基于SPM的头动矫正 终期报告

Final Report of Head Motion Correction Project Based on SPM

Abstract

Introduction

Materials & Methods

SPM头动矫正的原理

坐标系转换 & 刚体变换

高斯牛顿迭代算法 & 插值

重采样

高斯平滑

矫正的另一种实现方法: Pytorch Optimizer

Material

Result

Reflection

Reference

Abstract

头部运动矫正的目标是将实验序列中的每一帧图像与第一帧图像/平均图像按照一定的算法 精确对齐。如果运动程度位于可容许的范围内,可以使用一定的算法矫正信号,使其靠近真 实值。如果超过范围,则必须剔除这组数据。

我们的项目将使用Python语言,实现SPM软件包中spm_realign.m的主要功能,即用于fMRI 图像数据处理的头部运动矫正算法。我们将以Matlab代码和相关论文为思路参考,深入学 习并理解核心原理,如高斯牛顿迭代算法、最小二乘法,从原理层面构建Python相应代 码。

Introduction

磁共振成像 (MRI) 是一种广泛使用的非侵入性研究人脑结构和功能的方法。而MRI可依据其功能与原理上的差异分类为结构性核磁共振 (sMRI),功能性核磁共振 (fMRI)等。

由于fMRI极长的扫描时间,较多的测量次数和较高的运动灵敏度,图像质量通常会受到对象不自主运动的限制。即使被试的头部被固定,在实验过程中,被试也会不由自主地产生一些轻微的头部运动,被试的呼吸、血流脉动等生理因素也会造成头部运动。诸如此类的系统误差虽然微小,也会导致信号处理上显著的区别。此外,在统计处理时所用的t检验与残差平方和相关,残差平方和是数据与其适配的线性模型的方差和;头部运动会增加残差平方和,降低t检验函数的敏感度。因此需要采取适当的办法来消除它的影响,即我们所研究的头部运动矫正算法。

矫正头部运动的主流做法是采用在 Matlab 基础上开发的统计参数图软件包(statistical parametric mapping, SPM)。 SPM软件包采用了统计的方法,可处理 fMRI,PET 和 SPECT 的数据,功能强大且全面。SPM对不同类型数据的头动矫正处理原理基本一致,其中对 fMRI时间序列数据的处理过程是最为复杂的,并能解决对其他类型数据分析的多数问题。

当下,多种与生物医学领域息息相关的算法均使用Python语言实现,例如OpenEIT、MONAI;而SPM软件包处理三维图像的功能仍只能使用Matlab语言。因而,我们想通过本项目,结合运用课堂所学的知识,用Python语言实现SPM的该功能,对fMRI图像完成头动矫正基本过程,并实现了第二种方法:使用Pytorch Optimizer 完成高斯牛顿迭代算法。

Materials & Methods

SPM头动矫正的原理

SPM软件包头动矫正原理的提出,是以数据实际的物理意义为依据的。假定头动只存在平移运动和旋转运动,不存在头部的形变,则可用刚体运动来描叙。之后使用高斯牛顿迭代算法得到优化的刚体变换参数,用B样条插值算法对须矫正的图像进行重采样得到矫正后图像,实现图像序列的头动矫正,并以残差图和残差平方和的方法评价头动矫正效果,限制迭代次数。

头动矫正分为求解矫正参数和重切片2个步骤。首先将头动矫正问题转化为旋转平移参数求解问题,并用高斯牛顿迭代算法进行参数求解,生成矫正后坐标,最后用B样条插值重采样进行三维图像的重切片。

此处需要补充说明的是,我们主要参考文献的分析对象为SPM2,与最新版本的SPM12在原理和实际参数上略有差异。

坐标系转换 & 刚体变换

可假设被试头部的物理运动形式为平移运动和旋转运动,没有产生结构间相对位置的改变,这种运动被称为刚体运动。在获得的两卷图像之间进行头动矫正的匹配,首先需要计算描述刚体变换的参数。

