# 利用神经场对散射介质中的光吸收度进行高分辨率断层重建

## 作者信息

**Wuwei Ren**[1, *, #], **Siyuan Shen**[1, #], Linlin Li[1, #], Shengyu Gao[1], **Yuehan Wang**[1], **Liangtao Gu**[1], **ShiyingLi**[1], **Xingjun Zhu**[2], **Jiahua Jiang**[3, 4, *], Jingyi Yu[1, *]*[1]*信息科学与技术学院，上海科技大学，中国上海 201210*[2]*物理科学与技术学院，上海科技大学，中国上海 201210*[3]*数学科学研究*

*国*[#]*共同贡献*[*]*通讯作者*

## 通讯作者

通信作者：Jingyi Yu (yujingyi@shanghaitech.edu.cn)、Wuwei Ren (renwuw@shanghaitech.edu.cn)，上海科技大学信息科学与技术学院，上海 201210，中国；Jiahua Jiang (j.jiang.3@bham.ac.uk)，伯明翰大学数学学院，埃德巴斯顿，B15

**摘要**

光散射给成像浑浊介质（如生物组织和雾霾空气）深处的物体带来了巨大障碍。漫射光学层析成像（DOT）通过体积重建光吸收度来应对散射，在医学成像、遥感和自动驾驶领域具有重要意义。传统的DOT重建范式需要以预设分辨率将物体体积离散化为体素，以对漫射光传播进行建模，因此重建的空间分辨率通常受到限制。我们提出了NeuDOT，这是一种基于神经场（NF）的新型DOT方案，可对体积内的光吸收度进行连续编码，从而弥合模型精度与高分辨率之间的差距。全面的实验表明，NeuDOT可实现亚毫米级横向分辨率，并能解析深度达14毫米处的复杂三维物体，性能优于最先进的方法。NeuDOT是一种无创、高分辨率且计算高效的层析成像方法，并为神经场在光散射领域的进一步应用开辟了道路。

关键词

神经场；漫射光学层析成像；光散射；自适应网格划分；图像重建

# 引言

通过生物组织、雾霾空气和浑浊水体等强扩散介质，无创探测吸收和散射系数等光学性质的能力，有望惠及众多工程和研究领域。一个典型例子是新冠疫情期间常规使用的脉搏血氧测定：它发射近红外光，并基于一个简单原理监测氧合水平——富氧血液与缺氧血液在多个波长下的吸收系数存在显著差异。此后，血氧测定这一一维传感技术进一步拓展到了更具挑战性的三维成像任务，涵盖强散射组织中的血管解剖结构体绘制，以及自动驾驶中透过雾霾精准定位行人[1,2]。尤其在许多生物医学应用中，与血氧测定这类一维传感技术相比，利用三维血流动力学特征能够更清晰地展现组织活力和功能。

漫射光学层析成像（DOT）已发展成为一种有效的三维成像技术，能够对散射介质内部数厘米深度范围内的光学性质进行体积成像[3]。简而言之，DOT以非侵入方式测量从物体表面透射和散射出的光，随后应用基于模型的重建算法，恢复物体体积内光学性质的三维图谱，尤其是光吸收（$\mu_a$）。DOT在乳腺癌诊断[4,5]，、功能性脑成像[6,7]，、骨骼肌评估[8]，和外周循环评估[9]方面展现出显著价值。近期的进展则致力于进一步优化DOT，以成像尺度大得多的物体（例如，米级物体），并有望应用于遥感和自动驾驶[10]。

尽管DOT具有丰富的潜在应用，其图像重建仍是一项根本性挑战。传统扩散光学断层成像重建方法的分辨率较低，介于1毫米至1厘米之间[11],，这限制了其在需要检测组织细微异常的场景中的广泛应用。造成这一问题的原因有多方面。首先，DOT需要处理多重散射光子，导致其逆问题高度不适定[12,13]。光散射使成像系统无法准确聚焦于靶标位置，还会造成成像平面严重模糊；尤其当物体深度超过常规显微技术的检测范围时更是如此，即最大为~1 毫米，这一距离也称为输运平均自由程（TMFP）[1,14]。因此，该测量系统具有非线性，X射线计算机断层成像（CT）的经典重建算法（如滤波反投影（FBP））并不适用于DOT，因为这些算法仅考虑弹道光子或低散射光子的传播[15]。其次，高分辨率DOT重建的计算成本高昂。高精度重建算法需要准确地模拟漫射光传播；在数值上，可先将物体体积分割为体素或网格单元，再采用耗时的有限元法（FEM）或蒙特卡罗（MC）方法进行计算[16,17]。然而，对于尺寸较大且光学性质不均匀的物体，需要采用规模大、密度高的体素或网格近似。但增加体素或单元进行离散化，不仅会加重计算负担，还会引入大量未知数，使逆问题的不适定性加剧[3]。总而言之，开发一种能够应对逆问题不适定性并降低计算成本的高分辨率DOT重建算法，极具吸引力。

为解决这些问题，传统的DOT重建范式着重于通过最小化一个惩罚函数，求得未知光学性质（主要是 $\mu_a$）的最优解

该惩罚函数由数据保真项和正则化项组成。前者表示实际测量值与基于物理的扩散模型预测值之间的差异，后者则引入有关解的先验知识，例如对平滑性或稀疏性的约束[8]。将最小二乘损失与具有$l_2$范数的Tikhonov正则化相结合，可显著缓解扩散光学层析逆问题的不适定性。然而，重建图像[7]中仍会出现不理想的过度平滑效应。除传统重建方法外，深度学习（DL）方法在DOT重建中也表现出更高的准确性[18]。近年来，这些深度学习方法的复兴主要得益于基于卷积神经网络（CNN）的方法。例如，一种典型的CNN架构首先学习逆散射问题中的非线性物理规律，然后重建仿生体模和活体动物中的异质光学图谱[19]。多任务学习网络已被用于有限角度扩散光学层析场景下的病灶定位重建[20]。然而，现有的深度学习方法几乎都采用监督策略：为获得高分辨率重建，这些端到端的基于深度学习的方法需要大量训练数据集，而这些数据集要么通过真实实验获得，要么依赖耗费高昂的仿真生成。因此，亟需无监督或自监督的深度学习方法，从而无需生成大量训练数据集。还需指出的是，迄今为止，传统的DOT重建方法和基于深度学习的DOT重建方法都不可避免地需要先对物体体积进行离散化，然后求解离散形式的解。然而，如前所述，细化离散体素或网格单元会增加计算成本并加剧不适定性。因此，亟需从基于离散化的表示转向连续表示，以适用于自监督深度学习，支持高分辨率扩散光学层析成像。

神经辐射场（NeRF）作为一种新型自监督深度学习方案应运而生，它能够摆脱基于离散化的表示，并通过全连接深度网络连续渲染体积目标[21]。受 NeRF 最初应用于视图合成的启发，基于神经场（NF）的重建方法已成功用于多种成像技术，包括非视线成像（NLOS）[22]，显微成像[23,24]，和有限投影计算机断层成像（CT）[25]，，这表明 NF 能够从有限的测量数据（例如 CT 中有限角度的二维投影）中学习目标对象的高质量表示，而无需外部训练数据集。然而，这些基于神经场的重建方法大多仅涉及弹道光子传播，可视为将 NeRF 扩展至其最初的视图合成应用[21]。涉及强烈光散射的神经场渲染或重建鲜有报道。本文提出基于神经场的漫射光学层析成像（NeuDOT），这是一种新颖的 DOT重建方案，无需外部训练流程，即可从一系列二维测量中学习连续、高保真度的三维吸收系数分布或 $\mu_a$ 图。我们的方法具有若干独特优势：

- 我们的方法继承了基于神经场的表示的显著优势：其连续表示使我们能够获得足够高的分辨率，从而在任意位置精确定位重要区域。为此，我们优化多层感知机（MLP）神经网络，使其学习一个将空间坐标映射到$\mu_a$ 图的隐式函数。NeuDOT 能够高效存储和可视化高分辨率重建结果，其表现优于采用显式预定义网格或体素网格的传统方法。

- NeuDOT 首次探索了能够进行成像的基于神经场的渲染技术

该技术适用于高散射介质。有限元模拟器无缝集成到基于神经场的重建方案中，能够准确预测扩散光传播，并通过为有限元网格中的每个单元分配不同的吸收系数和散射系数来考虑光学异质性。

- NeuDOT 在重建速度和内存使用量方面具有较高的计算效率。我们的方法采用自监督方式，因此无需耗时的外部训练。为进一步降低计算成本，我们在重建迭代过程中细化有限元网格中的感兴趣区域，以实现自适应网格划分。通过查询训练好的多层感知机，可以获取更新后的网格中 $\mu_a$ 的新节点值。因此，正向模型的精度得以提高，而未知问题的规模（即多层感知机的结构）保持不变。

综合实验表明，在结构复杂程度不同的仿体研究中，我们的 NeuDOT 实现了前所未有的空间分辨率，优于广泛使用的传统方法以及最新的端到端深度学习方法。

## 结果

系统描述与 NeuDOT 重建我们设计了一套连续波（CW）-DOT成像系统（图 1a），配备固态激光器和一台16位互补金属氧化物半导体相机，在定制样品台上提供60 × 60 $mm^2$ 的视场（FOV）。生成的自由空间激光束在振镜引导下，按光栅扫描模式照射散射样品的底部表面；与此同时，相机在每个扫描 $p_i$ （$i = 1$、2、…… $N$处拍摄一张顶部表面图像，其中 $N$ 表示照明点总数。由此得到的二维图像堆栈（图 1c）用作输入，以进行

DOT重建（详见方法）。DOT的目标是根据边界测量 $\Gamma$ （图 1b）估计非均质光学系数 $\mu_a$ 。应对反演过程不适定性的一种常用策略是通过优化[3], ，例如最小化以下目标函数：

$$\Psi(\mu_a) = \|\Gamma - f(\mu_a)\|_2^2 + \tau R(\mu_a) \quad (1)$$

采用公式 (3)–(5) 给出的正向模型 $f$ 、正则化函数 $R$ 和超参数 $\tau$（正向模型的详细推导见方法）。

使用经典 DOT 重建复杂靶标时，主要瓶颈在于：用于优化 $\mu_a$ 的基于网格的表示 $\boldsymbol{r}$ 的基本实现难以达到足够高的分辨率：提高正向模型的网格细化程度会降低鲁棒性，并使优化求解器的精度下降[26]。为了在不降低鲁棒性的情况下提高空间分辨率，我们通过一种用于超分辨率 DOT 重建的新型计算框架，结合了神经场渲染和基于物理的有限元模型的特点，该框架称为 NeuDOT（图 1b）。NeuDOT 旨在利用由多层感知机网络 $\mu_a^\Theta$ 定义的神经场近似光吸收分布 $\boldsymbol{r}$，其权重 $\Theta$ 通过最小化公式 (1) 的修正目标函数进行优化，该函数为

$$\Psi(\mu_a^\Theta(\boldsymbol{r})) = \left\|\Gamma - f(\mu_a^\Theta(\boldsymbol{r}))\right\|_2^2 + \tau R(\mu_a^\Theta(\boldsymbol{r})) \quad (2)$$

NeuDOT 的两个关键特性对于实现高质量重建至关重要：1) 吸收分布 $\mu_a^\Theta(\boldsymbol{r})$ 的大小独立于有限元网格，这增强了我们算法的鲁棒性，并提高了实现超分辨率重建的可能性。2) NeuDOT 是无监督的，因此无需传统上规模庞大的训练数据集。

NeuDOT 的流程包含两个主要步骤：MLP 构建和自适应网格划分（图 1b）。传统扩散光学断层成像与 NeuDOT 的对比见图 1d。（有关 MLP 和自适应网格划分的详细信息，请参阅方法、补充视频 1）。

## 重建性能表征

我们基于包含不同二维平面图案的散射体模所获得的测量数据，从横向开始评估了 NeuDOT 的重建性能（实验 1，详见方法）。对于所有采集的数据集，我们将 NeuDOT 与两种最先进的 DOT 重建方法进行了比较：1）采用基于物理的模型和修正的 Levenberg-Marquardt算法（LM）[27]的经典重建方法（补充说明 1）；2）近期提出的采用卷积神经网络（CNN）[20]的监督学习方法（补充说明 2）。无论成像目标和所用重建算法有何不同，结果均统一存储在一个由 $110 \times 110 \times 7$ 个体素组成的网格中。为展示结果与真实值之间的差异，我们仅显示重建结果的底层（$z = 0$ 毫米）（图 2）。三种方法均成功重建了字母“T”的形状（图 2a，第 1 行）。相比之下，NeuDOT 的边界重建更清晰，且强度分布比 LM 和 CNN 更均匀。相反，CNN 的结果边界过于平滑，同时背景中还存在明显噪声。对于大学标志（图 2a，第 2 行），NeuDOT 分离出了周围的两条环形结构，并部分重建了中央塔形图案。然而，LM 和 CNN 均未能分辨出塔形结构或两条环形结构。最后一个案例中，NeuDOT 清晰地重建了相距 0.5 毫米的两条条纹，而 LM 和 CNN 均未能做到这一点（图 2a，第 3 行）。此外，我们还绘制了重建结果和真实值中心处的水平剖面（图 2c），显示 NeuDOT 达到了亚

