应用数学 文章编号: 1000-8608(2007)05-0773-04

新的 ICA算法实现成组 fMRI信号盲分离

唐焕文[1], 张伟伟[1,2], 史振威[3], 潘丽丽[1,2], 唐 一源*[2]

(1.大连理工大学 计算生物学和生物信息学研究所, 辽宁 大连 116024;
2.大连理工大学 神经信息学研究所, 辽宁 大连 116024;
3.清华大学 自动化系, 北京 100084)

摘要: 独立成分分析(ICA)方法已被成功地用于处理功能磁共振成像(fMRI)信号,但主要是用于处理单个被试的 fMRI信号,对于多个被试的情况却很少考虑.为此利用一种扩展的 ICA方法——Group ICA来处理多个被试的 fMRI信号,结果表明这种方法在保证结果准确性的前提下,可以大大减少计算量,快速获得统计结果.计算中应用的是 New FP算法,统计结果表明这种算法在估计激活的时间动力学准确性上优于 FastICA算法.

关键词: 独立成分分析; 盲源分离; 功能磁共振成像
中图分类号: TN911.7 文献标识码: A

独立成分分析(independent component analysis, ICA)是近年来发展起来的一种新的数据分析工具,是解决盲源分离[1](blind sources separation, BSS)问题的一种有效方法.现在它已经成为数据分析领域的有力工具,广泛应用于语音信号分离、生物医学信号处理、金融数据分析、图像消噪、人脸识别等众多方面.目前在将它用于处理功能磁共振成像(functional magnetic resonance imaging, fMRI)信号时,人们主要是应用其处理单个被试的 fMRI数据,但在实际实验中,通常需要对多个被试的 fMRI数据进行处理,如果对每个 fMRI数据逐一地进行处理,计算量非常大,而且耗时多.本文利用一种扩展的 ICA方法——Group ICA[2]来处理多个被试的 fMRI信号,以减少计算量,提高运算速度.

1 ICA的一个新的不动点算法

标准 ICA的数学模型为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{s} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{x} = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_N)^{\mathrm{T}}$是 N维观测信号,$\boldsymbol{A}$是 $N\times N$混合矩阵,$\boldsymbol{s} = (s_1 \ s_2 \ \cdots \ s_N)^{\mathrm{T}}$是分量彼此统计独立的源信号. ICA问题就是仅利用观测信号 $x_i\ (i = 1, 2, \cdots, N)$的信息来估计混合矩阵 $\boldsymbol{A}$和独立成分 s_i,即求出一个 $N\times N$矩阵 $\boldsymbol{W} = (\boldsymbol{w}_1 \ \boldsymbol{w}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{w}_N)^{\mathrm{T}}$使得

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{x} \tag{2}$$

而且 $\boldsymbol{u} = (u_1 \ u_2 \ \cdots \ u_N)^{\mathrm{T}}$的各分量是统计独立的.

根据式(2),得到模型的似然函数为[3]

$$\log L(\boldsymbol{W}) = \sum_{t=1}^{T}\sum_{i=1}^{N} \log p_i(\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(t)) + T\log|\det(\boldsymbol{W})| \tag{3}$$

在 ICA的计算中,需要对数据进行必要的预处理,即中心化及白化.所谓的中心化及白化就是对观测向量进行线性变换,使得到的数据 $\tilde{\boldsymbol{x}}$满足 $E\{\tilde{\boldsymbol{x}}\} = \boldsymbol{0}, E\{\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\} = \boldsymbol{I}$.在源信号单位方差且相互统计独立的假设下,可知

$$E\{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\} = \boldsymbol{W}E\{\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}\}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} \tag{4}$$

即矩阵 $\boldsymbol{W}$是正交矩阵,所以只需在正交矩阵空间中去寻找解混矩阵 $\boldsymbol{W}$,这样就减少了变量的数目,简化了问题的求解.根据式(3)、(4)可得到如下的优化问题:

$$\begin{cases} \max\ J(\boldsymbol{W}) = E\left\{\sum_{i=1}^{N} \log p_i(\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{x}})\right\} \\ \text{s.t. } \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} \end{cases} \tag{5}$$

其中解混矩阵 $\boldsymbol{W}$就是优化问题(5)的最优解.

