

# ข้อเสนอโครงการวิศวกรรมไฟฟ้า วิชา 2102490 ปีการศึกษา 2555

## การเรียนรู้โครงสร้างเชิงสาเหตุในข้อมูลการทำงานของสมอง

### Learning Causal Structures in fMRI time series

ชื่อนิสิต นายอานันท์ พงษ์รัตนกุล 5230619021 SRA: Advanced Control and Optimization

อาจารย์ที่ปรึกษา อ.ดร.จิตโกมุท ส่งศิริ ห้องปฏิบัติการวิจัย Control Systems Research Laboratory

## 1 บทนำ

### 1.1 หลักการและความเป็นมา

ในปัจจุบันการศึกษาระบบการคิดของมนุษย์ได้พัฒนาเป็นอย่างมากหลังจากการพัฒนาเครื่องสแกนสมองที่อาศัยเทคโนโลยี functional magnetic resonance imaging หรือ fMRI ซึ่งทำให้สามารถเห็นภาพการทำงานของระบบประสาทในสมอง fMRI จะใช้หลักการคือ เลือดที่มีออกซิเจนอยู่อย่างเข้มข้นจะแสดงคุณสมบัติต่อการเรียงตัวตามสนามแม่เหล็ก ส่วนเลือดที่มีออกซิเจนต่ำจะแสดงคุณสมบัติที่พร้อมจะเรียงตัวตามสนามแม่เหล็ก ดังนั้นข้อมูลที่ได้จาก fMRI จะสามารถบอกระดับออกซิเจนในเลือดในสมอง (blood oxygen-level dependent หรือ BOLD) ได้ ค่า BOLD นี้จะเป็นตัวเลขที่แสดงถึงระดับออกซิเจนของแต่ละจุดในสมอง ดังนั้นระดับ BOLD ที่วัดได้จึงบ่งบอกระดับการทำงานของสมองที่ถูกกระตุ้นว่าสูงต่ำเพียงใด โดยจุดที่เล็กที่สุดในปริภูมิ 3 มิติที่สามารถวัดค่าได้เราจะเรียกว่า voxel เนื่องจากเลือดจะไหลไปทุกส่วนในสมอง ดังนั้นแบบจำลองของค่า BOLD ของทุกจุด ในสมองจึงสามารถอธิบายความสัมพันธ์เชิงระบบพลวัตของการทำงานในสมองในแต่ละ voxel ได้

การเรียนรู้โครงสร้างความสัมพันธ์ หรือในที่นี้จะเรียกว่า *โครงสร้างเชิงสาเหตุ* คือการศึกษาว่าตัวแปรต่างๆ ในระบบจะมีผลกระทบกับตัวแปรอีกตัวหรือไม่ ในที่นี้สิ่งที่เราสนใจคือ ระดับการทำงานของสมอง ณ voxel ที่  $j$  จะส่งผลให้มีการทำงาน ณ voxel ที่  $i$  หรือไม่ หรืออาจกล่าวโดยรวมว่า เราสนใจว่าสมองในแต่ละส่วนมีการทำงานสัมพันธ์กันอย่างไร เราสามารถนิยามโครงสร้างเชิงสาเหตุให้ออกมาในรูปแบบ เจ็อนไซทางคณิตศาสตร์ได้ ซึ่งเ็อนไซนี้จะถูกนำไปพิจารณาเป็นเ็อนไซบนพารามิเตอร์ บนแบบจำลอง หากทราบความเชื่อมโยงของแต่ละ voxel แล้ว เราจะสามารถนำแบบจำลองที่ได้ไปประยุกต์ใช้ในการคัดแยกสภาวะของบุคคลหนึ่งๆ ได้โดยอาศัยสมมติฐานที่ว่า ภายใต้สภาวะที่ต่างกันของบุคคลหนึ่งๆ ย่อมนำไปสู่แบบจำลองที่ต่างกัน ดังนั้นหากนำไปใช้ในทางการแพทย์ เช่น [1] ใช้แบบจำลองในการคัดแยกสภาวะ

ผู้ป่วยแต่ละราย โดยการใช้แบบจำลองของผู้ป่วยโรคต่างๆเป็นฐานข้อมูลในการเปรียบเทียบ

ในการหาแบบจำลองนั้น เพื่อให้ได้แบบจำลองที่ง่าย เราจะใช้แบบจำลองเชิงเส้น ที่รวมเ็อนไซของโครงสร้างเชิงสาเหตุ ในการบอกความเชื่อมโยงของแต่ละ voxel ในสมอง ในการหาแบบจำลองนั้นเป็นการหาพารามิเตอร์ในแบบจำลอง ที่ทำให้ค่าความผิดพลาดระหว่างข้อมูลจริงกับผลตอบจากแบบจำลองมีค่าน้อยที่สุด รูปแบบปัญหาดังกล่าวมักจะสามารถจัดให้อยู่ในรูปของปัญหาค่าเหมาะที่สุด แล้วใช้เทคนิคการหาค่าเหมาะที่สุดในการหาคำตอบเพื่อให้ได้พารามิเตอร์ในแบบจำลอง

เมื่อได้แบบจำลองมาแล้วปัญหาถัดมาคือ เราจะใช้วิธีใดในการตัดสินใจว่าแบบจำลองที่ได้มีความแม่นยำและความน่าเชื่อถือเพียงพอต่อการนำไปใช้งานหรือไม่ ขั้นตอนนี้เรียกว่าการวิเคราะห์ความถูกต้องของแบบจำลอง (model validation) โดยอาจใช้วิธีการแบ่งข้อมูลที่มีอยู่เป็น 2 ชุด โดยใช้ชุดหนึ่งในการหาแบบจำลอง และใช้อีกชุดที่เหลือในการตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลอง เช่น หลังจากได้แบบจำลองแล้ว นำข้อมูลอีกชุดที่เหลือมาใช้ในการวัดค่าความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าประมาณที่ได้จากผลตอบของแบบจำลองกับข้อมูลค่าจริง