毫米级横向分辨率，远高于 LM 和 CNN。补充说明 7 的表 S5 展示了不同平面情况下各项指标的定量比较，证明 NeuDOT 优于最先进水平。

接下来，我们通过仅改变散射体模中成像目标的高度（实验 2，详见方法），评估了沿轴向的重建质量。对于所有重建方法，我们都在均匀离散化的 $110 \times 110 \times 15$ 体素体积内计算恢复的吸收系数。NeuDOT 能够以更高的精度恢复全部三根杆的高度（图 3a 和 b）。相比之下，LM 无法恢复杆的深度信息。此外，NeuDOT 清晰保留了每根杆的正方形横截面及其边界，而 LM 和卷积神经网络中的边界则发生了变形。我们还比较了各横截面沿 x 轴和 y 轴的剖面图（图 3c）。这些剖面清晰地展示了 NeuDOT 相较于最先进水平技术能够获得高度精确结果的能力。

## 人工血管体模

在最后一个实验（实验 3，详见方法部分）中，我们对一个仿体进行了成像。该仿体包含从人体脑血管模型中提取的虚拟血管结构，这对弥散光学断层成像而言是一项颇具挑战但更贴近现实的任务。图4c展示了重建结果在不同位置的横截面（z = 3、5、9 mm）。LM只能分辨物体的第一层，但无法在其余切片中生成强度足够的图像。基于CNN的方法略微提升了重建质量，但生成的图像过于模糊。相比之下，NeuDOT不仅能在所有切片中重建出基本结构，还能恢复血管模型的次级分支（图4c）。在不同

深度下恢复多个切片的能力进一步使NeuDOT能够重建血管的三维形状，这在以往研究中尚未实现。具体而言，我们使用中轴变换[28] 进行骨架提取，并将NeuDOT的估计结果与真实值进行比较（图4d）。提取出的中心线深度以颜色编码表示，血管分支的连接点和端点则以红色标出。NeuDOT能够恢复血管的基本解剖结构，包括主要分支和连接点。NeuDOT结果中次要分支的长度仍与原始仿体存在差异，这在很大程度上可归因于噪声和观测不足。对指标的进一步比较与所有切片中的可视化重建结果一致（补充说明 7）。

## 计算存储与时间

最后，我们通过与其他方法比较内存开销和重建时间，评估了 NeuDOT 的计算成本。为简化起见，这项概念验证基于包含三根杆的实验 2。我们观察到，NeuDOT 所需的内存空间最少（图 3d），这主要得益于自适应网格划分步骤。随着有限元网格每隔 100 次迭代通过添加新的采样点进行定期更新，存储用量呈阶梯式增长，在迭代 1200 次时从 4530 M 增至 19060 M（补充说明3）。我们还测试了未采用自适应网格划分的相同基于NF的方法。为达到相当的重建分辨率，我们使用了固定维度的精细网格，因此内存使用量大幅增加，达到约 40000 M，是采用自适应网格划分时的两倍。另一种基于深度学习的方法，即端到端卷积神经网络方法，计算效率较高，内存开销约为 20000 M，接近 NeuDOT 在迭代收尾阶段的水平。由于必须为密集有限元网格保存庞大的雅可比矩阵，LM 的内存消耗最大。

请注意，未采用自适应网格的 NeuDOT 仍比 LM 更节省内存。与 NeuDOT 和基于CNN的方法相比，它仍面临沉重的存储负担，这正是我们提出自适应网格划分的动机。在此，我们展示了借助自适应网格划分的 NeuDOT 能够灵活应用于各类物体、满足不同精度要求，并适用于更广泛的环境。例如，在存储空间有限的计算环境中，NeuDOT 仍能提供相对高分辨率的重建。

关于效率方面，图中展示了实验 2 中各种方法的计算时间（图3e）。得益于自适应网格划分，NeuDOT（~60 分钟）相比未采用自适应网格的 NeuDOT（~219 分钟），运行速度提升了 3.65 倍。在这四种方法中，LM（~6600 分钟）的计算开销最大。所有这些情况下均计入了 1200 次迭代。尽管如此，在实际应用中，LM 的二阶收敛特性使我们仅需 10 次迭代便能获得满意的重建，所需时间与 NeuDOT（~60 分钟）相当。对于基于CNN的方法，网络训练（210 分钟）完成后，重建时间仅为十分之几秒（~0.5 秒）。然而，训练时间高度依赖于数据量，数据不足会妨碍 CNN 的泛化性能（补充说明 2）。

## 讨论

从严重散射介质中分辨物体，长期以来一直是多个研究领域面临的挑战，尤其是生物医学研究和自动驾驶。在过去十年中，多光子显微镜[29]，、光声断层成像[30]，和波前调控[31]等技术通过调控

照明或采集非散射传输能量信号（例如利用光声信号），提高了光学成像的穿透深度。尽管这些技术改进取得了进展，漫射光学成像的重建范式仍未改变：通过求解一个固定维度未知参数的逆问题进行重建，这在很大程度上阻碍了空间分辨率的提升。亟需开发一种新的重建范式，使现有系统无需增加硬件复杂度即可获得更好的成像性能。在本研究中，我们将经典的弥散光学断层成像范式转变为NeuDOT，这是一种新方案，其中未知的光学属性图由一个经过位置编码、包含高频空间信息[21]的神经场隐式表示。我们还使用自建漫射光学断层成像系统，通过实验进一步验证了该重建方法。我们开展了一系列精心设计的仿体实验，将实验复杂度从简单的二维物体逐步提升至更复杂的三维人工血管模型。NeuDOT能够以亚毫米分辨率重建嵌入厚度为6.5 mm的组织仿体中的平面物体（图2b），并以体积方式分辨虚拟血管模型的复杂结构（图4）。在所有实验中，NeuDOT的表现均优于经典的LM重建[27] 和最先进的卷积神经网络方法[19]。

我们提出的方法的新颖之处在于，将基于NF的光吸收度连续表示与采用有限元法的改进型、基于物理的光传播建模相结合。对于NF的前一部分，位置编码的第一步是利用式（6）中一系列频率递增的三角函数，将三维坐标中的每个位置（$x, y, z$）映射为一个光吸收系数变量 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$。由于三角函数的内在性质，即一对正弦—余弦函数的导数保持不变，这一步不仅保留了任意位置处 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$的数值，还保留了其高阶导数性质。接下来，未知的 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$将被连续表示

为具有大量权重参数 Θ 的多层感知机网络。值得注意的是，传统方法（如LM）和近期报道的端到端基于CNN的方法，都只假设解具有固定维度[19,27]。NeuDOT使重建图像达到前所未有的空间分辨率，并大幅减轻了传统方法造成的过度平滑效应。基于物理的正向建模是第二个关键部分。每次迭代中，有限元法求解器生成的模拟测量值[32]（其中考虑了光学异质性）会与真实实验数据进行比较。随后，差异信息用于更新多层感知机网络，进而改变 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$的值，以便在下一次迭代中输入有限元法求解器。因此，我们的方法是无监督的，无需像卷积神经网络那样进行额外训练，而额外训练会耗费大量时间。限制模型精度的一个主要障碍是，包含大量节点的致密网格会导致计算时间过长和内存开销过高。为提高算法效率，我们引入了自适应网格划分，通过细化光学异质性较高的区域（在本例中即吸收较强的区域）来实现。隐式函数的优势在于，只需向多层感知机提供任意三维坐标，就能轻松从中重新采样。我们采用吉布斯采样，根据中间重建结果进行更合理的采样，并将新增节点添加回现有网格。随后更新网格，以供下一次迭代使用，从而提高正向建模的精度。结果表明，与未采用这一关键自适应网格划分步骤的相同方法相比，我们的自适应网格划分策略可将计算速度提高三倍以上，并将内存使用量减少约一半。此外，传统的LM方法是一种二阶收敛算法，所需迭代次数较少，并且已证明其在解决各种DOT重建问题时具有鲁棒性。不过，LM的缺点是需要大量内存来存储和运算雅可比矩阵，对于参数数量庞大的神经网络而言，这种内存需求难以接受。

与其他 NF 方法一样，NeuDOT 使用稳健的一阶 Adam 优化器[33] ，因为它计算效率高，并已在一系列 NF 应用中证明效果良好[21]。NeuDOT 的意义还在于，所提出的流程可以推广到其他漫射光学成像方法，甚至是涉及散射效应的其他成像模态。在本研究中，我们使用连续波光源和 CMOS 相机进行记录。这种连续波漫射光学断层成像技术具有高信噪比（SNR）数据质量、系统配置简单和成本低等特点，因此广泛用于临床和生物医学研究，例如功能性脑成像[34]。DOT 技术的一项潜在改进是引入时域（TD）信息，而不是像当前连续波漫射光学断层成像系统那样，仅使用在一定曝光时间内平均的光子强度[11]。单光子雪崩二极管（SPAD）与皮秒脉冲激光器结合，可进行时域测量并生成大量数据；研究已证明，这能显著提高 DOT 重建质量[11,35]。此外，除了光学性质，也可以采用类似 DOT 的原理，对荧光探针等外源性造影剂进行体积重建[36,37]。为实现时域漫射光学层析成像和荧光重建，只需在 NeuDOT 中更换当前有限元法求解器并添加变量，即可轻松完成适配，其余流程保持不变。此外，我们还可以将 NeuDOT 的概念推广到其他成像模态，例如正电子发射断层成像（PET）[38] 和 X射线计算机断层扫描[39], ，因为考虑散射光子有助于提高重建质量。NeuDOT 也可以视为基于神经场的原始视图合成方法的技术延伸；原始方法仅考虑弹道光子传播[21,40]。

尽管我们的方法在真实实验中取得了令人鼓舞的重建结果，但这仅仅是迈向散射介质中高精度、高速三维成像的第一步。NeuDOT 中的正向建模模块采用有限元法求解器实现，但有限元法——

——基于扩散近似的方法在光源附近区域，或在不满足$\mu_a \ll \mu_s'$[16,41]的情况下会失效。提高仿真精度的一种替代方案是采用更精确、但耗时更长的基于蒙特卡罗的方法[17]，；这种正向模型也与我们当前的 NeuDOT 流程兼容。目前 NeuDOT 的计算成本仍无法满足光吸收度实时三维可视化的要求。幸运的是，计算机视觉领域的后续研究已报告了能够改善神经场训练成本高这一缺点的方法。[42,43,44,45] 例如，Chen 等人不再采用纯粹的多层感知机，而是使用四维张量对辐射场进行建模，并进一步将张量分解为低秩分量，以加快训练过程[42]。Müller 等人则尝试采用一种新的输入编码策略，在不牺牲图像质量的前提下使用更小的网络，从而降低计算成本[43]。除了本研究使用的仿体目标外，我们还计划将 NeuDOT 方法用于更贴近现实且更复杂的场景，例如涉及动物甚至人体组织的活体成像。我们坚信，我们的方法可以在不同尺度上得到广泛应用，例如无创癌症诊断、低成本植物生长监测，以及自动驾驶中的障碍物识别（补充说明 8）。

总之，我们开发了 NeuDOT，这是一种基于神经场的新型重建框架，可对散射介质中的光吸收度进行体积解析。经过良好校准的仿体实验表明，所提出的方法在单层中可实现亚毫米级横向分辨率，并能准确重建深度达 14 mm 的复杂三维物体，其性能优于经典弥散光学断层成像方法和其他基于深度学习的方法。我们的工作证明，在漫射光传播占主导、光子的弹道传播受到抑制的情况下，神经场可为高分辨率成像技术提供一种替代方案，为生物医学研究、作物监测和自动驾驶领域更广泛且可扩展的应用开辟道路。

## 方法

### 漫射光学层析成像的基本原理

经典DOT重建包括两个步骤，即正向建模和反演。首先，使用基于物理的模型计算漫射光传播及其产生的测量值。本文采用玻尔兹曼输运方程的扩散近似，简称扩散方程（

$$-\nabla \cdot \kappa(\boldsymbol{r})\nabla\Phi(\boldsymbol{r}) + \mu_a(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{r}) = 0,\ \boldsymbol{r} \in \boldsymbol{\Omega} \tag{3}$$

其中，$\Phi(\boldsymbol{r})$表示散射体积 $\boldsymbol{\Omega}$ 内空间位置 $\boldsymbol{r}$ 处的光子密度分布。$\kappa(\boldsymbol{r})$和 $\mu_a(\boldsymbol{r})$分别表示扩散系数和吸收系数。由于只能测量体积表面的光子密度，因此引入如下边界条件：

$$\Phi(\boldsymbol{m}) + 2\zeta(c)\kappa(\boldsymbol{m})\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{m})}{\partial\nu} = q(\boldsymbol{m}),\quad \boldsymbol{m} \in \partial\boldsymbol{\Omega} \tag{4}$$

其中，$q(\boldsymbol{m})$是区域边界 $\partial\boldsymbol{\Omega}$上的源分布，$\nu$ 是外法线，$\zeta(c)$是用于表示与介质折射率失配的常数，$c$ 表示介质中的光速。可测量量是穿过边界的法向光子流，

$$\Gamma(\boldsymbol{m}) = -c\kappa(\boldsymbol{m})\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{m})}{\partial\nu},\ \boldsymbol{m} \in \partial\boldsymbol{\Omega}\ . \tag{5}$$

