

基于加权主成分分析和高斯混合模型的神经元峰电位分类*

剡笑田,王明浩,郭哲俊,陈翔,刘景全

(上海交通大学电子信息与电气工程学院 微纳电子学系 微米/纳米加工技术国家级重点实验室,上海 200240)

摘要: 通过加权主成分分析来对峰电位进行提取特征和降维,再利用高斯混合模型聚类算法对特征进行聚类,实现峰电位分类。采用开放的仿真数据和开放的实测数据分析验证算法的可行性和分类精度,并与主成分分析提取特征的高斯混合模型(GMM)聚类和加权主成分分析提取特征的K均值聚类2种方法进行了比较。仿真数据实验中,在噪声水平为0.05、0.10、0.15、0.20时,误分率分别为1.26%、1.43%、2.32%和3.37%,低于其他2种方法;实测数据实验中,恒河猴数据的平均 J_3 准则值为14.12,与其他2种方法相比,平均 J_3 准则值较大。

关键词: 峰电位分类; 加权主成分分析; 高斯混合模型

中图分类号: TP181; R857.3

文献标识码: A

文章编号: 1000-9787(2020)02-0018-04

Spike potential of nerve cell sorting based on weighted-PCA and Gaussian mixture model*

YAN Xiaotian, WANG Minghao, GUO Zhejun, Chen Xiang, LIU Jingquan

(National Key Laboratory of Science and Technology on Micro/Nano Fabrication, Department of Micro/Nano Electronics, School of Electronic Information and Electrical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The spike signal is extracted by weighted principal component analysis to extract features and to reduce the dimension. The features are clustered by Gaussian mixture model clustering algorithm. Spike sorting is achieved. Open simulation data and open measured data are used to analyze and verify the classification precision and feasibility of the algorithm and compared with the two methods of the Gaussian mixture model(GMM) clustering of the principal component analysis(PCA) and the K-means clustering of weighted PCA. In simulation data experiment, when the noise levels are 0.05, 0.10, 0.15, and 0.20, the misclassification rates are 1.26%, 1.43%, 2.32%, and 3.37%, respectively, which are lower than the other two methods. In the measured data experiment, the average J_3 criterion value of the Rhesus monkey data is 14.12. Compared with the other two methods, the average J_3 criterion value is larger.

Keywords: spike potential sorting; weighted principal component analysis(PCA); Gauss mixture model(GMM)

0 引言

脑机接口(brain computer interface, BCI)技术已经成为电子信息技术与神经科学交叉学科的热点技术^[1],其中一个重要的研究课题是神经解码^[2]。峰电位(spike)即动作电位,是神经元之间传递信息的载体,因此,有必要将植入式微电极阵列记录到的不同神经元的放电活动进行区分,即峰电位分类^[3]。然而在实际实验中,背景噪声等往往会影响神经信号采集,改变峰电位波形,因此加大了峰电位分类的难度^[4]。

峰电位分类的步骤可以概括为,在信号采集之后进行滤波、峰电位信号探测过滤、峰电位信号波形对齐、特征提

取和聚类或分类检测等^[5]。其中,分类结果的好坏非常依赖于特征提取的质量。特征提取的经典方法包括峰电位波形特征的提取,如相位、波宽、幅值或能量^[5-6]等,该方法对于噪声幅度小、波形差异大的峰电位信号分类效果较好,并且效率高、计算简单快速,但是处理波形接近的峰电位信号效果较差;此外,主成分分析(principal component analysis, PCA)^[7]、小波变换^[8]等特征提取方法也得到较广泛应用,但提取的特征的分类性能有明显提高。虽然传统的PCA是一种应用广泛且比较成熟的特征降维方法,但是它对每一维特征以同等权重对待,完全依赖于每一类样本均值,在一些特殊情况下(如数据中含有较强噪声、离群值等),

收稿日期: 2018-10-18

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51475307); 装备预研教育部联合基金资助项目(614A022606)

