

新的独立成分分析算法实现功能磁共振 成像信号的盲分离

武振华¹, 史振威¹, 唐焕文¹, 唐一源^{2,3,4}

(1. 大连理工大学计算生物学和生物信息学研究所, 大连 116023; 2. 大连理工大学神经信息学研究所, 大连 116023;
3. 中国科学院生物物理研究所视觉信息加工实验室, 北京 100101;
4. 中国科学院心理研究所心理健康重点实验室, 北京 100101)

摘要: 采用独立成分分析 (independent component analysis, ICA) 的一种新的牛顿型算法来提取功能磁共振成像 (functional magnetic resonance imaging, fMRI) 信号中的各种独立成分 (包括与实验设计相关的成分以及各种噪声)。与fastICA相比, 该算法减少了运算量, 提高了运算速度, 而且能够很好地分离出各个独立成分。结果表明该算法是一种有效的fMRI信号分析手段。

关键词: 牛顿型算法; 独立成分分析; 功能磁共振成像; 盲源分离

中图分类号: Q332, Q189

1 引言

独立成分分析 (ICA) [1-3] 是一种全新的数据分析工具, 1986年由Herault和Jutten第一次提出。1998年McKeown等[4]第一次把它用到fMRI信号处理中, 并有效地提取出各种独立成分 (包括与实验设计相关的成分以及头动、呼吸、心跳等各种噪声)。此后, ICA在fMRI中的应用一直是一个研究热点。

ICA对于观察到的多元数据集定义了一个生成模型, 假设观察到的数据是由一些未知隐藏变量的线性或非线性混合得到, 而混合系统也是未知的, 且这些隐藏变量服从非高斯分布, 并且各分量相互独立。这些隐藏变量就被称为观察数据集的独立成分, 它们可以通过ICA来找到。

设 $\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ 为观察信号, $\mathbf{s}=(s_1, s_2, \dots, s_M)^T$ 为独立的源信号且各分量呈非高斯分布, \mathbf{A} 是 $N \times M$ 阶混合矩阵。则标准的线性ICA模型为

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}\mathbf{s} \quad (1)$$

ICA的目的就是在仅知道 \mathbf{x} 的情况下, 寻找 $M \times N$ 阶解混矩阵 (demixing matrix) \mathbf{W} , 使 $\mathbf{y}=\mathbf{W}\mathbf{x}$, 其中 $\mathbf{y}=(y_1, y_2, \dots, y_M)^T$, 且 \mathbf{y} 的各分量尽可能地相互独立, 则 \mathbf{y} 就逼近 \mathbf{s} , 从而得到源信号 \mathbf{s} 。以下我们只考虑标准的线性ICA, 且假设随机向量的均值为零。

在脑功能成像中常用“广义线性模型” $\mathbf{x}=\mathbf{H}\boldsymbol{\beta}+\mathbf{e}$, 这里 \mathbf{x} 是观察到的数据, \mathbf{H} 是“设计矩阵”, 即假设成分的时间序列; $\boldsymbol{\beta}$ 是假设成分的象素值构成

的矩阵; \mathbf{e} 是模型的残余误差。去掉 \mathbf{e} , 就是上述无噪声的线性ICA随机模型。在fMRI信号分析中, 各种噪声被看成相互独立的成分, 因此可以用独立成分分析来提取出fMRI信号中的独立成分, 从而得到跟设计方波一致的独立成分以及心跳、呼吸、头动等各种噪声。

本文采用独立成分分析的一种新的牛顿型算法来提取fMRI信号中的各种独立成分, 该算法没有通常求解约束优化问题的Lagrange乘子项, 形式较简单, 简化了优化问题的求解过程, 减少了运算量, 提高了运算速度。

2 新的独立成分分析算法简介

2.1 ICA的优化模型

在ICA算法中, 首先对观察信号 \mathbf{x} 进行白化处理, 即进行线性变换

$$\mathbf{z}=\mathbf{V}\mathbf{x}=\mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{s} \quad (2)$$

