

Aalto-yliopisto
Perustieteiden korkeakoulu
Teknillisen fysiikan ja matematiikan koulutusohjelma

Ryhmäfaktoriansalyysi neurotiedesovelluksissa

Kandidaatintyö

4. kesäkuuta 2012

Sami Remes

Työn saa tallentaa ja julkistaa Aalto-yliopiston avoimilla verkkosivuilla. Muilta osin kaikki oikeudet pidätetään.

Tekijä:	Sami Remes
Työn nimi:	Ryhmäfaktorianalyysi neurotiedesovelluksissa
Päiväys:	4. kesäkuuta 2012
Sivumäärä:	26
Pääaine:	Systeemitieteet
Koodi:	F3010
Valvoja:	Professori Harri Ehtamo
Työn ohjaaja:	TkT Arto Klami (Tietojenkäsittelytieteen laitos)
<p>Tässä työssä tarkastellaan ryhmäfaktorianalyysiä, joka on malli useiden datajoukkojen välisten riippuvuuksien löytämiseksi. Työssä käsitellään mallia läheisten klassisten mallien, faktorianalyysin ja kanonisen korrelaatioanalyysin, näkökulmasta. Malli opitaan bayesilaisessa viitekehyksessä, ja työssä esitetään lyhyesti bayesilaisen mallintamisen periaatteet sekä mallin parametrien posteriori-jakauman laskemiseksi variaatiomenetelmään perustuva approksimaatio.</p> <p>Esitettyä menetelmää sovelletaan yksinkertaiseen simuloituun aineistoon, minkä tavoitteena on myös havainnollistaa ryhmäfaktorianalyysin suhdetta kanoniseen korrelaatioanalyysiin.</p> <p>Lisäksi ryhmäfaktorianalyysia sovelletaan todelliseen aivokuvantamisaineistoon. Datajoukkoina tällöin ovat aivojen anatomisesti erilliset alueet ja menetelmä löytää komponentteja, jotka selittävät näiden aivoalueiden välisiä riippuvuuksia.</p>	
Avainsanat:	bayesilainen mallintaminen, faktorianalyysi, variaatio-approksimaatio
Kieli:	Suomi

Sisältö

Käytetyt symbolit ja lyhenteet	4
1 Johdanto	5
2 Taustaa	6
2.1 Faktorianalyysi ja kanoninen korrelaatioanalyysi	6
2.2 Bayesilainen lähestymistapa	7
2.3 Malleja neurotieteessä	8
3 Ryhmäfaktorianalyysi	9
3.1 Malli	9
3.2 Variaatioapproksimaatio	12
3.2.1 Approksimaatio GFA:lle	14
4 Kokeet	15
4.1 Simuloitu aineisto	15
4.2 fMRI-data	16
5 Yhteenveto	18
Lähteet	22
A Kuvia fMRI-kokeeseen	25

Käytetyt symbolit ja lyhenteet

ARD	Automatic Relevance Determination, harvuuspriori
CCA	Canonical Correlation Analysis, kanoninen korrelaatioanalyysi
$\mathbb{E}[f(X)]$	$f(X)$:n odotusarvo
FA	Faktorianalyysi
fMRI	Functional Magnetic Resonance Imaging, eräs aivokuvantamistekniikka
$\mathcal{G}(a, b)$	Gamma-jakauma parametreilla a ja b
GFA	Group Factor Analysis, ryhmäfaktorianalyysi
\mathbf{I}	Yksikkömatriisi
Tr	Matriisin jälki
$\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$	Normaalijakauma odotusarvolla $\boldsymbol{\mu}$ ja kovarianssilla $\boldsymbol{\Sigma}$
ROI	Region of Interest, anatomisesti rajattu aivoalue

1 Johdanto

Koneoppimisessa ja tilastotieteessä suurten havaintoaineistojen analysointi on mielenkiintoinen ongelma. Jokainen havainto koostuu useista muuttujista, joiden väliset riippuvuussuhteet ovat kiinnostuksen kohteita; havaintojen avulla tavoitteena on pyrkiä löytämään näitä riippuvuuksia.

Usein tällaisen aineiston voidaan ajatella koostuvan jossain määrin erillisistä ryhmistä muuttujia esimerkiksi jonkin *priori*-tiedon mukaan tai sen perusteella, miten havainnot on kerätty. Tällöin on kiinnostavaa tutkia näiden muuttujaryhmien välisiä riippuvuuksia sekä sitä, mitkä muuttujat ryhmien sisällä liittyvät näihin riippuvuuksiin.

Neurotieteellisissä sovelluksissa esimerkiksi aivojen anatomisiin perustein eriteltyt alueet voitaisiin käsitellä tässä esitetyllä tavalla muuttujaryhminä, jotka koostuvat alueen sisältämistä kuvapisteistä (vokseleista). Toinen mahdollinen tapa jakaa aineistoja muuttujaryhmiin on esimerkiksi tapauksissa, joissa samaa koetta on toistettu usealle henkilölle, ja halutaan löytää aivoista alueita, jotka koehenkilöillä toimivat samoin. Muuttujaryhmiä olisivat tällöin eri koehenkilöiden koko aivojen tai jonkin kiinnostavan alueen vokselit.

Tässä työssä tarkastellaan mallia, joka pyrkii löytämään edellä kuvattuja riippuvuuksia useiden datajoukkojen välillä. Malli soveltuu korkeaulotteisen aineiston käsittelyyn myös tapauksissa, joissa havaittujen muuttujien ulottuvuus on huomattavasti suurempi kuin havaintojen lukumäärä. Esimerkkejä tällaisista tapauksista ilmenee muun muassa funktionaalisen magneettikuvaus (fMRI) -datan käsittelyssä neurotiedesovelluksissa.

Luvussa 2 esitellään työn teoreettista taustaa klassisten mallien kautta lähestyen niitä bayesilaisesta näkökulmasta. Lisäksi tarkastellaan kirjallisuudessa esitettyjä malleja aivosignaalien analyysissä. Luvussa 3 esitetään bayesilainen ryhmäfaktorianalyysimalli (GFA), joka yleistää faktorianalyysin useille datajoukoille muuttujien sijaan. Ryhmäfaktorianalyysia sovelletaan luvussa 4 yksinkertaiseen simuloituun kokeeseen sekä lisäksi todellisen fMRI-aineiston analyysiin.

2 Taustaa

2.1 Faktorianalyysi ja kanoninen korrelaatioanalyysi

Faktorianalyysi on perinteinen menetelmä, joka etsii riippuvuuksia muuttujien välillä. Havaintojen \mathbf{y}_n oletetaan tulevan mallista

$$\mathbf{y}_n = \mathbf{W}\mathbf{z}_n + \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\epsilon}_n, \quad (1)$$

missä \mathbf{z} ovat piilomuuttujat ja \mathbf{W} latausmatriisi sekä $\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}[\mathbf{y}]$. Latausmatriisi esittää, miten alkuperäiset havaitut muuttujat riippuvat mallin piilomuuttujista. Sekä kohinatermi $\boldsymbol{\epsilon}$ että piilomuuttujat \mathbf{z} oletetaan korreloimattomiksi. (Härdle ja Simar, 2003)

Kanoninen korrelaatioanalyysi (CCA) (Hotelling, 1936) on toinen klassinen menetelmä, joka etsii riippuvuuksia kahden muuttujajoukon (\mathbf{x} ja \mathbf{y}) välillä. CCA:ssa haetaan projektiovektoreita \mathbf{w}_x ja \mathbf{w}_y siten, että $\mathbf{w}_x^T \mathbf{x}$ ja $\mathbf{w}_y^T \mathbf{y}$ korreloivat maksimaalisesti. Näin saatuja muuttujia $u_1 = \mathbf{w}_x^T \mathbf{x}$ ja $v_1 = \mathbf{w}_y^T \mathbf{y}$ sanotaan ensimmäisiksi *kanonisiksi muuttujiksi*. Seuraavat kanoniset muuttujat saadaan etsimällä toisia projektioita, jotka ovat korreloimattomia kaikkien aiemmin saatujen kanonisten muuttujien kanssa. Toisin sanoen kanonisen korrelaatioanalyysin tavoitteena on löytää \mathbf{x} :lle ja \mathbf{y} :lle uusi ortogonaalinen kanta, jossa uudet muuttujat u_i ja v_i korreloivat maksimaalisesti.

