

受限波兹曼机联合稀疏近似的脑功能检测模型^①

景艳山, 曾卫明, 王倪传

(上海海事大学 信息工程学院数字影像与智能计算实验室, 上海 201306)

摘要: 人脑功能连通性检测是神经科学研究的重要技术. 使用受限制波兹曼机(Restricted Boltzmann Machine, RBM)对大量多被试功能磁共振(functional Magnetic Resonance Imaging, fMRI)数据进行建模可以检测人脑功能连接, 但是不能有效检测单被试数据的功能连接. 本文研究一种新颖的融合了稀疏近似与 RBM 技术的脑功能连通性检测模型, 该模型充分利用 fMRI 数据的稀疏性, 采用稀疏近似理论对 fMRI 数据进行空间域稀疏近似压缩, 然后使用 RBM 建立模型, 以检测脑功能连通性. 实验结果表明, 该融合模型可以有效地提取单被试数据的脑功能时间域混合模型及其相应的脑功能图谱, 解决了 RBM 在单被试数据分析上的瓶颈.

关键词: 功能磁共振; 功能连接; 受限制波兹曼机; 稀疏近似

Functional Connectivity Detection Method Based on Restricted Boltzmann Machine and Sparse Approximation

JING Yan-Shan, ZENG Wei-Ming, WANG Ni-Zhuan

(Lab of Digital Image and Intelligent Computation, College of Information Engineering, Shanghai Maritime University, Shanghai, 201306, China)

Abstract: The human brain functional connectivity detection is an important technique in neuroscience research. The restricted boltzmann machine (RBM), modeling on a large amount of multi-subject functional magnetic resonance imaging (fMRI) data, it can discover the brain functional connectivity. However, the former method with restriction of the huge training data, it can not detect the functional connectivity on single-subject data effectively. In this research, a novel functional connectivity detection model taking advantage of the sparsity is presented, which is an effective combination of the spatial-domain sparse approximation theory and the RBM technique. The experimental results demonstrated that the proposed model could effectively discover both the temporal dynamic model and the corresponding spatial functional maps on the single-subject data, which settled the the bottleneck of RBM.

Key words: functional magnetic resonance imaging; functional connectivity; restricted boltzmann machine; sparse approximation

功能连接是指空间上分离的脑区之间在神经生理学上的联系, 即检验两个脑区功能之间是否存在联系或有无信息交互, 它强调神经活性的描述形式. 功能连接研究方法主要分为两种: 1, 假设驱动方法, 主要有相关分析、相干分析, 一般线性模型等; 2, 数据驱动方法, 主要有独立成分分析, 主成分分析, 聚类分析方法等^[1]. 本文研究一种数据驱动方法, 此方法通过稀疏近似技术在空间域对功能磁共振(functional

Magnetic Resonance Imaging, fMRI)数据(体素数量)进行压缩, 大量减少计算量, 然后使用压缩后的数据训练限制波兹曼机(Restricted Boltzmann Machine, RBM)^[2]. RBM在分类和数据重新表示领域取得了很多成功的应用. 在神经影像领域取得了初步的进展, Sergey M.Plis等使用大量多被试 fMRI 数据训练了一个 RBM 模型, 用于检测任务刺激信号, 取得了和独立成分分析(independent component analysis, ICA)性能相

^① 基金项目:国家自然科学基金(31170952)

