几种优化方法在脑磁逆问题中的应用与比较

李 军
(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室,光及电磁波研究中心,杭州 310027)

摘 要: 利用脑磁图数据推断磁源参数是脑磁理论研究中的一个基本问题.优化方法是解决这一问题的有力工具.求解这一脑磁逆问题分别使用梯度法、高斯-牛顿法及模拟退火法.计算表明:这些算法在一定条件下均可使用,比较而言,梯度法、高斯-牛顿法具有很快的计算速度,而模拟退火法耗时较多.另一方面,模拟退火法对迭代初值要求不高,而梯度法、高斯 - 牛顿法则对此有一定的要求.特别在对多偶子磁源求解时,梯度法、高斯-牛顿法有时因初值选择困难而失效,而模拟退火法仍然是有效的.

关键词: 脑磁图; 逆问题; 优化方法; 梯度法; 高斯-牛顿法; 模拟退火法

中图分类号: Q64 **文献标识码**: A **文章编号**: 0372-2112 (2001) 01-0061-03

Application and Comparison of Some Optimization Methods on MEG Inverse Problem

LI Jun
(*State Key Lab. of Modern Optical Instrumentation , Centre for Optical and Electromagnetic Research , Zhejiang University , Hangzhou* 310027 , *China*)

Abstract : Magnetic source parameter estimation by MEG data is a basic question on MEG research. Optimization methods are available to the estimation. Gradient , Gauss-Newton and simulated annealing algorithms are used separately. Computer simulation demonstrates that these algorithms are all available under certain conditions. In comparison ,gradient , Gauss-Newton algorithms are of fast computation speed while simulated annealing costs more time. On the other hand ,simulated annealing almost has no special need for the selection of initial iterative values while gradient and Gauss-Newton algorithms have such need to some extent. Furthermore ,on estimation of multiple source parameters ,gradient , Gauss-Newton algorithms sometimes fail due to incorrect selection of initial iterative values ,while simulated annealing algorithm is still effective.

Key words : MEG;inverse problem;optimization;gradient algorithm;Gauss-Newton algorithm;simulated annealing algorithm

1 引言

人体内的生物电流可以激发出生物磁场,这种磁场很弱,利用超导量子干涉仪(Superconducting Quantum Interference Device ,简称 SQUID)可以拾取这一信号[1].脑磁为其中的重要一类,将头外多点处的脑磁场强度值绘成图,称脑磁图(Magnetoencephalogram,简称 MEG).通过记录和分析这种由于脑内神经元的电活动而产生的脑磁图,可以获得活动神经元的位置及强度等信息,为认知研究与脑神经疾病的诊断提供帮助[2,3].

脑磁逆问题就是利用脑磁图数据推断脑内磁源参数.目前针对这一问题存在两类解决方法:一类称为磁源重建[4,5],这是基于图像重建技术的方法.在这类方法中,假设磁源位于脑内离散化的固定位置处,问题转化为对欠定的线性方程组的求解,主要包括最小范数解及加权最小范数解等.另一类称为偶极子定位方法[6,7],鉴于多数实际情况下,脑内磁源只有一两个,而磁场测量点数相对较多,从而使欲求的未知参数少于磁场方程的数目,问题转化为求超定的非线性方程组的最小二乘解.本文采用后一种方法的思想,分别利用非线性优化理论中局域优化的梯度法、高斯-牛顿法及全局优化的模拟退火法对磁源参数进行求解.鉴于对单偶极子参数的计算已有人采用 Marquard 算法[8],对两个偶极子的计算有人采用模拟退火及遗传算法[9],而不同算法之间的比较工作,特别涉及局域算法与全局算法之间的比较,却未见报道.所以这里侧重几种算法之间的比较,并尝试用局域优化算法求解两个偶极子的情况,从而进一步确定在不同条件下选择不同算法的依据.

2 脑磁计算模型与算法

头模型采用球对称导体,即电导率 $\sigma = \sigma(r)$,呈球对称分布.磁源以电流偶极子 P 为模型,设在整个头内磁导率近似为常数 μ.脑磁测量仪通常记录的是头表面径向磁感应强度值 B_r,计算公式为[10]:

收稿日期:1999-09-08;修回日期:2000-04-21
基金项目:国家自然科学基金(No.59947004,No.30000034)

$$B_r(R)=\frac{\mu}{4\pi}\cdot\frac{P\cdot(R\times r)}{|R-r|^3|R|} \tag{1}$$

式(1)中,R 为测量场点位置,r 为磁源位置.在球对称导体头模型下,只需考虑偶极子 P 的两个切向分量 P_θ, P_ϕ.