不妨设:资源图像 f (头动偏移图像,需对齐的图像),靶图像 g (被对齐的目标图像) (我们的代码中默认为第一张图像)。

定义刚体变换向量为: $\overrightarrow{\mathbf{q}} = (q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6, q_7)$ 。其中 q_1, q_2, q_3 ,依次代表头部沿x,y,z坐标轴的平移量大小; q_4, q_5, q_6 依次代表头部绕x,y,z坐标轴的旋转度大小,为平衡两卷图像的灰度引入灰度平衡参数 q_7 (我们的代码默认 q_7 为1)。

为了保证各向同性,将体素坐标转换为笛卡尔坐标来进行运算。如:一卷图像f大小为: $64\times64\times30$ 体素,每个体素的实际大小为: $3.125\times3.125\times4.8~mm^3$,那么从体素坐标到笛卡尔坐标的转换矩阵为:

$$\mathrm{M}_f = egin{bmatrix} 3.125 & 0 & 0 & -103.13 \ 0 & 3.125 & 0 & -84.357 \ 0 & 0 & 4.8 & -62.4 \ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

其中右边的一列是将坐标原点移到图像中心。

若要将资源图像 f 对齐到靶图像 g ,需先将体素坐标(g, f)转换为笛卡尔坐标(G, F),再进行后续矩阵计算。

$$\mathrm{G} = M_g g \ \mathrm{F} = M_f f$$

在笛卡尔坐标系下, 求解各变换矩阵。

若点 $x(x_1,x_2,x_3)$ 沿向量 $q_t(q_1,q_2,q_3)$ 平移到点 $y(y_1,y_2,y_3)$:

$$y = x + q$$

则写成矩阵形式为:

$$egin{bmatrix} y_1 \ y_2 \ y_3 \ 1 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & q_1 \ 0 & 1 & 0 & q_2 \ 0 & 0 & 1 & q_3 \ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} egin{bmatrix} x_1 \ x_2 \ x_3 \ 1 \end{bmatrix}$$

其中,
$$T=egin{bmatrix}1&0&0&q_1\0&1&0&q_2\0&0&1&q_3\0&0&0&1\end{bmatrix}$$
为平移变换矩阵。

若点 $x(x_1,x_2,x_3)$ 绕坐标轴x旋转角度 q_4 ,得到点 $y(y_1,y_2,y_3)$:,则

$$egin{bmatrix} y_1 \ y_2 \ y_3 \ 1 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \ 0 & \cos{(q_4)} & \sin{(q_4)} & 0 \ 0 & -\sin{(q_4)} & \cos{(q_4)} & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} egin{bmatrix} x_1 \ x_2 \ x_3 \ 1 \end{bmatrix}$$

其中,

$$R_x = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \ 0 & \cos{(\mathrm{q_4})} & \sin{(\mathrm{q_4})} & 0 \ 0 & -\sin{(\mathrm{q_4})} & \cos{(\mathrm{q_4})} & 0 \ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

为绕x轴的旋转变换矩阵。

类似,得到
$$R_y = \begin{bmatrix} \cos{(q_5)} & 0 & \sin{(q_5)} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\sin{(q_5)} & 0 & \cos{(q_5)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
与 $R_z = \begin{bmatrix} \cos{(q_6)} & \sin{(q_6)} & 0 & 0 \\ -\sin{(q_6)} & \cos{(q_6)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

分别为绕y轴z轴的旋转变换矩阵。

由此得到旋转变换矩阵: $R = R_x R_y R_Z$

经过以上的推导,得到刚体变换矩阵为 $M_r = TR$ 。

因此,点 $x(x_1,x_2,x_3)$ 经过刚体变换位移至点 $y(y_1,y_2,y_3)$ 的过程可用矩阵运算表示,即:

$$y=M_r x \ egin{bmatrix} y_1 \ y_2 \ y_3 \ 1 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} egin{bmatrix} x_1 \ x_2 \ x_3 \ 1 \end{bmatrix}$$

综上,得到头动矫正中的刚体变换公式为:

$$\mathrm{g}=M_g^{-1}M_rM_ff$$

iਟ $M=M_{q}^{-1}M_{r}M_{f}$

高斯牛顿迭代算法 & 插值

建立刚体变换模型之后,头动矫正的配准即可化归为刚体变换向量

 $\overrightarrow{\mathbf{q}} = (q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6, q_7)$ 确定,而求解 $q_1, q_2, \dots q_6$ 这些独立未知参数需使用高斯牛顿 迭代算法。