收稿时间:2014-03-01;收到修改稿时间:2014-04-08

当的结果^[3]. 使用 RBM 学习 fMRI 数据面临着一个极为重要的问题, 即 fMRI 数据有很高的空间分辨率, 具有大量体素, 这就决定了相应的 RBM 模型拥有为数众多的可见节点. 进而, 大量的可见节点需要大量的权重值连接, 训练大量的权重值又需要大量的样本数据. 由于 RBM 需要大量的 fMRI 数据作为训练样本, 其功能连通性检测性能才和 ICA 相当, 所以对于单个被试数据的功能连通检测便无能为力. 其原因是权重参数规模太大, 单个被试数据作为训练样本数量相对太小, 不能使 RBM 的训练完全收敛, RBM 权重特征不能正确学得. Daubechies 等人指出 fMRI 原信号的稀疏性促使了 ICA 的成功^[4], 进一步, Wang 等人于 2013 年提出了 SACICA 模型, 该模型基于 L_p 范数构造了关于原混合数据的稀疏近似集, 并与 FastICA 算法^[5]进行联合, 提高了 FastICA 算法在对脑功能连通网络分割能力^[6]. 进一步, Wang 等人发展了 SACICA 模型, 提出一种基于小波阈值收缩的 WASICA 模型, 该模型采用稀疏近似理论对 fMRI 数据在空间域上进行大规模数据压缩的同时保留了源信号的稀疏性特征, 并在一定程度上压制了原数据中的噪声, 其结果表明该种模型能够显著提高脑功能网络分离的准确性^[7]. 基于以上已有研究, 为了解决 RBM 不能对少量样本进行建模的问题, 本文研究一种对 fMRI 数据采用稀疏近似方法进行空间域压缩, 然后使用压缩后的数据训练 RBM 的方法. 空间域压缩可以降低 fMRI 数据体素的数量, 从而减少 RBM 输入点的数量, 以致减少权重参数的数量. 权重参数数量的减少将使 RBM 训练所需要的样本数减少, 从而为单个被试 fMRI 数据分析提供了条件与可行性.

本文主要内容包括: 介绍 fMRI 数据的稀疏近似空间域压缩的理论与方法; 基于 RBM 的脑功能连通性检测模型; 实验设计与结果分析. 方法框架如图 1 所示, 上半部分为空间域稀疏近似压缩方法的描述, 下半部分为基于 RBM 的功能连接检测方法的描述.

1 稀疏近似理论

人脑功能连通性检测可以认为是一个盲源分离问题, 由稀疏近似理论^[6-8]可知, 空间域稀疏近似不会改变原数据中原功能信号之间固有的时间域混合模型, 并且由文献[7, 9]可知, 不同尺度上的小波变换或小波包变换可以获取关于原混合信号的稀疏近似系数, 即小波变换会使得原混合数据以及原功能信号变得更加稀疏, 这会使得基于稀疏近似集往往会获得准确的时

间域混合模型. 本文的稀疏近似压缩算法主要包括两部分: 1, 将 fMRI 的每一个 volume 进行 1D 小波包分解, 产生一系列的小波包树; 2, 在空间域进行压缩, 压缩包括两步, 每个 volume 的小波树节点的小波收缩和基于相对小波能量(relative wavelet packet energy, RWPE)的自动结点选择与融合.

