

基于分数的加速 MRI 扩散模型

林扬

摘要

基于分数的扩散模型提供了一种使用数据分布梯度对图像进行建模的强大方法。利用学习到的分数函数作为先验函数，这是一种从给定测量值的条件分布中采样数据的方法，以便该模型可以很容易地用于解决成像中的逆问题，特别是用于加速 MRI。简言之，通过训练了一个连续的时间相关的分数函数和去噪分数匹配。然后，在推理阶段，在数值 SDE 求解器和数据一致性步骤之间迭代以实现重构。模型只需要用于训练的图像，但能够重建复杂值数据，甚至可以扩展到并行成像。通过大量的实验验证了 score-MRI 方法在质量和实用性方面的优越性。

关键词：基于分数模型；扩散模型；逆问题；MRI；去噪扩散模型。

1 引言

近年来，磁共振成像（MRI）的亚采样测量重建方法取得了很大进展。正则化重建方法利用手工制作的先验数据的稀疏性以及数据的一致性来得出解决方案，但先验的构造是十分重要的，并且没有一种方法能够正确地建模 MRI 扫描的实际复杂数据分布 p_{data} 。数据驱动的深度学习方法可以直接或间接训练模型，但这些方法严重依赖于精心策划的 k 空间数据大型数据库的监督，这很难获得。

最近，基于分数的模型^[1]和去噪扩散概率模型（DDPM）^[2-3]作为一种新的生成模型获得了广泛的兴趣，这种模型在没有对抗性训练^[4]的情况下实现了惊人的高样本质量。在许多著作中，Song 等人将离散分数匹配程序一般化为连续随机微分方程（SDE）^[5-6]，事实上，该方程也将扩散模型纳入同一框架。基于分数的 SDE 作为基于分数的扩散模型，强调 score-MRI 方法^[7]可以灵活地用于两个模型类的任何实现：基于分数的生成模型和扩散模型。

基于分数的扩散模型根据前向 SDE 通过注入高斯噪声来扰动数据分布，从而获得可处理的分布（例如各向同性高斯分布）。为了从数据分布中采样，可以训练神经网络来估计对数数据分布的梯度（即 $\nabla_x \log p_t(x)$ ），并使用它数值求解反向 SDE。使用这些基于分数的扩散模型从 $p(x)$ 无条件生成样本已发现其在图像、音频和偶数图合成中的应用。在众所周知的计算机视觉问题背景下，也研究了 $p(x|y)$ 的条件生成：图像补全、超分辨率和图像编辑。

2 相关工作

扩散模型是一类概率生成模型，它可以通过添加不同尺度的噪声来学习反向逐步退化训练数据结构的过程。相关工作涉及两种扩散模型的公式，即去噪扩散概率模型^[2]、基于分数模型的 SDE^[1]的方法。每个公式描述了向数据添加噪声的过程，学习反转这个过程的方法，以及在推理时如何生成新的样本。

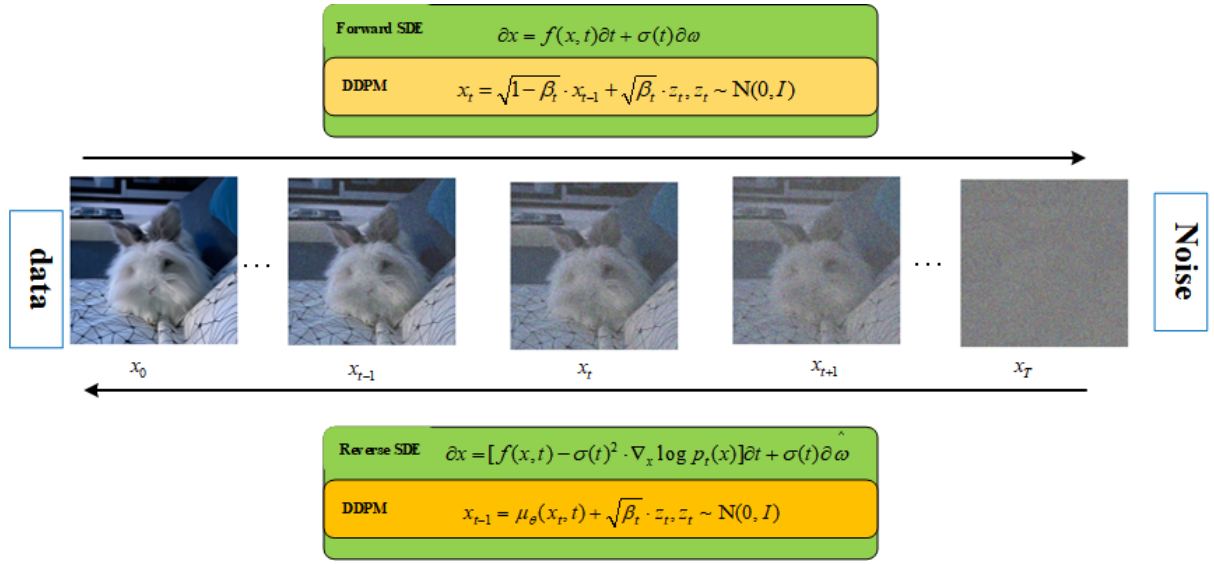


图 1: 扩散模型通用框架

2.1 基于分数的 SDE

可以用 $x(t)$ 构造一个连续扩散过程 $x(t)_{t=0}^T \in R^n$, 其中 $t \in [0, T]$ 是级数的时间索引, n 表示图像维度。我们选择 $x(0) \sim p_{data}$ 和 $x(T) \sim p_T$, 其中 p_{data} , p_T 分别指感兴趣的数据分布和可用于采样的先验分布 (例如球形高斯分布)。然后, 可以将随机过程构造为以下 SDE 的解:

$$dx = f(x, t)dt + g(t)dw \quad (1)$$

可以通过为 f 和 g 选择不同的函数来构造不同的 SDE:

$$f = -\frac{1}{2}\beta(t)x, \quad g = \sqrt{\beta(t)} \quad (2)$$

其中 $0 < \beta(t) < 1$ 是噪声尺度的单调递增函数, 可以实现方差保持 (VP)-SDE。在这种情况下, 信号的幅值衰减为 0, 方差保持为固定常数 $t \rightarrow \infty$ 。事实上, 方差保持 (VP)-SDE 可以被视为 DDPM 的连续版本。因此, 虽然 DDPM 是在一个单独的变分框架中开发的, 但它也可以被视为 SDE 的一个真实化。