经过上述步骤后,在理想情况下,参考图像g中的体素 x_i 与资源图像f中的体素 Mx_i 灰度值相同,但是由于体素坐标的独立性、头动中的非刚体运动等因素,二者不能达到完全一致,因此只能使两者的相似性达到最大。SPM 采用差值平方和作为测度,通过高斯牛顿迭代法使其最小化,过程如下:

定义目标函数为:

$$\mathrm{E}^{2}=\sum_{i}\left(f\left(Mx_{i}
ight) -q_{7}\cdot g\left(x_{i}
ight)
ight) ^{2}$$

其中,f(*)表示资源图像的灰度值,g(*)表示参考图像的灰度值, q_7 为 灰度平衡参数。

由于M与 $\overrightarrow{\mathbf{q}}$ 相关,令 $\mathbf{b}_{\mathbf{i}}(\overrightarrow{\mathbf{q}}) = f(Mx_i) - q_7 \cdot g(x_i)$ 当 $\overrightarrow{\mathbf{q}}$ 增加步长 $\overrightarrow{\mathbf{t}}$ 时,将 $b_i(\overrightarrow{\mathbf{q}} - \overrightarrow{\mathbf{t}})$ 在 $\overrightarrow{\mathbf{q}}$ 处泰勒展开并保留一阶近似时,目标函数可转化为:

$$\mathrm{E}^2 = \sum_i \left(\mathbf{b}_\mathrm{i} (\overrightarrow{\mathbf{q}} - \overrightarrow{\mathrm{t}})
ight)^2$$

 \rightarrow \mathbf{t} 的选取应该使目标函数 E^2 达到最小,也即所有体素的公式都趋近于 $\mathbf{0}$ 。将上式写为矩阵形式:

$$egin{bmatrix} rac{\partial b_1(ar{q})}{\partial q_1} & rac{\partial b_1(ar{q})}{\partial q_2} & \cdots & rac{\partial b_1(ar{q})}{\partial q_7} \ rac{\partial b_2(ar{q})}{\partial q_1} & rac{\partial b_2(ar{q})}{\partial q_2} & \cdots & rac{\partial b_2(ar{q})}{\partial q_7} \ dots & dots & dots & dots & dots \ dots & dots & dots & dots & dots \ dots & dots & dots & dots \ dots & dots & dots & dots \ dots & dots & dots \ dots & dots \ dots & dots \ dots & dots & dots \ dots & dots \ dots & dots \ dots & dots \ dots \ dots \ dots & dots \ dots \ dots \ dots \ dots & dots \ dots \ dots \ dots \ dots & dots \ \ dots \ dots \ dots \ dots \ dots \ \ dots \ dots \ dots \ dots \ \ \ \ \ \ \ \$$

记为 $A\vec{t}\cong b$,则步长 \vec{t} 由最小二乘估计可求得 $\vec{t}=\left(A^TA\right)^{-1}A^Tb$

可建立迭代方程,第n+1次迭代的 \overrightarrow{q} 为:

$$ec{q}^{(ext{n}+1)} = ec{q}^{(ext{n})} - ec{t} = ec{q}^{(ext{n})} - ig(A^T Aig)^{-1} A^T b$$

当差值平方和函数趋于平缓或达到指定的迭代次数 N_{th} 时迭代结束,此时的 $\overrightarrow{\mathbf{q}}$ 即为最佳的刚体变换参数。

在目标函数中, Mx_i 算出的体素坐标不一定是整数,由于体素的离散性,在这种情况下找不到对应坐标的灰度值,因此对于每一张图像,在开始迭代前需要先算出插值函数,在每次迭代时计算出所需的非整数位置的灰度值。SPM软件包采用插值函数中的B样条插值。

重采样

刚体变换及其参数求解的过程对坐标轴进行了旋转和平移。因此原先为了方便后期计算,还 要进行参考图像与资源图像坐标系的统一,即要在参考图像的坐标系下对配准图像进行重采 样,计算图像矫正后图像各体素的象素值。 在实际图像的处理中,如上述,已知靶图像g,资源图像f,和将f对齐到g的坐标变换矩阵 M。先构造一卷空的头动矫正后的图像rf,再逐体素的将rf反变换到f,在f中插值得到当前rf 的灰度值。这样就完成了头动矫正的重采样,得到头动矫正后图像rf。

我们的代码选择B样条插值函数为插值方式, 初始默认阶数n = 3.