不能精确地反映样本整体的实际特征情况。

目前常用聚类的方法有 K 均值 (K-means) 聚类^[9]、超顺磁聚类^[10]等,但 K 均值的缺点是需要根据初始聚类中心确定一个初始划分,而且初始聚类中心对聚类结果有很大影响;超顺磁聚类虽然是无监督聚类方法,但计算繁琐、速度较慢。文献[11]提出的适用于多通道信号分类 PCA 与最大最小距离聚类结合的峰电位分类方法,在大鼠海马区采集的峰电位信号的分类中取得了较好的分类效果。高斯混合模型 (Gaussian mixture model, GMM) 在各类尺寸不同、聚类间有相关关系的时可能比 K 均值聚类更合适。使用 GMM 的聚类属于软聚类方法 (一个观测按概率属于各个类,而不是完全属于某个类),各点的后验概率提示了各数据点属于各个类的可能性。使用 GMM 则可以克服上述方法的部分缺点,从而得到更好的聚类效果。

为改进以上问题,本文提出将加权主成分分析 (weighted-PCA, WPCA) 应用到峰电位分类研究中的特征提取步骤。仿真和实测结果显示,本文算法在峰电位分类中,误分率相比传统 PCA 的特征提取方法得到了降低。

1 数据与方法

1.1 峰电位分类

假设在一次实验中,对于给定通道,微电极分别从 C 个神经元处记录到了总共 N 个峰电位信号,其中每个峰电位信号由 M 个采样点组成,即 $X_i = \{x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,M}\} (i = 1, 2, \dots, N)$ 则这 N 个峰电位信号

$$Z = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,M} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \dots & x_{2,M} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \dots & x_{N,M} \end{pmatrix} \quad (1)$$

式中 Z 为 $N \times M$ 矩阵,表示在一次实验中微电极阵列记录到的峰电位波形的信号。

峰电位分类就是利用机器学习的聚类或分类方法将这些探测到未标记的峰电位信号分为不同类别,进而区别不同神经元的放电过程,以此对其活动性加以研究。

1.1.1 PCA 算法和 WPCA 算法

PCA 是一种线性无监督降维方法,通过线性转换,将拥有高维特征的原始数据投影到一个低维坐标空间中,得到一组拥有低维特征的新数据。这种算法在可接受的信息损失下,保留了原始数据的主要信息,且算法保证信息之间不相关,降低原始数据的冗余度,降低后续计算的复杂度。PCA 主要的计算步骤如下。

1) 计算样本 Z 的协方差矩阵

$$S = \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(X_i - \bar{X})^T \quad (2)$$

式中 \bar{X} 为总体样本均值。

2) 根据协方差矩阵求特征向量 u_1, u_2, \dots, u_N 和对应的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ 。

3) 根据降序排列求得的特征值并确定主成分。主成分的个数的确定,由累计贡献率 $D(m)$ 来确定的

$$D(m) = \sum_{i=1}^m \lambda_i / \sum_{i=1}^M \lambda_i \quad (3)$$

WPCA 是对传统 PCA 在计算过程中进行加权处理,即引入权函数 $w(d_{ij})$,其中 d_{ij} 为测度。在数学中测度是一个函数,对于一个给定的集合的某些子集指定一个数,这个数可以是大小、体积、概率等;一般满足非负性、规范性、完全可加性^[12]。测度的定义根据不同的应用而不同,马氏距离和绝对距离在数据降维中通常被使用^[13,14]。本文使用的测度是 $d_{ij} = \max(m_i - m_j)$,其中 m_i 为样本每一类的均值。因为权函数一般为递减函数,在处理样本类间距较近的情况时,会影响正确分类。因此,较大的权重可以有利区分。

对式(2)进行加权,得

$$S = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M w(d_{ij}) (X_i - \bar{X})(X_i - \bar{X})^T \quad (4)$$