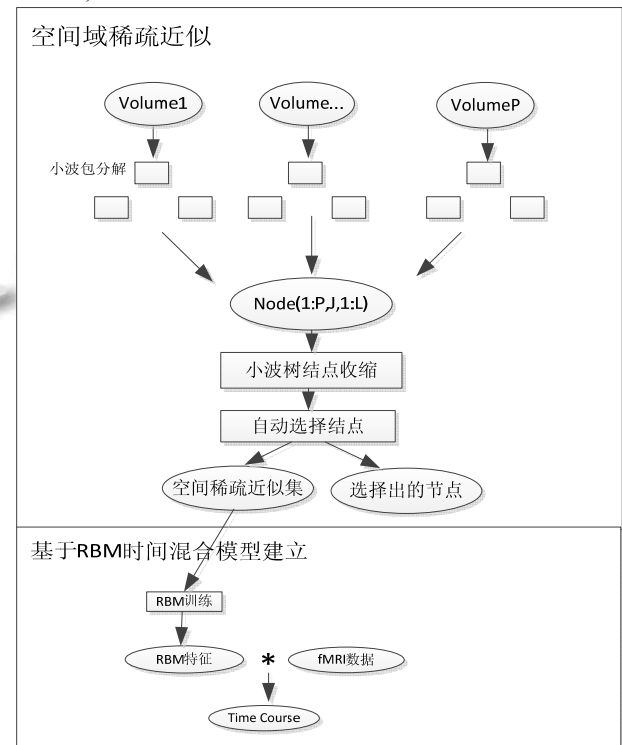


图 1 算法框架

1.1 小波包节点树的收缩

假设 fMRI 数据有 P 个 volume (P 个时间点), N 个体素, 使用小波包分解所得树为 J 层, 在第 j 层有 2^j 个结点, 共有 P 个小波包树. $Node(i, j, l)$ 代表第 i 个 volume 的小波树的第 j 层的第 l 个结点, $1 \leq i \leq P$, $1 \leq j \leq J$, $1 \leq l \leq 2^j$. 在很多研究人员的努力下, 小波收缩在信号降噪, 功率谱估计应用中取得了良好的应用. 小波收缩可以对信号能量进行压缩, 使小系数更小, 大系数更大. Gao(1998)指出当潜在的系数稀疏时, 小波收缩的效果最好^[10]. 在小波收缩中, 收缩方法主要包括硬阈值、软阈值、半软阈值和硬-软阈值. 我们采用硬阈值方法, 对小波包树的第 J 层的节点进行阈值化处理. 相关方程如下^[11]:

$$Node^H(i, J, l) = \delta_{\lambda_i}^H(Node(i, J, l)), \quad (1)$$

$$\delta_{\lambda_i}^H(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \lambda_i \\ x & |x| > \lambda_i \end{cases} \quad (2)$$

$$\lambda_i = \sigma_i \cdot \sqrt{2 \log(n)} \quad (3)$$

$$\sigma_i = MEA(|Node(i, J, l: 2^j)|) / 0.6745 \quad (4)$$

方程(1)中 $\delta_{\lambda_i}^H$ 代表对节点 $Node(i, j, l)$ 进行阈值化的函数, 具体如方程(2)表示, $Node^H(i, J, l)$ 代表阈值化后的节点. 方程(2)中 λ_i 为第 i 个小波树的阈值, 由方程(3)计算而得. 其中 σ_i 由方程(4)计算得到, 方程(4)中 MEA 代表计算向量的中值, $Node(i, J, l: 2^j)$ 代表将第 i 个小波包树的第 J 层的所有节点连接而成的向量, n 代表此向量的长度. 所有小波包树进行收缩后, 得到阈值化的节点.

1.2 基于 RWPE 的节点选择与集成

得到阈值化节点 $Node^H(i, J, l: 2^j)$ 后, 将进行选择和集成小波包树, 从而构成 fMRI 数据空间域稀疏近似数据集. 我们选择相对小波包能量作为选择阈值化的节点的标准, 进而集成为 fMRI 空间域的稀疏近似数据集. 第 i 个 volume 的小波树的第 J 层的第 l 个节点的能量定义如下^[7],

$$Energy(i, J, l) = \|Node^H(i, J, l)\|_2^2 \quad (5)$$

$\| \cdot \|_2^2$ 代表向量的 Frobenius 范数, 第 i 个 volume 所有节点的能量为:

$$Energy_{tot}(i) = \sum_{l=1}^{2^j} \|Node^H(i, J, l)\|_2^2 \quad (6)$$

定义第 i 个 volume 的小波树的第 J 层的第 l 个节点的相对小波包能量为:

$$RWPE(i, J, l) = \frac{Energy(i, J, l)}{Energy_{tot}(i)} \quad (7)$$

接下来可以计算 P 个 volume 在第 J 层小波包树第 l 个节点的 RWPE 的均值:

$$MRWPE_j(l) = \frac{1}{P} \left(\sum_{i=1}^P RWPE(i, J, l) \right), 1 \leq l \leq 2^j \quad (8)$$

通过公式(8), 我们可以得到所有 P 个小波包树在第 J 层所有节点的度量向量 $MRWPE_j(1: 2^j)$. 对 $MRWPE_j(1: 2^j)$ 降序排序, 选择满足 $\sum_{i=1}^q MRWPE_j(l) \geq Thresh$ 前 q 个元素^[7]. 同时, 将选择的节点的索引记入长度为 q 的 INDEX 向量中. 最后原始 fMRI 数据的稀疏近似集可以表示为:

$$C_X = \begin{bmatrix} c_{x_1} \\ M \\ c_{x_i} \\ M \\ c_{x_p} \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^q Node^H(i, J, INDEX(t)), 1 \leq i \leq P, \quad (9)$$