使 \mathbf{z} 的相关矩阵为单位阵: $E\{\mathbf{z}\mathbf{z}^T\}=\mathbf{I}$ 。这一步可以通过主成分分析 (PCA) 来完成。数据经过白化处理以后, 只需要在正交空间中寻找解混矩阵。

要求解模型(1), 还需要寻找一个度量随机向量

收稿日期: 2003-07-14

基金项目: 国家自然科学基金项目(90103033, 30170321)、
国家科技部973前期专项(2001CCA00700)

通讯作者: 唐一源, 电话: (0411)4706046,

E-mail: yy2100@163.net

的独立性的量, 这里用负熵 (negentropy) 来度量随机向量的独立性, 也就是寻找一个向量 \mathbf{w} , 使 $\mathbf{w}^T \mathbf{z}$ 的非高斯性最大。这样基于负熵的独立成分分析模型就等价于下面的优化问题^[8]:

$$\begin{aligned} & \max \{G(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\} \\ & \text{s.t. } \|\mathbf{w}\|^2 = 1 \end{aligned} \quad (3)$$

G 是为了估计负熵而引入的任意的非二次函数, 为了获得稳定的估计, 一般选择增长不是太快的 G , 文献[8]给出了 G 的几个稳定的估计量。

2.2 算法

对于标准的ICA问题, 前人已经给出了多种算法, 包括H-J算法^[9]、B-S算法^[10]、非线性的PCA算法等^[6], 通常这些算法都是基于梯度下降法的自适应算法。在实际应用中, 它们的收敛速度较慢, 且收敛很大程度上取决于步长序列的选择。随后, Hyvärinen提出了著名的fastICA算法^[7,8], 运算速度要比前面几种方法快。

我们对优化问题(3)进行分析, 给出了一种新的牛顿型算法。它采用如下的求解策略: 该问题的约束是等式且较简单, 可采用在约束集上投影的方法, 也就是先用算法求解相应的无约束优化问题, 在每一步迭代后, 该解被投影在约束集上以满足约束。针对问题(3), 先用牛顿法来求解相应的无约束优化问题, 在迭代的每一步后, 将向量 \mathbf{w} 投影到单位球面上, 这样得到以下算法:

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - [E\{\mathbf{z}\mathbf{z}^T g'(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\}]^{-1} [E\{\mathbf{z}g'(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\}] \quad (4)$$

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|$$

这里函数 g 是模型(3)中函数 G 的一阶导数, 函数 g' 是函数 g 的一阶导数, 值得注意的是, 算法(4)没有通常求解约束优化问题的Lagrange乘子项, 这就简化了优化问题的求解过程, 节省了运算量, 提高了运算速度。为了增强算法的稳定性, 可以添加一个步长因子 μ , 并采用如下估计式:

$$E\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T g'(\mathbf{w}^T \mathbf{x})\} \approx E\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T\} E\{g'(\mathbf{w}^T \mathbf{x})\} = E\{g'(\mathbf{w}^T \mathbf{x})\} \mathbf{I} \quad (5)$$

算法(4)就可以写成:

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \mu E\{\mathbf{z}g'(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\} / E\{g'(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\} \quad (6)$$

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|$$

算法(6)用来提取一个独立成分, 如果要提取 N 个独立成分, 就把(6)写成矩阵的形式:

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} + \mu \text{diag}(a_i) E\{\vec{g}(\mathbf{u})\mathbf{u}^T\} \mathbf{W} \quad (7)$$

$$\mathbf{W}_i \leftarrow \mathbf{W}_i / \|\mathbf{W}_i\| \quad (i=1, 2, \dots, N)$$

其中 \mathbf{W}_i 是矩阵 \mathbf{W} 的第 i 行所表示的列向量, a_i 定义为 $-1/E\{g'(\mathbf{W}_i^T \mathbf{x})\}$ ($i=1, 2, \dots, N$), $\vec{g}(\mathbf{u})=(g(\mathbf{W}_i^T \mathbf{x}))$,

