6 worden reconstructies voorgesteld bij gelijke reconstructietijden. Door het invoeren van de convolutie wordt de kwaliteit van de multirooster-reconstructie vergelijkbaar met de kwaliteit van het standaard-ML-EM-gereconstrueerde beeld. Indien de convolutie weggelaten wordt, zal de kwaliteit van de reconstructie verminderen. In het vervolg zal de convolutiestap steeds uitgevoerd worden.



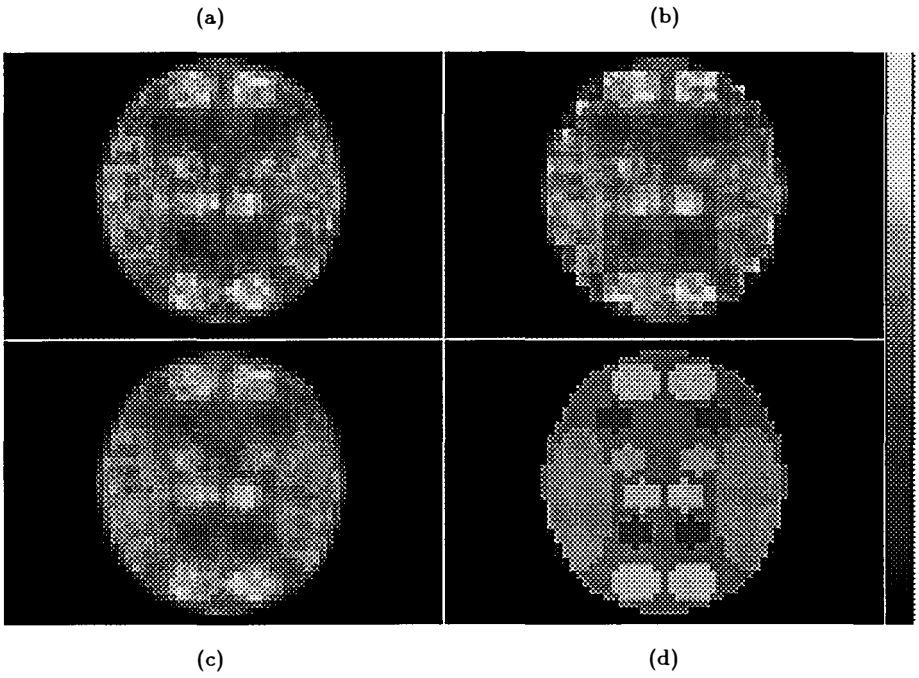
Figuur 4.5 De invloed van een convolutiestap tijdens de transitie tussen verschillende roosters voor het `DDC-fantoom` met gemiddeld 200 tellen in het sinogram: (a) standaard-ML-EM-algoritme (b) multirooster-reconstructie zonder convolutie (c) multirooster-reconstructie met convolutie.

Het transitiecriterium

In fig. 4.7 wordt de evolutie van *scDist*-foutcriterium vergeleken voor het normale ML-EM-algoritme, een multirooster-algoritme met een L-criterium en een multirooster-algoritme met een F-criterium. Bij dit experiment slaagt het L-criterium erin de opwaartse helling in de *scDist*-curve te vermijden.

De versnelling met multirooster-methoden

De *scDist*-evolutie uit fig. 4.7 geeft aan dat het multirooster-algoritme voor een bepaalde reconstructietijd steeds een betere *scDist*-waarde heeft dan het standaard-ML-EM-algoritme. De versnelling die verkregen wordt hangt sterk af van het gebruikte criterium. Versnellingen met een factor 10 kunnen verkregen worden met het multirooster-algoritme, indien gestopt wordt wanneer een bepaalde *scDist*-waarde bereikt wordt. Indien evenwel de reconstructietijden vergeleken worden waarvoor het *scDist*-foutcriterium een minimum bereikt, blijkt de versnelling evenwel verwaarloosbaar te zijn, zie fig. 4.8. Beide criteria zijn evenwel niet te hanteren in een praktische situatie omdat het referentiebeeld niet gekend is.



Figuur 4.6 Reconstructies van het `DDC-fantoom` (met gemiddeld 200 tellen in het sinogram) na 50 seconden: (a) standaard-ML-EM-reconstructie (b) multirooster-reconstructie zonder convolutie (c) multirooster-reconstructie met convolutie (d) referentiebeeld.

4.3.3 Reconstructiemethoden met partiële metingen

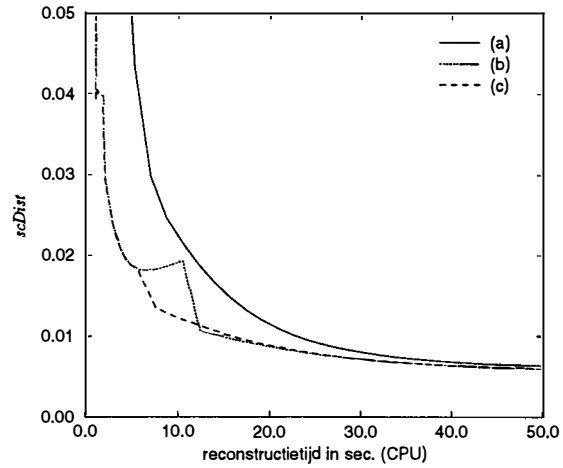
Inleiding

Het opmeten van de gegevens voor een patiënt neemt een bepaalde tijd in beslag. Gedurende een groot deel van deze meettijd is reeds een belangrijk deel van de totale meetgegevens aanwezig. Na de helft van de totale meettijd kan b.v. verondersteld worden dat ongeveer de helft van de totale data beschikbaar is. De bedoeling van de reconstructiemethoden met partiële data is om de reconstructie reeds te beginnen tijdens het meetproces. Daardoor kan een deel van de meettijd gebruikt worden om de reconstructie te beginnen. Dit onderzoek heeft tot doel de invloed van de partitionering op de beeldkwaliteit na te gaan.

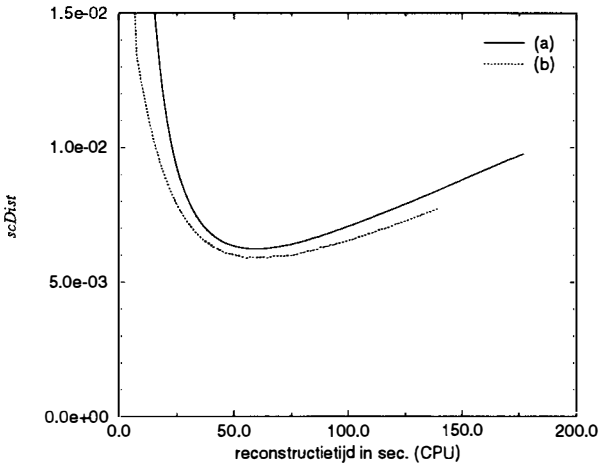
Methodologie

Twee typen partitioneringen worden onderzocht (zie fig. 4.9):

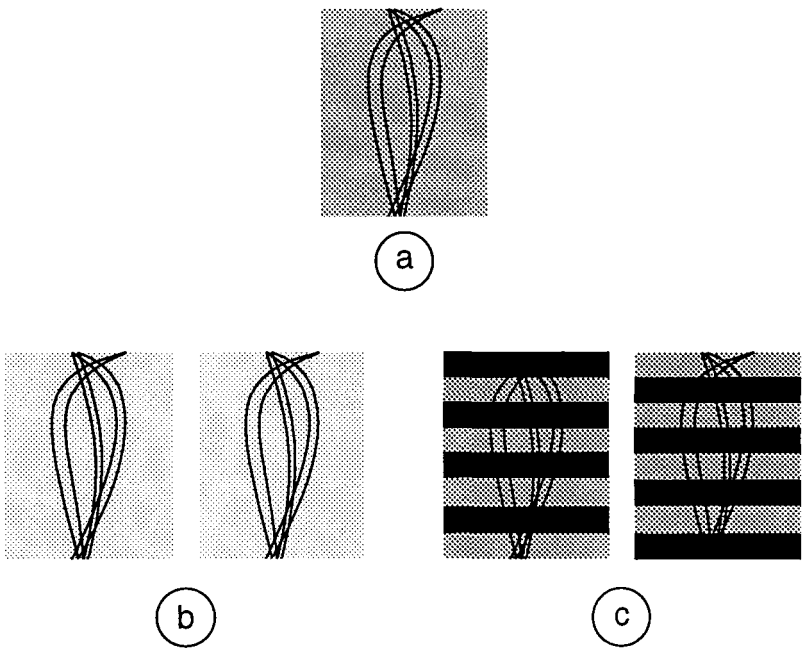
1. de angulaire data;
2. de additieve data.



Figuur 4.7 Het *scDist*-foutcriterium in functie van de reconstructietijd voor verschillende transitiecriteria voor het `DDC-fantoom` (met gemiddeld 200 tellen in het sinogram): (a) standaard-ML-EM-algoritme (b) F-criterium-transitie, (c) L-criterium-transitie.



Figuur 4.8 Het *scDist*-foutcriterium in functie van de reconstructietijd voor verschillende transitiecriteria voor het `DDC-fantoom` (met gemiddeld 200 tellen in het sinogram): (a) standaard-ML-EM-algoritme (b) multirooster-reconstructie. De minimale waarde voor het *scDist*-foutcriterium wordt ongeveer na dezelfde rekentijd verkregen.



Figuur 4.9 De twee verschillende partioneringsschema's: (a) de volledige dataset, (b) de additieve partitionering (c) de angulaire partitionering.

Bij de angulaire data worden de gegevens verzameld voor opeenvolgende meethoeken. De ECAT II en ECAT IV scanners van het UZ Gent werken bij benadering met dit systeem. Bij een dergelijke camera worden de gegevens voor een beperkt aantal hoeken eerst volledig opgemeten. Dan worden alle gegevens voor de volgende set hoeken verzameld. In deze studie wordt verondersteld dat de meethoeken gelijkmatig verspreid zijn over 180 graden. Een nieuwe partiële dataset bevat dan gegevens voor twee maal zo veel hoeken, waarbij alle gegevens van de voorgaande meethoeken aanwezig blijven. Op alle partiële datasets is er Poissonruis aanwezig.

Bij de additieve data worden de gegevens voor alle hoeken gelijktijdig opgemeten. Nu treedt een geleidelijke toename van het aantal geobserveerde tellen voor alle mogelijk detectorparen in functie van de meettijd op. Elke partiële dataset bevat gegevens voor alle meethoeken. Een nieuwe partiële dataset bestaat uit de voorgaande dataset waarbij de nieuwe meetgegevens opgeteld worden. De dataset die bij een voorgaande partiële dataset opgeteld wordt, bevat steeds

ongeveer het aantal tellen van de eerste partiële dataset. Het aantal tellen in de eerste partiële dataset hangt af van de mate waarin de totale dataset gepartitioneerd wordt. Naarmate het aantal tellen in de partiële dataset groter wordt, verbetert natuurlijk de signaal tot ruisverhouding van de dataset.

Voor elk type partiële data is de invloed van de verschillende intensiteiten van de metingen op de uiteindelijke beeldkwaliteit onderzocht. Het L-criterium met een 5% drempel (zie vorige paragraaf) bepaalt de overgang tussen de opeenvolgende partiële datasets. In praktische situaties kan de overgang naar een volgende partiële dataset het best plaatsvinden zodra deze beschikbaar is. Met betere gegevens zal immers ook een betere reconstructie verkregen worden. Indien de reconstructie met een partiële datablok het transitiecriterium snel bereikt (en nog geen nieuwe datablok beschikbaar is) kan het algoritme tijdelijk gestopt worden. Welke situatie zich het meest voordoet: het bereiken van een stopcriterium of het beschikbaar zijn van een nieuwe datablok moet de praktijk uitwijzen.

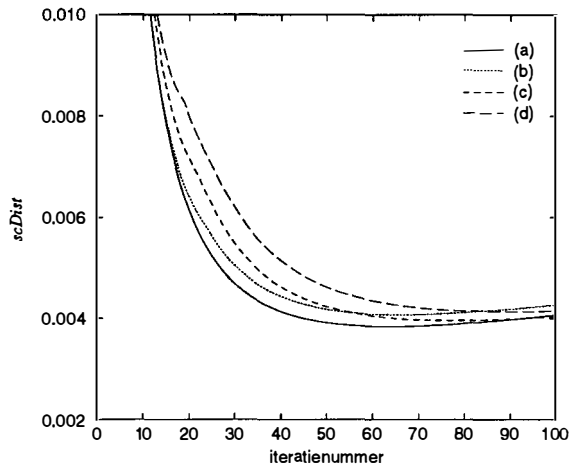
Experimentele resultaten

Het gebruikte fantoom is het `DDC-fantoom` (zie hoofdstuk 2) gedigitaliseerd op een 64×64 rooster. Het aantal projectiestroken is eveneens 64×64 en de attenuatie wordt verwaarloosd.

Het hoofddoel van deze experimenten is de invloed van de partitionering op de uiteindelijke beeldkwaliteit na te gaan. De experimenten worden uitgevoerd bij verschillende intensiteiten en voor de beide besproken typen partiële data. De resultaten voor additieve en angulaire data blijken vrij overeenstemmend te zijn.

In fig. 4.10 is te zien dat bij het gebruik van additieve datasets het beste resultaat optreedt voor het normale ML-EM-algoritme. Hierbij wordt geen convolutie uitgevoerd bij de transitie tussen datasets. Naarmate het aantal partitieblokken toeneemt zal de kwaliteit van de reconstructie verminderen. Deze vermindering is visueel echter niet waar te nemen bij deze intensiteit (gemiddeld 800 tellen in het sinogram), zie fig. 4.11. Uit fig. 4.12 blijkt dat een convolutiestap kan toelaten om de beeldkwaliteit van de standaard-ML-EM-reconstructie te benaderen met een reconstructie met partiële datasets. Indien de gemiddelde intensiteit vermindert, levert een opsplitsing in partiële data evenwel meer problemen op [Desme93a]. In deze gevallen is een convolutiestap vereist om nog een vergelijkbare beeldkwaliteit te behalen.

De invloed van de ruisinhoud bij het gebruik van angulaire data vormt het onderwerp van de volgende studie. Eerst wordt de invloed van het aantal initiële hoeken nagegaan. Een grote partitionering leidt tot een duidelijke vermindering van de beeldkwaliteit. Indien slechts 8 initiële hoeken beschouwd worden, is er duidelijk wel een verlies van kwaliteit waarneembaar zoals op fig. 4.13 af te

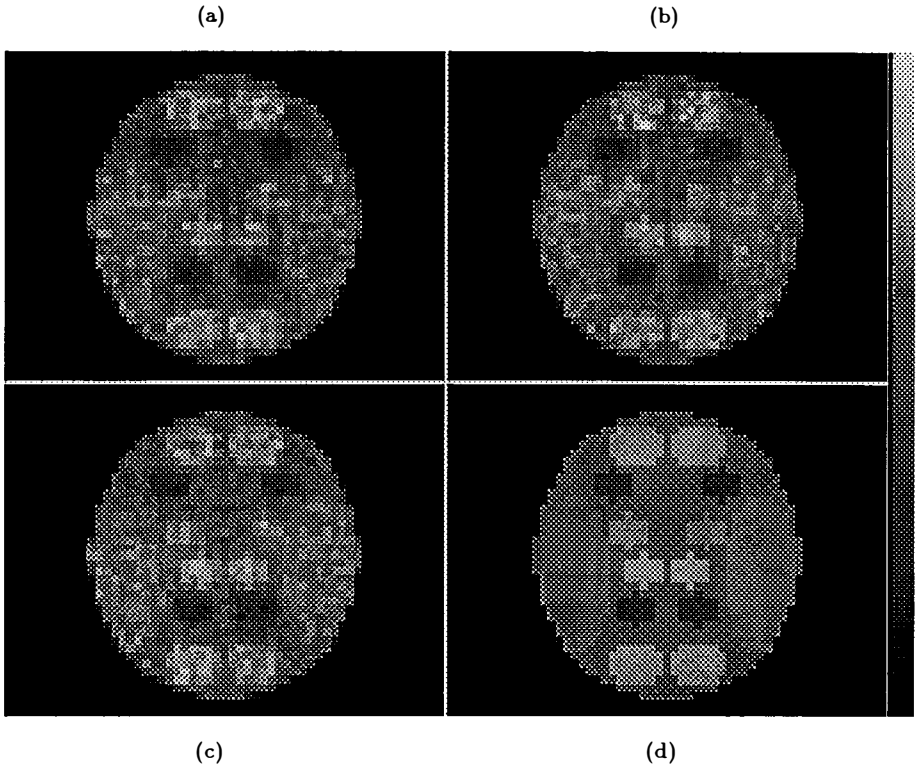


Figuur 4.10 De invloed van de partionering van de totale dataset: (a) standaard-ML-EM-algoritme (b) 2 partitieblokken (c) 4 partitieblokken (d) 8 partitieblokken voor het `DDC-fantoom`.

lezen valt. Het invoeren van een convolutiestap bij de verandering van partiële datasets, kan dit verlies wegwerken. Uit fig. 4.14 is het duidelijk dat zelfs bij de hoogste partitionering de bereikte *scDist*-waarde bij het gebruik van een convolutie overeenstemt met de waarde van het standaard-ML-EM-algoritme. De convolutiestap blijft zinvol voor verschillende ruisinhouden van het sinogram, zie fig. 4.15.

Bespreking

Het lijkt mogelijk om de reconstructie met partiële data uit te voeren zonder noemenswaardig verlies van de reconstructiekwaliteit. De oorspronkelijke bedoeling was om de meettijd van de scanner te gebruiken om sneller een reconstructie beschikbaar te hebben. Bij moderne scanners is deze strategie niet praktisch haalbaar omdat het aantal te reconstrueren beelden voor één enkele scan sterk toegenomen is. Bovendien levert deze toename van het aantal scans ook technische problemen op. De hoeveelheid data die opgemeten wordt bij de huidige scanners is zo groot dat gegevensuitwisseling tijdens het meetproces uitgesloten is. De methode van de angulaire data kan echter wel gebruikt worden om de reconstructie te versnellen. Indien b.v. maar de helft van de meethoeken gebruikt wordt, zal elke iteratie van het ML-EM-algoritme tweemaal sneller doorlopen worden. Deze methode staat bekend als de geordende subsetmethode



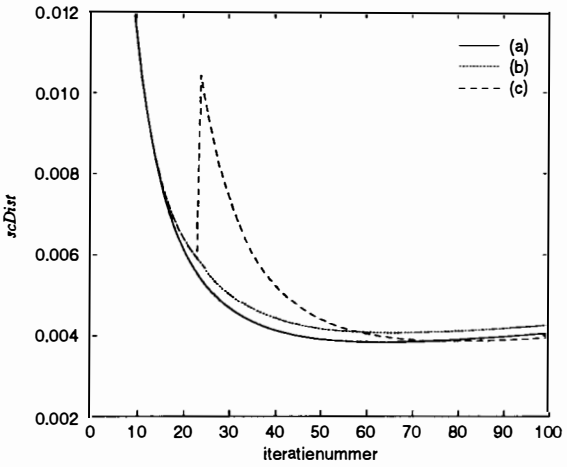
Figuur 4.11 Reconstructies na honderd iteraties voor additieve data: (a) 8 partitioneringen (b) 4 partitioneringen (c) 2 partitioneringen (d) referentiebeeld.

[Meikl94], [Hudso94]. Naarmate het iteratieproces vordert, worden steeds meer meethoeken in rekening gebracht. Deze methode kan gebruikt worden zonder verlies van de beeldkwaliteit en begint tegenwoordig algemeen ingang te vinden [Nuyts94]. Het werk uit deze paragraaf werd echter onafhankelijk uitgevoerd [Desme93a], [Desme94b], [Desme94d].

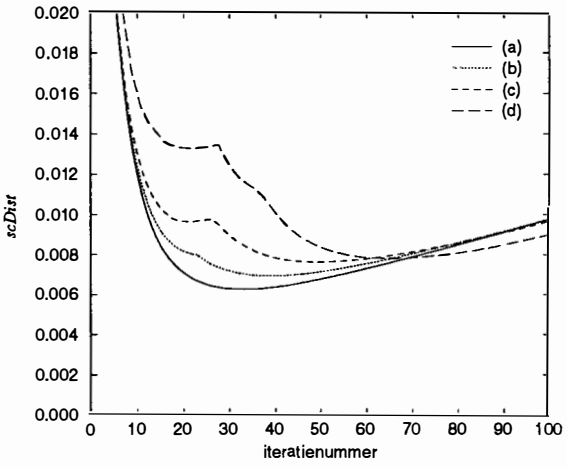
4.4 Een Bayesiaanse modeltoetsing als stopcriterium

4.4.1 Inleiding

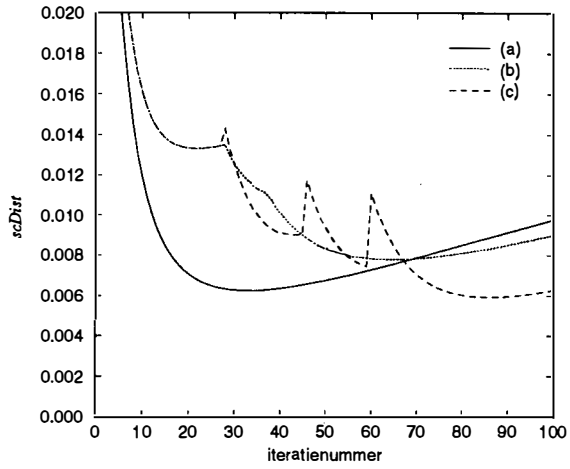
De ruisdegeneratie bij het ML-EM-algoritme treedt slechts op na een aantal iteraties. Door een geschikt stopcriterium op te stellen kan de ruisdegeneratie bijgevolg vermeden worden. Het vinden van een gepast stopcriterium is niet evident omdat de optimale iteratie afhangt van het aantal tellen in de metingen, de tracerverdeling in de patiënt, ... In de literatuur werden reeds



Figuur 4.12 De invloed van een convolutiestap bij additieve datasets: (a) standaard-ML-EM-algoritme (b) 2 partitieblokken zonder convolutie (c) 2 partitieblokken met convolutie voor het `DDC-fantoom`.



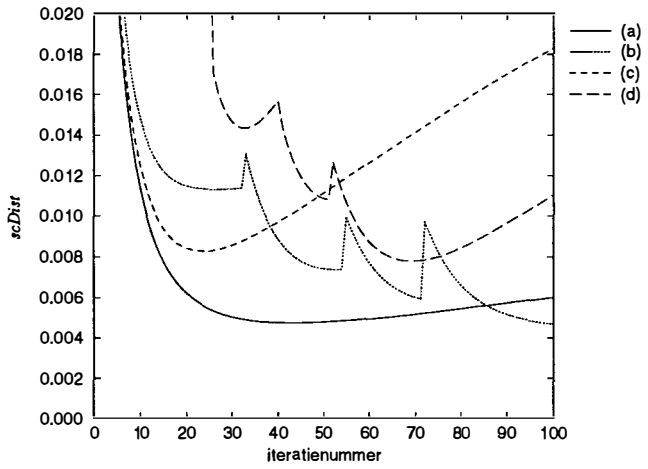
Figuur 4.13 Invloed op de convergentie van de angulaire partitionering met initiële hoeken (a) 64 = standaard-ML-EM (b) 32 (c) 16 (d) 8 voor het `DDC-fantoom` met gemiddeld 200 tellen in sinogram.



Figuur 4.14 De invloed van een convolutiestap voor het `DDC-fantoom` (gemiddeld aantal tellen in sinogram 200) met 8 initiële hoeken: (a) standaard-ML-EM algoritme (b) zonder convolutie (c) met convolutie

verschillende stopcriteria voorgesteld. Het bekendste criterium is gepubliceerd in Llacer [Llace89], [Vekle87]. Daarnaast zijn er nog criteria opgesteld door Hebert [Heber90] en Ranganath [Ranga88] (zie de multirooster-methode uit par. 4.3.2). De interessantste evolutie op dit gebied is gebaseerd op een kruisvalidatie [Coakl91]. Deze methode zal later uitgebreider aan bod komen. In de bespreking van het algoritme van Skilling en Gull uit par. 6.5.4 zal nog een ander stopcriterium aan bod komen.

De Bayesiaanse modeltoetsing is gebaseerd op het idee voorgesteld door Llacer [Llace89] en werd gepubliceerd in [Desme94c]. Bij deze test wordt de hypothese gecontroleerd of het Poissonproces een geschikte beschrijving is voor de generatie van de metingen gegeven de pseudometingen. M.a.w. indien het beeld gekend is (de schatting van het beeld gedurende die iteratie) dan corresponderen daarmee bepaalde verwachtingswaarden voor de metingen: de pseudometingen. De pseudometing impliceert een bepaalde gedaante van de directe waarschijnlijkheiddistributie voor de metingen. Met deze waarschijnlijkheidsdistributie wordt de waarschijnlijkheid van de werkelijke meting berekend. Splits nu de as met de waarde van de meting op in een aantal intervallen $I_{r,i}$, $r = 1, \ldots, R$, met i het beschouwde meetpunt. Het totaal aantal intervallen R is een keuze van de gebruiker. De keuze van de intervallen is zodanig dat de totale (directe) waarschijnlijkheid in elk interval voor de verschillende



Figuur 4.15 De invloed van het aantal tellen op de effectiviteit van de angulaire partitionering: (a) standaard-ML-EM algoritme voor het `DDC-fantoom` (sinogram met gemiddeld 400 tellen) (b) angulaire partitionering met 16 beginhoeken voor het `DDC-fantoom` (sinogram met gemiddeld 400 tellen) (c) standaard-ML-EM algoritme voor het `DDC-fantoom` (sinogram met gemiddeld 100 tellen) (d) angulaire partitionering met 16 beginhoeken voor het `DDC-fantoom` (sinogram met gemiddeld 100 tellen).

intervallen gelijk is:

$$\int_{I_{r,i}} bp(\boldsymbol{x} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ I)\ \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{I_{s,i}} bp(\boldsymbol{x} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ I)\ \mathrm{d}\boldsymbol{x}; \quad r,s = 1,\ldots,R. \tag{4.11}$$

De intervallen zijn zodanig gekozen dat bij de centrale intervallen (met $r \sim 1/2\ R$) de afwijking tussen de pseudometing en de werkelijke meting klein is. Grote afwijkingen treden op voor de intervallen waarvoor $r \sim 0$ en $r \sim R$. Voor elk meetpunt wordt de bovenstaande procedure herhaald. Voor alle meetpunten wordt het interval I_i waarin het terechtkomt gegeven de pseudometing berekend. Het histogram zet het aantal metingen dat in de verschillende intervallen terechtkomt uit in functie van de intervallen. Indien de Poissonhypothese geldt zal dit histogram vlak zijn. De afwijking van een vlak histogram wordt gemeten met een χ^2-waarde. Bij de eerste iteraties zullen de afwijkingen tussen metingen en pseudometingen groter zijn dan voorspeld door een Poissondistributie. Dit zal corresponderen met een histogram waarvan de uiterste vakken het meest bezet zijn. Naarmate de iteraties van het ML-EM-algoritme vorderen, blijkt dat dit histogram piekt voor de centrale waarden. Kleinere afwijkingen tussen meting en pseudometing komen dan frequenter voor dan grote afwijkingen.

Op een bepaald punt zal een optimum bereikt worden: het histogram zal dan bijna vlak zijn. Nadien zullen de pseudometingen te sterk overeenkomen met de werkelijke meting. Bij de laagste χ^2-waarde (het meest vlakke histogram) kan het algoritme gestopt worden.

In deze paragraaf wordt een stopcriterium opgesteld die gebaseerd is op een Bayesiaanse modeltoetsing. Deze test is ontworpen voor metingen zonder attenuatiefactoren en voor metingen waarbij de attenuatiefactoren verkregen worden via twee extra metingen: de transmissie- en emissie-meting.

4.4.2 Poissonmetingen zonder attenuatie

Het voorgestelde stopcriterium is gebaseerd op een Bayesiaanse modeltoetsing en zal op een alternatieve manier het verschil tussen meting en pseudometing controleren. De twee hypothesen die in de Bayesiaanse modeltoetsing vergeleken worden zijn:

1. H_p: de metingen worden gegenereerd uit de pseudometingen door een Poissonproces;

2. H_a: de metingen worden gegenereerd uit de pseudometingen door een alternatief proces, waarbij het alternatief proces een sterkere overeenkomst tussen meting en pseudometing vooropstelt.

Bijgevolg zal de modeltoetsing de alternatieve hypothese boven de Poissonhypothese verkiezen wanneer de metingen te sterk aanleunen bij de pseudometingen. Eenmaal dit gebeurt dient het iteratieproces gestopt te worden.

Alvorens een expliciete gedaante voor de alternatieve hypothese voor te stellen, zal eerst de formule afgeleid worden waarmee de modeltoetsing uitgevoerd wordt.

Een eenvoudige manier om een Bayesiaanse modeltoetsing te berekenen, bestaat erin het logaritme te nemen van de verhouding van de a posteriori waarschijnlijkheden van de verschillende hypothesen (zie b.v. bespreking over modeltoetsing in par. 3.8):

$$\gamma = \ln\left(\frac{bp(\, H_a \mid \mathbf{f}^{(n)}\ \mathbf{d}\ I)}{bp(\, H_p \mid \mathbf{f}^{(n)}\ \mathbf{d}\ I\,)}\right). \tag{4.12}$$

Wanneer de testparameter γ groter is dan nul, is de alternatieve hypothese H_a waarschijnlijker dan de Poissonhypothese H_p (gegeven de geobserveerde metingen $\mathbf{d}$ en de schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$).

Door het gebruik van het theorema van Bayes wordt de testparameter:

$$\gamma = \ln\left(\frac{bp(\, H_a \mid I\,)}{bp(\, H_p \mid I\,)}\right) + \ln\left(\frac{bp(\, \mathbf{f}^{(n)} \mid H_a\ I\,)}{bp(\, \mathbf{f}^{(n)} \mid H_p\ I\,)}\right) + \ln\left(\frac{bp(\, \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_a\ I\,)}{bp(\, \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_p\ I\,)}\right). \tag{4.13}$$

De eerste term in (4.13) is het logaritme van de waarschijnlijkheden van de a priori waarschijnlijkheden van de hypothesen. Deze term is niet afhankelijk van de metingen en blijft bijgevolg constant gedurende de iteraties. Deze verhouding zal nul gesteld worden. Dit betekent dat indien geen metingen geobserveerd werden, beide hypothesen even waarschijnlijk zijn. Voorts zal de waarschijnlijkheid van de schatting van het beeld niet afhangen van de generatiehypothese voor de metingen. Ook de tweede term uit (4.13) verdwijnt. De testparameter γ wordt bijgevolg gelijk aan de verhouding van de directe waarschijnlijkheden

$$\gamma = \ln\left(\frac{bp(\ \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_a\ I\ )}{bp(\ \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_p\ I)}\right). \tag{4.14}$$

Doordat de metingen voor de verschillende detectorparen zijn onafhankelijk (zie app. C) herleidt de testparameter zich tot de som van testparameters γ_i voor de individuele detectorparen:

$$\gamma = \sum_{i=0}^{M} \gamma_i, \tag{4.15}$$

met

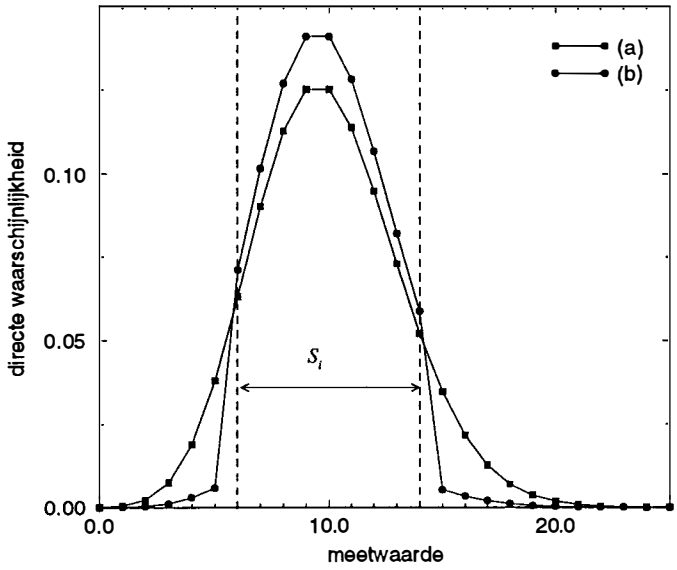
$$\gamma_i = \ln\left(\frac{bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_a\ I\ )}{bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_p\ I\ )}\right). \tag{4.16}$$

Deze verhouding kan eenvoudig berekend worden wanneer de alternatieve hypothese gespecifieerd wordt. De alternatieve hypothese veronderstelt een andere directe waarschijnlijkheid voor de metingen.

De alternatieve directe waarschijnlijkheid is voorgesteld in fig. 4.16 en houdt een verandering van de Poissondistributie in een geselecteerd gebied S_i in. De alternatieve distributie is ontworpen om een eenvoudige berekening van de testparameter γ toe te laten. Andere vormen voor de alternatieve hypothese kunnen onderzocht worden.

Voor de alternatieve distributie worden in een geselecteerd gebied S_i de waarschijnlijkheden van de Poissondistributie met een constante factor K vermenigvuldigd (zie fig. 4.16). Om de normering van de distributie te behouden moeten de waarschijnlijkheden buiten dat gebied met een andere constante factor vermenigvuldigd worden. De alternatieve distributie heeft bijgevolg twee parameters: de oppervlakte A_i van het geselecteerde gebied S_i en de vermenigvuldigingsfactor K. De gedaante van de alternatieve waarschijnlijkheidsdistributie is:

$$bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_a\ I\ ) = \begin{cases} K\ bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_p I); & d_i \in S_i \\ \left(\frac{1-K\ A}{1-A}\right)\ bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ H_p I); & d_i \notin S_i. \end{cases} \tag{4.17}$$



Figuur 4.16 De Poissondistributie (a) en de alternatieve distributie (b) voor $K = 1.12, A = 0.85$. De emissiesnelheid is 10 en het geselecteerde gebied S_i is aangeduid op de figuur.

Merk op dat de uitgestrektheid van S_i verandert met het beschouwde meetpunt wanneer de oppervlakte A constant blijft. De factor K is beperkt tot de waarden van het interval $[1, 1/A]$. Met deze alternatieve hypothese wordt de testparameter γ_i voor een bepaald detectorpaar:

$$\gamma_i = \begin{cases} \ln(K) & d_i \in S_i \\ \ln(\frac{1-\mathrm{K\ A}}{1-\mathrm{A}}) & d_i \notin S_i. \end{cases} \tag{4.18}$$

Bijgevolg is de testparameter γ gelijk aan

$$\gamma = L_1 \ln(K) + L_2 \ln(\frac{1-\mathrm{K\ A}}{1-\mathrm{A}}), \tag{4.19}$$

met L_1 het aantal meetpunten dat in het geselecteerde gebied valt en L_2 het aantal meetpunten dat buiten dat gebied valt. De eerste term uit (4.19) is steeds positief en de tweede term is steeds negatief. De interpretatie van (4.19) is eenvoudig: het algoritme zal stoppen wanneer het aantal meetpunten dat in het interval S_i valt groot is in vergelijking met het aantal meetpunten dat

buiten dat gebied terecht komt. De exacte waarde van de verhouding (L_1 / L_2) waarvoor de testparameter γ nul wordt, is bepaald door de grootte van het oppervlak A en de factor K.

Bij de volgende experimenten gelden de bijkomende vereenvoudigingen. Het geselecteerde gebied S_i is symmetrisch om de pseudomeetwaarde en de corresponderende totale waarschijnlijkheid van het interval S_i wordt berekend m.b.v. de Gaussapproximatie. Het is inderdaad bekend dat een Gaussdistributie een goede benadering van de Poissondistributie vormt wanneer voldoende tellen gedetecteerd zijn [Press89]. Voor de eenvoud wordt deze benadering nog steeds gebruikt wanneer een klein aantal tellen aanwezig zijn. Dit is niet juist, maar de resultaten zijn voldoende goed om deze benadering te rechtvaardigen.

4.4.3 Poisson data met attenuatiecorrectie

De voorgaande afleiding bevat geen onzekerheid in verband met de attenuatiecorrectie. De attenuatiecorrectie wordt verkregen door twee bijkomende metingen: de blanco-scan **bl** en de transmissie-scan **tr**. Beide metingen hebben last van Poissonruis. Hier wordt onderzocht of de invloed van de ruis op deze twee metingen kan geïncorporeerd worden in het stopcriterium. De attenuatiefactor wordt meestal berekend door de verhouding te nemen van de blanco- en transmissie-scan-waarden (met een meettijdcorrectie). In een dergelijke procedure wordt geen rekening gehouden met de ruis op de metingen. Bij de uitbreiding van de voorgestelde modeltoetsing wordt enigzins rekening gehouden met die ruis. In [Llace89] wordt een gelijkaardige uitbreiding voor de standaardtest gegeven waarbij de onzekerheid op de correctie van de detectorefficiënties onderzocht wordt.

Dezelfde twee hypothesen (H_p en H_a) zullen hier in de modeltoetsing beschouwd worden. Met het invoeren van de informatie I_a over de attenuatiefactor wordt de nieuwe testparameter γ_α:

$$\gamma_a = \ln\left(\frac{bp(\ \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ \mathbf{bl}\ \mathbf{tr}\ H_a\ I_a\ )}{bp(\ \mathbf{d} \mid \mathbf{f}^{(n)}\ \mathbf{bl}\ \mathbf{tr}\ H_p\ I_a\ )}\right). \tag{4.20}$$

Veronderstel opnieuw dat de metingen voor de verschillende detectorparen onafhankelijk zijn. De testparameter wordt dan berekend door de som:

$$\gamma_a = \sum_i \gamma_{a,i}, \tag{4.21}$$

waarbij de index i een bepaald detectorpaar aanduidt en

$$\gamma_{a,i} = \ln\left(\frac{bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ bl_i\ tr_i\ H_a\ I_a\ )}{bp(\ d_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ bl_i\ tr_i\ H_p\ I_a\ )}\right). \tag{4.22}$$

De attenuatiefactor a_i is hier een lastparameter. Deze parameter wordt verwijderd door de marginalisatieprocedure. De testparameter γ_a wordt bijgevolg

$$\gamma_{a,i} = \ln\left(\frac{\int_0^1 bp(\ d_i\ a_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ bl_i\ tr_i\ H_a\ I_a\ )\ \mathrm{d}a_i}{\int_0^1 bp(\ d_i\ a_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ bl_i\ tr_i\ H_p\ I_a\ )\ \mathrm{d}a_i}\right), \tag{4.23}$$

waarbij de integratie gaat over het volledige gebied waarin a_i gedefinieerd is, d.i. [0,1].

Definieer voor notationele eenvoud de functie Φ:

$$\Phi(a_i, H) = bp(\ d_i\ a_i \mid \mathbf{f}^{(n)}\ bl_i\ tr_i\ H I_a\ ), \tag{4.24}$$

waarbij H zowel de hypothese H_a als H_p kan voorstellen.