在对磁源参数估计时,采用极大似然方法.假设各测量点处噪声无关且呈具有相同方差的高斯分布,则磁源参数 β(为由源位置及强度参数组成的列向量)应使目标函数 $F(\beta)=\frac{1}{2}\|B-B'(\beta)\|^2$ 为最小.其中 B 为多点处磁场的测量值,$B'(\beta)$ 为式(1)代入参数 β 时的计算值,可见这里对参数 β 的估计即为求最优化问题 $\min\limits_{\beta}F(\beta)$ 的解.对这一最优化问题,分别利用梯度法、高斯-牛顿法及模拟退火法.

梯度法 梯度算法的迭代公式为:$\beta^{(K+1)}=\beta^{(K)}+\lambda_K P_K$,其中 $P_K=-J^T(\beta^{(K)})e(\beta^{(K)})$,残差向量 $e(\beta^{(K)})=B-B'(\beta^{(K)})$,J 为残差 e 关于 β 在 $\beta^{(K)}$ 处的 Jacobi 矩阵.步长因子 λ_K 满足:$F(\beta^{(K)}+\lambda_K P_K)=\min\limits_{\lambda>0}F(\beta^{(K)}+\lambda P_K)$,可采用一维搜索的方法确定步长因子 λ_K.

高斯-牛顿法 高斯-牛顿算法中的迭代公式为:

$$\beta^{(K+1)}=\beta^{(K)}-\lambda^K(J^T(\beta^{(K)})J(\beta^{(K)}))^{-1}J^T(\beta^{(K)})e(\beta^{(K)}) \tag{2}$$

同样步长因子 λ_K 使一元函数 $F(\beta^{(K+1)})$ 取最小.

式(2)可化为

$$\beta^{(K+1)}=\beta^{(K)}+\lambda_K P_K \tag{3}$$

其中搜索方向 P_K 满足方程

$$J^T(\beta^{(K)})J(\beta^{(K)})P_K=-J^T(\beta^{(K)})e(\beta^{(K)}) \tag{4}$$

由于方程(4)为方程

$$J(\beta^{(K)})P_K=-e(\beta^{(K)}) \tag{5}$$

的正规方程,可见 P_K 为方程(5)的最小二乘解.

在修改的高斯-牛顿算法中,针对 P_K 的求解,通常有几种方式:一种考虑若 J^TJ 矩阵奇异时,由方程(5)得不出 P_K 的解,则用负梯度方向作为搜寻方向;还可以通过改善 J^TJ 使之非奇异而保证 P_K 解的存在,如 Marquard 算法.在这里可以考虑用广义逆的方法,即无论 J^TJ 奇异与否,采用 $P_K=-J^+(\beta^{(K)})e(\beta^{(K)})$ 作为搜寻方向,从而保证迭代过程的完成.J^+ 为 J 的 Moore-Penrose 广义逆,可以证明通过这种方法得到的 P_K 指向目标函数的减小方向.

模拟退火法 取目标函数 F 形式同上,问题是寻找 $\beta^*\in V$,满足 $F(\beta^*)=\min\{F(\beta_i)\}$,$\beta_i\in V$,这里 β_i 为第 i 个可能的解,V 为所有 β 组成的集合,称为解空间.即 β^* 为解空间 V 中使目标函数 F 取极小的一个估计解.

(1)解的产生机制与接受准则

首先确定解空间 V 的范围,如以单电流偶极子为源假设情况,解空间中的点 $\beta=(x,y,z,P_\theta,P_\phi)$ 为一五维空间中的点.在这里各分量的取值范围如下:$(x^2+y^2+z^2)^{1/2}$:0～10.5cm,P_θ, P_ϕ:-10nAm～10nAm.对于多偶极子源情形,解空间维数相应增大.对于每一个解 $\beta_i\in V$,定义一个靠近 β_i 的解集 $\Omega_i\subset V$ 称之为解 β_i 的邻域,每一个 $\beta_j\in\Omega_i$ 称为 β_i 的邻域解.而产生机制就是从邻域解集 Ω_i 中选出某个待定解 $\beta_j\in\Omega_i$ 的方法.这里设邻域的半径与温度 T 成正比,而 β_i 的邻域解 β_j 的产生,采用以在 Ω_i 区域内均匀分布的生成概率进行随机抽样得到.产生机制确立之后再由接受准则确定接受 β_j 的概率,此概率

$$p_{ij}(\text{接受 }\beta_j)=\begin{cases}1, & (\text{当 }\Delta F_{ji}=F_j-F_i<0\text{ 时})\\ \exp(-\Delta F_{ji}/T), & (\text{当 }\Delta F_{ji}=F_j-F_i\geq 0\text{ 时})\end{cases}$$