C_X 是一个 $x_i' = \sum_{t=1}^q Node^H(i, J, INDEX(t))$, for $1 \leq i \leq P$ 的矩阵,

C_X 不仅对原始 fMRI 数据在空间域进行了压缩, 同时是一种有效的稀疏表达. 总结 fMRI 原始数据稀疏压缩的过程如下:

- ①对每一个 volume 进行小波包分解, 得到 P 个 J 层小波包树;
- ②对每个小波包树的第 J 层节点进行硬阈值化;
- ③根据 RWPE 对阈值化后节点进行选择;
- ④融合选择的节点, 组成原始数据的稀疏近似集.

1.3 数据的重构

使用选择的节点对原始 fMRI 数据进行重建, 对 $x_i' = \sum_{t=1}^q Node^H(i, J, INDEX(t))$, for $1 \leq i \leq P$ 进行小波包逆变换可以得到 $x_i' = \sum_{t=1}^q Node^H(i, J, INDEX(t))$, for $1 \leq i \leq P$. 设第 i 个 volume 的近似为^[11]:

$$x_i' = \sum_{t=1}^q Node^H(i, J, INDEX(t)), for 1 \leq i \leq P \quad (10)$$

进一步, 全部的 fMRI 重建数据为:

$$X' = [x_1', x_2', \dots, x_i', \dots, x_p']^T \quad (11)$$

2 受限制波兹曼机

RBM^[12]一种基于统计力学的随机神经网络, 是一个无向图模型, 结构示意图如图 2 所示:

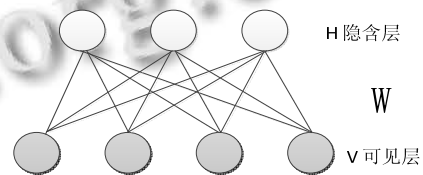


图 2 RBM 的结构示意图

v 为可见层, 代表观测数据, h 为隐含层, 是可见层的一种表示, W 为两层之间的连接权值. 在 fMRI 应用中, 可见层的每一个单元代表一个 volume 中的 voxel(体素), 一个 volume 中的所有 voxel 的值近似服从正态分布. RBM 模型的能量定义如下:

$$E(v, h) = -\sum_j \frac{v_j}{\sigma_j} W_j h - \sum_j \frac{(a_j - v_j)^2}{\sigma_j^2} - \sum_i b_i h_i \quad (12)$$

其中 a_j 和 b_i 分别是可见单元与隐含单元的偏置(bias), σ_j 是可见层 v_j 的标准差. 通常 σ_j 需要通过其它参数

学习而来,在实际应用中,将每一个体素样本进行 z-score 变换,计算将简单快速,将得到同样好的效果. RBM 的训练有很多超参数(hyper parameter),为了得到更稀疏的特征,将采用 L1 正则化,同时使用双曲正切函数作为激活函数. RBM 训练方法采用对比散度(Contrastive Divergence, CD)算法^[13].

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (13)$$

经过稀疏近似的压缩, fMRI 数据的体素数量将大大减少,减少到 $1/2^j$ (j 为小波包层数). 从而减少了 RBM 可见层节点的数量,因此网络权重的规模将减小,使网络训练过程对样本数量的需求降低,降低训练的复杂度,为使用单被试样本进行模型的训练提供了重要的基础. 同时提高了网络的训练速度.