Het verschil tussen de Poissonhypothese en de alternatieve hypothese bestaat uit het bevoordelen van de directe waarschijnlijkheid in het geselecteerd gebied S_i. Indien de data d_i in dat geselecteerde gebied terecht komt, werd in de modeltoetsing uit de voorgaande paragraaf de alternatieve hypothese waarschijnlijker. De grenzen van het geselecteerde gebied werden gegeven door

$$\mid p_i - d_i \mid = \epsilon\ \sqrt{p_i}. \tag{4.25}$$

Hier bepaalt ϵ de grootte van het gebied S_i en het corresponderende oppervlak A onder de directe waarschijnlijkheidsdistributie. In de nieuwe modeltoetsing worden de grenzen van het gebied bepaald door

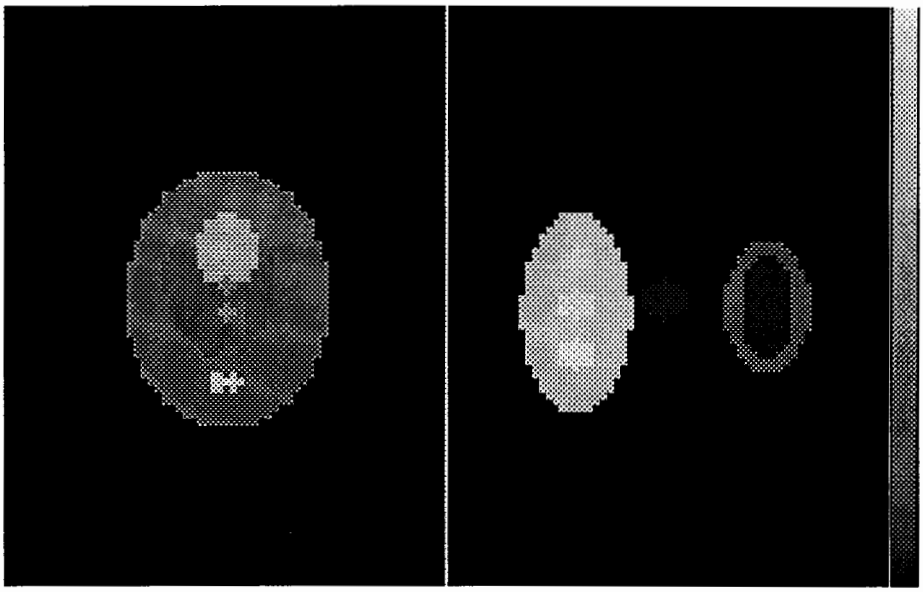
$$\mid a_i\ p_i - d_i \mid = \epsilon\ \sqrt{a_i p_i}, \tag{4.26}$$

waarbij a_i de attenuatiefactor voor een bepaald detectorpaar voorstelt en p_i de pseudometing voor dat detectorpaar zonder attenuatiecorrectie. Voor gegeven waarden van p_i en d_i zal er een volledige interval van waarden van de attenuatiefactor corresponderen met het gebied S_i. Het gebied van de attenuatiewaarden is begrensd door de waarden van α_i die een oplossing zijn van (4.26). Om de oplossing van deze vergelijking nog te vereenvoudigen wordt nog verondersteld dat $\sqrt{a_i p_i} \sim \sqrt{d_i}$, waardoor de oplossingen van (4.26) gegeven zijn door

$$a_{i,(1,2)} = \frac{d_i \mp \epsilon\sqrt{d_i}}{p_i} \tag{4.27}$$

De integralen uit (4.23) lopen over het interval [0,1]. Bijgevolg zal steeds een deel van die integratie het gebied $[a_{i,1}, a_{i,2}]$ bevatten. De integratie kan dan in het meest algemene geval in drie gesplitst worden:

$$\begin{aligned}\int_0^1 \Phi(a_i, H_a)\ \mathrm{d}a_i \quad &= \quad K \int_{a_{i,1}}^{a_{i,2}} \Phi(a_i, H_p)\ \mathrm{d}a_i + \\ &\frac{1 - K\ A}{1 - A}\left(\int_0^{a_{i,1}} + \int_{a_{i,2}}^1\right)\ \Phi(a_i, H_p)\ \mathrm{d}a_i. \end{aligned} \tag{4.28}$$



(a) (b)

Figuur 4.17 De configuraties van de twee fantomen: (a) *fantoom* 1 (a) *fantoom* 2

De testparameter wordt dus gegeven door

$$\gamma_{a,i} = \ln\left((K - \frac{1-K\ A}{1-A})\frac{\int_{a_{i,1}}^{a_{i,2}} \Phi(a_i, H_p)\mathrm{d}a_i}{\int_0^1 \Phi(a_i, H_p)\mathrm{d}a_i} + \frac{1-K\ A}{1-A}\right). \qquad (4.29)$$

Voor de analytische uitdrukking van $\Phi(a_i, H_p)$ wordt verwezen naar app. D. Het blijkt dat lage activiteiten een aparte behandeling vergen bij deze nieuwe modeltoetsing. Voor heel lage activiteiten werd de volgende (ad hoc) benadering gekozen. Indien de meting d_i of $\alpha_i\ p_i$ kleiner is dan één, wordt dit bepaald meetpunt ten gunste van de alternatieve hypothese gerekend indien aan de voorwaarde $\mid d_i - a_i\ p_i \mid < 1$ voldaan is. Dit resulteert in de extra term $\gamma_{a,i} = \ln(K)$ bij de berekening van γ_a.

4.4.4 Experimenten zonder attenuatiefactor

Het voorgestelde stopcriterium wordt getest op twee verschillende computergegenereerde fantomen. Beide fantomen worden in fig. 4.17 afgebeeld. Het eerste fantoom, *fantoom* 1, is een versie van het `SL-fantoom` [Kak88]. Het *fantoom* 2 is bij benadering het fantoom uit [Vekle87]. De fantomen zijn gedigitaliseerd op een 64 × 64 rooster. Van deze beelden werden dan sinogrammen met grootte 64 × 64 berekend. De intensiteitsniveaus van de fantomen wordt veranderd om verschillende gemiddelde waarden voor de projectiemetingen te

verkrijgen. De gebruikte gemiddelde intensiteiten voor het sinogram van b.v. *fantoom* 1 zijn 400, 200, 100, 40. Voor elk van deze intensiteiten wordt Poissonruis toegevoegd aan de metingen. De twee onderzochte foutcriteria zijn het *distError*- en het *scDist*-foutcriterium.

Voor de uitgevoerde experimenten worden goede resultaten verkregen met $K = 1.12$ en $A = 0.85$(dit is $\epsilon = 1.5$). Resultaten voor $K = 1.06, A = 0.9$ zullen ter illustratie ook weergegeven worden.

In fig. 4.18 wordt het nummer van de iteratie uitgezet waarvoor de verschillende stopcriteria een optimum detecteren in functie van het aantal tellen in het sinogram. Ook weergegeven in fig. 4.18 is de optimale iteratie volgens het *distError*- en het *scDist*-foutcriterium. Eerst kan er opgemerkt worden dat het benodigd aantal iteraties vergroot wanneer de gemiddelde intensiteit in de data toeneemt. Dit werd reeds eerder opgemerkt in [Floyd87].

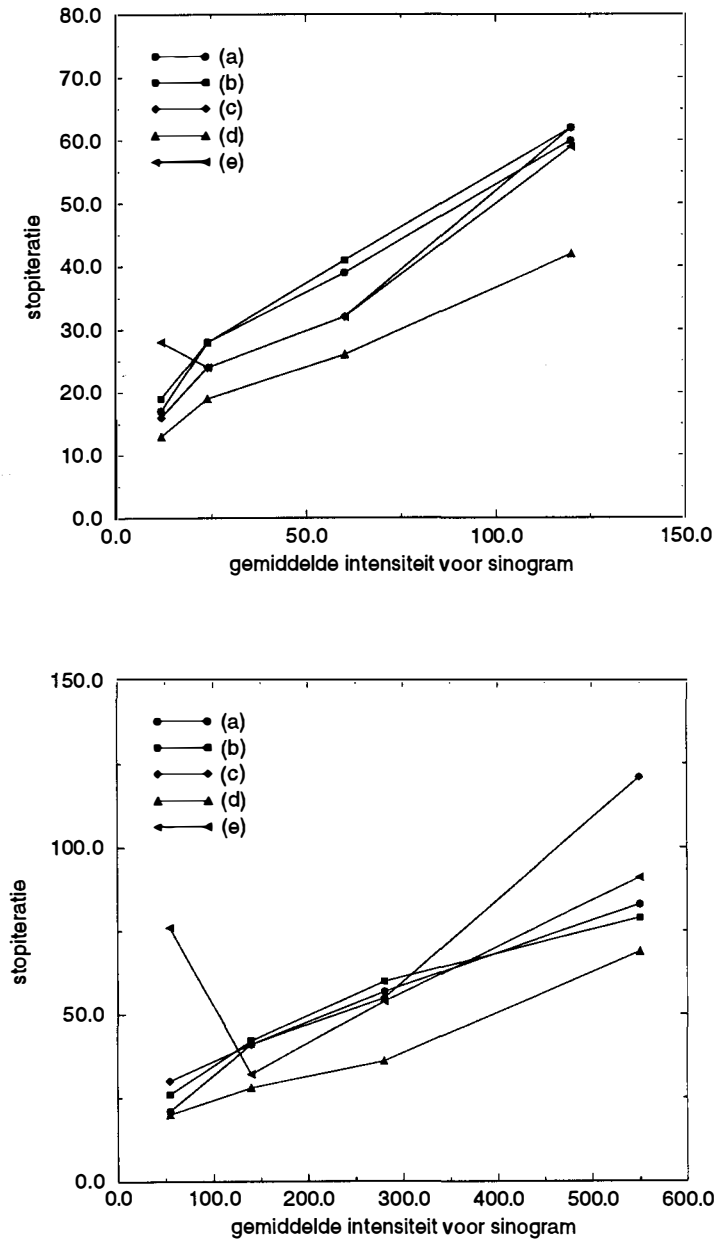
Bemerk ook dat het resultaat verschillend is voor de twee fantomen. Voor *fantoom* 1 treedt er een klein verschil op tussen de optimale iteraties volgens de modeltoetsingen en de foutcriteria. Voor *fantoom* 2 is er een goede overeenkomst tussen de optimale iteraties volgens de verschillende criteria voor de centrale intensiteiten. Bij dit experiment lijkt de Bayesiaanse modeltoetsing iets beter te presteren bij lage intensiteiten dan de χ^2-test. Bij hoge intensiteiten is de Bayesiaanse modeltoetsing slechter dan de χ^2-test. De Bayesiaanse modeltoetsing met $K = 1.06$ en $A = 0.9$ blijkt de iteraties systematisch iets te vroeg te stoppen. De evolutie van stopiteraties van beide modeltoetsingen is evenwel zinvol.

Reconstructies van *fantoom* 1 met gemiddelde intensiteit 400, zijn weergegeven in fig. 4.19. De modeltoetsing slaagt er duidelijk in om de iteraties te stoppen alvorens de ruisdegeneratie optreedt.

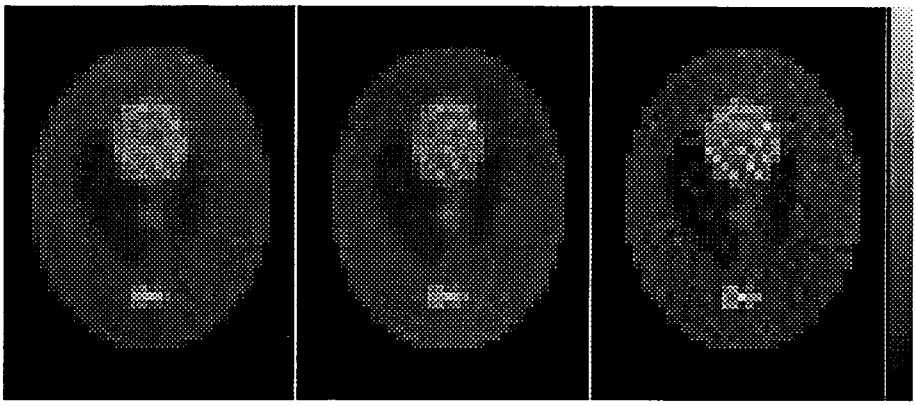
Alvorens verder gegaan wordt met de uitbreiding van de Bayesiaanse modeltoetsing met de attenuatiefactor kan hier opgemerkt worden dat de Bayesiaanse modeltoetsing bij de uitgevoerde experimenten en de gebruikte foutcriteria blijkbaar even goede resultaten oplevert als de klassieke χ^2-test. De Bayesiaanse modeltoetsing is evenwel eenvoudiger.

4.4.5 Experimenten met attenuatiefactor

Voor deze experimenten worden eveneens de fantomen uit de voorgaande paragraaf gebruikt. Nu moet er evenwel ook nog een attenuatie ingevoerd worden. De attenuatiefactor-configuratie is niet uniform en is weergegeven in fig. 4.20. Deze simulatie resulteert in drie datasets met ruis. In de experimenten kan elke dataset verschillende intensiteitsniveaus hebben. Deze intensiteitsniveaus worden van een etiket voorzien. De scan met etiket "0" heeft slechts de helft van de intensiteit van een scan met etiket "1". Een scan met etiket "1" heeft dan weer slechts de helft van de aktiviteit van een scan met etiket

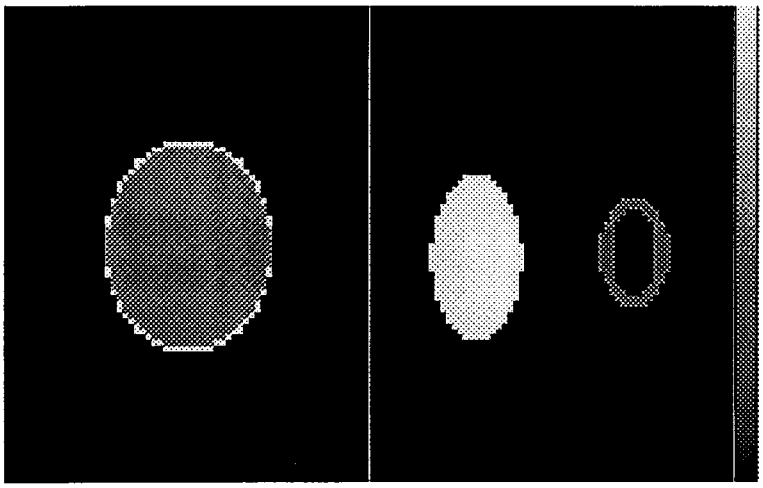


Figuur 4.18 Stopiteratienummers in functie van verschillende intensiteiten van het sinogram volgens verschillende criteria (a) *distError* (b) *scDist* (c) Bayesiaanse test $K = 1.12, A = 0.85$ (d) Bayesiaanse test $K = 1.06, A = 0.9$ (e) χ^2-test. De bovenste figuur correspondeert met *fantoom* 1 en de onderste figuur met *fantoom* 2.



(a) (b) (c)

Figuur 4.19 De reconstructies voor verschillende iteratienummers voor *fantoom* 1 met intensiteit 400: (a) 40 iteraties, optimaal volgens Bayesiaanse test met $K = 1.06, A = 0.9$ (b) 60 iteraties, optimaal volgens Bayesiaanse test met $K = 1.12, A = 0.85$, *scDist*, *distError* en de χ^2-test (c) 200 iteraties.



(a) (b)

Figuur 4.20 De configuraties van de attenuatiecoëfficënten: (a) *fantoom* 1 (b) *fantoom* 2.

Intensiteit	*distError*	*scDist*	Bayesiaanse test $K = 1.12, A = 0.85$	Bayesiaanse test $K = 1.06, A = 0.90$	χ^2
400	60	62	62	42	59
200	39	41	32	26	32
100	28	28	24	19	24
40	17	19	16	13	28

Tabel 4.3 Stopiteratienummerin functie van de het gemiddeld aantal tellen in het sinogram van *fantoom* 1.

fantoom 1		*fantoom* 2		
Blanco	**Transmissie**	**Emissie**	**Transmissie**	**Emissie**
125	100	12	100	100
250	200	24	230	200
500	370	60	450	400
		120		800

Tabel 4.4 Gemiddelde intensiteiten in de sinogrammen voor de twee fantomen.

"2". Een bepaald intensiteitschema wordt voorgesteld door "IS-BTE". Hierbij staan "B", "T" en "E" voor het etiket van respectievelijk de blanco-scan, de transmissie-scan en de emissie-scan. In tabel 4.4 zijn de onderzochte scan-intensiteiten weergegeven. Zo staat intensiteit "IS-012" voor *fantoom* 1 voor de intensiteiten: blanco-scan 125, transmissie-scan 200 en emissie-scan 60.

Enkele experimentele resultaten zijn terug te vinden in tabel 4.5. Uit deze tabel valt op te maken dat voor *fantoom* 1 de Bayesiaanse test dichter aanleunt bij het *scDist*-foutcriterium. Bij *fantoom* 2 is er een sterkere overeenkomst tussen de verschillende optimale iteraties. Een voorbeeld van de gerekonstrueerde beelden is weergegeven in fig. 4.21. Opnieuw is het duidelijk dat de Bayesiaanse modeltoetsing een evenwicht tracht te bereiken tussen de ruisdegeneratie en het terugvinden van belangrijke kenmerken van het beeld. Bij deze reconstructies zou geargumenteerd kunnen worden dat de iteratie te vroeg gestopt wordt.

4.4.6 Bespreking

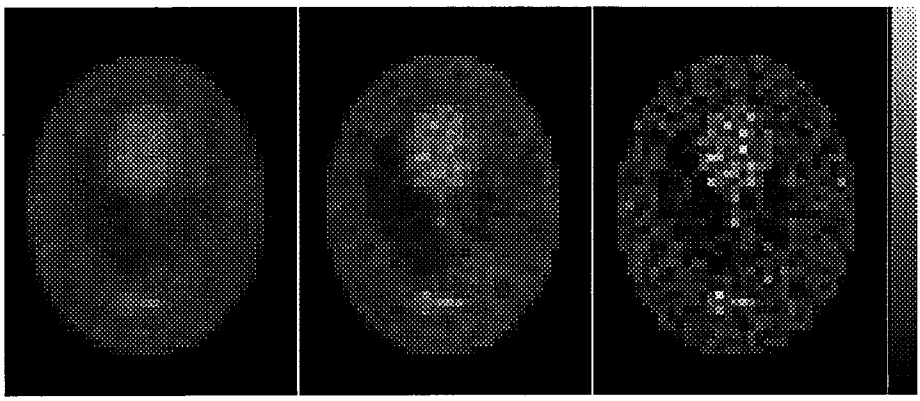
Bij de uitgevoerde experimenten vertoont de Bayesiaanse modeltoetsing een gelijkaardig gedrag als de klassieke test uit [Vekle87]. Bovendien is de implementatie van deze test gemakkelijk en is de interpretatie ervan eenvoudig. Verder kan de Bayesiaanse modeltoetsing uitgebreid worden om onzekerheden t.g.v. attenuatiefactor te includeren.

Met een geschikte keuze van de parameters (A, K) slaagt de Bayesiaanse modeltoetsing er blijkbaar in het ML-EM-algoritme te stoppen alvorens de

fantoom 1 **Intensiteitschema**	*distError*	*scDist*	**Bayesiaanse test** $K = 1.12, A = 0.85$	**Bayesiaanse test** $K = 1.06, A = 0.90$
IS-000	11	7	6	7
IS-111	15	7	7	8
IS-222	25	8	8	9
IS-220	14	8	7	7
IS-221	19	8	7	8
IS-222	25	8	8	9
IS-223	25	9	9	10

fantoom 2 **Intensiteitschema**	*distError*	*scDist*	**Bayesiaanse test** $K = 1.12, A = 0.85$	**Bayesiaanse test** $K = 1.06, A = 0.90$
IS-000	19	23	19	22
IS-111	27	34	24	28
IS-222	35	52	30	34
IS-220	35	36	19	21
IS-221	39	45	24	28
IS-222	35	52	30	34
IS-223	38	55	35	41

Tabel 4.5 Stopiteratienummer bij reconstructies met onzekerheid over de attenuatiecorrectie voor verschillende intensiteitschema's.



(a) (b) (c)

Figuur 4.21 Reconstructies voor IS-223: (a) bij 10 iteraties, optimaal volgens *scDist* en Bayesiaanse modeltoetsing (b) bij 25 iteraties, optimaal volgens *distError* (c) bij 100 iteraties.

ruisdegeneratie optreedt. Daarbij wordt een evenwicht gezocht tussen de ruisdegeneratie en de reconstructie van de belangrijkste kenmerken van het beeld. Ook bij de uitgebreide modeltoetsing wordt een overeenkomst met de optimale stopiteratie van het foutcriterium gevonden.

Deze test is evenwel al veel ingewikkelder. De bovenvermelde test blijkt nog niet te werken voor reële data. Bij reële metingen treden immers meer onzekerheden op. Zo zijn er b.v. de normalisatiecoëffiënten voor de verschillende detectoren.

Enkele ad hoc elementen van de bovenstaande modeltoetsing – de experimentele keuze van de parameters (A, K) en de keuze van de vorm van de alternatieve directe waarschijnlijkheidsdistributie – vormen belangrijke beperkingen van de voorgestelde test.

De laatste jaren werd evenwel een elegant stopcriterium uitgewerkt dat wel efficiënt werkt bij reële datasets [Coakl91], [Llace93]. Dit principe is gebaseerd op een kruiscorrelatie. Bij deze methode wordt de reconstructie van het ML-EM beeld uitgevoerd m.b.v. de helft van de metingen. De tweede helft van de metingen wordt als controleset gebruikt. In de iteraties van het ML-EM-algoritme zal de directe waarschijnlijkheid van de eerste dataset steeds toenemen. Ter controle wordt ook de directe waarschijnlijkheid van de tweede dataset onderzocht. De directe waarschijnlijkheid van de tweede dataset zal vanaf een bepaald iteratienummer verminderen. Dit is het teken om het iteratieproces te stoppen: vanaf dit ogenblik zal het beeld zich te sterk aanpassen aan de eerste dataset.

Het idee van het gebruik van een stopcriterium is op zichzelf controversieel. Soms wordt er beweerd dat het ML-EM-algoritme gewoon zo ver mogelijk doorlopen moet worden. In [Herma91] wordt aangetoond dat voor sommige criteria, zoals het detecteren van asymmetrieën van de tracerconcentratie voor beide hersenenhelften, het beter is om het ML-EM-algoritme verder te laten itereren.

4.5 Het berekenen van attenuatiefactoren met het ML-EM-algoritme

4.5.1 Theoretische beschouwingen

De attenuatiefactoren in de huidige scanners worden berekend door de metingen van de transmissie-scan **tr** en blanco-scan **bl** door elkaar te delen. Zoals vermeld in voorgaande paragraaf wordt bij deze procedure geen rekening gehouden met de ruis op de metingen. In het ML-EM-algoritme worden deze attenuatiefactoren gebruikt in de transfermatrix. Een verkeerde attenuatiefactor zal bijgevolg een foutieve transfermatrix tot gevolg hebben. Hierdoor wordt

het reconstructieproces bemoeilijkt. Hier volgt een methode die toelaat om de attenuatiefactoren beter te bepalen [Desme91d].

Bij de voorgestelde methode worden de attenuatiecoëfficiënten α_j berekend met het ML-EM-algoritme. De attenuatiecoëfficiënten geven de attenuatie voor de verschillende pixels weer. Het beeld van de attenuatiecoëfficiënten geeft de attenuatie in de verschillende delen van de patiënt en komt overeen met een beeld verkregen met een transmissie-scan uit X-stralentomografie. Deze attenuatiecoëfficiënten kunnen in attenuatiefactoren omgezet worden door een projectie. De berekende attenuatiefactoren kunnen dan in de transfermatrix gebruikt worden bij het ML-EM-algoritme.

Om de attenuatiefactoren α_j te berekenen worden de verwachtingswaarden voor de transmissie- en blanco-scan geschreven als

$$< tr_i >= s_i \exp\left(-\sum_j \Psi_{ij}\alpha_j\right) \tag{4.30}$$

$$< bl_i >= s_i, \tag{4.31}$$

waarbij s_i de transmissiebronactiviteit is voor de strook tussen het detectorpaar i en $\sum_j \Psi_{ij}\alpha_j$ de projectie van de attenuatiecoëfficiënten voor die strook voorstelt. Bijgevolg kunnen de attenuatiecoëfficiënten gevonden worden uit de vergelijkingen

$$\ln(\frac{< bl_i >}{< tr_i >}) = \sum_j \Psi_{ij}\alpha_j, \ i = 1, \ldots, M. \tag{4.32}$$

Veronderstel dat de verwachtingswaarden vervangen worden door de opgemeten waarden, dan wordt (4.32):

$$\ln(\frac{bl_i}{tr_i}) = \sum_j \Psi_{ij}\alpha_j, \ i = 1, \ldots, M. \tag{4.33}$$

De attenuatiecoëfficiënten kunnen uit deze vergelijkingen teruggevonden worden m.b.v. het ML-EM-algoritme.

Er zijn evenwel enkele theoretische nadelen verbonden aan deze methode:

1. de waarschijnlijkheidsdistributie voor de veranderlijke $\ln(bl_i/tr_i)$ is geen Poissondistributie;

2. het vervangen van de verwachtingswaarden uit (4.32) door de meetwaarden is niet correct.

Bijgevolg is het gebruik van het ML-EM-algoritme om een dergelijk probleem op te lossen niet volledig te verantwoorden. Maar zoals reeds aangeraakt werd in een vorige paragraaf tracht het ML-EM-algoritme een beeld te reconstrueren dat de metingen exact voorspelt. Het ML-EM-algoritme kan dus gebruikt

worden om een stelsel vergelijkingen op te lossen. Het Poissonkarakter van de metingen speelt tijdens het iteratief proces slechts een ondergeschikte rol.

Een praktisch nadeel van deze methode is dat de benodigde rekentijd voor één reconstructie ongeveer verdubbelt.

In de literatuur zijn nog andere methoden beschreven om de attenuatiefactoren beter te bepalen. De methode beschreven in [Ollin92] gebruikt bijna dezelfde strategie. Het beeld van de attenuatiecoëfficiënten wordt in het artikel echter berekend met een FB-methode. Een theoretisch beter gefundeerde ML-EM-reconstructie van de attenuatiecoëffiënten wordt gegeven in [Ollin94], [Lange87].

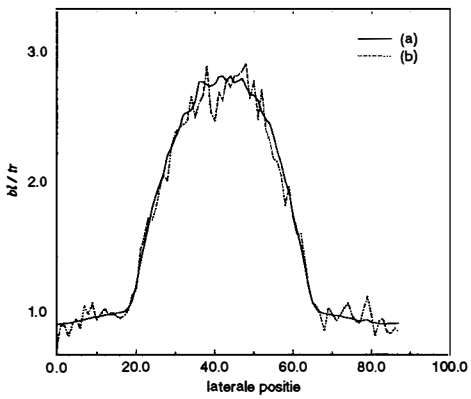
Een andere methode bestaat erin om uniforme attenuatiestructuren (zoals b.v. de longen) te detecteren. Aan de pixels waaruit een dergelijke structuur bestaat, wordt eenzelfde attenuatiecoëfficiënt toegekend. Hierdoor kan de ruis in de attenuatiefactoren sterk onderdrukt worden. Voor scans van het hoofd is het aantal benodigde structuren klein: de schedel en de hersenen (en de hoofdsteun). Voor scans van de romp zijn meer ingewikkelde structuren vereist. Het bepalen van de attenuatiestructuren kan gebeuren op een gereconstrueerd transmissiebeeld [Huang81] of op de metingen [Miche89], [Miche93], [Meikl93]. Ook worden methoden onderzocht om de attenuatiefactoren te berekenen aan de hand van alleen de emissiemeting. Een dergelijke methode zou het opmeten van de transmissie- en blanco-scan overbodig maken. Deze methode heeft dan een vermindering van de totale meettijd en de stralingsdosis tot gevolg, wat zowel voordelen voor de patiënt als de onderzoeksinstelling oplevert. Voor scans van het hoofd wordt dit gedaan in [Siege92]. Bij een andere interessante methode worden de emittorintensiteiten en de attenuatiecoëfficiënten gelijktijdig berekend [Clint91].

4.5.2 Experimenten en bespreking

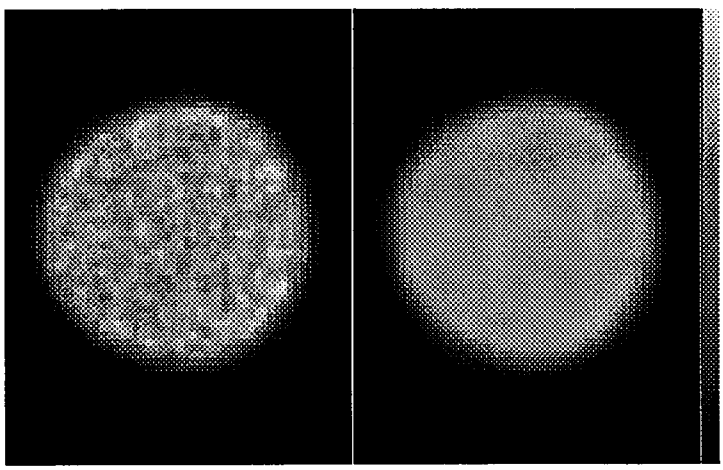
De experimenten worden uitgevoerd met echte scannermetingen. De scannermetingen zijn afkomstig van de ECAT IV scanner. Het doel van de experimenten is de kwaliteitsverbetering voor de reconstructies bij ML-EM-berekende attenuatiefactoren na te gaan [Desme91d]. Het ML-EM-algoritme wordt zowel voor de attenuatiecoëffiënten- als voor de emittorconcentratiereconstructie gestopt na de 10de iteratie. Bij de standaard berekening van de attenuatiecoëfficiënten wordt geen filter gebruikt.

Het eerste onderzochte object is een cilinder met uniforme activiteit. Het aantal tellen (in miljoenen) voor de verschillende metingen is: blanco-scan: 5.4, transmissie-scan 4.1 en emissie-scan 4.2.

In fig. 4.22 worden de attenuaties (bl/tr) voor een bepaalde projectielijn uitgezet. Het is duidelijk dat er in de attenuatiefactoren verkregen met het ML-EM-algoritme minder sprongen zijn. Merk op dat de rand van de cilinder

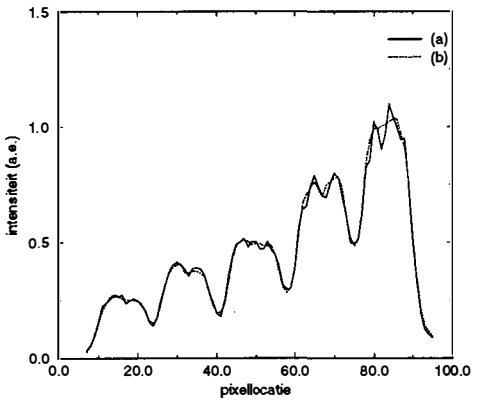


Figuur 4.22 De attenuaties bl/tr voor een horizontale lijn uit het sinogram van een cilinder: (a) ML-EM-berekende attenuatie (b) standaard berekende attenuatie.



(a) (b)

Figuur 4.23 De reconstructie van een uniforme cilinder (a) ML-EM-reconstructie met normale attenuatiecorrectie (b) ML-EM-reconstructie met ML-EM-attenuatiecorrectie.



Figuur 4.24 Een horizontale lijn van de reconstructies van de intensiteiten (in arbitraire eenheden (a.e.)) van het niet uniforme fantoom : (a) ML-EM-reconstructie met normale attenuatiecorrectie (b) ML-EM-reconstructie met ML-EM-attenuatiecorrectie.

nog steeds goed gelocaliseerd is in de ML-EM-gereconstrueerde attenuaties. In de volgende figuur (fig. 4.23) zijn de gereconstrueerde beelden weergegeven. Het is duidelijk dat het uniforme plateau van de cilinder veel beter gereconstrueerd wordt met de ML-EM-attenuatiecorrectie dan met de normale attenuatiecorrectie.

Het volgende voorbeeld is een niet-homogeen fantoom [VdBer89]. Het totaal aantal tellen (in miljoenen) voor de verschillende metingen is: blanco 9.7, transmissie 8.9 en emissie 0.5. Het fantoom heeft een totale lengte van 25 cm en bestaat uit vijf compartimenten. Elk compartiment is gevuld met water gemerkt met ^{66}Ga-EDTA. De activiteitsverhoudingen voor de verschillende compartimenten is 1:2:3:4:5. In de doorsnede van de reconstructie, zie fig. 4.24 is duidelijk te zien dat de wanden tussen de compartimenten even goed teruggevonden worden met de voorgestelde attenuatiecorrectie als met de klassieke attenuatiecorrectie. Er is echter een verbetering van de reproductie van de uniforme activiteitsverdeling in de verschillende compartimenten.

4.6 Besluit

Dit hoofdstuk behandelt enkele aanpassingen van het ML-EM-algoritme. Een eerste reeks veranderingen hebben de versnelling van het algoritme tot doel:

1. *parallelle implementatie*: door het programma op verschillende processoren (tot 4 processoren worden beschouwd) gelijktijdig uit te voeren, kan een

versnelling van het algoritme verkregen worden die vrijwel gelijk is aan het aantal gebruikte processoren;

2. *multirooster-reconstructie*: de versnelling die verkregen wordt met deze methode is afhankelijk van het gebruikte kwaliteitscriterium. Indien het iteratieproces gestopt wordt wanneer het *scDist*-foutcriterium een minimale waarde heeft, zal de versnelling verwaarloosbaar zijn. Na een gegeven reconstructietijd zal de multirooster-reconstructie steeds een betere *scDist*-waarde hebben dan de standaardreconstructie;

3. *reconstructies met partiële metingen*: door de reconstructie te beginnen tijdens het scanproces kan de uiteindelijke reconstructie sneller na het beëindigen van de meting beschikbaar zijn. Het blijkt dat het opsplitsen van de metingen geen kwaliteitsverlies met zich meebrengt. Het nut van een dergelijke methode is bij de huidige generatie scanners evenwel beperkt.

Het stopcriterium dat gebaseerd is op een Bayesiaanse modeltoetsing geeft een eenvoudig alternatief voor een vroegere test gebaseerd op klassieke statistische methoden. Het voordeel van deze test is zijn eenvoud. Bovendien is er een uitbreiding beschikbaar die ook de onzekerheden op de attenuatiecorrectie in rekening brengt.

Tenslotte wordt aangetoond dat de attenuatiefactoren ook berekend kunnen worden met het standaard-ML-EM-algoritme. Deze berekende attenuatiefactoren kunnen dan met goed gevolg gebruikt worden om de kwaliteit van de reconstructie van het emissiebeeld te verbeteren.

Hoofdstuk 5

De studie van maximalisatie-algoritmen

5.1 Inleiding

Het Bayesiaanse beeldreconstructieprobleem herleidt zich meestal tot de maximalisatie van een bepaalde functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$. Deze functie hangt af van de pixelwaarden $\mathbf{f}$ en de meetwaarden $\mathbf{d}$. In een Bayesiaanse context bepaalt de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van het beeld $\mathbf{f}$ gegeven de data $\mathbf{d}$ de gedaante van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$. De locatie van het maximum van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie kan ook gevonden worden door de maximalisatie van een monotoon-stijgend functie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. Bijgevolg kan de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ elke monotoon-stijgende functie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voorstellen. Doordat de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie een product is van een aantal distributies (die zelf dikwijls exponentiëlen zijn) is de meest evidente keuze voor deze monotone functie de logaritmische functie. Met deze functie wordt $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ geschreven als

$$Q(\mathbf{f}, \mathbf{d}) = Pri(\mathbf{f}) + Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}). \tag{5.1}$$

In de functie $Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ – het logaritme van de directe waarschijnlijkheidsdistributie – is dan de informatie aanwezig over de meetopstelling en de functie $Pri(\mathbf{f})$ – het logaritme van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie – bevat de a priori informatie over het beeld. Met een gekende gedaante van $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ bestaat de taak van het reconstructie-algoritme erin om het beeld $\hat{\mathbf{f}}$ te vinden dat de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ maximaliseert. Vermits het beeld bestaat uit N pixels, zal het extremum van de functie gelokaliseerd moeten worden in een N-dimensionale ruimte. In medische reconstructieproblemen bedraagt N enkele tienduizenden,

en het aantal metingen is van dezelfde grootte-orde. Hierdoor wordt de complexiteit van het maximalisatieproces enigszins duidelijk. Een goede inleiding tot verschillende maximalisatiemethoden wordt gegeven in [Press89].

De verschillende maximalisatiestrategieën die hier aan bod komen zijn:

1. *nulpunt-algoritmen*: bij deze algoritmen wordt de afgeleide van $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ voor de verschillende pixelintensiteiten berekend. De pixelintensiteiten waarvoor deze afgeleiden nul worden, geven dan de beste schatting voor het beeld $\hat{\mathbf{f}}$. Voorbeelden van dergelijke algoritmen zijn het ML-EM-algoritme en het Newton-Raphson-algoritme. Het ML-EM-algoritme is reeds uitgebreid aan bod gekomen (zie hoofdstuk 4). In par. 5.2 wordt het algoritme van Green behandeld. Dit algoritme is een aanpassing van het ML-EM-algoritme waarbij a priori informatie geïncorporeerd wordt;

2. *gradiënten-methoden*: het maximum voor de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ wordt onmiddellijk gezocht in een N-dimensionale ruimte. Voorbeelden van dergelijke algoritmen zijn het gradiënten- en het toegevoegde-gradiëntenalgoritme;

3. *gesimuleerd-uitgloeien*: deze methode is uiterst geschikt om het extremum te vinden van grillige functies $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$. Denk hierbij vooral aan functies met meerdere maxima;

4. *rij-methoden*: deze algoritmen wijken enigszins af van de andere algoritmen uit dit hoofdstuk. Bij rij-methoden wordt een stelsel vergelijkingen opgelost. Bij beeldreconstructie drukt elke vergelijking uit dat het aantal coïncidenties voor een bepaalde projectiestrook gelijk is aan de opgemeten waarde. Omdat deze vergelijkingen niet noodzakelijk een unieke oplossing hebben, moet een bijkomend criterium ingevoerd worden om toch een enkele oplossing voor te stellen. In dit hoofdstuk zal het criterium bestaan uit de maximalisatie van de entropie van het beeld.

Merk op dat al deze methoden iteratief zijn: uitgaande van een bepaalde schatting wordt een nieuwe schatting voor het beeld gevonden. Deze procedure wordt herhaald totdat een stopcriterium bereikt is.

In dit hoofdstuk wordt de snelheid en het convergentiegedrag van de verschillende algoritmen bestudeerd. Een verhoogde convergentiesnelheid is belangrijk om het dagelijks gebruik van statistische reconstructies te bevorderen. Het is evenwel niet evident dat een ingewikkeld algoritme noodzakelijk sneller convergeert (zowel wat de rekentijd als het aantal iteratiestappen betreft) dan een eenvoudig algoritme zoals het ML-EM-algoritme. Het gecompliceerd algoritme vereist immers meer rekentijd voor een enkele iteratiestap. Hierdoor kan het maximum effectief in minder iteraties bereikt worden, maar de benodigde rekentijd hoeft niet af te nemen. Door de studie van het convergentiegedrag

kan b.v. duidelijk worden dat bepaalde eigenschappen van de tracerconcentratie, zoals scherpe overgangen, op een efficiënte manier gereconstrueerd worden door een bepaald algoritme.

In medische beeldreconstructie wordt dikwijls verondersteld dat de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ slechts één maximum heeft. Dit vereenvoudigt aanzienlijk de theoretische benadering van het reconstructieprobleem. De snelheid van de algoritmen wordt bijna steeds bepaald door het aantal projectie/terugprojectie-operaties. Het aantal (volledige) projectie/terugprojectie-operaties verminderen om eenzelfde beeldkwaliteit te verkrijgen is het doel van veel van de beschreven algoritmen. Een uitzondering op vorige punten – het eisen van een enkel maximum voor de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ en de poging om het maximum zo snel mogelijk te bereiken – wordt gevormd door gesimuleerd-uitgloeien.

Naast de algoritmen uit dit hoofdstuk zijn nog veel andere iteratieve schema's denkbaar. Zie hiervoor b.v. [Gullb88], [Zhuan87], [Burr89], [Pleti84], [DeBac88].

Vanuit het Bayesiaanse standpunt is het vinden van het extremum van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ niet de juiste benadering van het probleem. Het doel in het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen is immers de studie van de volledige a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. Indien de gedaante van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie gekend is, kan met een (nog te specifiëren) verliesfunctie het optimaal beeld geselecteerd worden. In een N-dimensionale ruimte is een dergelijke studie evenwel bijna uitgesloten. Een poging om de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie in een hoogdimensionale ruimte te onderzoeken wordt ondernomen door Skilling en wordt uitgebreid besproken in par. 6.5.4.

Dit hoofdstuk bestudeert de werking van de verschillende maximalisatie-algoritmen. In [Desme91c] wordt een uitgebreidere bespreking gegeven. Bij de theoretische beschrijving kan a priori informatie aanwezig zijn. De vorm van de a priori informatie (gecodeerd in $Pri(\mathbf{f})$) vormt het onderwerp van hoofdstuk 6. Voor de experimenten uit dit hoofdstuk wordt de a priori informatie verwijderd: de algoritmen maximaliseren enkel de directe waarschijnlijkheid. Een uitzondering wordt gevormd door de rij-methoden. Bij deze algoritmen is de entropie van het beeld inherent aan het algoritme. De reconstructies van de verschillende algoritmen worden vergeleken met de reconstructies van het ML-EM-algoritme.

5.2 Nulpunt-algoritmen

Bij de nulpunt-algoritmen wordt de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ afgeleid naar de verschillende pixelintensiteiten. Om het maximum van deze functie te vinden, moet

het stelsel vergelijkingen

$$\frac{\partial Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})}{\partial f_i} = 0, \; i = 1, \ldots, N, \tag{5.2}$$

opgelost worden. Een toepassing van een Newton-Raphson methode om dit probleem in het kader van medische tomografie op te lossen wordt gegeven in [Fried72]. Maar tegenwoordig wordt dit algoritme niet meer vermeld in de literatuur. De meeste aandacht gaat naar het ML-EM-algoritme en de andere algoritmen uit dit hoofdstuk.

Het ML-EM-algoritme werd reeds uitgebreid besproken in het voorgaande hoofdstuk. Het wordt hier bij de nulpunt-algoritmen gerekend omdat bij de afleiding ook een stelsel vergelijkingen opgelost wordt. Dit stelsel vergelijkingen volgt niet onmiddellijk uit de directe waarschijnlijkheid (zie par. 4.2.1). Een belangrijke beperking van het ML-EM-algoritme is dat enkel de directe waarschijnlijkheidsdistributie (die bestaat uit het product van onafhankelijke Poissondistributies) gemaximaliseerd wordt. Het algoritme heeft de vorm

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Psi^T 1_M} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \mathbf{f}^{(n)}. \tag{5.3}$$

Door het grote succes van het ML-EM-algoritme worden uitbreidingen ervan sterk gestimuleerd. Green past het ML-EM-algoritme aan zodat ook a priori informatie geïncludeerd wordt [Green90]. Het iteratief schema wordt in dit geval

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Psi^T 1_M - \nabla Pri(\mathbf{f}^{(n+1)})} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \mathbf{f}^{(n)}. \tag{5.4}$$

Het enige verschil tussen de vergelijkingen (5.4) en (5.3) is de supplementaire term $\nabla Pri(\mathbf{f}^{(n+1)})$ in de noemer van de eerste term. Natuurlijk is het uitrekenen van die term onmogelijk omdat $\mathbf{f}^{(n+1)}$ niet gekend is. Green lost dit probleem op door $\mathbf{f}^{(n+1)}$ gewoon te vervangen door het huidige beeld: $\mathbf{f}^{(n)}$. Deze procedure staat bekend als de "one-step-late"-procedure. Het gebruikte iteratief schema is bijgevolg

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \frac{1}{\Psi^T 1_M - \nabla Pri(\mathbf{f}^{(n)})} \Psi^T \left(\frac{\mathbf{d}}{\Psi \mathbf{f}^{(n)}} \right) \mathbf{f}^{(n)}. \tag{5.5}$$

De convergentie van dit algoritme werd niet bewezen en Fessler merkt op dat dit algoritme soms instabiel wordt [Fessl94]. In het volgende hoofdstuk wordt dit algoritme gebruikt om verschillende a priori waarschijnlijkheidsdistributies voor de beelden te testen. De implementatie van dit algoritme is heel eenvoudig, vooral indien een ML-EM-algoritme reeds beschikbaar is.

