

概率神经网络用于舌诊的近红外光谱分类

严文娟^{1,2}, 林凌², 赵静², 李刚²

(1. 长江师范学院物理学与电子工程学院, 重庆 408100; 2. 天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072)

摘要:为了快速无创客观地检测舌体所携带的病理信息,提出了基于概率神经网络舌诊归一化反射率近红外光谱分类诊断模型。采集了健康人、脂肪肝患者、肝炎患者三类受试者舌尖的光谱数据,进行归一化反射率预处理,各获得32个样本数据,随机从三类受试者各抽取24个舌尖的光谱数据用于建模,其余的24个用于预测,并分析了径向基函数的扩展速度(SPREAD)对网络的影响。得出SPREAD在0.0065~0.0077之间取值时对网络模型的预测效果和泛化能力较好,用该模型对24个预测样本进行预测,其正确率为95.8%。实验结果表明利用概率神经网络对舌诊近红外光谱的分类是可行的,说明舌表面的光谱信息能客观地反映人体的病理信息,利用此方法对疾病的快速无创地进行初步的筛查成为可能。

关键词:近红外光谱;舌诊;概率神经网络

中图分类号:TP302.7 **文献标识码:**A

Probability neural network for the classification of tongue diagnosis by near infrared spectroscopy

YAN Wen-juan^{1,2}, LIN Ling², ZHAO Jing², LI Gang²

(1. School of Physics & Electron Engineering, Yangtze Normal University, Chongqing 408100, China;
2. State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract: For a quick, objective and non-invasive examination of the tongue for pathological information, a near infrared spectral classification examination model, based on probability neural network tongue diagnosis after normalized reflectivity pretreatment, is proposed. With the collection of spectral data from the tip of the tongues from healthy people, fatty liver patients, and hepatitis patients, 32 sample data from each group are collected after normalized reflectivity pretreatment. 24 sample data from each case are selected for the construction of the models. Then the remaining 24 sample data are adopted for prediction. Also the influence of the spread of radial primary function upon the internet is analyzed. The conclusion is that the predictability and generalization of the network models work well when the spread ranges from 0.0065 to 0.0077. The predictions, based on the model, toward the samples are 95.8% correct. Experimental results show that the near infrared spectral classification of the tongue diagnoses in accordance with probabilistic neural network is feasible, and it is proved that spectral information of the tongue surface can objectively reflect human pathological information, so the preliminary screening which is rapid and noninvasive is probable with the help of this method.

Key words: near-infrared spectroscopy; tongue diagnosis; probabilistic neural network

1 引言

舌诊是中医诊断学的重要研究内容之一,是通过观察舌象的变化,了解机体生理功能和病理变化的一种诊察方法,其临床价值及理论意义得到古今

基金项目:国家自然科学基金(No. 30973964; No. 60674111)资助。

作者简介:严文娟(1976-),女,讲师,主要从事信号检测与处理。E-mail: yanwj76@163.com

收稿日期:2010-07-09;修订日期:2010-08-16

医家的充分肯定。经过临床发现,很多常见疾病患者如脂肪肝、糖尿病、冠心病等人群的舌象^[1-3]会出现异常。为了进一步地发展中医舌诊,很多学者运用了计算机技术、图像处理技术,结合中医专家的临床经验,研制了舌象分析仪^[4],构建了各种分析方法对舌象进行分析,实现舌诊的量化、客观化^[5-6],但是这些都是以舌象作为研究对象进行分析,难免会受到诊断人的经验和知识的影响。

近红外光(near infrared, NIR)是介于可见光(VIS)和中红外光(MIR)之间的电磁波,其波长在780~2526 nm(12820~3959 cm⁻¹)之间^[7],是近年来迅猛发展起来的高新技术,可充分利用全波段或多波长下的光谱数据在化工、农产品、医药等行业结合分析算法进行各种成分含量的检测和类别的辨识^[8-10],取得了比较好的效果。特别是利用近红外光谱无创的特点已在血糖检测极限浓度^[11]、人体生化检测^[12]、血液循环系统诊断^[13]等方面进行了研究,这对进行人体的各项指标的检测提供了安全环保的保障,而将光谱用于舌诊方面的研究比较欠缺。