另一方面, 方差爆炸 (VE)SDE 选择:

$$f = 0, \quad g = \sqrt{\frac{d[\sigma^2(t)]}{dt}} \quad (3)$$

其中 $\sigma(t) > 0$ 再次是单调递增函数, 通常选择为几何级数。与 VP-SDE 不同, VE-SDE 以非常大的方差扩散信号, 随着时间的推移 $t \rightarrow \infty$, 因此得名。

(1) 的逆过程可以用另一个随机过程构建:

$$\begin{aligned} dx &= [f(x, t) - g(t)^2 \underbrace{\nabla_x \log p_t(x)}_{\text{score function}}]dt + g(t)d\bar{w} \\ &= \frac{d[\sigma^2(t)]}{dt} \underbrace{\nabla_x \log p_t(x)}_{\text{score function}} + \sqrt{\frac{d[\sigma^2(t)]}{dt}}d\bar{w}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 dt 是无穷小的负时间步长, 而 \bar{w} 又是标准 n - 维度布朗运动向后运行。

可以使用去噪分数匹配, 在这里替换未知 $\nabla_x \log p_t(x)$ 与 $\nabla_x \log p_{0t}(x(t)|x(0))$, 其中 p_{0t} 是高斯摄动核, 它摄动概率密度 $p_0(x)$ 到 $p_t(x)$ 。在某些正则性条件下, 用去噪分数匹配训练的 s 将满足 $s_{\theta^\square}(x(t), t) = \nabla_x \log p_t(x)$ 。

$$\min_{\theta} \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} [\lambda(t) \mathbb{E}_{x(0)} \mathbb{E}_{x(t)|x(0)} [\|s_{\theta}(\mathbf{x}(t), t) - \nabla_x \log p_{0t}(\mathbf{x}(t) | \mathbf{x}(0))\|_2^2]] \quad (5)$$

一旦用 (5) 训练网络, 就可以插入近似 $s(x(t), t) \simeq \nabla_x \log p_t(x(t))$ 来求解等式 (4) 中的反向 SDE:

$$d\mathbf{x} \simeq -\frac{d[\sigma^2(t)]}{dt} \mathbf{s}_{\theta^*}(\mathbf{x}(t), t) dt + \sqrt{\frac{d[\sigma^2(t)]}{dt}} d\bar{\mathbf{w}} \quad (6)$$

然后, 可以用数值方法求解 SDE, 将范围 $[0, 1]$ 中的 t 均匀地分解为 N 个区间, 使得 $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = 1$, 其中 $\Delta t = 1/N$ 。此外可以使用校正算法校正梯度上升的方向。迭代应用预测器和校正器步骤产生预测器-校正器 (PC) 采样算法。

2.2 去噪扩散模型 (DDPM)

前向过程: DDPM 将前向扩散过程定义为马尔可夫链, 其中在连续步骤中添加高斯噪声以获得一组噪声样本。考虑 $q(x_0)$ 作为未损坏 (原始) 数据分布。给定数据样本 $x_0 \sim q(x_0)$, 通过在时间 t 添加高斯噪声产生潜在 x_1 到 x_T 的前向噪声处理 p 定义如下:

$$p(\mathbf{x}_T, \mathbf{x}_{T-1}, \dots, \mathbf{x}_0) = p(\mathbf{x}_T) \prod_{t=1}^T p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t), \quad (7)$$

其中 T 和 $\beta_1, \dots, \beta_T \in [0, 1)$ 分别表示扩散步骤的数量和扩散步骤之间的方差表。 I 是单位矩阵, $\mathcal{N}(x; \mu, \sigma)$ 表示均值 μ 和协方差 σ 的正态分布。考虑到 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 和 $\alpha_t = \prod_{s=0}^t \alpha_s$, 可以直接对输入 x_0 上的噪声潜像的任意步骤进行采样, 如下所示:

$$q(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t} \mathbf{x}_0, (1 - \bar{\alpha}_t) \mathbf{I}) \quad (8)$$

$$\mathbf{x}_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t} \mathbf{x}_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t} \varepsilon \quad (9)$$

反向过程: 利用上述定义, 可以近似逆过程从 $q(x_0)$ 获得样本。为此可以从 $p(x_T) = \mathcal{N}(x_T; 0, I)$ 开始参数化这个反向过程, 如下所示:

$$p_{\theta}(\mathbf{x}_{0:T}) = p(\mathbf{x}_T) \prod_{t=1}^T p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t) \quad (10)$$

$$p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \mu_{\theta}(\mathbf{x}_t, t), \Sigma_{\theta}(\mathbf{x}_t, t)) \quad (11)$$

为了训练该模型, 使 $p(x_0)$ 学习真实数据分布 $q(x_0)$, 可以优化负对数似然上的以下变分界限:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[-\log p_{\theta}(\mathbf{x}_0)] &\leq \mathbb{E}_q \left[-\log \frac{p_{\theta}(\mathbf{x}_{0:T})}{q(\mathbf{x}_{1:T} | \mathbf{x}_0)} \right] \\ &= \mathbb{E}_q \left[-\log p(\mathbf{x}_T) - \sum_{t \geq 1} \log \frac{p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t)}{q(\mathbf{x}_t | \mathbf{x}_{t-1})} \right] \\ &= -L_{\text{VL-B}} \end{aligned} \quad (12)$$

也可以不要将 $\mu_{\theta}(x_t, t)$ 直接参数化为神经网络, 而是训练模型 $\varepsilon_{\theta}(x_t, t)$ 来预测 ε 。因此, 通过重新参数化方程 (12), 有一个简化的目标, 如下所示:

$$L_{\text{simple}} = E_{t, x_0, \varepsilon} [\|\varepsilon - \varepsilon_{\theta}(x_t, t)\|^2] \quad (13)$$

3 本文方法

3.1 本文方法概述

一个普遍适用于解决成像中的逆问题的框架, 特别是针对 MRI 重建任务。值得注意的是, score-MRI 方法^[7]只需要使用幅度图像训练单个分数函数。使用去噪分数匹配损失的训练分数模型, 从方差爆炸 SDE 构建了反向 SDE 的求解器, 这使得能够从分布 $p(x|y)$ 测量 y 为条件。这是通过无条件更