将原始数据的稀疏近似集的每一个 volume 作为 RBM 的训练样本,共 P 个. 经训练所得的 RBM 的权值 W 视为训练数据的特征,将特征与原始 fMRI 数据在对应空间相乘即可得到 fMRI 数据的时间过程(Time Course)矩阵 TC :

$$TC = W \cdot X', \quad (14)$$

将目标时间过程与重构 fMRI 数据在相应的维度相乘,即可得到目标时间过程相应的激活的脑区图谱 Map^[3]:

$$Map = (TC)^{-1} \cdot X'. \quad (15)$$

fMRI 数据具有较高的空间分辨率,与此同时,脑功能信号具有很强的稀疏性,然而稀疏性往往可以看成脑功能信号的一种本真属性^[13]. 稀疏近似可以使脑功能信号凸显此种本真特征,在一定程度上压制噪声,以指数次方分之一的程度削减待分析的数据量. 然而, RBM 在原来数据空间中需要大量的样本才能学得原脑功能连通网络相应的时间域混合模型,经稀疏近似处理后,一方面,脑功能信号的本真属性的凸显会使得 RBM 的学习过程难度降低,所需要的训练样本数量减少;另一方面,空间域稀疏近似压缩缩小了 RBM 可见层节点的数量,降低了 RBM 模型本身的复杂度,随之降低了对训练样本数量的需求,最终容易准确获取时间域混合模型.

3 实验结果

3.1 实验数据

实验所用 fMRI 数据是基于双边手指敲击(bilateral fingers tapping)任务数据,采集自华东师范大学上海磁共振重点实验室西门子磁共振仪,被试为 25 周岁健康男性,实验的 BLOCK 设计为 OFF-ON-OFF-ON-OFF-ON-OFF-ON-OFF-ON-OFF,所有 BLOCK 均持续 30s, ON BLOCK 进行双边手动敲击实验任务, OFF BLOCK 大脑清醒,不做任何思考,平躺于磁共振仪内. 具体 BLOCK 设计如图 3.

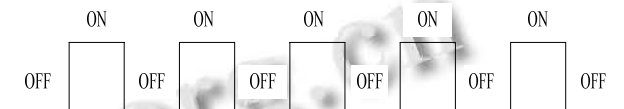


图 3 任务设计 BLOCK

该数据采集过程中参数设置如下:采用单次激发敏感梯度回波平面成像;切片数目为 35,覆盖整个脑区;敏感加速因子为 2.0; TR 为 2.0s,扫描分辨率为 64×64 ;片内分辨率为 $4mm \times 4mm$;片厚度为 $4mm$,片间隔 $1mm$. 所得数据共 165 个时间点.

3.2 数据处理

预处理使用 SPM8 软件包进行,主要对数据进行时间层矫正,头动校正,空间标准化,以及平滑处理. 预处理后得到的数据空间分辨率为 $91 \times 109 \times 91$,即 902629 个 voxel, 165 个 volume. 除去图像中非大脑部分后进行稀疏近似压缩. 使用 1D 小波包分解为 4 层,使用 db4 小波基;节点自动选择与融合遵循 RWPE 流程,阈值 $Thresh$ 设置为 0.99. 压缩所得到的为 17169165,标准化为零均值和单位方差. RBM 的可见层单元数设置为 17169,隐含层设置 55 个单元,激活函数为,学习速率为 0.05, L1 惩罚因子为 0.01,每批训练 5 个样本,进行 2000 回合训练保证完全收敛.

3.3 结果与分析

实验所得时间过程如图 4 所示,

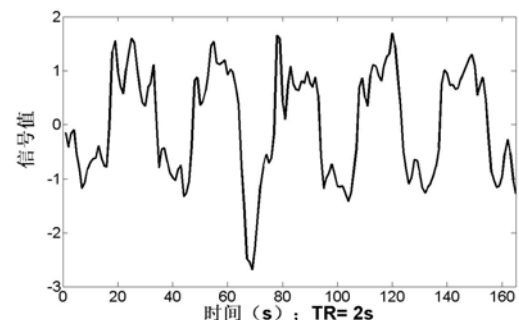


图 4 检测到的任务刺激 Time Course

图 4 表明: 检测到的 Time Course 与刺激任务设定的 BLOCK 相当吻合. 此 Time Course 对应的大脑图谱如图 5 所示:

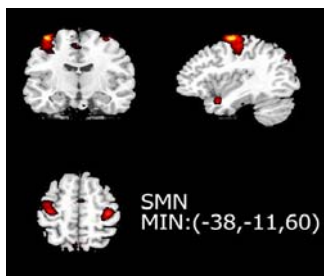


图 5 检测到的 Time Course 对应的脑区

图 5 中的激活区域为感觉运动网络 (sensory motor network, SMN), 是与实验所接受的刺激(手动)相关的.