5.3 Gradiënten-methoden

Het localiseren van een extremum in een N-dimensionale ruimte wordt algemeen eenvoudiger geacht dan het vinden van een nulpunt in een N-dimensionale ruimte [Press89]. Inderdaad, indien de functie met slechts één extremum gemaximaliseerd moet worden, volstaat het dat een nieuwe schatting $\mathbf{f}^{(n+1)}$ van het beeld een hogere waarde voor de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ heeft dan de huidige schatting $\mathbf{f}^{(n)}$:

$$Q(\mathbf{f}^{(n+1)}, \mathbf{d}) > Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d}). \tag{5.6}$$

Opeenvolgende schattingen moeten uiteindelijk naar het maximum van de functie leiden.

In deze paragraaf worden twee methoden besproken die trachten informatie uit de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ te gebruiken. De informatie bestaat uit de afgeleiden van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ in de voorlopige schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$ en kan toelaten om het maximum efficiënter te vinden. De twee beschreven methoden zijn het gradiëntenalgoritme en het toegevoegde-gradiëntenalgoritme. Een uitgebreidere beschrijving van beide methoden is te vinden in [Press89], [Desme91c].

Eerst worden enkele theoretische beschouwingen gegeven. Dan wordt de praktische implementatie, gebaseerd op het werk van Djafari [Djafa89], besproken.

5.3.1 Het gradiëntenalgoritme

Veronderstel een bepaalde schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$. Hoe wordt de volgende schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n+1)}$ bepaald? De bedoeling van het gradiëntenalgoritme is eerst een rechte, $\mathbf{h}^{(n)}$, vast te leggen die de verbindingslijn tussen de huidige en nieuwe schatting voorstelt. Langs die rechte wordt dan een stap τ genomen zodat de nieuwe schatting, $\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \tau\, \mathbf{h}^{(n)}$, de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ maximaliseert langs die rechte.

De rechte waarlangs gemaximaliseerd wordt, is in de gradiënten-methode de gradiënt van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ bij de huidige schatting $\mathbf{f}^{(n)}$. De gradiënt van de functie in het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$ is gegeven door

$$\nabla Q = \{\frac{\partial Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d})}{\partial f_i};\ i = 1, \ldots, N\}. \tag{5.7}$$

De gradiënten-methoden uit deze paragraaf (zowel het gradiënten- als het toegevoegde-gradiëntenalgoritme) verschillen van de "normale" gradiënten- methoden uit b.v. [Press89] en [Pina93], doordat langs een bepaalde rechte slechts één welbepaalde stap genomen wordt. In [Press89] wordt na het vastleggen van de zoekrechte het extremum op die rechte meestal bepaald met een iteratief algoritme waarbij vele opeenvolgende schattingen van het beeld vereist zijn. Omdat elke nieuwe schatting een groot aantal berekeningen (typisch een projectie

en terugprojectie) vereist, is deze procedure niet bruikbaar voor tomografische reconstructie. Bij tomografische reconstructie wordt het aantal projectie- en/of terugprojectie-operaties best zo veel mogelijk beperkt.

Nu de zoekrechte gespecificeerd is, moet de grootte van de stap τ bepaald worden. De nieuwe schatting zal zich bevinden op

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} - \tau \, \nabla Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d}). \tag{5.8}$$

Door de Taylorreeksontwikkeling te nemen in de nieuwe schatting kan τ berekend worden:

$$Q(\mathbf{f}^{(n)} - \tau \nabla Q^{(n)}) \approx Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d}) - \tau \sum_i \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_i} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_i} + \frac{1}{2}\tau^2 \sum_{i,j} \frac{\partial^2 Q^{(n)}}{\partial f_i \partial f_j} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_i} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_j}, \tag{5.9}$$

waarbij $Q^{(n)} = Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d})$. Opdat $\mathbf{f}^{(n+1)}$ de functie Q maximaliseert in de richting $\nabla Q^{(n)}$, is het voldoende dat de afgeleide naar τ in de nieuwe schatting nul wordt. Door afleiding naar τ van (5.9) blijkt dat het maximum bereikt wordt voor

$$\tau = \sum_i \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_i} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_i} \left(\sum_{k,l} \frac{\partial^2 Q^{(n)}}{\partial f_k \partial f_l} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_k} \frac{\partial Q^{(n)}}{\partial f_l} \right)^{-1}. \tag{5.10}$$

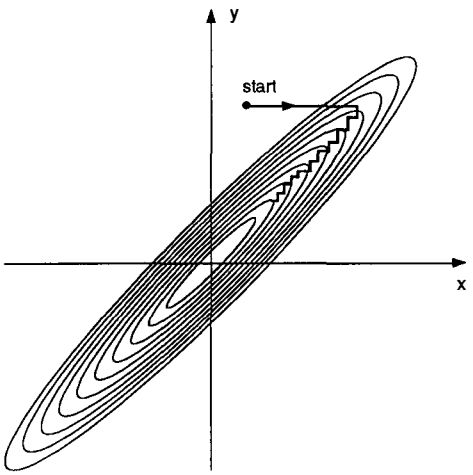
Hierdoor zijn alle elementen verenigd voor een implementatie van het algoritme. In par. 5.3.3 worden meer implementatiedetails gegeven. Eén van de eerste toepassingen van het gradiëntenalgoritme voor tomografische reconstructies is te vinden in [Werne77].

5.3.2 Het toegevoegde-gradiëntenalgoritme

Er is evenwel een belangrijk nadeel verbonden aan het gradiëntenalgoritme uit voorgaande paragraaf. Voor bepaalde vormen van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ zal het gradiëntenalgoritme te veel werk verrichten bij het localiseren van het maximum. Ter illustratie wordt in fig. 5.1 een dergelijke functie in een tweedimensionale ruimte voorgesteld. Typisch aan de voorgestelde functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ is dat de afgeleide in een bepaalde richting veel groter is dan in de andere richtingen.

Het probleem treedt op doordat na het vinden van een schatting langs een bepaalde rechte, de volgende gradiënt in de nieuwe schatting loodrecht moet staan op de voorgaande zoekrechte. Bij een ongelukkige initiële schatting moet het algoritme veel kleine stappen nemen, zigzaggend langs de richting met de grootste afgeleide, om uiteindelijk het maximum te bereiken.

Het toegevoegde-gradiëntenalgoritme tracht dit te vermijden. Daartoe wordt de informatie over de voorgaande zoekrechten bijgehouden. In het ideale geval zal het toegevoegde-gradiëntenalgoritme het maximum van de functie lokaliseren na hoogstens N schattingen.



Figuur 5.1 De evolutie van de maximalisatie van het gradiëntenalgoritme voor een functie met een grote gradiënt in één bepaalde richting. Het initiële beeld bevindt zich bij "start".

Vermits N in medische problemen enkele tienduizenden bedraagt, is het ondenkbaar om het volledig proces te doorlopen. Bovendien wordt bij het toegevoegde- gradiëntenalgoritme de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ benaderd door een kwadratische functie (zie hiervoor b.v. de bepaling van de grootte van de stap in een bepaalde richting). Hierdoor vervalt zelfs de garantie om het maximum te bereiken na N iteraties.

Er kan aangetoond worden dat de set van richtingen $\mathbf{h}^{(n)}$ een set toegevoegde functies is indien [Press89]:

$$\mathbf{h}^{(n+1)} = \mathbf{g}^{(n+1)} + \delta^{(n)}\, \mathbf{h}^{(n)}, \tag{5.11}$$

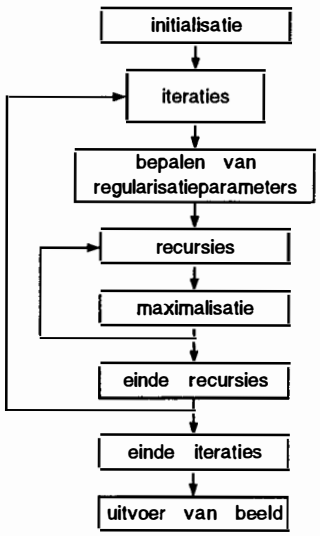
met

$$\delta^{(n)} = \frac{(\mathbf{g}^{(n+1)} - \mathbf{g}^{(n)})^t\ \mathbf{g}^{(n+1)}}{\mathbf{g}^{(n)^t}\ \mathbf{g}^{(n)}}. \tag{5.12}$$

Hierbij stelt $\mathbf{g}^{(n)}$ minus de gradiënt in de n-de schatting voor:

$$\mathbf{g}^{(n)} = -\nabla Q(\mathbf{f}^{(n)}, \mathbf{d}). \tag{5.13}$$

Door de richtingen $\mathbf{h}^{(n)}$ te gebruiken in de verschillende iteraties kan het gradiënten-programma omgezet worden naar een toegevoegde-gradiëntenalgo-



Figuur 5.2 Het iteratief schema voor het gradiënten- en toegevoegde-gradiëntenalgoritme.

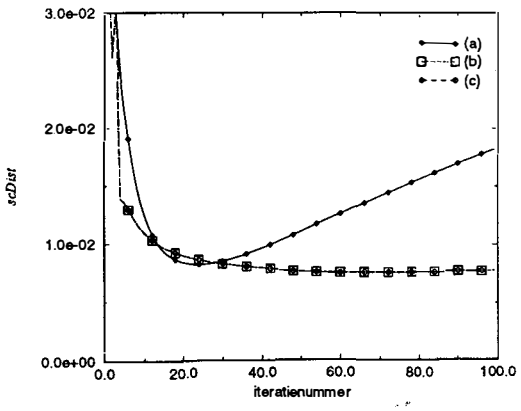
ritme. Het berekenen van de stapgrootte gebeurt op een analoge manier als (5.10), maar voor de toegevoegde richtingen.

5.3.3 De praktische implementatie

Het gebruikte programma steunt op de implementatie van Djafari [Djafa89]. Het oorspronkelijk programma is geschreven voor Matlab. Het programma is omgezet naar C, aangepast voor Poissonruis en tomografische reconstructies.

Het programma maakt gebruik van een dubbele lus (zie fig. 5.2): de iteraties en de recursies. Elke iteratie bevat een aantal recursies. Tijdens de recursies blijven alle regularisatieparameters (parameters in de a priori waarschijnlijkheidsdistributie, zie hoofdstuk 6) constant. Het totaal aantal maximalisatiestappen van het algoritme is bijgevolg gelijk aan (aantal iteraties) $\times$ (aantal recursies).

De benaderingen kunnen tot gevolg hebben dat op het einde van een maximalisatiestap in een bepaalde richting, de nieuwe schatting geen hogere waarde voor $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ bereikt. Nochtans zal deze nieuwe schatting toch aanvaard worden. Een dergelijke "misstap" kan er immers voor zorgen dat een lokaal maximum verlaten wordt. Om te vermijden dat het algoritme zich ook van een globaal maximum verwijdert, wordt het totaal aantal opeenvolgende "verkeerde" stap-



Figuur 5.3 De evolutie van het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer of aantal maximalisatiestappen voor (a) het ML-EM-algoritme; (b) het gradiëntenalgoritme; (c) het toegevoegde-gradiëntenalgoritme. Het gebruikte fantoom is het `DDC-fantoom` met intensiteit 100.

pen beperkt.

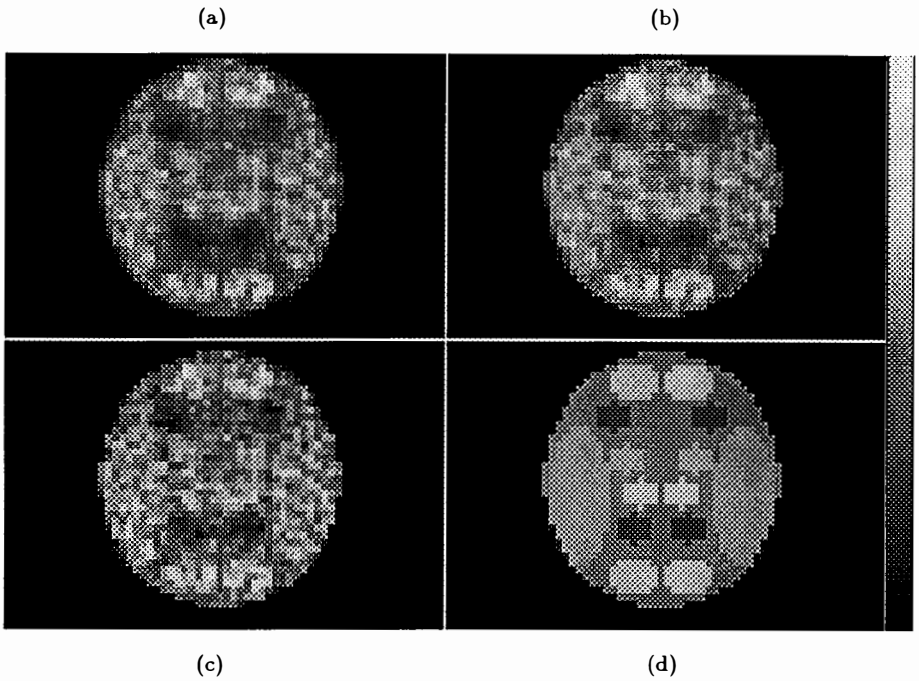
In de vergelijkingen (5.14) worden de functie $Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ en zijn afgeleiden gegeven voor een directe waarschijnlijkheidsdistributie afkomstig van het product van onafhankelijke Poissondistributies.

$$\begin{aligned} Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}) &= \sum_{i=1}^{M} \left(-\sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j + d_i \ln(\sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j) - \ln d_i! \right) \\ \frac{\partial Lik}{\partial f_k} &= \sum_{i=1}^{M} \left(-\Psi_{ik} + d_i \frac{\Psi_{ik}}{\sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j} \right) \\ \frac{\partial^2 Lik}{\partial f_k \partial f_l} &= -\sum_{i=1}^{M} d_i \Psi_{ik} \Psi_{il} (\sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j)^{-2} \end{aligned} \tag{5.14}$$

Hieruit is het duidelijk dat bij de bepaling van de zoekrechte en de stapgrootte extra projectie/terugprojecties vereist zijn. In het algoritme van Djafari heeft dit tot gevolg dat een enkele recursie ongeveer vier maal meer CPU-tijd gebruikt dan één iteratie van het ML-EM-algoritme.

5.3.4 Experimenten en bespreking

In fig. 5.3 wordt de evolutie van het *scDist*-foutcriterium uitgezet in functie van het iteratienummer voor het `DDC-fantoom` met gemiddelde intensiteit 100



Figuur 5.4 Reconstructies van het `DDC-fantoom` met gemiddelde intensiteit 100 in de projecties: (a) het gradiëntenalgoritme (100 maximalisatiestappen); (b) het toegevoegde-gradiëntenalgoritme (100 maximalisatiestappen); (c) het standaard-ML-EM-algoritme (100 iteraties); (d) het referentiebeeld.

in de projecties. De verschillende curven corresponderen met het gradiëntenalgoritme, het toegevoegde-gradiëntenalgoritme en het standaard-ML-EM-algoritme. Bij deze experimenten treedt slechts een miniem verschil op tussen de curven van het gradiëntenalgoritme en het toegevoegde- gradiëntenalgoritme. Bovendien lijkt het ML-EM-algoritme sneller een minimum voor het *scDist*-foutcriterium te bereiken. Dit minimum wordt evenwel ook sneller verlaten. De minimaal bereikte waarde is wel iets lager voor de gradiënten-methode. Bedenk dat een enkele iteratie in een gradiënten-methode ongeveer vier maal zoveel CPU-tijd nodig heeft als een iteratie van het ML-EM-algoritme. Bijgevolg zal op een tijdschaal het minimum in de *scDist*-curve veel later optreden bij de gradiënten-methoden. Gelijkaardige opmerkingen gelden ook voor experimenten met andere intensiteitsniveaus.

In fig. 5.4 worden enkele reconstructies gegeven. De reconstructies met het standaard-ML-EM-algoritme lijken gevoeliger te zijn voor de ruis.

5.4 De MART

5.4.1 Theoretische achtergrond

De Multiplicatieve Algebraïsche Reconstructie Techniek (Multiplicative Algebraic Reconstruction Technique), MART, heeft een andere benadering om het reconstructieprobleem op te lossen. Bij de overige technieken uit dit hoofdstuk wordt steeds een functie (die in relatie staat tot de a posteriori waarschijnlijkheid van het beeld gegeven de metingen) gemaximaliseerd. Bij MART ligt de nadruk op het bepalen van de oplossing van een stelsel vergelijkingen. Deze vergelijkingen komen overeen met de metingen van de scanner. In het ruisloos geval zal het beeld $\mathbf{f}$ gezocht worden dat een oplossing van het stelsel vergelijkingen

$$\Psi \mathbf{f} = \mathbf{d} \tag{5.15}$$

oplevert.

Dit komt overeen met een matrixinversie. Reeds vele algoritmen werden voorgesteld om dergelijke problemen op te lossen, zie b.v. [Barre94].

De oplossingsmethode uit deze paragraaf is evenwel gebaseerd op de "methode van projecties". De projectie uit de methode van Kacsmarz wordt hier de algebraïsche projectie genoemd, en is verschillend van de projectie van de scanner. Een algebraïsche projectie zorgt ervoor dat aan een bepaalde vergelijking van het stelsel (5.15) voldaan wordt. Indien b.v. van een initiële schatting $\mathbf{f}^{(0)}$ vertrokken wordt, zal de eerste algebraïsche projectie ervoor zorgen dat de nieuwe schatting $\mathbf{f}^{(1)}$ aan de eerste vergelijking van het stelsel (5.15) voldoet. Bij de volgende algebraïsche projectie zal de nieuwe schatting $\mathbf{f}^{(2)}$ aan een andere vergelijking voldoen. Merk op dat de nieuwe schatting $\mathbf{f}^{(2)}$ nu niet meer aan de eerste vergelijking hoeft te voldoen. Een projectie stemt overeen met de projectie op een $(N-1)$-dimensionaal hypervlak in de N-dimensionale ruimte van de beelden.

Door herhaalde algebraïsche projecties uit te voeren zal een schatting voor het beeld gereconstrueerd worden die aan alle vergelijkingen voldoet. Tanabe [Tanab77] heeft aangetoond dat voor een stelsel met een unieke oplossing, de methode van projecties naar die oplossing convergeert.

De convergentiesnelheid van het algoritme kan vergroot worden, door een geschikte opeenvolging van de algebraïsche projecties. Elke vergelijking legt immers bepaalde beperkingen op aan het beeld. Het is mogelijk dat twee vergelijkingen bijna dezelfde beperking opleggen. Dit is b.v. het geval voor vergelijkingen die corresponderen met scannerprojecties op ongeveer dezelfde plaats voor slechts weinig verschillende projectierichtingen. Doordat de schatting van het beeld reeds voldoet aan de beperkingen voor de eerste projectierichting, zal een kleine aanpassing van het beeld volstaan om aan de beperkingen voor de volgende projectierichting te voldoen. Bijgevolg zal een trage convergentie

optreden. Door de geschikte keuze van de verschillende algebraïsche projecties (een evidente keuze is opeenvolgingen van algebraïsche projecties die corresponderen met loodrechte scannerprojecties) zal de convergentie sterk toenemen [Ramak79].

De voorgaande methoden zijn voorbeelden van de Algebraïsche Reconstructie Techniek (ART). Het algemeen iteratief schema voor deze technieken is:

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \mathbf{c}^{(n)}. \tag{5.16}$$

Hierbij zal de verandering voor het beeld $\mathbf{c}^{(n)}$ ervoor zorgen dat de algebraïsche projectie uitgevoerd wordt.

Veel variaties op de voorgaande methode zijn denkbaar [Kak88]. Een belangrijke optie is de introductie van een relaxatieparameter ω. De relaxatieparameter verandert de grootte van de additieve term uit (5.16) waardoor de nieuwe schatting wordt:

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \omega\ \mathbf{c}^{(n)},\ 0 < \omega < 1. \tag{5.17}$$

Door de relaxatieparameter kleiner dan één te kiezen, wordt vermeden dat het beeld te sterk wordt aangepast aan een enkele vergelijking. Een te sterke aanpassing zou dan door andere algebraïsche projecties toch hersteld moeten worden, waardoor de convergentie vertraagd wordt.

Een andere mogelijkheid bestaat erin om met de aanpassing van het beeld te wachten totdat een aantal algebraïsche projecties verricht werden: Simultaneous Iterative Reconstruction Technique (SIRT). De SIRT kan op zijn beurt aangepast worden zodat aanpassingen voor centrale pixels belangrijker worden dan de aanpassingen voor randpixels.

Een veralgemeend schema voor algebraïsche reconstructietechnieken wordt gegeven in [Censo87]. Verschillende sequenties voor de opeenvolgende projecties worden ook gegeven in [Censo81].

De MART verschilt van de ART doordat naast het oplossen van een stelsel ook nog een functie gemaximaliseerd wordt. Het kan immers gebeuren dat het stelsel vergelijking (5.15) geen oplossing of zelfs meerdere oplossingen bezit. In dit geval kan toch een enkele oplossing gevonden worden door het bijkomend criterium: de "oplossing" maximaliseert een bepaalde functie. Indien deze functie een Bregmanfunctie is [Censo87], dan volstaat een kleine aanpassing van het normale ART algoritme om MART te bekomen. Voorbeelden van Bregmanfuncties zijn:

$$bf_1(\mathbf{f}) = \frac{1}{2}\sqrt{\sum_j x_j^2} \tag{5.18}$$

$$bf_2(\mathbf{f}) = -\sum_j x_j \ln x_j \tag{5.19}$$

$$bf_3(\mathbf{f}) = \sum_j \ln x_j, \tag{5.20}$$

waarbij x_j de genormeerde pixelintensiteit is:

$$x_j = \frac{f_j}{\sum_{i=1}^{N} f_i} \tag{5.21}$$

De eerste functie bf_1 is een norm van het beeld. De tweede functie bf_2 komt overeen met de Shannon-entropie van het beeld en de laatste uitdrukking is de Burg-entropie van het beeld. In deze paragraaf zal enkel de Shannon-entropie aan bod komen. Het iteratief schema voor bf_2 wordt [Censo90]:

$$f_j^{(n+1)} = \exp(B\Psi_{ij}) f_j^{(n)}, \tag{5.22}$$

met

$$B = \ln\left(\frac{d_i}{\sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j^{(n)}}\right). \tag{5.23}$$

Dit iteratief schema vormt een vereenvoudigde versie van het ML-EM-algoritme. Het is dan ook niet verwonderlijk dat de geordende-subsetmethode (besproken in par. 4.3.3) verwant is met MART.

Het bewijs van convergentie van deze methode wordt gegeven in [Censo90]. Voor een uitgebreidere bespreking zie o.a. [Dusau88], [Desme91a]. Uit deze overzichten blijkt dat de methode ook uitgebreid kan worden om onzekerheden in de metingen te includeren. Voor details over de praktische implementatie wordt verwezen naar [VdWyn92] en [Janin93].

Er bestaan een aantal recente publicatie die trachten het nut van MART voor medische reconstructies aan te tonen [Herma93].

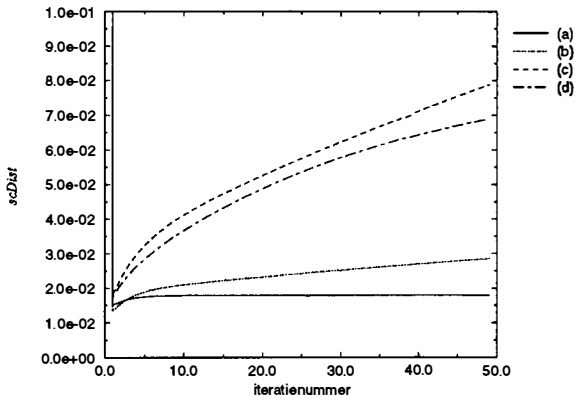
5.4.2 Experimenten en bespreking

De experimenten worden uitgevoerd met behulp van het `DDC-fantoom` gedigitaliseerd op een 64×64-rooster. Het MART-algoritme is geïmplementeerd met de Shannon-entropie als Bregmannfunctie.

De studie richt zich vooral op de invloed van het aantal projectiehoeken en het ruisniveau op de kwaliteit van de reconstructie. (Het beperken van het aantal projecties is belangrijk voor sommige industriële toepassingen.) De experimenten worden uitgevoerd met MART waarbij zo veel mogelijk loodrechte richtingen in opeenvolging genomen worden.

Eén enkele iteratie bij MART komt overeen met het eenmaal doorlopen van alle projectiehoeken. Een dergelijke iteratie heeft bijgevolg bijna evenveel berekeningen nodig als een standaard-ML-EM-iteratie.

In fig. 5.5 wordt de invloed getoond van het aantal projectiehoeken op de kwaliteit van de reconstructie (*scDist*-foutcriterium). Bemerk dat voor alle

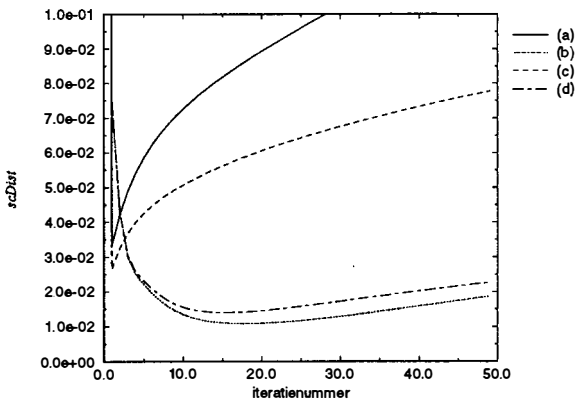


Figuur 5.5 Het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor MART-reconstructies van het `DDC-fantoom` met intensiteit 200 voor een verschillend aantal projectiehoeken:(a) 8 projectiehoeken; (b) 16 projectiehoeken; (c) 32 projectiehoeken; (d) 64 projectiehoeken.

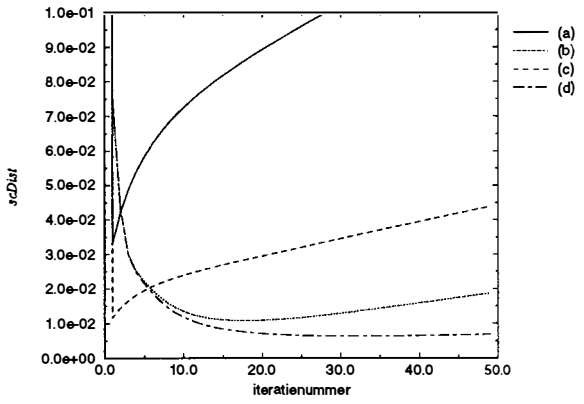
hoeken de laagste *scDist*-waarde bereikt wordt na de eerste iteratie. Dit suggereert dat het iteratief proces reeds gestopt kan worden na de eerste iteratie. Vanaf de tweede iteratie treedt er reeds een deterioratie van het gereconstrueerde beeld op. Opmerkelijk hierbij is dat de deterioratie het kleinst is bij het kleinste aantal projectiehoeken. Dit kan een gevolg zijn van de aanpassingsprocedure van het algoritme. Door slechts in een beperkt aantal richtingen te projecteren, zijn de mogelijke aanpassingen voor het beeld ook beperkt. Blijkbaar zijn bij een klein aantal projectierichtingen de aanpassingsmogelijkheden voor het beeld vrij snel opgebruikt. Naarmate het aantal meethoeken toeneemt, stijgt de helling van de *scDist*-curve in functie van het iteratienummer. Deze tendens wordt evenwel omgekeerd bij de overgang van 32 projectiehoeken naar 64 projectiehoeken. Blijkbaar wordt het dan wel mogelijk om de informatie in de metingen te incorporeren in de reconstructie.

In fig. 5.6 wordt de evolutie van het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor MART vergeleken met de resultaten van het ML-EM-algoritme. Het ML-EM-algoritme bereikt duidelijk een betere *scDist*-waarde. Bij het ML-EM-algoritme gedragen de *scDist*-curven zich zoals intuïtief verwacht wordt: bij een stijgend aantal projectiehoeken zal de *scDist*-waarde verlagen.

In fig. 5.7 wordt de invloed van het intensiteitsniveau (en bijgevolg ook het ruisniveau) op de evolutie van de *scDist*-curven getoond. Zoals verwacht, verbetert de kwaliteit van de reconstructie als de ruisinhoud in de projecties



Figuur 5.6 Het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor MART- en ML-EM-reconstructies voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 400 voor:(a) MART met 32 projectiehoeken; (b) ML-EM met 32 projectiehoeken; (c) MART met 16 projectiehoeken; (d) ML-EM met 16 projectiehoeken.



Figuur 5.7 Het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor MART- en ML-EM-reconstructies voor:(a) MART met 32 projectiehoeken voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 100; (b) ML-EM met 32 projectiehoeken voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 100; (c) MART met 32 projectiehoeken voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 400; (d) ML-EM met 32 projectiehoeken voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 400.

afneemt. Dit geldt zowel voor MART als voor het ML-EM-algoritme. De gevoeligheid voor de ruisverhoging lijkt evenwel bij MART groter te zijn.

In fig. 5.8 worden de reconstructies van het ML-EM-algoritme na 100 iteraties vergeleken met de reconstructies van de MART na één iteratie voor een verschillend aantal projectiehoeken. Indien slechts 8 projectiehoeken gebruikt worden, is de reconstructie van de MART duidelijk van minder visuele kwaliteit dan de reconstructie van het ML-EM-algoritme. Naarmate evenwel meer projectiehoeken beschouwd worden, vermindert het kwaliteitsverschil. Bij 64 projectiehoeken is het kwaliteitsverschil al niet meer waarneembaar. De reconstructietijd voor de MART-beelden na één iteratie is wel beduidend lager dan de reconstructietijd voor de ML-EM-reconstructies.

5.5 Gesimuleerd-uitgloeien

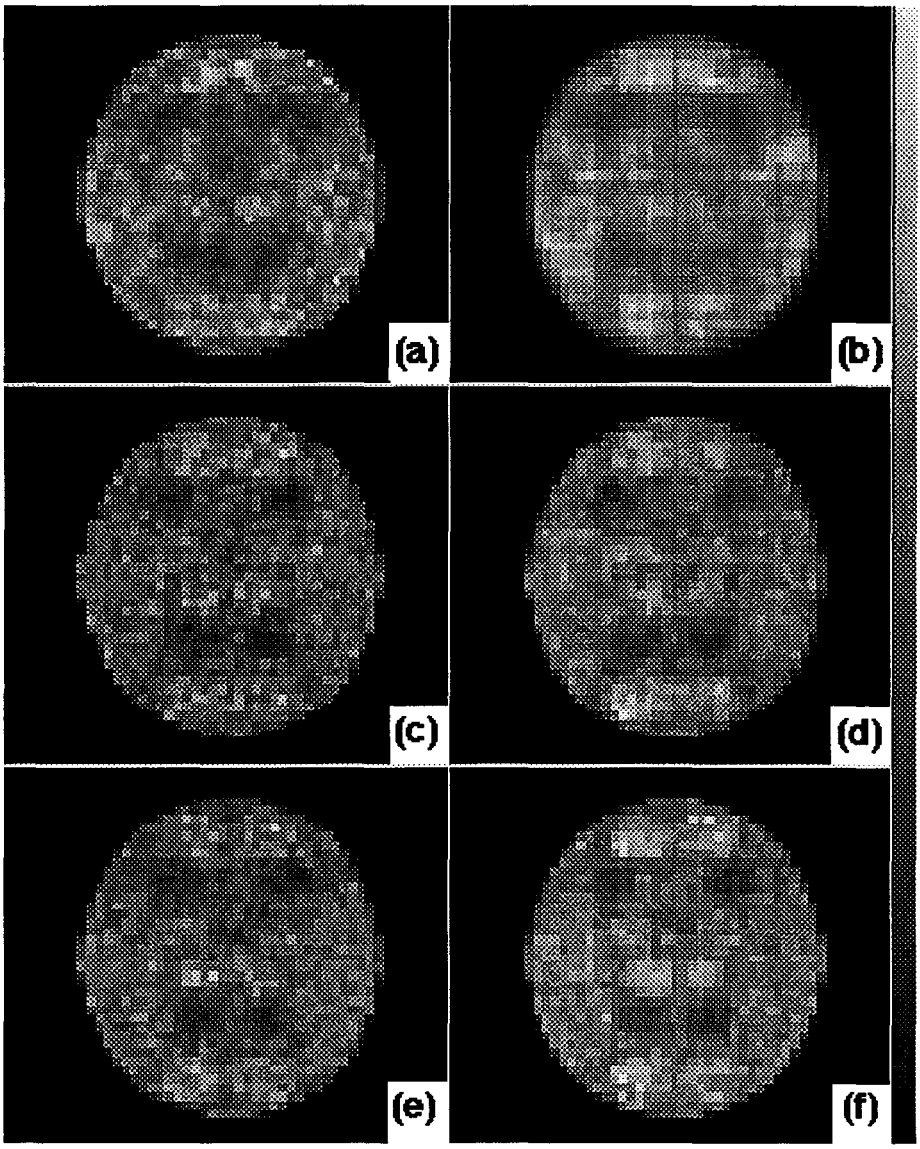
5.5.1 Theoretische achtergrond

Het doel van de voorgaande algoritmen bestaat erin zo snel mogelijk het maximum van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ te bereiken. Dit heeft tot gevolg dat de algoritmen in lokale extrema kunnen terechtkomen en deze niet meer verlaten. Bij b.v. een gradiënten-methode is dit evident omdat de nieuwe schatting steeds een hogere waarde voor de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ moet hebben. (De gebruikte implementaties van de gradiënten-methoden laten evenwel in een beperkte mate een verlaging van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ toe.) Opdat een algoritme zich van lokale maxima kan verwijderen, is het bijna noodzakelijk dat een tijdelijke verlaging van de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ toegestaan wordt. Gesimuleerd-uitgloeien ("simulated annealing") heeft deze mogelijkheid tot verlaging ingebouwd.

Gesimuleerd-uitgloeien is gebaseerd op een principe uit de statistische mechanica [VanLa87], [Kirkp83], [Sunde92]. De waarschijnlijkheid dat een systeem een energie E heeft bij de temperatuur T, wordt gegeven door de Boltzmandistributie:

$$bp(E) \propto \exp(-\frac{E}{kT}). \tag{5.24}$$

De constante van Boltzman k geeft de relatie tussen temperatuur en energie. Deze formule werd het eerst gebruikt voor numerieke maximalisatie van functies in [Metro53]. In deze context wordt de energie meestal aangeduid als de winstfunctie. In het algoritme wordt een "toevallige" verandering, transitie, van het systeem voorgesteld. Een transitie zal steeds aanvaard worden indien ze een verhoging van de winstfunctie tot gevolg heeft. Indien het nieuwe systeem een lagere waarde voor de winstfunctie heeft dan het huidige systeem, bestaat er toch nog een kans dat de overgang naar het nieuwe systeem doorgaat. Deze kans κ hangt af van het verschil in winstfunctie tussen de twee systemen en de



Figuur 5.8 Reconstructies voor het ML-EM-algoritme na 100 iteraties en het MART-algoritme na de eerste volledige iteratie voor het `DDC-fantoom` met intensiteit 400 voor een verschillend aantal hoeken: (a) ML-EM-reconstructie met 8 hoeken; (b) MART-reconstructie met 8 hoeken; (c) ML-EM-reconstructie met 32 hoeken; (d) MART-reconstructie met 32 hoeken; (e) ML-EM-reconstructie met 64 hoeken; (f) MART-reconstructie met 64 hoeken.

heersende "temperatuur"

$$\kappa = \exp(-\frac{E^{(n)} - E^{(n+1)}}{kT}). \tag{5.25}$$

De kans κ dat een transitie naar een systeem met lagere winstfunctie-waarde aanvaard wordt, daalt exponentieel met het verschil tussen de winstfunctie-waarden van twee systemen. Door de temperatuur te variëren kan de aanvaardingswaarschijnlijkheid van de toegelaten dalingen van de winstfunctie-waarden veranderen. Hoge temperaturen laten transities tussen sterk verschillende winstfunctie-waarden toe. Bij lagere temperaturen hebben enkel de overgangen tussen beelden met weinig verschillende winstfunctie-waarden een redelijke waarschijnlijkheid van optreden. Door in de eerste iteraties de temperatuur hoog te nemen en de temperatuur voldoende traag te laten afnemen, kunnen lokale maxima vermeden worden. Tijdens het iteratief proces zal de temperatuur langzaam afnemen. Hierdoor zullen bepaalde overgangen geleidelijk quasi-onmogelijk worden. Deze methode kan toelaten om een globaal maximum te bereiken van een functie die ook nog een aantal lokale maxima heeft.

In medische beeldreconstructie correspondeert het systeem met een voorlopige schatting van het beeld $\mathbf{f}^{(n)}$ en de energie E komt overeen met de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ die gemaximaliseerd wordt.

Voor een praktische implementatie zijn de volgende punten belangrijk:

1. de vorm van de winstfunctie;
2. het temperatuursverloop;
3. het transitiemechanisme tussen opeenvolgende beelden;
4. het aantal iteraties.

De vorm van de winstfunctie kan bepalen of gesimuleerd-uitgloeien zinvol is. Gesimuleerd-uitgloeien is het meest geschikt voor de maximalisatie van functies met één omvangrijk globaal maximum en een aantal kleinere (in volume) lokale maxima [VanMa93].

Voor de maximalisatie van de directe waarschijnlijkheidsdistributie in PET lijkt gesimuleerd-uitgloeien niet noodzakelijk: algemeen wordt aanvaard dat de de directe waarschijnlijkheidsdistributie slechts één maximum heeft. De studie van het algoritme kan evenwel interessante convergentie-eigenschappen opleveren. Zo zal de manier waarop gesimuleerd-uitgloeien het maximum van de directe waarschijnlijkheid benadert, verschillen van de andere maximalisatie-algoritmen. Maar de voornaamste reden waarom gesimuleerd-uitgloeien interessant kan worden voor beeldreconstructie is de mogelijkheid om ingewikkelde a priori waarschijnlijkheidsdistributies (zoals b.v. in het standaardartikel van

[Geman84]) te includeren. In deze paragraaf zal evenwel gesimuleerd-uitgloeien enkel gebruikt worden voor de maximalisatie van de directe waarschijnlijkheidsdistributie.

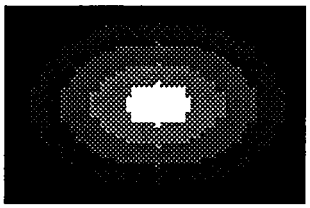
Een tweede belangrijke parameter is de temperatuur. Wat is de begintemperatuur en hoe snel verandert de temperatuur? Voor de starttemperatuur wordt de temperatuur gekozen waarbij ongeveer 80% van de voorgestelde negatieve veranderingen aanvaard worden [VanLa87]. De temperatuursverandering treedt op wanneer de veranderingen van de winstfuncties tijdens de laatste iteraties niet voldoende groot meer zijn [Sunde92]. De verandering van temperatuur wordt b.v. gegeven door

$$T^{(n+1)} = \eta\, T^{(n)}. \tag{5.26}$$

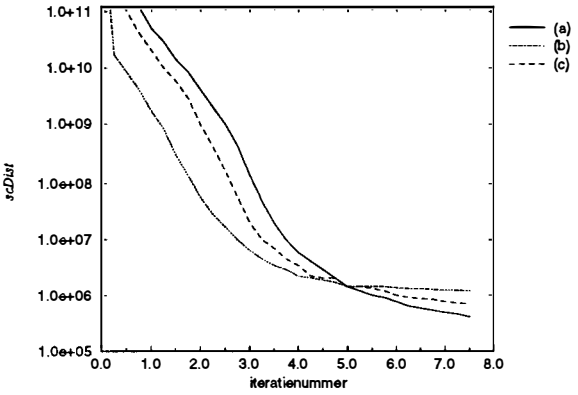
De invloed van de parameter η zal experimenteel onderzocht worden.