式中 \bar{X} 为样本总均值, $w(d_{ij})$ 为权函数 ($d_{ij} = \max(m_i - m_j)$)。

根据文献[13,14]研究和比较不同的权函数,本文取 $w(d_{ij}) = 1/d_{ij}^2$ 进行计算。

1.1.2 GMM

假设峰电位数据集 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ 服从由 K 个高斯分量组成的 GMM,即 K 类。对于单个峰电位样本 x_i ,其高斯混合分布的概率密度函数为

$$P(x_i | \theta) = \sum_{k=1}^K \pi_k N_k(x_i | \mu_k, \sigma_k) \quad (5)$$

式中 π_k 为满足每个高斯成分的先验概率的混合系数,满足

$$\sum_{k=1}^K \pi_k = 1, 0 \leq \pi_k \leq 1 \quad (6)$$

式中 μ_k, σ_k 为各高斯成分的参数,即均值和方差。 $N_k(x_i | \mu_k, \sigma_k)$ 为第 k 个高斯分量的概率密度函数,即 x_i 属于第 k 类的概率,可表示为

$$N_k(x_i | \mu_k, \sigma_k) = \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right) \quad (7)$$

使用期望最大化(expectation maximization, EM)算法,对 GMM 进行非线性概率函数的优化,首先根据分类数目给模型参数赋初值,给出 (μ_k, σ_k) 的初始估计值 (μ_{0k}, σ_{0k}) 。求出参数 $\lambda = (\mu_k, \sigma_k)$,即每一个样本属于第 k 类的概率,由最大后验概率准则可知,后验概率最大的那一类为该样本分类^[8]。

EM 算法通过期望步(E-step)和最大值步(M-step)两步之间进行迭代,进行对参数 (π_k, μ_k, σ_k) 的调整,达到最大

的对数似然函数。

1) E-step: 通过对数似然函数用于计算当前估计和先前估计的差值 $Q(p, p_{old})$ [8] 表示为

$$Q(p, p_{old}) = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K p(k|X_n, p_{old}) \ln \pi_k + \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K p(k|X_n, p_{old}) \ln N_k(X_n | \mu_k, \sigma_k) \quad (8)$$

2) M-step: 使式(8)中的 $Q(p, p_{old})$ 达到最大, 根据式(9)得到新的参数 $(\pi_{k, new}, \mu_{k, new}, \sigma_{k, new})$

$$\begin{cases} \pi_{k, new} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N p(k|X_n, p_{old}) \\ \mu_{k, new} = \sum_{n=1}^N X_n p(k|X_n, p_{old}) / \sum_{n=1}^N p(k|X_n, p_{old}) \\ \sigma_{k, new} = \sum_{n=1}^N (X_n - \mu_{k, new})^2 p(k|X_n, p_{old}) / \sum_{n=1}^N p(k|X_n, p_{old}) \end{cases} \quad (9)$$

新参数可以在另一次的迭代中进行估计和校正, 直到 $Q(p, p_{old})$ 收敛到预定的条件, 从而获得参数 λ 并结束峰电位分类。

1.2 评价指标

1) 误分率: 因归类错误导致的误分样本的数量占样本总个数的比率。本文使用误分率来定量评价峰电位分类算法的性能 [15]。

2) J_3 准则值: 聚类检测中, 类内方差要小, 即每一类的特征值分布在某个尽可能小的区域; 其次类间距离要大, 即不同类之间的特征值分布的区域之间的距离要尽可能远。

1.3 实验数据

采用仿真数据和实测数据验证本文方法的实用性与有效性, 分类精度和实际分类效果, 并与其他特征提取与聚类算法进行了比较。

1) 仿真数据: 本文实验选用了文献[13]的公开的仿真峰电位分类测试数据, 共包含有4组数据, 每组信号中由噪声水平(信号背景噪声的标准差)分别为0.05, 0.10, 0.15, 0.20的4段仿真信号组成, 分别记为data1, data2, data3和data4。每段数据包含有大约3400个峰电位, 分别来自3个神经元发放, 采样频率为24 kHz, 时长为60 s。