新步骤之后的每次迭代中强制执行数据一致性步骤来完成的。方法如图 2 所示。从先验分布抽样的 x_T 开始，通过在更新步骤和数据一致性步骤之间交替进行基于分数的抽样来求解反向 SDE^[8]，从而达到 x_0 。

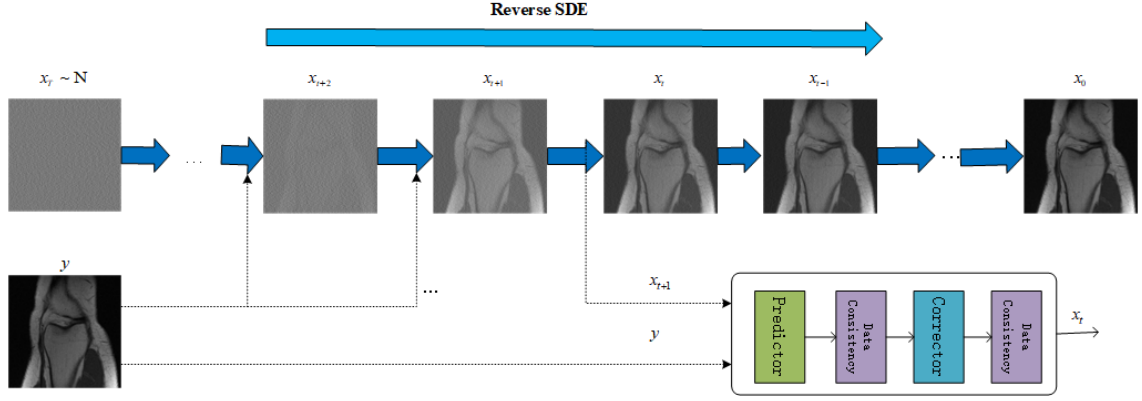


图 2: 方法示意图

3.2 网络架构详解

如图 3 所示，网络架构主要是用于构造分数函数 s_θ 的 ncsnpp 网络架构^[9]，该网络将 x_t 和 t 作为输入。由于求解的是一个连续的 SDE，所以附加的时间调节变量很重要。对于时间条件 t ，它通过时间调节模块中高斯傅里叶投影 (GFP)，然后，嵌入向量通过几层 MLP 来匹配输入图像特征的通道维大小。最后，将时域特征向量在 H、W 维上进行广播，通过每一层的残差块添加到图像特征中。(a) 整体 U-Net 类结构^[9]，由 BigGAN 残差块 (RB) 和注意力块组成。附加 t 与时间调节块合并，输出的 t 影响所有残差块。(b) ncsnpp 的基本组成部分。(c) 时间调节模块^[10]，采用高斯傅里叶投影 (GFP) 模块。(d) 绿色模块的详细说明。

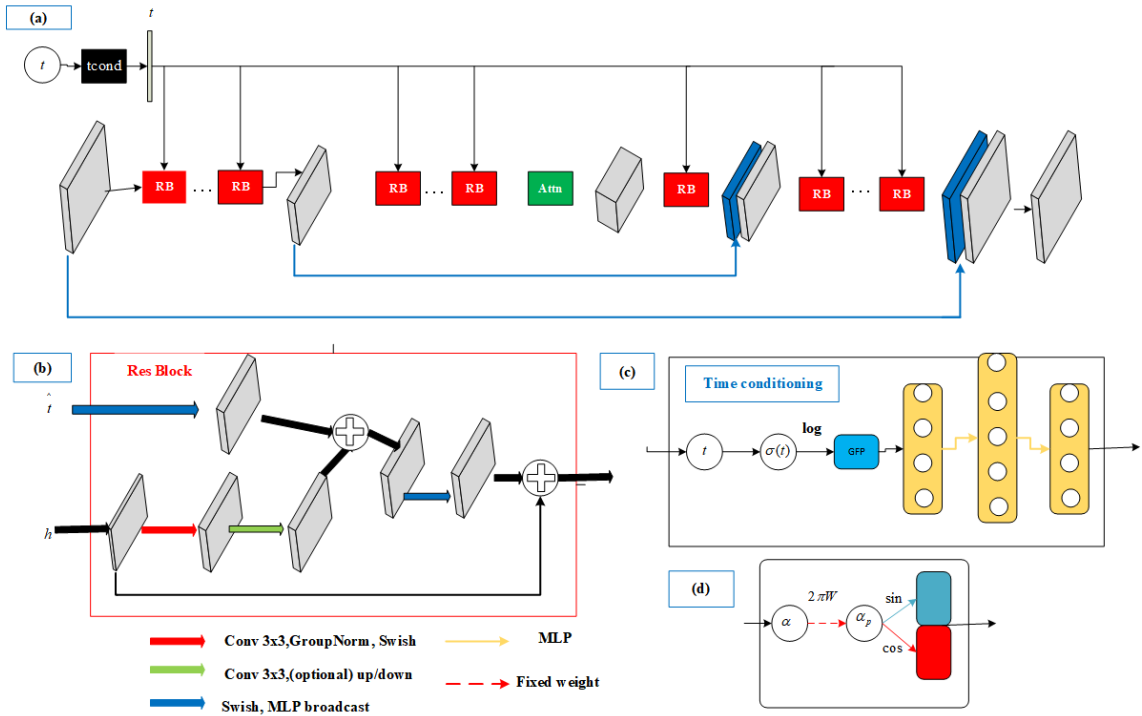


图 3: 网络架构

3.3 前向测量模型

在加速 MRI 中，考虑以下测量模型：

$$y = Ax$$

其中 $y \in C^m$ 是测量值, $x \in C^n$ 是潜像, 参数化正向测量矩阵 $a \in C^{m \times n}$ 定义为:

$$A := P_{\Omega} \mathcal{F} S \quad (15)$$

其中 $S := [S(1); \dots; S(c)]$ 是 c 个不同线圈的灵敏度图, \mathcal{F} 表示傅立叶变换, P_{Ω} 是一个具有 0 和 1 的对角矩阵, 表示具有给定采样模式的子采样算子 Ω 。灵敏度图 S 是标准化的。

$$S^* S = I \quad (16)$$

在单线圈采集的情况下, S 简化为单位矩阵, 使得 $A_{(sc)} = P_{\Omega} \mathcal{F}$ 。

3.4 用于加速 MR 重建的反向 SDE

经典方法是解决以下约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min_x \Psi(x) \\ \text{subject to } y = Ax \end{aligned} \quad (17)$$