Een ander belangrijk aspect is het vastleggen van de transitiemogelijkheden tussen opeenvolgende beelden. In het kader van dit werk worden drie transitiemechanismen onderzocht: de Pixelwaarde-VeranderingsMethode (PVM) de Pixelwaarde-TransferMethode (PTM), Pixelwaarde-Verandering-Transfer-Methode (PVTM). De eerste twee methoden zijn voorgesteld in [Usten91]. Bij de eerste methode (PVM) wordt door een toevalsproces een bepaalde verandering voor de pixelwaarde gekozen. Dit gebeurt door met een uniforme distributie een waarde te selecteren uit een interval $[-g, g]$. Dan wordt, opnieuw door een toevalsproces, een pixellocatie gekozen. Hierbij heeft elke pixel in de huidige implementatie dezelfde waarschijnlijk om op te treden. De invloed van deze overgang op de winstfunctie bepaalt de aanvaarding van de voorgestelde transitie. Bij de tweede methode (PTM) wordt eveneens een bepaalde hoeveelheid pixelintensiteit door een toevalsproces gekozen. Nu worden echter twee pixellocaties door het lot aangewezen. De transitie bestaat erin om de pixelintensiteit tussen de pixellocaties uit te wisselen. De laatste methode (PVTM) is een combinatie van beide voorgaande methoden. Bij PVTM wordt eerst door een toevalsproces bepaald welke methode, PTM of PVM, toegepast zal worden. Beide transitiemechanismen hebben dezelfde kans om op te treden bij dit toevalsproces. Eenmaal de transitiemethode geselecteerd is, wordt de iteratie normaal doorlopen.

Een iteratie in gesimuleerd-uitgloeien bestaat uit het onderzoek van een aanvaardbare transitie. Voor PVM is dit verandering van een enkele pixel waarbij de intensiteit (na verandering) groter dan nul is. In een iteratie wordt dan nagegaan wat de invloed van de transitie op de winstfunctie is en of deze transitie aanvaard wordt. De convergentie van het algoritme wordt bestudeerd door het algoritme een ruim aantal iteraties (enkele miljoenen) te laten doorlopen. Stopcriteria zoals voorgesteld in par. 4.4 kunnen eventueel toegepast worden.



Figuur 5.9 Het **ES-fantoom** bestaat uit een aantal concentrische cirkels met toenemende activiteit.



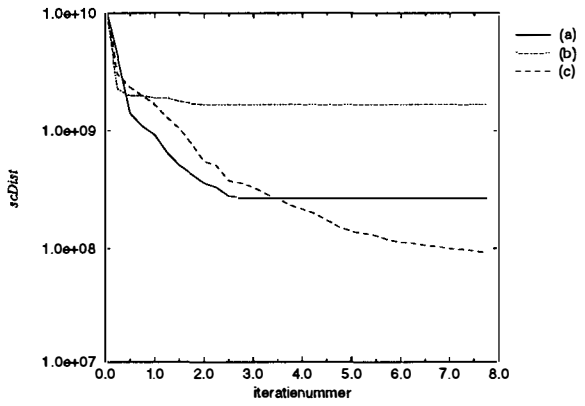
Figuur 5.10 De evolutie van het *distError*-foutcriterium in functie van het iteratienummer in miljoenen voor verschillende transfermechanismen: (a) PVM (b) PTM (c) PVTM.

5.5.2 Experimenten en bespreking

De experimenten worden verricht met het **ES-fantoom** uit fig. 5.9. Dit fantoom is gediscretiseerd op een 40×40 rooster en het aantal projecties is eveneens 40×40.

In fig. 5.10 wordt de evolutie van het *distError*-foutcriterium in functie van het iteratienummer gegeven voor verschillende transitiemechanismen. In de eerste iteraties is de PTM beter dan de PVTM, die op zijn beurt beter is dan de PVM. Maar in dit stadium van de iteraties is de fout nog zo groot dat deze volgorde van weinig belang is. In de latere iteraties wordt de PVM de optimale methode. In de volgende experimenten zal de PVM gebruikt worden.

Een optimalisatie van de PVM bestaat erin de grootte van de pixelveranderingen te variëren tijdens de iteraties. In de eerste iteraties zullen grote veranderingen van pixelintensiteiten nuttig zijn. In de latere iteraties zullen de

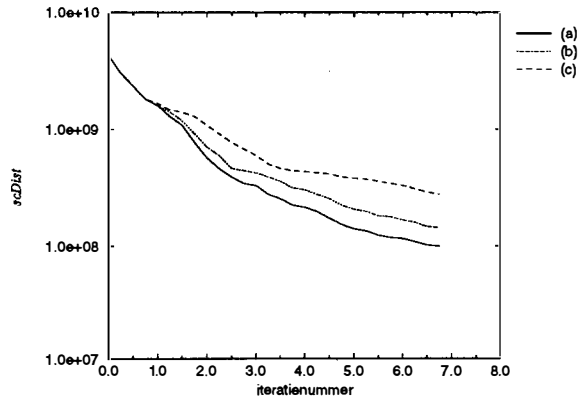


Figuur 5.11 De evolutie van het $distError$-foutcriterium in functie van het iteratienummer in miljoenen voor verschillende grootten van toegelaten veranderingen $[0, g]$: (a) [0,100], (b) [0, 1000], (c) veranderlijk.

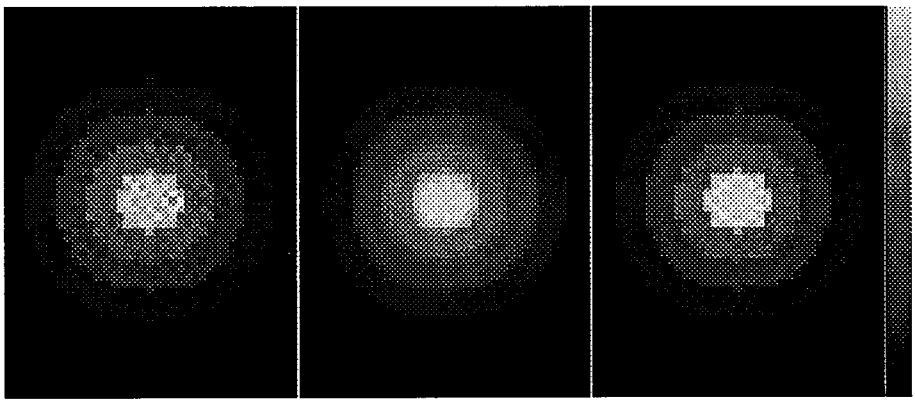
zinvolle veranderingen steeds kleiner worden. In de voorgestelde optimalisatie varieert de grootte van de toegestane veranderingen in functie van de iteraties. Indien de gemiddelde aanvaarde absolute verandering tijdens de voorgaande iteraties $g^{(n)}$ was, dan zal bij de volgende iteraties de verandering gekozen worden uit het interval $[-2\ g^{(n)}, 2\ g^{(n)}]$ Uit fig. 5.11 blijkt dat de fout van de reconstructie het sterkst gereduceerd kan worden door de grootte van de pixelveranderingen variabel te houden. Een constante grootte van toegelaten verandering zorgt ervoor dat gedurende de eerste iteraties snel naar de oplossing geconvergeerd wordt. Maar na een aantal iteraties zullen de verbeteringen van het beeld nog slechts sporadisch optreden.

De curven uit fig. 5.12 geven de invloed weer van de koelingsparameter η. Van de geteste koelingsparameters blijkt $\eta = 0.85$ de beste resultaten op te leveren.

Tenslotte worden nog enkele reconstructies vergeleken in fig. 5.13. Het is duidelijk dat de reconstructie van gesimuleerd-uitgloeien een scherpere reconstructie oplevert dan het ML-EM-algoritme na 20 iteraties. Indien evenwel de reconstructie na veel ML-EM-iteraties bestudeerd wordt, vervalt dit verschil. Natuurlijk is het ML-EM-algoritme veel sneller dan gesimuleerd-uitgloeien. Dit laatste algoritme vergt ongeveer 10 CPU-uur, daar waar het ML-EM-algoritme voor 500 iteraties "slechts" 10 CPU-minuten nodig heeft. Het is ook gebleken dat gesimuleerd-uitgloeien, evenals het ML-EM-algoritme, duidelijk last heeft van ruisdeterioratie.



Figuur 5.12 De evolutie van het $distError$-foutcriterium in functie van het iteratienummer in miljoenen voor verschillende afkoelingssnelheden: (a) $\eta = 0.85$, (b) $\eta = 0.90$, (c) $\eta = 0.98$.



(a) (b) (c)

Figuur 5.13 Vergelijking van de reconstructies van het `ES-fantoom` zonder ruistoevoeging met verschillende algoritmen: (a) gesimuleerd-uitgloeien, (b) het ML-EM-algoritme na 10 iteraties (c) het ML-EM-algoritme na 500 iteraties.

Er bestaan verschillende situaties waarin het gesimuleerd-uitgloeien zinvol aangewend kan worden:

1. voor de maximalisatie van a posteriori waarschijnlijkheidsdistributies waarvan de a priori waarschijnlijkheidsdistributie te ingewikkeld is om behandeld te worden met een andere reconstructiemethode uit dit hoofdstuk;

2. voor de nabewerking van de beelden van andere reconstructiemethoden. Om de pixelintensiteit te veranderen maken de meeste algoritmen gebruik van een terugprojectie. Deze terugprojectie beperkt de snelheid waarmee de intensiteit van de individuële pixels aangepast wordt. Bij gesimuleerd-uitgloeien is er geen sprake van terugprojectie.

5.6 Besluit

In dit hoofdstuk is de studie gepresenteerd van enkele maximalisatie-algoritmen. Het ML-EM-algoritme lijkt sneller te convergeren dan de eigen implementatie van het gradiënten-, het toegevoegde-gradiëntenalgoritme (zoals voorgesteld door Djafari) en het gesimuleerd-uitgloeien. De MART is het enige onderzochte algoritme dat sneller een optimum bereikt. Daar staat tegenover dat het MART gevoeliger lijkt voor ruis. Bij de uitgevoerde experimenten blijft de gradiënten-methoden langer in de buurt van de optimale *scDist*-waarde.

Gesimuleerd-uitgloeien introduceert een interessante uitbreiding van de standaard maximalisatie-algoritmen waardoor lokale extrema vermeden kunnen worden. Bijgevolg zullen de belangrijkste verbeteringen met dit algoritme enkel bekomen worden indien gesofisticeerde a priori waarschijnlijkheidsdistributies gebruikt worden. Enkele optimalisaties voor gesimuleerd-uitgloeien werden voorgesteld: de keuze van het transitiemechanisme, de veranderlijke grootte van de pixelveranderingen, de snelheid waarmee de temperatuur verandert. Indien evenwel enkel de directe waarschijnlijkheidsdistributie gemaximaliseerd wordt, levert gesimuleerd-uitgloeien geen betere reconstructies op dan de ML-EM-reconstructies. Bovendien is gesimuleerd-uitgloeien uitzonderlijk traag.

De MART slaagt er blijkbaar in heel snel een goede reconstructie te vinden. Het aantal op te meten projectiehoeken blijkt ook beperkt te zijn. Bij de uitgevoerde experimenten kon bijna ongestraft overgegaan worden van 64 naar 32 projectiehoeken. Een combinatie van MART met het standaard-ML-EM-algoritme lijkt dan ook aangewezen. Dit kan aanleiding geven tot het geordende subset-algoritme.

Hoofdstuk 6

A priori waarschijnlijkheidsdistributies in PET

6.1 Inleiding

Dit hoofdstuk handelt over a priori waarschijnlijkheidsdistributies voor tomografische beeldreconstructie. Het voornaamste doel van het incorporeren van dergelijke kennis is de beeldkwaliteit te verbeteren. In de eerste statistische reconstructiemethoden (zoals het ML-EM-algoritme) wordt verondersteld dat er geen a priori informatie over het beeld aanwezig is. In de afwezigheid van metingen zijn alle beelden even waarschijnlijk. Deze methoden hebben evenwel veel last van ruisdegeneratie. Met behulp van een goed gekozen a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt de nodige informatie aangebracht om de ruisdegeneratie te vermijden.

Het eerste probleem bestaat erin de expliciete uitdrukking van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie vast te leggen. De kennis die aangebracht wordt door de a priori waarschijnlijkheidsdistributie moet ook voldoende groot zijn om de beeldkwaliteit te verbeteren. Anderzijds mag deze kennis niet foutief zijn. Indien de a priori waarschijnlijkheidsdistributie b.v. veronderstelt dat de tracerverdeling in een patiënt gelijkaardig moet zijn aan de tracerverdeling in een gezond individu, dan kan deze informatie tot gevolg hebben dat werkelijke anomalieën niet gedetecteerd worden. In dit hoofdstuk worden voornamelijk a priori waarschijnlijkheidsdistributies gebaseerd op een "entropie" van het beeld besproken. Deze a priori waarschijnlijkheidsdistributies zullen voor de eenvoud entropiepriors genoemd worden. De entropiepriors zijn een interes-

sante kandidaat om de kwaliteit van de reconstructies te verbeteren omdat voor deze priors een theoretische fundering beschikbaar is. Bovendien is de informatie geïncorporeerd in de entropiepriors voldoende algemeen, zodat ook onverwachte eigenschappen in de tracerverdeling nog gereconstrueerd kunnen worden.

Een bijkomend probleem is het optreden van een regularisatieparameter in de a priori waarschijnlijkheidsdistributie. Deze parameter bepaalt het relatieve belang van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie t.o.v. de directe waarschijnlijkheidsdistributie. In par. 6.4 worden twee methoden onderzocht om deze parameter tijdens de reconstructie vast te leggen. De standaardmethode voor het bepalen van de regularisatieparameter bestaat uit het experimenteel kiezen van een waarde.

Tenslotte wordt de kwaliteit van de reconstructies van het **Memsys** 5-programma bestudeerd. Dit programma is ontwikkeld in Cambridge (V.K.) door enkele van de pioniers van Bayesiaanse beeldreconstructiemethoden en werd in het kader van deze thesis aangepast voor PET.

6.2 Vormen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies

6.2.1 Inleiding

Er is een evolutie merkbaar bij de introductie van a priori informatie. Aanvankelijk werden de methoden meestal op een ad hoc manier ingevoerd [Gull78]. Zo werd b.v. de entropie gemaximaliseerd met een aantal beperkingen (de metingen) [Gullb88]. Dit is analoog aan de methode voor het bepalen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies uit par. 3.10. Voor reconstructie in PET is deze methode niet evident omdat er ruis op de metingen aanwezig is. De metingen vormen geen "harde" beperkingen voor het beeld. Om deze reden worden de verschillende metingen in reconstructiemethoden gegroepeerd in één enkele "harde" beperking.

Na de eerste successen werd een theoretische fundering voor dergelijke methoden gezocht. Een fundering voor de incorporatie van a priori informatie, bestaat erin de methoden te plaatsen in een Bayesiaanse context [Demom89]. De a priori informatie wordt dan omgezet in een a priori waarschijnlijkheidsdistributie. Door deze a priori waarschijnlijkheidsdistributie worden bepaalde beelden a priori waarschijnlijker dan andere beelden. Het reconstrueren van een beeld in de Bayesiaanse context bestaat erin het beeld te vinden waarvoor de a posteriori waarschijnlijkheid maximaal is. Bij deze maximalisatie worden dikwijls nog steeds dezelfde vergelijkingen gebruikt uit de beginperiode [Djafa92]) (waarbij b.v. ad hoc een entropie ingevoerd werd). Sommigen beschouwen

het optreden van de regel van Bayes in de afleiding van de vergelijkingen als een ultieme rechtvaardiging van de methode. De regel van Bayes garandeert immers consistentie. Maar het opstellen van de expliciete vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie is toch dikwijls aan kritiek onderhevig [Lored90].

De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\ \mathbf{f} \mid \mathbf{d}\ I\ )$ van het beeld $\mathbf{f}$ gegeven de metingen $\mathbf{d}$, kan berekend worden met de regel van Bayes:

$$bp(\ \mathbf{f} \mid \mathbf{d}\ I\ ) = \frac{bp(\ \mathbf{f} \mid I)\ bp(\ \mathbf{d} \mid \mathbf{f}\ I\ )}{bp(\ \mathbf{d} \mid I\ )}. \tag{6.1}$$

Bij beeldreconstructiemethoden wordt dat beeld gereconstrueerd dat de a posteriori waarschijnlijkheid $bp(\ \mathbf{f} \mid \mathbf{d}\ I\ )$ maximaliseert. Bij het zoeken van het maximum van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie speelt de term $bp(\mathbf{d} \mid I)$ geen rol omdat deze term onafhankelijk van het beeld $\mathbf{f}$ is. De maximalisatie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie is dan equivalent met het maximaliseren van de functie

$$Q(\mathbf{f}, \mathbf{d}) = Pri(\mathbf{f}) + Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}), \tag{6.2}$$

waarbij de functie $Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ – het logaritme van de directe waarschijnlijkheidsdistributie – de informatie over de meetopstelling bevat en de functie $Pri(\mathbf{f})$ – het logaritme van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie – incorporeert de a priori informatie over het beeld.

De functie $Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ brengt de overeenstemming tussen de metingen en het beeld in rekening. Deze term wordt maximaal wanneer alle meetpunten exact (d.i. inclusief ruis) voorspeld worden door de schatting van het beeld. De functie $Pri(\mathbf{f})$ kent een getalwaarde toe aan een bepaalde eigenschap van het beeld. De functie $Pri(\mathbf{f})$ kan b.v. maximaal worden indien het beeld uniform is. Door $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$ te maximaliseren zal een balans gezocht worden tussen de overeenkomst met de data en het voldoen aan een specifieke eigenschap (zoals vlakheid).

Bij medische beeldreconstructie is het voornaamste probleem de ruisdegeneratie. Bij de ruisdegeneratie zullen naburige pixels sterk verschillende intensiteiten aannemen. Het is dan ook niet verwonderlijk dat de meest gebruikte a priori waarschijnlijkheidsdistributies een vlakheidsterm bevatten. In de volgende paragraaf zullen enkele entropie-gebaseerde a priori waarschijnlijkheidsdistributies besproken worden.

Het is evident dat deze procedure een zeker gevaar inhoudt. Indien het werkelijk beeld helemaal niet voldoet aan de eigenschap die vooropgesteld wordt door $Pri(\mathbf{f})$, kan de kwaliteit van de reconstructie verminderen door de introductie van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie. Tot op heden wordt er een conservatieve houding aangenomen: de functie $Pri(\mathbf{f})$ zal slechts heel vage kennis incorporeren. Zo zal $Pri(\mathbf{f})$ b.v. veronderstellen dat het beeld

een zekere vlakheid heeft. De entropie van het beeld kan dergelijke informatie incorporeren.

6.2.2 Het gebruik van gekende momenten

Ten eerste zijn er de a priori waarschijnlijkheidsdistributies die gebaseerd zijn op het berekenen van a priori waarschijnlijkheden m.b.v. van het maximum-entropieprincipe (zie par. 3.10) [Liang87], [Hart87a], [Hart87b]. Bij deze methode wordt uitgaande van een bepaalde beperking (gekende momenten) voor een pixelintensiteit het maximum-entropieprincipe toegepast om een waarschijnlijkheidsdistributie voor de pixelintensiteiten te verkrijgen. De verschillende vormen van a priori informatie over de pixelintensiteiten leiden tot verschillende vormen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies:

1. indien de pixelintensiteiten enkel tot een eindig interval $[a, b]$ kunnen behoren, wordt de waarschijnlijkheidsdistributie:

$$bp_1(f_j) = \begin{cases} 1/(b_j - a_j) & \text{voor } a_j \leq f_j \leq b_j \\ 0 & \text{elders} \end{cases} \tag{6.3}$$

   Dit is een gewone uniforme verdeling;

2. indien elke pixel een waarde tussen $-\infty$ en $+\infty$ kan aannemen en de gemiddelde waarde voor de pixelintensiteiten $< f_j >$ evenals de spreiding σ_j^2 gegeven zijn, wordt de a priori waarschijnlijkheidsdistributie een Gaussdistributie

$$bp_2(f_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp\left(-\frac{(f_j - < f_j >)^2}{2\sigma_j^2}\right). \tag{6.4}$$

3. indien bovenstaande beperken (twee gekende momenten) gelden, maar de pixelintensiteiten bovendien enkel positieve reële waarden kunnen hebben, dan vormt de Poissondistributie een goede benadering voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie

$$bp_3(f_j) = \begin{cases} 1/f_j!\ \exp(-< f >_j) < f_j >^{f_j} & \text{voor } 0 \leq f_j \leq \infty \\ 0 & \text{elders.} \end{cases} \tag{6.5}$$

Indien de pixels statistisch onafhankelijk zijn, wordt de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van een beeld berekend door het produkt van de waarschijnlijkheidsdistributies van de afzonderlijke pixels te nemen:

$$bp_l(\mathbf{f}) = \prod_{j=1}^{N} bp_l(f_j);\ l = 1, 2, 3. \tag{6.6}$$

Om een idee te hebben van de gemiddelde waarde van een pixelintensiteit kunnen andere onderzoeksmethoden (zoals bloedstalen) gebruikt worden. Het zinvol specifiëren van gemiddelden en spreidingen voor alle pixelintensiteiten van het beeld is evenwel niet evident.

Deze momenten kunnen opgesteld worden met behulp van een alternatieve reconstructiemethode. Een snelle reconstructiemethode kan immers een redelijke schatting voor het beeld opleveren, waarmee dan de momenten voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie bepaald worden. Bij PET bestaat er een dergelijk snel reconstructie-algoritme: het FB-algoritme. De FB-reconstructies hebben evenwel last van streepvormige artefacten. Door het uitvoeren van een spatiale convolutie kunnen deze artefacten verwijderd worden. De pixelwaarden van de geconvolueerde FB-reconstructie kunnen de gemiddelde pixelintensiteiten voor een Gaussdistributie opleveren [Levit87].

Tegen deze methoden bestaat echter een sterk fundamenteel bezwaar: de a priori waarschijnlijkheidsdistributie is niet meer onafhankelijk van de metingen. De regel van Bayes wordt hier verkeerd toegepast.

6.2.3 Het gebruik van Gibbsenergie

Een andere klasse van a priori waarschijnlijkheidsdistributies wordt gevormd door de Gibbs a priori waarschijnlijkheidsdistributies. Bij deze waarschijnlijkheidsdistributies wordt een "energie" $U(\mathbf{f})$ van een beeld gedefinieerd. Deze energie kent een getalwaarde toe aan het beeld, welke kleiner wordt naarmate het beeld beter aan een bepaalde voorwaarde voldoet. Indien b.v. de gewenste eigenschap de vlakheid van het beeld is, kan de energie van een uniform beeld b.v. nul zijn. Bij elke afwijking van de uniformiteit zal de energie van het beeld toenemen.

Eénmaal de gewenste eigenschap vertaald is in een energie wordt de a priori waarschijnlijkheidsdistributie gelijk gesteld aan [Geman88], [Geman84]:

$$bp(\mathbf{f} \mid I_G) \propto \exp\{-U(\mathbf{f})\}. \tag{6.7}$$

Door het algemeen definiëren van een energie voor een beeld is het mogelijk om bijna elke eigenschap om te zetten in een getalwaarde. Zo kan rekening gehouden worden met randen, puntbronnen, vlakke structuren, enz. Doordat de energiefuncties dikwijls gecompliceerde vormen aannemen, is het aangeraden om de maximalisatie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie uit te voeren met het gesimuleerd-uitgloeien.

6.2.4 Het gebruik van structurele informatie

Wanneer er structurele informatie aanwezig is (kennis van patronen, vormen, enz.) zijn de pixelintensiteiten niet meer onafhankelijk. De a priori waarschijn-

lijkheid van het beeld kan dan niet meer geschreven worden als het product van de waarschijnlijkheden van de individuële pixelintensiteiten zoals in (6.6). Een algemene uitbreiding voor vergelijking (6.6) is opgesteld in [Fukun72].

Soms geeft de a priori informatie aan dat de tracerconcentratie bestaat uit een vast aantal puntbronnen op een vrij uniforme achtergrond. De locatie van de puntbronnen mag onafhankelijk of gecorreleerd zijn. Dergelijke informatie kan eveneens omgezet worden in een a priori waarschijnlijkheidsdistributie [Hart87a]. Een gelijkaardige vorm van informatie wordt vertaald in een a priori waarschijnlijkheidsdistributie in [Skill87].

Recentelijk werd getracht om informatie uit NMR-metingen te gebruiken om de kwaliteit van de reconstructies in PET te verbeteren [Leahy91]. Het betreft hier voornamelijk vorminformatie uit de NMR-metingen (b.v. de locatie van de schedelomtrek). Uit meerdere PET-metingen op dezelfde plaats kan eveneens vorminformatie geëxtraheerd worden. Bij een dynamische scan worden b.v. veel opeenvolgende scans (elk met een lage signaal tot ruisverhouding) op eenzelfde plaats van de patiënt genomen. De som van alle beelden kan informatie verschaffen over de aanwezige structuren. Door de ligging van de structuren op het sombeeld te bepalen, wordt de kwaliteit van de afzonderlijke reconstructies verbeterd [Llace92].

Een ander type van vorminformatie wordt geëxploreerd in [Hanso93]. De vorminformatie bestaat hier uit de vorm van een object en toegelaten vervormingen ervan. Het blijkt dat de reconstructies van eenvoudige objecten met deze a priori informatie behoorlijk zijn. Dit zelfs wanneer slechts metingen voor vier projectiehoeken beschikbaar zijn.

In de a priori waarschijnlijkheidsdistributie kunnen ook gelijktijdig meerdere criteria ingevoerd worden [Wang92].

6.3 De entropiepriors

6.3.1 Inleiding

Met het invoeren van een entropie van het beeld in de a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt steeds getracht een "vlakheid" voor de beelden voorop te stellen. Veel verschillende afleidingen van de entropieformule zijn reeds gepubliceerd [Shann49], [Shore80], [Shore83], [Tikoc84]. Bovendien bestaat er ook een indrukwekkende lijst entropie-uitdrukkingen [Gull85], [Kesav90], [Kapur90]. Voor een overzicht wordt verwezen naar [Desme91a].

In tabel 6.1 worden enkel entropie-uitdrukkingen gegeven. Niet alle vormen zijn even bruikbaar. Zo blijkt b.v. de Burg-entropie niet geschikt voor beeldreconstructietechnieken. In [Gull85] wordt aangetoond dat de Burg-entropie aanleiding geeft tot sterke pieken in de reconstructies. Bedenk hierbij dat het

Benaming S Formule	$\frac{\partial S}{\partial f_i}$	$\frac{\partial^2 S}{\partial f_i \partial f_j}$
Shannon-entropie $-\sum_l x_l \ln x_l$	$-\frac{1}{T}(\ln x_i - \sum_l x_l \ln x_l)$	$\frac{1}{T^2}(-2\sum_l x_l \ln f_l$ $+\ln(f_i f_j) + 1 - \frac{T}{f_i}\delta_{ij})$
$-\sum_l f_l \ln f_l$	$-(1+\ln f_i)$	$-\delta_{ij} f_i$
$-\sum_l f_l \ln\left(\frac{f_l}{m_l}\right)$	$-(1+\ln \frac{f_i}{m_i})$	$-\delta_{ij} f_i$
Burg-entropie $\sum_l \ln x_l$	$\frac{1}{f_i} - N/T$	$-\delta_{ij}/f_i^2 + N/T^2$
$\sum_l \ln f_l$	$1/f_i$	$-\delta_{ij}/f_i^2$
$\sum_l \ln\left(\frac{f_l}{m_l}\right)$	$1/f_i$	$-\delta_{ij}/f_i^2$
$\sum_l (f_l - m_l - f_l \ln(\frac{f_l}{m_l}))$	$-\ln \frac{f_l}{m_l}$	$-\delta_{ij}/f_i$

Tabel 6.1 Enkele entropie-uitdrukkingen met de eerste en tweede afgeleiden met m_i de waarden van het model (zie tekst) en $T = \sum_l f_l$.

invoeren van de entropie net dergelijke effecten tracht te vermijden!

Eén reden van de diversiteit van deze afleidingen is de verschillende interpretaties van entropie van een beeld: (1) de entropie kan berekend worden op een distributie bestaande uit genormeerde pixelintensiteiten en (2) de entropie kan berekend worden op een distributie van beelden.

Entropie voor distributies van pixelintensiteiten

Bij een eerste interpretatie wordt de entropie gedefinieerd op een enkel beeld. De pixelintensiteiten worden hiertoe genormeerd:

$$x_j = \frac{f_j}{\sum_{k=1}^{N} f_k}. \tag{6.8}$$

De genormeerde intensiteiten $\{x_j\}$ kunnen beschouwd worden als een discrete waarschijnlijkheidsdistributie waarvoor de entropie berekend wordt. De genormeerde intensiteit x_j stelt de waarschijnlijkheid voor dat het volgende positron uitgezonden wordt door pixel j. Van de genormeerde pixelintensiteiten kan de Shannon-entropie berekend worden [Shann49]. De Shannon-entropie berekent de informatie-inhoud van deze discrete distributie en dus van het beeld.

Bij de oorspronkelijke toepassing van het maximum-entropieprincipe wordt de entropie van het beeld gemaximaliseerd waarbij een aantal beperkingen (de

metingen) in rekening gebracht worden. Dit correspondeert met de methode uit par. 3.10. Met deze methode wordt uit alle mogelijke pixelintensiteitsdistributies die aan de metingen voldoen, deze distributie geselecteerd met de kleinste informatie-inhoud. Deze methode is niet helemaal gerechtvaardigd voor de reconstructie van PET-beelden omdat de metingen ruis bevatten. De metingen zijn geen "harde" beperkingen. Daarom worden de metingen dikwijls samengevoegd tot één enkele beperking die minder ruisgevoelig is. Dit is de historische benadering van het probleem en werd reeds vroeg toegepast [Fried72], [Fried78], [Gull78].

Deze benadering is niet volledig Bayesiaans omdat geen omzetting gebeurt van een a priori waarschijnlijkheidsdistributie naar een a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie door het gebruik van een directe waarschijnlijkheidsdistributie.

Entropie voor distributies van beelden

De huidige benaderingen van de beeldreconstructie zijn meer Bayesiaans georiënteerd. De uitdrukking van de entropie treedt nu expliciet op in de a priori waarschijnlijkheidsdistributie. In de entropie-uitdrukkingen die in de volgende uiteenzettingen van dit werk aan bod komen, wordt de entropie gedefiniëerd op distributies van beelden. Elk beeld heeft een bepaalde a priori waarschijnlijkheid om op te treden die afhangt van de entropie van dat beeld. De a priori waarschijnlijkheidsdistributie waarin een entropie-uitdrukking voorkomt, wordt in dit hoofdstuk een entropieprior genoemd.

Merk op dat entropiepriors niet verkregen worden met behulp van het maximum-entropieprincipe uit par. 3.10. Bij deze methoden worden (bij het gebruik van momenten als beperkingen) steeds distributies verkregen uit de exponentiële familie van distributies. De entropie-uitdrukking komt daarbij niet meer expliciet voor in de a priori waarschijnlijkheidsdistributie.

Stel dat een entropieprior gebruikt wordt, wat is dan de expliciete gedaante van de entropie? In dit hoofdstuk worden enkel de volgende entropiepriors onderzocht:

1. de entropiepriors volgens Djafari;

2. de entropiepriors volgens Skilling en Gull.

Om de uitdrukking van de entropiepriors af te leiden, maken beide methoden gebruik van een aantal basisveronderstellingen voor de distributies van de beelden en/of pixels. Deze twee typen entropiepriors worden geselecteerd omdat de auteurs een bijhorende methode ontwikkeld hebben om automatisch de regularisatieparameters te berekenen.

6.3.2 Entropiepriors volgens Djafari

In [Djafa91] wordt een interessante methode gepresenteerd om een klasse van a priori waarschijnlijkheidsdistributies op te stellen. Stel dat de a priori informatie van het beeld $\mathbf{f}$ bestaat uit de kennis van de verwachtingswaarden van twee functies $G(\mathbf{f})$ en $H(\mathbf{f})$. De verwachtingswaarden van de functies G en H zijn gelijk aan $< g >, < h >$:

$$\int G(\mathbf{f})\ bp(\mathbf{f} \mid I_{Dja})\ \mathrm{d}\mathbf{f} = < g >; \tag{6.9}$$

$$\int H(\mathbf{f})\ bp(\mathbf{f} \mid I_{Dja})\ \mathrm{d}\mathbf{f} = < h > . \tag{6.10}$$

De informatie I_{Dja} houdt rekening met de verschillende veronderstellingen van Djafari. De intensiteiten van het beeld $\{f_i\}$ worden positief verondersteld. Merk op dat de gedaante van de functies $G(\mathbf{f})$ en $H(\mathbf{f})$ nog volledig onbekend is. De vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt bepaald door de kennis van de twee verwachtingswaarden en de toepassing van het maximum-entropieprincipe:

$$bp(\mathbf{f} \mid I_{Dja}) = \frac{1}{Z} \exp(\rho_1 G(\mathbf{f}) + \rho_2 H(\mathbf{f})), \tag{6.11}$$

met ρ_2 en ρ_1 de Lagrange-multiplicatoren (de regularisatieparameters), en Z de partitiefunctie.

Nu tracht Djafari de expliciete uitdrukking voor de algemene functies G en H te bepalen. Indien verondersteld wordt dat de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van het beeld opgemaakt is uit onafhankelijke waarschijnlijkheidsdistributies van de verschillende pixelintensiteiten en dat de pixels bovendien onderling verwisselbaar zijn, is de algemene uitdrukking van de functies G en H :

$$G(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^{N} g(f_i) \qquad \text{en } H(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^{N} h(f_i), \tag{6.12}$$

hierbij zijn $g(f_i)$ en $h(f_i)$ nog steeds onbekende functies. Een meer beperkende veronderstelling is het schaalinvariantie-axioma: de meetschaal voor de pixelintensiteiten is willekeurig. De gedaante van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie moet onafhankelijk zijn voor het uitdrukken van stralingshoeveelheid in Curie of Becquerel. Door een dergelijke coördinatentransformatie wordt de waarschijnlijkheidsdistributie omgezet naar een distributie die evenredig is met de oorspronkelijke distributie (op de schaling na). De enige klassen van functies g en h die voldoen aan deze bijkomende beperking zijn:
(a) $g(f_i) = f_i^{r_1}$, $h(f_i) = f_i^{r_2}$; $r_1 > r_2, \rho_1 > 0$, en $\rho_2 > 0$ als $r_2 < 0$
(b) $g(f_i) = f_i^{r}$, $h(f_i) = \ln f_i$; $(1 - \rho_2)r > 0$ en $\rho_1 > 0$

(c) $g(f_i) = \ln f_i$, $h(f_i) = lnf_i{}^2$; $\rho_2 > 0$
(d) $g(f_i) = f_i^r$, $h(f_i) = f_i^r \ln f_i$; $\rho_2 > 0$ en $r > 0$.

Voor het bepalen van de Lagrange-multiplicatoren (regularisatieparameters) wordt de momentenmethode gebruikt, zie par. 6.4.1.

Met deze methode wordt een hele klasse van entropiepriors gedefinieerd. De benaming "entropieprior" is hier wel dubbelzinnig: de entropie-uitdrukking komt expliciet voor in een bepaalde klasse van a priori waarschijnlijkheidsdistributies en het maximum-entropieprincipe wordt eveneens gebruikt om de a priori waarschijnlijkheidsdistributies af te leiden.

6.3.3 Entropiepriors volgens Skilling en Gull

Axiomatische afleiding

In eerste instantie wordt de entropieformule opgesteld door te eisen dat een bepaalde functie $S(\mathbf{f}, \mathbf{m})$ een hiërarchie voor de beelden opsteld. Hierbij is $\mathbf{m}$ het model. Indien een aantal beperkingen aan het beeld opgelegd worden, zal het beeld dat $S(\mathbf{f}, \mathbf{m})$ maximaliseert en voldoet aan de beperkingen geselecteerd worden. Dit beeld is dan "optimaal". Dit is analoog aan het maximum-entropieprincipe, maar nu wordt eerst nog de gedaante van de functie $S(\mathbf{f}, \mathbf{m})$ bepaald. Er worden een aantal axioma's geponeerd waaraan het selectiecriterium moet voldoen. De gepresenteerde uiteenzetting is intuïtief, voor een meer wiskundige benadering wordt verwezen naar [Skill88]. Deze axioma's zijn:

1. *subset-onafhankelijkheid*: stel dat onafhankelijke informatie beschikbaar is over twee distincte deelgebieden (beeldhelften) van het beeld $\mathbf{f}$. Dan mag het selectiecriterium geen verschillend optimaal beeld opleveren indien eerst de afzonderlijke informatie op beide beeldhelften toegepast wordt en nadien deze geselecteerde helften worden samengevoegd; of indien de totale informatie (voor beide beeldhelften) gezamenlijk gebruikt wordt;

2. *invariantie onder coördinatentransformatie*: een coördinatentransformatie mag de keuze van het optimaal beeld niet beïnvloeden;

3. *systeem-onafhankelijkheid*: indien enkel twee marginale distributies voor disjuncte gebieden van het beeld $\mathbf{f}$ gekend zijn, dan is het optimale beeld het product van deze twee marginale distributies. Hierbij wordt verondersteld dat de marginale distributies en het beeld genormaliseerd zijn;

4. *schaling*: indien geen informatie beschikbaar is, wordt het model $\mathbf{m}$ geselecteerd.

De enige functie die aan deze axioma's voldoet is [Skill88]

$$S(\mathbf{f},\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^{N}(f_i - m_i - f_i \ln \frac{f_i}{m_i}). \tag{6.13}$$

Merk op dat met deze formule één enkel beeld geselecteerd kan worden. Deze formule geeft evenwel niet aan hoe waarschijnlijk dat beeld is t.o.v. andere mogelijke reconstructies.

De enkelvoudige entropie volgens Skilling en Gull

Bij de huidige benadering wordt teruggegrepen naar het "aapmodel" ("monkey model") [Fried72], [Jayne68]. In dit model wordt het reconstructieprobleem herleid tot het gooien, door een niet-intelligente mechanisme (aap), van elementaire intensiteitseenheden in een aantal vakken (pixels). Bij het gooien van elementaire pixelintensiteiten heeft de aap geen voorkeur voor bepaalde pixels. De elementaire intensiteiten komen willekeurig in de verschillende pixels terecht. Indien geen beperkingen opgelegd worden, zal het meest waarschijnlijke beeld bij een dergelijk aapmodel uniform zijn. Dit is tevens het beeld met maximale entropie. In de aanwezigheid van een beperking (meting) wordt het meest waarschijnlijke beeld, het beeld met maximale entropie die aan die beperking voldoet. Een frequentistische interpretatie hiervan is: bij de herhaalde uitvoeringen van het gooiproces door de aap, zal het beeld met maximale entropie het meest gegenereerd worden. Door de frequentie waarmee de verschillende beelden optreden bij het herhaald gooiproces bij te houden, kan een waarschijnlijkheidsdistributie voor de beelden opgesteld worden. Deze benadering vertoont verwantschap met het begrip typische sequenties en de concentratie rond maximum-entropiedistributies [Jayne83a].

De volgende stap bestaat erin de aap een voorkeur voor bepaalde pixels aan te leren. Voordat de aap begint met het werpen van de pixelintensiteiten wordt aan elke pixel een modelwaarde m_i toegekend worden. Gezamenlijk zullen deze modelwaarden m_i het model $\mathbf{m}$ voor het beeld vormen. Veronderstel dat de intensiteitseenheden in de verschillende pixels aankomen volgens een Poissonproces [Gull89]. De waarschijnlijkheid dat een beeld de pixelwaarden $\{f_j\}$ heeft is dan

$$bp(\mathbf{f} \mid \mathbf{m}\ I_{Kla}) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{f_i!}\ m_i^{f_i}\ e^{-m_i}. \tag{6.14}$$

Hierbij zal I_{Kla} de gebruikte informatie voor de afleiding van de enkelvoudige entropie volgens Skilling en Gull voorstellen.

M.b.v. de benadering van Stirling wordt dit

$$bp(\mathbf{f} \mid \mathbf{m}\ I_{Kla}) = \frac{1}{Z(\rho)} \exp\left(\rho\ S(\mathbf{f},\mathbf{m})\right), \tag{6.15}$$

waarbij

$$S(\mathbf{f},\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^{N}(f_i - m_i - f_i \ln \frac{f_i}{m_i}). \tag{6.16}$$

en ρ is de regularisatieparameter. Opmerkelijk hierbij is dat de entropie-uitdrukking (6.13) optreedt in de exponentiële. Nu is een waarschijnlijkheids-distributie (6.15) voor de beelden beschikbaar. Bepaalde beelden zijn nu waarschijnlijker dan andere beelden.

Merk op dat in (6.16) geen normalisatie van het beeld of het model vereist is. Indien deze evenwel genormaliseerd zijn, herleidt (6.16) zich tot de Kullback-Leibler afstand.

De methode waarbij de enkelvoudige entropie in combinatie met een marginalisatieprocedure voor het bepalen van de regularisatieparameter ρ gebruikt wordt, staat bekend als de "Klassieke-MaxEnt"-methode. Deze naam werd geïntroduceerd door Skilling in [Skill89].

De ICF-methode

Een uitbreiding van de voorgaande methode is de ICF-methode ("Intrinsic Correlation Function"-methode). De bedoeling van de ICF-methode is een afhankelijkheid tussen pixelintensiteiten te introduceren. Bij de ICF-methode worden twee opeenvolgende aap-gooiprocessen gebruikt. Bij het eerste aap-gooiproces wordt uitgaande van een uniform premodel $\overset{o}{\mathbf{m}}$ een tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}$ gegenereerd. Dit tussenmodel wordt omgezet door een spatiale convolutie in het model $\mathbf{m}$. Het tweede aap-gooiproces genereerd uit dit model $\mathbf{m}$ het beeld $\mathbf{f}$. De bedoeling van deze methode is een model te creëren met een zekere vlakheid die toch enige struktuur bevat.