Merkitsemällä \mathbf{x} :n ja \mathbf{y} :n kovarianssimatriisin ositusta

$$\boldsymbol{\Sigma} = \text{cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{XX} & \boldsymbol{\Sigma}_{XY} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{YX} & \boldsymbol{\Sigma}_{YY} \end{pmatrix},$$

CCA voidaan esittää optimointitehtävänä

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{w}_x, \mathbf{w}_y} \text{cor}(\mathbf{w}_x^T \mathbf{x}, \mathbf{w}_y^T \mathbf{y}) &= \mathbf{w}_x^T \boldsymbol{\Sigma}_{XY} \mathbf{w}_y \\ \text{s.e. } \mathbf{w}_x^T \boldsymbol{\Sigma}_{XX} \mathbf{w}_x &= 1, \\ \mathbf{w}_y^T \boldsymbol{\Sigma}_{YY} \mathbf{w}_y &= 1, \end{aligned} \quad (2)$$

joka saadaan ratkaistua erään matriisin ominaisarvotehtävänä (Härdle ja Simar, 2003).

2.2 Bayesilainen lähestymistapa

Tavanomaisessa tilastollisessa mallissa mallin parametreja pidetään kiinteinä mutta tuntemattomina. Parametrit estimoidaan perustuen suurimman uskottavuuden menetelmään, ja parametreille voidaan muodostaa esimerkiksi luottamusvälejä, mutta niihin ei kuitenkaan suoraan liitetä todennäköisyyksiä. Bayesilaisessa mallintamisessa sen sijaan mallin parametrijakin pidetään satunnaismuuttujina, joille pyritään määräämään todennäköisyysjakauma.

Yleisesti bayesilaisessa lähestymistavassa asetetaan mallin muuttujille Θ joitain oletuksia niin sanottujen priorijakaumien $p(\Theta)$ avulla. Nämä esittävät etukäteistietoa parametrien mahdollisista arvoista ja siitä kuinka todennäköisinä eri arvoja pidetään. Jos etukäteistietoa ei ole syytä olettaa, voidaan parametrille antaa niin sanottu ei-informatiivinen prior, jolla kaikki arvot ovat yhtä todennäköisiä. Bayesin kaavan

$$p(\Theta|\mathbf{Y}) = \frac{p(\mathbf{Y}|\Theta)p(\Theta)}{p(\mathbf{Y})} \quad (3)$$

avulla saadaan niin sanottu posteriorijakauma mallin parametreille, kun on tehty havainnot \mathbf{Y} . Posteriorijakauma kuvaa siis päivitettyä tietoa mallin parametreista. Usein ollaan kiinnostuneita esimerkiksi parametrien posteriorin odotusarvoista.

Bayesin kaavassa termiä $p(\mathbf{Y}|\Theta)$ sanotaan uskottavuudeksi tai uskottavuusfunktiksi. Se kertoo, kuinka uskottavia havainnot ovat annetuilla parametreilla Θ . Termi $p(\mathbf{Y})$ on mallin niin sanottu evidenssi ja sitä voidaan pitää normalisointiterminä, sillä se ei riipu mallin parametreista. Evidenssi voidaan kirjoittaa myös muodossa

$$p(\mathbf{Y}) = \int p(\mathbf{Y}, \Theta)d\Theta = \int p(\mathbf{Y}|\Theta)p(\Theta)d\Theta. \quad (4)$$

Tämä integraali on käytännössä usein mahdotonta laskea analyttisesti, jolloin joudutaan käyttämään joitain approksimatiivisia menetelmiä. Eräs menetelmä esitetään kappaleessa 3.2.

Myös kanoninen korrelaatioanalyysi voidaan muotoilla probabilistisen tulkinnan kautta täysin bayesilaisena mallina, kuten Wang (2007) ja Virtanen et al.

(2011) ovat esittäneet. Muun muassa Luttinen ja Ilin (2010) ovat esittäneet bayesilaisen faktorianalyysimallin. Yhteistä näille ja vastaaville bayesilaisille malleille on se, että niissä saadaan tehtyä automaattista mallin valintaa tarvittavien piilomuuttujien lukumäärän suhteen hyödyntäen automaattista relevanssin määrittystä (ARD, automatic relevance determination, Mackay (1995); Bishop (2006)).

2.3 Malleja neurotieteessä

Funktionaalinen magneettikuvaus (fMRI) perustuu veren happitasosta riippuvan (BOLD, blood-oxygen-level-dependent) signaalin mittaamiseen. Muutokset signaalissa ovat yhteydessä aivotoimintaan ja vaste ärsykkeeseen näkyy signaalissa vasta useiden sekuntien kuluttua. (Logothetis et al., 2001)

Tavanomainen fMRI-aineiston analyysi perustuu yleisten lineaaristen mallien soveltamiseen. Jokaiselle vokselille sovitetaan erikseen malli, jossa selittäjinä ovat koeasetelman eri tiloja vastaavat muuttujat sekä tyypillisesti muita esimerkiksi signaalitason systemaattisen vaihtelun poistamiseksi tarvittavia muuttujia. Sovitetuille malleille voidaan tehdä tilastollisia testejä, joilla voidaan muun muassa selvittää, onko jokin koeasetelman ärsyke tilastollisesti merkitsevä selittäjä tietyn vokselin aktiivisuudessa. Koska tilastollisia testejä tehdään jokaiselle vokselille erikseen, tarvitaan p -arvoille tiettyjä korjauksia gaussisten satunnaiskenttien teoriaan (Gaussian random field) perustuen, sillä lähekkäiset vokselit ovat korreloituneita. Tulokset havainnollistetaan piirtämällä testisuureiden arvot esimerkiksi MRI-poikkileikkauskuvien päälle. (Friston et al., 1994)

Vastakohtana edellä esitetylle lähestymistavalle on soveltaa aineistoon erilaisia monimuuttujamenetelmiä, jotka käsittelevät useita tai kaikkia vokseleita kerralla. Yksi lähestymistapa on soveltaa aineistoon erilaisia luokittelumenetelmiä, jotka pyrkivät löytämään vokseleista sellaisia ryhmiä, jotka pystyvät parhaiten erottelamaan esimerkiksi eri ärsykkeisiin liittyvät aktivaatiot aivoissa. (Norman et al., 2006; Pereira et al., 2009)

Luokittimien lisäksi muun muassa kanonista korrelaatioanalyysia ja fakto-

rianalyysia on sovellettu fMRI-aineistoihin. Deleus ja Hulle (2011) ovat esittäneet usealle datajoukolle yleistetyn CCA-mallin, jota he sovelsivat aivoalueiden välisten riippuvuuksien tutkimiseen. Tavallista faktorianalyysiiä ovat soveltaneet ainakin Peterson et al. (1999), jotka faktorianalyysin avulla tutkivat aivojen funktionaalista konnektiivisuutta; suuret lataukset samassa faktorissa vastaavat aivoalueiden funktionaalisia yhteyksiä.