其中 $\Psi(\cdot)$ 是从压缩感知理论^[11]中的稀疏性促进正则化器, 例如 L1 小波和总变化 (TV)。求解等式 (17) 通常涉及近端算法, 例如变量分裂或凸集投影 (POCS), 这些算法消除了先验项和前向一致性项的优化。然后, 可以交替解决这两个子问题, 以达到最佳效果。

利用随机样本, 而不是建模先验分布 $p(x)$ 。来自先前分布的样本可以可从等式 (4) 中的反向 SDE 获得:

$$x_i \leftarrow (\sigma_{i+1}^2 - \sigma_i^2) s_{\theta}(x_{i+1}, \sigma_{i+1}) + \sqrt{\sigma_{i+1}^2 - \sigma_i^2} z \quad (18)$$

然后, (17) 中约束的数据一致性映射可以通过:

$$x_i \leftarrow x_i + \lambda A^* (y - Ax_i) = (I - \lambda A^* A) x_i + A^* y \quad (19)$$

对于 $\lambda \in [0, 1]$, 其中 A^* 表示 A 的厄米伴随。

(18) 和 (19) 对应于预测器步骤。当使用校正步骤时, 也可以对离散校正步骤进行相同的处理。

$$\begin{aligned} x_i &\leftarrow x_{i+1} + \varepsilon_i s_{\theta}(x_{i+1}, \sigma_{i+1}) + \sqrt{2\varepsilon_i} z \\ x_i &\leftarrow x_i + \lambda A^* (y - Ax_i) \end{aligned} \quad (20)$$

其中 ε_i 是第 i 次迭代的步长。迭代应用预测器和校正器步骤, 如 PC 算法^[12]中的步骤, 产生了推理算法, 该算法在算法 1 中进行了正式描述。

只有当先验地知道信号仅包含实值时, 才能使用该算法 1, 并且必须小心, 因为在 MRI 重建的大多数实际情况下, 重建的信号是复杂的。

一种可行的方法是训练分数函数^[13], 使其处理复杂信号, 在实现方面, 这对应于将信号的实部和虚部视为单独的通道, 并应用去噪分数匹配目标来处理 $2 \times H \times W$ 大小的图像, 其中 H 和 W 分别是图像的高度和宽度。但这种处理降低了网络训练的稳定性, 也损害了使用算法 1 进行重建的性能。进一步注意到, 这种处理方式限制了实用性, 因为模型现在需要原始 k 空间数据进行训练。为了克服这些限制, 对算法 1 提出了一个简单的修正, 该算法提供了一种仅使用幅度图像训练的分数函数 s , 并将其用于重建复杂图像的方法。该方法在算法 2 中给出。

将图像分成实部和虚部, 并分别对每个部分应用预测-校正步骤。

Algorithm 1 Score-based sampling (Real)

Input: $s_\theta, N, M, \varepsilon_i$, step size, σ_i , noise schedule**Output:** x_0 $A := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{FS}$ $x_N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_T^2 I)$ **for** $i = N-1$: 0 **do** $\mathbf{x}_i \leftarrow \text{Predictor}(\mathbf{x}_{i+1}, \sigma_i, \sigma_{i+1})$ $\mathbf{x}_i \leftarrow \text{Re}(\mathbf{x}_i + A^*(y - A\mathbf{x}_i))$ **for** $j=1:M$ **do** $\mathbf{x}_i \leftarrow \text{Corrector}(\mathbf{x}_i, \sigma_i, \varepsilon_i)$ $\mathbf{x}_i \leftarrow \text{Re}(\mathbf{x}_i + A^*(y - A\mathbf{x}_i))$ **end****end**

Algorithm 2 Score-based sampling (SENSE-type)

Input: $s_\theta, N, M, \varepsilon_i$, step size, σ_i , noise schedule**Output:** x_0 **if** *parallel imaging (PI)* **then** $A := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{FS}$ **end****else** $A := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{F}$ **end** $x_N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_T^2 I)$ **for** $i = N-1$: 0 **do** $\text{Re}(\mathbf{x}_i) \leftarrow \text{Predictor}(\text{Re}(\mathbf{x}_{i+1}), \sigma_i, \sigma_{i+1})$ $\text{Im}(\mathbf{x}_i) \leftarrow \text{Predictor}(\text{Im}(\mathbf{x}_{i+1}), \sigma_i, \sigma_{i+1})$ $\mathbf{x}_i = \text{Re}(\mathbf{x}_i) + \iota \text{Im}(\mathbf{x}_i)$ $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i + A^*(y - A\mathbf{x}_i)$ **for** $j=1:M$ **do** $\text{Re}(\mathbf{x}_i) \leftarrow \text{Corrector}(\text{Re}(\mathbf{x}_i), \sigma_i, \varepsilon_i)$ $\text{Im}(\mathbf{x}_i) \leftarrow \text{Corrector}(\text{Im}(\mathbf{x}_i), \sigma_i, \varepsilon_i)$ $\mathbf{x}_i = \text{Re}(\mathbf{x}_i) + \iota \text{Im}(\mathbf{x}_i)$ $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i + A^*(y - A\mathbf{x}_i)$ **end****end**

3.5 扩散模型并行成像

虽然所提议的基于分数的复杂值数据重建框架非常有用，但大多数现代 MRI 扫描仪都有多个接收器线圈，它们以不同的灵敏度捕获信号。参考文献中提出了许多重建真实潜在信号的技术，其中最突出的两种是 SENSE^[14]和 GRAPPA^[15]。前一种方法需要估计或校准线圈灵敏度图，这些图与 (14) 中规定的正向模型相结合。相反，后一种方法通过简单地取每个重建线圈图像的平方根和 (SSOS)，从而减少了对灵敏度图的需要。这种方法是临床实践中使用最广泛的方法之一，因为它具有一些优点，包括易于实现。基于分数的方法可以无缝地集成到 SSOS 类型^[16]的方法中。具体而言，如算法 3 所述：

Algorithm 3 Score-based sampling (SSOS-type)