Het volledige generatieproces van de beelden wordt dan

$$\overset{o}{\mathbf{m}} \rightarrow \tilde{\mathbf{m}}, \tag{6.17}$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{B}\,\tilde{\mathbf{m}}, \tag{6.18}$$

$$\mathbf{m} \rightarrow \mathbf{f}, \tag{6.19}$$

hierbij stelt matrix B de spatiale convolutie voor. Het aap-gooiproces wordt weergegeven door "$\rightarrow$". Het belang van de vorm van de convolutiekern wordt ondergeschikt geacht aan de breedte van de kern. Het is voldoende dat de convolutiekern een zekere vlakheid introduceert.

Deze procedure leidt tot de volgende formule voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie [Gull89]:

$$bp(\mathbf{f}\ \tilde{\mathbf{m}} \mid \mathbf{m}\ I_{ICF}) \sim \exp\left(\rho_1 S(\mathbf{f},\mathbf{m}) + \rho_2 S(\tilde{\mathbf{m}},\overset{o}{\mathbf{m}})\right). \tag{6.20}$$

Het aantal onbekenden is hier toegenomen. Naast de intensiteiten van de pixels van het beeld $\mathbf{f}$ worden nu ook de intensiteiten van het tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}$ gezocht.

In (6.20) treden twee regularisatieparameters op. Deze kunnen naar analogie met de Klassiek-MaxEnt-methode, berekend worden met een marginalisatieprocedure. De globale procedure, de combinatie van de ICF-methode en de marginalisatieprocedure, wordt de "Nieuwe-MaxEnt-methode" genoemd.

Een uitbreiding van deze ideeën wordt voorgesteld in de pixonprocedure [Pina93]. Bij deze reconstructiemethode wordt een spatiale convolutie waarvan de breedte afhangt van de pixellocatie, gebruikt. Dit in tegenstelling tot de ICF-methode waarbij de breedte van de convolutie constant is voor alle pixels. Het voordeel van de pixon-methode is dat in gebieden met veel structuur de convolutiekern klein gekozen kan worden. In gebieden met weinig structuur (b.v. de gebieden van de reconstructie buiten de patiënt) kan de convolutiekern daarentegen groot zijn.

6.4 De regularisatieparameters

De meest gebruikte methode om de regularisatieparameter te bepalen bestaat uit het ad hoc kiezen van een waarde. In deze paragraaf worden enkele methoden onderzocht die toelaten de regularisatieparameter automatisch uit te rekenen.

De elegantste oplossing voor het regularisatieparameter-probleem is het opstellen van een a priori waarschijnlijkheidsdistributie waarin deze parameter niet meer optreedt [Silve93]. Deze methode wordt hier evenwel niet bestudeerd. Deze methode werd tot nog toe enkel toegepast voor reconstructies van ééndimensionale objecten.

De regularisatieparameter weegt de invloed van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie t.o.v. de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. De invloed van de regularisatieparameter ρ wordt duidelijk indien deze expliciet geschreven wordt in de uitdrukking voor de functie $Q(\mathbf{f}, \mathbf{d})$:

$$Q(\mathbf{f}, \mathbf{d}) = \rho \; Pri_0(\mathbf{f}) + Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}), \tag{6.21}$$

waarbij $Pri_0(\mathbf{f})$ de factor van $Pri(\mathbf{f})$ is die onafhankelijk is van de regularisatieparameter ρ.

Bij heel grote ρ zullen de metingen bijna geen invloed hebben op de uiteindelijk reconstructie. Indien ρ heel klein is, zal daarentegen de a priori waarschijnlijkheidsdistributie een ondergeschikte rol spelen. In dit laatste geval zal de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie zich herleiden tot de directe waarschijnlijkheid en wordt het Maximum-A-Posteriori-algoritme (MAP-algoritme) een Maximum-Likelihood-algoritme (ML-algoritme).

De twee onderzochte methoden zijn:

1. *de momentenmethode*: aan de hand van de momenten van de huidige schatting van het beeld worden de regularisatieparameters berekend;
2. *de marginalisatiemethode*: door de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de regularisatieparameter(s) te berekenen kan de optimale waarde van de regularisatieparameter(s) bepaald worden.

6.4.1 De momentenmethode

De momentenmethode wordt voorgesteld in [Djafa91]. Veronderstel dat de parameters ϕ van een distributie bepaald worden aan de hand van een steekproef $\{e_1, \ldots, e_N\}$. De steekproef wordt genomen volgens de distributie en geeft duidelijk informatie over de parameters ϕ van de distributie. De momentenmethode gebruikt de momenten van de steekproef om een schatting van de parameters ϕ op te stellen. Een schatting voor de eerste twee centrale momenten (μ_1, μ_2) is b.v. gegeven door:

$$\mu_1 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e_j \tag{6.22}$$

$$\mu_2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N} (e_j - \mu_1)^2. \tag{6.23}$$

Voor sommige distributies bestaat er een expliciete relatie tussen deze momenten en de parameters van de distributie. Het eenvoudigste voorbeeld is de Gaussdistributie:

$$bp(e \mid \mu\ \sigma\ I_{Dja}) \propto \exp\left(-\frac{(e-\mu)^2}{2\,\sigma^2}\right). \tag{6.24}$$

De centrale momenten (μ_1, μ_2) vormen een schatting voor de parameters μ en σ van de Gaussdistributie. Bemerk dat de Gaussdistributie behoort tot de klassen van a priori waarschijnlijkheidsdistributies afgeleid in par. 6.3.2. Bij beeldreconstructie zal de steekproef van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie bestaan uit de waarden van de pixelintensiteiten van de huidige schatting $\mathbf{f}^{(k)}$ van het beeld.

In de notatie van par. 6.3.2 is de a priori waarschijnlijkheidsdistributie

$$bp(f \mid \rho_1\ \rho_2\ I_{Dja}) \sim \exp(-\rho_2 f - \rho_1 f^2). \tag{6.25}$$

Deze uitdrukking kan herschreven worden in de standaardvorm voor Gaussdistributies:

$$bp(f \mid \rho_1\ \rho_2\ I_{Dja}) \sim \exp\left(-\rho_1\ \left(f + \frac{\rho_2}{2\,\rho_1}\right)^2\right). \tag{6.26}$$

Door deze vorm te vergelijken met (6.24) worden de parameters van de distributie benaderd door

$$\rho_1 = \frac{1}{2\,\mu_2}, \tag{6.27}$$

$$\rho_2 = -\frac{\mu_1}{\mu_2}. \tag{6.28}$$

De bovenstaande procedure kan herhaald worden voor de Gammadistributie:

$$bp(\ f \mid \rho_1\ \rho_2\ I_{Dja}) = \frac{\rho_2^{(1-\rho_1)}}{\Gamma(1-\rho_1)} f^{-\rho_1} \exp(-\rho_2\ f). \tag{6.29}$$

De relatie tussen de regularisatieparameters en de eerste twee centrale momenten wordt dan

$$\rho_1 = \frac{\mu_2 - \mu_1^2}{\mu_2}, \tag{6.30}$$

$$\rho_2 = \frac{\mu_1}{\mu_2}. \tag{6.31}$$

Het zijn deze beide functies, de Gammadistributie en de Gaussdistributie, die door Djafari gebruikt worden als a priori waarschijnlijkheidsdistributies. De schatting van de parameters door de momentenmethode wordt dan immers eenvoudig.

6.4.2 De marginalisatiemethode

Inleiding

Bij het reconstrueren van beelden met de maximum-entropiemethode correspondeert elke beperking met een Lagrange-multiplicator. Lagrange-multiplicatoren kunnen enkel ingevoerd worden voor "harde" beperkingen. Maar PET-metingen bevatten ruis en zijn dus ongeschikt als "harde" beperkingen.

Om deze redenen worden alle metingen in één beperking samengebracht. Voor Gaussiaanse directe waarschijnlijkheidsdistributies wordt de beperking [Gull78], [Skill85]

$$\sum_{i=1}^{M} \frac{(p_i - d_i)^2}{\sigma_i^2} = M, \tag{6.32}$$

met $p_i = \sum_{j=1}^{N} \Psi_{ij} f_j$, de pseudometing voor het i-de datapunt en σ_i is de spreiding voor dat datapunt. De uitdrukking $\sum_{i=1}^{M}(p_i - d_i)^2/\sigma_i^2$ heeft immers een χ^2-distributie waarvan de verwachtingswaarde (voor Gaussiaanse directe waarschijnlijkheidsdistributies) M is. Uit vergelijking (6.32) volgt dat de gemiddelde afwijking tussen de metingen en de pseudometingen gelijk is aan de spreiding in de verschillende meetpunten. De regularisatieparameter ρ wordt

in het algoritme zodanig gevarieerd (beginnend bij heel grote waarden) dat uiteindelijk aan (6.32) voldaan wordt. Nadelen van deze methode zijn:

1. indien de metingen een Gaussdistributie hebben, dan heeft de som

$$\sum_{i=1}^{M} \frac{(p_i - d_i)^2}{\sigma_i^2} \tag{6.33}$$

   inderdaad een χ^2-distributie. D.w.z. dat indien het beeld gekend is, dan bij verschillende herhalingen van de metingen de verwachtingswaarde voor χ^2 gelijk is aan M. Maar hier is het beeld niet vooraf gekend, en is er slechts één stel metingen beschikbaar;

2. er bestaat weinig verschil tussen goede (met een kleine spreiding σ_i) en slechte metingen (met een grote spreiding σ_i). Echt goede metingen zullen zich moeilijk kunnen manifesteren;

3. bij medische reconstructieproblemen is er veel ruis op de metingen. Hierdoor zal de verwachtingswaarde van χ^2 inderdaad M zijn. Maar de spreiding voor χ^2 wordt dan gelijk aan $\sqrt{M}$.

Om deze redenen wordt een nieuwe methode onderzocht om de regularisatieparameter te bepalen. Deze methode leidt tot de Klassieke-MaxEnt-methode.

De Klassieke-MaxEnt-methode

De methode uit deze paragraaf tracht een waarde voor de regularisatieparameter te bepalen in een Bayesiaanse context. De beschreven methode maakt gebruik van de marginalisatie voor het beeld en wordt daarom marginalisatiemethode genoemd. De a priori waarschijnlijkheidsdistributie wordt gevormd door een enkelvoudige entropie $S(\mathbf{f}, \mathbf{m})$, zie (6.16).

De eerste stap van de marginalisatiemethode bestaat erin de gezamenlijke a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie, $bp(\rho\ \mathbf{f} \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas})$, voor de regularisatieparameter ρ en het beeld $\mathbf{f}$ te berekenen. Door de marginalisatie voor het beeld $\mathbf{f}$ wordt de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de regularisatieparameter, $bp(\rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas})$, opgesteld. Door deze uitdrukking te maximaliseren voor de regularisatieparameter ρ wordt een "optimale" schatting $\hat{\rho}$ berekend. Met deze schatting $\hat{\rho}$ kan de reconstructie van het beeld uitgevoerd worden. Deze methode is verantwoord indien de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de regularisatieparameter ρ een voldoende scherpe piek vertoont. In beeldreconstructies kan de optimale waarde van ρ vrij goed gedefinieerd zijn doordat de waarde van één enkele parameter bepaald wordt uit een groot aantal metingen.

Het grootste probleem bij het toepassen van de marginalisatiemethode is de marginalisatie voor het beeld **f**. De volgende afleiding werd gepubliceerd in [Gull89].

Voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van de parameter ρ wordt de niet-informatieve a priori waarschijnlijkheidsdistributie

$$bp(\rho \mid I_{Klas})\mathrm{d}\rho \propto \mathrm{d}\ln(\rho) \tag{6.34}$$

gebruikt.

Marginalisatie bij deze methode vereist het uitrekenen van de integraal

$$bp(\rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas}) = \int \mathrm{d}\mathbf{f}\ bp(\mathbf{f}\ \rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas}). \tag{6.35}$$

Om deze integraal uit te voeren wordt de waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\mathbf{f}\ \rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas})$ door een Gaussdistributie rond het optimale beeld $\hat{\mathbf{f}}$ benaderd. Nadat de integratie uitgevoerd wordt, kan de waarde ρ waarvoor de distributie $bp(\rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas})$ een maximum bereikt, berekend worden door een afleiding naar ρ van $bp(\rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas})$. De vergelijking voor de optimale regularisatieparameter $\hat{\rho}$ wordt dan

$$-2\ \hat{\rho}\ S(\hat{\mathbf{f}}, \mathbf{m}) = \sum_{j=1}^{N} \frac{\xi_j}{\hat{\rho} + \xi_j} \tag{6.36}$$

met ξ_j de eigenwaarden van

$$\Xi = -\nabla\nabla(Lik), \tag{6.37}$$

waarbij $\nabla\nabla(Lik)$ staat voor de Hessiaan van Lik:

$$\nabla\nabla(Lik) = \left| \frac{\partial^2 Lik}{\partial f_i \partial f_j} \right| \tag{6.38}$$

Een grote eigenwaarde ξ_j stelt hierbij een goede "meetrichting" voor (grote kromming in de log-likelihood functie) en omgekeerd. Vergelijking (6.36) kan geïnterpreteerd door de volgende beschouwingen te maken:

1. het linkerlid stelt een maat voor van de structuur in het gereconstrueerde beeld $\hat{\mathbf{f}}$. Dit geeft aan in welke mate de metingen erin geslaagd zijn het beeld te doen afwijken van het model **m**;

2. het rechterlid stelt het aantal goede metingen voor. Elke term van deze som weegt de meting t.o.v. de regularisatieparameter ρ. Indien de regularisatieparameter ρ veel kleiner is dan de eigenwaarde ξ_j, vergroot deze eigenwaarde ξ_j het rechterlid met een eenheid. Indien daarentegen de eigenwaarde ξ_j veel kleiner is dan de regularisatieparameter ρ is de bijdrage van de eigenwaarde tot de som van het rechterlid bij benadering nul. Deze eigenwaarde zal niet bijdragen tot de structuur in het beeld.

De som van het aantal "goede" metingen geeft aan hoe ver de metingen het gereconstrueerde beeld verwijderd hebben van het model $\mathbf{m}$.

De Nieuwe-MaxEnt-methode

In de praktijk levert de Klassieke-MaxEnt-methode dikwijls "overaangepaste" beelden op. Dit zijn beelden waarbij grote verschillen tussen naburige pixelintensiteiten systematisch optreden. Dit effect treedt ook op bij het ML-EM-algoritme en werd daar ruisdegeneratie genoemd, zie hoofdstuk 4.

In de Klassieke-MaxEnt-methode corresponderen de overaangepaste beelden met te kleine waarden van de regularisatieparameter ρ. De kleine waarde voor de regularisatieparameter ρ is het gevolg van de uniformiteit van het model $\mathbf{m}$. Indien de reconstructie zich wil verwijderen van het model $\mathbf{m}$ moet de waarde van ρ voldoende klein zijn. Anders kan niet voldoende structuur in het gereconstrueerde beeld aangebracht worden. Maar de kleine ρ-waarde heeft ook tot gevolg dat "slechte" metingen niet voldoende verworpen worden.

De Nieuwe-MaxEnt-methode tracht dit op te lossen door het model $\mathbf{m}$ dichter te laten aanleunen bij de uiteindelijke reconstructie. De waarschijnlijkheidsdistributie van het tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}$ is gegeven door

$$bp(\tilde{\mathbf{m}} \mid \rho_2\ I_{ICF}) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(\rho_2\ S(\tilde{\mathbf{m}}, \overset{\mathbf{o}}{\mathbf{m}})\right), \tag{6.39}$$

met Z_T een normalisatieconstante.

Hieruit wordt de uitdrukking voor de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie [Gull89]:

$$\begin{aligned} \ln\left(bp(\rho_1\ \rho_2 \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ \overset{\mathbf{o}}{\mathbf{m}}\ I_{ICF})\right) = \\ \text{constante} + \frac{M}{2}\ln(\rho_1) - 1/2\ln(\mathrm{Det}(\rho_1\mathbf{I} + \boldsymbol{\Xi})) \\ +\rho_1 S(\hat{\mathbf{f}}, \mathbf{m}) + \rho_2\ S(\hat{\tilde{\mathbf{m}}}, \overset{\mathbf{o}}{\mathbf{m}}) + Lik(\hat{\mathbf{f}}, \mathbf{m}), \end{aligned} \tag{6.40}$$

met $\mathbf{I}$ de $N \times N$ eenheidsmatrix, $\hat{\mathbf{f}}$ en $\hat{\tilde{\mathbf{m}}}$ het beeld en het tussenmodel die de gezamenlijke a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\rho_1\ \rho_2\ \mathbf{f}\ \tilde{\mathbf{m}} \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ \overset{\mathbf{o}}{\mathbf{m}}\ I_{ICF})$ maximaliseren. De matrix $\boldsymbol{\Xi}$ is gedefinieerd door

$$\Xi_{ij} = -\frac{\partial^2 Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})}{\partial f_i \partial f_j}. \tag{6.41}$$

De waarden van de regularisatieparameters ρ_1 en ρ_2 die (6.40) maximaliseren worden gezocht. Om de vergelijking (6.40) te maximaliseren, moeten eerst een aantal problemen opgelost worden. Wat is b.v de waarde van het tussenmodel $\hat{\tilde{\mathbf{m}}}$ en de optimale schatting van het beeld $\hat{\mathbf{f}}$?

Het MaxEnt-algoritme voor projectiemetingen

Het maximaliseren van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributies van de regularisatieparameter(s) voor de Klassieke-MaxEnt-methode en de Nieuwe-MaxEnt-methode is niet eenvoudig. Hier worden een aantal aanpassingen voorgesteld om de methode toepasbaar te maken voor PET-reconstructies. De oorspronkelijk methode is ontwikkeld voor een meetproces dat gebaseerd is op een convolutie [Gull89]. Zelfs voor dit eenvoudig meetproces (convolutie) worden reeds een indrukwekkend aantal vereenvoudigingen ingevoerd. Eerst wordt de entropie-uitdrukking benaderd door zijn kwadratische uitdrukking:

$$S(\mathbf{f},\mathbf{m}) \sim -\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2}(f_j - m_j)^2. \tag{6.42}$$

Bij de eigen implementatie zal de huidige schatting $\mathbf{f}^{(k)}$ van het beeld gebruikt worden i.p.v. de optimale schatting $\hat{\mathbf{f}}$. Voor het tussenmodel zal een gelijkaardige benadering gevolgd worden: de huidige schatting van het tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}^{(k)}$ wordt gebruikt voor de optimale schatting $\hat{\tilde{\mathbf{m}}}$. Het overblijvende probleem bestaat uit het bepalen van de eigenwaarden van de matrix $\boldsymbol{\Xi}$ en de determinant $\mathrm{Det}(\rho_1 \mathbf{I} + \boldsymbol{\Xi})$ in (6.40).

Indien de directe waarschijnlijkheidsdistributie voor de metingen een Gaussdistributie is met eenzelfde spreiding σ voor de metingen, dan worden de elementen van de matrix $\boldsymbol{\Xi}$:

$$\Xi_{ij} = \sum_{l=1}^{M} \frac{1}{\sigma^2} \Psi_{li} \Psi_{lj}\,, \tag{6.43}$$

Voor projectiemetingen stelt Ψ_{lj} de invloed van de j-de pixel op het l-de datapunt voor. Veronderstel dat de elementen Ψ_{ij} slechts de waarden 0 en 1 kunnen aannemen. Deze veronderstelling houdt in dat een pixel voor een bepaalde projectiehoek slechts door één detector wordt waargenomen. Met deze veronderstelling kunnen de elementen van de matrix $\boldsymbol{\Xi}$ gelijk gesteld worden aan:

$$\Xi_{ij} = \frac{1}{\sigma^2},\ i \neq j \tag{6.44}$$

$$= \frac{\theta}{\sigma^2},\ i = j, \tag{6.45}$$

met θ het aantal meethoeken. Bij de afleiding van (6.45) werd uitgegaan van de volgende redenering. In (6.43) wordt de som genomen van alle meetpunten waarvoor Ψ_{li} en Ψ_{lj} gelijktijdig verschillen van nul. Dit stemt overeen met het tellen van alle projectiestroken die pixel i *en* pixel j bevatten. Door aan te nemen dat de elementen Ξ_{ij} gegeven worden door (6.45) wordt verondersteld dat

het aantal projectiestroken die gelijktijdig door twee pixels gaan, gelijk is aan 1 indien de pixels verschillend zijn en gelijk is aan het aantal projectierichtingen θ indien de pixels samenvallen. Hier wordt een bijzonder grote vereenvoudiging doorgevoerd.

De eigenwaarden voor de marginalisatieprocedure worden dan (zie app. E):

$$\gamma_1 = \sigma^{-2}(\theta + (N-1)) \tag{6.46}$$

$$\gamma_i = \sigma^{-2}(\theta - 1),\ i = 2, \ldots, N. \tag{6.47}$$

Met deze eigenwaarden kan de regularisatieparameter uit de vergelijking (6.36) bepaald worden. Voor het invullen van de vergelijking (6.40) wordt verwezen naar app. E.

6.5 Experimenten

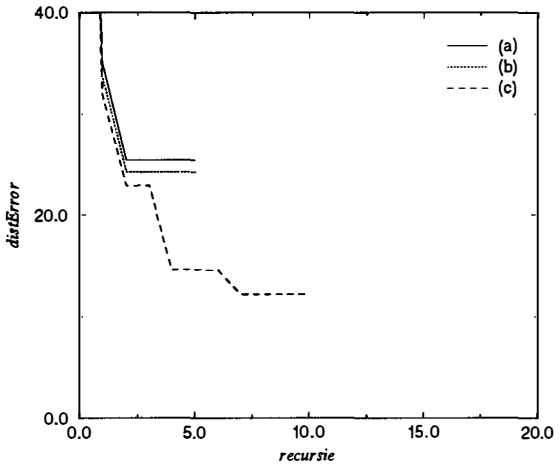
6.5.1 Inleiding

Het doel van de volgende experimenten is het onderzoek van

1. de meest geschikte methode voor de determinatie van de regularisatieparameter(s);
2. de invloed van het model op de reconstructie in de Klassieke-MaxEnt-methode;
3. de prestatie van het oorspronkelijk algoritme van Skilling en Gull: het **Memsys 5**-algoritme.

Er dient een onderscheid gemaakt te worden tussen (a) de eigen implementatie, de Klassieke-MaxEnt-algoritme en het Nieuwe-MaxEnt-algoritme, en (b) het **Memsys 5**-algoritme, de oorspronkelijk implementatie van Skilling en Gull. De eigen implementatie is gebaseerd op een uitbreiding van het toegevoegde-gradiëntenalgoritme van Djafari. Dit algoritme is beschreven in par. 5.3.

In tabel 6.1 worden enkele entropie-uitdrukkingen en hun eerste en tweede afgeleiden gegeven. Deze uitdrukkingen zijn vereist voor de implementatie van het algoritme. Voor het bepalen van de regularisatieparameters met het Klassieke-MaxEnt-algoritme en het Nieuwe-MaxEnt-algoritme worden maximalisatie-algoritmen uit [Press89] gebruikt. Voor het Nieuwe-MaxEnt-algoritme is er de bijkomende moeilijkheid dat ook het tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}$ berekend moet worden. Naast de N onbekende beeldintensiteiten $\mathbf{f}$ zijn er ook N onbekende tussenmodel-intensiteiten $\tilde{\mathbf{m}}$. Het aantal onbekenden neemt bij de overgang van het Klassieke-MaxEnt-algoritme naar het Nieuwe-MaxEnt-algoritme dus toe met een factor twee. De zoekrichtingen voor het Nieuwe-MaxEnt-algoritme bestaan nu uit twee delen. Het eerste deel is afkomstig van de afleiding naar



Figuur 6.1 De evolutie van *distError* in functie van het totaal aantal recursies met de momentenmethode: (a) $\sigma = 100$ (b) $\sigma = 60$ (c) $\sigma = 1$.

de beeldintensiteiten, het tweede deel correspondeert met de afleiding naar de tussenmodel-intensiteiten:

$$\frac{\partial Q}{\partial f_i} = -\rho_1 \ln \frac{f_i}{m_i} + \frac{\partial Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})}{\partial f_i} \tag{6.48}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \tilde{m}_i} = -\rho_2 \ln \frac{\tilde{m}_i}{\overset{o}{m}_i} - \rho_1 \sum_k B_{ki} \left(f_k \left(\textstyle\sum_j B_{kj} \tilde{m}_k \right)^{-1} - 1 \right). \tag{6.49}$$

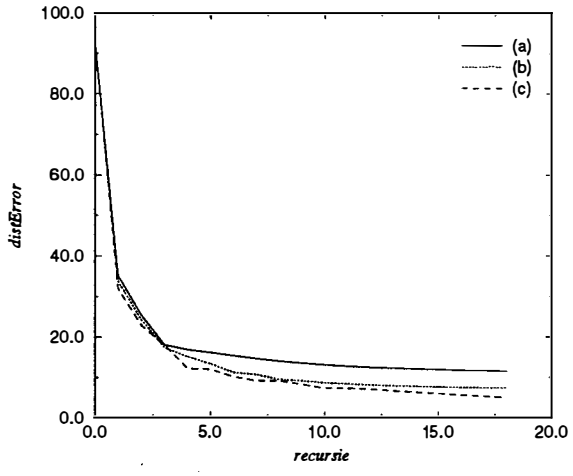
De grootte van een stap ϵ in een bepaalde richting wordt berekend naar analogie met (5.10).

Bij de studie van de invloed van het model $\mathbf{m}$ op de reconstructie van het Klassieke-MaxEnt-algoritme wordt een aangepaste versie van het algoritme van Green gebruikt (par. 5.2). Dit algoritme is immers veel eenvoudiger dan het gradiëntenalgoritme.

6.5.2 Het bepalen van de regularisatieparameter

Hier volgen enkele experimenten om de werking van de momentenmethode en de marginalisatiemethode te bestuderen. Het gebruikte fantoom is geïnspireerd op het `SL-fantoom`, zoals afgebeeld in fig. 4.17.

Voor deze testen geldt dat de metingen voldoen aan een Gaussdistributie met een enkele spreiding σ voor alle metingen. In fig. 6.1 wordt de evolutie van



Figuur 6.2 De evolutie van *distError* in functie van het aantal recursies voor het Klassieke-MaxEnt-algoritme: (a) $\sigma = 100$ (b) $\sigma = 60$ (c) $\sigma = 1$.

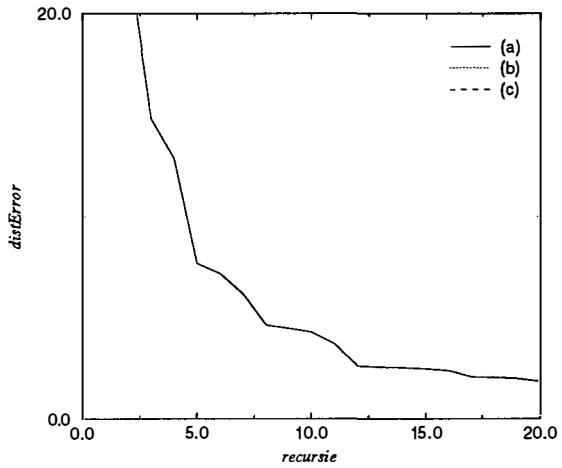
het *distError*-foutcriterium gegeven in functie van het recursienummer voor het momentenalgoritme. De verschillende curven corresponderen met verschillende waarden voor de spreiding σ. De a priori waarschijnlijkheidsdistributie bestaat uit de functies:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{f}) &= \sum_{j=1}^{N} f_j \\ H(\mathbf{f}) &= \sum_{j=1}^{N} \ln f_j \end{aligned} \tag{6.50}$$

Uit fig. 6.1 is het duidelijk dat het momentenalgoritme reeds faalt bij de aanwezigheid van slechts een beperkte hoeveelheid ruis ($\sigma > 1$). Het verschillend aantal uitgevoerde iteraties is te verklaren doordat het algoritme stopt nadat een aantal opeenvolgende verkeerde stappen genomen worden (zie bespreking in par. 5.3).

In fig. 6.2 wordt de evolutie van het *distError*-foutcriterium getoond voor het Klassieke-MaxEnt-algoritme. Bij deze methode blijft de invloed van de ruis beperkt. Zelfs bij een grote hoeveelheid ruis ($\sigma = 100$) wordt de reconstructie nog behoorlijk uitgevoerd.

In de volgende figuren (fig. 6.3, fig. 6.4) wordt telkens voor een bepaald ruisniveau de invloed nagegaan van het variëren van de breedte van de convolutie



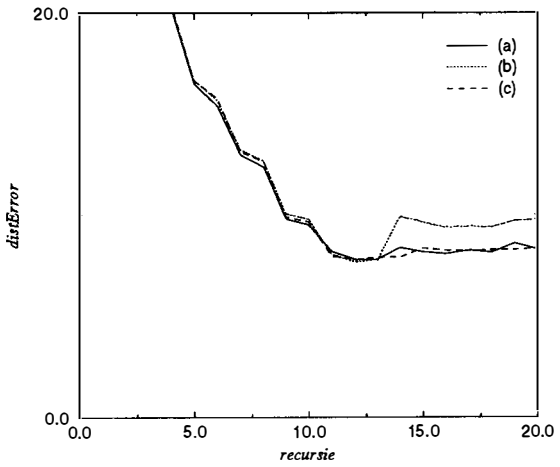
Figuur 6.3 De evolutie van *distError* in functie van het aantal recursies voor de Nieuwe-MaxEnt-methode voor $\sigma = 1$: (a) $b = 1$ (b) $b = 4$ (c) $b = 8$. De verschillende curven overlappen elkaar hierbij volledig.

bij het Nieuwe-MaxEnt-algoritme. In fig. 6.3 is de evolutie van het *distError*-foutcriterium weergegeven voor $\sigma = 1$. Voor dit lage ruisniveau is het verschil tussen de benaderingen miniem. Blijkbaar levert het invoeren van een tussenmodel onvoldoende bijkomende informatie op. De Nieuwe-MaxEnt-methode onderdrukt de invloed van de breedte van de convolutiekern. De reconstructies met de drie methoden zijn allemaal uitstekend.

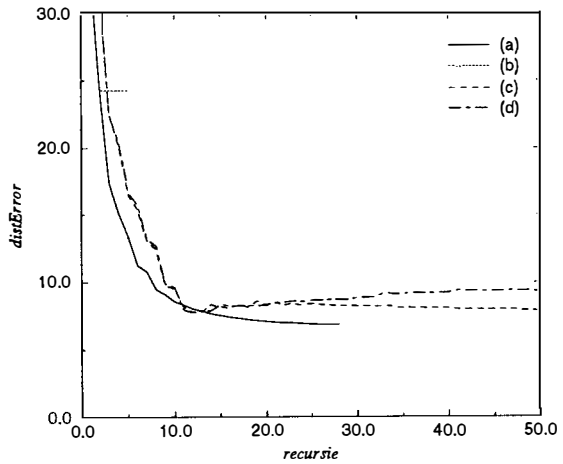
In fig. 6.4 wordt dezelfde evolutie weergegeven voor $\sigma = 60$. Hier is er wel een invloed van de breedte van de convolutiekern te merken. De beste waarde voor het *distError*-foutcriterium treedt op bij $b = 1$. Een convolutiebreedte van $b = 8$ is iets minder optimaal en een breedte van $b = 4$ levert het slechtste resultaat op. Dit effect wordt verklaard bij de bespreking van de reconstructies.

In fig. 6.5 wordt de evolutie van het *distError*-foutcriterium gegeven voor verschillende regularisatiemethoden. Uit fig. 6.5 blijkt duidelijk dat de beste kwaliteit voor de reconstructie optreedt met het Klassieke-MaxEnt-algoritme. Het momentenalgoritme levert de slechtste resultaten op. Bij dit momentenalgoritme worden de iteraties van het toegevoegde-gradiëntenalgoritme bijzonder snel onderbroken. Alle reconstructiemethoden zouden 100 recursies moeten doorlopen.

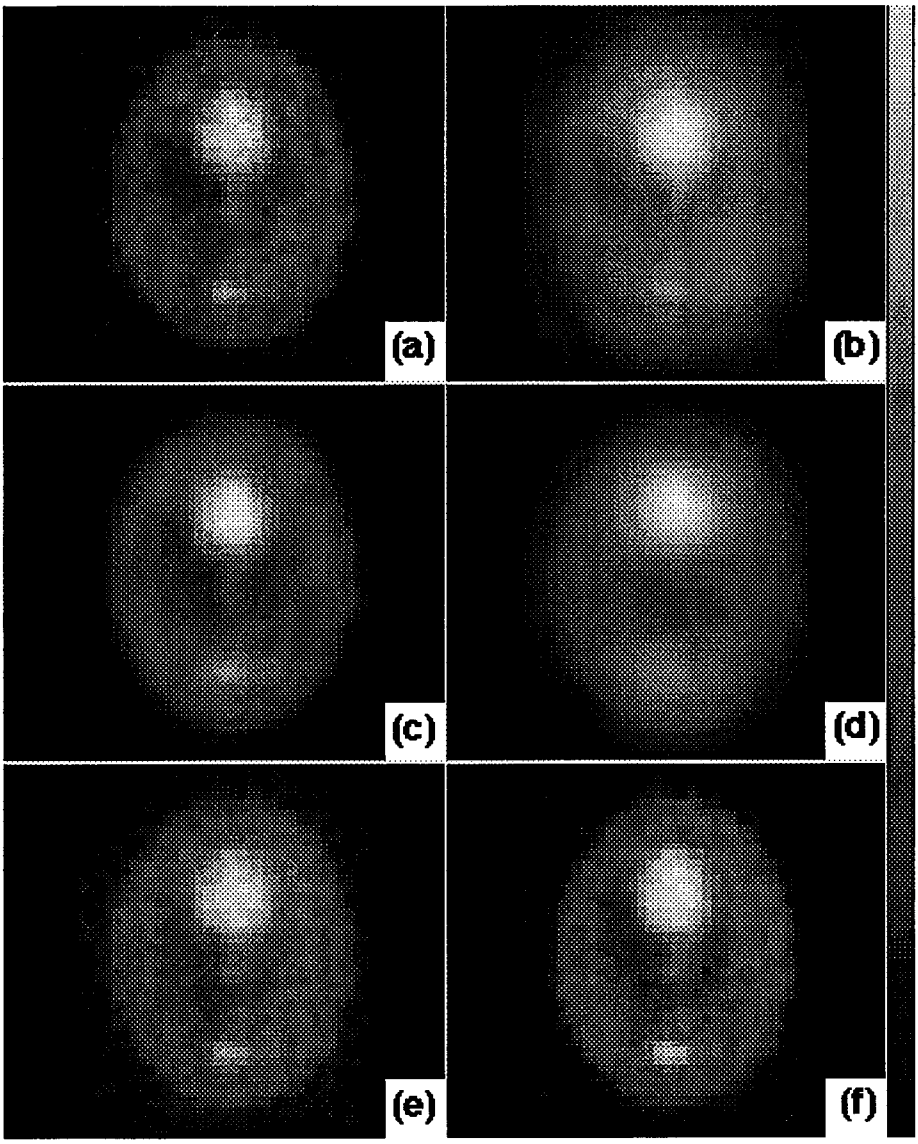
In fig. 6.6 zijn enkele reconstructies van de verschillende algoritmen weergegeven. De reconstructie met het Klassieke-MaxEnt-algoritme levert een bevre-



Figuur 6.4 De evolutie van *distError* in functie van het aantal recursies voor de Nieuwe-MaxEnt-methode voor $\sigma = 30$: (a) $b = 1$ (b) $b = 4$ (c) $b = 8$.



Figuur 6.5 De evolutie van *distError* in functie van het aantal recursies voor $\sigma = 60$: (a) de Klassieke-MaxEnt-methode (b) de momentenmethode van Djafari (c) de Nieuwe-MaxEnt-Methode met $b = 1$ (d) de Nieuwe-MaxEnt-Methode met $b = 4$.



Figuur 6.6 Reconstructies voor verschillende reconstructie methoden met $\sigma = 60$: (a) de Klassieke-MaxEnt-methode; (b) de momentenmethode; (c) de Nieuwe-MaxEnt-methodemet de Gausskern gelijk aan 1 pixel; (d) de Nieuwe-MaxEnt-methode met de Gausskern gelijk aan 4 pixels; (e) de Nieuwe-MaxEnt-methode met de Gausskern gelijk aan 8 pixels;(f) de entropiepriors volgens Djafari, maar met manueel gekozen regularisatieparameters.

digend resultaat op. Het momentenalgoritme daarentegen reconstrueert een beeld met veel te weinig structuur. De evolutie in functie van de breedte van de convolutiekern van de reconstructies met het Nieuwe-MaxEnt-algoritme verloopt zoals theoretisch voorspeld. Eerst zal bij toenemende grootte van de convolutiekern de vlakheid van de reconstructie toenemen. Vergelijk hiervoor de reconstructies behorend bij $b = 1$ en $b = 4$. Maar indien de convolutie heel groot wordt ($b = 8$), zal de reconstructie van het Nieuwe-MaxEnt-algoritme deze van het Klassieke-MaxEnt-algoritme benaderen. Bij een heel grote convolutiekern wordt immers elke struktuur van het tussenmodel vernietigd door de convolutie. Het model $\mathbf{m}$ zal dan bestaan uit een uniform beeld en het Nieuwe-MaxEnt-algoritme benadert het Klassiek-MaxEnt-algoritme. De laatste reconstructie uit fig. 6.6 correspondeert met een entropieprior volgens Djafari waarvan de regularisatieparameters manueel ingesteld werden. Het blijkt dat een zinvolle reconstructie verkregen wordt door de regularisatieparameters klein te veronderstellen. In dit geval wordt bijna een maximum-likelihood-reconstructie uitgevoerd.

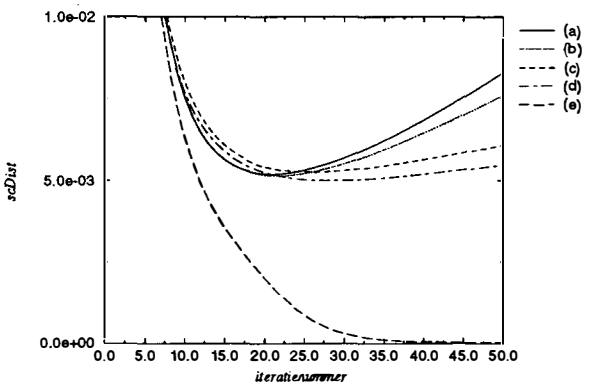
6.5.3 De invloed van het model in het Klassieke-MaxEnt-algoritme

Bij deze studie zal het algoritme van Green gebruikt worden (par. 5.2). De experimenten worden uitgevoerd op het `DDC-fantoom` gedigitaliseerd op een 128×128 rooster. De ruis op de metingen volgt een Poissondistributie.

Een bijkomende vereenvoudiging voor de marginalisatieprocedure is vereist voor het uitvoeren van deze experimenten. Deze vereenvoudig moet toelaten reconstructies uit te voeren voor metingen met Poissonruis. Bij de oorspronkelijke marginalisatieprocedure wordt verondersteld dat alle metingen een Gaussdistributie volgen met eenzelfde spreiding σ. De bepreking van deze methode is te vinden in par. 6.4.2. De benadering die hier ingevoerd wordt, bestaat uit twee delen. Eerst wordt in elk meetpunt (met waarde d_i) de Poissondistributie benaderd door een Gaussdistributie met spreiding $\sqrt{d_i}$. Nadien wordt de globale spreiding berekend door het gemiddelde te nemen van de individuele spreidingen:

$$\sigma = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \sqrt{d_i}. \tag{6.51}$$

In fig. 6.7 wordt de invloed van het variëren van het model $\mathbf{m}$ uitgezet. De verschillende modellen zijn: een uniform beeld, een ellipsvormig model van het hoofd, een convolutie van het referentiebeeld en het referentiebeeld zelf. Het is duidelijk dat naarmate de overeenkomst tussen het model en het referentiebeeld groter wordt het Klassieke-MaxEnt-algoritme erin slaagt de reconstructie te verbeteren. Indien het model gelijk is aan het referentiebeeld realiseert het



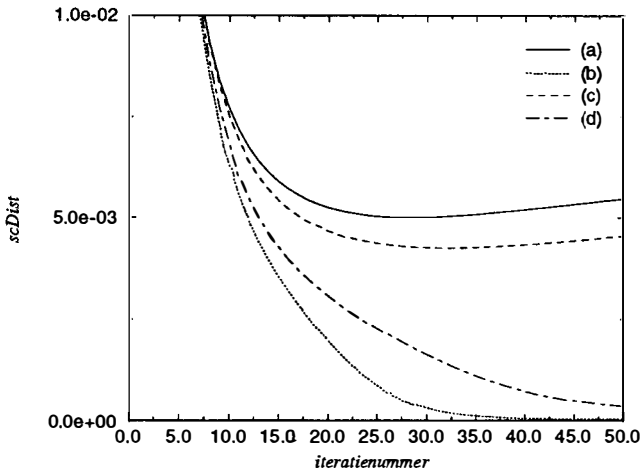
Figuur 6.7 De evolutie van het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer bij de Klassieke-MaxEnt-algoritme voor de verschillende modellen : (a) ML-EM-reconstructie, (b) uniform model, (c) ellipsvormig model van hoofd, (d) convolutie van referentiebeeld, (e) referentiebeeld. Het `DDC-fantoom` heeft gemiddelde intensiteit 200 in de projecties.

Klassieke-MaxEnt-algoritme een nagenoeg perfecte reconstructie. Blijkbaar kan het Klassieke-MaxEnt-algoritme een goed model onderscheiden van een minder goed model.