高斯平滑

我们就代码的优化问题通过邮件咨询SPM原作者,得到了进行平滑处理等的建议。原信件相关内容如下:

After downloading SPM2, I see that the images were smoothed by 5mm in memory and samples every 4 mm to make realignment go faster. In SPM12, it smooths by only 2 mm and samples about every 2 mm. The smoothing is mostly included so that information is not lost because of only sampling every few voxels, but it also makes Gauss-Newton work more effectively (but also increases the influence of changing bold signal on the estimated parameters).

因而,我们使用了Scipy库中的ndimage.gaussian filter函数。

高斯滤波(Gaussian filter) 根据通带频率的不同而分为多种。此处图像层面的高斯滤波属于高斯低通滤波,因而滤除图像高频成分而保留低频成分(图像平滑区域),对于抑制高斯噪声(服从正态分布的噪声)非常有效。所以处理后,图像的噪点会减少,而副作用则是略显模糊。

其基本原理为:取以每个像素点为中心,相邻区域内像素灰度值的加权平均,作为中心点的灰度值。距离越近的点权重越大,距离越远的点权重越小。其具体权重分配模式为正态分布,即高斯函数(二维形式),如下。

$$G(x,y)=rac{1}{2\pi\sigma^2}e^{-rac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$$

其本质为利用高斯函数生成的高斯核对图像进行卷积操作。

Scipy库的相关文档关于参数 σ 的具体解释如下。

sigma: scalar or sequence of scalars

Standard deviation for Gaussian kernel.(高斯核的标准差) The standard deviations of the Gaussian filter are given for each axis as a sequence, or as a single number, in which case it is equal for all axes.

我们的代码中,将其设置为正整数。

在实际代码运行中,我们发现:在重采样中对图像先进行高斯平滑处理能较大程度地改善图像。

矫正的另一种实现方法: Pytorch Optimizer

刚体变换参数向量的求解是一个以寻找损失函数的最小值点为目标的优化问题。我们使用B样条插值函数对刚体变换的图形进行插值,而Pytorch Optimizer提供了可自定义的优化算法,目前没有其他库具备求解刚体变换的B样条插值算法中各导数的功能。所以我们使用pytorch提供的插值算法,与pytorch autograd(自动求导),更改pytorch 内部的forward和backward函数。Pytorch有详细的官方文档可供参考,同时也提供了多种API接口,具有较高的调整自由度;这些优势使得我们选择使用Pytorch Optimizer。

补充介绍优化器(Optimizer)的概念:在深度学习反向传播过程中,优化器指导损失函数(目标函数)的各参数向正确的方向更新,使得损失函数的输出值不断逼近全局最小。优化方向决定"前进的方向是否正确",在优化器中反映为梯度或动量。步长决定"每一步迈多远",在优化器中反映为学习率。

Material

- 编程语言: Python。
- 涉及到的Python库: Numpy、Matplotlib、Scipy、Nibabel、Pytorch、PyQt5、ITK。
- 数据来源:课程提供的示例数据

Result

我们的代码涉及多个可调参数,主要为:

- 迭代步长(step)
- 迭代次数(iteration)
- B样条插值函数的阶数(order)

- σ (高斯核的标准差) (standard deviation for Gaussian kernel)
- α (迭代过程的收敛系数) (the parameter of constriction during iteration)
- β (每张图的初始缩小系数) (the initial reduction parameter of every graph)

关于参数的说明:

迭代次数即高斯牛顿迭代算法循环迭代次数。由于残差平方和并非随迭代次数增加而减小,且受到运行时长限制,故需对迭代次数进行直接限制。通过运行可知,当迭代次数 <= 5 时,时长较短;此后运行时长随迭代次数增加而增大。我们建议将迭代次数限制在20以下。

迭代步长为迭代过程中每次循环对应于图像中越过的距离,由于代码中已经过坐标系换算,故步长为实际单位大小。理论而言,迭代步长越小,图像结果将越精准,而运行时长将拉长。依据SPM原作者的建议,我们推荐设置步长 = 2(单位为毫米)(与SPM12维持一致)。也欢迎针对具体图像情况的具体调整。

B样条插值阶数可调范围基本为2~6.

