

文章编号:1002-0411(2004)02-0208-05

非线性优化方法在脑电逆问题中的应用与比较

邹凌, 朱善安

(浙江大学电气工程学院, 浙江 杭州 310027)

摘要:讨论了基于单纯形法(Simplex)、阻尼最小二乘法(LM)方法、混合遗传算法(HGA)等非线性优化方法的脑电偶极子定位问题。仿真结果表明,这些算法在一定条件下均可使用,比较而言,Simplex、LM法有较快的计算速度,而HGA耗时较多。另一方面,HGA对迭代初值要求不高,而Simplex、LM则对此有一定的要求。特别在对多偶极子源求解时,Simplex、LM有时因初值选择困难而失效,而HGA仍然是有效的。

关键词:脑电逆问题;混合遗传算法;单纯形法;阻尼最小二乘法

中图分类号:R318.04 TP301.6

文献标识码:B

Application and Comparison of Some Nonlinear Optimization Methods in EEG Inverse Problem

ZOU Ling, ZHU Shan-an

(College of Electrical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: This paper discusses EEG dipole source localization problems solved by nonlinear optimization methods, such as Simplex, Levenberg-Marquart and Hybrid Genetic Algorithm. Computer simulation demonstrates that these algorithms are all available under certain conditions. In comparison, Simplex, LM algorithms are of fast computation speed while HGA costs more time. On the other hand, HGA almost has no special need for the selection of initial iterative values while Simplex and LM algorithms have such need to some extent. Furthermore, on estimation of multiple source parameters, Simplex, LM algorithms sometimes fail due to incorrect selection of initial iterative values, while HGA is still effective.

Keywords: EEG inverse problem; hybrid genetic algorithm; simplex; Levenberg-Marquart

1 引言(Introduction)

神经科学中普遍研究的一个问题是,在给定头皮表面测量电压的情况下,决定大脑电活动的区域。这个问题的精确结果对临床诊断和脑功能的研究都非常有用^[1]。

然而,从给定头皮脑电的分布推算脑电活动的源(脑电的逆问题,反之,称为正问题)是一个不适定问题。脑电逆问题的不适定性使得解决逆问题(源定位)成为一个很有挑战性的研究课题。

解决脑电的源定位有几种方法。一个普遍的方法是源成像方法,具体包括基于头皮电位、边界元、有限元等的皮层电位成像方法^[2],以及低分辨率层析方法^[3]。另一种源定位方法不包括模型中源位置的先验假设,把电流偶极子当作源,大脑的一个相对集中小区域的电活动可以被一个等效偶极子源模

拟,由这个小区域产生的头皮脑电包含了关于这个等效偶极子源的位置方向信息,这个偶极子最终能提供它所代表的脑组织的活动信息^[4,5]。等效偶极子源定位方法现在被广泛应用。

基于非线性优化理论,本文分别利用结合了全局优化与局域优化特点的混合遗传算法及局域优化的单纯形法(Simplex)、阻尼最小二乘法(LM)求解脑电偶极子定位问题。鉴于单个或两个移动偶极子定位方法经常使用以下四种方法:试错法(Trial-and-error)、LM优化方法、单纯形法及模拟退火方法^[5,6],而遗传算法在脑电偶极子定位中却少见报道,本文将局域优化算法与全局优化的遗传算法结合而成的混合遗传算法应用在脑电逆问题方面,侧重几种算法之间的比较,并尝试用局域优化算法求解两个偶极子的情况,从而进一步确定在不同条件下选择不同算法的依据。

2 脑电正问题模型选择及逆问题表述 (Model Selection of EEG forward problem and description of inverse problem)

为解决基于偶极子的脑电源定位问题,首先必须要假设源模型和头模型.本文源模型选用等效的单偶极子和双偶极子,为减少计算量,头模型选用简化的可以实现线性参数与非线性参数分离的不均匀同心三层球模型^[7].

偶极子定位方法描述了基于等效电流偶极子的脑电活动.六个参数、三个位置坐标、三个极矩坐标就完全确定了一个电流偶极子.等效电流偶极子产生的电压与观测电压的“紧密性”保证了偶极子与实际脑电活动的“等效性”.“紧密性”意味着在所有其他可能的偶极子中,等效偶极子产生的电压与观测电压之间的均方差最小.因为真实的电活动源并不是一个点,所以等效偶极子不能完全代表真实的电流活动源,为了说明两者的近似程度,引入了一个生理学意义上的概念——拟合优度 (goodness-of-fit, GOF),定义为:

$$GOF = \sqrt{1 - \frac{\|U_{\text{meas}} - U_{\text{dipole}}\|^2}{\|U_{\text{meas}}\|^2}} \quad (1)$$

U_{meas} 、 U_{dipole} 分别是测量电压和偶极子产生的电压值.因为偶极子是点源,所以在讨论基于等效电流偶极子的脑电活动时必须要检查它的拟合优度.从经验我们知道,当 $GOF > 98\%$ 时,等效单偶极子定位是合理的; $GOF > 99\%$ 时,等效双偶极子定位才是合理的^[8].