Input: $s_\theta, N, \varepsilon_i$, step size, σ_i , noise schedule**Output:** x_0 $A := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{FS}$ $x_N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_T^2 I)$ **for** $i = N-1$: 0 **do** **for** $k = 1$: c **do** $\text{Re}(\mathbf{x}_i^{(k)}) \leftarrow \text{Predictor}(\text{Re}(\mathbf{x}_{i+1}^{(k)}), \sigma_i, \sigma_{i+1})$ $\text{Im}(\mathbf{x}_i^{(k)}) \leftarrow \text{Predictor}(\text{Im}(\mathbf{x}_{i+1}^{(k)}), \sigma_i, \sigma_{i+1})$ $\mathbf{x}_i^{(k)} = \text{Re}(\mathbf{x}_i^{(k)}) + \iota \text{Im}(\mathbf{x}_i^{(k)})$ $\mathbf{x}_i^{(k)} \leftarrow \mathbf{x}_i^{(k)} + A^*(y^{(k)} - A\mathbf{x}_i^{(k)})$ $\text{Re}(\mathbf{x}_i^{(k)}) \leftarrow \text{Corrector}(\text{Re}(\mathbf{x}_i^{(k)}), \sigma_i, \varepsilon_i)$ $\text{Im}(\mathbf{x}_i^{(k)}) \leftarrow \text{Corrector}(\text{Im}(\mathbf{x}_i^{(k)}), \sigma_i, \varepsilon_i)$ $\mathbf{x}_i^{(k)} = \text{Re}(\mathbf{x}_i^{(k)}) + \iota \text{Im}(\mathbf{x}_i^{(k)})$ $\mathbf{x}_i^{(k)} \leftarrow \mathbf{x}_i^{(k)} + A^*(y^{(k)} - A\mathbf{x}_i^{(k)})$ **end****end**

$$\mathbf{x}_0 = \sqrt{\sum_{k=1}^c |\mathbf{x}_0^{(c)}|^2}$$

算法 3 的一个缺点是线圈重建之间不存在串扰。这可能是次优的，因为重建过程没有考虑到所有线圈图像都来自同一图像。相反，为了更好地利用不同线圈图像之间的相关性，通过结合 SENSE 类型约束，在算法 4 中额外实现了混合类型方法^[17]。

对于每 m 个单独线圈更新步骤，使用以下更新强制线圈之间的依赖关系：

$$\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i + \lambda A_{(mc)}^* (y - A_{(mc)} \mathbf{x}_i) \quad (21)$$

其中 $\lambda \in [0, 1]$ 决定了数据一致性的强加程度， $A_{(mc)}$ 是 (15) 中定义的标准多线圈正向测量矩阵。一旦完成就可以通过 SSOS 操作得出最终结果。

SSOS 类型和混合类型方法的一个警告是推理速度慢。与单线圈重建相比，实现这些算法将导致 c 倍的计算时间。

Algorithm 4 Score-based sampling (Hybrid-type)

Input: $s_\theta, N, \varepsilon_i$, step size, σ_i , noise schedule**Output:** x_0

$$A_{(sc)} := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{F}$$

$$A_{(mc)} := \mathcal{P}_\Omega \mathcal{FS}$$

$$x_N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_T^2 I)$$

for $i = N-1$: 0 **do****for** $k = 1$: c **do**

$$\text{Re} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) \leftarrow \text{Predictor} \left(\text{Re} \left(\mathbf{x}_{i+1}^{(k)} \right), \sigma_i, \sigma_{i+1} \right)$$

$$\text{Im} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) \leftarrow \text{Predictor} \left(\text{Im} \left(\mathbf{x}_{i+1}^{(k)} \right), \sigma_i, \sigma_{i+1} \right)$$

$$\mathbf{x}_i^{(k)} = \text{Re} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) + \iota \text{Im} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right)$$

$$\mathbf{x}_i^{(k)} \leftarrow \mathbf{x}_i^{(k)} + A_{(sc)}^* \left(y^{(k)} - A_{(sc)} \mathbf{x}_i^{(k)} \right)$$

$$\text{Re} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) \leftarrow \text{Corrector} \left(\text{Re} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right), \sigma_i, \varepsilon_i \right)$$

$$\text{Im} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) \leftarrow \text{Corrector} \left(\text{Im} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right), \sigma_i, \varepsilon_i \right)$$

$$\mathbf{x}_i^{(k)} = \text{Re} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right) + \iota \text{Im} \left(\mathbf{x}_i^{(k)} \right)$$

$$\mathbf{x}_i^{(k)} \leftarrow \mathbf{x}_i^{(k)} + A_{(sc)}^* \left(y^{(k)} - A_{(sc)} \mathbf{x}_i^{(k)} \right)$$

end**if** $\text{mod}(i, m) == 0$ **then**

$$\mathbf{x}_i = [\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(c)}]$$

$$\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i + \lambda A_{(mc)}^* \left(y - A_{(mc)} \mathbf{x}_i \right)$$

end**end**

$$\mathbf{x}_0 = \sqrt{\sum_{k=1}^c \left| \mathbf{x}_0^{(c)} \right|^2}$$

4 复现细节

4.1 与已有开源代码对比

使用全部的开源代码并在其基础上创新，原代码是基于分数的加速 MRI 扩散模型，进一步弄出基于去噪扩散模型的加速 MRI。

4.2 实验环境搭建

NVIDIA GeForce 3090

python =3.8

PyTorch = 1.13.0+cu116

torchvision

torchaudio

cudatoolkit =10.2

scipy

matplotlib

tqdm
ipdb
packaging
ml-collections
sigpy
h5py
tensorflow
Ninja

4.3 使用说明

训练 score-MRI 模型如下：

```
python main_fastmri.py \  
--config=configs/ve/fastmri_knee_320_ncsnpp_continuous_multi.py \  
--eval_folder=eval/fastmri_multicoil_knee_320 \  
--mode='train' \  
--workdir=workdir/fastmri_multicoil_knee_320
```

使用算法 1 进行重建推理如下：

```
python inference_real.py --task 'retrospective' \  
--data '001' \  
--mask_type 'gaussianld' \  
--acc_factor 4 \  
--center_fraction 0.08 \  
--N 2000
```

使用算法 2 进行重建推理如下：

```
python inference_single-coil.py \  
--data '001' \  
--mask_type 'gaussianld' \  
--acc_factor 4 \  
--center_fraction 0.08 \  
--N 2000
```