收稿日期: 2005-12-20; 修回日期: 2007-07-13.
基金项目: 国家科技部国际合作资助项目(DF2003); 国家自然科学基金资助项目(10571018).
作者简介: 唐焕文(1936-2006),男,教授,博士生导师; 唐一源*(1966-),男,教授,博士生导师.
?1994-2014 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

根据文献 [4],为了求解 $\boldsymbol{W}$,得到以下的 ICA 算法:

(i) 中心化数据使其为零均值;

(ii) 白化数据,给出 $\tilde{\boldsymbol{x}}$;

(iii) 选择正交矩阵作为 $\boldsymbol{W}$的初始值;

(iv) 计算 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{x}}(t)$,$N$ 维对角阵 $\boldsymbol{K} = \mathbf{diag}(k_i)$, $k_i = \mathrm{sgn}(E\{\mathrm{sech}^2(u_i)\}E\{u_i^2\} - E\{[\tanh(u_i)]u_i\})$, $i = 1, 2, \cdots, N$;

(v) 迭代解混矩阵

$$\boldsymbol{W} \leftarrow E\{-\boldsymbol{K}\tanh(\boldsymbol{u})\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\}\boldsymbol{W}$$

(vi) 作 $\boldsymbol{W}$的对称正交化

$$\boldsymbol{W} \leftarrow (\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})^{-1/2}\boldsymbol{W}$$

(vii) 若不满足结束准则,则返回到 (iv).

这里结束准则意味着 $\boldsymbol{w}_i$ ($i = 1, 2, \cdots, N$) 的新旧向量有相同的方向,即内积为 1. 新算法可简记为 NewFP(new fixed-point)算法.

2 Group ICA的模型

2.1 ICA的模型

设 $\boldsymbol{X}$是 $N \times V$的观测信号,其中 N表示时间点的个数,V 表示体元数. 假设大脑成分图中的激活体元是稀疏而且不重叠的,每个体元的 fMRI 信号是各个成分过程的激活信号的线性混合,则 $\boldsymbol{X}$可以分离成相互统计独立的成分,记 $\boldsymbol{S}$为 N 个分离的成分图,$\boldsymbol{A}$为 $N \times N$ 混合矩阵,则

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{S}$的行是相互之间统计独立的成分图,$\boldsymbol{A}$的列表示相应的成分图的时间序列. 在成分图的空间分布和激活的时间序列都未知的情况之下,要求得 $\boldsymbol{A}$和 $\boldsymbol{S}$就是一个盲源分离问题,因此可以利用独立成分分析的方法来解决,即有

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{X} \tag{7}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{S}}$是通过独立成分分析得到的成分图,$\boldsymbol{W}$是解混矩阵.

2.2 Group ICA的模型

以两个被试 (x, y) 的情况为例进行说明,假设被试的 fMRI信号是相互统计独立的,且每个体元中的数据分别是从两个时间点获得的,分别记为 $\boldsymbol{d}_x = (x_1 \quad x_2)$,$\boldsymbol{d}_y = (y_1 \quad y_2)$,将其混合为一个向量,记为

$$\boldsymbol{d} = (\boldsymbol{d}_x \quad \boldsymbol{d}_y)^{\mathrm{T}} \tag{8}$$