$g(\mathbf{W}_2^T \mathbf{x}), \dots, g(\mathbf{W}_N^T \mathbf{x})^T$ 且 $\mathbf{u}=\mathbf{W}\mathbf{x}$ 。同时, 为了避免算法(7)收敛到相同的独立成分, 在算法迭代的每一步, 矩阵 \mathbf{W} 需要一个对称正交化的过程:

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

3 材料和方法

fMRI技术和参数: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: $TR=2000$ ms, $TE=40$ ms, $FOV=24$ cm \times 24 cm, 层厚6 mm, 间距1 mm, 矩阵为64 \times 64, $FA=90^\circ$, 共取14层。

设计与材料:实验采用组块设计 (block-design) 或方波设计。共有4个组块, 每个组块60 s, 其中包含30 s的控制字符“+”和30 s内10个字刺激, 实验持续时间为240 s。实验任务是动词联想任务, 如看到“饭”联想“吃”(注意必须

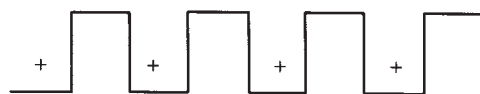


Fig.1 Block design

是动词), 控制条件是放松被动看“+”字, 不做任何联想活动。实验的具体模式如下:

被试:被试为一名健康大学生, 经标准化问卷调查确认为右利手, 视力正常, 实验前无任何不适感。

4 结果

通过fMRI实验, 得到120帧/层的脑功能磁共振成像数据(取14层)。把同一帧的14层数据看成一个独立成分, 总共是120个独立成分。结合无噪声线性模型 $\mathbf{X}=\mathbf{H}\boldsymbol{\beta}$, 首先对数据进行中心化处理, 再用主成分分析对数据进行白化, 然后用算法(7)计算独立成分(取 $\mu=0.9$)。从120个独立成分中选择有代表性的成分(成分的判定可以参考文献[4]): 任务相关信号成分、眼动信号成分、头动信号成分、拟周期性信号成分、噪声信号成分。通过选取合适的阈值($|z|>2$), 用脑功能成像处理软件SPM (Statistical Parametric Mapping) 显示各个独立成分所对应的激活图(图2)。

在得到的120个成分的时间序列里, 我们发现

类似于实验的方波设计、并且跟实验设计的时间序列相关系数大于0.5的有一个(为0.7966),把它单独视为一类。与眼动相似的成分共有3个,其时间序列不一样,但是都有明显的跳跃,激活区域基本相同,可以归为一类;跟缓慢头动相似的成分有两

个;突然头动信号独立成分有一个;拟周期性信号在分离出来的独立成分中有多个,激活区域也基本一致,可以把它们归为一类。噪声信号有多个,而且它们引起的激活呈随机分布。取上述有代表性的独立成分,用SPM给出各自的激活图:

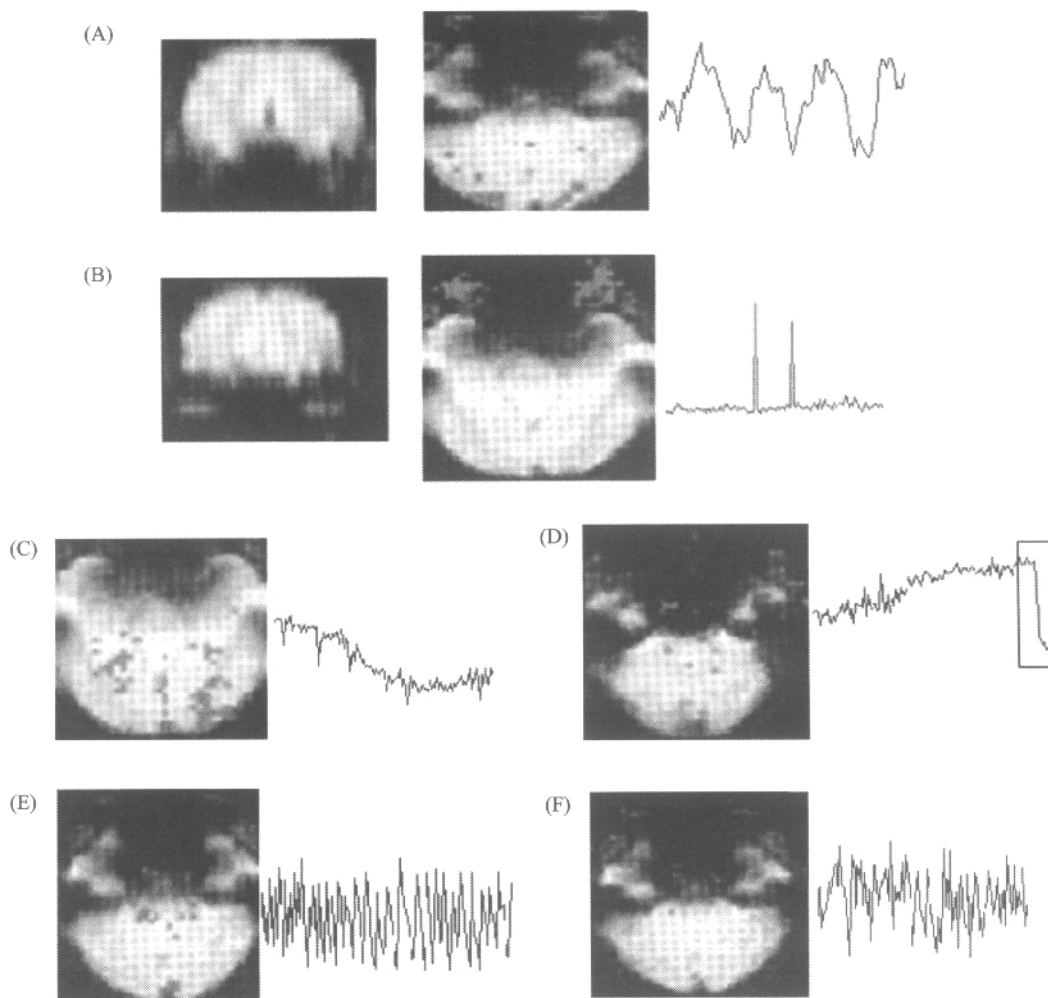


Fig.2 Independent components and respective time course ($|z| > 2$). (A) Task-related independent component and time course; (B) Eye movement and time course; (C) Slow head movement and time course; (D) Abrupt head movement and time course; (E) Quasi-periodic signal and time course; (F) Noise signal and time course

任务相关独立成分(图2A):由图可以看出激活区包括枕叶、颞叶、额叶、小脑。这跟文献[9]、[10]的结果相符,实验的独立成分的时间序列跟实验设计的时间序列的相关性达到0.7966,这个相关系数略低于文献[9]的结果,但是好于文献[10]中相关性分析和主成分分析得到的结果。

眼动信号独立成分(图2B):可以看出该成分引起的激活区主要集中在眼睛附近,而且在时间序列上有两个突然的跳跃,可以认为是由眨眼引起的

激活。

头动信号独立成分(图2C、2D):由于该实验时间较长,被试可能由于疲劳导致头部缓慢的移动,可以看出,激活区主要集中在脑的轮廓线上,而且其时间序列从高到低缓慢变化,可以认为是缓慢头动所致。被试也可能在短时间内有大幅度的头动(平移或者转动),激活区主要出现在脑的轮廓线上,其时间序列有一个从高到低的突然变化。

拟周期信号独立成分(图2E):激活的时间序列

在实验中呈现近似于周期性的变化,但这个周期不同于任务和控制的交替周期,可以认为是心跳或者呼吸等产生的信号在起作用。

噪声信号独立成分(图2F):在所有的独立成分中,我们分离出多个噪声信号,这里给出了一个噪声信号的独立成分例子,它所引起的激活散布在整个大脑中,其时间序列也呈一种随机分布,没有任何的规律性。