โดยในโครงการนี้จะหาแบบจำลองที่สามารถอธิบายโครงสร้างเชิงสาเหตุของข้อมูลการทำงานของสมอง จากนั้นจะวิเคราะห์ความถูกต้องของแบบจำลอง และวิเคราะห์โครงสร้างเชิงสาเหตุที่เรียนรู้จากแบบจำลองว่ามีความสมเหตุสมผลเพียงใด

### 1.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในการศึกษาเกี่ยวกับการทำงานของสมองนั้น หลังจากการเก็บข้อมูลด้วย fMRI เช่นใน [2] แล้วได้มีการคิดค้นและประยุกต์ใช้วิธีการต่างๆ เพื่อหาแบบจำลองของสมอง [3] ซึ่งล้วนแต่มีเป้าหมายที่จะหาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรในแบบจำลอง ดังนั้นเพื่อให้ได้แบบจำลองที่สามารถนำไปอธิบายความสัมพันธ์ดังกล่าวได้ เราจึงต้องตั้งเ็อนไซเพิ่มเติมบนแบบจำลอง

ความสัมพันธ์ของตัวแปรในแบบจำลองใดๆ หรือโครงสร้าง

เชิงสาเหตุ สามารถถูกนิยามได้หลายแบบ ในที่นี้จะกล่าวถึงเงื่อนไขความสัมพันธ์ระหว่างเหตุและผล (Granger causality หรือ G-causality) [4, บทที่ 2] โดยหลักการพื้นฐานคือ เหตุห้ามเกิดหลังผลลัพธ์ ถ้าหากตัวแปร  $x$  มีผลต่อตัวแปร  $z$  แล้วการที่รู้ค่าตัวแปร  $x$  ก่อน ย่อมช่วยในการทำนายค่าของตัวแปร  $z$  เงื่อนไขทางคณิตศาสตร์ของ G-causality นั้นเหมาะสมสำหรับแบบจำลองถดถอยด้วยตัวเองหลายตัวแปร (Multivariate Autoregressive Model หรือ MAR) เนื่องจากเงื่อนไข G-causality ของแบบจำลอง MAR จะสามารถแสดงออกมาเป็นเงื่อนไขของพารามิเตอร์ใน MAR ในรูปแบบที่ง่าย ดังนั้นเงื่อนไขนี้จึงได้ถูกนำไปใช้อย่างมากในงานที่เกี่ยวข้องกับอนุกรมเวลา

แบบจำลองถดถอยด้วยตัวเองที่มี  $n$  ตัวแปร อันดับ  $p$  สามารถแสดงได้ดังนี้

$$y(t) = A_1 y(t-1) + A_2 y(t-2) + \dots + A_p y(t-p) + u(t) \quad (1)$$

โดยที่  $y \in \mathbf{R}^n$ ,  $A_k \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ,  $k = 1, 2, \dots, p$  และ  $u(t)$  คือสัญญาณรบกวน

ใน [4, บทที่ 2] ได้แสดงให้เห็นว่าเงื่อนไข G-causality ของแบบจำลอง MAR นั้นเขียนได้ในรูปสมการเชิงเส้นของสัมประสิทธิ์ใน MAR กล่าวคือ ถ้า  $y_j$  ไม่ใช่สาเหตุแบบ Granger ต่อ  $y_i$  แล้ว

$$[A_{ij}]_k = 0 \quad (2)$$

ทุกค่า  $k = 1, 2, \dots, p$  โดยที่  $[A_{ij}]_k$  คือ สมาชิกตัวที่  $(i, j)$  ของเมทริกซ์  $A_k$

เนื่องจากการหาแบบจำลอง fMRI เป็นงานที่เกี่ยวข้องกับอนุกรมเวลา ดังนั้น MAR จึงเป็นแบบจำลองที่ถูกนิยมนำมาใช้ในงานวิจัยอย่างมาก เช่นใน [1, 5, 6, 7, 8] ซึ่งทั้ง 5 งานวิจัยต่างใช้ MAR ที่คำนึงถึงเงื่อนไข G-causality โดยจัดรูปแบบเป็นปัญหาค่าเหมาะที่สุดที่เพิ่มฟังก์ชันลงโทษ (penalty function) ในฟังก์ชันจุดประสงค์ การเลือกฟังก์ชันลงโทษจะมีจุดหมายเพื่อให้ได้ผลเฉลยที่ทำให้พารามิเตอร์ใน  $A_k$  มีศูนย์เป็นจำนวนมาก ดังนั้นจาก (2) รูปแบบของศูนย์ใน  $A_k$  จะบอกรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวแปรว่าตัวแปรใดส่งผลต่อตัวแปรใดบ้าง โดยแต่ละงานวิจัยจะใช้ฟังก์ชันลงโทษที่ต่างกันดังจะกล่าวถึงต่อไป นอกจากนี้แต่ละงานวิจัยจะใช้ขั้นตอนวิธีที่ต่างกันในการหาผลเฉลยของฟังก์ชันจุดประสงค์ เช่น [1, 6] จะวิเคราะห์ในโดเมนความถี่ ส่วน [5, 7, 8] จะวิเคราะห์ในโดเมนเวลา จากนั้นแต่ละงานวิจัยจะใช้โปรแกรมสำเร็จรูปในการหาผลเฉลยของปัญหาค่าเหมาะที่สุด หลังจากได้แบบจำลองแล้วจะมีการนำแบบจำลองไปประยุกต์ใช้อย่างเช่น [1] นำแบบจำลองที่ได้ไปใช้ในการคิดแยกผู้ป่วย ส่วน [6] ใช้ในการเปรียบเทียบระหว่างบุคคลที่ร่างกายเหนื่อยล้ากับบุคคลที่ได้พักผ่อนอย่างเต็มที่

## 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

วิธีหนึ่งที่นิยมใช้ในการประมาณหาแบบจำลองคือวิธีกำลังสองต่ำสุด (least-squares) เนื่องจากเป็นวิธีที่ง่ายและมีผลเฉลย