假设提取两个源信号,则对数据降维后利用 ICA 算法计算得到

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{d} =$$

$$\begin{pmatrix} T_1 & T_2 & T_3 & T_4 \\ U_1 & U_2 & U_3 & U_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} T_1x_1 + T_2x_2 + T_3y_1 + T_4y_2 \\ U_1x_1 + U_2x_2 + U_3y_1 + U_4y_2 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} S_{11} + S_{12} \\ S_{21} + S_{22} \end{pmatrix} =$$

$$(\boldsymbol{W}_x \quad \boldsymbol{W}_y)\begin{pmatrix} \boldsymbol{d}_x^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{d}_y^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{W}_x = \begin{pmatrix} T_1 & T_2 \\ U_1 & U_2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{W}_y = \begin{pmatrix} T_3 & T_4 \\ U_3 & U_4 \end{pmatrix}$, $S_{11} = T_1x_1 + T_2x_2$, $S_{21} = U_1x_1 + U_2x_2$, $S_{12} = T_3y_1 + T_4y_2$, $S_{22} = U_3y_1 + U_4y_2$. 因为利用 ICA算法产生的是相互统计独立的成分,$S_{11} + S_{12}$与 $S_{21} + S_{22}$是近似统计独立的,又因为本文假设不同被试的 fMRI信号相互之间是统计独立的,所以 S_{11}、S_{22}是相互独立的 (S_{21}、S_{12}也是相互独立的). 因此,利用 ICA算法保证 $S_{11} + S_{12}$与 $S_{21} + S_{22}$独立的同时也保证 S_{11}与 S_{21} (S_{12}与 S_{22}) 之间是近似独立的,所以,利用解混矩阵可以近似地分离出各个被试的 fMRI信号的源信号[2].

对于多个被试的 fMRI信号 (假设有 M个被试),假设信号之间是统计独立的,首先利用 PCA 将每个被试的数据降维成 $P_i \times V$矩阵 (各个 fMRI数据维数可以不同),然后将所有的降维之后的数据混合成一个$\sum_{i=1}^{M} P_i \times V$的混合矩阵,再利用 PCA对混合矩阵进行第二次降维,降为 $P \times V$矩阵;接下来利用 ICA算法对第二次降维后得到的数据进行处理,通过对第二次降维得到的矩阵进行分块,可以获得每个被试的成分图. 具体计算过程如下.

假设 $\boldsymbol{X}_i = \boldsymbol{F}_i^{-1}\boldsymbol{Y}_i$ ($i = 1, 2, \cdots, M$) 是第 i个信号降维之后的数据,$\boldsymbol{Y}_i$是 $N \times V$矩阵,$\boldsymbol{F}_i^{-1}$是 $P_i \times N$ 降维矩阵 (由 PCA得到的). 则将 M个降维之后的矩阵进行混合后对混合矩阵再进行降维,得到

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{G}^{-1}\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1^{-1}\boldsymbol{Y}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{F}_M^{-1}\boldsymbol{Y}_M \end{pmatrix} \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{G}^{-1}$是 $P \times \sum_{i=1}^{M} P_i$的降维矩阵 (由 PCA得到的).

根据 ICA模型可以得到

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \tag{11}$$

?1994-2014 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

这里 $\boldsymbol{A}$是 $P\times P$的混合矩阵,根据式(10)和(11)有

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1^{-1}\boldsymbol{Y}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{F}_M^{-1}\boldsymbol{Y}_M \end{pmatrix} = \boldsymbol{GAS} \tag{12}$$

对矩阵 $\boldsymbol{G}$进行分块得到

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1^{-1}\boldsymbol{Y}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{F}_M^{-1}\boldsymbol{Y}_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{G}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{G}_M \end{pmatrix} \boldsymbol{AS} \tag{13}$$

$$\boldsymbol{F}_i^{-1}\boldsymbol{Y}_i = \boldsymbol{G}_i\boldsymbol{AS}_i \tag{14}$$

$$\boldsymbol{S}_i = (\boldsymbol{G}_i\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{F}_i^{-1}\boldsymbol{Y}_i \tag{15}$$

$$\boldsymbol{Y}_i \approx \boldsymbol{F}_i\boldsymbol{G}_i\boldsymbol{AS}_i \tag{16}$$

$i = 1,2,\cdots,M$,这样就得到了每个被试的 fMRI信号的独立成分图及其对应的时间序列.