人工神经网络(artificial neural networks, ANN)因其广泛的适应能力、学习能力、非线性映射能力而日益受到很多学科研究者的关注。当前人工神经网络在实际应用中最为广泛的是前馈神经网络,尤其是BP(back-propagation network)网络,但前馈神经网络收敛速度慢,且易于陷入局部极小。本文将概率神经网络(probabilistic neural network, PNN)应用于对健康人、脂肪肝患者、肝炎患者三类舌诊的近红外光谱进行分类,以克服BP网络的缺点,实验结果分析取得了较为满意的效果。

2 概率神经网络原理

概率神经网络是一种结构简单、训练简洁、应用相当广泛的人工神经网络,是由D. F. Specht提出的一种径向基函数(RBF)网络的重要变形^[14-15],由径向基神经元和竞争神经元组成,其实质是基于贝叶斯最小风险准则发展而来的一种并行算法,主要用于模式分类研究。与传统的BP网络相比,概率神经网络的主要优点有^[16]:训练速度快,没有BP网络的误差反向传播过程,其训练时间只略大于读取数据的时间;收敛性较好,无论待分类的问题多么复杂,只要训练样本足够多,就可以保证获得贝叶斯的最优解;网络结构设计灵活方便,允许增加或减少训练样本而不需要重新进行长时间的训练。网络结构如图1所示,是一个三层前向网络,输入层由信号源节点组成;第二层为隐含层,采用径向基神经元,其

个数与输入样本矢量的个数相同;第三层是输出层,采用竞争层,其个数等于训练样本数据的类数,每个神经元分别对应于训练数据的一个类别。首先计算输入向量 P 与隐层的输入权值 W^1 向量接近的程度,然后与阈值 b^1 向量相乘,再经过径向传递函数得该层第 i 个节点的输出: $a_i^1 = \text{radbas}(\|W_i^1 - P\| b_i^1)$,radbas为高斯函数,输出层的传递函数为线性函数, C 表示竞争传递函数,其功能是找出其输入矢量 n^2 中各元素的最大值,并且使与最大值对应的神经元输出为1,其他类别的神经元的输出为0。这样网络得到的分类结果能够达到最大的正确概率,其输出 $a^2 = \text{compet}(W^2 \cdot a^1)$ 。

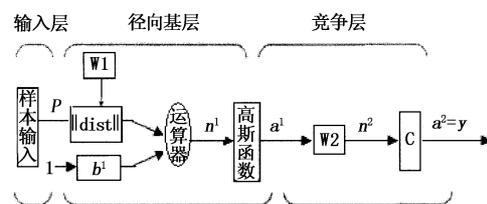


图1 概率神经网络结构图

Fig. 1 probabilistic neural network structure

3 舌诊光谱分类模型的建立

3.1 实验及数据预处理

实验使用美国海洋光学公司的NIR-512近红外光谱仪,测定波长范围853.59~1737.26 nm,分辨率小于5.0 nm,光源和光纤采用定制的GY-30光纤耦合溴钨灯及其配套光纤。光源输出直接经过光纤耦合作为照明垂直入射到被测体表面,而反射光又通过光纤输入到光谱仪,并利用配套软件spectralsuit进行采样,采集到的数据直接转化为光强值通过USB口进入计算机。其数据采集示意图如图2所示。