รูปแบบปิดที่ชัดเจน เมื่อประยุกต์วิธีกำลังสองต่ำสุดนี้มาใช้ในการหาแบบจำลอง MAR จะเป็นปัญหาการเลือกค่า  $A_1, A_2, \dots, A_p$  ที่ทำให้

$$\sum_{t=p+1}^N \|y(t) - \sum_{k=1}^p A_k y(t-k)\|_2^2 \quad (3)$$

มีค่าต่ำที่สุด โดย  $y(1), y(2), \dots, y(N)$  เป็นข้อมูลที่กำหนดให้ เราอาจเขียนปัญหาดังกล่าวได้ใหม่เป็น

$$\min \|Y - AH\|_F^2 \quad (4)$$

โดยมีตัวแปรคือ  $A_k \in \mathbf{R}^{n \times n}$  สำหรับ  $k = 1, 2, \dots, p$  และ

$$A = [A_1 \ A_2 \ \dots \ A_p]$$

$$Y = [y(p+1) \ y(p+2) \ \dots \ y(N)]$$

$$H = \begin{bmatrix} y(p) & y(p+1) & \dots & y(N-1) \\ y(p-1) & y(p) & \dots & y(N-2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y(1) & y(2) & \dots & y(N-p) \end{bmatrix}$$

โดยที่  $\|\cdot\|_F$  คือ นอร์มโฟรบิเนียนส (Frobenius norm) ซึ่งนิยามได้ดังนี้

$$\|X\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |x_{ij}|^2}$$

อาจกล่าวได้ว่า นอร์มโฟรบิเนียนส เป็นกรณีพิเศษเมื่อ  $p = 2$  ของนอร์ม- $p$  ซึ่งนิยามโดย

$$\|X\|_p = \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |x_{ij}|^p \right)^{1/p}$$

ปัญหา (4) มีผลเฉลยรูปแบบปิด (close-form solution) คือ

$$A = (YH^T)(HH^T)^{-1} \quad (5)$$

โดยมีเงื่อนไขว่า  $H$  เป็นเมทริกซ์เต็มขั้น (full rank)

ในความเป็นจริงระดับออกซิเจนในสมอง (BOLD) จะต้องเป็นค่าที่มีขอบเขต คือจะต้องไม่มีค่าเกินค่าๆ หนึ่ง ดังนั้นหากต้องการแบบจำลองที่มีความสมเหตุสมผลมากขึ้น เราจึงควรเพิ่มเงื่อนไขที่ทำให้แบบจำลองที่ได้มีเสถียรภาพ

เนื่องจาก (4) อาจมีผลเฉลยที่ได้พารามิเตอร์ที่ทำให้แบบจำลองที่ได้ไม่มีเสถียรภาพ ถ้าหากเราต้องการจะได้เฉพาะแบบจำลองที่มีเสถียรภาพแล้ว เราจะต้องกำหนดเงื่อนไขเพิ่มเติมบนพารามิเตอร์ของแบบจำลอง โดยพิจารณา (1) ในรูปสมการสถานะแบบวิฤต

$$x(t+1) = Ax(t) + Bu(t) \quad (6)$$

โดยที่

$$x(t) = \begin{bmatrix} y(t-1) \\ y(t-2) \\ \vdots \\ y(t-p) \end{bmatrix}, \mathcal{A} = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & \dots & A_{p-1} & A_p \\ I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & & I & 0 \end{bmatrix}$$

ระบบ (6) นี้จะมีเสถียรภาพเมื่อขนาดของค่าเจาะจง (eigenvalues) ทุกค่าของ  $A$  อยู่ภายในวงกลม 1 หน่วย [9] หรืออาจกล่าวได้ว่า

$$|\lambda(A)| < 1 \quad (7)$$

โดยที่  $\lambda(A)$  คือค่าเจาะจงใดๆ ของ  $A$

จากผลเฉลยของปัญหาค่ากำลังสองต่ำสุดตาม (5) เราสามารถอ่านรูปแบบร่วมของศูนย์ (common sparsity pattern) ใน  $A_1, A_2, \dots, A_p$  เพื่อนำไปสรุปโครงสร้างเชิงสาเหตุได้ แต่โดยทั่วไปแล้วผลเฉลยของปัญหาค่ากำลังสองต่ำสุดจะทำให้เมทริกซ์  $A$  มีความหนาแน่น (dense) หรือ ค่าใน  $A_k$  ส่วนใหญ่ไม่เป็นศูนย์ ทำให้เราไม่สามารถสรุปโครงสร้างความสัมพันธ์ของตัวแปรได้อย่างแน่ชัด ดังนั้นหากเราออกแบบปัญหาค่าเหมาะที่สุดเพื่อให้มีผลเฉลยเมทริกซ์  $A$  เป็นเมทริกซ์เบาบาง (เมทริกซ์ ซึ่งมีศูนย์เป็นจำนวนมาก หรือ sparse matrix) แล้ว เราจะได้ว่าแบบจำลองที่ได้จะสามารถอธิบายโครงสร้างเชิงสาเหตุ และยังเป็นการลดจำนวนตัวแปรในเมทริกซ์  $A$  ลง ซึ่งทำให้ความซับซ้อนของแบบจำลองลดลง ด้วยเหตุนี้เราจะพัฒนาปัญหาค่าเหมาะที่สุดไปในรูปแบบ

$$\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma g(A) \quad (8)$$

โดย  $\gamma > 0$  เป็นพารามิเตอร์ของฟังก์ชันลงโทษ ซึ่งจะเป็นตัวกำหนดว่าเราจะให้น้ำหนักกับฟังก์ชันลงโทษมากเท่าใด และ  $g(A)$  คือฟังก์ชันลงโทษในตัวแปร  $A = [A_1 \ A_2 \ \dots \ A_p]$  ที่จะทำให้ได้ผลเฉลยที่สมาชิกภายใน  $A_k$  มีศูนย์เป็นจำนวนมาก ในแต่ละงานวิจัยจะใช้รูปแบบฟังก์ชัน  $g(A)$  ที่ต่างกัน เช่น การใช้ฟังก์ชันลงโทษเป็น นอร์ม-2