使用算法 3 进行重建推理如下：

```
python inference_multi-coil_SSOS.py \  
--data '001' \  
--mask_type 'gaussianld' \  
--acc_factor 4 \  
--center_fraction 0.08 \  
--N 2000
```

使用算法 4 进行重建推理如下：

```
python inference_multi-coil_hybrid.py \  
--data '001' \  
--mask_type 'gaussianld' \  
--acc_factor 4 \  
--center_fraction 0.08 \  
--N 2000
```

4.4 创新点

借助已有的的是由 DDPM 进行加速 MRI 重建方法 MC-DDPM 方法^[18], 使得将基于分数的扩散模型替换为 DDPM 扩散模型。如下的新符号来表示欠采样前向测量模型:

$$\mathbf{y}_M = \mathbf{M}\mathbf{A}\mathbf{x} + \varepsilon_M \quad (22)$$

其中 $M \in R^{n \times n}$ 是一个对角矩阵, 其对角元素为 1 或 0, 取决于抽样模式 Ω 。新表示法的优点是可以进一步定义 $M^c = I - M$ 和 $\mathbf{y}_{M^c} = M^c \mathbf{A}\mathbf{x}$, 另外, 重构后验分布可重写为 $q(\mathbf{x} | M, \mathbf{y}_M)$ 。

MC-DDPM, 通过生成 $q(\mathbf{y}_{M^c} | M^c, \mathbf{y}_M)$ 的样本来解决重构问题。MC-DDPM 定义在测量域, 而不是通常的 DDPM 定义在图像域, 并且以非采样矩阵 M^c 和采样测量 \mathbf{y}_M 为条件。它有以下形式:

$$p_\theta(\mathbf{y}_{M^c,0} | \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) := \int p_\theta(\mathbf{y}_{M^c,0:T} | \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) d\mathbf{M}^c_{1:T} \quad (23)$$

与 DDPM 相似, $p(\mathbf{y}_{M^c} | M^c, \mathbf{y}_M)$ 的采样过程是扩散过程的逆过程, 也定义在测量域。具体来说, 在非采样测量值 $\mathbf{y}_{M^c,0}$ 中逐渐加入高斯噪声。扩散过程有以下形式:

$$\begin{aligned} q(\mathbf{y}_{M^c,1:T} | \mathbf{y}_{M^c,0}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) &:= \prod_{t=1}^T q(\mathbf{y}_{M^c,t} | \mathbf{y}_{M^c,t-1}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M), \\ q(\mathbf{y}_{M^c,t} | \mathbf{y}_{M^c,t-1}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) &:= \mathcal{N}(\alpha_t \mathbf{y}_{M^c,t-1}, \beta_t^2 \mathbf{M}^c), \end{aligned} \quad (24)$$

通过优化负对数似然的变分界来实现:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[-\log p_\theta(\mathbf{y}_{M^c,0} | \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)] &\leq \mathbb{E}_q \left[-\log \frac{p_\theta(\mathbf{y}_{M^c,0:T} | \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)}{q(\mathbf{y}_{M^c,1:T} | \mathbf{y}_{M^c,0}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)} \right] \\ &= \mathbb{E}_q \left[-\log p(\mathbf{y}_{M^c,T} | \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) - \sum_{t \geq 1} \log \frac{p_\theta(\mathbf{y}_{M^c,t-1} | \mathbf{y}_{M^c,t}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)}{q(\mathbf{y}_{M^c,t} | \mathbf{y}_{M^c,t-1}, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)} \right] =: L. \end{aligned} \quad (25)$$

调整权重 L 可以简化为:

$$L_{\text{simple}} = \mathbb{E}_{\mathbf{y}_{M^c,0}, t, \varepsilon} \left\| \varepsilon - \varepsilon_\theta(\bar{\alpha}_t \mathbf{y}_{M^c,0} + \bar{\beta}_t \varepsilon, t, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M) \right\|_2^2, \varepsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M}^c) \quad (26)$$

模型如图 4 所示, 以欠采样 MRI 重建为例, 概述了所提出的方法。扩散过程: 从非采样 k-空间 $\mathbf{y}_{M^c,0}$ 开始, 逐渐加入高斯噪声, 直到时间 T。逆向过程: 从总噪声开始, 一步步生成 $\mathbf{y}_{M^c,0}$ 。

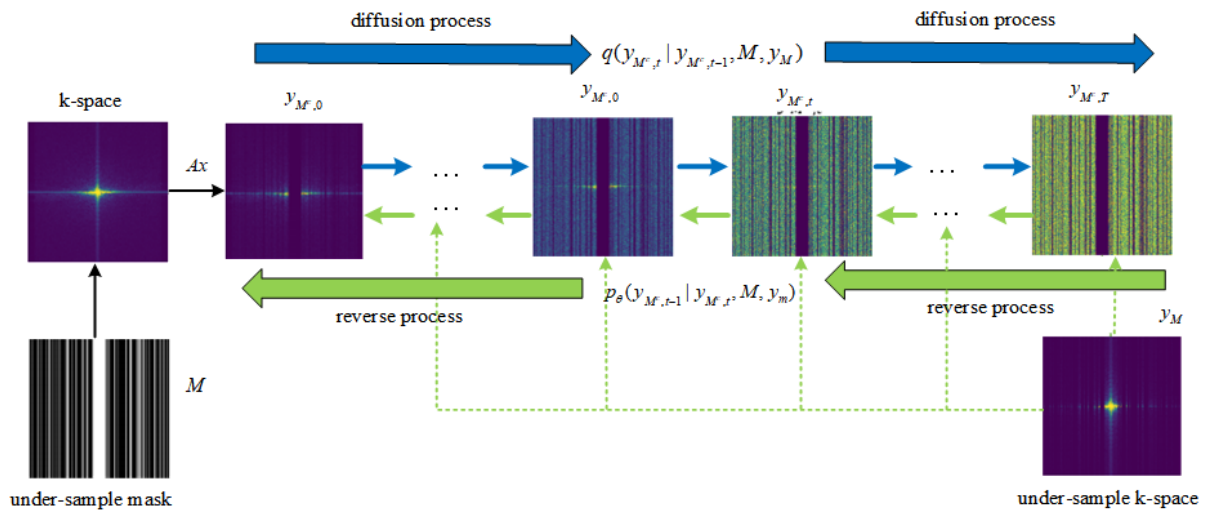


图 4: MCDDPM 方法

算法 5 显示了这个简化目标的完整训练过程, 算法 6 显示了采样过程。

Algorithm 5 MC-DDPM Training**repeat**

$\mathbf{x} \sim q(\mathbf{x})$
 obtain \mathbf{M} and \mathbf{M}^c
 $\mathbf{y}_M = \mathbf{M}\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y}_{M^c} = \mathbf{M}^c\mathbf{A}\mathbf{x}$
 $\varepsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M}^c)$
 $t \sim \text{Uniform}(\{1, \dots, T\})$
 $\mathbf{y}_{M,t}^c = \bar{\alpha}_t \mathbf{y}_{M,0}^c + \bar{\beta}_t \varepsilon$
 Take gradient descent step on
 $\nabla_{\theta} \|\varepsilon - \varepsilon_{\theta}(\mathbf{y}_{M,t}^c, t, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)\|_2^2$