2) 实测数据: 为了验证该算法的实用性和实际分类效果, 采用的实测数据为从CRCNS.org(Collaborative Research in Computational Neuroscience-Data sharing)神经数据共享平台提供的恒河猴V1区峰电位信号 [16], 选取其中4组经典数据, 分别记为data5, data6, data7和data8。峰电位信号来自体重为4~5 kg的恒河猴。4组选择的数据包括约32000, 54000, 41000和31000个峰电位, 采样频率为24.4 kHz。

2 结果

图1为一组仿真数据使用不同方法的聚类结果。图中(a)为4个不同噪声水平(分别是0.05, 0.10, 0.15, 0.20)

的仿真数据波形, 显示三类峰电位之间的差异随着噪声水平的增加而减小; 图(b)~(d)分别为3种不同特征提取和聚类方法效果。三种方法分别为WPCA的GMM聚类(WPCA+GMM); 传统PCA的GMM聚类(PCA+GMM); WPCA的K均值聚类(WPCA+K-means)。

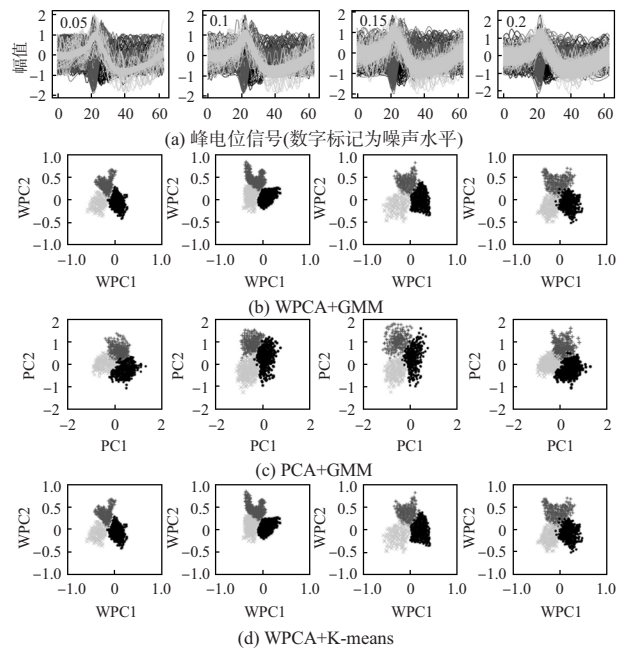


图1 三种特征提取和聚类方法结果对比(仿真数据)

从图1中可以看出3种分类方法中不同峰电位类之间的重叠程度随着噪声水平的增加而逐渐增加, 表现出的差异度变小。相较于本文方法, 其他2种方法的类间距变化较大, 体现出本文方法在分类效果和分类性能上的优势。

表1给出了3种不同分类方法对4组不同噪声水平的仿真数据集的误分率, 精确衡量对比本文算法的分类效果及性能。

表1 3种特征提取和聚类方法的误分率(仿真数据)

噪声水平	方法	误分率/%				平均误分率/%
		Data1	Data2	Data3	Data4	
0.05	WPCA + GMM	0.59	1.23	2.55	0.65	1.26 ± 0.91
	PCA + GMM	3.23	1.66	3.78	0.69	2.34 ± 1.42
	WPCA + k-means	1.01	1.69	3.12	0.59	1.60 ± 1.11
0.10	WPCA + GMM	0.66	1.41	2.96	0.70	1.43 ± 1.08
	PCA + GMM	6.85	2.28	4.22	1.45	3.70 ± 2.40
	WPCA + k-means	1.42	2.25	3.89	1.23	2.19 ± 1.21
0.15	WPCA + GMM	0.96	3.23	3.97	1.11	2.32 ± 1.51
	PCA + GMM	7.65	2.98	5.86	2.57	4.77 ± 2.41
	WPCA + k-means	1.87	3.53	5.02	1.90	3.08 ± 1.51
0.20	WPCA + GMM	1.75	5.12	5.06	1.54	3.37 ± 2.00
	PCA + GMM	8.89	8.73	9.01	3.22	7.46 ± 2.83
	WPCA + k-means	2.03	5.43	6.11	2.85	4.11 ± 1.97