$$g(A) = \|A\|_2^2$$

ในสมการ (8) โดยเรียกปัญหานี้ว่าการถดถอยแบบบริดจ์ (ridge regression) [10] การใช้ฟังก์ชันลงโทษรูปแบบนี้จะทำให้ปัญหาค่าเหมาะที่สุดมีผลเฉลยรูปแบบปิดเสมอ โดยไม่ขึ้นกับลักษณะของเมทริกซ์  $H$  ว่าเป็นเมทริกซ์เต็มขั้นหรือไม่ ผลเฉลยรูปแบบปิดของปัญหาการถดถอยแบบบริดจ์คือ

$$A = (YH^T)(HH^T + \gamma I)^{-1}$$

เนื่องจากผลเฉลยของปัญหาการถดถอยแบบบริดจ์ ไม่มีการบังคับบางตำแหน่งในเมทริกซ์  $A$  ให้มีค่าเป็นศูนย์ โดยทั่วไปแล้วผลเฉลยที่ได้จากรูปแบบนี้จะยังมีลักษณะเป็นเมทริกซ์หนาแน่นเหมือนผลเฉลยของปัญหาค่ากำลังสองต่ำสุด ในขณะที่การใช้ฟังก์ชันลงโทษเป็น นอร์ม-1

$$g(A) = \|A\|_1$$

ในสมการ (8) จะเป็นปัญหาที่รู้จักกันในนามว่าการถดถอยแบบ lasso (lasso regression) [8, 11] การใช้ฟังก์ชันลงโทษรูปแบบนี้เป็นที่ทราบกันดีว่าจะทำให้ได้ผลเฉลยที่มีลักษณะเบาบาง [11] ดังนั้นเมื่อ  $A_1, A_2, \dots, A_p$  มีศูนย์เป็นจำนวนมากแล้ว เราจึงอ่านและเลือกตำแหน่งที่เมทริกซ์เหล่านี้เป็นศูนย์ *พร้อมๆ กัน* เพื่อนำไปใช้อธิบายความสัมพันธ์ของตัวแปรได้

เมื่อพิจารณาข้อดีของปัญหาการถดถอยแบบบริดจ์ในแง่ที่ว่าเมทริกซ์  $H$  ไม่จำเป็นต้องเป็นเมทริกซ์เต็มขั้นได้นั้น หากรวมข้อดีของการถดถอยแบบ lasso ที่ทำให้ได้ผลเฉลยแบบเบาบาง จึงได้มีผู้เสนอการใช้ฟังก์ชันลงโทษที่ผสมระหว่าง นอร์ม-1 กับ นอร์ม-2 เป็น

$$g(A) = \alpha \|A\|_1 + (1 - \alpha) \|A\|_2^2$$

โดยที่  $\alpha \in [0, 1]$  ในสมการ (8) โดยเรียกปัญหานี้ว่าการถดถอยแบบ elastic net (elastic net regression) [12]

ถึงแม้ว่าปัญหาการถดถอยแบบ lasso จะให้ผลเฉลย  $A_1, A_2, \dots, A_p$  ที่มีศูนย์เป็นจำนวนมาก แต่ตำแหน่งของศูนย์ในแต่ละ  $A_k$  นั้นไม่ได้จำเป็นต้องอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกัน ทำให้ตีความโครงสร้างเชิงสาเหตุของแบบจำลองที่ได้ตาม (2) นั้นเป็นไปได้ยาก เพราะต้องอ่านจาก *รูปแบบร่วม* ของศูนย์ในทุกๆ  $A_k$

ด้วยเหตุนี้เราจึงพิจารณา

$$g(A) = \sum_{i \neq j} \| [ (A_1)_{ij} \ (A_2)_{ij} \ \dots \ (A_p)_{ij} ] \|_2 \quad (9)$$

การใช้ผลบวกของค่าที่ไม่เป็นลบสำหรับทุกๆ  $(i, j)$  นั้นเสมือนกับการใช้นอร์ม-1 ดังนั้นเมื่อ  $g(A)$  มีค่าน้อยระดับหนึ่ง (จากการเลือกค่า  $\gamma$ ) จะมีบางตำแหน่ง  $(i, j)$  ที่ทำให้  $\| [ (A_1)_{ij} \ (A_2)_{ij} \ \dots \ (A_p)_{ij} ] \|_2$  เป็นศูนย์ ซึ่งจะได้ว่าที่ตำแหน่ง  $(i, j)$  นี้  $(A_k)_{ij}$  จะเป็นศูนย์ทุกๆ  $k$

ปัญหาถัดมาคือการเลือกค่า  $\gamma$  และค่าอันดับของ MAR ( $p$ ) ที่จะทำให้แบบจำลองที่ได้มีค่าความผิดพลาดต่ำ และต้องสามารถอธิบายลักษณะโครงสร้างเชิงสาเหตุได้อย่างสมเหตุสมผล โดยจะเห็นได้ว่าการเพิ่มค่า  $\gamma$  จะทำให้แบบจำลองมีความซับซ้อนน้อยลง (เมทริกซ์  $A$  ที่ได้จะมีศูนย์เป็นจำนวนมากขึ้น) แต่อาจทำให้ค่าความผิดพลาดของแบบจำลองมีค่ามากขึ้น ในทางกลับกันหากเพิ่มค่า  $p$  จะทำให้ค่าความผิดพลาดของแบบจำลองมีค่าลดลง แต่จะทำให้แบบจำลองมีความซับซ้อนมากขึ้น ดังนั้นเราจะใช้เกณฑ์การเลือกแบบจำลองสำหรับค่า  $\gamma$  และ  $p$  ที่ต่างกัน โดยเกณฑ์การเลือกแบบจำลองที่นิยมใช้ [7, 12, 13] คือ Bayesian Information Criterion [14]

$$\text{BIC score} = -2\mathcal{L} + d \ln(N)$$

โดย  $\mathcal{L}$  คือฟังก์ชันความเป็นไปได้,  $d$  คือจำนวนตัวแปรอิสระในแบบจำลอง และ  $N$  คือจำนวนข้อมูล