未知参数，即光学系数 $\mu_a$，通过最小化目标函数式（1），从边界测量$\Gamma$ 中恢复。

### 实验装置

我们的连续波漫射光学断层成像系统（图 1a）配备了一台 16位互补金属氧化物半导体相机（pco.edge 4.2，PCO AG，凯尔海姆，德国）和一枚物镜（f = 50 mm，尼康，东京，日本），可提供分辨率为 2048 × 2048 像素、视场（FOV）为 60 × 60 $mm^2$的原始图像。系统采用一台波长为 660 nm、最大功率为 100 mW 的固态激光器（OBIS，Coherent，加利福尼亚州，美国）作为连续波照明光源。产生的自由空间激光束首先通过耦合器（PAF-X-5-B，Thorlabs，新泽西州，美国）进入光纤，随后经准直器（F280FC-B，Thorlabs，新泽西州，美国）导向振镜（basiCube 10，SCANLAB GmbH，慕尼黑，德国）。系统采用透射式照明，即振镜出射的光照射到仿体底部，而在顶部表面测量透射光和散射光。系统使用光密度滤光片（NE01A-A，Thorlabs，新泽西州，美国）和聚焦透镜（LA1172，Thorlabs，新泽西州，美国，焦距 400 mm），以降低功率波动、获得直径小于 1 mm 的光斑，从而改善照明质量。相机前放置了一片 660 nm 带通滤光片（FB660-10，Thorlabs，新泽西州，美国），以减少环境光的干扰。我们采用栅格扫描策略，在仿体上设置 20 × 20 个扫描点，并在每次扫描时采集一幅图像，激光功率设为 20 mW。每次测量的曝光时间为 500 ms。

## MLP 构建

为使用多层感知机网络近似给定网格中 $\mu_a(\boldsymbol{r})$ 的每个节点值，我们构建了一个全连接网络，其中包含八个 256 通道层、一个 128 通道层，并在所有 256 通道层中使用 ReLU 激活函数[21]（图 5a）。值得注意的是，我们在输入层与第四层之间设置了跳跃连接，以便多层感知机更好地学习高频细节，并使训练更加稳定。从本质上说，多层感知机网络将每个输入坐标 $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ 映射到其

对应的 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$。在弥散光学断层成像中，我们主要关注包含较大光学系数的区域，因为高频目标位于这些区域，例如嵌入健康组织中的强吸光肿瘤。为确保多层感知机能够最佳地表示高频区域，我们采用位置编码技术，将每个坐标分量 $p$ 从 $\mathrm{R}^1$ 空间映射到高维类傅里叶域 $\mathrm{R}^{2n}$，其编码函数为 $\gamma(\cdot)$：

$$\gamma(p) = (\sin(2^0\pi p), \cos(2^0\pi p), \ldots, \sin(2^{n-1}\pi p), \cos(2^{n-1}\pi p)), p \in \{x, y, z\} \quad (6)$$

其中，$n$ 表示基函数不同频率的数量。随后，将原始三维空间坐标 $\boldsymbol{r} \in \mathrm{R}^3$ 扩展为更高维向量 $\boldsymbol{r_e} = (\gamma(x), \gamma(y), \gamma(z)) \in \mathrm{R}^{3\cdot 2n}$，以便用于学习 $\mu_a(\boldsymbol{r})$ 体积重建中的高频信息。多层感知机与位置编码相结合，使网络能够拟合非线性散射光强，从而高保真地建模光吸收系数的复杂分布。

随后，我们通过最小化式（2）给出的损失函数 $\Psi(\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r}))$，来惩罚实际测量 $\Gamma$ 与预测测量值 $f(\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r}))$ 之间的差异。该预测测量值由多层感知机和有限元正向模型 $f$ 组合计算得出（补充说明 1）。在这种无监督设置下，无需预训练数据集，只需通过标准梯度反向传播即可训练多层感知机。值得注意的是，该框架与此前报道的监督学习方法（如卷积神经网络）[20] 有很大不同。一些无监督学习算法（如 DeCAF）[24] 采用了类似的框架，但它们需要额外的数据来首先构建去噪模型。最后，NeuDOT 具有很高的灵活性，可纳入各种正则化方法，以抑制原始测量值中的不同类型噪声。

## 自适应网格划分

请注意，DOT重建的分辨率在很大程度上取决于正向模型的精度。要实现高分辨率，通常需要在非常精细的网格上求解公式（3）–（5）。实际上，这在计算上不可行，因为随着自由度数量的指数级增长，传统方案需要非常大的内存。同样，要准确训练公式（2）中 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$ 的神经场表示，需要在所有网格点上密集评估神经辐射场网络，即便采用分层采样，计算成本也高得难以承受。为了平衡计算开销与数值精度，我们进一步设计了一种自适应网格划分技术，并将其集成到基于物理的模型和多层感知机网络中（图5c）。这使我们不仅能够以可承受的自由度，在所需分辨率下高效训练 NeuDOT，还能高效地实现神经表示与几何表示之间的转换。具体而言，我们从粗网格开始，通过连续迭代进行自适应分层细化。在每次迭代中，我们采用吉布斯采样[47]，将前一次迭代得到的重建解作为先验信息，并利用采样得到的新点更新嵌套网格（补充说明3）。具体来说，我们将 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$ 建模为三维概率分布，并利用该分布进行体积采样（图5b）。位置编码与自适应网格划分相结合，使 NeuDOT 能够以高精度和高分辨率可靠地近似高频吸收图，其效果在很大程度上优于传统 DOT 重建方法及其他基于深度学习的方法，例如卷积神经网络。

## 仿体实验

为了评估所提出的 NeuDOT 方法，我们使用光学性质与真实生物组织相似的仿生仿体开展了全面实验。

采用聚二甲基硅氧烷（PDMS）（SYLGARD 184，DOW，美国加利福尼亚州）作为仿体基材。我们将其与二氧化钛（$TiO_2$, Collins，美国加利福尼亚州）和炭黑粉末（CB, Collins，美国加利福尼亚州）混合，分别调节散射系数和吸收系数。所有高吸收成像目标均使用黑色材料（VeroUltra，Stratasys，美国明尼苏达州）进行 3D打印。我们设计了三项仿体实验，以测试所提方法的不同方面：

**实验 1**：本实验通过使用尺寸为 22 × 22 ×6.5 $mm^3$ 的光学均匀平板仿体，重点评估横向上的重建性能。仿体底部放置了不同的高吸收率平面图案作为成像目标（图 2a）。共设计了三种图案：a）字母“T”；b）上海科技大学的简化标志；c）两条平行对齐条纹。具体而言，仿体 a）中的字母高 14.4 mm、宽 7.1 mm，笔画宽度为 2 mm。仿体 b）中的大学标志由两个同心圆环（外径：18 mm；内径：13.7 mm；笔画宽度：1.2 mm）和中心的一个塔组成（高：8 mm；宽：4.9 mm）。仿体 c）中的每条条纹高 16.1 mm、宽 1.2 mm，两条条纹之间的间隙为 0.5 mm

**实验 2**：我们进一步使用尺寸为 55 × 55 × 14 $mm^3$ 的板状仿体，通过评估轴向上的重建性能来进行验证。该仿体包含三根高度不同的高吸收杆。每根杆的横截面为 6 × 6 $mm^2$ 正方形，这些杆的高度分别为 4 mm、8 mm 和 12 mm。每根杆的底面与仿体彼此平行对齐（图 3a）。

**实验 3**：**为** 测试一项更具挑战性的任务，该任务类似于真实生物样本，w e

构建了一个尺寸为 55 × 55 × 14 $mm^3$ 的立方体模体，其中包含虚拟血管。该虚拟血管采用人头部心血管系统的数字模型[48]，并缩放至尺寸为 31 × 22 × 10 $mm^3$ 的边界框。血管分支的直径范围为 1.2 mm 至 2.5 mm，分支位于深度 z = 3 mm 至 13 mm 之间（图4a）

所有仿体的光学性质均使用定制的积分球（2P3/M，Thorlabs，美国新泽西州）并采用逆加倍-倍增法[49]进行了仔细校准。对于仿体实验 1，估算的背景光学性质为 $\mu_a$ = 0.108 $mm^{-1}$ 和$\mu_s'$ = 0.529 $mm^{-1}$；对于仿体实验 2）和 3），估算的背景光学性质为 $\mu_a$ = 0.075 $mm^{-1}$ 和 $\mu_s'$= 0.444 $mm^{-1}$ （补充说明 5）。

我们使用多种指标对重建结果进行定量比较，包括均方误差（MSE）、Dice相似系数（DSC）、结构相似性（SSIM）和峰值信噪比（PSNR）（补充说明 7）。在所有实验中，我们使用 MATLAB（R2021b，MathWorks，美国马萨诸塞州）在一台台式计算机（Intel Xeon Gold 6248R，128 GB 内存）上实现语言模型（LM），并使用 PyTorch[50] 在一块图形处理器（GeForce RTX 3090，24 GB 内存，NVIDIA，美国加利福尼亚州）上实现 NeuDOT 和卷积神经网络（CNN）。

## 致谢

本研究得到上海科技大学启动经费、国家自然科学基金委员会（61977047、61976138、62105205）以及上海市科学技术委员会（21010502400）的资助。

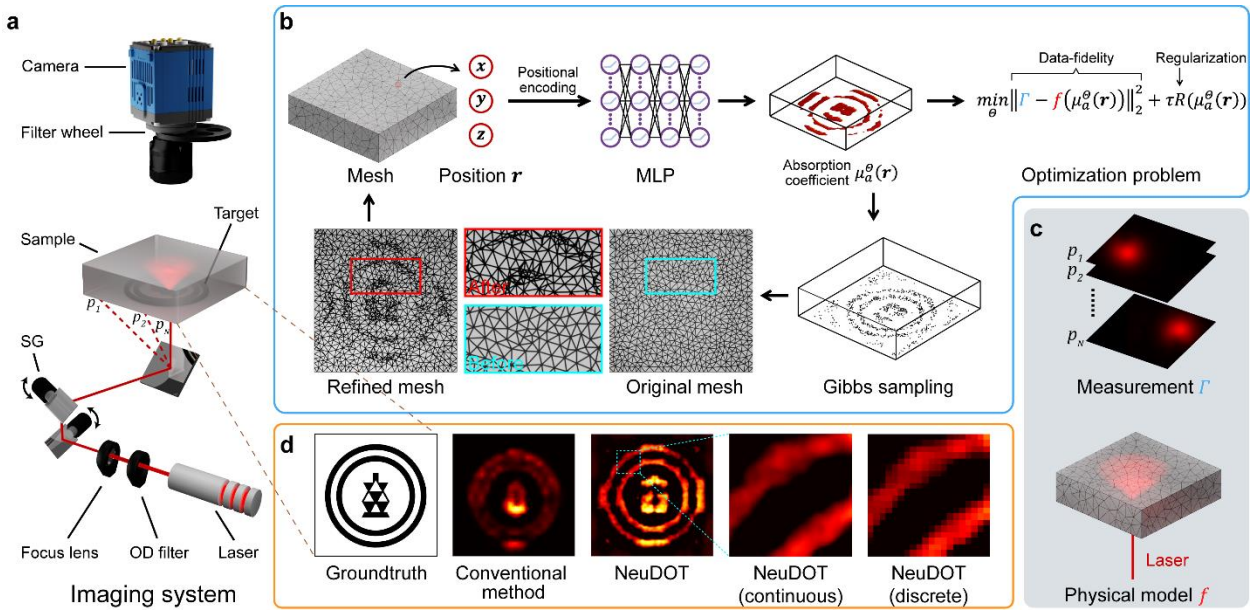



**图 1. 使用 NeuDOT 进行散射介质三维成像的示意图。 a,** 实验用弥散光学断层成像（DOT）装置主要由连续波（CW）激光器、扫描振镜（SG）和 CMOS 相机构成。自由空间激光束对散射样品底部进行光栅扫描，相机在每个照明点 $p_i\ (i = 1,2, \dots N)$处采集一幅图像，如（c）所示。 **b,** NeuDOT 的简要流程。与传统方法将吸收系数 $\mu_a$ 存储在预先确定的网格或网格中不同，NeuDOT 首先通过引入多层感知机网络（$\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$）对 $\mu_a$ 进行编码，使其在任意位置 $r$ 的取值都能连续表示。随后，通过最小化目标函数 $\Psi(\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r}))$来优化多层感知机的参数 $\Theta$，该目标函数如式（2）所示。NeuDOT 流程中集成了基于有限元法的物理模型 $f$，用于模拟漫射光传播（c）。我们还引入了自适应网格划分，在重建迭代过程中细化感兴趣区域内的网格密度（比较红色和蓝色框中的内容）。**d,** 与传统方法相比，基于神经场的隐式表示使 NeuDOT 能够通过散射介质实现更高精度的重建。在任意所需分辨率下进行渲染是 NeuDOT 的另一项优势。