由表1可知3种方法的误分率随着噪声水平的增加, 显示出逐渐升高的趋势。本文方法与其他2种方法比较得

出,在任何噪声水平情况下的误分率均为最低的,分别为 1.26%、1.43%、2.32% 和 3.37%。与图 1 的分类结果所体现出的结论一致。综合图 1 和表 1 所示结果,从特征提取的方面看,与传统 PCA 特征提取方法相比,WPCA 特征提取方法可以有效地提取出具有较大差异的特征,并具有相当的抗噪能力;从聚类的方面看,高斯混合模型算法聚类效果优于经典的 K-means 算法,能有效拟合峰电位波形特征的非高斯分布。

图 2 显示了实测数据使用不同方法的聚类结果。图中 (a) 是实测数据的峰电位信号;(b) 为本方法的聚类结果;(c)~(d) 是其他 2 种不同方法的聚类结果。从分类结果来看,该方法的聚类结果优于其他方法,类间距离较明显,类与类之间重叠很少,与仿真数据得出的结论一致。

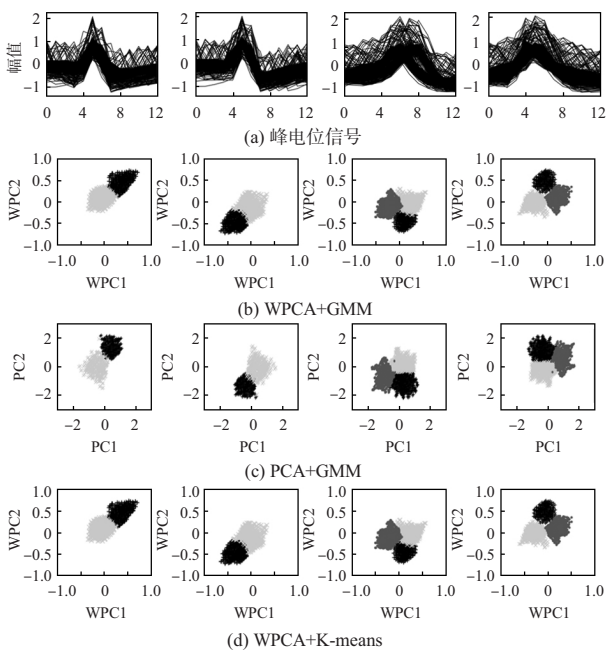


图 2 3 种特征提取和聚类方法结果对比(实测数据)

由于实测数据中不同峰电位信号的分类是未知的,误分率不能衡量实测数据的分类性能,因此 J_3 准则值可以作为类可分性度量指标,对不同分类算法进行评价。表 2 给出了实测数据不同方法的分类 J_3 准则值。由表可知,在平均水平上,本文方法 J_3 准则值高于其他 2 种方法,表现出的类可分性较高。

表 2 3 种特征提取和聚类方法的 J_3 准则值(实测数据)

方法	J_3 准则值				
	Data5	Data6	Data7	Data8	平均值
WPCA + GMM	13.89	14.65	12.55	15.42	14.1275
PCA + GMM	10.31	13.79	10.12	14.35	12.1425
WPCA + K-means	10.70	13.96	11.83	15.31	12.95

3 结 论

基于仿真数据和实测数据的结论,从特征提取和聚类

两方面来看,本文方法的分类效果和分类性能都优于其他方法。WPCA 可以有效体现提取出不同神经元峰电位信号之间的差异,GMM 聚类效果优于经典的 K-means 算法,能有效拟合峰电位波形特征的非高斯分布。

参考文献:

[1] 代建华,章怀坚,张韶岷,等. 大鼠运动皮层神经元集群锋电位时空模式解析[J]. 中国科学, 2009, 39(8): 736-745.