In fig. 6.8 wordt de invloed van het intensiteitsniveau op de kwaliteit van de reconstructie nagegaan. Indien het referentiebeeld als model gebruikt wordt, blijkt dat bij een toenemend intensiteitsniveau minder belang gehecht wordt aan het model. Indien de convolutie van het referentiebeeld als model dient, verhindert dit model niet dat de *scDist*-waarde verbetert bij een vermindering van het ruisniveau. Het Klassieke-MaxEnt-algoritme houdt bijgevolg rekening met het intensiteitsniveau (of equivalent het ruisniveau) van de metingen.

In fig. 6.9 worden enkele reconstructies (na 50 iteraties) samen met het gebruikte model getoond. Merk op dat de verbetering van de reconstructie met de convolutie van het referentiebeeld als model niet duidelijk is. De verbetering van de reconstructie bij het gebruik van het referentiebeeld als model is daarentegen wel frappant. Dit laat vermoeden dat de kwaliteit van de reconstructies enkel verbetert indien het model dicht genoeg bij het te reconstrueren beeld gebracht wordt.

In de praktijk is het bijna onmogelijk om het model reeds sterk te laten corresponderen met de gewenste reconstructie. De meest evidente keuze voor het model bestaat uit de spatiale convolutie van een FB-reconstructie. Strikt genomen is dit een anti-Bayesiaanse oplossing. De metingen worden hier tweemaal gebruikt: éénmaal om de a priori distributie op te stellen via het model en



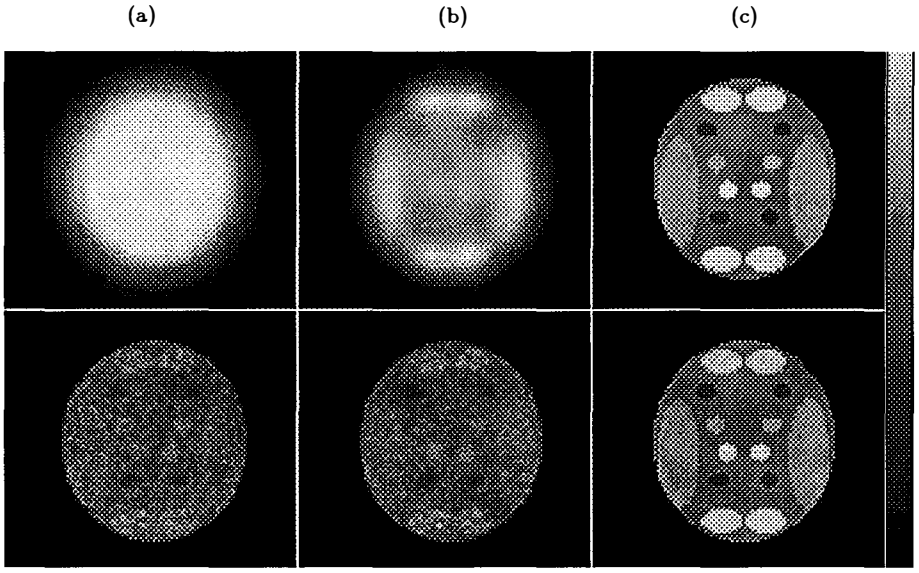
Figuur 6.8 De evolutie van het *scDist*-foutcriteriumin functie van het iteratienummer bij het Klassieke-MaxEnt-algoritme voor de verschillende modellen en gemiddelde intensiteiten in de projecties: (a) convolutie van referentiebeeld bij intensiteit 200, (b) referentiebeeld bij intensiteit 200, (c) convolutie van referentiebeeld bij intensiteit 400, (d) referentiebeeld bij intensiteit 400.

éénmaal in de directe waarschijnlijkheidsdistributie. Deze methode is verwant met de methode van [Levit87], waarbij de geconvolueerde FB-reconstructie gebruikt wordt in een Gaussiaanse a priori waarschijnlijkheidsdistributie.

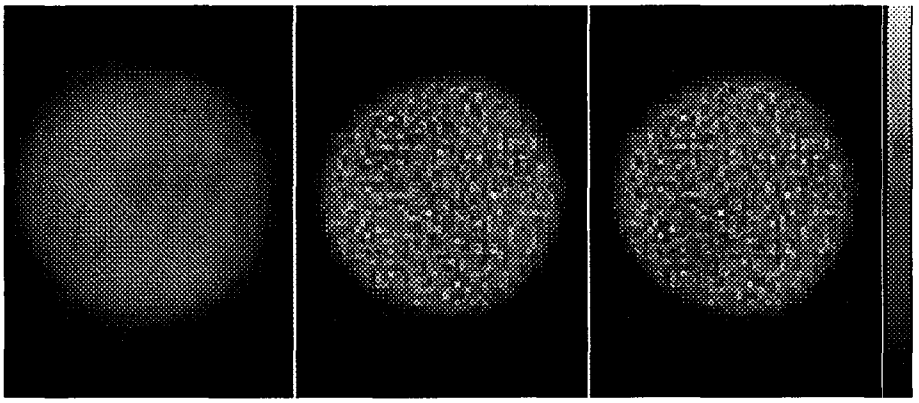
In fig. 6.10 worden de reconstructies getoond van een echt scannerbeeld waarbij het model bestaat uit een spatiale convolutie van een FB-reconstructie. Ter vergelijking wordt ook de ML-EM-reconstructie weergegeven. Het opgemeten object is een uniforme cilinder. Er valt geen kwaliteitswinst te bespeuren met het Klassieke-MaxEnt-algoritme.

6.5.4 Het `Memsys` 5-algoritme

Het **`Memsys`** 5-algoritme is een algoritme dat ontwikkeld werd door de groep rond Skilling en Gull (Cambridge, V.K.). Deze groep heeft al ongeveer 15 jaar ervaring met reconstructies van beelden met het maximum-entropieprincipe (zie par. 6.4.2). Recentelijk werd het **`Memsys`** 5-programma in een Bayesiaans jasje gestoken. Skilling en Gull zijn al vele jaren toonaangevend voor de ontwikkelingen in beeldreconstructiemethoden met entropiepriors. Hun programma, **`Memsys`** 5, is de referentie waaraan nieuwe ontwikkelingen getoetst worden. Het **`Memsys`** 5-programma wordt op vele onderzoeksgebieden toegepast: astronomie



Figuur 6.9 Modellen en reconstructies voor het Klassieke-MaxEnt-algoritme (met het algoritme van Green). De verschillende modellen zijn: (a) een convolutie van een circulaire ellips; (b) een convolutie van het referentiebeeld; (c) het referentiebeeld. De verschillende reconstructies corresponderen met erboven afgebeelde modellen: reconstructie (d) met model (a); reconstructie (e) met model (b) en reconstructie (f) met model (c). Het aantal iteraties voor de reconstructies is 50.



Figuur 6.10 Reconstructies na 100 iteraties van een uniforme cilinder met (a) model, (b) het ML-EM-algoritme en (c) het Klassieke-MaxEnt-algoritme (Green-algoritme versie) met een convolutie van de FB-reconstructie als model.

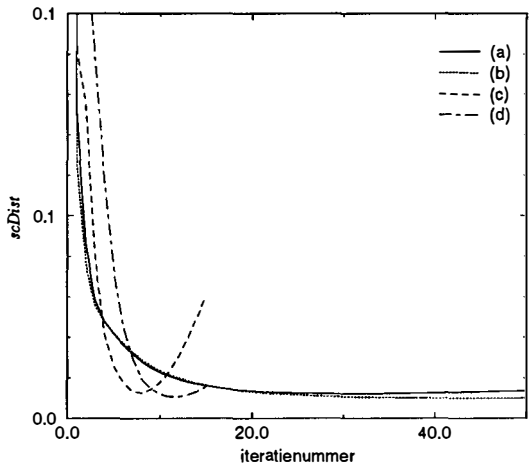
[Bonte93], spectroscopie, compartimenten-modellen, enz.

In medische beeldreconstructietechnieken is dit programma evenwel minder bekend. Dat het **Memsys 5**-programma een commercieel product is en bijgevolg nogal duur is, zal hier niet vreemd aan zijn. In deze paragraaf wordt het resultaat gepresenteerd van een nauwe samenwerking met de Cambridge-groep. Gedurende deze samenwerking werd het programma door mij aangepast voor reconstructie van tomografische beelden.

Hier worden de reconstructies van het Klassieke-MaxEnt-algoritme (**Memsys 5**-implementatie) vergeleken met reconstructies van het standaard-ML-EM-algoritme. Bovendien wordt ook de prestatie van het MOVIES-hulpmiddel onderzocht [Skill91]. Het MOVIES-hulpmiddel laat toe om verschillende beelden te reconstrueren. Deze beelden worden gekozen door de studie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributies. Een tweede "Bayesiaanse" hulpmiddel is de mogelijkheid om de activiteit met foutvlaggen in een bepaald gebied te berekenen. Bij het opstellen van de foutvlaggen wordt eveneens de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie gebruikt. Deze mogelijkheid wordt hier evenwel niet nader bestudeerd. Een studie van de prestatie van het **Memsys 5**-algoritme voor verschillende foutcriteria is gepubliceerd in [Desme93e]. Opmerkelijk is dat de Nieuwe-MaxEnt-methode nooit gecommercialiseerd werd door Skilling en Gull.

Vermits het **Memsys 5**-programma een commercieel product is, zijn de publicaties over de implementatiedetails schaars. De laatste publicatie waarin de werking van het algoritme toegelicht wordt, dateert van 1985 [Skill85]. Volgens dat artikel is het **Memsys 5**-algoritme gebaseerd op een toegevoegde-gradiëntenmethode. De toegevoegde-gradiëntenmethode wordt evenwel direct in een meerdimensionale ruimte uitgevoerd. Een ander belangrijk detail is de bepaling van de regularisatieparameter. In par. 6.4.2 wordt de regularisatieparameter bepaald door een vergelijking te maximaliseren. Deze vergelijking maakt gebruik van tal van vereenvoudigingen. Zo wordt de optimale schatting van het beeld vervangen door de voorlopige schatting. In het **Memsys 5**-programma wordt een meer voorzichtige houding aangenomen. De regularisatieparameter wordt eerst heel groot gekozen. Hierdoor zal een afwijking van het a priori optimale beeld klein gehouden worden. Door geleidelijk de regularisatieparameter te verkleinen zal op een bepaald ogenblik voldaan worden aan de vergelijking (6.36). Deze conservatieve houding heeft tot gevolg dat het aantal projecties/terugprojecties die nodig zijn bij een **Memsys 5**-reconstructie groot is in vergelijking met het ML-EM-algoritme.

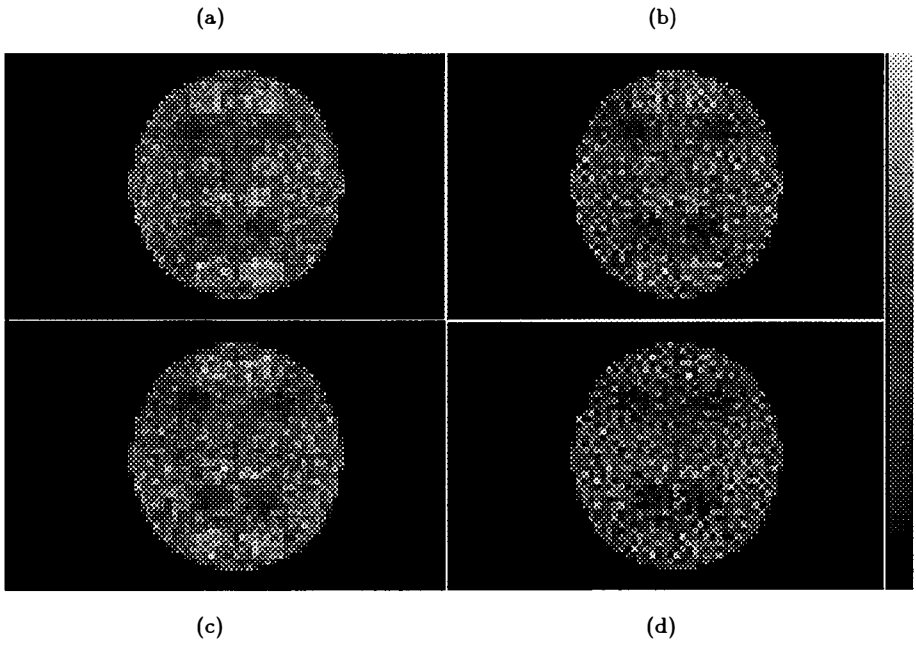
In fig. 6.11 wordt de evolutie van het *scDist*-foutcriterium vergeleken voor het **DDC-fantoom** met gemiddelde intensiteiten 200 en 400 in de projecties voor het ML-EM- en het **Memsys 5**-algoritme. Merk op dat ongeveer hetzelfde minimum voor het *scDist*-criterium bereikt wordt. Het **Memsys 5**-programma



Figuur 6.11 De evolutie van het *scDist*-foutcriterium in functie van het iteratienummer voor: (a) ML-EM-reconstructie met intensiteit 200, (b) ML-EM-reconstructie met intensiteit 400, (c) **Memsys 5**-reconstructie met intensiteit 200, (d) **Memsys 5**-reconstructie met intensiteit 400. De iteraties voor het ML-EM-algoritme en het **Memsys 5**-algoritme zijn wel niet vergelijkbaar in rekentijd (zie tekst).

vertoont evenals het ML-EM-algoritme een stijging van het *scDist*-criterium. Het gebruik van de entropieprior slaagt er blijkbaar niet in om de ruisdegeneratie te vermijden. Wel slaagt het algoritme erin de toename van de *scDist*-waarden een halt toe te roepen in latere iteraties (niet zichtbaar op de figuur). Bemerk evenwel dat de benodigde CPU-tijd voor een iteratie van het **Memsys 5**-programma sterk verschilt van de CPU-tijd die nodig is voor één iteratie van het ML-EM-iteratie. Eén iteratie in het **Memsys 5**-programma stemt overeen met één waarde van de regularisatieparameter. Tijdens één enkele iteraties wordt de schatting van het beeld aangepast totdat een bepaald stopcriterium (dat zelf afhangt van de waarde van regularisatieparameter) bereikt wordt [Skill85]. Het aantal projecties/terugprojecties voor één iteratie ligt hierdoor niet vast, maar is steeds veel groter dan het aantal projecties/terugprojecties voor één iteratie van het ML-EM-algoritme. Het aantal projecties/terugprojecties bij iteratienummer 10 is bij het ML-EM-algoritme 20 en bij het **Memsys 5**-algoritme 160.

In fig. 6.12 worden reconstructies van het **Memsys 5**-programma vergeleken met een reconstructie met het ML-EM-algoritme. Het is duidelijk dat de **Memsys 5**-reconstructies een grotere grilligheid vertonen dan de ML-EM-reconstructies. De grilligheid van de reconstructie neemt sterk toe bij een dalend intensiteitsniveau van de projecties. Gull suggereert het invoeren van



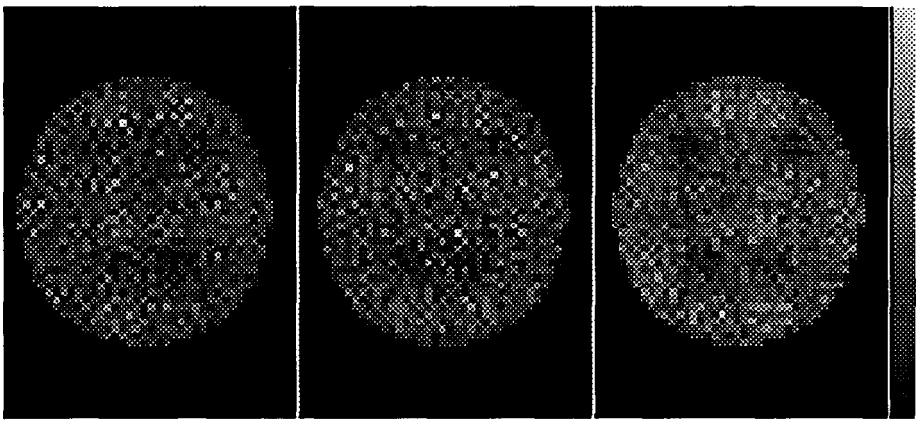
Figuur 6.12 Een vergelijking van de reconstructie van het ML-EM-algoritme en het **Memsys** 5-algoritme: (a) ML-EM-reconstructie na 100 iteraties voor **DDC-fantoom** met intensiteit 200, (b) **Memsys** 5-reconstructie **DDC-fantoom** met intensiteit 200, (c) ML-EM-reconstructie na 100 iteraties voor **DDC-fantoom** met intensiteit 100, (d) **Memsys** 5-reconstructie **DDC-fantoom** met intensiteit 100.

een convolutie op de schattingen van het beeld om de reconstructiekwaliteit te verbeteren. Deze methode is dan vergelijkbaar met de zeefmethode [Snyde85]. Het gebruik van een convolutie van de beelden wordt binnen het kader van dit werk evenwel niet onderzocht. De voornaamste reden hiervoor is dat een convolutie de maximale frequentiecomponent voor het hele beeld verkleint.

In fig. 6.13 worden enkele reconstructies gegeven met het MOVIES-hulpmiddel. De verschillende beelden zijn steekproeven van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie. Deze beelden zijn nog grilliger dan de gewone reconstructies van het **Memsys** 5-algoritme. Door het gemiddelde van 10 beelden van het MOVIE-hulpmiddel te nemen, wordt het beeld (c) van fig. 6.13 verkregen. Bij deze reconstructie is een uitmiddeling merkbaar, maar de reconstructie is nog steeds niet uitzonderlijk goed.

6.5.5 Bespreking

Van de eigen implementaties met entropiepriors en automatische berekening van de regularisatieparameter(s) blijkt de Klassieke-MaxEnt-algoritme de beste reconstructies op te leveren. De entropieprior volgens Djafari met de momen-



(a) (b) (c)

Figuur 6.13 Schattingen voor het beeld met het MOVIES-hulpmiddel: (a) en (b) twee afzonderlijke beelden (c) het gemiddelde van 10 beelden van het MOVIES-hulpmiddel voor `DDC-fantoom` met intensiteit 200.

tenmethode lijkt ongeschikt voor de reconstructie van PET-beelden. Het reconstructies verkregen met het Nieuwe-MaxEnt-algoritme zijn in overeenstemming met de theoretische voorspellingen. De verbetering van de beeldkwaliteit met het Nieuwe-MaxEnt-algoritme is evenwel niet groot genoeg om de toename in complexiteit van het algoritme te verantwoorden.

Het Klassieke-MaxEnt-algoritme gedraagt zich zoals voorspeld door de theorie. Het algoritme brengt het ruisniveau en het kwaliteit van het model in rekening. De hoeveelheid informatie die het model moet aanbrengen is evenwel zo belangrijk dat bij praktische toepassen de verbetering t.o.v. een ML-EM-reconstructie verwaarloosbaar is. De invloed van de verschillende vereenvoudigingen op de kwaliteit van de reconstructie kan het onderwerp uitmaken van verder onderzoek.

De kwaliteit van de reconstructies van het **`Memsys 5`**-programma is niet beter dan de kwaliteit van de reconstructies van het ML-EM-algoritme. Bij het **`Memsys 5`**-algoritme treedt er evenwel een stabilisatie van de afwijking tussen het gereconstrueerde beeld en het referentiebeeld op. De benodigde rekentijd voor het **`Memsys 5`**-algoritme is beduidend hoger dan voor het ML-EM-algoritme. Dit maakt de toepassing ervan voor de medische praktijk minder evident. Het MOVIES-hulpmiddel tracht een Bayesiaanse benadering van de beeldreconstructie uit te voeren. Het nemen van steekproeven van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie resulteert in bijzonder grillig beelden. Het gebruik van het MOVIES-hulpmiddel voor de visuele interpretatie wordt hierdoor bemoeilijkt.

6.6 Besluit

In dit hoofdstuk zijn een aantal entropiepriors en regularisatieprocedures getest. De twee typen a priori waarschijnlijkheidsdistributies hebben een corresponderende methode om de regularisatieparameter(s) te bepalen. Het blijkt dat het momentenalgoritme niet toepasbaar is bij reconstructies waarbij het ruisniveau zo hoog is als bij PET-metingen. Van het Klassieke-MaxEnt-algoritme en het Nieuwe-MaxEnt-algoritme lijkt het Klassieke-MaxEnt-algoritme de beste reconstructies op te leveren. Bij verschillende modellen slaagt het Klassieke-MaxEnt-algoritme erin goede modellen te onderkennen. Vooraleer het model een duidelijk invloed heeft op de reconstructie, moet de afstand tussen model $\mathbf{m}$ en werkelijk beeld voldoende klein zijn. Hierdoor wordt de bruikbaarheid van de methode beperkt. Bij het Klassiek-MaxEnt-algoritme, zelf met een convolutie van een FB-reconstructie als model, zijn de resultaten niet duidelijk beter dan de resultaten van het ML-EM-algoritme. Het Nieuwe-MaxEnt-algoritme gedraagt zich zoals theoretisch voorspeld. Bij een toenemende breedte van de convolutie zal de vlakheid van de reconstructies in eerste instantie toenemen. Wordt de convolutie te breed, dan zal de invloed van de convolutie op de reconstructie verdwijnen. De reconstructies benaderen bij grote convolutiebreedten de reconstructies van het Klassiek-MaxEnt-algoritme. Deze reconstructies zijn niet noodzakelijk beter dan de ML-EM-reconstructies.

Tenslotte werd het `Memsys 5`-algoritme geëvalueerd. Ook hier lijkt het ML-EM-algoritme evenwaardige (of zelfs betere) reconstructies op te leveren dan de Klassiek-MaxEnt-methode.

Hoofdstuk 7

Besluit

In dit werk worden een aantal aspecten van Bayesiaanse beeldreconstructiemethoden bij PET behandeld. Het domein van de verschillende onderzoeksgebieden is hierbij ruim: van de theoretische studie van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen tot de praktische implementatie van algoritmen.

Een belangrijke doelstelling van deze thesis is de studie van de snelheid en de kwaliteit van de Bayesiaanse reconstructiemethoden. Hierdoor wordt een bijdrage geleverd tot de praktische bruikbaarheid van de Bayesiaanse reconstructiemethoden.

In hoofdstuk 2 wordt een elementaire inleiding tot PET gegeven. Dit wordt gevolgd door een hoofdstuk met een uitgebreide uiteenzetting van de technieken van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen.

Het werk i.v.m. beeldreconstructiemethoden begint in hoofdstuk 4 met enkele verbeteringen voor het "Maximum Likelihood-Expectation Maximization"-algoritme (ML-EM-algoritme). Dit is het populairste statistische reconstructiealgoritme in PET. De voornaamste nadelen van dit algoritme zijn: zijn lange reconstructietijd en de ruisdegeneratie. Verschillende oplossingen om de reconstructietijd te verminderen, worden in hoofdstuk 4 onderzocht:

1. *parallelle implementatie*: de verkregen versnellingen zijn nagenoeg gelijk aan het aantal processoren;

2. *multirooster-reconstructie*: de versnelling is miniem indien de optimale iteratie beschouwd wordt;

3. *reconstructies met partiële data*: slechts een klein kwaliteitsverlies treedt op door de reconstructie tijdens de meting te starten.

De ruisdegeneratie kan vermeden worden door een stopcriterium. Het voorgestelde stopcriterium is een Bayesiaanse modeltoetsing en geeft een eenvoudig

alternatief voor een vroegere test (gebaseerd op klassieke statistische methoden). De kwaliteit van de reconstructie wordt tevens verbeterd door de attenuatiefactoren m.b.v. het ML-EM-algoritme uit te rekenen.

In hoofdstuk 5 worden verscheidene algoritmen uitgetest voor de maximalisatie van het "Maximum Likelihood"-criterium. Het blijkt dat het ML-EM-algoritme sneller convergeert dan het gradiënten-, het toegevoegde-gradiënten-algoritme (zoals voorgesteld door Djafari) en het gesimuleerd-uitgloeien. Bij de uitgevoerde experimenten bereikt de MART sneller een optimum. Daar staat tegenover dat de MART gevoeliger lijkt voor ruis.

In het laatste hoofdstuk worden verschillende a priori waarschijnlijkheidsdistributies bestudeerd. Deze zijn steeds gebaseerd op een "entropie"-formule. Onderzoek wordt ook verricht naar de prestatie van technieken om de regularisatieparameter(s) automatisch te bepalen. Experimenten duiden aan dat de momentenmethode (algoritme van Djafari) niet geschikt is voor PET-reconstructies. De marginalisatiemethoden leverden ook geen betere reconstructies op dan het ML-EM-algoritme. Wel werd een stabilisatie van de kwaliteit geobserveerd.

Nog een aantal verwezenlijkingen zijn geplaatst in de appendices: de computerfantoomgenerator, `BayesCalc` (een pakket om automatisch Bayesiaanse berekeningen uit te voeren) en de theoretische behandeling van de attenuatiefactoren.

De voornaamste originele bijdragen van dit werk zijn: het `BayesCalc`-pakket, de diverse aanpassingen van het ML-EM-algoritme, de theoretische studie van de attenuatiefactoren, de studie van maximalisatie-algoritmen en de studie van a priori waarschijnlijkheidsdistributie gebaseerd op entropie-uitdrukkingen met de bijhorende berekeningsmethoden voor de regularisatieparameters.

Dit werk kan nog op diverse manieren uitgebreid worden. Zo wordt er momenteel onderzoek verricht naar het gesimuleerd-uitgloeien en het pixon-algoritme. Het onderzoek van het gesimuleerd-uitgloeien legt zich toe op de vorm van de a priori waarschijnlijkheidsdistributie en de optimalisatie van het iteratieschema. Bij het pixon-algoritme wordt een convolutie van de schattingen toegepast, waarbij de breedte van de convolutie evenwel niet noodzakelijk uniform is voor het hele beeld.

Bij de experimenten uit deze thesis werd zelden reële scannerdata gebruikt. De beschikbare scannerdata in Gent is afkomstig van erg verouderde scanners (ECAT IV en ECAT II). Beide scanners zijn immers reeds meer dan 10 jaar oud en worden daarom soms "bronze age"-scanners genoemd. De relevantie van de resultaten van experimenten met deze scannermetingen kan dan ook in vraag gesteld worden. Deze situatie is evenwel tijdelijk, in 1995 wordt een nieuwe PET-scanner geïnstalleerd in Gent. Deze nieuwe scanner zal aanleiding

geven tot veel nieuwe onderzoeksonderwerpen.

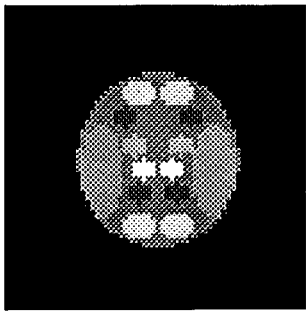
Appendix A

De computerfantoomgenerator

A.1 Inleiding

Het doel van een reconstructie-algoritme in PET is het berekenen van een tracerverdeling uit een aantal projectiemetingen. Om de prestatie van een reconstructie-algoritme te controleren moet een vergelijking tussen de reconstructie en de werkelijke tracerverdeling uitgevoerd worden. Bij medische toepassingen kan deze laatste controlestap slechts uiterst zelden geschieden. De tracerverdeling in een patiënt is immers onbekend en enkel invasieve technieken laten enige verificatie toe. Daarom zijn voor medische scanners (PET, SPECT, NMR) een beperkt aantal fantomen op de markt gebracht. Deze fantomen kunnen m.b.v. de scanner opgemeten worden. De resultaten van de reconstructie-algoritmen kunnen dan vergeleken worden met de specificaties van het fantoom. Maar het uitvoeren van metingen met een dergelijk fantoom vereist veel werkuren en (financiële) middelen. Bovendien zal er nog steeds een onzekerheid over de exacte tracerverdeling in het fantoom bestaan. Kleine positioneringsfouten kunnen b.v. reeds complicaties opleveren.

Dergelijke problemen worden omzeild door het gebruik van computerfantomen. De configuratie van het fantoom wordt nu gespecifieerd door de gebruiker. Elke ambiguïteit hieromtrent verdwijnt. Doordat ook de meetprocedure gemodelleerd wordt in een transfermatrix, vergroot de controle van de gebruiker op het reconstructieproces. Alle effecten t.g.v. een onvolledige kennis van de transfermatrix worden vermeden. De computerfantoomgenerator laat bijgevolg toe om uitsluitend het reconstructie-algoritme te testen. Bovendien kan de computerfantoomgenerator gebruikt worden voor de verfijning van de transfermatrix-beschrijving. De invloed van verschillende onnauwkeurigheden



Figuur A.1 Het `DDC-fantoom`.

bij de implementatie van de transfermatrix op de reconstructie-algoritmen kan onderzocht worden.

De voornaamste doelstellingen van de computerfantoomgenerator zijn dus:

1. het eenvoudig produceren van metingen waarbij de evaluatie van de reconstructie mogelijk is;
2. de onnauwkeurigheden in de beschrijving van de transfermatrix opvangen;
3. de beschrijving van de transfermatrix verfijnen.

A.2 Het algemeen programmeerschema

De computerfantoomgenerator bestaat uit een aantal afzonderlijke bouwstenen. Elke bouwsteen voert een specifieke taak uit en kan afzonderlijk of in combinatie met andere bouwstenen aangewend worden. De kracht van de implementatie bestaat erin de bouwstenen op verschillende manieren te combineren.

De eerste bouwsteen laat toe om de fantoomconfiguratie te specifiëren. De computerfantomen in de literatuur zijn meestal samengesteld uit een aantal geometrische objecten (dikwijls ellipsen). Bij de voorgestelde implementatie worden fantomen opgebouwd door het superponeren van een aantal eenvoudige geometrische vormen (ellipsen, lijnen, ...). Een voorbeeld van een dergelijk fantoom is het `DDC-fantoom` uit fig. A.1.

De tweede bouwsteen kan verschillende operaties (convolutie, rotatie, ...) uitvoeren op het fantoom. Bij deze operaties blijven de dimensies van het fantoom behouden.

De derde bouwsteen voert de geometrische projectie uit. Hier worden de detectorposities van de scanner in rekening gebracht.

De configuratie- en de operatie-bouwsteen zijn geïncorporeerd in een enkel programma: **phg**. Dit programma kan de configuratie van een fantoom evenals de opeenvolging van de operaties (convoluties, ...) bewaren in een ASCII-bestand. Aldus wordt hergebruik en aanpassing van voorgaande specificaties eenvoudig. De standaard uitvoer van **phg** is een binair bestand. Dit bestand bevat de opeenvolging van pixelintensiteiten.

Het programma **scansim** combineert de verschillende bouwstenen om de volledige scansequentie van PET te simuleren. Het resultaat van **scansim** zijn de drie sinogrammen : de blanko-scan, de transmissie-scan en de emissie-scan.

A.3 Specifieke eigenschappen

Bij het specifiëren van de configuratie van een fantoom worden de afmetingen opgegeven in mm. Dit laat toe om eenzelfde fantoom eenvoudig te digitaliseren op verschillende pixelroosters. De volgende geometrische objecten kunnen gebruikt worden voor het opbouwen van een fantoom:

1. cirkel;
2. rechthoek;
3. lijn;
4. meerdere evenwijdige lijnen;
5. driehoek;
6. ellips.

De algemene configuratie bevat informatie over de pixelgrootte, het aantal rijen en kolommen van het beeld en de achtergrondintensiteit. De verschillende intensiteiten van objecten worden gesuperponeerd. Indien twee objecten overlappen zal in het overlappingsgebied de intensiteit van de pixel gelijk zijn aan de som van de intensiteiten van de verschillende objecten. Een uitzondering hierop wordt gevormd door objecten met intensiteit nul. Door het plaatsen van een dergelijk object worden de pixelintensiteiten voor het geselecteerde gebied op nul gezet. Hierdoor kunnen gebieden met lage intensiteit ingebed worden in grotere structuren met hoge intensiteit. Een groot aantal verschillende intensiteitscombinaties kan met deze procedure opgesteld worden. Als voorbeeld wordt het ASCII-bestand van het **DDC-fantoom** weergegeven in fig. A.2

De beschikbare operaties voor de beelden zijn:

1. verwijderen van pixelwaarden door een toevalsproces;
2. convolutie;

```
*PIC*

Pixelsize Nr Column Nr Rows Background Act.,
5        64 64 0


CIRCLES
x y radius activity,
8 -15.00 -10.00 8.0 22
9 15.00 -10.00 8.0 22
10 -25.00 15.00 8.0 15
11 25.00 15.00 8.0 15
12 -35.00 45.00 8.0 0
13 35.00 45.00 8.0 0
14 -22.00 -35.00 8.0 0
15 22.00 -35.00 8.0 0
16 -35.00 45.00 8.0 23
17 35.00 45.00 8.0 23
18 -22.00 -35.00 8.0 23
19 22.00 -35.00 8.0 23

RECTANGLES
x1 y1 x2 y2 angle activity,

MULTIPLE LINES
angle activity width distance,

SINGLE LINES
x1 y1 x2 y2 width activity,

TRIANGLES
x1 y1 x2 y2 x3 y3 activity,

ELLIPSES
x1 y1 x2 y2 radius activity,
1 0.00 -35.00 0.00 35.00 180.00 45
2 -35.00 72.00  -5.00 72.00 35.0 21
3 35.00 72.00   5.00 72.00 35.0 21
4       -60.00    -60.00  -60.00  35.00 100.00 11
5       60.00    -60.00  60.00    35.00    100.00 11
6 -35.00 -72.00  -5.00 -72.00 35.0 21
7 35.00 -72.00  5.00 -72.00 35.0 21


COLOR SCALE,
```

Figuur A.2 Het ASCII-bestand met de configuratie voor het `DDC-fantoom`.

3. ruistoevoeging;

4. rotaties;

5. horizontale en verticale translaties.

De opeenvolging van verschillende operaties kan eveneens in een ASCII-bestand opgeslagen worden. Een voorbeeld van een dergelijk ASCII-bestand is te vinden in fig. A.3.

De belangrijkste operaties van **phg** met hun opties worden weergegeven in tabel A.1.

Bij de projectie-operatie kan het aantal detectoren, het aantal meethoeken en de grootte van de detectoren ingesteld worden. De totale breedte van de detectoren mag hierbij verschillen van de totale breedte van het beeld. De projectiehoeken worden steeds gelijkmatig verdeeld over het interval $[0, 180]$. Na het uitvoeren van de projectie-operatie wordt een sinogram uitgeschreven. In fig. 1.3 is een voorbeeld van een sinogram weergegeven.

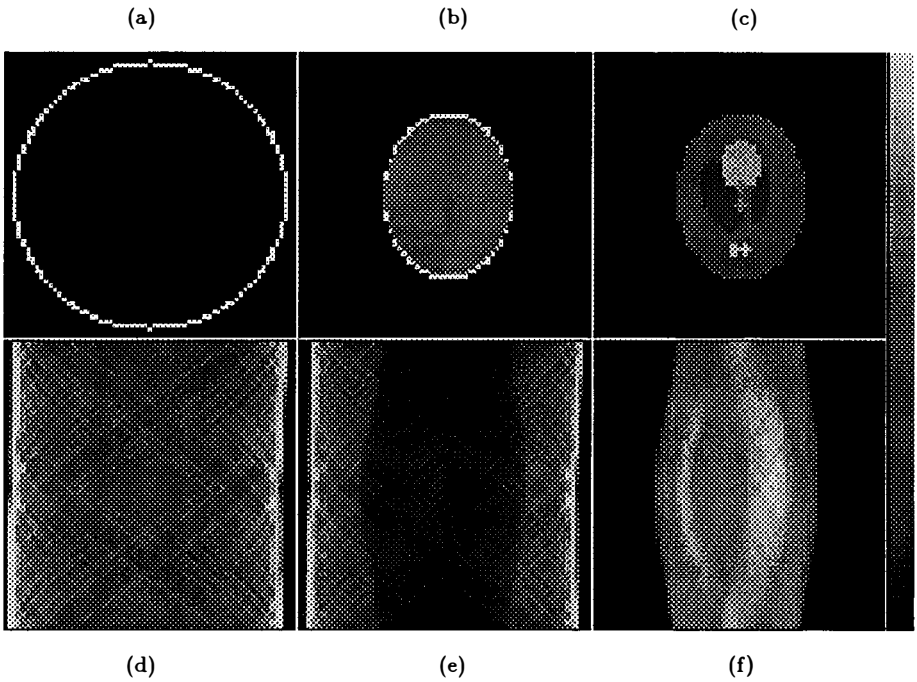
Het programma **scansim** produceert de drie sinogrammen van een PET-sequentie: de blanco-scan, de transmissie-scan en de emissie-scan. De vereiste supplementaire informatie voor **scansim** is de configuratie van de ringbron, de attenuatiecoëfficiënten van het fantoom en de tracerverdeling van het fantoom. In fig. A.4 worden dergelijke configuraties en de resulterende sinogrammen weergegeven.

```
*CAL*

DISCARDED DATA
perc

CONVOLUTION
GAUSS  width  hor ver
2  1.000 1.000

NOISE
Poisson
1

ROTATION
Xo   Yo   angle

HORIZONTAL DISPLACEMENT
distance
3  5

VERTICAL DISPLACEMENT
distance
```

Figuur A.3 Een voorbeeld van een ASCII-bestand met operaties. In volgorde wordt uitgevoerd: (1) voeg Poissonruis toe, (2) een convolutie met een tweedimensionale Gausskern en (3) een horizontale translatie over 5 mm.

Commando's	Opties	Parameters
Configuratie		*pixelgrootte, aantal rijen, aantal kolommen, achtergrond activiteit*
Cirkel		*centrum (x, y), straal, activiteit*
Rechthoek		*hoekpunt linksonder (x,y), hoekpunt rechtsboven (x,y), hoek met horizontale, activiteit*
Enkele lijn		*startpunt (x,y), eindpunt(x,y) breedte, activiteit*
Evenwijdige lijnen		*hoek met horizontale, activiteit, lijnbreedte, afstand tussen lijnen*
Driehoek		*punt 1 (x,y), punt 2 (x,y),punt 3 (x,y)*
Ellips		*brandpunt 1 (x,y), brandpunt 2 (x,y), straal*
Operaties		
Verwijderen van meetpunten		*percentage*
Convolutie		
	Gauss	*horizontale breedte, verticale breedte*
	Sinc	*straal*
	Cone	*straal*
	Matrix	*size X,size Y, elements*
Ruis		
	Poisson	
	Gauss	*spreiding*
Rotatie		*rotatiepunt (x,y), hoek*
Horizontale translatie		*grootte*
Verticale translatie		*grootte*

Tabel A.1 Tabel met opties voor configuraties en operaties van phg.



Figuur A.4 De verschillende configuraties (de invoer) voor `scansim` en de corresponderende sinogrammen (de uitvoer) voor `scansim`: (a) ringbron-configuratie, (b) attenuatiecoëfficiënten, (c) traververdeling, (d) blanco-sinogram, (e) transmissie-sinogram, (f) emissie-sinogram.

Appendix B

Het Mathematica**-pakket** BayesCalc

B.1 Inleiding

Mathematica[1] is een omgeving om symbolische en numerieke manipulaties uit te voeren. De mogelijkheid om ook symbolische manipulaties uit te voeren onderscheidt *Mathematica* van de normale programmeertalen. Gelijkaardige pakketten zijn *Maple*, *Maxima*,... Het is niet denkbeeldig dat binnen enkele jaren de meeste symbolische manipulaties, naar analogie met de numerieke berekeningen nu, door computers uitgevoerd zullen worden. Een computer vormt een uiterst geschikt hulpmiddel voor dergelijke manipulaties.

Er bestaan reeds een aantal publicaties [Korsa93a], [Korsa93b] waarbij *Mathematica* gebruikt wordt voor Bayesiaanse berekeningen. De basisberekeningen (o.a. toepassing van de regel van Bayes) worden hierbij nog steeds manueel uitgevoerd. Het hier voorgestelde programma gaat nog een stap verder. Het pakket `BayesCalc` implementeert de basisregels van het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen (BWR) in *Mathematica*. Hierdoor kunnen in principe alle berekeningen van een Bayesiaanse analyse automatisch door de computer uitgevoerd worden.

De centrale operatie hierbij is het berekenen van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie door de opeenvolgende toepassingen van de produkt- en somregel. Het pakket steunt hiervoor op de informatie die de gebruiker over het specifiek probleem opgeeft. Deze informatie bevat de afhankelijkheden van verschillende hypothesen, de directe waarschijnlijkheden, enz. Doordat `BayesCalc` de berekeningen automatisch uitvoert, wordt de voornaamste zorg

[1] *Mathematica* is een merknaam van Wolfram Research Inc. Voor details over de *Mathematica*-programmeertaal zie [Wolfr91].

van de gebruiker het exact specifiëren van deze informatie. In deze appendix worden geen implementatiedetails gegeven. Voor de geïnteresseerde programmeur is een rapport beschikbaar met meer specifieke gegevens. [Desme93e].

Notatie:
Mathematica-invoer en uitvoer wordt gegeven in de `''typeset''`-font. De *Mathematica*-interface wordt gesimuleerd door invoerregels te laten voorafgaan door "*In[n]* :=", en uitvoerregels door "*Out[n]*=". Hierbij is *n* het *Mathematica*-lijnnummer. Indien *n* gelijk is aan één, wordt geen voorafgaande invoer verondersteld.