3 Ryhmäfaktorianalyysi

Tässä osiossa esitetään ryhmäfaktorianalyysi-mallin muotoilu sekä mallin parametrien ja piilomuuttujien posteriorijakauman approksimointi käyttäen yleistä bayesilaista variaatioapproksimaatio-menetelmää. (Virtanen et al., 2012)

3.1 Malli

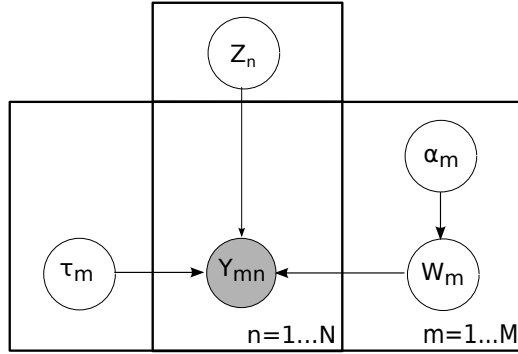
Ryhmäfaktorianalyysi (Group Factor Analysis, GFA, Virtanen et al. (2012)) voidaan nähdä sekä CCA:n että faktorianalyysin yleistykseenä. GFA kahdella datajoukolla ratkaisee CCA-ongelman (Virtanen et al., 2011), ja useammalla joukolla sitä voidaan hyvin verrata moniin muihin CCA:n yleistyksiin monille datajoukoille. Ryhmäfaktorianalyysin etu moniin muihin yleistyksiin nähden on se, että GFA etsii myös komponentteja, joiden ei tarvitse esiintyä jokaisessa datajoukossa. GFA:n voi myös nähdä faktorianalyysin yleistykseenä, jossa yksittäisten muuttujien sijaan käsitellään useita datajoukkoja.

Useista datajoukoista peräisin oleva data kootaan yhteen datamatriisiin \mathbf{Y} siten, että erilliset datamatriisit yhdistetään muuttujittain

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2, \dots, \mathbf{Y}_M],$$

missä jokainen $\mathbf{Y}_m \in \mathbb{R}^{N \times D_m}$. Merkitään $D = \sum_{m=1}^M D_m$, jolloin matriisin \mathbf{Y} koko on siis $N \times D$. Näin muodostetulle datamatriisille voidaan esittää generatiivinen malli

$$\mathbf{y}_n \approx \mathbf{W} \mathbf{z}_n, \tag{5}$$



Kuva 1: Graafinen malli ryhmäfaktoriansiästä. Nuolet kuvaavat muuttujien ehdollisia riippuvuussuhteita.

missä \mathbf{z}_n on mallin piilomuuttuja sekä \mathbf{W} projektiomatriisi, joka kuvaa piilomuuttujat havaituille muuttujille. Tämä on analoginen tavanomaisen faktoriansiästä (kaava (1)) kanssa, kun oletetaan datan olevan nollakeskiarvoista. Mallin uskottavuusfunktio

$$p(\mathbf{Y}|\Theta) = \prod_{n=1}^N \mathcal{N}(\mathbf{y}_n | \mathbf{W} \mathbf{z}_n, \text{diag}(\boldsymbol{\tau})^{-1}) \quad (6)$$

olettaa havaintojen \mathbf{y}_n olevan riippumattomia. Lisäksi matriisi $\text{diag}(\boldsymbol{\tau})$ sisältää diagonaalilla jokaista datajoukkoa m vastaavan parametrin τ_m toistettuna D_m kertaa, eli jokaisella muuttujalla datajoukon sisällä on sama varianssi. Muuttujille τ_m ja \mathbf{z}_n asetetaan yksinkertaisesti priorit

$$p(\mathbf{z}_n) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \mathbf{0}, \mathbf{I}),$$

$$p(\tau_m) = \mathcal{G}(\tau_m | a, b),$$

missä τ_m :lle asetetaan ei-informatiivinen priorit valitsemalla hyperparametrien arvoiksi pieni luku, kuten 10^{-14} . Monimutkaisempi korreloiva kohinarakenne yhden datajoukon sisällä mallinnetaan eksplisiittisesti mallin mukaisilla piilomuuttujilla.

Piilomuuttujat sinällään ovat kaikille datajoukoille yhteisiä. Datajoukkojen väliset riippuvuudet mallinnetaan valitsemalla projektiomatriisille \mathbf{W} sopeva rakenne, joka valitsee, miten kukin piilomuuttuja selittää datajoukkojen välisiä yhteyksiä. Tapauksessa $M = 2$ projektiomatriisin \mathbf{W} rakenne on

helppo havainnollistaa seuraavasti

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{V}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{W}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{V}_2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Matriisin ositus on valittu siten, että matriisit \mathbf{W}_m , $m = 1, 2$, vastaavat riiveiltään alkuperäisiä datamatriiseja \mathbf{Y}_m . Lisäksi huomataan, että matriisit \mathbf{W}_m vastaavat niitä piilomuuttujia tai komponentteja, jotka ovat aktiivisia¹ molemmissa datajoukoissa, ja vain toisessa datajoukossa esiintyviä komponentteja vastaavat matriisit \mathbf{V}_m . Kun $M > 2$, lisätään matriisiin (7) sarakkeita, joissa aktiivisena on kaikki paitsi yksi tai useampi datajoukko. Mahdollisten kombinaatioiden lukumäärä kasvaa eksponentiaalisesti datajoukkojen määrän funktiona, joten on tärkeää, että malli kykenee huomioimaan tämän seikan ja valitsemaan automaattisesti oikean harvuusrakenteen.

Tämä harvuus saadaan mallinnettua asettamalla matriisin alkiolle automaattinen relavanssin määrittäminen (ARD) -priori

$$p(\mathbf{W}|\boldsymbol{\alpha}) = \prod_{k=1}^K \prod_{m=1}^M \prod_{d=1}^{D_m} \mathcal{N}(w_{m,k}(d)|0, \alpha_{m,k}^{-1}), \quad (8)$$

$$p(\alpha_{m,k}) = \mathcal{G}(\alpha_{m,k}|a_0, b_0), \quad (9)$$

missä $w_{m,k}(d)$ viittaa datajoukon m muuttujan d painoon komponentissa k , ja kaikilla joukon m muuttujilla on yhteinen parametri $\alpha_{m,k}$. K on komponenttien suurin mahdollinen lukumäärä, jotka malli voi löytää. Edelleen $\alpha_{m,k}$:n priorin asetetaan ei-informatiiviseksi valitsemalla hyperparametrien a_0 ja b_0 arvoiksi pieni luku, kuten 10^{-14} .

Tällaisella ARD-priorilla on taipumus asettaa tarpeettomia \mathbf{W} :n sarakkeita tai erityisesti vain tiettyjä datajoukkoja vastaavat osat näistä sarakkeista nolnaan tai hyvin pieneen arvoon, kun vastaava $\alpha_{m,k} \rightarrow \infty$. Tällöin saadaan aikaan kaavassa (7) esitetty harvuusrakenne. Pieni $\alpha_{m,k}$:n arvo toisaalta kertoo, että komponentti k on aktiivinen datajoukossa m . Malli kykenee siis automaattisesti valitsemaan sekä oikean määrän komponentteja kokonaisuudessaan että komponenttien jaon eri datajoukkojen osajoukoille, kunhan

¹Aktiivisuudella tarkoitetaan, että kyseinen komponentti selittää vaihtelua datajoukon muuttujissa.

komponenttien maksimimäärä K on valittu riittävän suureksi. ARD:ta on käytetty useissa erityyppisissä malleissa onnistuneesti muun muassa komponenttien lukumäärän tai piirteiden automaattiseen valintaan (Bishop, 2006; MacKay et al., 1994; Tan ja Févotte, 2009).

