

文章编号: 1671-7848(2007)04-0398-03

核独立成分分析在 fMRI 数据中的应用

张红娟¹, 郭崇慧²

(1. 大连理工大学 应用数学系, 辽宁 大连 116024; 2. 大连理工大学 系统工程研究所, 辽宁 大连 116024)



摘 要: 介绍了一种全新的功能核磁共振数据(fMRI)分析方法即核独立成分分析方法,它是核方法与典型相关分析方法的综合运用。将 Bach 和 Jordan 提出的核独立成分分析方法应用于功能核磁共振成像数据分析,并基于实验所得的时间序列与参考函数的相关系数的大小,比较了该方法与经典的成分分析方法—主成分分析(PCA)方法与快速不动点算法(FastICA)的实验结果。结果表明,对 fMRI 数据而言,核独立成分分析方法和 FastICA 算法要优于 PCA 算法。

关键词: 核独立成分分析; 快速不动点算法; 主成分分析; 功能核磁共振成像数据
中图分类号: TP 391 文献标识码: A

Kernel Independent Component Analysis for fMRI Data

ZHANG Hong-juan¹, GUO Chong-hui²

(1. Department of Applied Mathematics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China;
2. Institute of Systems Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: A novel functional magnetic resonance imaging (fMRI) data analysis method is introduced. The proposed method, referred as kernel independent component analysis (Kernel-ICA), combines the strength of the kernel approaches with canonical correlation analysis. For performing Kernel-ICA, an algorithm developed by Bach and Jordan is employed. Based on the analysis of fMRI data, the performance of Kernel-ICA is compared with classical algorithms such as PCA and FastICA. The comparative results are based on correlation and associated time-courses. Numerical results show that both Kernel-ICA and FastICA are outperformed to PCA for analyzing the fMRI data.

Key words: Kernel independent component analysis; FastICA algorithm; principle component analysis; functional magnetic resonance imaging data

1 引言

功能核磁共振成像(fMRI)是探测人脑功能时间和空间信息的一个强有力的新技术,它主要是依据血流的敏感性和血氧水平依赖性(Blood Oxygenation Level Dependent, BOLD)。目前已有多种分析 fMRI 数据的方法,从各种方法所基于的分析机制上可以将它们分为两大类,即“数据驱动”方法(data-driven)和“假设驱动”方法(hypothesis-driven)。其中“数据驱动”方法,是一种探测性数据分析方法,它直接通过某些数据分析工具,通过分析数据的内在结构,推断出脑的激活区域,得出有用的信息。而且,多维数据更能从本质上揭示大脑各体元间的关系,从而为研究大脑各空间区域上的互激活提供更有用的信息。在各种“数据驱动”方法中,独立成分分析(ICA)方法是 fMRI 数据分析的一种强有力的^[1-3]工具。独立成分分析方法是一种寻找潜在信

号或者是从线性混合数据中找到相互独立的源成分的方法,它能从空间上和时间上对 fMRI 数据进行分析,并找到脑的激活信息。然而,由于大脑内部结构的复杂性,在其内部存在着更加复杂的信息混合过程,比如说非线性的混合过程。而核化^[4]恰好能使非线性变量 $y^i \in \mathbf{R}^m (i = 1, \dots, N)$ 线性化,它通过非线性映射 $\phi: \mathbf{R}^m \rightarrow \mathcal{R}$, 把 y^i 映射到某一核特征空间 \mathcal{R} , 从而使得 \mathcal{R} 空间中的线性盲源分离等价于原空间中的非线性盲源分离。核独立成分分析算法^[5]是标准独立成分分析算法的一个推广,已经应用到许多领域,例如:人脸识别分析^[6,7]等领域。

本文利用核独立成分分析方法分析了 fMRI 数据,并比较了该方法与经典的成分分析方法:主成分分析(PCA)与快速不动点算法(FastICA)^[8]的实验结果。结果表明,对 fMRI 数据而言,核独立成分分析方法和 FastICA 算法要优于 PCA 算法。