文献[3]使用了 28 个被试数据, 一共 6972 个 volume 作为训练样本, 训练 RBM 得到了与 ICA 相近的结果. 我们按照文献[3]中的方法分析前述手动实验数据, 未进行稀疏近似压缩, 一个被试数据(165 volume)作为训练样本, 经过试验多种参数组合均未得到与设计 BLOCK 相符的时间序列. 上述结果表明, 本文研究的将数据在空间域进行稀疏压缩后, 建立 RBM 模型的方法可以有效的解决使用原始 fMRI 数据训练 RBM 需要大量样本的问题, 本文研究的方法扩展了使用 RBM 检测 fMRI 功能连接的适用范围, 改善了 RBM 模型在单被试数据(少量训练样本)上脑功能连接检测的性能.

3 结语

本文主要针对 RBM 模型在进行 fMRI 脑功能连通性检测需要大量训练样本而不能有效检测单被试数据脑功能连通网络的问题, 提出了将稀疏近似与 RBM 融合的检测模型. 该模型对原始 fMRI 数据在空间域进行稀疏近似压缩, 凸显了 fMRI 脑功能信号本真特征, 削减了空间数据量, 从而使 RBM 模型的训练难度降低, 减少了对训练样本数量的需求, 有效地提升了 RBM 对时间域混合模型的检测能力. 经实验验证, 该融合模型有效的解决了对训练数据量需求高的问题, 可以使用少量训练样本训练 RBM 模型, 有效地检测单被试数据的功能连接. 今后, 我们将进一步在实际

中检验该方法的有效性, 旨在最终形成一种比较完善的 fMRI 信息检测系统.

参考文献

- 1 Li K, Guo L, Nie J, ed. Review of methods for functional brain connectivity detection using fMRI. *Computerized Medical Imaging and Graphics*, 2009, 33(2): 131–139.
- 2 Salakhutdinov R, Mnih A, Hinton G. Restricted Boltzmann machines for collaborative filtering. *Proc. of the 24th International Conference on Machine Learning*. ACM, 2007: 791–798.
- 3 Plis SM, Hjelm DR, Salakhutdinov R, ed. Deep learning for neuroimaging: a validation study. *arXiv preprint arXiv: 1312.5847*, 2013.
- 4 Daubechies I, Roussos E, Takerkart S, ed. Independent component analysis for brain fMRI does not select for independence. *Proc. Natl Acad Sci USA* 2009, 106(26): 10415–10422.
- 5 Hyvarinen A. Fast and robust fixed-point algorithms for independent component analysis. *IEEE Trans. on Neural Networks*, 1999, 10(3): 626–634.
- 6 Wang N, Zeng W, Chen L. SACICA: A sparse approximation coefficient-based ICA model for functional magnetic resonance imaging data analysis. *Journal of Neuroscience Methods*, 2013, 216(1): 49–61
- 7 Wang N, Zeng W, Shi Y, ed. WASICA: An effective wavelet-shrinkage based ICA model for brain fMRI data analysis. *Journal of Neuroscience Methods*[To appear].
- 8 Kisilev P, Zibulevsky M, Zeevi YY. A multiscale framework for blind separation of linearly mixed signals. *The Journal of Machine Learning Research*, 2003, 4: 1339–1363.
- 9 Mallat S. *A wavelet tour of signal processing*. Academic press, 1999.
- 10 Gao HY, Bruce AG. WaveShrink with firm shrinkage. *Statistica Sinica*, 1997, 7(4): 855–874.
- 11 Gao HY. Wavelet shrinkage denoising using the non-negative garrote. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 1998, 7(4): 469–488.
- 12 Hinton G. A practical guide to training restricted Boltzmann machines. *Momentum*, 2010, 9(1): 926.
- 13 Tieleman T, Hinton G. Using fast weights to improve persistent contrastive divergence. *Proc. of the 26th Annual International Conference on Machine Learning*. ACM, 2009. 1033–1040.