until converged;**Algorithm 6** MC-DDPM Sampling**Input:** M_c, y_M **Output:** $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y}_M + \mathbf{y}_{M^c,0})$ $\mathbf{y}_{M^c,T} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \bar{\beta}_T^2 \mathbf{M}^c)$ **for** $t=T, \dots, 1$ **do** $\mathbf{z}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M}^c)$ if $t > 1$, else $\mathbf{z}_t = \mathbf{0}$ $\mu_t = \mu_{\theta}(\mathbf{y}_{M^c,t}, t, \mathbf{M}^c, \mathbf{y}_M)$ $\mathbf{y}_{M^c,t-1} = \mu_t + \sigma_t \mathbf{z}_t$ **end**

5 实验结果分析

本部分对实验所得结果进行分析，包括数据集介绍，不同方法对比定量分析、不同方法对比定性分析、以及在创新上对比 UNet^[9]、Score-MRI^[7]和 MC-DDPM^[18]方法。

5.1 数据集介绍

fastMRI 数据集^[19]包括两种类型的 MRI：膝盖磁共振图像（knee MRI）和脑部磁共振图像（brain MRI）。数据集包括训练数据、验证数据以及 masked 测试数据集。下面的实验主要是使用膝盖磁共振图像（knee MRI）数据集。数据来自在 3 和 1.5 特斯拉磁体上获得的 1,500 多个完全采样的膝关节 MRI，以及来自 10,000 个临床膝关节 MRI 的 DICOM 图像也在 3 或 1.5 特斯拉下获得。原始数据集包括有和没有脂肪抑制的冠状质子密度加权图像。DICOM 数据集包含有和没有脂肪抑制的冠状质子密度加权、轴向质子密度加权和脂肪抑制、矢状质子密度和矢状 T2 加权和脂肪抑制。数据集分为单线圈轨道类型和多线圈轨道类型数据集。数据保存成 HDF5 类型。

5.2 不同方法对比定量分析

采样过程使用具有 $\times 4$ 1D 高斯随机采样加速。为了量化重建与目标的接近程度，使用标准度量-峰值信噪比（PSNR）和结构相似性指数（SSIM）。四种采样方法对锯齿图像的重构精度高，质量随着采样方法的改进进一步提高。如表格 1 所示。定量指标也证实了其优越性。在不同的采样模式中，可以看到算法 2 由于加入虚部图像信息重建效果比只进行实部图像重建的算法 1 效果好，算法 4 通常在 1D 采样模式下表现更好，而算法 3 对 1D 图案执行不好。推理时间可以看到表格 2 中的数据，表格 2 数据是一张图所花费的推理时间。不同采样方法花费的推理时间存在较大的差距。单线圈实值图像的重建时间约为 8 分钟，复值图像的重构时间约为 20 分钟。SSOS 类型和混合类型方法的一个问题是推理速度慢。与单线圈重建相比，实现算法 3 和算法 4 将导致 c 倍的计算时间，最好是能进行并行计算。

表 1: 不同方法对比定量分析

	real	single-coil	multi-coil-SSOS	multi-coil-hybrid
PSNR	32.32	32.96	31.43	33.25
SSMI	0.805	0.838	0.821	0.845

表 2: 不同方法对比定性分析

	real	single-coil	multi-coil-SSOS	multi-coil-hybrid
time(/s)	499.007413387298	1031.36929750442	17792.7611870765	14978.9093046188

5.3 不同方法对比定性分析

采样过程使用具有 $\times 4$ 1D 高斯随机采样加速。为了量化重建与目标的接近程度，使用标准度量-峰值信噪比（PSNR）和结构相似性指数（SSIM）。四种采样方法对锯齿图像的重构精度高，质量随着采样方法的改进进一步提高。如图 5 所示。在不同的采样模式中，可以看到算法 2 由于加入虚部图像信息重建效果比只进行实部图像重建的算法 1 效果好，算法 4 通常在 1D 采样模式下表现更好，而算法 3 对 1D 图案执行不好。使用所提出的方法，能够实现高保真重建。

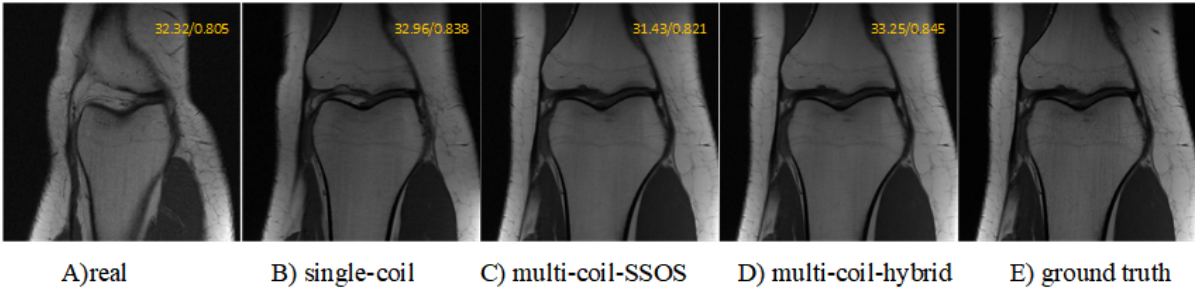


图 5: 不同方法对比定性分析

5.4 UNet、Score-MRI、MC-DDPM 方法对比

采样过程使用具有 $\times 4$ 采样加速。在表 3 中，将 MC-DDPM 和 Unet、基于分数的重建方法 Score-MRI 进行了比较。表 3 中的定量指标证实 MC-DDPM 方法的优越性。三种方法主要是在单线圈的方法下进行推理。MC-DDPM 方法在 PSNR/SSIM 方面为 34.22/0.866($4\times$) 优于基于分数的扩散模型 score-MRI 的 32.96/0.838 ($4\times$), 更不必说只使用 Unet 模型只达到 28.64/0.771($4\times$)。Score-MRI 和 MC-DDPM 方法在 $4\times$ 加速度下都表现很好，但从如图 6 所示的图像中，可以看到了 MC-DDPM 比 U-Net 和 score-MRI 方法更真实的结构和更小的误差，且速度能达到 12 分钟一张图快于 Score-MRI 方法的 20 分钟左右。