B.2 De algemene eigenschappen van `BayesCalc`

De algemene notatie van een conditionele waarschijnlijkheid is `bp[{A}, {B}]`. Dit is equivalent met $bp(A \mid B\ I)$. Bemerk dat de haakjes "{}" bepalen welke hypothesen zich aan de linker- en rechterkant van het conditioneel teken "|" bevinden. Indien een hypothese bestaat uit een verzameling hypothesen, d.i. het logisch produkt van de hypothesen, worden de hypothesen gescheiden door komma's.

Voor de berekening van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie moet de informatie I over het probleem aan het pakket meegedeeld worden. Beschouw eerst het opgeven van een probabilistische relatie. Dit gebeurt met behulp van de functie `DefineBP`:

$$\texttt{DefineBP}[\{\texttt{A}\}, \{\texttt{B}\}, \mathit{userFunc}[A, B]] \tag{B.1}$$

In de conventionele notaties is dit gelijk met $bp(A|BI) = \mathit{userFunc}(A, B)$. Zo geeft b.v. de regel

$$\texttt{DefineBP}[\{\texttt{x}\}, \{\mu, \sigma\}, \texttt{Gauss}[\texttt{x}, \mu, \sigma]] \tag{B.2}$$

aan dat de directe waarschijnlijkheidsdistributie voor x gegeven wordt door een Gaussdistributie met gemiddelde μ and spreiding σ.

Het is belangrijk te beseffen dat `BayesCalc` steeds veronderstelt dat twee hypothesen `A` en `B` onafhankelijk zijn van elkaar, tenzij een relatie van de vorm (B.1) deze hypothesen verbindt. Dit principe is ingevoerd om buitensporig typwerk te vermijden. Indien de gebruiker wenst dat alle hypothesen afhankelijk zijn van elkaar kan dit gebeuren door de functie `AllDependent[]` aan te roepen. De afhankelijkheid tussen hypothesen kan opgeheven worden door `Independent[{A},{B}]`.

Een tweede informatievorm bestaat uit de specificatie van de domeinen van de verschillende parameters. De invoer

$$\texttt{DefineRange[a, \{b, c\}]} \tag{B.3}$$

zegt dat de parameter `a` tot het continu interval $[b, c]$ behoort. Indien de parameter `a` evenwel een discreet domein heeft, is het aangepaste commando

$$\texttt{DefineRange[a, \{b, c, d\}]} \tag{B.4}$$

Dit duidt aan dat de parameter `a` de discrete waarden tussen `b` en `c` kan aannemen (vertrekkend van `b` met een increment `d`).

Met de gespecifieerde informatie wordt de gewenste a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie gevonden door

$$\texttt{Posterior[BP[\{A\}, \{B\}]]} \tag{B.5}$$

Deze vorm wordt door de toepassing van de regel van Bayes onmiddellijk omgezet in de gezamenlijke waarschijnlijkheidsdistributie

$$\frac{1}{\texttt{BP[\{B\}]}}\texttt{BP[\{A, B\}]} \tag{B.6}$$

Zowel voor de teller als de noemer van (B.6) wordt, door het herhaaldelijk toepassen van de produktregel, een omzetting in gekende waarschijnlijkheidsrelaties gezocht. Bij een goede specificatie van de informatie wordt de teller herschreven in een expliciete gedaante. De noemer is een normalisatieconstante en zal in het algemeen onveranderd teruggegeven worden. Indien het pakket er bovendien niet in slaagt de geschikte probabilistische relaties voor de teller te vinden, wordt de uitdrukking (B.6) onveranderd gelaten.

In veel toepassingen zal het resultaat van `Posterior` voldoende zijn voor het bestuderen van het probleem. In sommige gevallen wordt evenwel een genormaliseerde versie van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie vereist. Het commando hiervoor is

$$\texttt{Normalize}[\textit{probFunc}[A, B], \{\texttt{A}\}] \tag{B.7}$$

Hierbij is `A` de verzameling van hypothesen waarvoor de normalisatie gewenst is.

Bij de normalisatie ondervindt *Mathematica* dikwijls moeilijkheden bij het uitvoeren van de symbolische integratie of sommatie. Om dit euvel te verhelpen worden een aantal veel voorkomende integralen geïmplementeerd in `BayesCalc`. Maar zelfs met dit steuntje blijft de integratie/sommatie moeilijk. Daarom hebben de verschillende commando's een numeriek broertje/zusje gekregen. De syntax van de numerieke routines is steeds gebaseerd op de symbolische versie ervan.

De numerieke versie van b.v.

$$\texttt{Posterior[BP[\{A\},\{B\}]]} \tag{B.8}$$

is

$$\texttt{NPosterior[BP[\{A\},\{B\}],\{S\}]} \tag{B.9}$$

Een "**N**" wordt voor de routine geschreven en een argument {S} wordt toegevoegd. Het argument {S} bevat toekenningen in de standaard *Mathematica*-notatie. Een voorbeeld hiervan is

$$\texttt{\{a->10.0, b->0.0\}} \tag{B.10}$$

Met de berekende a posteriori waarschijnlijkheidsdistributies is het dan mogelijk om verdere toepassingen van het BWR, zoals besliskunde en modeltoetsing, door te voeren.

Voor een uitgebreidere beschrijving en meer voorbeelden wordt verwezen naar publicaties [Desme93b], [Desme94b], [Desme94f] en interne rapporten [Desme93e], [Desme94g]. In tabel B.1 en tabel B.2 wordt een overzicht gegeven van de commando's geïmplementeerd in **BayesCalc**.

B.3 Een voorbeeld

In deze paragraaf worden de berekeningen voor het voorbeeld van de modeltoetsing uit par. 3.8 uitgevoerd met **BayesCalc**.

Veronderstel dat er twee modellen (M_0 en M_1) bestaan om een enkele meting te verklaren. Beide modellen stellen een Gaussdistributie voorop voor de directe waarschijnlijkheidsdistributie van de meting:

$$bp(d \mid \alpha\ M_0\ I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-\frac{(d-\alpha)^2}{2\sigma^2}) \tag{B.11}$$

$$bp(d \mid \beta\ M_1\ I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-\frac{(d-\beta)^2}{2\sigma^2}). \tag{B.12}$$

De parameters $\check{\alpha}$ en $\check{\beta}$ zijn de locatieparameters voor de respectievelijke modellen M_0 en M_1. De spreiding σ is dezelfde voor beide modellen en wordt gekend verondersteld. Het enige verschil tussen beide modellen is het gebied waarover de respectievelijke locatieparameters $\check{\alpha}$ en $\check{\beta}$ variëren. De parameter $\check{\alpha}$ behoort tot het domein $[0, aMax]$ en de parameter $\check{\beta}$ tot een twee maal groter domein $[0, 2\ aMax]$. Gevraagd wordt om te bepalen wat de meest waarschijnlijke hypothese is in functie van de waarde van de meting.

De specificatie van dit probleem in `BayesCalc` is:

```
In[1] :=
    Reset[]
    DefineRange[a,{0,aMax}]
    DefineRange[b,{0,2 aMax}]
    DefineBP[{a},Uniform[a]]
    DefineBP[{b},Uniform[b]]
    DefineBP[{h1},1/2]
    DefineBP[{h2},1/2]
    DefineBP[{data},{a,h1},Gauss[data,a,sigma]]
    DefineBP[{data},{a,h2},Gauss[data,b,sigma]]
```

(B.13)

De oplossing van dit probleem wordt verkregen door

```
In[2] :=
    HypothesesTest[{h1},{a},{h2},{b},{data}]
```

(B.14)

wat resulteert in

$$Out[2] = \frac{2\left(-\text{Erf}\left[\frac{(\text{aMax}-\text{data})\ \text{Sqrt}[\text{sigma}^{-2}]}{\text{Sqrt}[2]}\right]-\text{Erf}\left[\frac{\text{data}\ \text{Sqrt}[\text{sigma}^{-2}]}{\text{Sqrt}[2]}\right]\right)}{-\text{Erf}\left[\frac{(2\ \text{aMax}-\text{data})\ \text{Sqrt}[\text{sigma}^{-2}]}{\text{Sqrt}[2]}\right]-\text{Erf}\left[\frac{\text{data}\ \text{Sqrt}[\text{sigma}^{-2}]}{\text{Sqrt}[2]}\right]} \qquad \text{(B.15)}$$

Deze uitdrukking is door enkele heel eenvoudige operaties te herleiden tot (3.44).

Bij deze operatie worden de volgende regels achtereenvolgens toegepast: de regel van Bayes, de produktregel en de marginalisatie. Dit alles in 10 sec. op een 40Mhz PC. Voor een verdere uitwerking van dit voorbeeld wordt verwezen naar par. 3.8.

Mathematica-commando	Conventionele betekenis
Informatiespecificators	
`Reset[]`	verwijder alle voorgaande probabilistische definities van de gebruiker
`AllDependent[]`	veronderstel alle hypothesen afhankelijk van elkaar
`Dependent[{A},{B}]`	hypothese A is afhankelijk van hypothese B
`Independent[{A},{B}]`	hypothese A is onafhankelijk van hypothese B
`DefineBP[{A}, {B}, probFunc[A,B]]`	$bp(A \mid BI) = probFunc(A,B)$
`DefineBP[{A}, probFunc[A]]`	$bp(A \mid I) = probFunc(A)$
`DefineRange[a,{b,c,d}]`	parameter a neemt discrete waarden tussen b en c aan, vertrekkend van b met increment d
`DefineRange[a,{b,c}]`	$a \in [b,c]$
Probabilitistische relaties	
`Gauss[x,mu,sigma]`	$\frac{1}{\sqrt{2\pi sigma^2}} \exp(-\frac{1}{2}\frac{(x-mu)^2}{sigma^2})$
`Poisson[x,rate]`	$\exp(-rate)\ rate^x\ \frac{1}{x!}$
`Uniform[a]`	uniforme prior voor parameter a
`Jeffreys[a]`	Jeffreys prior voor parameter a
`ImproperUniform[a]`	niet-genormaliseerde uniforme prior
`ImproperJeffreys[a]`	niet-genormaliseerde Jeffreys prior
Hulpmiddelen	
`Posterior[BP[{A},{B}]]`	bereken waarschijnlijkheid $bp(A \mid BI)$
`NormalizedPosterior[BP[{A},{B}]]`	bereken genormaliseerde waarschijnlijkheid $bp(A \mid BI)$
`Normalize[probFunc[A,B],{C}]`	normaliseer *probFunc[A,B]* voor de hypothesen C
`Marginalize[probFunc[A,B],{C}]`	marginaliseer *probFunc[A,B]* voor de hypothesen C
`Mean[probFunc[A],c]`	bereken gemiddelde
`Stdev[probFunc[A],c]`	bereken spreiding
`Moment[probFunc[A],n, c]`	bereken n-de moment
`HypothesisTest[{M1},{N1},{M2},{N2},{D}]`	bereken verhouding $\frac{bp(M1\mid D)}{bp(M2\mid D)}$ met - $N1$ complicatieparameters voor $M1$ - $N2$ complicatieparameters voor $M2$
`BestEstimate[{A},{B},{C}, lossFunc, {P}]`	bepaal optimale waarden voor P met $bp(A\|C)$ de marginale distributie voor $bp(AB\|C)$ en de verliesfunctie *lossFunc*

Tabel B.1 Overzicht van de `BayesCalc`-commando's.

Mathematica-commando	Conventionele betekenis
Numerieke commando's	
`NPosterior[BP[{A},{B}],{S}]`	zie `NNormalizedPosterior`
`NNormalizedPosterior[BP[{A},{B}]]`	bereken de numerieke waarde van de a posteriori waarschijnlijkheid $BP(A \mid BI)$ met toekenningen S
`NNormalize[`*probFunc[A,B]*`,{C}, {S}]`	numerieke normalisatie
`NMarginalize[` *probFunc[A,B]*`,{C}, {S} ]`	numerieke marginalisatie
`NMean[`*probFunc[A]*`,c, {S}]`	numerieke berekening van gemiddelde
`NStdev[`*probFunc[A]*`,c, {S}]`	numerieke berekening van spreiding
`NMoment[`*probFunc[A]*`,n, c, {S}]`	numerieke berekening van n-de moment
`NHypothesisTest[{M1},{N1},{M2},{N2},{D},{S}]`	numerieke berekening van modeltoetsing
Basishulpmiddelen	
`GetConstant[`*probFunc*`, {A}]`	selecteer termen van $probFunc$ die onafhankelijk zijn van parameters A
`GetProportional[`*probFunc*`, {A}]`	selecteer termen van $probFunc$ die afhankelijk zijn van parameters A
`AssignData[`*name*`, {D}]`	maak de toekenningen: `{name[1]->D[[1]], name[2]->D[[2]], ...}`
Logische "or" en logische "and"	
`BP[{LogicalOr[a,b]}]`	$bp(a+b \mid I)$
`BP[{LogicalOr[a,LogicalAnd[b,c]]}]`	$bp(a+bc \mid I)$
`BP[{a,b}]`	$bp(ab \mid I)$

Tabel B.2 Overzicht van de `BayesCalc`-commando's (vervolg).

Appendix C

De statistische onafhankelijkheid van metingen in PET

Bij de diverse reconstructiemethoden wordt steeds verondersteld dat de metingen voor de verschillende projectiestroken statistisch onafhankelijk zijn. Hierdoor kan de gezamenlijke directe waarschijnlijkheid voor de metingen opgesplitst worden in het product van de directe waarschijnlijkheden van de afzonderlijke metingen. Deze appendix heeft tot doel de statistische onafhankelijkheid van de metingen aan te tonen.

Eerst wordt aangetoond dat het aantal fotonenparen afkomstig van eenzelfde pixellocatie en gedetecteerd door verschillende detectorparen, statistisch onafhankelijk zijn. Dit geldt dan bijgevolg voor alle pixellocaties. Het totaal aantal gedetecteerde fotonenparen voor een projectiestrook is dan de som van een aantal fotonen afkomstig van alle pixellocaties. Door de som te nemen van statistisch onafhankelijke parameters met een Poissondistributie, blijft de Poissondistributie behouden voor de somparameter. Om de statistische onafhankelijkheid van de metingen voor verschillende projectiestroken aan te tonen, volstaat het bijgevolg te bewijzen dat de tellen afkomstig van een enkele pixellocatie in verschillende detectorenparen statistisch onafhankelijk zijn.

Veronderstel dat het totaal aantal uitgezonden fotonenparen uit een bepaalde pixellocatie n_t is. Daarvan worden n_1 door detectorpaar 1 en n_2 door detectorpaar 2 gedetecteerd. Het aantal fotonen dat noch op detector 1 noch op detector 2 invalt is dus $n_t - n_1 - n_2$. De emissiesnelheid voor de pixellocatie wordt voorgesteld door f (veronderstel voor de eenvoud een eenheidstijdsinterval). Om de statistische onafhankelijkheid van deze metingen aan te tonen,

volstaat het te bewijzen dat

$$bp(\ n_1\ n_2\ |f\ I\ ) = bp(\ n_1\ |\ f\ I\ )\ bp(\ n_2\ |\ f\ I\ ), \tag{C.1}$$

met $bp(\ n_1\ |\ f\ I\ )$ en $bp(\ n_2\ |\ f\ I\ )$ gegeven door een Poissondistributie. Door het invoeren van het totaal aantal uitgezonden fotonenparen wordt de gezamenlijke waarschijnlijkheid $bp(\ n_1\ n_2\ |\ f\ I\ )$:

$$bp(\ n_1\ n_2\ |\ f\ I\ ) = \sum_{n_t=0}^{\infty} bp(\ n_1\ n_2\ n_t\ |\ f\ I\ ). \tag{C.2}$$

Door het gebruik van de regel van Bayes herleidt deze uitdrukking zich tot

$$bp(\ n_1\ n_2\ |\ f\ I\ ) = \sum_{n_t=0}^{\infty} bp(\ n_t\ |\ f\ I\ )\ bp(\ n_1\ n_2|\ n_t\ f\ I\ ) \tag{C.3}$$

De uitdrukking van $bp(\ n_t\ |\ f\ I\ )$ volgt uit het Poissonkarakter van het radioactief verval en de uitdrukking van $bp(\ n_1\ n_2|\ n_t\ f\ I\ )$ wordt gegeven door een multinomiale distributie. Hierbij wordt verondersteld dat de waarschijnlijkheid dat een fotonenpaar in de projectiestrook 1 terechtkomt p_1 en in de projectiestrook 2 p_2 is. Hierdoor herleidt uitdrukking (C.3) zich tot

$$\sum_{n_t=0}^{\infty} f^{n_t}\ \frac{\exp(-f)}{n_t!}\ \frac{n_t!}{n_1!\ n_2!\ (n_t-n_1-n_2)!}\ p_1^{n_1}\ p_2^{n_2}\ (1-p_1-p_2)^{n_t-n_1-n_2}. \tag{C.4}$$

Door alle termen onafhankelijk van n_t buiten de som te brengen, wordt dit

$$\begin{aligned} &bp(\ n_1\ n_2\ |\ f\ I\ ) = \\ &\quad \exp(-f)\frac{1}{n_1!}\left(\frac{p_1}{1-p_1-p_2}\right)^{n_1}\frac{1}{n_2!}\left(\frac{p_2}{1-p_1-p_2}\right)^{n_2}\times \\ &\quad \sum_{n_t=n_1+n_2}^{\infty} f^{n_t}\ \frac{1}{(n_t-n_1-n_2)!}(1-p_1-p_2)^{n_t}. \end{aligned} \tag{C.5}$$

De sommatie start nu vanaf n_1+n_2 omdat n_t geen lagere waarden kan aannemen. Voer de nieuwe sommatie-index $n' = n_t - n_1 - n_2$ in en gebruik de relatie

$$\sum_{n'=0}^{\infty} \frac{(c\ f)^{n'}}{c!} = \exp(c\ f), \tag{C.6}$$

om vergelijking (C.5) het herschrijven als

$$bp(\ n_1\ n_2\ |\ f\ I\ ) = \frac{(p_1\ f)^{n_1}}{n_1!}\exp(-p_1\ f)\ \frac{(p_2\ f)^{n_2}}{n_2!}\exp(-p_2\ f) \tag{C.7}$$

$$= bp(\ n_1\ |\ f\ I\ )\ bp(\ n_2\ |\ f\ I\ ). \tag{C.8}$$

Hierbij zijn de $bp(\ n_1 \mid f\ I\ )$ en $bp(\ n_2 \mid f\ I\ )$ gegeven door de Poissondistributie. Bijgevolg is bewezen dat de metingen in de verschillende projectiestroken een statistische onafhankelijke Poissondistributie hebben. De splitsing van de gezamenlijke directe waarschijnlijkheid van de metingen in een product van onafhankelijke Poissonwaarschijnlijkheden is hiermee gerechtvaardigd.

Appendix D

Modellering van de attenuatie

D.1 Inleiding

In deze appendix wordt het Bayesiaanse waarschijnlijkheidsrekenen aangewend om de attenuatiefactor te bepalen. De attenuatiefactor voor een bepaalde strook geeft de attenuatie van de gammastralen langs die strook. Vermits hier de attenuatiefactor voor één enkele strook berekend wordt, zullen geen indices gebruikt worden. Om de attenuatiefactor te bepalen worden twee metingen verricht: de transmissie- en de blanco-scan (zie hoofdstuk 2). Voor beide metingen wordt een ringbron gebruikt die fotonparen uitzendt. Bij de blanco-scan worden de fotonparen gedetecteerd zonder dat de fotonen geattenueerd worden. Bij de transmissie-scan moet één van de twee fotonen voor detectie het onderzochte object doorlopen. Daarbij kan dit foton geattenueerd worden. Veronderstel dat het aantal tellen voor een bepaalde strook voor deze twee metingen gegeven is door tr en bl. De meettijden voor de transmissie- en blanco-scan worden voorgesteld door τ_{tr} en τ_{bl}.

De standaardprocedure bij PET om de attenuatiefactor te berekenen bestaat uit het delen van het aantal tellen van de transmissie-scan door het aantal tellen van de blanco-scan:

$$a = \frac{tr}{bl}. \tag{D.1}$$

De attenuatiefactor is dus de verhouding van het aantal geattenueerde fotonen tot het aantal niet-geattenueerde fotonen.

Door de meettijden in rekening te brengen wordt de attenuatiefactor:

$$a = \frac{tr/\tau_{tr}}{bl/\tau_{bl}} \tag{D.2}$$

Deze uitdrukking is correct indien de ruis op de transmissie- en blanco-metingen verwaarloosd wordt. Maar het is algemeen aanvaard dat de transmissie- en de blanco-meting een Poissonwaarschijnlijkheidsdistributie hebben [Herma79].

In deze appendix worden de gegevens van de twee metingen gecombineerd om een a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de attenuatiefactor te berekenen. Met deze a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie kan de invloed van het aantal tellen in de verschillende metingen op de attenuatiefactorbepaling nagegaan worden.

Bovendien wordt ook de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van de emissie-metingen bepaald in het geval de attenuatiefactor ongekend is. Deze waarschijnlijkheidsdistributie wordt gebruikt in het Bayesiaanse stopcriterium (zie par. 3.8).

D.2 De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van de attenuatiefactor

Bij de transmissie- en blanco-meting wordt een ringbron gebruikt. De parameter $\check{s}$ stelt de activiteit van de ringbron in de onderzochte strook voor. De directe waarschijnlijkheden voor de transmissie- en de blanco-meting zijn dan

$$bp(tr \mid a\ s\ I_a) = \frac{1}{tr!} \exp(-a\ s)\ (a\ s)^{tr} \tag{D.3}$$

$$bp(bl \mid s\ I_a) = \frac{1}{bl!} \exp(-s)\ s^{bl}. \tag{D.4}$$

Beide distributies zijn Poissondistributies. Voor de blanco-meting is de emissiesnelheid s en voor de transmissie-meting $a\ s$. Voorlopig wordt geen rekening gehouden met de meettijden van de diverse metingen. De kennistoestand I_a bevat de informatie over de meetsequentie.

Hiermee kan eenvoudig de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de attenuatiefactor berekend worden. Voor deze berekeningen is de activiteit s van de ringbron een lastparameter. De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de attenuatiefactor wordt verkregen door de marginalisatie over de ringactiviteit van de gezamenlijke a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(a\ s \mid bl\ tr\ I_a)$:

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) = \int_0^\infty bp(a\ s \mid bl\ tr\ I_a)\ \mathrm{d}s. \tag{D.5}$$

Het integratie-interval wordt hier onrealistisch groot genomen: $[0, \infty]$. Dit onrealistisch groot interval laat een vereenvoudiging van de integraties toe. In een PET-centrum kan een schatting van de waarde voor s gebeuren aan de

hand van de halveringstijd en de concentratie van de positron-emittor van de ringbron. Uit de volgende berekeningen zal blijken dat een beperkt interval voor s (i.p.v. $[0,\infty]$) de resultaten niet significant verandert.

Deze formule kan met het theorema van Bayes herschreven worden:

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) = \frac{1}{bp(bl\ tr \mid I_a)} \int_0^\infty bp(s \mid I_a)\, bp(a \mid I_a)\, bp(bl \mid sI)\, bp(tr \mid s\, a\, I_a)\, \mathrm{d}s. \quad \text{(D.6)}$$

Hieruit blijkt dat de a priori waarschijnlijkheidsdistributies voor twee parameters nog gespecifieerd moeten worden. Voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van de attenuatiefactor zal een uniforme distributie over het interval [0,1] genomen worden. Dit interval correspondeert met het fysisch relevante gebied voor de attenuatiefactor. Voor de a priori waarschijnlijkheidsdistributie van de bronactiviteit zal een Jeffreys a priori waarschijnlijkheidsdistributie verondersteld worden. De twee nieuwe a priori distributies zijn bijgevolg

$$bp(s \mid I_a) \propto 1/s, \quad \text{(D.7)}$$

$$bp(a \mid I_a) = 1, a \in [0,1]. \quad \text{(D.8)}$$

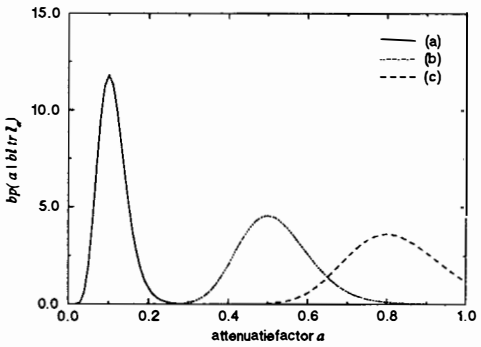
De integratie van (D.6) kan nu uitgevoerd worden:

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) = \frac{a^{tr}(a+1)^{-(bl+tr)}(1+tr)}{{}_2F_1(1+tr, bl+tr; 2+tr; -1)}, \quad \text{(D.9)}$$

hierbij is ${}_2F_1(a,b;c;z)$ de hypergeometrische functie. Merk op dat de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie een extremum bereikt voor $a = tr/bl$. Deze waarde correspondeert met de vooropgestelde attenuatiefactor in de standaardbenadering.

In fig. D.1 wordt deze a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie weergegeven voor verschillend verhoudingen van het aantal transmissie- en blanco-tellen. Merk op dat de locatie van het maximum van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie steeds overeenkomt met de tr/bl-waarde. Merk ook op dat de breedte van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie toeneemt bij toenemende tr-waarden.

In fig. D.2 wordt deze a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie weergegeven voor een verschillend aantal tellen in de transmissie- en blanco-meting. Hierbij wordt de verhouding tr/bl constant gehouden. Bemerk hoe bij een toenemend aantal tellen de breedte van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie afneemt. Door het aantal opgemeten tellen in de transmissie- en blanco-meting te verhogen kan de attenuatiefactor inderdaad beter bepaald worden. Dit wordt ook duidelijk wanneer de Gaussbenadering van (D.9) gebruikt wordt



Figuur D.1 De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(a|tr\ bl\ I_a)$ voor $bl = 100$. De verschillende curven corresponderen met verschillende waarden voor de transmissie-meting: (a) $tr = 10$, (b) $tr = 50$, (c) $tr = 80$.

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) = \tag{D.10}$$

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(tr/bl-a)^2}{tr(bl+tr)/bl^3}\right)\frac{(1+tr)(tr/bl)^{tr}(1+(tr/bl)^{-(bl+tr)})}{{}_2F_1(1+tr, bl+tr; 2+tr; -1)}. \tag{D.11}$$

Hieruit blijkt dat de spreiding σ_a van de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie gegeven wordt door

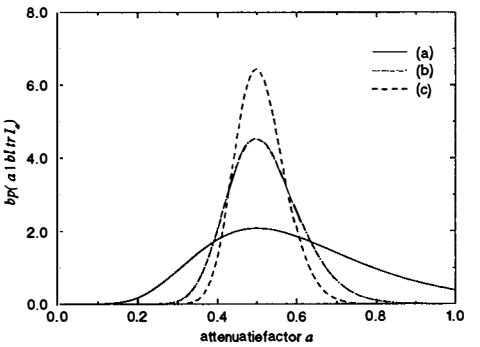
$$\sigma_a = \sqrt{\frac{tr(tr+bl)}{bl^3}}. \tag{D.12}$$

Het is duidelijk dat met deze benadering de vorm van de grafieken uit fig. D.2 en fig. D.1 te verklaren is.

Indien de ringbron slechts waarden kan aannemen in het interval $[s_1, s_2]$, wordt (D.9)

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) \propto a^{tr}(a+1)^{-(bl+tr)} \times$$
$$(\Gamma(bl+tr, 0, (1+a)s_2) - \Gamma(bl+tr, 0, (1+a)s_1)), \tag{D.13}$$

waarbij $\Gamma(a, b, c)$ de veralgemeende incomplete gammafunctie is. In fig. D.3 wordt de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie weergegeven waarbij het bereik van de bronactiviteit s gelijk is aan [50,150]. Daarnaast wordt ook de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie weergegeven waarbij het bereik van de bronactiviteit oneindig is: $[0, \infty]$. De overeenkomst is zo sterk dat bij het weergeven van beide figuren op één grafiek, de curven elkaar volledig overlappen.



Figuur D.2 De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie van de attenuatiefactor in functie van het aantal tellen in de transmissie- en blanco-scan. Het aantal tellen is (a) $tr = 10$, $bl = 20$; (b) $tr = 50$, $bl = 100$; (c) $tr = 100$, $bl = 200$. Merk op dat de verhouding tr/bl constant blijft.

Indien er ook nog rekening gehouden wordt met de meettijden voor de transmissie- en blanco-scan τ_t en τ_b dan wordt de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie voor de attenuatiefactor

$$bp(a \mid bl\ tr\ I_a) = \frac{\tau_{bl}^{bl+tr}\, a^{tr}(\tau_{tr}a + \tau_{bl})^{-(bl+tr)}(1+tr)}{{}_2F_1(1+tr, bl+tr; 2+tr; -\tau_{tr}/\tau_{bl})}. \tag{D.14}$$

Het maximum van deze functie correspondeert opnieuw met de waarde uit de standaardbenadering

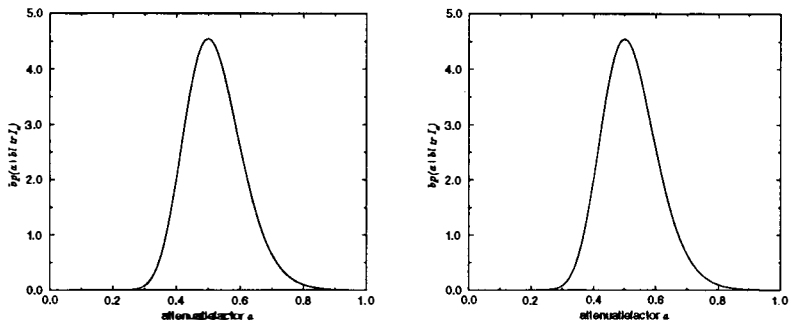
$$a = \frac{tr/\tau_{tr}}{bl/\tau_{bl}}. \tag{D.15}$$

Hier wordt verondersteld dat deze benadering voor elke strook afzonderlijk geldt. De a posteriori waarschijnlijkheidsdistributies voor de attenuatiefactoren voor elk van de stroken wordt dan bekomen door een analoge formule. Bij deze benadering worden correlaties tussen verschillende stroken verwaarloosd.

D.3 De directe waarschijnlijkheidsdistributie met een ongekende attenuatiefactor

Nu wordt de directe waarschijnlijkheid voor de emissie-meting langs een strook bepaald wanneer de attenuatiefactor langs die strook niet volledig bekend is. Het is duidelijk dat de directe waarschijnlijkheid met een gekende attenuatiefactor langs een bepaalde strook, gegeven wordt door een Poissondistributie:

$$bp(d|a\ \lambda\ I_a) = \frac{1}{d!}\exp(-a\ \lambda)\ (a\ \lambda)^d, \tag{D.16}$$



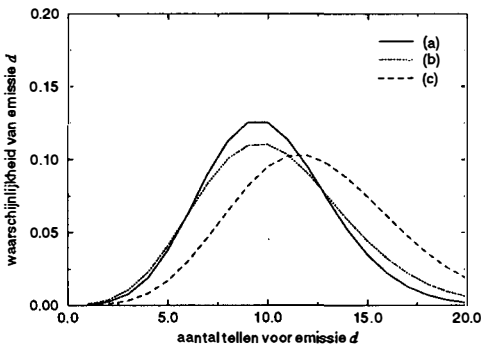
(a) (b)

Figuur D.3 De a posteriori waarschijnlijkheid van de attenuatie wanneer het bereik van de bronactiviteit beperkt wordt tot [50, 150] (figuur (a)) en $[0, \infty]$ (figuur (b)). De waarden voor de transmissie- en blanco-meting zijn $tr = 50$ en $bl = 100$.

waarbij d het aantal fotonen is gemeten gedurende de emissie-scan en λ het aantal niet-geattenueerde fotonen voor dat detectorpaar voorstelt. De gezochte waarschijnlijkheidsdistributie is $bp(d \mid tr\ bl\ I_a)$. Bij deze waarschijnlijkheidsdistributie wordt de attenuatiefactor niet gekend verondersteld, maar de attenuatiefactor kan geschat worden m.b.v. de transmissie- en emissie-meting. Deze waarschijnlijkheidsdistributie wordt bekomen door de marginalisatie over de lastparameters $\check{a}$ en $\check{s}$:

$$bp(d \mid tr\ bl\ I_a) = \int_0^1 \int_0^\infty bp(d\ a\ s \mid tr\ bl\ I_a)\ \mathrm{d}s\ \mathrm{d}\alpha. \qquad \text{(D.17)}$$

Een analytische gedaante voor deze uitdrukking werd niet gevonden. In fig. D.4 wordt de directe waarschijnlijkheid voor de data met een gekende attenuatiefactor $bp(d \mid \lambda\ a\ I_a)$, curve (a), vergeleken met de directe waarschijnlijkheid voor de data met een gemeten attenuatiefactor $bp(d \mid tr\ bl\ I_a)$, curven (b) en (c). Indien de gemeten attenuatiefactor correspondeert met de gekende attenuatiefactor, curve (a) en curve (b), dan bevinden de waarschijnlijkheidsddistributie op dezelfde plaats, maar is de waarschijnlijkheidsdistributie met de gemeten attenuatiefactor iets meer uitgesmeerd. Indien de gemeten attenuatiefactor echter niet overeenkomt met de gekende attenuatiefactor, curve (c), dan is de waarschijnlijkheidsdistributie niet alleen uitgesmeerd, maar bevindt het maximum ervan ook nog op een andere locatie.



Figuur D.4 De directe waarschijnlijkheidsdistributie voor de data met een gekende attenuatiefactor $bp(d \mid \lambda\ a\ I_a)$ (curve (a)) wordt vergeleken met de directe waarschijnlijkheidsdistributie voor de data met een gemeten attenuatiefactor $bp(d \mid tr\ bl\ I_a)$ (curven (b) en (c)). Voor de waarschijnlijkheidsdistributie $bp(d \mid \lambda\ a\ I_a)$ geldt $\lambda = 20, a = 0.5$. Voor de waarschijnlijkheidsdistributie $bp(d \mid bl\ tr\ I_a)$ werden twee waarden voor de verhoudingen van tr/bl gekozen. Bij curve (b) hoort $tr/bl = 0.5$ $(tr = 50, bl = 100)$ en bij curve (c) hoort $tr/bl = 0.6$ $(tr = 60, bl = 100)$.

D.4 De toepassing in de Bayesiaanse modeltoetsing

De uitdrukking die nodig in de modeltoetsing uit par. 3.8 is van de vorm:

$$\begin{aligned}
&\int_a^b \Phi(a, H_p)\ \mathrm{d}a = \\
&\int_a^b \int_0^\infty bp(H_p\ a\ s \mid \mathbf{f}^{(n)} d, tr, bl, I_a)\ \mathrm{d}s\ \mathrm{d}a = \\
&\int_a^b \int_0^\infty bp(H_p \mid I_a) bp(s \mid I_a) bp(a \mid I_a) \times \\
&\quad bp(bl \mid s I_a) bp(tr \mid a\, s I_a) bp(\mathbf{f}^{(n)} \mid I_a) bp(d \mid a \mathbf{f}^{(n)} H_p I_a)\ \mathrm{d}s\ \mathrm{d}a. \quad \text{(D.18)}
\end{aligned}$$

Hierbij stelt $\mathbf{f}^{(n)}$ het beeld voor tijdens de n-de iteratie. De hypothese H_p staat voor het Poissonkarakter van de metingen.

Bij nader onderzoek blijkt dat de integratie over de bronactiviteit gegeven wordt door (D.9). De vereiste integraal heeft bijgevolg de vorm:

$$\int_a^b \Phi(a, H_p)\ \mathrm{d}a \propto \int_a^b \frac{1}{\lambda} \frac{a^{tr}}{(a+1)^{bl+tr}} (a\lambda)^d \exp(-a\lambda) \frac{1}{d!}\ \mathrm{d}a. \quad \text{(D.19)}$$

Wanneer de meettijden in rekening gebracht worden, is deze uitdrukking

$$\int_a^b \Phi(a, H_p)\,\mathrm{d}a \propto \int_a^b \frac{1}{\lambda}\frac{a^{tr}}{(\tau_{tr}\,a+\tau_{bl})^{bl+tr}}(a\,\tau_\lambda\,\lambda)^d \exp(-a\,\tau_\lambda\,\lambda)\frac{1}{d!}\,\mathrm{d}a. \quad \text{(D.20)}$$

Hierbij stelt τ_λ de meettijd van de emissie-scan voor. Voor deze integraal werd geen analytische uitdrukking gevonden. Deze integraal werd berekend m.b.v. de Gaussapproximatie van het integrandum.

Appendix E

Marginalisatie voor de MaxEnt-algoritmen

In deze appendix worden de hulptechnieken besproken voor de berekening van de regularisatieparameters uit de Klassieke-MaxEnt-methode en de Nieuwe-MaxEnt-methode uit par. 6.4.2.

Een van de basisproblemen bij deze marginalisatiemethoden is het bepalen van de eigenwaarden van de matrix Ξ:

$$\Xi_{ij} = -\nabla\nabla Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}). \tag{E.1}$$

In de eerste paragraaf van deze appendix worden deze eigenwaarden bepaald m.b.v. van de Fouriergetransformeerden. Deze methode is geschikt indien de meetprocedure gemodelleerd wordt door een plaatsonafhankelijke circulaire convolutie.

In de volgende paragraaf wordt de procedure aangegeven om de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie (6.40) van de regularisatieparameters in het ICF-model te berekenen.

In de laatste paragraaf wordt een vereenvoudiging doorgevoerd die toelaat om de eigenwaarden van Ξ te berekenen voor projectiemetingen.

E.1 Fouriergetransformeerden bij de marginalisatie

Deze methode kan toegepast worden indien de meetprocedure gemodelleerd wordt als een symmetrische en spatiaal-invariante convolutie. Bovendien bestaat de directe waarschijnlijkheidsdistributie uit het produkt van onafhanke-

lijke Gaussdistributies. De $Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})$-functie wordt dan:

$$Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{M} \frac{1}{\sigma_i^2} (d_i - \sum_{j=1}^{N} E_{ij} f_j)^2, \tag{E.2}$$

waarbij E_{ij} de convolutie modelleert. De elementen van de matrix $\Xi = -\nabla\nabla Lik$ worden met de Gaussiaanse directe waarschijnlijkheidsdistributie:

$$\Xi_{ij} = \sum_{l=1}^{M} \frac{1}{\sigma_l^2} E_{li} E_{lj}. \tag{E.3}$$

Veronderstel verder dat alle spreidingen van de verschillende meetpunten gelijk zijn: $\sigma_i = \sigma, i = 1, \ldots, M$. De marginalisatie in het Klassieke-MaxEnt-methode vereist de integratie

$$\int \exp\left(\rho S(\mathbf{f}, \mathbf{m}) + Lik(\mathbf{f}, \mathbf{d})\right) \, \mathrm{d}\mathbf{f}. \tag{E.4}$$

Door de Taylorreeksontwikkeling te nemen van de exponentiële en enkel de eerste twee termen te behouden rond het beeld $\hat{f}$ (die de exponentiële maximaliseert), is de enige term die integratieproblemen oplevert

$$\int \exp(T_{Klas}) \, \mathrm{d}\mathbf{f} = \int \mathrm{d}\mathbf{f} \exp\left(-\rho \sum_{j=1}^{N} f_j^2 - \sum_{i,j=1}^{N} \left(\textstyle\sum_{l=1}^{M} 1/\sigma^2 \; E_{li} \; E_{lj} \; f_i \; f_j\right)\right). \tag{E.5}$$

Deze integratie is moeilijk omdat de N-dimensionale integraal niet opgesplitst kan worden in N ééndimensionale integralen.

Om toch de opsplitsing van de integraal te kunnen bewerkstelligen worden Fouriergetransformeerden ingevoerd. Deze methode is, voor een andere toepassing, beschreven in [Gull85].