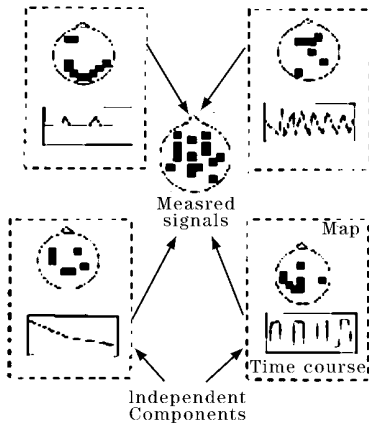
收稿日期: 2007-03-20; 收修定稿日期: 2007-04-18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(101571018)

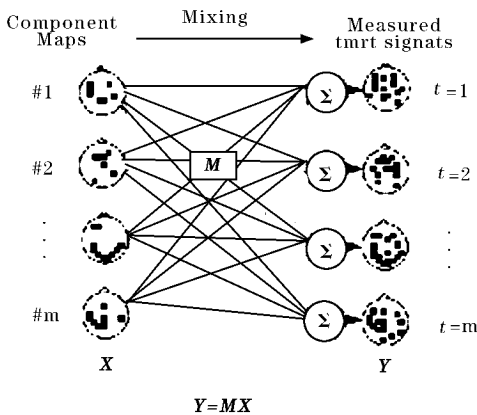
作者简介: 张红娟(1980-), 女, 山东莱芜人, 博士, 主要研究方向为独立成分分析及其应用等。

2 模型

在简单的单任务刺激实验中,实验任务与其他一些干扰的心理活动所激活的脑区在空间上是不相关的,在这些脑区中混杂了许多非自然的信号:比如瞬间产生的神经活动,头动信息,实验过程中的噪声信息等。上述每个信号都可以看作是空间上相互独立的,并且它们与每个体元的时间过程及其成分图相关。上述过程的图形表示如图 1 所示。



(a) fMRI 数据分解成独立成分图示



(b) 各个时刻每个成分经 M 混合成 fMRI 数据的过程示意图

图 1 ICA 用于 fMRI 数据的图形表示

Fig.1 Visualization of ICA applied to fMRI data

假设每一个由定值的空间分布描述的成分图都叠加到了相关 fMRI 信号的脑区上,同时假定成分图之间是独立的,而且是惟一确定的。假设成分图中的激活体元是稀疏的、不重叠的,且每个体元的 fMRI 信号是各自成分激活信号的混合。基于上述假设,ICA 可以用于处理 fMRI 时间序列,定位 BOLD 的激活位置。

假定 $Y = \{y^1, \dots, y^N\}$ 是 fMRI 观测数据组成的 $m \times N$ 矩阵, $X = \{x^1, \dots, x^N\}$ 是由各个成分图值的大小组成的 $m \times N$ 矩阵。在线性混合中 M 表示 $m \times m$ 混合矩阵,它的每一列是相应于 m 个成分的时间过程,在非线性混合过程中 M 则表示更为复杂

的混合过程。其中 m 表示扫描的次数, N 表示大脑体元的数目。空间 ICA 由混合模型 $Y = MX$ 给出,其中 X 的各行相互独立, M 未作任何假设。

3 核独立成分分析算法

F. R. Bach 和 M. I. Jordan 指出核独立成分分析并不是 ICA 算法的简单核化,而是一种全新的 ICA 算法。它是以核 Hilbert 空间中的变量间的典型相关性作目标函数,对其最小化得到的有效算法。同时作者证明了该函数跟常用的互信息有一定的相关性,而且拥有较好的数学性质,并且指出此种函数空间适用于各种不同分布的源,所得到的算法随着源的变化更加稳健^[5]。

1) 核独立成分分析算法 下面简单介绍一下算法的机理。给定一组数据向量 $\{y^1, \dots, y^N\} \in \mathbb{R}^m$ 及参数矩阵 W , 有 $x^i = W * y^i, i = 1, \dots, N$, 其中 $\{x^1, \dots, x^N\} \in \mathbb{R}^m$ 是估计的源信号向量。由 m 个成分能得到 m 个 Gram 矩阵 K_1, \dots, K_m , 其中 K_j 是由 $\{x_j^i\}$ 生成的, $j = 1, \dots, m; i = 1, \dots, N$, 并且由这些矩阵,定义了目标函数: $C(W) =$