表 3: UNet、Score-MRI、MC-DDPM 方法对比

	UNet	score-MRI	MC-DDPM
PSNR	28.64	32.96	34.22
SSMI	0.771	0.838	0.866

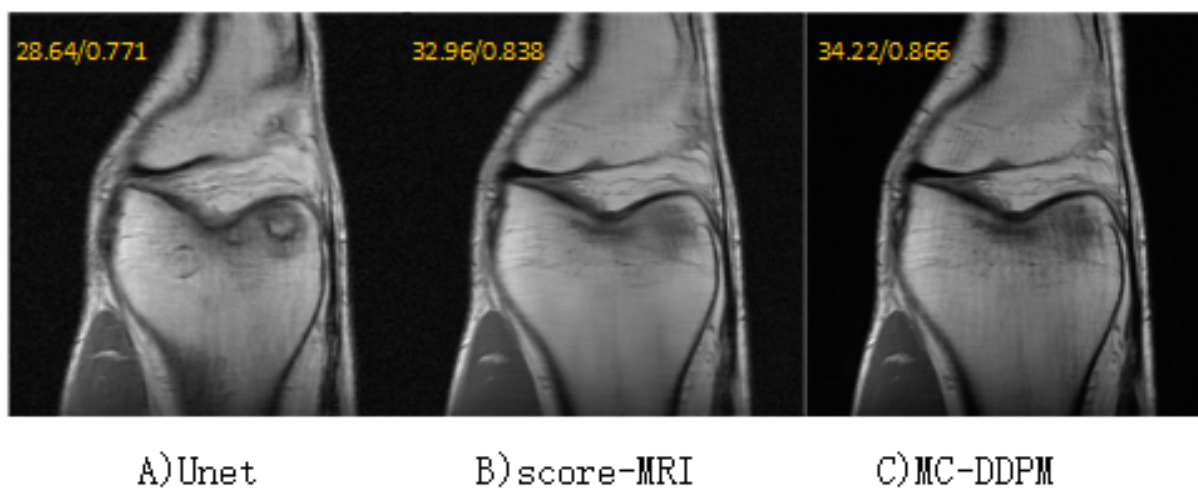


图 6: UNet、Score-MRI、MC-DDPM 方法对比

6 总结与展望

基于分数的加速 MRI 重建方法。使用连续时间去噪分数匹配使用大小数据来训练日志数据分布的梯度。使用学习到的分数作为先验，可以从给定测量的条件分布中取样，只需在每一步应用数据一致性投影。score-MRI 方法产生高精度的重建，无论是单线圈，还是多线圈的情况下。与现有技术相比，score-MRI 方法在质量和实用性方面都具有优越性。

参考文献

- [1] VAHDAT A, KREIS K, KAUTZ J. Score-based Generative Modeling in Latent Space[Z]. 2021.
- [2] HO J, JAIN A, ABBEEL P. Denoising Diffusion Probabilistic Models[J]., 2020.
- [3] SOHL-DICKSTEIN J, WEISS E A, MAHESWARANATHAN N, et al. Deep Unsupervised Learning using Nonequilibrium Thermodynamics[J]. JMLR.org, 2015.
- [4] DHARIWAL P, NICHOL A. Diffusion Models Beat GANs on Image Synthesis[J]., 2021.
- [5] MENG C, SONG Y, SONG J, et al. SDEdit: Image Synthesis and Editing with Stochastic Differential Equations[Z]. 2021.
- [6] KIM D, SHIN S, SONG K, et al. Score Matching Model for Unbounded Data Score[Z]. 2021.
- [7] CHUNG H, YE J C. Score-based diffusion models for accelerated MRI[J]., 2021.
- [8] SONG Y, SHEN L, XING L, et al. Solving Inverse Problems in Medical Imaging with Score-Based Generative Models[C]//arXiv. 2021.
- [9] RONNEBERGER O, FISCHER P, BROX T. U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation[C]//International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention. 2015.
- [10] TANCIK M, SRINIVASAN P P, MILDENHALL B, et al. Fourier Features Let Networks Learn High Frequency Functions in Low Dimensional Domains[Z]. 2020.

- [11] DONOHO D L. Compressed sensing[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 2006, 52(4): 1289-1306.
- [12] LYU Q, WANG G. Conversion Between CT and MRI Images Using Diffusion and Score-Matching Models[J]. arXiv e-prints, 2022.
- [13] SONG Y, KINGMA D P. How to Train Your Energy-Based Models[Z]. 2021.
- [14] PRUESSMANN K P, WEIGER M, SCHEIDEGGER M B, et al. SENSE: Sensitivity encoding for fast MRI[J]. Magnetic Resonance in Medicine, 1999, 42(5): 952-962.
- [15] GRISWOLD M A, JAKOB P M, HEIDEMANN R M, et al. Generalized autocalibrating partially parallel acquisitions (GRAPPA)[J]. Magnetic Resonance in Medicine, 2002, 47(6).
- [16] RAMZI Z, REMY B, LANUSSE F, et al. Denoising Score-Matching for Uncertainty Quantification in Inverse Problems[Z]. 2020.
- [17] Deshmane, Gulani, Griswold, et al. Parallel MR imaging[J]. Journal of magnetic resonance imaging: JMRI, 2012.
- [18] XIE Y, LI Q. Measurement-conditioned Denoising Diffusion Probabilistic Model for Under-sampled Medical Image Reconstruction[C]//arXiv e-prints. 2022.
- [19] ZBONTAR J, KNOLL F, SRIRAM A, et al. fastMRI: An Open Dataset and Benchmarks for Accelerated MRI[J]., 2018.