易知,图像结果精确程度与运行时长之间存在权衡(tradeoff)。因而,考虑到时长问题, 在步长较短的情况下,可优先调低迭代次数。

由于添加了高斯平滑,参数 σ (高斯核的标准差)同样可调。 σ 的值越大,正态分布的值越分散,不同的点的像素灰度值的权重之差越小,越接近于对相邻区域内灰度值取平均。依据SPM原作者的建议,我们推荐设置 $\sigma=2$ (单位为毫米)(与SPM12维持一致)。

为了优化迭代结果,增加迭代的收敛性,我们尝试在迭代循环中计算刚体变换参数向量时添加参数,即迭代过程的收敛系数 α (α 在0,1之间,初始值为1)。我们又在每张图像计算刚体变换参数向量之前添加参数,即每张图的初始缩小系数 β (β 大于1,初始值为1.2)。通过运行可知,我们建议 β 应小于2.5.

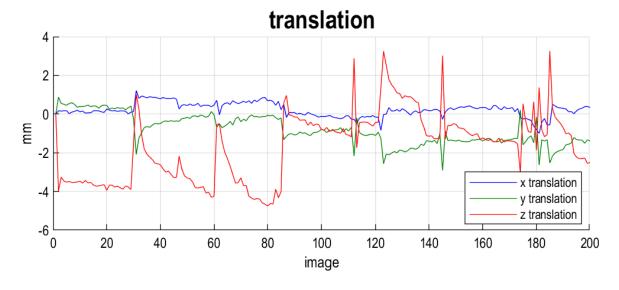
运行结果范例:

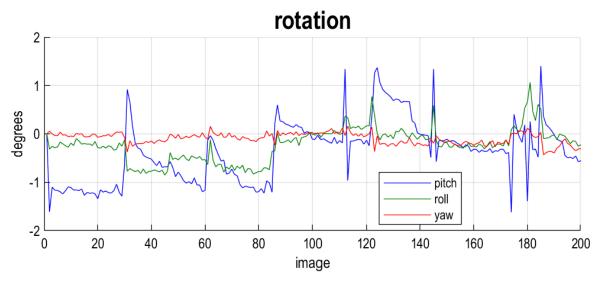
fMRI文件: sub-Ey153 ses-3 task-rest acq-EPI run-1 bold.nii.gz

结果展示方式:由于SPM中并无衡量矫正效果的参数指标,直接评估重采样后图像略乏准确性,我们采用对比刚体变换参数向量曲线的方法,如下列图片所示。上方图片展示 q_1,q_2,q_3 ,即头部沿x, y, z坐标轴的平移量大小;下方图片展示 q_4,q_5,q_6 即头部绕x, y, z 坐标轴的旋转度大小。

SPM12运行结果如下:

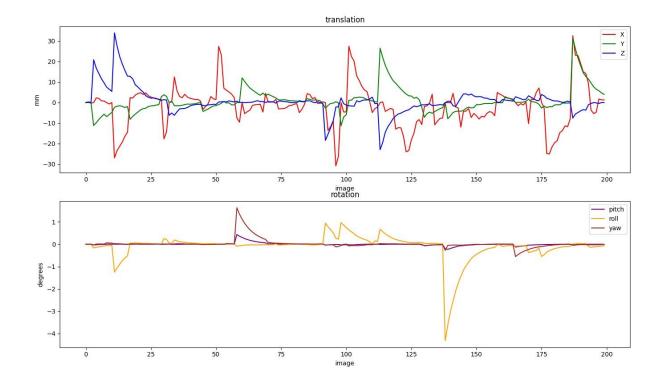
当插值阶数为3时:





可见,在一定范围内,B样条插值阶数的变化并不会显著影响矫正参数的求解。

设定: step = 4, iteration = 1, order = 2, σ = 2, α = 1, β = 1.2



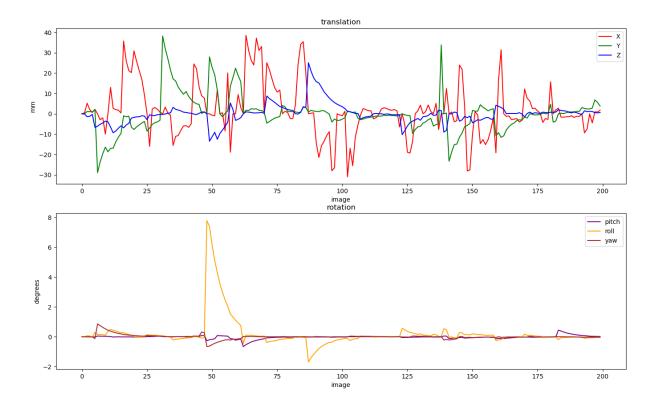
结果较为贴合。

此后依据SPM原作者建议,恒定设置step = 2, σ = 2

当iteration = 2, order = 3, α = 1, β = 1.2 时,效果较不理想。

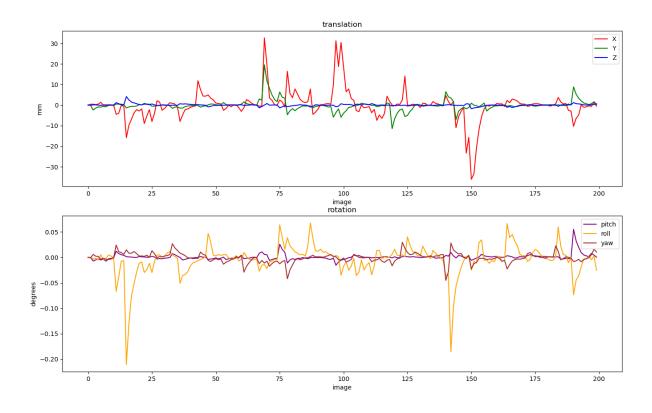
调整参数 α , β 可进一步优化刚体变换向量。

改变 α = 0.3:



相较于 α = 1的结果, 平移值的极值分布更为合理。

进一步修改参数,使得 $\alpha = 0.15$, $\beta = 1.65$ 。



曲线峰值更加明显,更符合实际头动偏移情况。对比可知,此组数据,即step = 2, σ = 2, iteration = 2, order = 3, α = 0.15, β = 1.65, 矫正效果较为良好。

Reflection

- 1. 根据SPM原作者的回复,可知还存在几种优化算法,由于项目时间限制无法探索, 具体为:
 - SVR(slice to volume registration),为2D-3D配准的一种;不同于需要将图像引入维度的大多数的配准算法,SVR直接将像素和体素比较。它已被用于胎体和胎盘MRI的运动矫正。
 - 在3T及以上的高磁场中存在EPI(epipolar plane image)失真,该问题 是由外加磁场的不均匀性引起的。不均匀的磁场会破坏空间编码梯度,导 致靠近空气 - 组织界面的区域出现局部几何变形和信号丢失。相应的矫正 方法为三维反向相位编码矫正等。
- 2. 在SPM中,高斯牛顿迭代算法的设置为:差值平方和差异的连续三次迭代相对减少小于10⁻⁸,迭代停止;或者迭代至64次。由于运行速度的问题,我们采用直接设定迭代次数和添加相关参数的方法。若时间充裕,还可探索用Python实现SPM原始高斯牛顿迭代算法的设置的可行性。
- 3. 由于ITK库的某些特质,部分数据输入代码后无法进行正常的头动矫正。其中的原因仍然有待深究。

Reference

《SPM软件包头动矫正原理的分析与评价 王超》

《基于SPM的脑功能磁共振图像头动矫正算法研究 夏维亚》

《图像配准算法及其在功能磁共振图像预处理中的研究 戴和谱》

《STATISTICAL PARAMETRIC MAPPING 1 100 translate》

SPM工具包

torch.optim — PyTorch 1.13 documentation

切片到体积医学图像配准: 一项调查 - ScienceDirect

高磁场下大脑定量MRI的EPI失真矫正方法评估 - ScienceDirect