เนื่องจาก (1) หากตั้งสมมติฐานให้  $u(t)$  มีการแจกแจงแบบปกติแล้ว จะได้ว่า

$$\mathcal{L} = -\frac{N}{2} \ln(\det(\mathcal{R}(\theta)))$$

โดยที่  $\mathcal{R}(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N e(t, \theta)e(t, \theta)^T$  หรือเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วมเกี่ยวของตัวอย่าง โดย  $e(t, \theta)$  คือ ค่าความคาดเคลื่อนระหว่างค่าที่ประมาณได้จากแบบจำลองกับข้อมูลค่าจริงที่เวลา  $t$  และ  $e(t, \theta) \in \mathbb{R}^n$  โดยที่  $n$  คือจำนวน voxel ในสมอง

ดังนั้นเราสามารถเขียนเกณฑ์การเลือกแบบจำลองได้ใหม่

$$\text{BIC score} = N \ln(\det(\mathcal{R}(\theta))) + d \ln(N)$$

หลังจากได้แบบจำลองมาแล้ว เราจะตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลองที่ได้ โดยการนำข้อมูลอีกชุดหนึ่งมาคำนวณหาค่าความแม่นยำของแบบจำลองโดยคำนวณจาก

$$\% \text{ fit} = \left(1 - \frac{\|Y - \hat{Y}\|_2^2}{\|Y\|_2^2}\right) \times 100\% \quad (10)$$

โดยที่  $Y$  คือข้อมูลจริงและ  $\hat{Y}$  คือค่าประมาณที่ได้จากผลตอบของแบบจำลอง

อย่างไรก็ตามมีวิธีที่น่าสนใจในการวิเคราะห์ความถูกต้องอีกหลายวิธีนอกเหนือจากที่กล่าวถึงข้างต้น เช่นใน [15] เนื่องจากการทำข้อมูล fMRI แบบเวลาจริง ดังนั้นจึงใช้วิธีวิเคราะห์ความแม่นยำโดยการป้อนกลับ หลักการคือหลังจากหาแบบจำลองเสร็จแล้ว จะวัดค่าความผิดพลาด จากนั้นป้อนกลับโดยการให้บุคคลที่กำลังสแกนสมองอยู่นั้นทำภารกิจอย่างหนึ่งเพื่อกระตุ้นสมองส่วนที่สนใจ จากนั้นหาแบบจำลองอีกครั้งและดูว่าค่าความผิดพลาดลดลงหรือไม่ เป็นต้น หรือใน [1] ใช้วิธีวิเคราะห์ความแม่นยำโดยดูจากความถูกต้องในการนำแบบจำลองที่ได้ไปใช้ในการคัดแยกผู้ป่วยจริงกับคนปกติ

ในการนำข้อมูลที่ได้ไปหาแบบจำลองนั้น การประมวลผลข้อมูลก่อนจะช่วยเพิ่มความถูกต้องของแบบจำลองที่ได้อย่างมาก เช่น หากเรารู้ส่วนของสมองที่เราสนใจ (Region of Interest หรือ ROI) ก่อนแล้ว เราก็สามารถลดจำนวนตัวแปรได้โดยการหาค่าเฉลี่ยของกลุ่มตัวแปรที่เราสนใจเพื่อลดจำนวนตัวแปรในระบบ ก่อนนำข้อมูลที่ได้ไปใช้ในการหาแบบจำลอง เช่นใน [6] ใช้วิธีการแบ่ง ROI เป็น 6 ส่วนซึ่งทำให้หมดปัญหาจำนวนข้อมูลไม่เพียงพอ แต่เหตุผลหลักในการประมวลผลข้อมูล คือเพื่อลดระดับความแตกต่างของข้อมูลที่วัดได้ หากข้อมูลอยู่ในระดับสเกลที่ต่างกันแล้ว การใช้สมการที่ (1) อาจทำให้ได้ผลเฉลยที่สมาชิกในเมทริกซ์  $A$  มีขนาดที่ต่างกันมากเกินไป ดังนั้นเราจึงต้องปรับขนาดข้อมูลของแต่ละ voxel ให้อยู่ในมาตรฐานเดียวกัน ซึ่งสามารถทำได้ 2 แบบ คือ การหาค่าสูงสุดของแต่ละ voxel แล้วนำมาปรับขนาด หรือการหาค่าเฉลี่ยและส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานแล้วนำมาปรับขนาด โดยวิธีหลังเป็นวิธีที่ดีกว่าแบบแรก [16] หากข้อมูลบาง voxel มีการเปลี่ยนแปลงอย่างมากแล้วการปรับระดับโดยให้ข้อมูลในแต่ละ voxel มีค่าเฉลี่ยเป็นศูนย์และส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานเป็นหนึ่งจะช่วยลดผลของการเปลี่ยนแปลงได้

### 3 รายละเอียดของข้อเสนอโครงการ

#### 3.1 วัตถุประสงค์

- เพื่อศึกษาการหาแบบจำลองที่สามารถนำไปอธิบายโครงสร้างเชิงสาเหตุแบบ Granger ในข้อมูลการทำงาน

ของสมองระหว่างส่วนต่างๆ

#### 3.2 ขั้นตอนการทำงาน

1. จัดรูปปัญหาการประมาณค่าของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เพื่อใช้ในการอธิบายความสัมพันธ์การทำงานของส่วนต่างๆ ในสมองให้เป็นปัญหาค่าเหมาะที่สุด
2. หาผลเฉลยด้วยวิธีเชิงเลขและเขียนชุดคำสั่งด้วย MATLAB
3. วิเคราะห์ความถูกต้องของแบบจำลองที่ได้