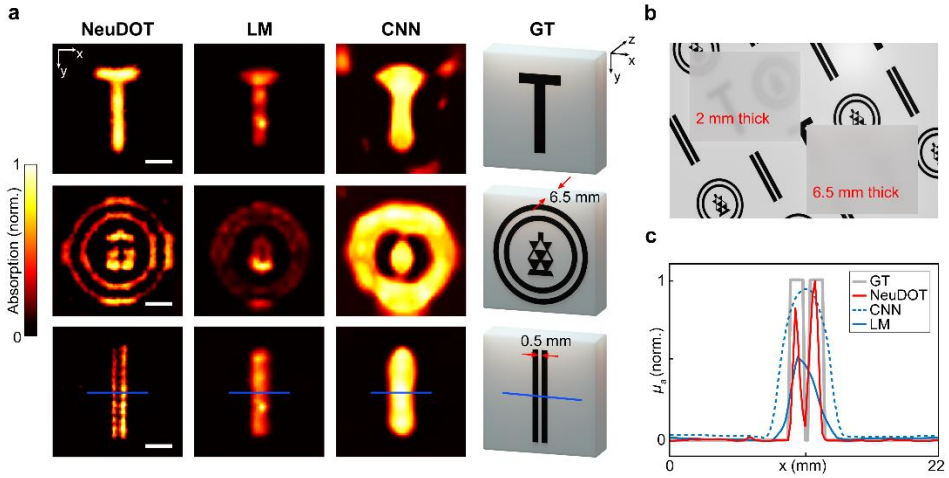



**图 2. 横向的重建性能。a,** NeuDOT、LM 和卷积神经网络生成的三种不同二维物体的重建结果（比例尺：4 mm）。**b,** 如不同厚度的仿体所示，穿过厚散射介质检测二维样品图案受到严重阻碍。**c,** 从双条纹物体（**a**，第 3 行）中央水平线提取的线剖面。在此情况下，NeuDOT 的横向分辨率可达 0.5 mm。

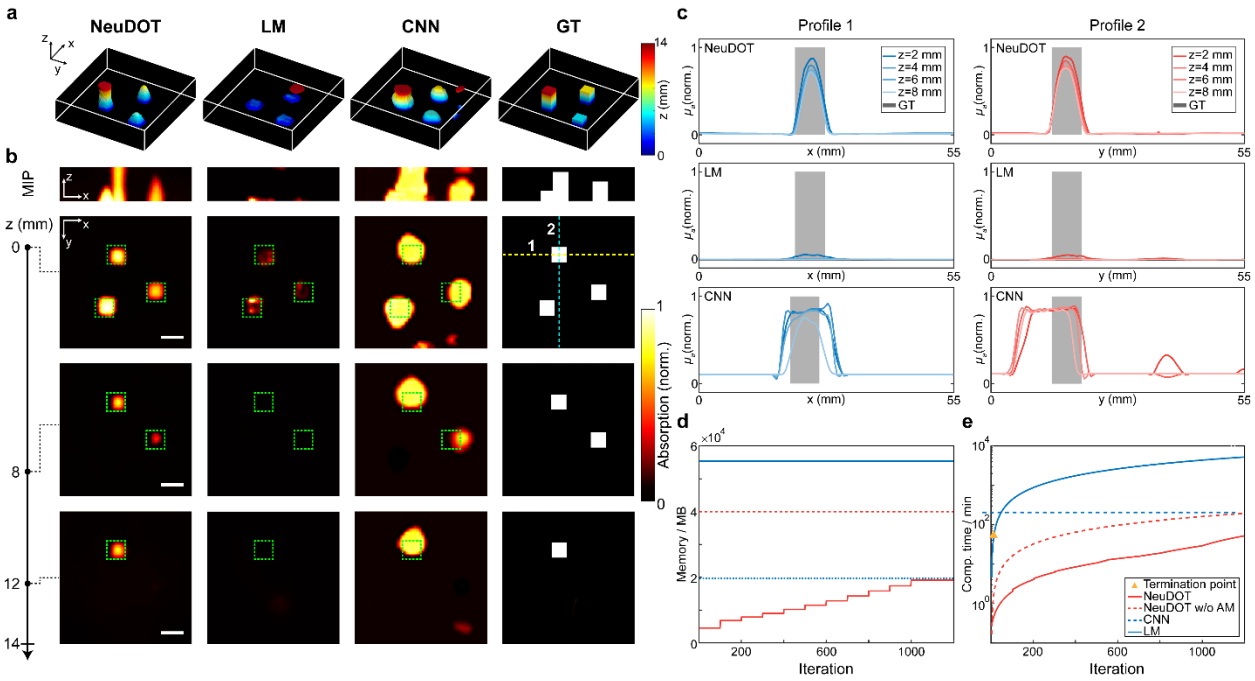



**图 3. 轴向上的重建性能。** **a,** NeuDOT、LM 和卷积神经网络生成的重建结果的体绘制。最后一幅图显示的是含有三个不同高度（12 mm、8 mm、4 mm）高吸收夹杂物的板状仿体真实值（GT）。**b,** 重建的 $\mu_a$ 图和真实值的最大强度投影（MIP）及横截面（z = 0、8、12 mm 处）（比例尺：10 mm）。绿色虚线框标出了夹杂物的实际位置。 **c,** **b**中两条线所示位置的剖面图表明，与 LM 和卷积神经网络相比，NeuDOT 能以更高的精度恢复各夹杂物的位置和几何形状。 **d,** 内存使用量比较。在迭代过程中，得益于自适应网格划分步骤，NeuDOT 的内存开销（红色实线）逐步增加。采用固定维度精细网格生成与原始 NeuDOT 相同重建质量的类似基于 NF 的方法（红色虚线），内存开销将高出 2 倍。与 NeuDOT 相比，LM （蓝色实线）和卷积神经网络（蓝色虚线）的内存使用量都更高。 **e,** 计算时间比较。不使用自适应网格划分的 NeuDOT 和卷积神经网络都耗时较长（> 200 分钟）。在实际应用中，LM 在第 10 次迭代时有效收敛（黄色三角形所示）。采用自适应网格划分的 NeuDOT 所需计算时间与 LM 相当（~60 分钟）。

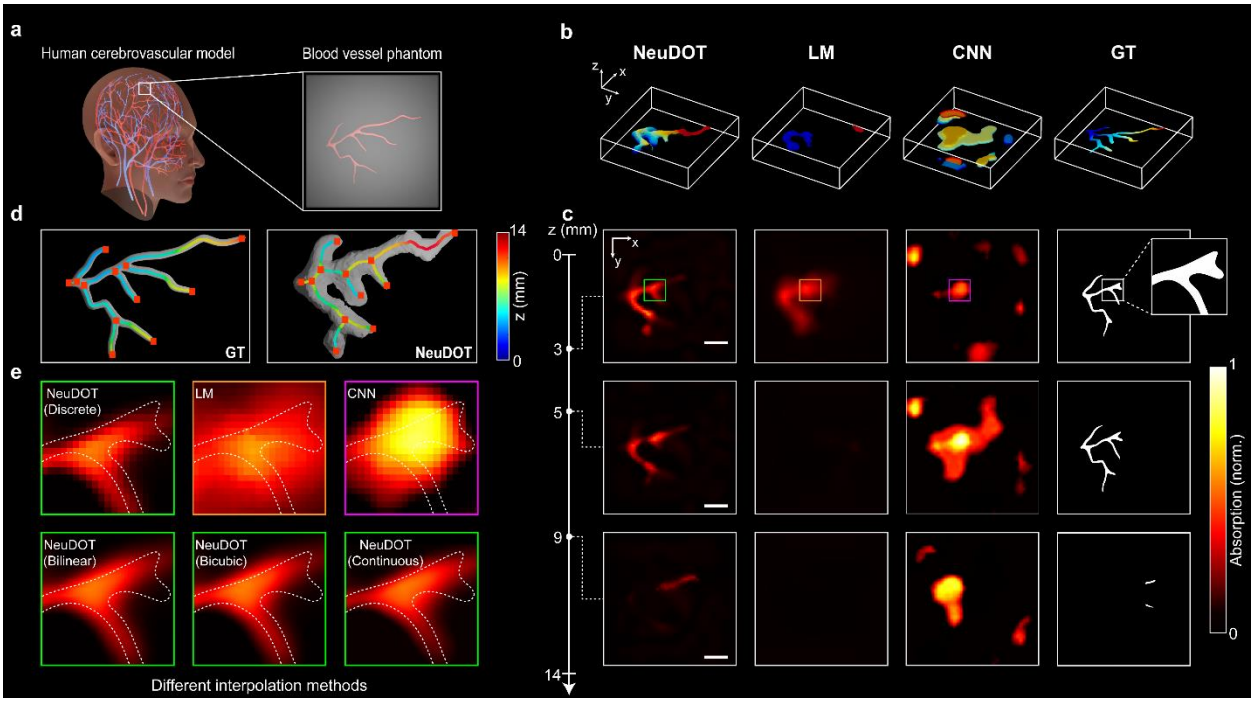



**图4. 散射介质中人工血管模型的重建结果。** **a**，基于人体脑血管模型[48]，3D 打印出一条虚拟血管（边界框尺寸：$33\times19\times9$ $mm^3$），随后将其嵌入散射体模中。 **b**，由 NeuDOT、语言模型和卷积神经网络生成的体积重建结果。最后一张图显示了类血管对象的真实值（GT）。 **c**，重建的 $\mu_a$ 图和 GT 在深度 z = 3、5、9 mm 处的横截面（比例尺：10 mm）。 **d**，比较从 GT 和 NeuDOT 得到的骨架与端点。NeuDOT 能够恢复复杂的三维结构，并良好保留深度信息。 **e**，不同方法得到的 $\mu_a$ 图及 GT 的放大视图，分别以不同颜色标示（绿色：NeuDOT，黄色：语言模型，紫色：卷积神经网络）。第二行展示了 NeuDOT 能够连续上采样 $\mu_a$，实现前所未有的高分辨率结果，与经典插值方法的结果一致。

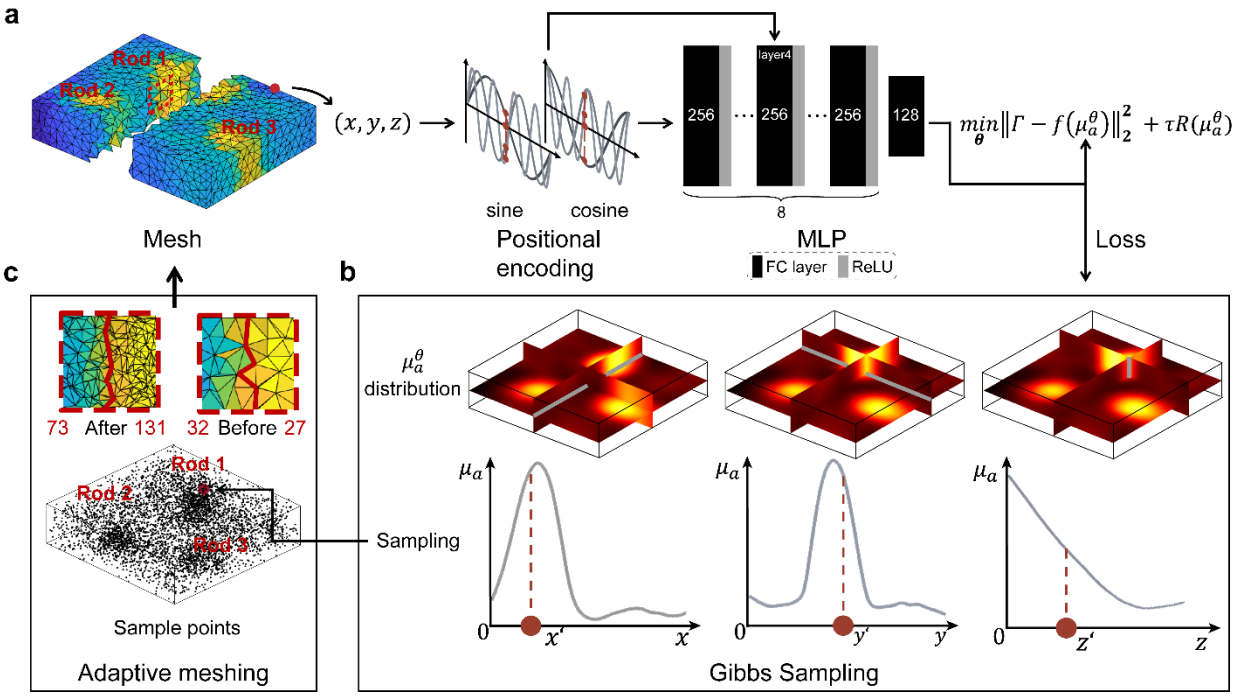



**图 5. 一个详细展示 NeuDOT 自适应网格划分与 Gibbs重采样技术的流程。** **a,** NeuDOT旨在通过多层感知机网络学习隐式函数，以重建光吸收 $\mu_a$ 。不同于采用离散的基于体素的表示，多层感知机以连续方式将任意坐标 $\boldsymbol{r} =$ （$x$、$y$、$z$）映射到其对应的光吸收 $\mu_a$（$\boldsymbol{r}$）。首先将成像物体离散化为网格，并将原始坐标编码到扩展的高维空间中。随后将编码后的坐标输入多层感知机，在编码输入与第四层之间设置跳跃连接，并通过最小化损失函数进行训练。**b**，输出 $\mu_a^\Theta$ 用作先验知识，沿三个坐标轴使用Gibbs采样法进行重采样。之后，将重采样点添加到先前的网格中以进行细化。**c**，采样点倾向于在高吸收区域更密集地聚集，而细化后的网格则能解析这些位置的更多结构细节。此处使用一个包含三根杆的仿体（图3）进行说明。重建结果 $\mu_a$ 采用颜色编码。横截面显示，经过自适应网格划分后，杆的边缘变得更加笔直。杆右侧的节点数增长速度快于左侧（右侧：27增至131；左侧：32增至73）。