5 讨 论

在数据处理中,我们发现该算法具有较快的收敛速度:在主频为2G的Interl pentium 4计算机上,分别采用本文所给算法和国际上著名的fastICA^[7,8]算法(http://www.cishut.fi/projects/ica/fastica/code/FastICA_2.1.zip),对同一次实验的多个fMRI信号实现盲分离,并记录程序运行时间,然后取其平均值,结果发现用fastICA算法实现单个fMRI信号分离时程序要运行75 min,而该算法只需65 min,可见该算法提高了运算速度。这在数据量庞大的fMRI信号处理中是很重要的,而且该算法也取得很好的分离结果,能够有效地分离出跟实验设计相关的独立成分和心跳、呼吸、头动等各种噪声。

值得注意的是,由于独立成分分析算法本身的原因,分离出来的独立成分是不分先后顺序的,因此独立成分的排序是一个值得研究的问题。

在分离出来的每个独立成分中,像素值超过一定的阈值被认为是激活,当阈值较大时,激活区域少,阈值较小时,激活区域多。但实际应用中阈值的选取需要根据心理学的需要来选择,在心理学有意义的范围内来选择阈值,进而确定激活区域。

得到独立成分以后,还需要对独立成分进行生理学、心理学上的分析和解释。单个fMRI信号分离的结果,对个体的研究有重要意义,但是缺乏统

计意义,从而使生理学、心理学上的分析和解释缺乏普遍性。这样就有研究fMRI组信号的必要,通过fMRI组信号的研究可以寻找到个体间的异同,得到具有普遍意义的结论。Callhoun^[11]做了初步的尝试,但是,由于运算量太大,实际操作中存在不少困难,有待进一步探索。

参考文献:

- [1] Comon P. Independent component analysis——A new concept. *Signal Processing*, 1994,36:287~314
- [2] Bell A, Sejnowski T. An information-maximization approach to blind separation and blind deconvolution. *Neural Computation*, 1995,7:1129~1159
- [3] Hyvärinen A, Oja E. A fast fixed-point algorithm for independent component analysis. *Neural Computation*, 1997, 9(7):1483~1492
- [4] McKeown MJ, Makeig S, Brown GG, Jung TP, Kindermann SS, Bell AJ, Sejnowski T. Analysis of fMRI data by blind separation into independent spatial components. *Human Brain Mapping*, 1998,6:160~188
- [5] Jutten C, Herault J. Blind separation of sources, Part I: an adaptive algorithm based on neuromimetic architecture. *Signal Processing*, 1991,24:1~10
- [6] Oja E. The nonlinear PCA learning rule in independent component analysis. *Neurocomputing*, 1997,17(1):25~46
- [7] Hyvärinen A. Fast and robust fixed-pointed algorithms for independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1999,10(3):626~634
- [8] Hyvärinen A, Oja E. Independent component analysis: algorithms and applications. *Neural Network*, 2000,13:411~430
- [9] 范丽伟,唐焕文,唐一源. 空间独立成分分析在fMRI数据分析中的应用. 大连理工大学学报, 2003,43(4):399~402
- [10] 钟明军,唐焕文,唐一源. 空间独立成分分析实现fMRI信号的盲源分离. 生物物理学报, 2003,19(1):79~83
- [11] Callhoun VD, Adali T, Pearlson GD, Pekar JJ. A method for making group inferences from functional MRI data using independent component analysis. *Human Brain Mapping*, 2001,14:140~151

BLIND SOURCE SEPARATION FOR FMRI SIGNALS USING A NEW INDEPENDENT COMPONENT ANALYSIS ALGORITHM

WU Zhen-hua¹, SHI Zhen-wei¹, TANG Huan-wen¹, TANG Yi-yuan^{2,3,4}

(1. Institute of Computational Biology and Bioinformatics, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China;

2. Institute of Neuroinformatics, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China;

3. Laboratory of Visual Information Processing, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China;

4. Key Lab for Mental Health, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China)

Abstract: In order to separate independent components (task-related signal and other noises) from functional magnetic resonance imaging (fMRI) signals, a new independent component analysis algorithm was used. In contrast to fastICA, the algorithm reduced computation and raised speed of operation. It also separated independent components from fMRI signals very well.

Key Words: Newton algorithm; Independent component analysis; Functional magnetic resonance imaging; Blind source separation