#### 3.3 ผลลัพธ์ที่คาดหวังจากโครงการ

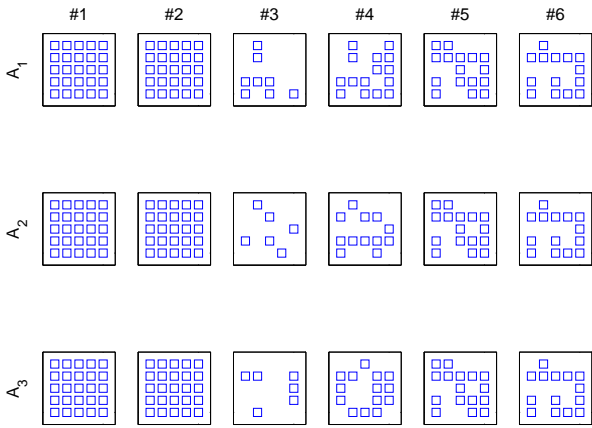
- ได้ชุดคำสั่ง MATLAB ที่แก้ปัญหาการหาแบบจำลองการทำงานของสมองส่วนต่างๆ และสามารถเรียนรู้โครงสร้างเชิงสาเหตุของข้อมูลสมองที่ได้มา

#### 3.4 ภาพรวมของโครงการ

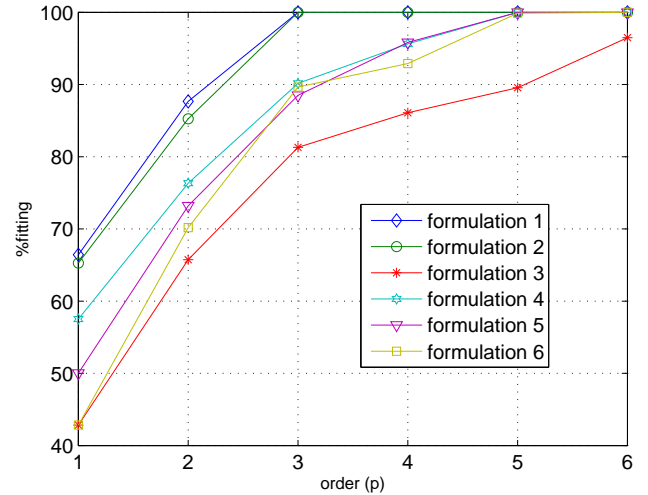
โครงการนี้จะศึกษาการหาแบบจำลองที่ใช้ในการอธิบายความสัมพันธ์ของการทำงานระหว่างส่วนต่างๆ ในสมอง โดยการวัดค่า BOLD ที่แต่ละ voxel จากนั้นนำข้อมูลที่วัดได้มาหาแบบจำลอง โดยจะใช้แบบจำลอง MAR ร่วมกับฟังก์ชันลงโทษเพื่อให้ได้ว่าสมาชิกของเมทริกซ์  $A_k$  จะต้องมีค่าเป็นศูนย์ที่ตำแหน่งเดียวกันทุกค่า  $k = 1, 2, \dots, p$  และจะมีการใส่เงื่อนไขเสถียรภาพลงในแบบจำลองเพื่อให้ได้แบบจำลองที่สมเหตุสมผลมากขึ้น ซึ่งจะได้เป็นปัญหาค่าเหมาะที่สุด หลังจากนั้นจะเป็นการหาผลเฉลยของปัญหาค่าเหมาะที่สุดนี้ โดยการเขียนชุดคำสั่งใน MATLAB ท้ายที่สุดจะทดสอบว่าแบบจำลองที่ได้นั้นสามารถบอกความสัมพันธ์ระหว่างสมองส่วนต่างๆ ได้ดีเพียงใด

#### 3.5 สรุปเนื้อหาส่วนของโครงการที่ได้ทำไปแล้วในภาคการศึกษาต้น รวม ผลการทดลองและการวิเคราะห์

- กำหนดฟังก์ชันจุดประสงค์ที่จะใช้ในการหาแบบจำลอง ดังสมการ (8)
- เขียนโปรแกรมที่ใช้ในการสังเคราะห์ข้อมูลตามสมการ (1) เพื่อใช้ในการทดสอบรูปแบบปัญหาที่นำเสนอ โดยให้  $u(t)$  มีการแจกแจงปกติ และให้เมทริกซ์  $A$  ที่ได้มีลักษณะเบาบางและสอดคล้องเงื่อนไข (2)
- ทดลองศึกษาลักษณะผลตอบของแบบจำลอง โดยการสังเคราะห์ข้อมูลที่ได้จากแบบจำลองถดถอยตัวเองที่มี 5 ตัวแปร อันดับ 3 โดยในที่นี้จะใช้รูปแบบฟังก์ชันลงโทษทั้งหมด 6 แบบในการทดลองดังนี้
  - ปัญหา 1  $\min_A \|Y - AH\|_F^2$
  - ปัญหา 2  $\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma \|A\|_2^2$



รูปที่ 1: รูปแบบของศูนย์ในเมทริกซ์  $A_1, A_2, A_3$  ที่เป็นคำตอบของปัญหา 1-6 โดยเราใช้สี่เหลี่ยมแทนตำแหน่งที่ค่าใน  $A_k$  ไม่เป็นศูนย์



รูปที่ 2: เปอร์เซนต์ความแม่นยำของแบบจำลองคำนวณตาม (10) กับอันดับของแบบจำลองของปัญหา 1-6

- ปัญหา 3  $\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma \|A\|_1$
- ปัญหา 4

$$\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma (\alpha \|A\|_1 + (1 - \alpha) \|A\|_2^2)$$

โดยกำหนดให้  $\alpha = 0.5$

- ปัญหา 5

$$\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma \sum_{i \neq j} \| [ (A_1)_{ij} \ \cdots \ (A_p)_{ij} ] \|_2$$

- ปัญหา 6

$$\min_A \|Y - AH\|_F^2 + \gamma \sum_{\forall i, j} \| [ (A_1)_{ij} \ \cdots \ (A_p)_{ij} ] \|_2$$