$\hat{I}_{\delta_{\mathcal{K}}}(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m) = -\frac{1}{2} \lg \delta_{\mathcal{K}}^{\kappa}(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m)$ 最小化 $\mathcal{C}(W)$ 就得到了核 ICA 算法。其中:

$\delta_{\mathcal{K}}^{\kappa}(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m) = \det \mathcal{L}_{\kappa} / \det D_{\kappa}$ 是核化的方差。 \mathcal{L}_{κ} 的对角元素是 $\mathcal{L}_i + (N \cdot \kappa / 2) * I$, 非对角元素是 $\mathcal{L}_{\kappa}(i, j) = K_i * K_j (i \neq j)$, D_{κ} 是对角矩阵,它的对角元素是 $\mathcal{L}_i + (N \cdot \kappa / 2) * I$, 其中 K_i 是 $N \times N$ 的 Gram 矩阵, κ 为调整参数。

基于上述目标函数的核独立成分分析算法的计算复杂度是 $O(m^3 N^3)$ 。但是正如一些研究者所指出的: Gram 矩阵的谱趋向于快速退化,因此其低阶近似通常就可以给出足够的精确度。对半正定矩阵 K , 它总能分解成 $G * G^T$, 其中 G 是一个 $N \times N$ 矩阵。本文的目的是找到一个 $N \times M$ 的矩阵 $G, M \ll N$, 使得差值 $K - G * G^T$ 的范数小于一个给定的 η 。这个过程可以用不完全 Cholesky 分解来实现,此时的计算复杂度变为 $O(M^2 N)$ 。

同时,由于 fMRI 数据量太大,因此本文在实验前用 PCA 作了降维预处理,所降到的维数大小由著名的信息论指标 AIC 或者 MDL^[9]确定。

下面给出核独立成分分析算法的具体过程:
输入: 数据向量 $\{y^1, \dots, y^N\} \in \mathbb{R}^m$ 核函数:

$$K(x, y) = G_{\sigma}(x - y) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|x - y\|^2\right)$$

- ① 白化数据, 确定源的个数 $p (1 < p < m)$
- ② 初始化解混矩阵 $W \in \mathbb{R}^{p \times m}$ 。
- ③ 最小化目标函数 $\mathcal{C}(W)$

a) 估计源信号 $\hat{s}_1, \dots, \hat{s}_N \in \mathbf{R}^p$, $\hat{s}_i = \mathbf{W} * y^i$, 并计算它们的中心化 Gram 矩阵。

b) 完全 Cholesky 分解计算 $\det \mathcal{L}_\kappa$ 。

c) 计算目标函数：

$$\mathcal{C}(\mathbf{W}) = \hat{\mathcal{I}}_{\delta_\kappa}(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m) = -\frac{1}{2} \lg \delta_\kappa(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m)$$

式中 $\delta_\kappa(\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m) = \det \mathcal{L}_\kappa / \det \mathbf{D}_\kappa$ 。

d) 使用最速下降法最小化 $\mathcal{C}(\mathbf{W})$ 。

输出： \mathbf{W} 并正交化它的每一列。

4 实验结果

1) 图像采集与实验任务 实验的被试是一名健康大学生，右利手，视力正常。采用组块设计，共有 6 个组块，每一个组块包含 20 s 的任务与 20 s 的控制，任务与控制交替出现。实验采用 GE 公司 Signa Horizon 1.5T 超导型磁共振成像系统。实验时，功能成像采用回波平面成像梯度回波序列，其扫描参数如下：TR = 2 000 ms，TE = 40 ms，FOV = 240 × 240 mm²，层厚 = 7 mm，层间距 = 1 mm，矩阵为 64 × 64，FA = 90°，共取 18 层。

用英文单词的字形辨别任务来研究大脑的认知功能。在控制组块中，被试只需注视屏幕中央的“+”，并且放松；在任务组块中，英文单词的真词和假词交替出现，所谓真词，即正确的常用英文单词，字母为 5~6 个，如“apple”，所谓假词，即符合英语单词的构词法则，但是拼写错误的单词，如“dewn”。

2) 方法 首先，对数据进行预处理，用上面所说的 AIC 指标确定源信号数的大小，本文从 120 维降到了 12 维。再者，由文献 [5]，确定调整参数 $\kappa = 0.01$ ，高斯核宽度 $\sigma = 1$ 。本文用线性相关分析方法来评价算法估计激活时间动力学的准确性：构造一个包含方波的参考函数与控制/任务实验设计的 BOLD 脉冲反应函数匹配，如图 2(a) 所示。