## 参考文献

1 Ntziachristos, V. 超越显微成像：生物学光学成像的前沿。《自然·方法》7, 603-614, doi:10.1038/nmeth.1483 (2010)。2 Altmann, Y. 等。量子启发式计算成像。《科学》361, doi:10.1126/science.aat2298 (2018)。3 Arridge, S. R. & Lionheart, W. R. B. 基于扩散的光学断层成像中的非唯一性。《光学快报》23 (1998)。4 Ntziachristos, V., Yodh, A. G., Schnall, M. & Chance, B. 吲哚菁绿增强后乳房磁共振成像与漫射光学断层成像的同步进行。《美国国家科学院院刊》97, 2767-2772 (2000)。5 Xu, C. 等。超声引导漫射光学断层成像用于预测和监测乳腺癌新辅助化疗：近期进展。《超声成像》38, 5-18, doi:10.1177/0161734615580280 (2016)。6 Zhao, H. & Cooper, R. J. 无光纤全头皮漫射光学断层成像系统近期进展综述。《神经光子学》5, 011012, doi:10.1117/1.NPh.5.1.011012 (2018)。7 Doulgerakis, M., Eggebrecht, A. T. & Dehghani, H. 基于频域测量的高密度功能性漫射光学断层成像可改善图像质量和空间分辨率。《神经光子学》6, 035007, doi:10.1117/1.NPh.6.3.035007 (2019)。8 Hill man, E. M. 等。人体前臂的时间分辨光学断层成像。《医学物理与生物学》46, 1117-1130, doi:10.1088/0031-9155/46/4/315 (2001)。9 Hoshi, Y. & Yamada, Y. 漫射光学断层成像及其临床应用概述。《生物医学光学杂志》21, 091312, doi:10.1117/1.JBO.21.9.091312 (2016)。10 Lindell, D. B. & Wetzstein, G. 基于共焦漫射断层成像的散射介质三维成像。《自然·通讯》11, 4517, doi:10.1038/s41467-020-18346-3 (2020)。11 Zhao, Y. 等。利用共焦飞行时间漫射光学断层成像实现高分辨率深层成像。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》43, 2206-2219, doi:10.1109/TPAMI.2021.3075366 (2021)。12 Arridge, S. R. & Schotland, J. C. 光学断层成像：正问题与逆问题。《逆问题》25, doi:Artn 123010.1088/0266-5611/25/12/123010 (2009)。13 Ripoll, J. & Ntziachristos, V. 从有限体积到无限体积：消除漫射波成像中的边界。《物理评论快报》96, 173903, doi:10.1103/PhysRevLett.96.173903 (2006)。14 Wang, F. 等。近红外二区窗口中的光片显微镜成像。《自然·方法》16, 545-552, doi:10.1038/s41592-019-0398-7 (2019)。15 Jackson, P. C. 等。透照计算机断层成像系统的开发。《英国放射学杂志》60, 375-380, doi:10.1259/0007-1285-60-712-375 (1987)。16 Schweiger, M., Arridge, S. R., Hiraoka, M. & Delpy, D. T. 用于散射介质中光传播的有限元法——边界与源条件。《Medical Physics》22, 1779-1792 (1995)。17 Fang, Q. Q. & Boas, D. A. 利用图形处理器加速三维浑浊介质中光子迁移的蒙特卡罗模拟。《光学快报》17, 20178-20190, doi:10.1364/Oe.17.020178 (2009)。

18 Smith, J. T., Ochoa, M., Faulkner, D., Haskins, G. & Intes, X. 宏观漫射光学成像中的深度学习。《生物医学光学杂志》27, doi:10.1117/1.JBO.27.2.020901 (2022). 19 Yoo, J. et al. 深度学习漫射光学层析成像。IEEE Trans Med Imaging 39, 877-887, doi:10.1109/TMI.2019.2936522 (2020). 20 Ben Yedder, H., Cardoen, B., Shokoufi, M., Golnaraghi, F. & Hamarneh, G. 有限角度漫射光学层析成像中的病灶多任务深度学习重建与定位。IEEE Trans Med Imaging 41, 515-530, doi:10.1109/TMI.2021.3117276 (2022). 21 Mildenhall, B. et al. NeRF：将场景表示为用于视图合成的神经辐射场。美国计算机协会通讯 65, 99-106, doi:10.1145/3503250 (2022). 22 Shen, S. et al. 通过神经瞬态场进行非视域成像。IEEE模式分析与机器智能汇刊 43, 2257-2268 (2021). 23 Zhu, H., Liu, Z., Zhou, Y., Ma, Z. & Cao, X. DNF：用于无透镜显微成像的衍射神经场。《光学快报》30, doi:10.1364/oe.455360 (2022). 24 Liu, R., Sun, Y., Zhu, J., Tian, L. & Kamilov, U. S. 利用神经场从离散的纯强度测量值恢复连续三维折射率图。Nature Machine Intelligence, doi:10.1038/s42256-022-00530-3 (2022). 25 Reed, A. W. et al. 载于《IEEE/CVF国际计算机视觉会议论文集》(2021). 26 Arridge, S. R., Schweiger, M., Hiraoka, M. & Delpy, D. T. 用于模拟组织中光子传输的有限元方法。Med Phys 20, 299-309, doi:10.1118/1.597069 (1993). 27 More, J. J. Levenberg-Marquardt算法：实现与理论。(1978). 28 Lee, T.-C., Kashyap, R. L. & Chu, C.-N. 通过三维中轴线细化算法构建骨架模型。CVGIP: Graphical Models and Image Processing 56, 462-478 (1994). 29 Helmchen, F. & Denk, W. 深层组织双光子显微成像。《自然·方法》2, 932-940, doi:10.1038/nmeth818 (2005). 30 Nasiriavanaki, M. et al. 小鼠脑静息态功能连接的高分辨率光声断层成像。Proc Natl Acad Sci U S A 111, 21-26, doi:10.1073/pnas.1311868111 (2014). 31 Horstmeyer, R., Ruan, H. & Yang, C. 引导星辅助波前整形方法：将光聚焦至生物组织。《自然·光子学》9, 563-571, doi:10.1038/nphoton.2015.140 (2015). 32 Schweiger, M. & Arridge, S. 用于光学层析成像正向与逆向建模的Toast++ 软件套件。《Journal of Biomedical Optics》19, doi:10.1117/1.JBO.19.4.040801 (2014). 33 Kingma D P & J, B. 载于第3届国际学习表征会议（美国圣迭戈，2015）。34 Frijia, E. M. et al. 使用可穿戴式高密度漫射光学层析成像对发育中的大脑进行功能成像：为扫描仪外婴儿神经成像树立新基准。Neuroimage 225, 117490, doi:10.1016/j.neuroimage.2020.117490 (2021).

35 Bruschini, C., Homulle, H., Antolovic, I. M., Burri, S. & Charbon, E. 生物光子学中的单光子雪崩二极管成像仪：综述与展望。《Light: Science & Applications》8, doi:10.1038/s41377-019-0191-5 (2019). 36 Ren, W. et al. 时域近红外光学层析成像与连续波荧光分子断层成像相结合的多模态成像。《Optics Express》28, 9860-9874, doi:10.1364/OE.385392 (2020). 37 Ren, W., Isler, H., Wolf, M., Ripoll, J. & Rudin, M. 荧光断层成像智能工具包：仿真、重建与验证。IEEE Trans Biomed Eng 67, 16-26, doi:10.1109/TBME.2019.2907460 (2020). 38 Zaidi, H., Montandon, M. L. & Slosman, D. O. 磁共振成像引导的三维脑正电子发射断层成像衰减与散射校正。Med Phys 30, 937-948, doi:10.1118/1.1569270 (2003). 39 Engel, K. J., Herrmann, C. & Zeitler, G. 单源与双源CT中的X射线散射。Med Phys 35, 318-332, doi:10.1118/1.2820901 (2008). 40 Kniesel, H. et al. 从含噪二维扫描透射电子显微图像中提取干净的隐式三维结构。arXiv预印本 arXiv:2203.15434 (2022). 41 Jacques, S. L. & Pogue, B. W. 漫射光传输教程。《Journal of Biomedical Optics》13 (2008). 42 Chen, A., Xu, Z., Geiger, A., Yu, J. & Su, H. TensoRF：张量辐射场。arXiv预印本 arXiv:2203.09517 (2022). 43 Müller, T., Evans, A., Schied, C. & Keller, A. 采用多分辨率哈希编码的即时神经图形基元。arXiv预印本 arXiv:2201.05989 (2022). 44 Yu, A. et al. Plenoxels：无需神经网络的辐射场。arXiv预印本 arXiv:2112.05131 (2021). 45 Yu, A. et al. 载于《IEEE/CVF国际计算机视觉会议论文集》。5752-5761. 46 Golub, G. H., Hansen, P. C. & O'Leary, D. P. Tikhonov正则化与总体最小二乘法。《SIAM矩阵分析与应用杂志》21, 185-194 (1999). 47 Geman, S. & Geman, D. 随机松弛、吉布斯分布与图像的贝叶斯复原。IEEE模式分析与机器智能汇刊, 721-741 (1984). 48 TurboSquid。（TurboSquid，2022）。49 Prahl, S. A., van Gemert, M. J. & Welch, A. J. 使用加倍法确定浑浊介质的光学性质。《Applied Optics》32, 559-568 (1993). 50 Paszke, A. et al. PyTorch：一种命令式、高性能深度学习库。《神经信息处理系统进展》32 (2019)。

……的补充信息

# 高分辨率断层重建：利用神经场重建散射介质中的光学吸光度

Wuwei Ren、Siyuan Shen、Linlin Li、Shengyu Gao、Yuehan Wang、Liangtao Gu、Shiying Li、Xingjun Zhu、Jiahua Jiang、Jingyi Yu

**本文件包含：**

补充说明 1：DOT 理论与传统重建方法 补充说明 2：基于 CNN 的 DOT 重建 补充说明3：吉布斯采样 补充说明4：仿真研究 补充说明5：仿体制作与校准 补充说明6：包含两个字母的额外仿体实验 补充说明7：重建算法的定量评估 补充说明8：NeuDOT 的未来应用 补充图 S1 至 S6 补充表 S1 至 S5 补充参考文献

# 补充说明 1：DOT 理论与传统重建方法

传统的 DOT 重建范式由两部分组成：1）用于模拟光在散射介质中传播的前向有限元求解器；2）逆向求解器，采用基于模型的迭代优化方法，根据光透射的边界测量值，重建感兴趣体积中未知的光吸收分布。表 S1 介绍了我们的方法中使用的符号。

## 1.1 正向建模与有限元法求解器

扩散方程（DE）是描述近红外光在散射介质中传播的常用模型。给定连续波（CW）光源和由 $\partial\boldsymbol{\Omega}$界定的散射区域 $\boldsymbol{\Omega} \subset \mathrm{R}^{\boldsymbol{3}}$，扩散方程可写为

$$-\nabla \cdot \kappa(\boldsymbol{r})\nabla\Phi(\boldsymbol{r}) + \mu_a(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{r}) = 0, \boldsymbol{r} \in \boldsymbol{\Omega} \tag{1}$$

其边界条件为罗宾型边界条件

$$\Phi(\boldsymbol{m}) + 2\zeta(c)\kappa(\boldsymbol{m})\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{m})}{\partial v} = q(\boldsymbol{m}), \boldsymbol{m} \in \partial\boldsymbol{\Omega} \tag{2}$$

其中，在大多数生物组织中， $g$ 的典型值介于 0.7 至 0.95[1] 之间。扩散方程在条件 $\mu_a \ll \mu_s'$下有效。可测量的边界量定义为

$$\Gamma(\boldsymbol{m}) = -c\kappa(\boldsymbol{m})\frac{\boldsymbol{\partial}\Phi(\boldsymbol{m})}{\partial v}, \boldsymbol{m} \in \partial\boldsymbol{\Omega} \tag{3}$$

结合公式 (2) 和 (3)，可得 $\Gamma(\boldsymbol{m})$ 与$\Phi(\boldsymbol{m})$之间的线性关系，

$$\Gamma(\boldsymbol{m}) = \frac{c}{2\zeta(c)}(\Phi(\boldsymbol{m}) - q(\boldsymbol{m})) \tag{4}$$

Fo用于成像的样本涉及光学异质性和不规则边界

在实际应用中，会采用数值方法求解方程（1）和（2）。在这项工作中，我们使用伽辽金有限元法（FEM）求解正问题。区域$\boldsymbol{\Omega}$ 可用离散网格描述，该网格包含 $P$ 个单元和 $N$ 个顶点节点。由于我们只改变单元尺寸并保持多项式次数不变，因此使用上标 h 表示有限元网格基函数展开形式。解 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 由各单元上的分片多项式近似，

$$\Phi^h(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\Phi}_i u_i(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

其中，$\Phi^h(\boldsymbol{r})$ 是 $\Phi(\boldsymbol{r})$ 的数值近似，$\{\boldsymbol{\Phi}_i\}\boldsymbol{w}_{i=1}^{N}$ 是节点系数，$\{\mathbf{u}_i(\boldsymbol{r})\}_{i=1}^{N}$ 是基函数。系数 $\kappa(\boldsymbol{r})$ 和 $\mu_a(\boldsymbol{r})$ 以相同方式展开，分别记为 $\kappa^h(\boldsymbol{r})$ 和 $\mu_a^h(\boldsymbol{r})$。对式（1）的弱形式应用分部积分和边界条件式（2），得到线性系统

$$[\boldsymbol{K}(\kappa^h) + \boldsymbol{C}(\mu_a^h) + \zeta \boldsymbol{A}]\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{Q} \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{\Phi} = [\boldsymbol{\Phi}_1, \ldots, \boldsymbol{\Phi}_N]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{K}$，$\boldsymbol{C}$，$\boldsymbol{A}$ 是稀疏对称正定矩阵，且 由下式给出[2]

$$\boldsymbol{K}_{ij} = \int_{\Omega} \kappa^h(\boldsymbol{r}) \nabla u_i(\boldsymbol{r}) \cdot \nabla u_j(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}$$

$$\boldsymbol{C}_{ij} = \int_{\Omega} \mu_a^h(\boldsymbol{r}) u_i(\boldsymbol{r}) u_j(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}$$

$$\boldsymbol{A}_{ij} = \int_{\partial\Omega} u_i(\boldsymbol{m}) u_j(\boldsymbol{m}) d\boldsymbol{m}$$