โดยในการทดลองได้ทำการหาค่าความแม่นยำจากปัญหา 6 รูปแบบ และตรวจสอบเสถียรภาพของแบบจำลองที่อันดับ  $p$  ตั้งแต่ 1 ถึง 6 โดยการใช้โปรแกรม CVX [17] ซึ่งเป็นโปรแกรมแปลงปัญหาค่าเหมาะที่สุดให้อยู่ในรูปแบบคอนเวกซ์ ซึ่งจะทำให้ปัญหาดังกล่าวสามารถหาค่าผลเฉลยได้ง่าย ในการแก้ปัญหาที่เหมาะสมที่สุด เหตุผลที่ทำการทดลองถึงอันดับ 6 เนื่องจากที่อันดับ 7 ขึ้นไปนั้น  $H$  ไม่เป็นเมทริกซ์เต็มชั้น ดังนั้นเราจึงพิจารณาถึงแค่อันดับ 6 โดยในการทดลองขั้นต้น เราจะกำหนดให้  $\gamma = \frac{0.1}{\rho}$  โดยที่  $\rho$  เป็นค่าความหนาแน่นของปริมาณศูนย์ในแบบจำลองจริงในเมทริกซ์  $A$  ซึ่งมีค่าในช่วง  $[0,1]$  คือถ้า  $A$  หนาแน่นมาก เราจะใช้  $\gamma$  ค่าน้อยซึ่งทำให้ค่าประมาณของ  $A$  มีลักษณะหนาแน่น

จากผลการทดลองลักษณะการกระจายตัวของตัวแปรที่ไม่เป็นศูนย์ในเมทริกซ์  $A$  ในแบบจำลองที่อันดับ 3 ในรูปที่ 1 จะเห็นได้ว่าปัญหา 1 และ 2 นั้นจะได้ผลเฉลยที่ไม่มีตัวแปรใดเลยในเมทริกซ์  $A$  มีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งแตกต่างกับผลเฉลย

ตารางที่ 1: เสถียรภาพของแต่ละแบบจำลองที่ได้จากปัญหา 1-6 : Yes คือ แบบจำลองมีเสถียรภาพ และ No คือ แบบจำลองไม่มีเสถียรภาพ

$p$	#1	#2	#3	#4	#5	#6
1	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
2	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
3	No	No	Yes	Yes	Yes	Yes
4	No	No	Yes	Yes	No	Yes
5	No	No	Yes	No	No	No
6	No	No	Yes	No	No	Yes

ของปัญหาอีก 4 รูปแบบที่เหลือที่จะต้องมียังบางตำแหน่งในเมทริกซ์  $A$  มีค่าเป็นศูนย์ และจะเห็นได้ว่าผลเฉลยของปัญหา 3 นั้นมีลักษณะเบาบางมากที่สุด ในขณะที่ปัญหา 4 ซึ่งเป็นการพัฒนารูปแบบฟังก์ชันลงโทษจากปัญหา 3 จะมีตำแหน่งในเมทริกซ์  $A$  ที่ไม่เป็นศูนย์มากกว่าผลเฉลยของปัญหา 3 ในขณะที่ปัญหาที่ 5 และ 6 จะได้ผลเฉลยซึ่งมีรูปแบบของตำแหน่งศูนย์เหมือนกันในเมทริกซ์  $A_k$  ทุกค่า  $k$  แต่ผลเฉลยจากปัญหา 5 จะได้ว่าแนวทแยงมุมของทุกเมทริกซ์  $A_k$  จะไม่มีค่าเป็นศูนย์ ในขณะที่ผลเฉลยจากปัญหา 6 จะอนุญาตให้แนวทแยงมุมของเมทริกซ์  $A_k$  มีค่าเป็นศูนย์ได้

จากผลการทดลองในการหาค่าความแม่นยำของแบบจำลองดังรูปที่ 2 จะเห็นได้ว่าเราสามารถแบ่งกลุ่มของรูปแบบปัญหาได้เป็น 3 แบบโดยปัญหา 1 และ 2 จะจัดเป็นอยู่ในกลุ่มที่มีความแม่นยำสูง ส่วนปัญหา 4, 5, และ 6 นั้นเป็นกลุ่มที่มีความแม่นยำระดับปานกลาง ในขณะที่ปัญหา 3 เป็นปัญหาที่มีผลเฉลยซึ่งมีความแม่นยำค่อนข้างต่ำ

จากผลการตรวจสอบเสถียรภาพของแบบจำลองในตารางที่ 1 และลักษณะการกระจายตัวของตัวแปรที่ไม่เป็นศูนย์ในเมทริกซ์  $A$  ในแบบจำลองที่อันดับ 3 ในรูปที่ 1

จะเห็นได้ว่ารูปแบบปัญหาที่ให้ผลเฉลยซึ่งเมทริกซ์  $A$  มีลักษณะเบาบางมากกว่าจะมีแนวโน้มที่แบบจำลองที่ได้จะมีเสถียรภาพมากกว่า

จากผลการทดลองทั้ง 3 จะเห็นได้ว่าแต่ละแบบจำลองจะมีข้อดีแตกต่างกันไป โดยในโครงการนี้เราต้องการที่จะได้แบบจำลองที่ได้เมทริกซ์  $A$  ซึ่งมีลักษณะเบาบาง และรูปแบบของศูนย์ในทุกๆ  $A_k$  ต้องสอดคล้องกันดัง (2) อีกทั้งเรายังต้องการให้แบบจำลองที่ได้มีค่าความแม่นยำของแบบจำลองในระดับที่น่าพอใจ ดังนั้นแบบจำลองที่ 4, 5, และ 6 จึงเป็นแบบจำลองที่น่าสนใจ เนื่องจากแบบจำลองเหล่านี้สามารถผสมผสานคุณลักษณะของแบบจำลองที่เราต้องการได้พอสมควร