注意,由于 fMRI数据量一般都比较庞大,在计算过程中利用 PCA对数据进行了降维,在这之前利用信息论的方法 AIC/MDL[5]来确定源信号的个数,具体形式如下:

$$AIC(P) = -2V\left(M\sum_{i=1}^{M}P_i - P\right)Q(\hat{\theta}_P) + 2\left(1 + P\sum_{i=1}^{M}P_i + \frac{1}{2}(P-1)\right) \tag{17}$$

$$MDL(P) = -V\left(M\sum_{i=1}^{M}P_i - P\right)Q(\hat{\theta}_P) + \frac{1}{2}\left(1 + P\sum_{i=1}^{M}P_i + \frac{1}{2}(P-1)\right)\ln V \tag{18}$$

$$Q(\hat{\theta}_P) = \ln\left(\frac{(\lambda_{P+1}\cdots\lambda_{M\sum_{i=1}^{M}P_i})^{1/(M\sum_{i=1}^{M}P_i - P)}}{\frac{1}{M\sum_{i=1}^{M}P_i - P}(\lambda_{P+1} + \cdots + \lambda_{M\sum_{i=1}^{M}P_i})}\right) \tag{19}$$

其中 $M\sum_{i=1}^{M}P_i$是第一次降维后的时间点的个数,P是独立成分的个数,是由式(17)、(18)关于 P的最小值确定的. λ_j代表通过 PCA得到的第 j个特征值(其中 λ_j是以由大到小的顺序排列的,$j = p+1,\cdots,M\sum_{i=1}^{M}P_i$).

3　实　验

3.1　材料和方法

实验的被试是 3名健康的大学生,右利手,视力正常. 采用的是组块设计,共有 3个组块,每一个组块包含 20 s的任务与 16 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 mm × 240 mm,层厚为 7 mm,层间距为 1 mm,矩阵为 64× 64, FA= 90°,共取 16层.

实验过程中,在控制组块中,被试只需注视屏幕中央的圆点,并且放松;在任务组块中,会出现不同的符号,每个符号(不考虑方向)都连续出现 3次,被试需要判断出现的 3个相同符号的方向是否一致. 例如: “5”、“△”、“6”方向即不同. 通过这样的实验可以研究大脑的认知功能.

在处理数据之前要对数据做预处理(利用脑功能成像处理软件 SPM将数据做平滑、配准、标准化处理),这样产生了 79× 95× 68个体元. 为了便于呈现激活的结果,选择第 40~ 60层数据进行处理,根据 2.2中的介绍,首先利用 PCA将各个被试的数据降到 40维,第二次降到 20维. 在实验过程中,本文利用 ICA及 Group ICA方法分别对数据进行了处理,并且为了进行比较,分别利用两种算法(FastICA[6]和 New FP)对数据进行了处理(其中 FastICA采用对称形式,选择非线性函数为 tanh).

3.2　实验结果及分析

本文用线性相关的分析方法来评价 ICA算法估计激活的时间动力学准确性[7]. 构造一个包含方波的参考函数(如图 1)与控制 /任务实验设计的 BOLD脉冲反应函数匹配,而混合矩阵的列为成分图的时间序列,求混合矩阵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.

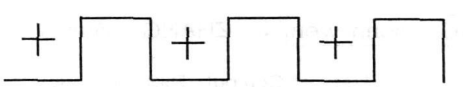


图 1　参考函数

Fig. 1　Reference function

利用 FastICA及 New FP算法计算得到的 3个被试的 CTR成分的时间序列与参考函数的相关系数的统计平均结果分别是 0.743 0.753,而利用这两种算法分别对 3个数据逐一地进行处理得到的结果为 0.733 0.740. 可见,利用 Group ICA不仅可以大大减少计算量,而且可以保证结果的准确性,并且通过比较两种算法的计算结果,表明 New FP算法在估计激活的时间动力学准确

?1994-2014 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

性上优于 FastICA算法. 用 SPM显示其激活,如图 2 3所示,分别是 3个被试的与任务相关的独立成分图,可以发现,在额叶有明显激活.