Malli on myös mahdollista esittää graafisesti, kuten kuvassa 1. Graafissa solmut ovat mallissa esiintyviä satunnaismuuttujia ja suunnatut kaaret kuvaavat suoria ehdollisia riippuvuuksia. Esimerkiksi, jos graafissa solmusta A on suunnattu kaari solmuun B, josta edelleen on kaari solmuun C, muuttujien A, B ja C yhteisjakauma faktorituu kuten $p(A, B, C) = p(A)p(B|A)p(C|B)$. (Barber, 2012; Bishop, 2006)

3.2 Variaatioapproksimaatio

Kuten GFA:n tapauksessa, usein posteriorin $p(\Theta|X)$ analyttinen ratkaiseminen ei ole mahdollista. On kuitenkin olemassa useita approksimatiivisia menetelmiä posteriorin määrittämiseksi, kuten erilaiset otanta- ja variaatiomenetelmät (Bishop, 2006).

Tässä työssä tarkastellussa variaatioapproksimaatiossa oletetaan posteriorille faktorisaatio

$$p(\Theta|\mathbf{X}) \approx q(\Theta) = \prod_{i=1}^k q_i(\theta_i), \quad (10)$$

missä θ_i :t ovat jokin Θ :n pistevieras jako k :n osaan sekä $q_i(\theta_i)$:t näitä vastaavat approksimatiiviset jakaumat. Usein q_i :sta jätetään alaindeksi pois, ja vain parametri θ_i kertoo, mistä jakaumasta on kyse. Tavoitteena on siis ratkaista jakaumat q_i , ensiksi määrittelemällä suure jakaumien eroavaisuudelle ja sitten minimoimalla tämä ero.

Määritellään jakaumille q ja p Kullback-Leibler -divergenssi

$$D_{KL}(q||p) = - \int q(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx, \quad (11)$$

joka on eräänlainen etäisyys jakaumien q ja p välillä. Se ei ole symmetrinen eikä muutenkaan toteuta tavanomaisia etäisyysmitan ominaisuuksia, mut-

ta on silti hyödyllinen suure approksimoinnissa, kun halutaan löytää paras approksimaatio $q(\Theta)$.

Kaavassa (4) määritellyn evidenssin logaritmi voidaan esittää muodossa

$$\log p(X) = \mathcal{L}(q) + D_{KL}(q||p),$$

missä

$$\mathcal{L}(q) = \int q(\Theta) \log \frac{p(X, \Theta)}{q(\Theta)} d\Theta \quad (12)$$

on alaraja log-evidenssille, sillä

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(q) + D_{KL}(q||p) &= \int q(\Theta) \left[\log \frac{p(X, \Theta)}{q(\Theta)} + \log \frac{q(\Theta)}{p(\Theta|X)} \right] d\Theta \\ &= \int q(\Theta) \log \frac{p(X, \Theta)}{p(\Theta|X)} d\Theta \\ &= \int q(\Theta) \log p(X) d\Theta = \log p(X) \end{aligned}$$

ja $D_{KL}(q||p) \geq 0$. KL-divergenssin minimointi on siis ekvivalenttia alarajan $\mathcal{L}(q)$ maksimoinnin kanssa, koska $\log p(X)$:n arvo ei riipu faktorisaatiosta q .

Merkitään mielivaltaista θ_i :ta yksinkertaisesti y :llä ja loppuja θ_j :ta pelkällä θ :lla. Approksimaatio on nyt siis muotoa $q(\Theta) = q(y, \theta) = q(y)q(\theta)$. Derivoimalla (12) $q(y)$:n suhteen ja asettamalla se nolaksi saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q(y)} &= \int q(\theta) \left[\frac{\partial}{\partial q(y)} \int q(y) \log \frac{p(X, y, \theta)}{q(\theta)q(y)} dy \right] d\theta \\ &= \int q(\theta) \left[\log \frac{p(X, y, \theta)}{q(\theta)q(y)} - 1 \right] d\theta = 0, \end{aligned}$$

mistä ryhmittelemällä ja ottamalla $\log q(y)$ integraalista ulos saadaan

$$\log q(y) = \int q(\theta) \log p(X, y, \theta) d\theta + \text{vakio},$$

jossa vakioon on kerätty y :stä riippumattomia termejä. Lisäksi täytyy huomioida rajoitusehto $\int q(y) dy = 1$, jotta se esittää todennäköisyysjakaumaa; normalisointitermi voidaan sisällyttää edellisessä kaavassa olevaan vakioon.

Funktionaalin (12) maksimiksi saadaan siis

$$\log q(\theta_i) = \mathbb{E}_{j \neq i} [\log p(X, \Theta)] + \text{vakio}, \quad (13)$$

missä vakio saadaan tavallisesti ilman suoraa laskemista tunnetun jakauman normalisointitermistä (Bishop, 2006). Approksimaatio $q(\theta_i)$ saadaan siis laskemalla odotusarvo yhteisjakauman $p(X, \Theta)$ logaritmista kaikkien $q(\theta_j)$ -jakaumien, $j \neq i$, suhteen. Se on KL-divergenssin mielessä paras muotoa (10) oleva approksimaatio.

Käytännössä (13) ei ole vielä suora analyttinen ratkaisu, sillä jakaumien $q(\theta_i)$ parametrit riippuvat yleisessä tapauksessa liian vaikealla tavalla odotusarvoista muiden jakaumien suhteen. Kuitenkin alustamalla kaikki parametrit joihinkin arvoihin (esimerkiksi satunnaisesti) ja käyttämällä aina sen hetkisiä arvoja (13):n laskemiseen vuorotellen kaikille $i \in \{1, \dots, K\}$ sekä toistamalla tätä, kunnes (12):n arvo ei enää muutu, saadaan toimiva algoritmi posteriorin approksimaation löytämiseksi (Bishop, 2006).

3.2.1 Approksimaatio GFA:lle

GFA:lle voidaan tehdä seuraava faktorisaatio

$$q(\Theta) = \left[\prod_{m=1}^M q(\boldsymbol{\alpha}_m) q(\tau_m) \right] \left[\prod_{d=1}^D q(\mathbf{w}_d) \right] \prod_{n=1}^N q(\mathbf{z}_n), \quad (14)$$

missä $\boldsymbol{\alpha}_m$ on datajoukkoa m vastaavat ARD-parametrit, $D = \sum_{m=1}^M D_m$ kaikkien datajoukkojen dimensioiden summa ja \mathbf{w}_d projektiomatriisiin \mathbf{W} d . rivi (Virtanen et al., 2012). Esimerkiksi piilomuuttujille saadaan ratkaistua approksimatiivinen jakauma

$$\begin{aligned} q(\mathbf{z}_n) &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_n | \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{z}_n}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{z}_n}), \\ \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{z}_n}^{-1} &= \mathbf{I} + \sum_{m=1}^M \mathbb{E}[\tau_m] \mathbb{E}[\mathbf{W}_m^T \mathbf{W}_m], \\ \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{z}_n} &= \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{z}_n} \sum_{m=1}^M \mathbb{E}[\tau_m] \mathbb{E}[\mathbf{W}_m^T] \mathbf{y}_{mn}, \end{aligned}$$

missä \mathbf{y}_{mn} on m . datajoukon n . näyte. Lisäksi tästä on helposti nähtävissä riippuvuus toisten jakaumien odotusarvoista, kuten $\mathbb{E}[\tau_m]$, samalla tavalla kuin edellisessä kappaleessa esitettiin.