### 3.6 อธิบายส่วนของงานที่จะทำต่อไปในภาคการศึกษาปลาย

- จากฟังก์ชันจุดประสงค์ (8) กำหนดฟังก์ชันลงโทษ  $g(A)$  ที่จะใช้ในการหาแบบจำลอง
- เลือกวิธีที่จะใช้ในการเลือกค่า  $\gamma$  และอันดับของแบบจำลอง  $p$  โดยค่าที่เลือกจะต้องทำให้ได้แบบจำลองที่มีค่าความผิดพลาดต่ำ และหากค่าที่เราสามารถเลือกได้มีหลายค่า เราอาจจะเลือกค่าที่ทำให้ได้แบบจำลองที่มีเสถียรภาพโดยไม่จำเป็นต้องใส่เงื่อนไขทางด้านเสถียรภาพลงในแบบจำลองเพิ่มเติม
- หาผลเฉลยของฟังก์ชันจุดประสงค์ด้วยวิธีเชิงเลข โดยการเขียนชุดคำสั่งใน MATLAB และเนื่องจากข้อมูล fMRI มีจำนวนตัวแปรมาก ดังนั้นจึงจำเป็นต้องเลือกวิธีที่มีประสิทธิภาพในการแก้ปัญหาค่าที่เหมาะสมที่สุด
- เลือกวิธีในการวิเคราะห์ความถูกต้องของแบบจำลอง
- วิเคราะห์โครงสร้างเชิงสาเหตุที่เรียนรู้ได้ว่ามีความสมเหตุสมผลเพียงใด

## 4 บทสรุป

ในภาคการศึกษานี้ได้ศึกษาการหาแบบจำลองจากเอกสารอ้างอิง จากนั้นศึกษาการเก็บข้อมูล fMRI จากเครื่อง fMRI และหาข้อมูล fMRI ที่จะใช้ในการหาแบบจำลอง เมื่อได้ข้อมูล fMRI มาแล้วจึงเริ่มศึกษาข้อมูล และได้ทำการเพิ่มสมมติฐานเกี่ยวกับคุณสมบัติด้านเสถียรภาพที่แบบจำลองควรมี ตามด้วยกำหนดฟังก์ชันจุดประสงค์ และเงื่อนไขของแบบจำลอง ท้ายที่สุดได้ทดลองเปรียบเทียบคุณลักษณะของฟังก์ชันลงโทษที่ได้มีการกล่าวในเอกสารอ้างอิง

## 5 เอกสารอ้างอิง

[1] O. Demirci, M. C. Stevens, N. C. Andreasen, A. Michael, J. Liu, T. White, G. D. Pearlson, V. P. Clark, and V. D. Calhoun. Investigation of relationships between fMRI brain networks

in the spectral domain using ICA and Granger causality reveals distinct differences between schizophrenia patients and healthy controls. *Neuroimage*, 46(2):419–431, 2009.

- [2] D. A. Feinberg, S. Moeller, S. M. Smith, E. Auerbach, S. Ramanna, M. F. Glasser, K. L. Miller, K. Ugurbil, and E. Yacoub. Multiplexed echo planar imaging for sub-second whole brain fMRI and fast diffusion imaging. *PLoS One*, 5(12):e15710, 2010.
- [3] K. E. Stephan and A. Roebroeck. A short history of causal modeling of fMRI data. *Neuroimage*, 2012.
- [4] H. Lütkepohl. *New Introduction to Multiple Time Series Analysis*. Springer Verlag, 2006.
- [5] R. Garg, G. A. Cecchi, and A. R. Rao. Full-brain autoregressive modeling (FARM) using fMRI. *Neuroimage*, 58(2):416–441, 2011.
- [6] G. Deshpande, S. LaConte, G. A. James, S. Peltier, and X. Hu. Multivariate Granger causality analysis of fMRI data. *Human Brain Mapping*, 30(4):1361–1373, 2009.
- [7] R. Goebel, A. Roebroeck, D. S. Kim, and E. Formisano. Investigating directed cortical interactions in time-resolved fMRI data using vector autoregressive modeling and Granger causality mapping. *Magnetic Resonance Imaging*, 21(10):1251–1261, 2003.
- [8] W. Tang, S. L. Bressler, C. M. Sylvester, G. L. Shulman, and M. Corbetta. Measuring Granger Causality between Cortical Regions from Voxelwise fMRI BOLD Signals with LASSO. *PLoS Computational Biology*, 8(5):e1002513, 2012.
- [9] D. Banjerdpongchai. *Dynamical Control Systems Analysis, Design and Application*. Chulalongkorn press, 2008.
- [10] P. A. Valdés-Sosa, J. M. Sánchez-Bornot, A. Lage-Castellanos, M. Vega-Hernández, J. Bosch-Bayard, L. Melie-García, and E. Canales-Rodríguez. Estimating brain functional connectivity with sparse multivariate autoregression. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 360(1457):969–981, 2005.
- [11] S.P. Boyd and L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge Univ Pr, 2004.
- [12] S. Ryali, T. Chen, K. Supekar, and V. Menon. Estimation of functional connectivity in fMRI data using stability selection-based sparse partial correlation with elastic net penalty. *Neuroimage*, 59(4):3852–3861, 2011.
- [13] N. D. Daw, S. J. Gershman, B. Seymour, P. Dayan, and R. J. Dolan. Model-based influences on humans' choices and striatal prediction errors. *Neuron*, 69(6):1204–1215, 2011.
- [14] T. Söderström and P. Stoica. *System Identification*. Prentice Hall International, London, 1989.
- [15] C. O. Plumptre, L. I. Kuncheva, N. N. Oosterhof, and S. J. Johnston. Naive random subspace ensemble with linear classifiers for real time classification of fMRI data. *Pattern Recognition*, 45(6):2101–2108, 2012.
- [16] F. Pereira, T. Mitchell, and M. Botvinick. Machine learning classifiers and fMRI: a tutorial overview. *Neuroimage*, 45(1):S199–S209, 2009.
- [17] M. Grant and S. Boyd. CVX: Matlab software for disciplined convex programming, version 1.21, 2010.