且 $\boldsymbol{Q}$ 定义为

$$\boldsymbol{Q}_i = \int_{\Omega} u_i(\boldsymbol{r}) q(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}$$

由于高分辨率情况下前向矩阵较大，我们采用共轭梯度法[3] 求解式（6）。注意，式（4）—（6）使我们能够通过吸收系数 $\mu_a(\boldsymbol{r})$ 预测测量值$\Gamma(\boldsymbol{m})$。

## 1.2 反演与正则化

为根据边界测量 $\Gamma$ 重建吸收系数 $\mu_a(\boldsymbol{r})$ 的分布，我们采用 Levenberg–Marquardt（LM）方法[4] 求解如下所述的 Tikhonov 正则化逆问题：

$$\min_{\mu_a} \|\Gamma - f(\mu_a)\|_2^2 + \tau \|\mu_a - \mu_a^0\|_2^2 \tag{7}$$

其中，正向模型 $f$ 由方程 (1)-(3) 给出，$\tau$ 为正则化参数，$\mu_a^0$ 为吸收系数的先验估计。在 LM 迭代过程中，阻尼参数初始设为 10，并在每次迭代时缩小 $10^{0.25}\rho$ 倍，其中 $\rho$ 为 $J^T J$ 的最大对角元素，$J$ 为通过伴随法[5]构造的雅可比矩阵。有关光学断层成像 LM 算法的更多详情，请参见参考文献[6]。

# 补充说明 2：基于 CNN 的 DOT 重建

基于卷积神经网络（CNN）的方法近年来在图像重建领域日益流行，并在 DOT 中展现出优异的重建性能[7]。在本研究中，我们将 NeuDOT 与一种采用多任务学习技术的代表性基于 CNN 的重建方法进行比较[8]。考虑到本研究中的硬件配置有所不同，我们在进行对比实验时调整了原有的数据准备流程。下文将介绍网络结构、数据准备和训练过程。

**网络结构：**基于CNN的方法采用残差注意力网络作为框架（图 S1a）。第一个全连接层通过将测量值映射到一个 9600 列的向量来充当特征提取器。该层的输出经过重塑，变为一个 $40 \times 40 \times 6$ 数组，并传递到后续的卷积层；该卷积层有 16 个通道，滤波器尺寸为 $3 \times 3 \times 3$。随后，加入一个残差注意力块，该模块有 16 个通道和 3 种不同的滤波器尺寸（图 S1b）。输出层是一个具有 1 个通道、滤波器尺寸为 $3 \times 3 \times 3$ 的卷积层，用于生成最终的重建体积。整个网络均使用 ReLU 作为激活函数。

**数据准备：**有限元法[9] 用于仿真工具，以生成训练数据集和测试数据集的投影测量值。$20 \times 20$ 光源和探测器分别放置在仿体的顶部和底部。在实验 1 中，包含二维物体的仿体尺寸设为 $22 \times 22 \times 6.5$ mm$^3$。训练数据通过一个数字仿体生成，该仿体包含三个椭球形夹杂物，它们在均匀背景中随机成形并分布（图 S2）。每个夹杂物的三个主半径分别从 0.52 mm 至 12 mm、0.3 mm 至 6.57 mm 和 0.3 mm 至 6.57 mm 的范围内均匀采样。为涵盖更多一般情形，我们不限制夹杂物的位置，并允许它们相互重叠。物体和背景的吸收系数 $\mu_a$ 分别为 1 mm$^{-1}$ 和 0.1082 mm$^{-1}$。介质中的散射系数 $\mu_s$ 为 0.5287 mm$^{-1}$。训练集包含 4880 个样本，测试集使用 1220 个样本。在实验 2 和实验 3 中，仿体尺寸设为 $55 \times 55 \times 14$mm$^3$。我们生成包含四个随机分布的椭球形夹杂物的数据，其三个主半径分别从 0.69 mm 至 25 mm、0.4 mm 至 13.69 mm 和 0.4 mm 至 13.69 mm 的范围内均匀采样。物体和背景的 $\mu_a$ 分别为 1 mm$^{-1}$ 和 0.0748 mm$^{-1}$，而 $\mu_s$ 为 0.4441 mm$^{-1}$。使用 7200 个训练

样本和 1800 个测试样本。与实验 1 类似，我们不限制这些夹杂物的位置。

**训练：**我们基于CNN的方法所使用的损失函数是真实值与预测重建结果之间的均方误差（MSE）。在实验中，我们以 16 的批量大小训练网络，共训练 200 轮。我们在优化过程中使用 Adam 优化器[10]，学习率为$1 \times 10^{-4}$（实验 1）和 $1 \times 10^{-5}$（实验 2 和 3），超参数为$\beta_1 = 0.9$、 $\beta_2 = 0.999$ 和 $\epsilon = 1 \times 10^{-4}$。

## 补充说明3：吉布斯采样

**吉布斯采样：**正如正文第 2.3 节所述，高分辨率 DOT重建需要高精度的正向模型，而这会带来较大的内存开销。此外，在神经场网络的所有节点上密集查询 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$ 并不实际。为了尽可能少用采样点来获得准确的正向模型，我们开发了自适应网格划分技术。

我们使用吉布斯采样技术[11] 提取新的节点以更新网格，这些新添加点的位置包含感兴趣的信息。吉布斯采样是一种知名的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）算法，用于从已知的多变量概率分布中采样。该算法基于这样一个事实：对于高维分布，获取一维条件概率分布通常比获取联合分布更容易。由于 NeuDOT 重建$\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$并在三维体积中采样（不同于 NeRF[12] 沿单条一维射线采样），因此吉布斯采样适用于从三维分布中采样。

我们的采样策略的核心思想是将三维采样任务转换为三个一维采样步骤的组合。在采样过程中，我们首先沿 $x-$、$y-$、$z-$ 坐标轴对 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$ 的概率分布进行归一化。随后，我们在网格边界内（$x^{(0)}$、$y^{(0)}$、$z^{(0)}$）$\sim$（$x_{boundary}$、$y_{boundary}$、$z_{boundary}$）初始化一个随机的三维空间坐标。然后，我们沿每个坐标轴进行采样，以获得下一个采样点。这一步与 NeRF 最初用于视图合成的应用相同，即从单条一维光学射线中进行采样。

更具体地说，我们首先固定 $y^{(0)}, z^{(0)}$，并从条件概率分布 $p(x^{(0)}|y^{(0)}, z^{(0)})$ 中采样下一个采样点 $x^{(1)}$。与原始 NeRF 一样，我们生成一系列均匀采样的输入点（在 NeuDOT 中使用 10000 个）$\{x_i^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}|x_i^{(0)} = \frac{i}{10000}x^{(0)}, i = 1, \dots, 10000\}$，并将它们输入多层感知机。利用网络输出 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$，我们通过求和并归一化计算累积分布函数（CDF）。然后，我们通过对 CDF 进行均匀采样和逆采样，得到 $x^{(1)}$。之后，固定 $x^{(1)}, z^{(0)}$，从 $p(y^{(0)}|x^{(1)}, z^{(0)})$ 中采样 $y^{(1)}$。最后，固定 $x^{(1)}, y^{(1)}$，从 $p(z^{(0)}|x^{(1)}, y^{(1)})$ 中采样 $z^{(1)}$。我们重复这一循环中的三个一维采样步骤，得到一系列采样点；这些点位于高度关注的区域（在本例中为高吸收物体）。

**训练参数：**为平衡计算成本与重建性能，我们每次采样 1000 个新的节点，并每隔 100 次迭代更新一次网格；这是因为每次执行采样和网格更新需要 1–2 分钟。迭代 1000 次后，我们停止自适应网格划分，此时网格已足够精细。NeuDOT 重建的完整过程总共进行 1200 次迭代。在训练参数方面，我们将位置编码的编码维度设为 4。我们使用 $\mu_a^{\Theta}(\boldsymbol{r})$ 的 L2范数作为正则化项，并将超参数 τ 设为 0.1（参见正文第 2.3 节）。我们采用 Adam 优化，超参数为 $\beta_1 = 0.9$、$\beta_2 = 0.999$ 和 $\epsilon = 1 \times 10^{-8}$。在实验中，学习率从 $1 \times 10^{-3}$ 开始，并在优化过程中呈指数衰减至 $1 \times 10^{-4}$。

**算法** 从 $\mu_a^{\Theta}$ 分布中采样 $n$ 个点

1: **初始化：**

$x^0 \sim U(0, x_{boundary})$

$y^0 \sim U(0, y_{boundary})$

$z^0 \sim U(0, z_{boundary})$

2: **循环** $t = 1$ 至 $n$ **执行**

3: $x^t \sim p(x^{t-1}|y^{t-1}, z^{t-1})$

4: $y^t \sim p(y^{t-1}|x^t, z^{t-1})$

5: $z^t \sim p(z^{t-1}|x^t, y^t)$

6: **结束循环**

算法 S1. 吉布斯采样策略。

## 补充说明4：仿真研究

在开展实验重建任务之前，我们还在数字仿体上进行了仿真实验。对于目标位于仿体底部的二维物体案例，数字仿体设计为尺寸为 $10 \times 10 \times 6\ \mathrm{mm}^3$ 的平板，并离散为 6921 个节点和 23047 个单元。对于目标嵌入仿体不同层中的三维物体案例，数字仿体设计为尺寸为 $20 \times 20 \times 6\ \mathrm{mm}^3$ 的长方体，并离散为 26899 个节点和 152149 个单元。我们设计了两个二维物体案例：一个包含字母“ST”（图 S3a），另一个包含两条相距 0.5 mm 的条纹（图 S3b）；此外，还设计了一个三维物体案例，其中两个字母分别位于不同层内，厚度为 1 mm（图 S3c）。均匀背景的光学性质 $\mu_{a,\ b}$ 和 $\mu_{s,\ b'}$ 分别设为 0.001 $\mathrm{mm}^{-1}$ 和 0.99 $\mathrm{mm}^{-1}$。所有嵌入式夹杂物均具有较高的吸收（$\mu_{a,\ i} = 0.1\ \mathrm{mm}^{-1}$），且散射系数与背景相同。我们采用正文中提到的算法验证了本方法的性能（图 S3）。只有 NeuDOT 成功重建出字母“ST”和两条分离的条纹，而其他方法得到的目标边界模糊、形状变形。在三维物体案例中，NeuDOT 清晰地重建出位于不同深度的字母，而其他方法可能产生重建伪影（图 S3c）。

# Su补充说明 5：仿体制作与校准

## 5.1 逆加倍-倍增法

我们使用逆加倍法（IAD）确定仿体的光学性质。IAD 包含两个部分：一个用于求解辐射传输方程（RTE）的高效数值求解器（也称为加倍-倍增法或 AD 方法），以及一个用于寻找最优光学性质的优化器，使预测的反射和透射值与实测值相匹配。AD 方法最初是为在平板几何中求解 RTE 而提出的[14]。表征光在散射平板中传播的物理量包括单次散射相函数 $p(\theta)$、反照率 $\alpha$和光学厚度 $\tau$，其定义如下：

$$\alpha = \frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_a}, \tau = d(\mu_s + \mu_a) \tag{8}$$

其中 $d$ 为平板的厚度。相位函数可用 Henyey-Greenstein 函数近似[15]，其表达式为：

$$p(v) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2gv)^{3/2}} \tag{9}$$

其中，$v$ 是散射角的余弦（$v = \cos\theta$）。关注的量是反射和透射，两者均以样品表面的辐照度归一化，取值范围为 0 到 1，其中 1 表示完全透射。总反射 $R_T$ 是样品镜面反射和后向散射的光之和；总透射 $T_T$ 是穿过样品的光之和（包括未经散射而穿过样品的光）。对于非吸收样品，$R_T + T_T = 1$。AD 方法基于以下假设计算反射和透射值：1）光源处于稳态且为非偏振光；2）样品均匀；3）样品几何形状视为具有有限厚度的无限平行平板；4）样品具有均匀的折射率。已知一个平板中入射角为 $v$、出射角为 $v'$ 的光的反射 $R(v, v')$ 和透射 $T(v, v')$ 后，可以通过叠加两个相同的平板并将每种情况的两个值相加，求得厚度为其两倍的平板的反射和透射

然后，我们可以先求出具有相同光学性质的薄层的反射和透射，再逐次将厚度加倍，直至达到目标厚度，从而计算任意平板的反射和透射。逆问题是根据一组反射和透射测量值估计反照率、光程和各向异性。对于一组特定的光学性质，预测值与实际测量值之间的距离定义为相对误差之和：

$$M(\alpha,\tau,g)=\frac{\left|R_{pred}-R_{meas}\right|}{R_{meas}+10^{-6}}+\frac{\left|T_{pred}-T_{meas}\right|}{T_{meas}+10^{-6}} \tag{10}$$