Virtanen et al. (2012) esittää tavallisten päivitysten lisäksi alarajan (12) maksimoinnin piilomuuttujien rotaation \mathbf{R} suhteen. Tämä voidaan tehdä, koska mallin uskottavuus on invariantti tämän muunnoksen suhteen: $\mathbf{W}^* \mathbf{z}^* = (\mathbf{W}\mathbf{R})(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z}) = \mathbf{W}\mathbf{z}$. Luttinen ja Ilin (2010) esittivät vastaavan rotaation optimoinnin myös toiselle faktorianalyysimallille. Sieventämällä saadaan maksimoitavaksi funktioksi

$$L = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{R}^{-1} \mathbb{E}[\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}] \mathbf{R}^{-T}) + C \log |\mathbf{R}| - \sum_{m=1}^M \frac{D_m}{2} \log \prod_{k=1}^K \mathbf{r}_k^T \mathbb{E}[\mathbf{W}_m^T \mathbf{W}_m] \mathbf{r}_k,$$

missä \mathbf{r}_k ovat matriisin \mathbf{R} sarakkeita ja $C = D - N$. Rotaation optimoinnin hyöty on pääasiassa nopeammassa konvergenssissa. Maksimoinnissa hyödynnetään tavanomaista rajoittamattoman optimoinnin rajoitettua Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shannon (L-BFGS) -menetelmää (Liu ja Nocedal, 1989).

4 Kokeet

Tässä osiossa havainnollistetaan ryhmäfaktorianalyysin käyttöä data-analyysissä soveltamalla menetelmää yksinkertaisiin simuloituihin aineistoihin. Kokeissa käytetään R-ohjelmointikielellä toteutettua² variaatioapproksimaatiota ryhmäfaktorianalyysille sekä R:n omaa toteutusta tavallisesta kanonisesta korrelaatiosta (`cancor`).

4.1 Simuloitu aineisto

Kahdella datajoukolla GFA:sta saadaan erikoistapauksena toteutus bayesilaisesta CCA:sta. Tässä kokeessa on tavoitteena näyttää, että simuloitulla matalaulotteisella aineistolla GFA ja CCA löytävät hyvin samankaltaiset ratkaisut ja havainnollistaa tämän avulla sitä, että malli toimii oikein.

Aineisto on luotu siten, että piilomuuttujia on seitsemän kappaletta, joista kaksi ensimmäistä ovat erivaiheisia sinikomponentteja ja loput riippumatto-

²Toteutus saatavilla osoitteesta <http://research.ics.tkk.fi/mi/software/gSCCA/>.

mia näytteitä normaalijakaumasta. Kaikki 7 piilomuuttujaa on esitetty kuvassa 2.

Datajoukot muodostetaan näistä piilomuuttujista projektiomatriisiin \mathbf{W} avulla lisäten normaalijakautunutta kohinaa variansseilla $\tau^{-1} = \frac{1}{3}$. Projektiomatriisi on muodostettu riippumattomasti normaalijakautuneista satunnaisluvusta siten, että kolme ensimmäistä piilomuuttujaa valitaan kummallekin datajoukolle yhteisiksi, ja lopuista neljästä kaksi ovat spesifejä ensimmäiselle datajoukolle ja kaksi toiselle. Datajoukkojen dimensioksi valitaan ensimmäiselle datajoukolle 20 ja toiselle 15. Projektiomatriisi on esitetty kuvassa 3.

Sekä GFA että CCA kykenevät löytämään simuloidusta aineistosta todelliset jaetut komponentit, kuten kuvissa 2 ja 4 näytetään. GFA löytää lisäksi kummankin datajoukon sisäistä vaihtelua selittävät komponentit, mitä CCA ei edes pyri etsimään. Kanonisista muuttujista on valittu kolmea suurinta kanonista korrelaatioita vastaavat muuttujat, sillä neljäs korrelaatio poikkeaa jo melko paljon näistä kolmesta eli loput korrelaatiot eivät ole kiinnostavia.

Kolmen jaetun komponentin korrelaatiot todellisten ja estimoitujen välillä ovat GFA:lla 0.93, 0.94 ja 0.98. CCA:lla vastaavasti kanonisten muuttujien keskiarvojen $((u_i + v_i)/2)$ korrelaatiot todellisten komponenttien kanssa ovat 0.86, 0.91, 0.96. GFA kykenee löytämään todelliset komponentit jonkin verran paremmin. Kuvassa 3 on esitetty sekä todelliset että menetelmien estimoimat projektiomatriisit kummallekin datajoukolle. GFA:n projektiot näyttävät olevan lähempänä todellisia projektioita kuin CCA:n. CCA:kin löytää joka tapauksessa useita oikeita painoja.

4.2 fMRI-data

fMRI-aineistossa (Keller et al., 2001) koehenkilöille näytettiin toistetuissa kokeissa aluksi ensimmäinen ärsyke, joka oli joko lause tai kuva, minkä jälkeen ärsyke poistettiin neljän sekunnin kuluttua. Edelleen neljän sekunnin kuluttua näytettiin toinen ärsyke, lause tai kuva riippuen ensimmäisestä ärsykkeestä, mitä näytettiin kunnes neljä sekuntia täyttyi tai koehenkilö painoi nappia, joka merkitsi, että kuva vastasi annettua lausetta. Jokaisen kokeen

loppuun lisättiin vielä 15 sekunnin lepoaika. Koehenkilöltä mitattiin yhteensä 40 edellä kuvattua koetta ja lisäksi 10 koetta, joissa koehenkilö lepäsi tai katsoi kiinnitettyä pistettä.

Aika jokaisen fMRI-kuvan välillä on 500 millisekuntia, joten jokainen koe koostuu yhteensä noin 55 kuvasta. Kuvaus rajoitettiin vain osaan koko aivoista ja kussakin kuvassa on 4698 vokselia, jotka voidaan jakaa 25 anatomisesti erilliseen alueeseen (region of interest, ROI). Kokoamalla koehenkilön kaikki kokeet saadaan yhteensä 2746 peräkkäistä kuvaa.

Soveltaessa aineistoon ryhmäfaktorianalyysia, jokainen ROI voidaan asettaa omaksi datajoukokseen mallin formulaatiossa. Tällöin tavoitteena on löytää komponentteja, jotka selittävät eri aivoalueiden toiminnan yhteneväisyyksiä. Lisäksi analyysi saattaa paljastaa tietoa ROI:n sisäisestä rakenteesta ja toiminnasta. Muun muassa Deleus ja Hulle (2011) ovat esittäneet vastaavan koeasetelman monelle datajoukolle yleistetyllä CCA-mallilla.