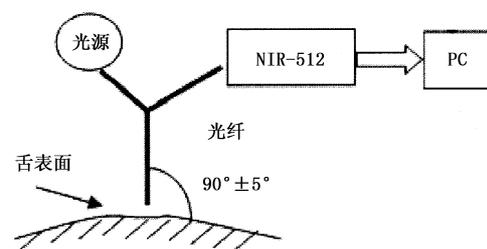


图2 数据采集示意图

Fig. 2 data acquisition schematic

分别对某医院的健康人、脂肪肝患者、肝炎患者各32例作为受试对象。受试者取坐位,将舌自然伸出口外,充分暴露,呈扁平形,使舌体放松,让光线充足直射入口。打开光源5 min,待光源光谱稳定后,光纤探头垂直入射到舌体表面进行测试,取舌尖数据进行分析。经多次实验后确定距离约1 cm,设定

积分时间为 35 ms,在测量范围之间采集 512 个波长数据,每个波长扫描 50 次。为了消除照明光源的影响能更客观地反映舌表面成分与结构的信息,首先对采集到的每个波长的 50 个原始数据进行叠加平均,再进行反射率计算并归一化处理。如图 3 所示为不同舌体舌尖的光谱曲线,其中波形 1 为健康人舌尖光谱图、波形 2 为肝炎患者舌尖光谱图、波形 3 为脂肪肝患者舌尖光谱图。横坐标为波长范围 853.59 ~ 1737.26 nm,纵坐标为光谱归一化反射率。

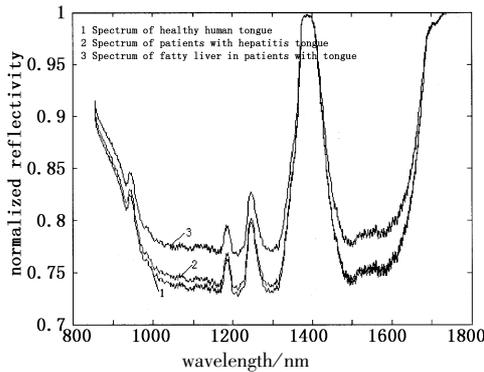


图 3 光谱归一化反射率图

Fig. 3 the normalized reflectance rate of spectrum

3.2 PNN 径向基函数扩展速度 SPREAD 的选取

径向基函数的扩展速度 SPREAD 是 PNN 网络中唯一需调整的参数,SPREAD 越大,函数的拟合就越平滑,但需要非常多的神经元以适应函数的快速变化,如果过小,也需要许多神经元来适应函数的缓慢变化,这样设计的网络性能就不会很好,为了能更好地建立 PNN 模型,本文对 SPREAD 在 0.001 ~ 0.03 这个范围内进行分析,讨论了其取值对训练集和预测集数据的误差影响,如表 1 所示,综合分析训练集和预测集数据影响,得出当 SPREAD 在 0.0065 ~ 0.0077 时为最优值,本文所取 SPREAD 为 0.007。

表 1 SPREAD 取不同取值范围时 PNN 的分类识别率

Tab. 1 recognition rate of PNN classifier in different range SPREAD

SPREAD 取值范围	训练集样本分类识别率/%	测试集样本分别识别率/%
0.001 ~ 0.0065	100	91.67
0.006 ~ 0.0077	100	95.83
0.0078 ~ 0.01	98.61	95.83
0.011 ~ 0.02	94.44	95.83
0.021 ~ 0.03	90.28	91.67

3.3 概率神经网络模型的建立及预测分析

首先确定 PNN 网络的结构,根据径向基函数的

特点,其输入层神经元个数与输入样本向量个数相同,输出层神经元个数等于训练样本数据的种类个数,网络的输出层是竞争层,每个神经元分别对应于一个数据类别。根据所采样的数据在全波段上每个样本共采集了 512 个点,现只取 511 个点(第一个点为 0,其误差较大),对健康人、肝炎患者、脂肪肝患者这三类舌体的光谱数据进行分类,则所设计的 PNN 网络的结构为:输入层为 511 个神经元,输出层为 3 个神经元,分别用 1 代表健康者、2 代表肝炎患者、3 代表脂肪肝患者,中间层神经元的传递函数为高斯函数,输出层的传递函数为线性函数,SPREAD 为 0.007。