该问题可使用基于 Nelder 和 Mead[17]下山单纯形法的迭代法求解。 $g$ 的值通常可从文献中获知；求出 $\alpha$、 $\tau$后，即可利用式（8）得到 $\mu_a$、 $\mu_s$ 。

## 5.2 仿体校准

我们在实验中校准了两个仿体：一个55 × 55 × 14 毫米$^3$ 体模 A 和一个 22 × 22 × 6.5 毫米$^3$ 体模 B（图 S4a）。校准系统由一个积分球（2P3/M，Thorlabs，新泽西州，美国）、一台 660 nm 波长的固态激光器（OBIS，Coherent，加利福尼亚州，美国）和一台光功率计（PM100D，Thorlabs，新泽西州，美国）组成。测量值经修改后为

$$M_R=r_{std}\cdot\frac{R\left(r_s^{direct},r_s\right)-R(0,0)}{R(r_{std},r_{std})-R(0,0)},M_T=\frac{T\left(t_s^{direct},r_s\right)-T_{dark}}{T(0,0)-T_{dark}} \tag{11}$$

其中， $R(r_s^{direct},r_s)$、 $T(t_s^{direct},r_s)$分别表示仿体的反射和透射， $R(0,0)$、 $T(0,0)$分别表示空气的反射和透射， $R(r_{std},r_{std})$表示标准样品的反射率， $T_{dark}$ 表示暗[18]环境光的透射。积分球测得的仿体透射率和反射率见表 S2；我们还测量了 IAD 算法所需的其他参数，例如样品的折射率和厚度，以及积分球的入口孔径（图 S4b）。估算得到的光学参数见表 S3。

## 补充说明6：包含两个字母的额外仿体实验

我们还进行了额外的仿体实验，以进一步测试所提出的方法。本实验使用了一个嵌有两个高吸收字母（‘S’和‘T’）的55 × 55 × 14 $mm^3$ 板状仿体。‘S’和‘T’的边界框尺寸分别为 25× 18 × 4 $mm^3$ 和24 × 17 × 4 $mm^3$, 。此外，‘S’位于底部，‘S’与‘T’之间的垂直距离为 4 mm，水平距离为 7 mm（图 S5a）。结果表明，与另外两种方法相比，NeuDOT 能更准确地恢复两个字母的高度。NeuDOT 完整地恢复了两个字母的形状，而另外两种方法得到的边界较为模糊。NeuDOT 重建在字母“T”的轴向产生了轻微伪影，这一现象在三个杆的情形中也会出现。尽管如此，与卷积神经网络和 LM 方法相比，NeuDOT 仍表现出更优的性能。

.

# 补充说明 7：重建 - 算法

我们比较了正文中提及的所有方法的计算成本。此外，我们还测试了不使用自适应网格划分的 NeuDOT（表 S4）。实验中使用的有限元网格，以及各方法的内存使用量和重建时间，均列于表 S4。

为定量分析各方法的重建结果，我们引入四项指标：均方误差（MSE）、Dice相似系数（DSC）、结构相似性（SSIM）和峰值信噪比（PSNR）。输入为一个归一化三维数组 $\boldsymbol{A}$，表示重建体积；以及一个归一化三维数组 $\boldsymbol{B}$，表示真实值。各项指标的计算方法如下

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N}(\boldsymbol{A}_i - \boldsymbol{B}_i)^2 \tag{12}$$

$$SSIM = \frac{(2\mu_{\boldsymbol{A}}\mu_{\boldsymbol{B}} + C_1)(2\sigma_{\boldsymbol{AB}} + C_2)}{(\mu_{\boldsymbol{A}}^2 + \mu_{\boldsymbol{B}}^2 + C_1)(\sigma_{\boldsymbol{A}}^2 + \sigma_{\boldsymbol{B}}^2 + C_2)} \tag{13}$$

$$PSNR = 10\log_{10}\frac{peakval^2}{MSE} \tag{14}$$

$$DSC = 2 * \frac{|intersection(\boldsymbol{A}_b, \boldsymbol{B}_b)|}{|\boldsymbol{A}_b| + |\boldsymbol{B}_b|} \tag{15}$$

其中，由于体积已归一化，$peakval$ 设为 1；$\mu_{\boldsymbol{A}}$、$\mu_{\boldsymbol{B}}$、$\sigma_{\boldsymbol{A}}$、$\sigma_{\boldsymbol{B}}$、$\sigma_{\boldsymbol{AB}}$分别是数组 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的均值、标准差和互协方差。通过阈值处理生成二值化体积 $\boldsymbol{A}_b$ 和 $\boldsymbol{B}_b$：二维体积以最大值的 10% 为阈值，三维体积以均值的 2.5 倍为阈值。

## 补充说明 8：NeuDOT 的未来应用

NeuDOT 已展现出生成高质量重建结果的能力，例如重建小型且复杂的血管靶标结构。后续关于神经场的大量研究表明，NeuDOT 的训练速度有望进一步提升（如正文所述）。我们认为，NeuDOT 可应用于更广泛的领域（图 S6），例如：1）无创高分辨率乳腺癌诊断，无需使用电离辐射；2）雾天自动驾驶中的障碍物识别；3）植物根系生长监测，即通过浑浊流体提取根系的准确结构。