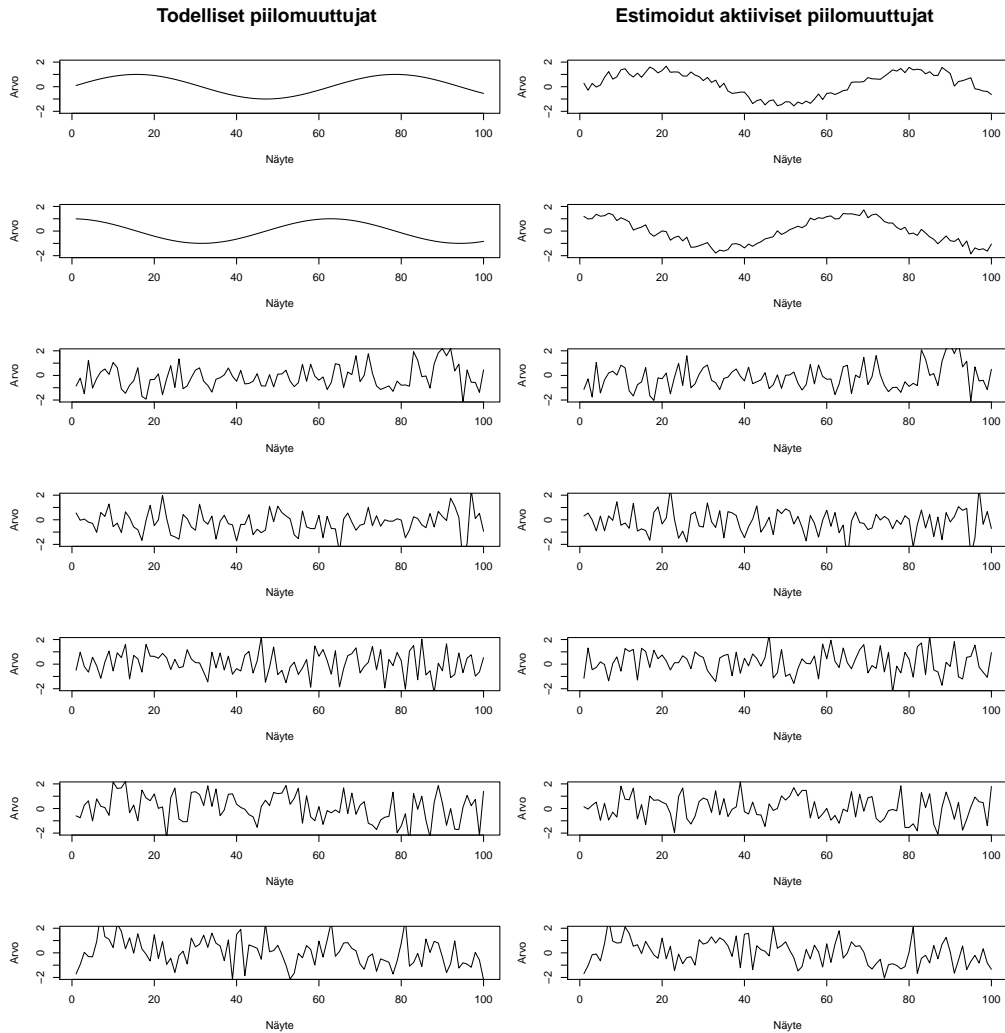
GFA ajettiin aineistolle käyttäen $K = 100$ komponenttia, joista 45 komponenttia jäi selvästi aktiivisiksi loppujen mennessä nolnaan. Kuvassa 5 on esitetty matriisi, jonka alkioina on arvot $\alpha_{m,k}^{-\frac{1}{2}}$, jotka kuvaavat komponentin k päälläoloa datajoukossa (ROI) m , järjestettynä sarakevektorien normin mukaisesti. Kuvasta voi selvästi havaita, että GFA löytää aineistosta joitakin komponentteja, jotka ovat aktiivisia vain pienessä joukossa rajattuja aivoalueita. Osa komponenteista on myös aktiivisia joko melkein kaikissa tai vain yhdessä ROI:ssa. Lisäksi liitteessä A esitetyissä kuvissa on piirretty vokseleita vastaavat painot valituille komponentille. Kuviin on valittu sellaisia potentiaalisesti mielenkiintoisia komponentteja, joissa on aktiivisena vain muutamia erilaisia aivoalueita, ja niistä voi havaita, että löydetyt painot jakautuvat avaruudellisesti jokseenkin sileästi, mikä on odotettavaa fMRI-aineiston tapauksessa.

Tulosten tarkempi tarkastelu täytyy jättää tämän työn ulkopuolelle, sillä tämän kokeen tavoitteena oli vain soveltaa ryhmäfaktorianalyysia todelliseen aineistoon ja havainnoida, että GFA kykenee löytämään komponentteja, jotka jollain tavalla selittävät usean aivoalueen välisiä riippuvuuksia.

5 Yhteenveto

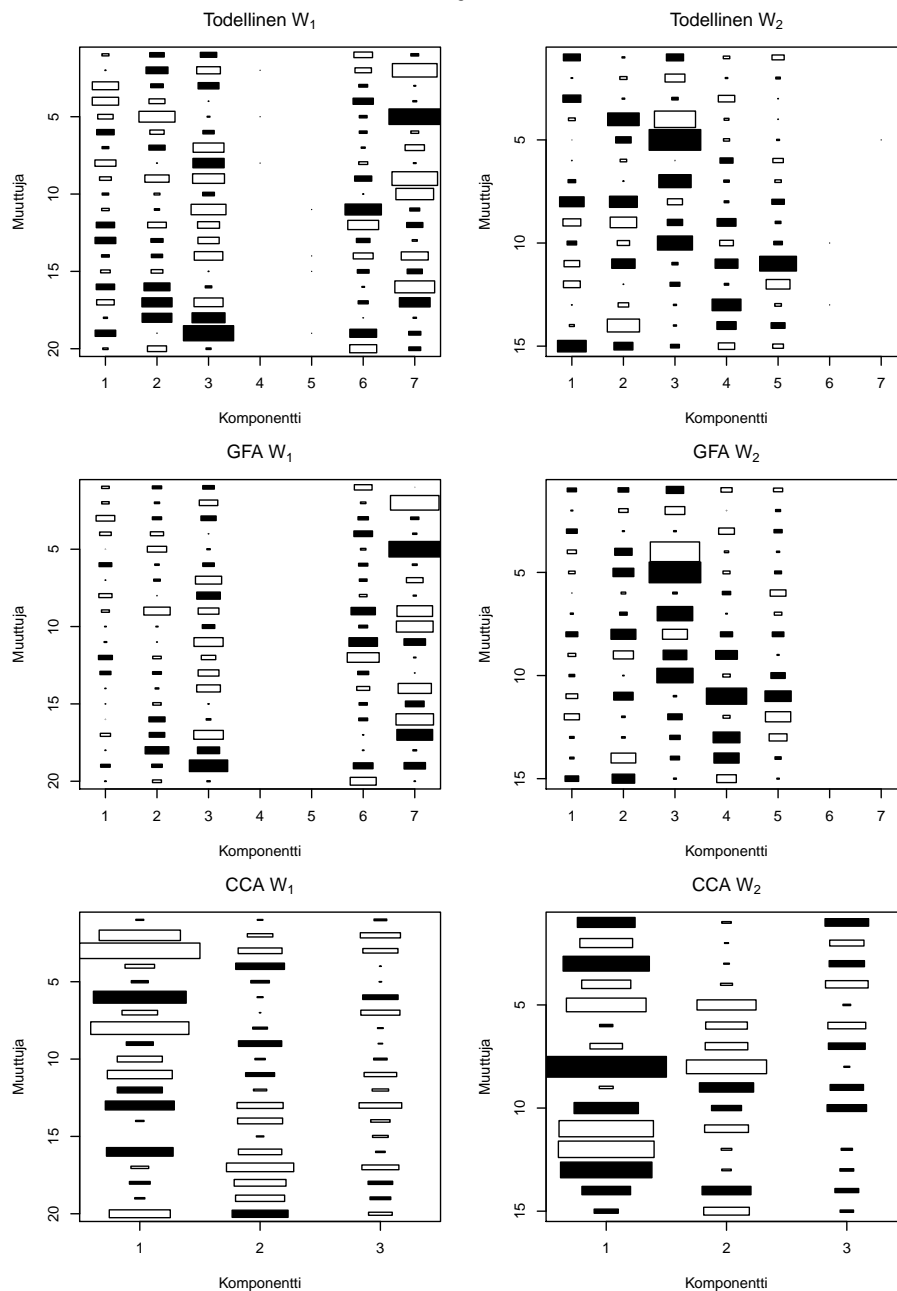
Tässä työssä tarkasteltiin ryhmäfaktorianalyysiä, joka on malli useiden datajoukkojen välisten riippuvuuksien löytämiseksi. Mallia lähestyttiin klassisten mallien, faktorianalyysin ja kanonisen korrelaation, näkökulmasta sekä esittämällä lyhyesti bayesilaisen mallintamisen peruseriaatteet. Ryhmäfaktorianalyysi muotoiltiin bayesilaisena mallina määrittelemällä sen parametreille ja piilomuuttujille priori-todennäköisyysjakaumat. Bayesilaisen mallin posteriorin laskemiseksi esitettiin variaatiomenetelmään perustuva approksimaatio, jossa oletetaan, että posteriori voidaan esittää tulona riippumattomia todennäköisyysjakaumia.