[2] MA N. Brain-machine interfaces to restore motor function and probe neural circuits [J]. Nature Reiview Neuroscience, 2003, 4(5): 417-442.

[3] 祝晓平,王东,陈耀武. 基于提升小波的神经元锋电位并行检测方法[J]. 华南理工大学学报: 自然科学版, 2011, 39(10): 19-25.

[4] 万红,张超,刘新玉,等. 波形特征的高斯混合模型锋电位分类算法[J]. 中国生物医学工程学报, 2016, 35(4): 402-410.

[5] LEWICKI M S. A review of methods for spike sorting: The detection and classification of neural action potentials [J]. Network, 1998, 9(4): R53.

[6] KIM K H, KIM S J. Neural spike sorting under nearly 0 dB signal-to-noise ratio using nonlinear energy operator and artificial neural-network classifier [J]. IEEE Transactions on Bio-medical Engineering, 2000, 47(10): 1406-1411.

[7] 丁伟东,袁景淇,梁培基. 多电极锋电位信号检测与分类方法研究[J]. 仪器仪表学报, 2006, 27(12): 1636-1640.

[8] BESTEL R, DAUS A W, THIELEMAN C. A novel automated spike sorting algorithm with adaptable feature extraction [J]. Journal of Neuroscience Methods, 2012, 211(1): 168-178.

[9] PARASKEVOPOULOU S E, BARSACKIOGLU D Y, SABERI M R et al. Feature extraction using the first and the second derivative extrema (FSDE) for real-time and hardware-efficient spike sorting [J]. Journal of Neuroscience Methods, 2013, 215(1): 29-37.

[10] WILD J, PREKOPCSAK Z, SIEGER T et al. Performance comparison of extracellular spike sorting algorithms for single-channel recordings [J]. Journal of Neuroscience Methods, 2012, 203(2): 369-376.

[11] 王静,封洲燕. 多通道神经元锋电位检测和新方法[J]. 生物化学与生物物理进展, 2009, 36(5): 641-647.

[12] 王德芬,高建强,李莉. 基于中值 PCA 和加权 PCA 数据分类的研究[J]. 信息技术, 2014, 38(2): 14-18.

[13] LIANG Y, LI C, GONG W et al. Uncorrelated linear discriminant analysis based on weighted pairwise Fisher criterion [J]. Pattern Recognition, 2007, 40(12): 3606-3615.

[14] LOTLIKAR R, KOTHARI R. Fractional-step dimensionality reduction [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2000, 22(6): 623-627.

[15] GENG X, HU G. Unsupervised feature selection by kernel density estimation in wavelet-based spike sorting [J]. Biomedical Signal Processing & Control, 2012, 7(2): 112-117.

(下转第 25 页)

规划算法的仿真验证,并通过可视化工具 Rviz 实时显示构图过程,具体步骤如下:

第一步:启动复杂世界环境地图

```
roslaunch turtlebot3_gazebo turtlebot3_world.launch
```

第二步:启动算法程序

```
roslaunch turtlebot3_slam turtlebot3_slam.launch
```

第三步:启动模拟仿真程序

```
roslaunch turtlebot3_gazebo turtlebot3_simulation.launch
```

第四步:保存地图

```
roslaunch map_server map_saver -f ~/map
```

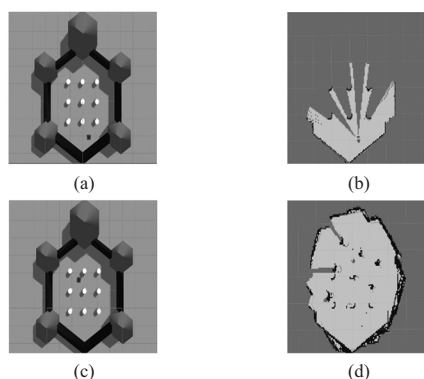


图7 路径规划算法模拟仿真

在复杂世界环境地图中,Turtlebot 3 机器人由右下角起始位置出发,沿着规划出的最优搜索路径向终点移动,并且在移动时躲避掉多个圆柱体障碍物,在这个过程中,机器人有一部分代价花费在原地旋转运动上,此时是在建图、规划路线,最终移动至左上角终点位置。从可视化仿真窗口 Rviz 中可直观地观察到生成的地图,如图 7(b)、(d)所示,对照 3D 模拟环境地图,图 7(a)、(c)所示,整体地图构建精确,中间 9 个圆柱体障碍物的位置清晰可见。仿真结果表明,A* 算法规划全局路径和 DWA 算法制定局部路径相协作,能够在避障的同时找到一条从起始点到目标点的最优路径;代价地图构建精确,保障了智能导航的准确性。

5 结束语

分析研究了全局路径规划 A* 算法和局部路径规划 DWA 算法的结构原理及应用于 ROS 中的程序架构,对 Costmap 在 ROS 中的各种接口关系、构建流程以及机器人

URDF 文件创建、Gazebo3D 环境模型搭建进行研究分析。实现了 Turtlebot3 机器人在 Gazebo 复杂世界地图中的智能导航模拟仿真,并在可视化工具 Rviz 中实时观察建图过程。仿真结果验证了路径导航算法的高效性和创建地图的准确性。

参考文献:

- [1] 崔孔龙,鲁守银,谈金东,等.变电站绝缘设备水冲洗机器人结构优化设计与仿真[J].制造业自动化,2016,38(1):56-58,61.
- [2] 王春颖,刘平,秦洪政.移动机器人的智能路径规划算法综述[J].传感器与微系统,2018,37(8):5-8.
- [3] 郑潇峰.基于 ROS 的移动机器人室内激光导航研究[D].重庆:重庆邮电大学,2017.
- [4] 张鹏,高放,双丰.基于 ROS 的全向移动机器人控制系统的设计与实现[J].组合机床与自动化加工技术,2018(7):89-92,96.
- [5] 赵甜甜,王思明.基于改进 PSO 算法的移动机器人路径规划[J].传感器与微系统,2018,37(2):57-60.
- [6] LI L L, LIN C J, HUANG M L, et al. Mobile robot navigation control using recurrent fuzzy cerebellar model articulation controller based on improved dynamic artificial bee colony [J]. Advances in Mechanical Engineering, 2016, 8(11):1-10.
- [7] 李阳,卢健,何耀帧.基于 ROS 系统自主路径规划与避障小车的研究[J].科技风,2018(4):248.
- [8] 李凌雁,常青,王耀力.室内机器人服务目标避障路径优化仿真[J].计算机仿真,2018,35(1):301-305,336.
- [9] 许玉龙.基于 ROS 的移动机器人建图导航技术研究[D].哈尔滨:哈尔滨工业大学,2017.
- [10] 月黑风高云游诗人.激光 SLAM 导航系列(三) Costmap(代价地图). [EB/OL]. [2017-05-04] <https://blog.csdn.net/lqyg-ame/article/details/71174342>.
- [11] 张瑞雷,刘锦涛.ROS 机器人高效编程[M].3 版.北京:机械工业出版社,2017.

作者简介:

崔 靛(1992-),女,硕士研究生,研究方向为机电系统智能控制,E-mail:970621762@qq.com.

朱学军(1970-),男,通讯作者,教授,硕士研究生导师,研究领域为机电系统智能控制,E-mail:zhuxuejunxu@sina.com.

(上接第 21 页)

- [16] CHU C C J, CHIEN P F, HUNG C P. Tuning dissimilarity explains short distance decline of spontaneous spike correlation in macaque V1 [J]. Vision Research, 2014, 96: 113-132.

作者简介:

剡笑田(1993-),男,硕士研究生,研究方向为植入式脑机接口信号采集系统。

刘景全(1971-),男,通讯作者,教授,博士生导师,主要研究领域为可植入微系统、微能源技术、生物芯片技术,E-mail:jqliu@sjtu.edu.cn.