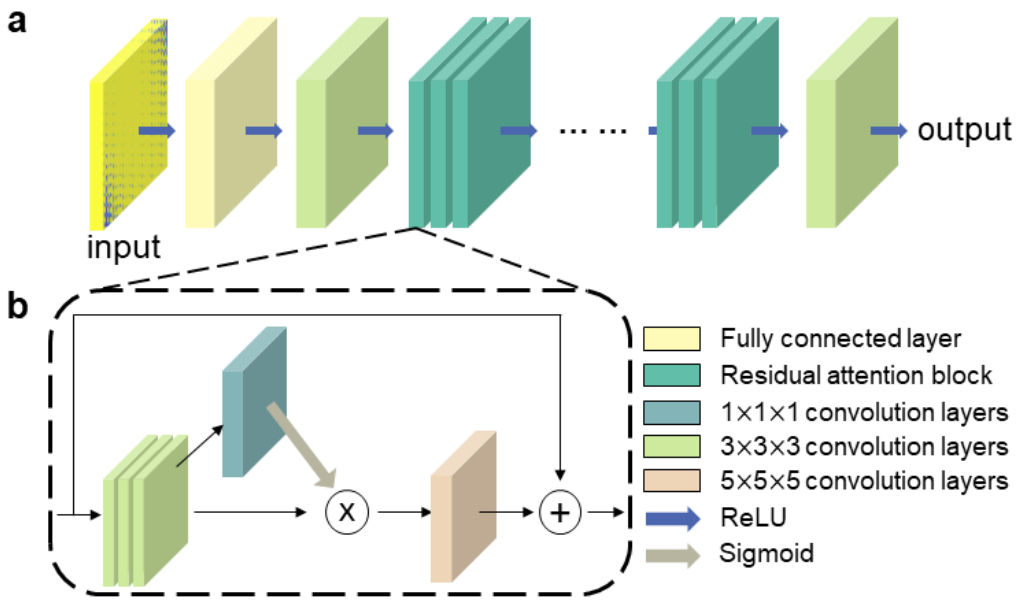



图 S1 **基于 CNN 的重建方法的网络架构。** **a** CNN 框架的结构。 **b** 残差注意力块的结构。

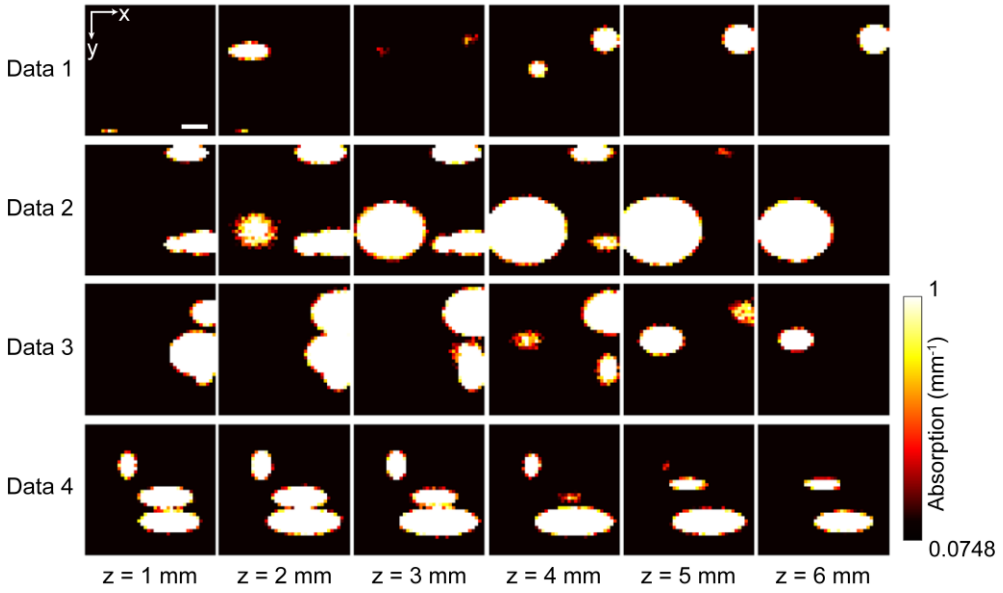



**图 S2 实验 1 中基于 CNN 的方法的训练数据示例。** $\mu_a$ 在不同深度处的真实值。比例尺表示 11 mm 的长度。

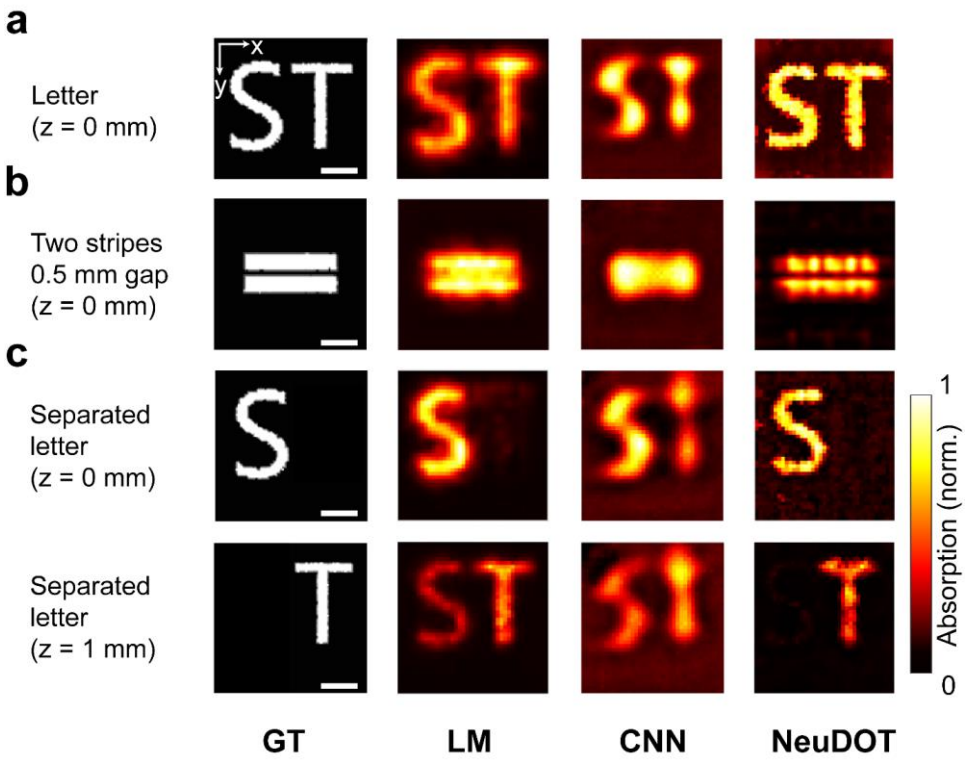



**图 S3 仿真研究的重建结果。**（比例尺：5 毫米）

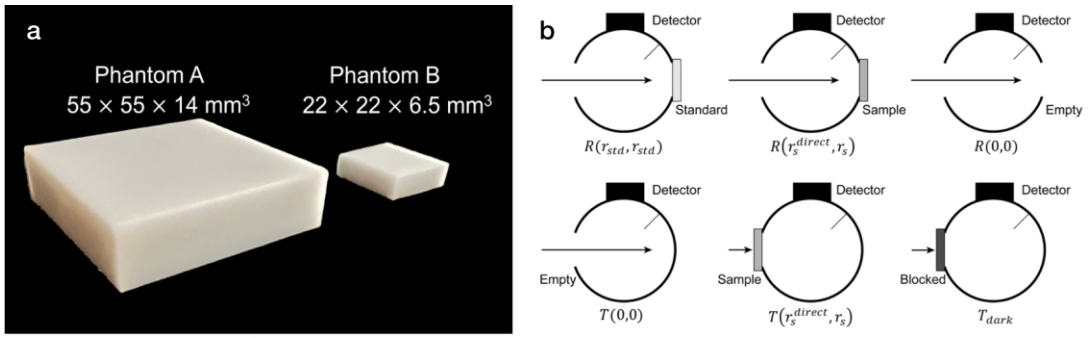



**图 S4 硅胶仿体与校准程序。a** 用于实验的两个仿体。 **b** 入射光（箭头）进入积分球（弧形部分），功率探测器在顶部（黑色方框）记录不同的数值。

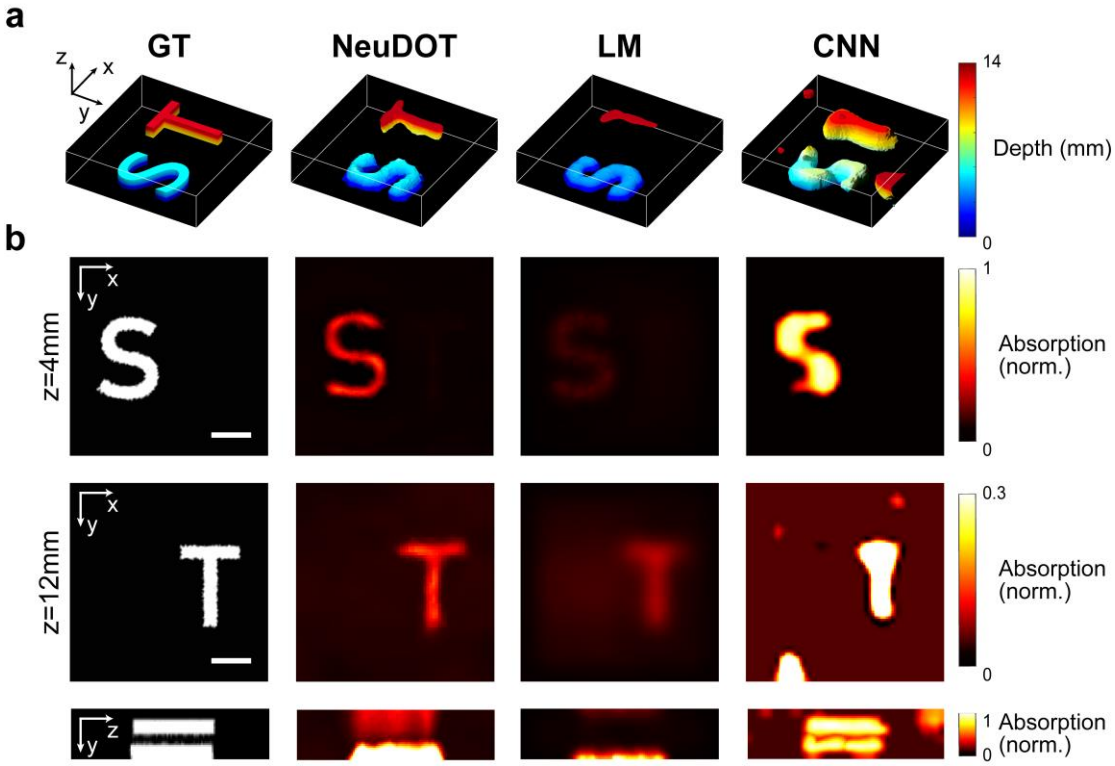



**图 S5 嵌入仿体中的字母“ST”的重建结果。 a** 三维示意图：靶标及三种方法的重建结果。两个字母的参考厚度均为 4 mm。“S”位于平面 z=0 mm 上方，“T”位于平面 z=8 mm 上方。**b**z = 4 和 z = 12 mm 处的轴向视图。比例尺：10 mm。底部显示 yz 平面上的最大强度投影，突出显示了与 LM 和 CNN 相比更高的深度精度

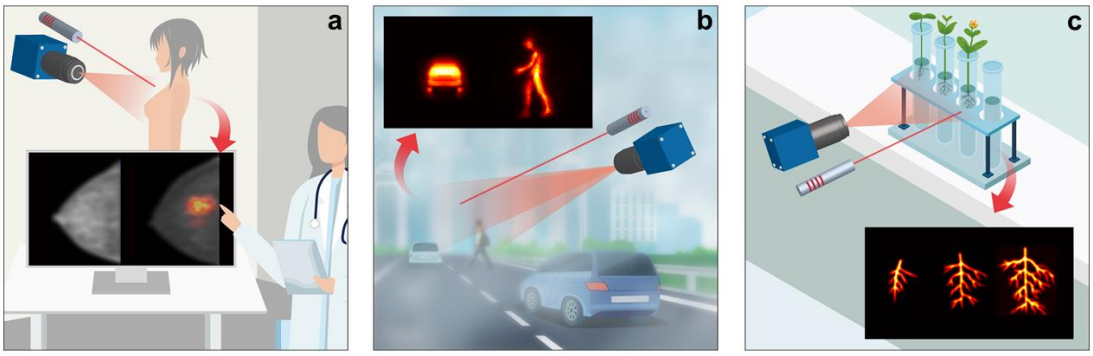



**图 S6 NeuDOT 未来应用示意图。a** 乳腺癌诊断。**b** 自动驾驶。**c** 植物监测。

| 符号 | 数量 | **Unit** |
|---|---|---|
| $\boldsymbol{\Omega}$ | 散射区域 $\boldsymbol{\Omega} \subset \mathrm{R}^3$ | mm |
| $\partial\boldsymbol{\Omega}$ | $\boldsymbol{\Omega}$的边界 | mm |
| $\boldsymbol{r}$ | 位置向量 $\boldsymbol{r} = (x, y, z) \in \boldsymbol{\Omega}$ | mm |
| $\Phi(\boldsymbol{r})$ | $\boldsymbol{r}$处的光子密度分布 | #光子 $\mathrm{mm}^{-3}$ |
| $\mu_a(\boldsymbol{r})$ | $\boldsymbol{r}$处的吸收系数 | $\mathrm{mm}^{-1}$ |
| $\mu_s(\boldsymbol{r})$ | $\boldsymbol{r}$处的散射系数 | $\mathrm{mm}^{-1}$ |
| $g$ | 各向异性因子 | NA |
| $\mu_s'(\boldsymbol{r})$ | $\boldsymbol{r}$在 $\mu_s'$处的约化散射系数$(\boldsymbol{r}) = (1-g)\mu_s$ | $\mathrm{mm}^{-1}$ |
| $\kappa(\boldsymbol{r})$ | $\boldsymbol{r}$在 $\kappa$处的扩散系数$(\boldsymbol{r}) = 1/3(\mu_a + \mu_s')$ | mm |
| $\boldsymbol{m}$ | 约束于表面的测量位置向量 $\partial\boldsymbol{\Omega}$ | mm |
| $q(\boldsymbol{m})$ | 边界上的源分布 $\partial\boldsymbol{\Omega}$ | #光子 $\mathrm{mm}^{-2}$ |
| $\nu$ | $\partial\boldsymbol{\Omega}$处的外法线 | NA |
| $c$ | 介质中的光速 | $\mathrm{mm\ s}^{-1}$ |
| $\zeta(c)$ | 边界失配 | NA |
| $\Gamma$ | 可测量量 | NA |

**表 S1** 本节中使用的符号。

| | $R(r_{std}, r_{std})(\mu w)$ | $R(r_s^{direct}, r_s)(\mu w)$ | $R(0,0)(\mu w)$ |
|---|---|---|---|
| 体模 A | 18.6 | 2.34 | 0.03 |
| 体模 B | 18.2 | 2.23 | 0.06 |
| | $T(0,0)(\mu w)$ | $T(t_s^{direct}, r_s)(\mu w)$ | $T_{dark}(\mu w)$ |
| 体模 A | 18.6 | 0.07 | 0 |
| 体模 B | 18.2 | 0.74 | 0 |

**表 S2 使用积分球测量的原始数据**。

| | $\mu_a$(毫米$^{-1}$) | $\mu_s'$(mm$^{-1}$) |
|---|---|---|
| 体模 A | 0.0748 | 0.4441 |
| 体模 B | 0.1082 | 0.5287 |

**表 S3 校准后的光学性质**。

| 靶标 | 有限元网格 | | 内存开销 / MB | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 节点 | 单元 | LM | NeuDOT | 不含 NeuDOT AM | CNN |
| 字母“T” | 21304 | 119018 | 13312 | 18736 | 38753 | 22180 |
| Logo | | | | | | |
| 两条条纹 | | | | | | |
| 字母“ST” | 22279 | 124024 | 55421 | 19060 | 41245 | 19490 |
| Rods | | | | | | |
| 血管 | | | | | | |
| 靶标 | 重建时间 / 分钟 | | | | | |
| | LM | NeuDOT | 不含 NeuDOT AM | | | CNN |
| 字母“T” | 14 | 46 | 203 | | | 122 |
| Logo | | | | | | |
| 两条条纹 | | | | | | |
| 字母“ST” | 55 | 60 | 219 | | | 210 |
| Rods | | | | | | |
| 血管 | | | | | | |

**表 S4 LM、卷积神经网络和 NeuDOT 的内存开销与重建时间。**

| | 方法 | 二维实验 | | |
|---|---|---|---|---|
| | | 字母“T” | Logo | 两条条纹 |
| MSE | LM | 0.0047 | 0.0298 | 0.0057 |
| | NeuDOT | **0.0014** | **0.0292** | **0.0061** |
| | CNN | 0.0177 | 0.0474 | 0.0069 |
| DSC | LM | 0.7689 | 0.3818 | 0.4758 |
| | NeuDOT | **0.8297** | **0.4387** | **0.8067** |
| | CNN | 0.3619 | 0.3352 | 0.3393 |
| SSIM | LM | 0.5836 | 0.2824 | 0.2063 |
| | NeuDOT | **0.7684** | **0.5639** | **0.2201** |
| | CNN | 0.0384 | 0.0858 | 0.1020 |
| PSNR | LM | 23.3235 | 15.2600 | **22.4458** |
| | NeuDOT | **27.7593** | **15.3505** | 22.1653 |
| | CNN | 17.5094 | 13.2408 | 21.6363 |
| | **方法** | **三维实验** | | |
| | | 字母“ST” | 血管 | Rods |
| MSE | LM | 0.0198 | 0.0093 | 0.0203 |
| | NeuDOT | **0.0154** | **0.0063** | **0.0091** |
| | CNN | 0.0287 | 0.0249 | 0.0437 |
| DSC | LM | 0.4499 | 0.0602 | 0.3974 |
| | NeuDOT | **0.6117** | **0.2048** | **0.7834** |
| | CNN | 0.4906 | 0.1930 | 0.4299 |
| SSIM | LM | 0.7076 | 0.6553 | 0.6181 |
| | NeuDOT | **0.8018** | **0.7054** | **0.8736** |
| | CNN | 0.7201 | 0.4380 | 0.6223 |
| PSNR | LM | 17.0230 | 20.2952 | 16.9263 |
| | NeuDOT | **18.1268** | **22.0394** | **20.3868** |
| | CNN | 15.4203 | 16.0346 | 13.5972 |

**表 S5 定量评估**。 最高性能指标以粗体突出显示。

# 参考文献

1 Beek, J. 等. 630 至 1064 nm 组织的体外双积分球光学特性. 医学与生物学物理学 42, 2255（1997）. 2 Arridge, S. R. 医学成像中的光学层析成像. 《逆问题》15, R41（1999）. 3 Schweiger, M. & Arridge, S. 散射介质中光传播的有限元法：频域情形. 《Medical Physics》24, 895-902（1997）. 4 More, J. J. Levenberg-Marquardt 算法：实现与理论.（1978）. 5 Arridge, S. R. & Schweiger, M. 光子测量密度函数。第 2 部分：有限元法计算. 《Applied Optics》34, 8026-8037（1995）. 6 Dehghani, H. 等. 使用 NIRFAST 进行近红外光学层析成像：数值模型与图像重建算法. 工程数值方法通讯25, 711-732（2009）. 7 Balasubramaniam, G. M. 等. 深度学习在漫射光学层析成像中的应用教程. 电子学11, 305（2022）. 8 Ben Yedder, H., Cardoen, B., Shokoufi, M., Golnaraghi, F. & Hamarneh, G. 有限角度漫射光学层析成像中的多任务深度学习重建与病灶定位. IEEE Trans Med Imaging 41, 515-530, doi:10.1109/TMI.2021.3117276（2022）. 9 Schweiger, M. & Arridge, S. 用于光学层析成像正向与逆向建模的 Toast++ 软件套件. 《生物医学光学杂志》19, doi:10.1117/1.JBO.19.4.040801（2014）. 10 Kingma, D. P. & Ba, J. Adam：一种随机优化方法. arXiv 预印本 arXiv:1412.6980（2014）. 11 Geman, S. & Geman, D. 随机松弛、吉布斯分布与图像的贝叶斯复原. IEEE模式分析与机器智能汇刊, 721-741（1984）. 12 Mildenhall, B. 等. NeRF：将场景表示为用于视图合成的神经辐射场. 美国计算机协会通讯65, 99-106, doi:10.1145/3503250（2022）. 13 Tran, A. P., Yan, S. & Fang, Q. 使用基于网格的解剖模型和光传输模型改进基于模型的功能性近红外光谱分析. 《神经光子学》7, 015008（2020）. 14 Hulst, H. C. 关于多重散射的新见解.（美国国家航空航天局空间研究所，戈达德太空飞行中心, 1963）. 15 Yoon, G., Welch, A., Motamedi, M. & Gemert, M. 激光照射组织的三维光分布模型的开发与应用. IEEE量子电子学杂志23, 1721-1733（1987）. 16 Plass, G. N., Kattawar, G. W. & Catchings, F. E. 辐射传输矩阵算子理论。1：瑞利散射. 《Applied Optics》12, 314-329（1973）. 17 Nelder, J. A. & Mead, R. 一种用于函数最小化的单纯形法. 计算机杂志7, 308-313（1965）. 18 Prahl, S. A. 关于逆加倍法你应了解的一切. 俄勒冈医学激光中心，圣文森特医院1344, 1-74（2011）。