Ryhmäfaktorianalyysiä sovellettiin yksinkertaiseen simuloituun aineistoon sekä todelliseen aivokuvantamissovellukseen. Molemmissa kokeissa saatiin kvalitatiivisesti hyviä tuloksia. Olisi mielenkiintoista käsitellä tarkemmin tässä työssä käytetyllä tai muulla vastaavalla fMRI-aineistolla saatavia tuloksia ja selvittää, pystytäänkö ryhmäfaktorianalyysin avulla löytämään aineistosta jotain neurotieteellisesti merkittäviä tuloksia.

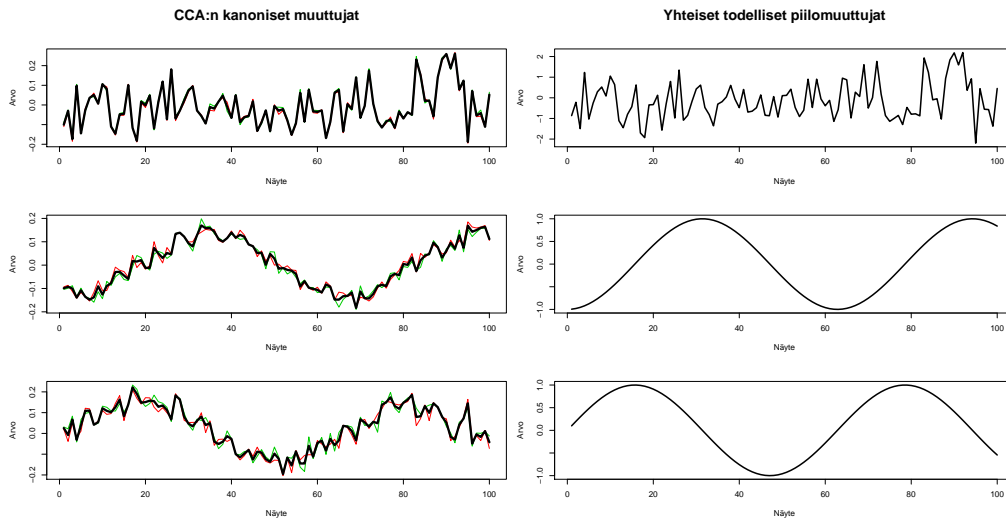


Kuva 2: Vasemmalla todelliset simuloidut piilomuuttujat ja oikealla estimoidun mallin piilomuuttujien odotusarvo näytteiden funktiona. Kuvaajista voi havaita, että malli on invariantti etumerkkien suhteen eli jotkin estimoidut muuttujat pitäisi kertoa -1 :llä. Estimoidut muuttujat on järjestetty manuaalisesti luettavuuden helpottamiseksi vastaamaan parhaiten todellisia muuttujia.

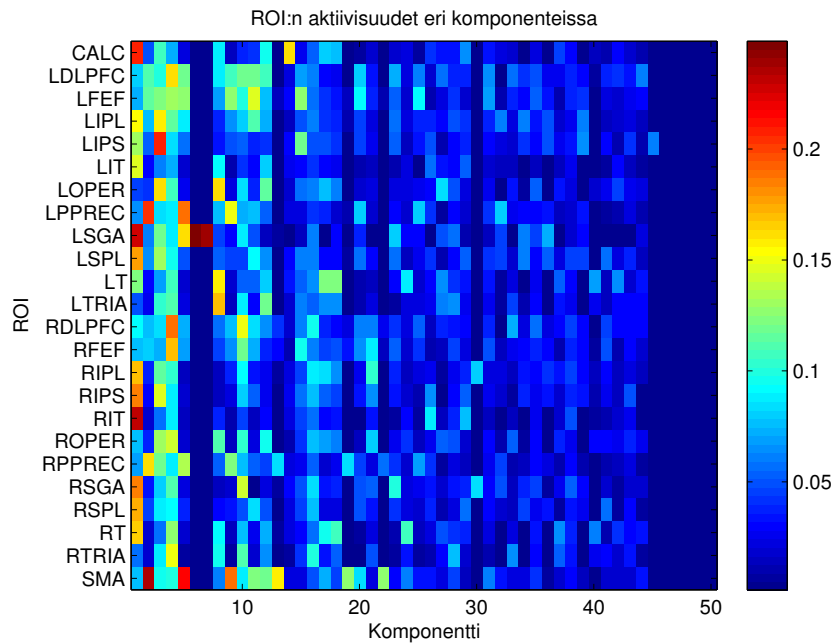
Projektit



Kuva 3: Todellinen projektionmatriisi sekä GFA:n ja CCA:n löytämät projektit. GFA selvästi löytää oikeat projektit komponenteille, mutta CCA:n projektit ovat hieman erilaisia. Laatikoiden koko kuvaa luvun suuruutta ja väri etumerkkiä (Hinton-diagrammi). Tyhjät sarakkeet vastaavat komponentteja, jotka ovat toiselle datajoukolle ominaista vaihtelua ja joita ei CCA pyri edes löytämään.



Kuva 4: CCA:n antamat kolme ensimmäistä kanonista muuttujaa (punainen ja vihreä) ja niiden keskiarvot (musta). Vertailun helpottamiseksi todelliset yhteiset piilomuuttujat esitetty oikealla.



Kuva 5: Eri aivoalueiden (ROI) aktiivisuudet eri komponenteissa. Suuri arvo merkitsee, että komponentti selittää ROI:n vokselien aktiivisuutta.

Lähteet

- David Barber. *Bayesian Reasoning and Machine Learning*. Cambridge University Press, 2012. ISBN 9780521518147.
- Christopher M. Bishop. *Pattern recognition and machine learning*. Springer, 2006. ISBN 9780387310732.
- Filip Deleus ja Marc M. Van Hulle. Functional connectivity analysis of fMRI data based on regularized multiset canonical correlation analysis. *Journal of Neuroscience Methods*, 2011.
- K.J. Friston, A.P. Holmes, K.J. Worsley, J.P. Poline, C.D. Frith ja R.S.J. Frackowiak. Statistical parametric maps in functional imaging: a general linear approach. *Human brain mapping*, 2(4):189–210, 1994.
- Harold Hotelling. Relations between two sets of variates. *Biometrika*, 28: 321–377, 1936. doi: 10.1093/biomet/28.3-4.321.
- Wolfgang Härdle ja Léopold Simar. *Applied multivariate statistical analysis*. Springer, 2003. ISBN 9783540030799.
- T. A. Keller, M. A. Just ja V. A. Stenger. Reading span and the time-course of cortical activation in sentence-picture verification. *Annual Convention of the Psychonomic Society*, 2001. Data saatavilla osoitteesta <http://www.cs.cmu.edu/afs/cs.cmu.edu/project/theo-81/www/> (viitattu 2.5.2012).
- Dong C. Liu ja Jorge Nocedal. On the limited memory bfgs method for large scale optimization. *Mathematical Programming*, 45:503–528, 1989. ISSN 0025-5610. doi: 10.1007/BF01589116.
- N.K. Logothetis, J. Pauls, M. Augath, T. Trinath, A. Oeltermann et al. Neurophysiological investigation of the basis of the fMRI signal. *Nature*, 412(6843):150–157, 2001.