Door de inverse Fouriergetransformeerde toe te passen, worden de beeldintensiteiten $\{f_i\}$ omgezet in de getransformeerde beeldintensiteiten $\{\tilde{f}_p\}$ door de formule

$$f_i = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{p=1}^{N} \tilde{f}_p \exp\left(\frac{I \; 2 \; \pi \; p \; i}{N}\right). \tag{E.6}$$

Met deze transformatie wordt de exponentiële term T_{Klas}

$$\begin{aligned} T_{Klas} &= \sum_{i,j=1}^{N} \left(\sum_{l} \frac{1}{\sigma^2} \; E_{li} \; E_{lj} \; f_j \; f_i \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j,p,q,l=1}^{N} E_{l,i} \; E_{l,j} \; \exp\left(\frac{I \; 2 \; \pi \; p \; i}{N}\right) \exp\left(-\frac{I \; 2 \; \pi \; q \; j}{N}\right) \tilde{f}_q \tilde{f}_p^* \end{aligned} \tag{E.7}$$

vermits de convolutie circulair spatiaal-invariant is, verandert E_{li} enkel met de afstand tussen de pixellocaties l en i. Hierdoor kunnen de sommaties over i en j vervangen worden door sommaties over u, v, waarbij u, v afstanden tot pixel l voorstellen. Met deze substitutie van sommatie-indexen wordt de vorige vergelijking:

$$T_{Klas} = \sum_{u,v,p,q,l} E_{l,l+u}\ E_{l,l+v} \frac{1}{N} \exp\left(\frac{I2\pi p(l+u)}{N}\right) \exp\left(\frac{-I2\pi q(l+v)}{N}\right) \tilde{f}_q \tilde{f}_p^*. \tag{E.8}$$

Vermits de convolutie spatiaal-invariant is, is de coëfficiënt $E_{l,l+u}E_{l,l+v}$ onafhankelijk van l. Door $E_{l,l+u}\ E_{l,l+v}$ te vervangen door $\overline{E}(u,v)$ herleidt de vergelijking zich tot:

$$T_{Klas} = \sum_{u,v,p,q,l} \overline{E}(u,v) \frac{1}{N} \exp\left(\frac{I2\pi p(l+u)}{N}\right) \exp\left(\frac{-I2\pi q(l+v)}{N}\right) \tilde{f}_q \tilde{f}_p^*. \tag{E.9}$$

De som over l wordt uitgevoerd m.b.v. van de orthogonaliteitsrelaties:

$$T_{Klas} = \sum_{p=1} \left(\sum_{u,v} \overline{E}(u,v) \exp\left(I2\pi p(u-v)/N\right)\right) |\tilde{f}_p|^2. \tag{E.10}$$

Hierdoor werd de term in de exponentiële gediagonaliseerd en kan de integraal opgesplitst worden in N ééndimensionale integralen. De eigenwaarden van Ξ die bij deze ééndimensionale integralen te voorschijn komen, zijn:

$$\xi_p = \sum_{u,v} \overline{E}(u,v) \exp\left(\frac{I2\pi p(u-v)}{N}\right). \tag{E.11}$$

Met deze eigenwaarden kan de a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie $bp(\ \rho \mid \mathbf{d}\ \mathbf{m}\ I_{Klas}\ )$ voor de regularisatieparameter ρ opgesteld worden. Door de maximalisatie van deze a posteriori waarschijnlijkheidsdistributie wordt vergelijking (6.36) opgesteld.

E.2 De marginalisatie voor het Nieuwe-MaxEnt-algoritme

In het Nieuwe-MaxEnt-algoritme wordt het bepalen van eigenwaarden nog moeilijker. De uit te rekenen integraal is hier

$$\int \exp\left(\rho_1 S(\mathbf{f},\mathbf{m}) + \rho_2 S(\tilde{\mathbf{m}},\overset{\circ}{\tilde{\mathbf{m}}}) + Lik(\mathbf{f},\mathbf{d})\right)\ \mathrm{df}\ \mathrm{d}\tilde{\mathbf{m}}. \tag{E.12}$$

Door de Taylorreeksontwikkeling rond de optimale schatting voor het beeld $\hat{\mathbf{f}}$ en het tussenmodel $\hat{\tilde{\mathbf{m}}}$ wordt de belangrijkste hinderpaal voor de integratie

gevormd door de term T_{New}

$$\begin{aligned} T_{New} &= \sum_{i,j=1}^{N} \left(-\rho_1 \delta_{il} - \sum_{p=1}^{M} E_{pi} E_{pj} \right) \hat{f}_i \hat{f}_j + \sum_{i,j=1}^{N} B_{ij} \hat{f}_i \hat{\tilde{m}}_j \\ &+ \sum_{i,j=1}^{N} \left(-\rho_2 \delta_{ij} - \rho_1 \sum_{l=1}^{M} B_{li} B_{lj} \right) \hat{\tilde{m}}_i \hat{\tilde{m}}_j , \end{aligned} \tag{E.13}$$

hierbij stellen de elementen van de matrix $\mathbf{B}$ de convolutie bij de overgang van tussenmodel $\tilde{\mathbf{m}}$ naar model $\mathbf{m}$ voor. Met behulp van de methode uit voorgaande paragraaf kunnen de termen $\hat{f}_i \hat{f}_j$ en $\hat{\tilde{m}}_i \hat{\tilde{m}}_j$ gediagonaliseerd worden. De termen van de vorm $\hat{f}_i \hat{\tilde{m}}_j$ blijven evenwel in de uitdrukking optreden. De volledige opsplitsing van de $2N$-dimensionale integraal in ééndimensionale integralen treedt nog niet op door omzetting m.b.v. de fouriergetransformeerden. Maar door de matrixvorm voor T_{New} (na Fouriertransformatie) op te schrijven, wordt de oplossing duidelijk:

$$\begin{aligned} &\left(\tilde{f}_1 \cdots \tilde{f}_N \; \tilde{m}_1 \ldots \tilde{m}_N\right)^* \times \\ &\begin{pmatrix} -\rho_1 - \xi_1 & \cdots & 0 & \rho_1 b_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & -\rho_1 - \xi_i & \vdots & \vdots & \rho_1 b_i & \vdots \\ 0 & \cdots & -\rho_1 - \xi_i & 0 & \cdots & \rho_1 b_N \\ \rho_1 b_0 & \cdots & 0 & -\rho_2 - \rho_1 b_0^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \rho_1 b_i & \vdots & \vdots & -\rho_2 - \rho_1 b_i^2 & \vdots \\ 0 & \cdots & \rho_1 b_N & 0 & \cdots & -\rho_2 - \rho_1 b_N^2 \end{pmatrix} \times \\ &\qquad \begin{pmatrix} \tilde{f}_1 \\ \cdots \\ \tilde{f}_N \\ \tilde{m}_1 \\ \cdots \\ \tilde{m}_N \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{E.14}$$

Hierbij zijn $\tilde{m}_i$ de coëfficiënten van het optimale tussenmodel $\hat{\tilde{\mathbf{m}}}$ en $\tilde{f}_i$ de coëfficiënten van het optimale beeld $\hat{\mathbf{f}}$ na Fouriertransformatie. Gelukkig kan de determinant (en de eigenwaarden) van een dergelijke matrix eenvoudig bepaald worden. Er geldt immers

$$\det \begin{pmatrix} F & G \\ G & H \end{pmatrix} = \det(F - GH^{-1}C) \det(C), \tag{E.15}$$

met F, G, H NxN dimensionale blokmatrices. Deze uitdrukking geeft dan aanleiding tot de vergelijking (6.40).

E.3 De eigenwaarden voor projectiemetingen

De complicatie bij projectiemetingen ontstaat doordat de meetprocedure niet meer door een spatiaal-invariante, circulaire convolutie gemodelleerd wordt. Dit probleem wordt opgelost door een vereenvoudiging door te voeren voor de matrix $\mathbf{\Xi}$. Deze vereenvoudiging wordt beschreven in par. 6.4.2. De waarden van deze matrix zijn

$$\Xi_{ij} = \frac{1}{\sigma^2},\ i \neq j \tag{E.16}$$

$$= \frac{\theta}{\sigma^2},\ i = j, \tag{E.17}$$

met θ het aantal projectiehoeken.

Deze matrix is van de standaardgedaante

$$\mathbf{\Xi}_a = \begin{pmatrix} b & a & \dots & & a \\ a & b & a & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & a \\ \vdots & \vdots & a & b & a \\ a & \dots & \dots & a & b \end{pmatrix}. \tag{E.18}$$

Door het gebruiken van de notatie

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{E.19}$$

kan deze matrix herschreven worden als

$$\mathbf{\Xi}_a = (b-a)\mathbf{I} + a\mathbf{E}\mathbf{E}^t. \tag{E.20}$$

Doordat de eigenwaarden E_i van $\mathbf{E}\mathbf{E}^t$

$$E_1 = N, \tag{E.21}$$

$$E_i = 0,\ i = 2, \dots, N; \tag{E.22}$$

zijn, worden de eigenwaarden van $\mathbf{\Xi}_a$

$$\xi_{a,1} = b + (N-1)\,a \tag{E.23}$$

$$\xi_{a,i} = b - a,\ i = 2, \dots, N. \tag{E.24}$$

Deze eigenwaarden kunnen dan in combinatie met de methoden uit voorgaande paragrafen gebruikt worden om de verschillende marginalisaties door te voeren.

Bibliografie

[Aczel66] J. Aczel. *Lectures on functional equations and their applications.* Academic Press, New York, 1966.

[Barre94] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. Van der Vorst. Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods. Available by ftp: netlib2.cs.utk.edu, directory linalg, 1994.

[Basti93] K. Bastiaens, P. Desmedt, I. Lemahieu. Parallel maximum entropy reconstruction of PET images. Accepted for publication in Maximum entropy and Bayesian methods, Santa Barbara, Ed. G. Heidbreder, Kluwer Academic Publishers, 1993.

[Basti94a] K. Bastiaens, I. Lemahieu, P. Desmedt, W. Vandermeersch. An efficient parallel implementation of the ML-EM algorithm for PET image reconstruction with a multi-threaded operating system. In *Proceedings of the 2nd Euromicro Workshop on Parallel and Distributed processing*, IEEE Computer Society Press, Malaga, blzn. 253-259, 1994.

[Basti94b] K. Bastiaens, I. Lemahieu, P. Desmedt. On the use of a multi-threaded operating system for an efficient parallel implementation of the ML-EM Algorithm for PET image reconstruction. In *Applications in Parallel and Distributed Computing, IFIP Transactions A-44: Computer Science and Technology*, Ed. C. Girault, Elsevier Science B.V. (North-Holland), blzn. 31-39, 1994.

[Basti94c] K. Bastiaens. FUGA, een visuele programmeertaal voor parallelle toepassingen. Doctoraatsthesis, Faculteit Toegepaste Wetenschappen, Universiteit Gent, 1994.

[Bidau92] L. Bidaut, J. Doll, C. Als, L.G. Strauss. Comparison between filtered back projection and a new iterative reconstruction method on data from clinical investigationsin routine Positron Emission Tomography. In *Nuclear medicine in research and practice*, European Nuclear Medicine Congress 1991, Vienna, blzn. 72-75, 1992.

[Berna94] J.M. Bernardo, A.F.M. Smith. Bayesian Theory. Wiley series in probability and mathematical statistics, John Wiley & Sons, 1994.

[Bonte93] T.R. Bontekoe. Pyramid images. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Paris*, Eds. A.Mohammad-Djafari and G. Demoment, Kluwer Academic Publishers, blzn. 341-344, 1993.

[Burr89] R.L. Burr. Iterative convex I-projection algorithm for maximum entropy and minimum cross-entropy computations. *IEEE Trans. Inf. Theory*, Vol. 35, blzn. 695-698, 1989.

[Buyuk91] C. Buyukkopc, G. Persiano. A new algorithme and an efficient parallel implementation of the EM technique in PET imaging. *SPIE Vol. 1452 image processing algorithms and techniques II*, blzn. 170-179, 1991.

[Byars94] L. Byars. Oral communication at ECAT users' Meeting 1994.

[Censo81] Y. Censor. Row-action methods for huge and sparse systems and their applications. *SIAM review 23*, blzn. 444-446, 1981.

[Censo87] Y. Censor, T. Elfving, G.T. Herman. On some optimization techniques in image reconstruction from projections. *Applied Numerical Mathematics 3*, Elsevier, blzn. 365-391, 1987.

[Censo90] Y. Censor, A.R. De Pierro, T. Elfving, G.T. Herman, A.N. Iusem. On iterative methods for linearly constrained entropy maximization. *Numerical analysis and mathematical modelling*, Banach center publications, PWN-Polish scientific publishers, blzn. 145-163, 1990.

[Chees86] P. Cheeseman. Probabilistic vs fuzzy reasoning. In *Kanal en Lemmer*, blzn. 85-112, 1986.

[Chen91] C.M. Chen, S.-Y. Lee, Z.H. Cho. Parallelization of the Em algorithm for 3-D PET image reconstruction. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-10, blzn. 513-522, 1991.

[Clint91] N.H. Clinthorne, J.A. Fessler, G.D. Hutchins, W.L. Rogers. Joint maximum likelihood estimation for emission and attenuation densities in PET. In *Conference record of the 1991 IEEE nuclear science symposium and medical imaging conference*, Santa Fe, New Mexico, blzn. 1927-1932, 1991.

[Coakl91] K.J. Coakley, J. Llacer. The use of cross-validation as a stopping rule in emission tomography image reconstruction. *SPIE Vol. 1443 Medical Imaging V: Image Physics*, blzn. 226-233, 1991.

[Cox46] R.P. Cox. Probability, Frequency and Reasonable Expectation. *Am. Jour. Phys. 17*, blzn. 1-13, 1946.

[DeBac88] T. De Backer. Stochastische rekonstruktietechnieken voor tomografische beelden. Afstudeerwerk ingediend tot het behalen van de wettelijke graad van burgerlijk elektronisch ingenieur, Universiteit Gent, 1988.

[DeLae92] J. De Laet. Een toepassing van de Dempster-Shafer-theorie: biologische identificatie met behulp van dichotomische sleutels. Eindwerk aangeboden tot het behalen van de aanvullende graad van licentiaat in de informatica, Katholieke Universiteit Leuven, 1992.

[Demom89] G. Demoment. Image reconstruction and restoration: overview of common estimation structures and problems. *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, Vol. 37, blzn. 2024-2036, 1989.

[Demps77] A.P. Dempster. Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. *J.R. Stat Soc. Series B*, blzn. 1-38, 1977.

[DeReu92] J. De Reuck, D. Decoo, J. Vienne, K. Strijckmans, I. Lemahieu. Significance of white matter lucencies in posthypoxic-ischemic encephalopathy: comparison of clinical status and of computed and positron emission tomographic findings. *Eur. Neurol. (32)*, blzn. 334-339, 1992.

[Desme91a] P. Desmedt. IWONL jaarverslag 1991: 1ste mandaat, 1991.

[Desme91b] P. Desmedt. Maximum entropie en Bayesiaanse beeldrekonstruktie: theoretische achtergrond. LEM Technical Report DG 91-13, 1991.

[Desme91c] P. Desmedt. Maximum entropy and Bayesian image reconstruction: overview of algorithms. LEM Technical Report DG 91-14, 1991.

[Desme91d] P. Desmedt, K. Thielemans, I. Lemahieu, F. Vermeulen, D. Vogelaers, F. Colardyn. Measured attenuation correction using the Maximum Likelihood algorithm. *Medical Progress through Technology*, blzn. 199-204, 1991.

[Desme92a] P. Desmedt. IWONL jaarverslag 1992: 2de mandaat, 1992.

[Desme92b] P. Desmedt. Comparing different priors in Bayesian image reconstruction. LEM Technical Report DG 92-10, 1992.

[Desme93a] P. Desmedt. IWONL jaarverslag 1993: 3de mandaat, 1993.

[Desme93b] P. Desmedt, I. Lemahieu. A comparison of different prior laws for Bayesian image reconstruction in Positron Emission Tomography. In *Maximum Entropy and Bayesian methods, Paris*, Eds. A.Mohammad-Djafari and G. Demoment, Kluwer Academic Publishers, blzn. 393-398, 1993.

[Desme93c] P. Desmedt, I. Lemahieu, K. Bastiaens. Statistical reconstruction techniques in Positron Emission Tomography. In *Proceedings of Medisch Informatica Congres, MIC'93, Gent*, blzn. 137-148, 1993.

[Desme93d] P. Desmedt, I. Lemahieu, K. Thielemans. A Mathematica package for symbolic Bayesian calculations. Accepted for publication in *Maximum Entropy and Bayesian methods, Santa Barbara*, Ed. Heidbreder, Kluwer Academic Publishers, 1993.

[Desme93e] P. Desmedt, I. Lemahieu, K. Bastiaens. A multicriterion evaluation of the MemSys5 program for PET. Accepted for publication in *Maximum Entropy and Bayesian methods, Santa Barbara*, Ed. Heidbreder, Kluwer Academic Publishers, 1993.

[Desme93d] P. Desmedt. Maximum-entropie beeldrekonstruktie in positron-emission tomography: Volledig IWONL verslag 3de mandaat. ELIS Technical Report DG 93-12, 1993.

[Desme93e] P. Desmedt. Technical aspects of the Mathematica package BayesCalc. ELIS Technical Report DG 93-13, 1993.

[Desme94a] P. Desmedt, I. Lemahieu. On maximum entropy methods in PET image reconstruction. Accepted for publication in *ECAT users' Meeting 1994, Selected proceedings*, 1994.

[Desme94b] P. Desmedt, I. Lemahieu. On the use of successive data in the ML-EM algorithm in PET. In *Proceedings of the International Conference on Medical Physics & Biomedical Engineering, Vol. 1, MPBE'94*, blzn. 180-184, 1994.

[Desme94c] P. Desmedt, I. Lemahieu. A Bayesian hypothesis test as stopping criterion for iterative image reconstruction methods. *Physics in Medicine & Biology, Abstracts of the world congress on medical physics and biomedical engineering, Rio De Janeiro*, blzn. 603, 1994.

[Desme94d] P. Desmedt, I. Lemahieu. On the use of successive data in the ML-EM algorithm in Positron Emission Tomography. In *Proceedings of the ProRISC IEEE Benelux, Workshop on circuits, systems and signal processing*, blzn. 89-94, 1994.

[Desme94e] P. Desmedt, I. Lemahieu, K. Thielemans. Introducing Bayesian Probability Theory. Accepted for publication in *The Mathematica Journal*, 1994.

[Desme94f] P. Desmedt, I. Lemahieu, K. Thielemans. Evolution review of BayesCalc, a package for doing symbolic Bayesian calculation. Accepted for publication in *Maximum entropy and Bayesian methods, Cambridge*, Ed. J. Skilling, Kluwer Academic Publishers, 1994.

[Desme94g] P. Desmedt. Exploring Bayesian probability theory with Mathematica: examples of BayesCalc. ELIS Technical Report DG 94-4, 1994.

[Djafa89] A. Mohammad-Djafari, G. Demoment. Maximum entropy and Bayesian approach in tomographic image reconstruction and restoration. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Cambridge*, Ed. J. Skilling, Kluwer Academic Publishers, blzn. 195-201, 1989.

[Djafa91] A. Mohammad-Djafari, J. Idier. Maximum entropy prior laws of images and estimation of their parameters. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Laramie*, Eds. W.T. Grandy, Jr. and L.H. Shick, Kluwer Academic Publishers, blzn. 285-293, 1991.

[Djafa92] A. Mohammad-Djafari. Maximum entropy and the linear inverse problems: a short review. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Paris*, Eds. A. Mohammad-Djafari and G. Demoment, blzn. 253-264, 1992.

[Dusau88] N.J. Dusaussoy. Maximum entropy type algorithms for image reconstruction from projections. PhD dissertation, University of Delaware, 1988.

[Fergu67] T.S. Ferguson. Mathematical statistics, A decision theoretic approach. Academic Press, 1967.

[Fessl94] J.A. Fessler. Private communication.

[Floyd87] C.E. Jr. Floyd, R.J. Jaszczak, R.E. Coleman. Convergence of the maximum likelihood reconstruction algorithm for emission computed tomography. *Phys. Med. Biol.*, Vol. 32 (4), blzn. 477-493, 1987.

[Fouge89] P.F. Fougere. Maximum entropy calculation on a discrete probability space: predictions confirmed. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Cambridge*, Ed. J. Skilling, Kluwer Academic Publishers, blzn. 303-308, 1989.

[Fried72] B.R. Frieden. Restoring with maximum likelihood and maximum entropy. *J. Opt. Soc. Am.* 62, blzn. 511-518, 1972.

[Fried78] B.R. Frieden, D.C. Wells. Restorating with maximum entropy. III. Poisson Sources and backgrounds. *J. Opt. Soc. Am.* 68, blzn. 93, 1978.

[Fukun72] K. Fukunaga. Introduction to statistical pattern recognition. New York: Academic Press, 1972.

[Garre93] A.J.M. Garrett. Presentation at *MaxEnt93 conference*, Santa Barbara, 1993.

[Geman84] S. Geman, D. Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intell*, Vol. PAMI-6, blzn. 721-741, 1984.

[Geman88] S. Geman. Stochastic relaxation methods for image restoration and expert systems. In *Maximum entropy and Bayesia methods in science and engineering 2*, Eds. G.J. Erickson and C.R. Smith, Kluwer Academic Publishers, blzn. 265-311, 1988.

[Green90] P.J. Green. Bayesian reconstruction from emission tomography data using a modified EM algorithm. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-9, blzn. 84-93, 1990.

[Gull78] S.F. Gull, G.J. Daniell. Image reconstruction from incomplete and noisy data. *Nature*, Vol. 272, blzn. 686-690, 1978.

[Gull85] S.F. Gull, J. Skilling. The entropy of an image. In *Maximum entropy and Bayesian methods in inverse problems*, Eds. C.R. Smith and W.T. Grandy, Kluwer Academic Publishers, blzn. 287-301, 1985.

[Gull88] S.F. Gull. Bayesian inductive inference and maximum entropy. In *Maximum entropy and Bayesian methods in science and engineering 1*, Eds. G.J. Erickson and C.R. Smith, Kluwer Academic Publishers, blzn. 53-74, 1988.

[Gull89] S.F. Gull. Developments in entropy data analysis. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Cambridge*, Ed. J. Skilling, Kluwer Academic Publishers, blzn. 53-73, 1989.

[Gullb88] G. Gullberg, B. Tsui. Maximum entropy reconstruction with constraints: iterative algorithms for solving the primal and dual programs. In *Information processing in medical imaging*, Eds. de Graaf and Viergever, blzn. 181-199, 1988.

[Hanso87] K.M. Hanson. Bayesian and related methods in image reconstruction from incomplete data. In *Image recovery: theory and application*, Ed. H. Stark, Academic Press, blzn. 79-125, 1987.

[Hanso91] K.M. Hanson. Optimization of the constrained algebraic reconstruction technique for the performance of a variety of visual tasks. *Information processing in medical imaging*, blzn. 45-57, 1991.

[Hanso93] K.M. Hanson. Bayes reconstruction based on flexible prior models. *Journal of Optical Society of America A*, blzn. 997-1004, 1993.

[Hart87a] H. Hart, Z. Liang. Bayesian image processingin two dimensions. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-6, blzn. 201-208, 1987.

[Hart87b] H. Hart, Z. Liang. Bayesian image processing of data from constrained source distributions II : valued, uncorrelated and correlated constraints. *Bull. Math. Biol.*, blzn. 75-91, 1987.

[Heber90] T. J. Hebert. Statistical stopping criteria for iterative maximum likelihood reconstruction of emission images. *Phys. Med. Biol.*, blzn. 1221-1232, 1990.

[Heima83] E. Heimans, H.W. Heinsius, J.P. Thysse. Geïllustreerde flora van Nederland, W. Versluys Uitgeversmaatschappij B.V., 22e druk, 1983.

[Herma79] Image reconstrcution from projections, implementations and applications, Ed. G.T. Herman, Springer-Verlag, Topics in applied physics, Vol. 32, Springer-Verlag, 1979.

[Herma89] G.T. Herman, K.T.D. Yeung. Evaluators of image reconstruction algorithms. Technical report No. MIPG#151, University of Pennsylvania, 1989.

[Herma91] G.T. Herman, D. Odhner. Performance evaluation of an iterative image reconstruction algorithm for positron emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-10, blzn. 336-345, 1991.

[Herma93] G.T. Herman, B.M. Meyer. Algebraic reconstruction techniques can be made computationally efficient. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. 12, blzn. 600-609, 1993.

[Huang81] S.-C. Huang, R.E. Carson, M.E. Phelps, E.J. Hoffman, H.R. Shelbert, D.E. Kuhl. A boundary method for attenuation correction in positron computed tomography. *J Nucl Med* , blzn. 627-637, 1981.

[Hudso94] H.M. Hudson, R.S. Larkin. Accelerated image reconstruction using ordered subsets of projection data. Submitted for publication, 1994.

[Janin93] W. Janin. Optimalisatie van rekonstruktie van PET-scannerbeelden via maximale entropie-metode. Afstudeerwerk ingediend tot het behalen van de wettelijke graad van burgerlijk elektrotechnisch ingenieur, Universiteit Gent, 1993.

[Jayne57] E.T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics I, II. *Physical review*, blzn. 620-630, 1957.

[Jayne68] E.T. Jaynes. Prior Probabilities. *IEEE Trans. on Sci. Cybern.*, Vol. SSC-4, blzn. 227-241, 1968.

[Jayne76] E.T. Jaynes. Confidence intervals vs. Bayesian intervals. In *Foundations of probability theory, statistical inference and statistical theories of science*, Eds. W.L. Harper and C.A. Hooker, Reidel Publishing Company, 1976.

[Jayne83a] E.T. Jaynes. Concentration of distributions at entropy maxima. In *Papers on probability, statistics and statistical physics*, Ed. Rosenkrantz, blzn. 317-336, 1983.

[Jayne83b] E.T. Jaynes. Marginalization and prior probabilities. In *Papers on probability, statistics and statistical physics*, Ed. Rosenkrantz, blzn. 340-375, 1983.

[Jayne83c] E.T. Jaynes. Brandeis lectures In *Papers on probability, statistics and statistical physics*, Ed. Rosenkrantz, blzn. 39 - 77, 1983

[Jayne88] E.T. Jaynes. The relation of Bayesian and maximum entropy methods. In *Maximum entropy and Bayesian methods in science and engineering 1*, Eds. G.J. Erickson and C.R. Smith, Kluwer Academic Publishers, blzn. 25-29, 1988.

[Jayne90] E.T. Jaynes. Probability theory as logic. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 1- 16, 1990.

[Jayne94] E.T. Jaynes. Probability theory as logic, preliminary version of book, copy available from author, 1994.

[Jeffe92] W.H. Jefferys, J.O. Berger. Ockham's razor and Bayesian analysis. *American Scientist*, blzn. 64-72, 1992.

[Jeffr39] Jeffreys H. Theory of probability, Oxford University Press, 1939.

[Kak88] A.C. Kak, M. Slaney. Principles of Computerized Tomographic Imaging, New York : IEEE Press, 1988.

[Kande78] A. Kandel, W.J. Byatt. Fuzzy sets, fuzzy algebra, and fuzzy statistics. In *Proceedings of the IEEE*, vol. 66, no. 12, blzn. 1619-1639, 1978.

[Kapur90] J.N. Kapur, H.K. Kesavan. The inverse MaxEnt and MinxEnt principles and their applications. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 433-450, 1990.

[Karp88] J.E. Karp, G. Muehllehner. Positron-Emission Tomography. In *Progress in Medical Imaging*, Ed. V.L. Newhouse, Springer-Verlag, blzn. 185-213, 1988.

[Kesav90] H.K. Kesavan, J.N. Kapur. Maximum entropy and minimum-crossentropy principles : need for a broader perspective. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 419-432, 1990.

[Kirkp83] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science 220*, blzn. 671-680, 1983.

[Korsa93a] R.J. Korsan. An example of Bayesian inference. *The Mathematica Journal* (3), blzn. 57-59, 1993.

[Korsa93b] R.J. Korsan. Flipping thumbtacks: 1000 points of data. *The Mathematica Journal* (4), blzn. 35-40, 1993.

[Lange84] K. Lange, R. Carson. EM reconstruction algorithms for emission and transmission tomography. *J. Comput. Assist. Tomogr.*, blzn. 306-316, 1984.

[Lange87] K. Lange, M. Bahn, R. Little. A theoretical study of some maximum likelihood algorithms for emission and transmission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-6, blzn. 106-114, 1987.

[Lapla14] P.S. Laplace. *Essai Philisophique sur les probabilites*, English Translation in 1952 Philisophical essay on probabilities, Dover, 1814.

[Leahy91] R. Leahy, X. Yan. Incorporation of anatomical MR data for improved functional imaging in PET. *Information processing in medical imaging*, Lectures notes in computer science, 511, Springer, blzn. 105-119, 1991.

[Levit87] E. Levitan, G.T. Herman. A maximum a posteriori probability expectation maximization algorithm for image reconstruction in emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-6, blzn. 185-192, 1987.

[Lewit86] R.M. Lewitt, G. Muehllehner. Accelerated iterative reconstruction for positron emission tomography based on the EM algorithm for maximum likelihood estimation. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-4, blzn. 16-22, 1986.

[Lewit92] R.M. Lewitt. Alternatives to voxels for image representation in iterative reconstruction algorithms. *Phys. Med. Biol.*, vol. 37, blzn. 705-716, 1992.

[Liang87] Z. Liang, H. Hart. Bayesian image processing of data from constrained source distributions I. non-valued, uncorrelated and correlated constraints. *Bulletin of Mathematical Biol.*, blzn. 51-74, 1987.

[Llace89] J. Llacer, E. Veklerov. Feasible images and practical stopping rules for iterative algorithms in emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-8, blzn. 186-193, 1989.

[Llace92] J. Llacer, B.M. ter Haar Romeny, M.A. Viergever. The use of geometric prior information in Bayesian tomographic image reconstruction: a preliminary report. *SPIE Vol. 1786 Methematical methods in Medical imaging*, blzn. 82-94, 1992.

[Llace93] J. Llacer, E. Veklerov, K.J. Coakley, E.J. Hoffman, J. Nunez. Statistical analysis of maximum likelihood estimator images of human brain FDG-PET studies. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-12, blzn. 215-231, 1993.

[Lored90] T.J. Loredo. From Laplace to supernova SN 1987A : Bayesian inference in astrophysics. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 81-142, 1990.

[Meikl93] S.R. Meikle, M. Dahlbom, S.R. Cherry. Attenuation correction using count-limited transmission data in positron emission tomography. J. Nucl. Med., blz. 143-150, 1993.

[Meikl94] S.R. Meikle, B.F. Hutton, D.L. Bailey, P.K. Hooper, M.J. Fulham. Accelerated EM reconstruction in total body PET: potential for improving tumour detectability. Submitted for publication, 1994.

[Metro53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, M. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chem. Physics, 21*, blzn. 1087-1092, 1953.

[Miche89] C. Michel, A. Bol, A.G. De Volder, A.M. Goffinet. Online brain attenuation correction in PET: towards a fully automated data handling in a clinical environment. *Eur. J. Nucl. Med., Vol. 15*, blzn. 712-718, 1989.

[Miche93] C. Michel, A. Bol, A. Coppens, M. Sibomana, L. Byars, W. Tribbey. Calculated attenuation in 3D. In *ECAT Technical Users' Meeting, Koln, Germany March 29-30*, blzn. 29, 1993.

[Nuyts91] J. Nuyts. Quantification of SPECT images: simulation, scatter correction, reconstruction and automated analysis, Ph.D thesis, K.U.Leuven, 1991.

[Nuyts94] J. Nuyts, P. Dupont, C. Schiepers, L. Mortelmans. Efficient storage of the detection probability matrix for reconstruction in PET. *J. Nucl. Med. 35*, blzn. 187, 1994.

[Ollin92] J.M. Ollinger. Reconstruction-reprojection processing of transmission scans and the variance of PET images. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, Vol. 39, blzn. 1122-1125, 1992.

[Ollin94] J.M. Ollinger. Maximum-Likelihood reconstruction of transmission images in emission computed tomography via the EM algorithm. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-13, blzn. 89-101, 1994.

[Press89] W.H. Press, B.P. Flannery, S. Teukolsky, W. Vetterling. Minimization or maximization of functions. In *Numerical recipes in C*, Cambridge University Press, blzn. 290-353, 1989.

[Pan91] T.-S. Pan, A.E. Yagle. Numerical study of multigrid implementations of some iterative image reconstruction algorithms. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-10, blzn. 572-588, 1991.

[Papou65] A. Papoulis. Probability, random variables and stochastic processes. McGraw-Hill Book Company, 1965.

[Parke90] J. A. Parker. Image reconstruction in radiology. CRC Press, Inc., 1990.

[Pfeif65] P.E. Pfeiffer. Concepts of probability theory, Dover Publications, Inc., 1965.

[Phelp86] Positron Emission Tomography and Autoradiography: Principles and applications for the brain and heart, Eds. M. Phelps, J.C. Mazziotta, H.R. Schelbert, Raven Press, New York, 1986.

[Pina93] R. K. Pina, R.C. Puetter. Bayesian image reconstruction: the pixon and optimal image modeling. *Publications of the Astonomical Society of the Pacific 105*, blzn. 630-637, 1993.

[Pleti84] D. Pletinckx. Maximum entropie rekonstruktie van tomografische beelden. Afstudeerwerk ingediend tot het behalen van de wettelijke graad van burgerlijk elektronisch ingenieur, Rijksuniversiteit Gent, 1984.

[Ramak79] R.S. Ramakrishan, S.K. Mullick, R.K.S. Rathore, R. Subramanian. Orthogonalization, Bernstein polynomials, and image restoration. *Appl. Opt. 18*, blzn. 464-468, 1979.

[Ranga88] M.V. Ranganath, A.P. Dhawan, N. Mullani. A multigrid expectation maximization reconstruction algorithm for positron emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. 7, blzn. 273-278, 1988.

[Reba83] R.C. Reba. Diagnostic imaging in medicine. In *Nato ASI Series, Series E: Applied Sciences - No. 61*, Ed. Reba R.C., Goodenough D.J., Davidson H.F., 1983.

[Rockm76] Rockmore A.J., A. Macovski. A maximum likelihood approach to emission tomography. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, blzn. 1428-1432, 1976.

[Rockm77] Rockmore A.J., A. Macovski. A maximum likelihood approach to transmission image reconstruction from projections. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, blzn. 1929-1935, 1977.

[Seth90] A.K. Seth, J.N. Kapur. A comperative assessment of entropic and non-entropic methods of estimation. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 433-450, 1990.

[Shann49] C.E. Shannon, V. Weaver. The mathematical theory of information, U. Illinois Press, Urbana, Ill., 1949.

[Shepp82] L.A. Shepp, Y. Vardi. Maximum likelihood reconstruction for emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. MI-1, blzn. 113-122, 1982.

[Shepp84] L.A. Shepp, Y. Vardi, J.B. Ra, S.K. Hilal, Z.K. Cho. Maximum likelihood of PET with real data. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, blzn. 910-912, 1984.

[Shore80] J.E. Shore, R.W. Johnson. Axiomatic derivation of the principle of maximum entropy and the principle of minimum cross-entropy. *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT 26, blzn. 26 -37, 1980.

[Shore83] J.E. Shore, R.W. Johnson. Comments on and correction to "Axiomatic derivation of the principle of maximum entropy and the principle of minimum cross-entropy". *IEEE Trans. Inform. Theory, IT 29*, blzn. 942 -943, 1983.

[Siege92] S. Siegel, M. Dahlbom. Implementation and evaluation of a calculated attenuation correction for PET. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, Vol. 39, no. 4, blzn. 1117-1121, 1992.

[Silve93] R.N. Silver. Quantum statistical inference. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Paris*, Eds. A.Mohammad-Djafari and G. Demoment, Kluwer Academic Publishers, blzn. 167-182, 1993.

[Skill85] J. Skilling, S.F. Gull. Algorithms and applications. In *Maximum entropy and Bayesian methods in inverse problems*, Eds. C.R. Smith and W.T. Grandy, Kluwer Academic Publishers, blzn. 83-132, 1985.

[Skill87] J. Skilling, S.F. Gull. Prior information should be used. In *Maximum entropy and Bayesian spectral analysis and estimation problems*, Eds. C.R. Smith and G.J. Erickson, Kluwer Academic Publishers, blzn. 161-173, 1987.

[Skill88] J. Skilling. The axioms of maximum entropy. In *Maximum entropy and Bayesian methods in science and engineering 1*, Eds. G.J. Erickson and C.R. Smith, Kluwer Academic Publishers, blzn. 173-187, 1988.

[Skill89] J. Skilling. Classic maximum entropy. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Cambridge*, Ed. J. Skilling, Kluwer Academic Publishers, blzn. 45-52, 1989.

[Skill91] J. Skilling, D.R.T. Robinson, S.F. Gull. Probabilistic displays. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Laramie*, Eds. W.T. Grandy, Jr. and L.H. Shick, Kluwer Academic Publishers, blzn. 365-368, 1991.

[Smith90] C.R. Smith, G.J. Erickson. Probability theory and the associativity equation. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Dartmouth*, Ed. P.F. Fougere, Kluwer Academic Publishers, blzn. 17-30, 1990.

[Snyde85] D.L. Snyder, M.I. Miller. The use of sieves to stabilize images produced with the EM algorithm for emission tomography. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, blzn. 3864-3872, 1985.

[Snyde87] D.L. Snyder, M.I. Miller, L.J. Thomas, D.G. Politte. Noise and edge artifacts in maximum-likelihood reconstructions for emission tomography. *IEEE Trans. Med. Imaging, Vol. MI-6*, blzn. 228-238, 1987.

[Stock93] Radiopharmaceuticals for positron emisson tomography, Eds. G. Stocklin and V.W.Pike, Kluwer Academic Publishers, 1993.

[Sunde92] E. Sundermann. Simulated annealing voor computertomografie. Afstudeerwerk ingediend tot het behalen van de wettelijke graad van burgerlijk elektronisch ingenieur, Universiteit Gent, 1992.

[Sunde94a] E. Sundermann, I. Lemahieu, P. Desmedt. Simulated annealing image reconstruction from positron emission tomography. In *Proceedings of the International conference on medical physics & biomedical engineering, Vol. 1, MPBE '94*, blzn. 175-179, 1994.

[Sunde94b] E. Sundermann, I. Lemahieu, P. Desmedt. PET image reconstruction using simulated annealing. In *Proceedings of the ProRISC IEEE Benelux, Workshop on circuits, systems and signal processing*, blzn. 239-245, 1994.

[Sunde94] E. Sundermann, I. Lemahieu. Simulated annealing image reconstruction from positron emission tomography. *Physics in Medicine & Biology*, Abstracts of the world congress on medical physics and biomedical engineering, Rio De Janeiro, blzn. 601, 1994.

[Tanab77] K. Tanabe. Projection method for solving a singular system. *Numeric. Math.*, blz 203-214, Vol. 17, 1977.

[Tanak92] E. Tanaka. Improved iterative image reconstruction with automatic noise artifact suppression. *IEEE Trans. Med. Imaging, Vol. MI-11*, blzn. 21-27, 1992.

[Thiel90] K. Thielemans, P. Desmedt, D. Vogelaers, F. Colardyn, I. Lemahieu, J.H.C. Reiber, P. Anema Towards a quantitative evaluation of myocardial infarct size through PET-imaging. In *Proceedings of the "North Sea Conference on Biomedical Engineering 1990"*, 1990.

[Tikoc84] Y. Tikochinsky, N.Z. Tishby, R.D. Levine. Consistent inference of probabilities for reproducible experiments. *Phys. Rev. Lett.*, blzn. 1357-1360, 1984.

[Towns93] D.W. Townsend, M. Defrise. Image reconstruction methods in Positron Tomography. Lecture notes of the Academic Training Programme of CERN 1992-1993, 1993.

[Tribu69] M. Tribus. Rational descriptions, decisions and design, Pergamon Press, Inc., 1969.

[Usten91] D. Ustendag, N.M. Queen, G.K. Skinner, J.E. Bowcock. Two new methods for retrieving an image from noisy, incomplete data and comparison with the Cambridge maxent package. In *Maximum entropy and Bayesian methods, Laramie*, Eds. W.T. Grandy, Jr. and L.H. Shick, Kluwer Academic Publishers, blzn. 295-301, 1991.

[VanCa81] J.M Van Campenhout, T.M. Cover. Maximum entropy and conditional probability. *IEEE Trans. Inf. Theory*, blzn. 483-489, 1981.

[VdBer89] Van Den Bergen, G. Jonkers, K. Strijckmans, P. Goethals. Industrial applications of positron emission computed tomography. *Int. J. Radiat. Apll. Instrum. Part E*, blzn. 407-418, 1989.

[VdWyn92] K. Vanden Wyngaerd. Entropie maximalisatie voor computertomografie. Afstudeerwerk ingediend tot het behalen van de wettelijke graad van burgerlijk elektronisch ingenieur, Universiteit Gent, 1992.

[VanLa87] P.J.M. Van Laarhoven, E.H.L. Aarts. Simulated annealing: theory and applications, Reidel Publ. Corp., 1987.

[VanMa93] H. Van Marck, J. Van Campenhout. Simulated annealing voor plaatsing en routine in chip-ontwerp. LEM technische rapport DG 93-14, 1993.

[Vekle87] E. Veklerov, J. Llacer. Stopping rule for the MLE algorithm based on statistical hypothesis testing. *IEEE Trans. Med. Imaging, Vol. MI-6*, blzn. 313-319, 1987.

[Verme83] F. Vermeulen. On the performance of maximum-likelihood reconstructions in positron emission tomography. *Proceedings of the 1983 SPIE International Technical Conference/Europe, Vol. 397, Applications of digital image processing*, blzn. 274-279, 1983.

[Voorb90] F. Voorbraak. Redeneren met onzekerheid 3: Dempster-Shafer-theorie. *Informatie*, blzn. 4-12, 1990.

[Voorb90] F. Voorbraak. Redeneren met onzekerheid 3: Vage en niet-monotone logica. *Informatie*, blzn. 236-244, 1990.

[Wald47] A. Wald. Sequential Analysis, Dover Publication Inc., 1947.

[Wang92] Y. Wang, W. Lu. Multicriterion maximum entropy image reconstruction from projections. *IEEE Trans. Med. Imaging*, Vol. 11, blzn. 70-75, 1992.

[Werne77] S.J. Wernecke, L.R. D'Addario. Maximum entropy image reconstruction. *IEEE Trans. Computers* C-26, blzn. 351-364, 1977.

[Willi80] P.M. Williams. Bayesian conditionalisation and the principle of minimum information. *Brit. J. Phil. Sci. 31*, blzn. 131-144, 1980.

[Wolfr91] S. Wolfram. Mathematica, A system for doing mathematics by computer, Adison-Wesley Publishing Company, Inc., 1991.

[Zhuan87] X. Zhuang, E. Ostevold, R.M. Haralick. A differential equation approach to maximum entropy image reconstruction. *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, blzn. 208-218, 1987.