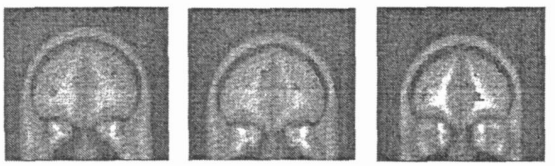


图 2 利用 Group ICA计算得到的 3个被试的与任务相关的独立成分

Fig. 2 The task-related component maps of the three subjects derived by Group ICA

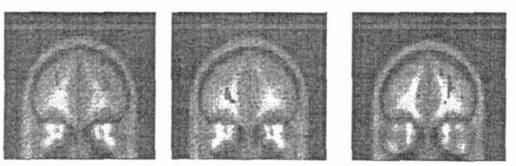


图 3 利用 ICA计算得到的 3个被试的与任务相关的独立成分

Fig. 3 The task-related component maps of the three subjects derived by ICA

4 结 论

本文利用一种扩展的方法处理了在认知功能实验中多个被试的 fMRI信号,计算结果表明这种方法在保证计算结果精确性的前提下,可以大大减少计算量,提高计算速度,而且激活结果表明大脑的额叶有明显的激活现象. 在计算过程中利用了一种新的 ICA算法,结果表明这种算法在估计激活的时间动力学准确性上优于 FastICA算法. 本文的工作表明 ICA不仅可以分离单个 fMRI信号,而且可以分离成组的 fMRI信号.

参考文献:

[1] JUTTEN C, HERAULT J. Blind separation of sources, part I: an adaptive algorithm based on neuromimetic architecture [J]. **Signal Processing**, 1991, **24**: 1-10

[2] CALHOUN V D, ADALI T, PEARLSON G D, *et al*. A method for making group inferences from functional MRI data using independent component analysis [J]. **Hum Brain Mapp**, 2001, **14**: 140-151

[3] HYVÄRINEN A, KARHUNEN J, OJA E. **Independent Component Analysis** [M]. New York: Wiley, 2001: 203-219

[4] SHI Z W, TANG H W, TANG Y Y. A new fixed-point algorithm for independent component analysis [J]. **Neurocomputing**, 2004, **56**: 467-473

[5] CICHOCKI A, AMARI S. **Adaptive Blind Signal and Image Processing: Learning Algorithms and Applications** [M]. New York: John Wiley & Sons, Ltd., 2002

[6] HYVÄRINEN A. The fixed-point algorithm and maximum likelihood estimation for independent component analysis [J]. **Neural Processing Lett**, 1999, **10**(1): 1-5

[7] ESPOSITO F, FORMISANO E, SEIFRITZ E, *et al*. Spatial independent component analysis of functional MRI time-series: to what extent do results depend on the algorithm used? [J]. **Hum Brain Mapp**, 2002, **16**: 146-157

Blind source separation for group fMRI signals using a new independent component analysis algorithm

TANG Huan-wen[1], ZHANG Wei-wei[1,2], SHI Zhen-wei[3], PAN Li-li[1,2], TANG Yi-yuan*[2]

(1.Inst. of Comput. Biol. and Bioinformatics, Dalian Univ. of Technol., Dalian 116024, China;
2.Inst. of Neuroinformatics, Dalian Univ. of Technol., Dalian 116024, China;
3.Dept. of Autom., Tsinghua Univ., Beijing 100084, China)

Abstract Independent component analysis (ICA) has been used effectively for processing the functional magnetic resonance imaging (fMRI) data, but usually the data come from one subject. To process the signals from a group of subjects, an extended independent component analysis method, Group ICA is proposed. The results show that this method can reduce the data and receive the statistical result fast. In the processing, an independent component analysis method named new fixed-point is used, and the results show that the new method is superior to the FastICA on the accuracy of estimating the temporal dynamics of activations.

Key words independent component analysis; blind source separation; functional magnetic resonance imaging

?1994-2014 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net