- Jaakko Luttinen ja Alexander Ilin. Transformations in variational bayesian factor analysis to speed up learning. *Neurocomputing*, 73(7-9):1093–1102, 2010.
- David J.C. Mackay. Probable networks and plausible predictions - a review of practical Bayesian methods for supervised neural networks. *Network: Computation in Neural Systems*, 6(3):469–505, 1995.
- David J.C. MacKay et al. Bayesian nonlinear modeling for the prediction competition. *Ashrae Transactions*, 100(2):1053–1062, 1994.
- Kenneth A. Norman, Sean M. Polyn, Greg J. Detre ja James V. Haxby. Beyond mind-reading: multi-voxel pattern analysis of fMRI data. *Trends in cognitive sciences*, 10(9):424–430, 2006.
- Francisco Pereira, Tom Mitchell ja Matthew Botvinick. Machine learning classifiers and fMRI: a tutorial overview. *Neuroimage*, 45(1):S199–S209, 2009.
- Bradley S. Peterson, Pawel Skudlarski, J. Chris Gatenby, Heping Zhang, Adam W. Anderson ja John C. Gore. An fMRI study of stroop word-color interference: evidence for cingulate subregions subserving multiple distributed attentional systems. *Biological Psychiatry*, 45:1237–1258, 1999. doi: 10.1016/S0006-3223(99)00056-6.
- Vincent Y. F. Tan ja Cédric Févotte. Automatic Relevance Determination in Nonnegative Matrix Factorization. *SPARS'09 - Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations*, Rémi Gribonval, toimittaja, Saint Malo, Royaume-Uni, 2009. Inria Rennes - Bretagne Atlantique.
- Seppo Virtanen, Arto Klami ja Samuel Kaski. Bayesian CCA via group sparsity. *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (ICML-11)*, Lise Getoor ja Tobias Scheffer, toimittajat, ICML '11, sivut 457–464, New York, NY, 2011. ACM. ISBN 978-1-4503-0619-5. Implementation in R available at <http://research.ics.tkk.fi/mi/software/gSCCA/>.

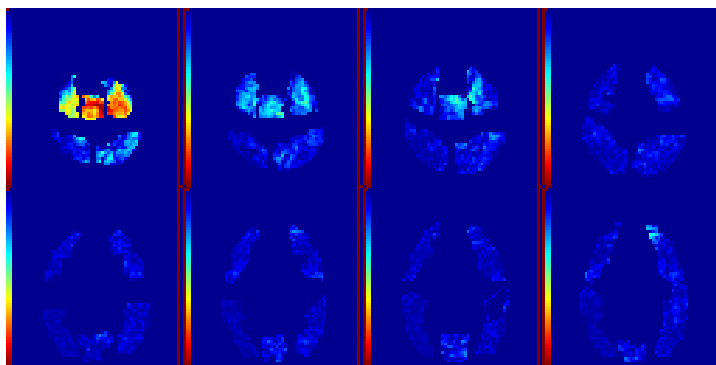
Seppo Virtanen, Arto Klami, Suleiman A. Khan ja Samuel Kaski. Bayesian group factor analysis. *Proceedings of the Fifteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS 2012)*, Neil Lawrence ja Mark Girolami, toimittajat, JMLR: Workshop and Conference Proceedings, sivut 1269–1277, 2012.

Chong Wang. Variational Bayesian Approach to Canonical Correlation Analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 18:905–910, 2007. doi: 10.1109/TNN.2007.891186.

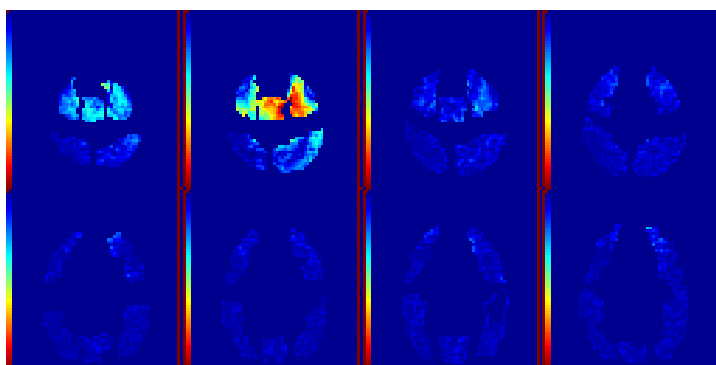
A Kuvia fMRI-kokeeseen

Seuraavissa kuvissa on esitetty GFA-komponentteja vastaavat painovektorit piirtämällä jokainen vokseli värillä, joka vastaa painon itseisarvoa. Vokselit voidaan esittää kahdeksalla poikkileikkauskuvalla aivoista. Kylmät värit kuvaavat pieniä itseisarvoja ja lämpimät värit suuria; vaaleansininen ja sitä lämpimämmät värit ovat merkittävästi nolasta poikkeavia lukuja, sillä jokaiselle vokselille on annettu pieni positiivinen arvo, jotta ne erottuisivat taustaväristä.

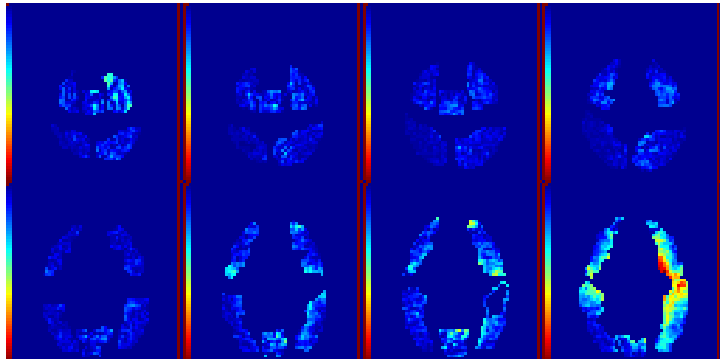
Komponentti 2



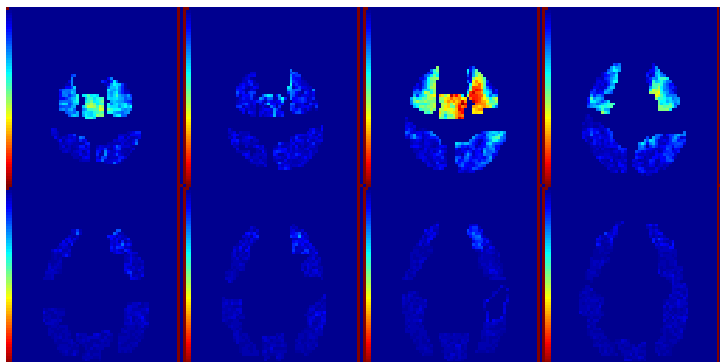
Komponentti 5



Komponentti 8



Komponentti 9



Komponentti 19