将健康人、脂肪肝患者、肝炎患者各 32 例共 96 个样本,从不同类别舌体中随机各选取 24 个为学习集,其余的各 8 个为预测集数据。对 24 个测试样本的吻合情况如图 4 所示。横轴是用于预测的样本数,纵轴为各类舌体的目标样本值,圆圈、正方形、菱形分别表示健康人、肝炎患者、脂肪肝患者三类不同舌体,星号表示对 24 个样本测试分类的结果,由图 4 可知,其中有一例健康人被错判为脂肪肝患者,其他的都与实际的完全相吻合,其正确率为 95.83%。

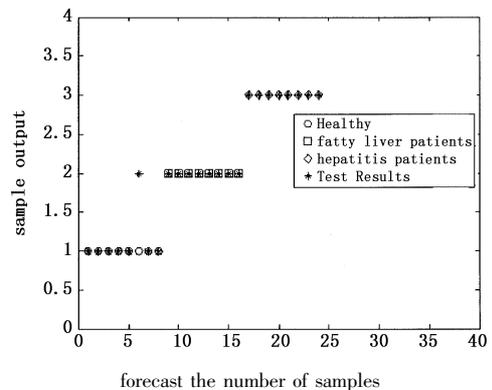


图 4 PNN 检测结果

Fig. 4 the results of PNN detection

4 结果

应用概论神经网络不需要设置初始权值,学习速度快,调节参数少,建立了健康人、肝炎患者、脂肪肝患者三类不同舌体的光谱舌诊模型。研究了径向基函数的扩展速度 (SPREAD) 对网络的影响,得出 SPREAD 在 0.0065 ~ 0.0077 之间取值时网络模型的预测效果和泛化能力较好。用该模型对 24 个预测样本进行预测,其正确率为 95.83%。这为利用近红外光谱分析舌表面所携带的病理信息的分析方法提供了一定的实验依据,使利用光谱法进行疾病的诊断成为可能。

参考文献:

- [1] Wang Shenghua, Li Fangling, Liang Rong, et al. Physical examination of patients with fatty liver crowd characteristics of tongue [J]. Chinese Journal of Basic Medicine in Traditional Chinese Medicine, 2007, 13 (11): 847 - 849. (in Chinese)
王盛花, 李方玲, 梁嵘, 等. 体检人群中脂肪肝患者的舌象特征分析 [J]. 中国中医基础医学杂志, 2007, 13 (11): 847 - 849.
- [2] Huang Xiaoying. Tongue and diabetes [J]. Hebei J TCM, 2005, 27 (5): 397 - 398. (in Chinese)
黄晓莺. 舌诊与糖尿病 [J]. 河北中医, 2005, 27 (5): 397 - 398.
- [3] Li Jinghua, Weng Weiliang. Quantitative study of coronary heart disease tongue [J]. Chinese Journal of Basic Medicine in Traditional Chinese Medicine, 2009, 15 (4): 284 - 286. (in Chinese)
李敬华, 翁维良. 冠心病舌诊定量研究 [J]. 中国中医基础医学杂志, 2009, 15 (4): 284 - 286.
- [4] Cai Yiheng, Liu Changjiang, Shen Lansun. New type instrument for tongue image analy [J]. Measurement & Control Technology, 2005, 24 (5): 34 - 36. (in Chinese)
蔡轶珩, 刘长江, 沈兰荪. 新型舌象分析仪的设计方案 [J]. 测控技术, 2005, 24 (5): 34 - 36.
- [5] Pang Bo, Zhang David, Li Naimin, et al. Computerized tongue diagnosis based on bayesian networks [J]. IEEE Transactions on Biomedical Engineering, 2004, 51 (10): 1803 - 1810.
- [6] Li Xiaoyu, Zhang Xinfeng, Shen Lansun. An algorithm study on tongue color recognition of traditional chinese medicine based on support vector machine [J]. Beijing Biomedical Engineerin, 2006, 25 (1): 43 - 46. (in Chinese)
李晓宇, 张新峰, 沈兰荪. 基于支撑向量机的中医舌色苔色识别算法研究 [J]. 北京生物医学工程, 2006, 25 (1): 43 - 46.
- [7] Liu Lei, Luo Wenwen, Gong Shuying, et al. Quantitative analysis by NIR spectrum technique for the main components of savor in green tea [J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology, 2008, 8 (6): 109 - 115. (in Chinese)
刘蕾, 罗文文, 龚淑英, 等. 采用近红外光谱技术定量分析绿茶中的主要呈味物质 [J]. 中国食品学报, 2008, 8 (6): 109 - 115.
- [8] Du Zhenhui, Qi Rubin, Zhang Huimin, et al. Quantitative detection of propane and isobutene based on NIR spectroscopy [J]. Journal of Tianjin University, 2008, 41 (5): 589 - 592. (in Chinese)
杜振辉, 齐汝宾, 张慧敏, 等. 近红外光谱定量检测丙烷和异丁烷 [J]. 天津大学学报, 2008, 41 (5): 589 - 592.
- [9] Yang Chunmei, Li Ning, Zhao Xuehong, et al. Application of selecting wavelength regions to determination of free amino acid content in tea by FT-NIR spectroscopy [J]. Laser & Infrared, 2009, 17 (8): 1839 - 1844. (in Chinese)
杨春梅, 李宁, 赵学虹, 等. 用于果蔬内部品质无损检测的 NIRS 技术新进展 [J]. 激光与红外, 2009, 39 (11): 1137 - 1141.
- [10] Liang Tian, Zheng Nan, Qi Wenzong. Rapid determination of two main components in roxithromycin by near infrared spectrometry [J]. Ptca (Patr B: Chem. Anal), 2007, 43 (12): 1000 - 1003. (in Chinese)
梁田, 郑楠, 齐文宗. 近红外光谱法快速分析罗红霉素中两种主要成分 [J]. 理化检验: 化学分册, 2007, 43 (12): 1000 - 1003.
- [11] Luo Yunhan, Chen Zhe, Chen Xingdan. Detection limit of glucose concentration in noninvasive sensing with near infrared spectroscopy [J]. Opt. Precision Eng., 2008, 16 (5): 784 - 788. (in Chinese)
罗云瀚, 陈哲, 陈星旦. 近红外光谱无创血糖测量的极限检测浓度 [J]. 光学精密工程, 2008, 16 (5): 784 - 788.
- [12] Chen Xingdan. Possibility of noninvasive clinical biochemical examination by near infrared spectroscopy [J]. Opt. Precision Eng., 2008, 16 (5): 759 - 763. (in Chinese)
陈星旦. 近红外光谱无创生化检验的可能性 [J]. 光学精密工程, 2008, 16 (5): 759 - 763.
- [13] Kamil Riha, Radim Ciz. Searching for a new non-invasive method of blood circulation system diagnostics [C]. Third International Conference on Systems. 2008, 4: 156 - 161.
- [14] Liang Yong-chun, Sun Xiao-yun, Liu Dong-hui, et al. Application of combinatorial probabilistic neural network in fault diagnosis of power transformer [C]. Proceedings of the Sixth International Conference on Machine Learning and Cybernetics, Hong Kong, 2007, 2: 1115 - 1119.
- [15] Rong Wei, Tao Zhi, Gu Jihua, et al. Identification of chinese whispered speech based on PNN [J]. Computer Engineering and Applications, 2008, 44 (17): 148 - 150. (in Chinese)
荣薇, 陶智, 顾济华, 等. 基于概率神经网络的汉语耳语音识别系统 [J]. 计算机工程与应用, 2008, 44 (17): 148 - 150.
- [16] Zhang Defeng. MATLAB neural network application design [M]. Beijing: Mechanical Industry Press, 2009. (in Chinese)
张德丰. MATLAB 神经网络应用设计 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2009.