式中 F_i, F_j 为解取 β_i,β_j 时的目标函数,T 为退火温度.从上式可知当 $F_j<F_i$ 时,即目标函数减小,β_j 一定被接受;而 $F_j\geq F_i$ 时,目标函数变大或不变,则 β_j 可能被接受也可能不被接受.此时判断 β_j 是否被接受,可以使用以下方法:即产生(0 1)之间的一随机数 P',若 $P_{ij}>P'$,则接受 β_j,否则不接受.这一过程有助于避免目标函数陷入局部极小.解的产生机制与接受准则的应用,构成了当前解变换为下一个解的转移过程.

(2)退火方案

这里包括初始温度 T_0 的选择与降温过程的确定.T_0 应当选得足够高,即高到使所有出现的转移均被有效地接受.具体可以在解空间 V 中随机选取 N 个可能的解 β_j,$j=1,2,\cdots,N$,分别计算其对应的目标函数 F_j,$j=1,2,\cdots,N$,及其均值 $\overline{U}=(\sum_j^N F_j)/N$ 和均方根值 $\sigma=(\sum_j^N(F_j-\overline{F})^2)^{1/2}/N$,选取 σ 的数倍作为计算的初始温度 T_0.降温时,温度下降过程要求以缓慢的方式进行,这里采用几何级数递减的形式降低温度,即如果第 k 次温级的温度为 T_k,第 $k+1$ 次温级的温度为 T_{k+1},则可取 $T_{k+1}=\alpha T_k$,其中 α 为一个小于 1 但接近 1 的正数.随着温度的降低,邻域 Ω_i 的半径不断的缩小,解在搜寻迭代过程中的转移距离不断减小,最后落入全局极小状态.总之要达到目标函数的全局最小,必须要以足够高的温度开始,充分缓慢地退火.

(3)迭代停止的准则

在对解空间 V 进行的迭代搜寻过程中,迭代何时停止,可采用当温度下降到足够低,比如温度已降到初始温度的几千分之一,即可停止搜寻迭代.

3 模拟计算结果与讨论

设头半径为 11cm(考虑头骨厚 0.5 厘米),磁导率系数 $\mu=1.26\times10^{-6}$H/m,采用头表面 20 个点处的磁场数据,分别以单电流偶极子及双电流偶极子为磁源计算.相应参数见表 1、表 2,其中偶极矩以纳安米(nAm)表示.

表 1 单电流偶极子磁源参数

X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	P_θ(nAm)	P_ϕ(nAm)
4.500	4.500	6.364	0.300	1.000

表 2 双电流偶极子磁源参数

	X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	P_θ(nAm)	P_ϕ(nAm)
P_1	4.500	4.500	6.363	0.300	1.000
P_2	-4.950	4.950	0.000	0.500	0.800

考虑到目标函数空间结构的复杂性,为尽可能保证迭代最终能取得目标函数极小值的结果.在利用梯度法、高斯-牛顿法时,对参数的初始迭代初值进行以下方式的选择:在解空间随机产生一些点,分别计算其对应的目标函数值,选取其中使目标函数值最小的几个点作为迭代初值的候选.计算结果

见表 3、表 4.

表 3　单电流偶极子参数的计算结果

	迭代初始值					计算结果				
	X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	$P\theta$(nAm)	$P\phi$(nAm)	X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	$P\theta$(nAm)	$P\phi$(nAm)
梯度法	1.105	2.087	0.877	0.945	4.095	4.499	4.500	6.364	0.300	0.998
	1.180	6.130	4.034	0.221	0.771	4.500	4.499	6.363	0.301	0.999
高斯-牛顿法	1.105	2.087	0.877	0.945	4.095	4.500	4.500	6.364	0.300	1.000
	1.180	6.130	4.034	0.221	0.771	4.499	4.498	6.363	0.300	0.999
模拟退火法	解空间任一随机点					4.499	4.500	6.363	0.299	1.000

表 4　双电流偶极子参数的计算结果

		迭代初始值					计算结果				
		X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	$P\theta$(nAm)	$P\phi$(nAm)	X(cm)	Y(cm)	Z(cm)	$P\theta$(nAm)	$P\phi$(nAm)
梯度法	$P1$	1.457	2.012	0.662	0.401	4.806	4.499	4.498	6.362	0.299	0.999
	$P2$	-0.372	-2.263	2.151	-0.477	1.665	-4.949	4.950	0.000	0.500	0.800
	$P1$	-0.149	2.935	0.821	2.476	5.294	4.500	4.500	6.364	0.300	1.000
	$P2$	2.227	-1.347	0.316	-1.772	-0.940	-4.948	4.949	0.000	0.500	0.800
模拟退火法	P_1	解空间任一随机点					4.467	4.463	6.313	0.314	1.031
	P_2						-4.974	4.975	0.048	0.495	0.783