而 M 的列为成分图的时间序列，求 M 的每一列与参考函数的相关系数，所得的相关系数越大，说明求得的时间序列与实验任务越相关。把相关系数最大的时间序列对应的成分图叫做一致任务相关 (Consistently Task-Related, CTR) 成分^[1]。

3) 实验结果与讨论 本文比较了由 Kernel-ICA, FastICA 和 PCA 三种算法得到的 CTR 成分的时间序列与参考函数的相关系数，结果如图 2(b)(d) 所示，由于篇幅限制，此实验仅列出三种算法所得的 CTR 成分的时间序列与参考函数的相关系数结果。它们的相关系数分别是 PCA(0.818 8), Kernel-ICA(0.820 3), Fast-ICA(0.850 1)。由计算结果可以看出：Kernel-ICA 算法得到的 CTR 的时间序列与参考函数的相关系数较大，因此它可以用来做 fMRI

数据分析，并且其估计激活的时间动力学准确性比较高。

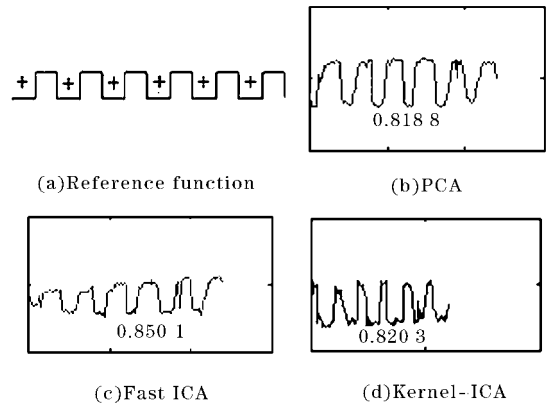


图 2 PCA, FastICA 和 Kernel-ICA 的实验参考函数三种算法的 CTR 成分的时间序列

Fig.2 The reference function in the trial and time series of CTR components of PCA, FastICA and Kernel-ICA

5 结语

本文首次将 F.R.Bach and M.I.Jordan 所提出的核独立成分分析方法，用于功能核磁共振成像数据分析。并基于实验所得的时间序列与参考函数的相关系数的大小，比较了该方法与经典的成分分析方法：成分分析(PCA)与快速不动点算法(FastICA)。实验结果表明：核独立成分分析方法和快速不动点算法(FastICA)要优于 PCA 算法。

参考文献 (References)：

- [1] McKeown M J, Makeig S, Brown G G, et al. Analysis of fMRI data by blind separation into spatial independent component analysis[J]. Human Brain Mapping, 1998, 1(3):160-188.
- [2] Arfanakis K, Cordes D, Haughton V M, et al. Combining independent component analysis and correlation analysis to probe interregional connectivity in fMRI task activation datasets[J]. Journal of Magnetic Resonance Imaging, 2000, 11(8):921-930.
- [3] Moritz C H, Haughton V M, Cordes D, et al. Whole-brain functional MR imaging activation from a finger-tapping task examined with independent component analysis[J]. American Journal of Neuroradiology, 2000, 21:1629-1635.
- [4] Schölkopf B, Smola A, Müller K R. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem[J]. Neural Computation, 1998, 10(5):1299-1319.
- [5] Bach F R, Jordan M I. Kernel independent component analysis[J]. Journal of Machine Learning Research, 2002, 3:1-48.
- [6] Wu Y, Zhuang Y F. Face detection method based on kernel independent component analysis and boosting chain algorithm[C]. Chengdu: ISNN 2006.
- [7] Martingiano T, Leo M, Orazio T D, et al. Face recognition by kernel independent component analysis[C]. Bari Italy: The 17th International Conference on Innovations in Applied Artificial Intelligence, 2005.
- [8] Hyvärinen A. Fast and robust fixed-point algorithms for independent component analysis[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2002, 13(3):626-634.
- [9] Cichocki A, Amari S. Adaptive blind signal and image processing: learning algorithms and applications[M]. Chichester England: J Wiley, 2002.