在以上对单偶极子源参数计算时发现:梯度法及高斯-牛顿法对迭代初值有一定的要求,若不进行筛选而随机选择初值,则可能无法得到合理的解.模拟退火法则几乎无此要求,从解空间中随机产生的点作初始迭代值,均可得到最优点.在计算时间上,梯度法和高斯-牛顿法速度很快,上述问题在赛扬 300 微机上,计算时间少于 1 秒钟,而模拟退火法耗时较多,欲达到相应的精度需 10 分钟左右时间.在对双偶极子源计算时,以上情况更加突出,高斯-牛顿法已很难选出合适的迭代初值,梯度算法通过进一步增加筛选原始解空间点的数目尚能选出一些合适的迭代初值,但这种选择已变得有些困难,即选出的点不合适的可能性比单电流偶极子源时的要大得多.而模拟退火法仍然对迭代初值要求不高,在计算时间上,梯度法需几秒钟时间,而退火法则需几十分钟甚至数小时的时间.

综上可以得出以下结论,利用优化方法可以求解脑磁逆问题,在理论上,尽管相对全局优化的模拟退火法而言,梯度法及高斯-牛顿法为局域优化方法,但在实际计算时可根据目标函数值的情况判断所求参数是否满足全局最小.在对单电流偶极子求解时,梯度法及高斯-牛顿法是合适的选择,速度快、精度高.而在求解两个偶极子源时,则可选择梯度法.如果需对更多的偶极子源参数求解,则梯度法亦将因迭代初值选择的困难而失效,在不计时间代价的情况下,模拟退火法仍然是可选择的方法.

参考文献:

[1] Hamalainen. M , Hari. R , Ilmoniemi. R. J et al. Magnetoencephalography theory ,instrumentation ,and applications to noninvasive studies of the working human brain [J]. Rev. Mod. Phys ,1993 ,65(2) :413 - 497.

[2] Hari. R ,. Lounasmaa. O. V. Recording and interpretation of cerebral magnetic fields [J]. Science ,1989 ,244 :432 - 436.

[3] Forss. N. Magnetoencephalography (MEG) in epilepsy surgery [J]. Acta. Neurochur. suppl. ,1997 ,58 :81 - 84.

[4] Phillips. J. W ,Leahy. R. M ,Mosher. John C. MEG-Based Imaging of Focal Neuronal Current Sources [J]. IEEE Trans. Biomed. Eng. 1997 , 16(3) :338 - 348.

[5] Wang. J. Z ,Williamson. S. J , Kaufman. L. Magnetic source images determined by a lead-field analysis: the unique minimum-norm least-squares estimation [J]. IEEE Trans Biomed Eng ,1992 ,39(7) :665 - 675.

[6] Mosher. J. C ,Lewis. P. S , Leahy. R. M. Multiple dipole modeling and localization from spatio-temporal MEG data [J]. IEEE Trans Biomed Eng ,1992 ,39(6) :541 - 557.

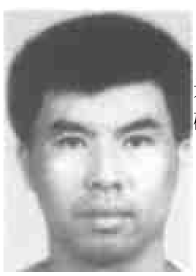
[7] Sekihara. K ,Poeppel. D ,Marantz. A ,et al. Noise covariance incorporated MEG-MUSIC algorithm :a method for multiple-dipole estimation tolerant of the influnence of background brain activity [J]. IEEE ,Trans. Biomed. Eng. 1997 ,44(9) :839 - 847.

[8] Cuffin. B. N. Effects of fissures in the brain on electroencephalograms and magnetoencephalograms [J]. J. Appl. Phys ,1985 ,57(1) :146 - 153.

[9] Uutela. K ,Hamalainen. M ,Salmelin. R. Global Optimization in the Localization of Neuromagnetic Sources [J]. IEEE Trans Biomed Eng , 1998 ,45(6) :716 - 723.

[10] Sarvas. J. Basic mathematical and electromagnetic concepts of the biomagnetic inverse problem [J]. Phys. Med. Biol ,1987 ,32(1) :11 - 22.

作者简介:



李　军　副教授,博士.现在浙江大学现代光学仪器国家重点实验室做博士后,主要从事脑磁图及医学图像重建研究.