给定合适的模型之后,需要根据有限的测量点处的电压值重建源,逆问题可以归结为估计电流偶极子的位置参数和极矩参数的最小二乘问题^[9].

$$E(L, Q) = \|V_{\text{meas}} - G(L)Q\|_F^2 \quad (2)$$

式中, V_{meas} : 测量电压值, L : 位置, Q : 偶极矩, $G(L)$: 增益矩阵, $\|\cdot\|_F$: Frobenius 范数.这样逆问题归结为通过最小化目标函数 E 求 $\{L, Q\}$.很显然这是非线性优化问题,因此必须采用一些迭代优化算法来解决.假定有 N 个偶极子、 k 个时间点,那么就有 $3N$ 个位置参数 $3NK$ 个偶极矩参数,共有 $3N(k+1)$ 个参数,这实际上是一个很困难的优化问题.然而,由于 V_{meas} 是参数 Q 的线性函数,就可以通过线性参数与非线性参数分离的方法,大大地减少计算的复杂性.首先,假设位置 L 已知,那么使 $E(L, Q)$ 最小化的矩阵 Q 为:

$$Q = G^* V_{\text{meas}} \quad (3)$$

G^* 是 Moore-Penrose 伪逆, $G^* = V\Sigma^+U^T$, 这里 $G = U\Sigma V^T$ 是奇异值分解, Σ^+ 是 Σ 的逆.在得到 L 以前用这个伪逆代替 Q , 逆问题的目标函数就变成:

$$E = \|V_{\text{meas}} - GQ\|_F^2 = \|V_{\text{meas}} - G^*V_{\text{meas}}\|_F^2 = \|(1 - GG^*)V_{\text{meas}}\|_F^2 \quad (4)$$

可以看出,目标函数仅依赖增益矩阵 G , G 是只有 $3N$ 个非线性位置参数的函数.这样如果源是两个偶极子,优化的参数就减少为 6 个.通过某些非线性优化方法确定 L 后, Q 中的 $3Nk$ 个极矩参数就可以用式(3)求得.这在计算上是很简单的,只需求 G 的伪逆即可.

3 优化方法 (Optimization methods)

非线性优化方法包括非线性局域优化方法与非线性全局优化方法.常用的非线性局域优化算法大致可以分为两类:一类是以牛顿类型为基础的梯度法,如 LM 算法;另一类是直接搜索法,如 Simplex 算法.局域优化方法有一个共性,即都是从解空间的某一个点出发,沿着使目标函数减小的方向搜寻迭代,直到找到极小点.所以若目标函数空间结构不复杂,只有一个最小点或只有少数的极小点,则可以利用该算法,否则,由于局域优化方法没有逃出局部极小的机制,可能会经常性地陷入局部极小点,寻找不到全局最小点,这时就需要使用具有有效逃离局部极小机制、可以在有限的可以接受的时间内以较大概率搜寻到全局最优点的全局优化算法.本文采用 LM 算法、Simplex 算法和混合遗传算法来解决偶极子位置参数的优化问题.

LM 算法 Gauss-Newton 算法中的迭代公式为:

$$L^{k+1} = L^{(k)} - \lambda_k (J^T(L^{(k)}) \cdot J(L^{(k)})^{-1} J^T(L^{(k)}) e(L^{(k)})) \quad (5)$$

其中残差 $e(L^{(k)}) = V_{\text{meas}} - G(L^{(k)})G^*(L^{(k)})V_{\text{meas}}$, $J(L^{(k)})$ 为 $L^{(k)}$ 处残差 e 关于 L 的雅可比矩阵, λ_k 为正数,称为步长因子,使一元函数 $E(L^{(k+1)})$ 取最小.式(5)可化为:

$$L^{(k+1)} = L^{(k)} + \lambda_k P_k \quad (6)$$

其中搜索方向 P_k 满足方程:

$$J^T(L^{(k)})J(L^{(k)})P_k = -J^T(L^{(k)})e(L^{(k)}) \quad (7)$$

当 $J^T(L^{(k)})J(L^{(k)})$ 在迭代过程中出现奇异时,无法直接从方程中得出搜索方向,LM 算法解决了此问题.LM 算法把 $J^T(L^{(k)})J(L^{(k)})$ 对角线上的元素都加上一个正数 μ , 则搜索方向 P_k 的方程变为:

$$(J^T(L^{(k)})J(L^{(k)}) + \mu I)P_k = -J^T(L^{(k)})e(L^{(k)}) \quad (8)$$

注意到 $J^T(L^{(k)})J(L^{(k)})$ 是非负定的,故 $J^T(L^{(k)}) \cdot J(L^{(k)}) + \mu I$ 一定是正定的,因而从方程中可以解出搜索方向 P_k ,这就是 LM 算法,也称阻尼最小二乘法.它的中心思想是:如果初始值远离最优点,则选较大的阻尼因子 μ 值,按最速下降法迭代到最优点附近,然后减少 μ 值,按拟牛顿法寻优.若初始值选择接近最优点, μ 值可以始终很小.可见,LM 算法结合了最速下降法与高斯-牛顿法的优点,是一种比较理想的优化算法.

Simplex 算法 所谓单纯形是指 n 维空间中具有 $n+1$ 个顶点的凸多面体.这里,引入反应平面(response surface)的概念.通常,对于描述最小二乘问题的函数 $SS = \frac{1}{2} \|F(x)\|_2^2 = \frac{1}{2} \sum_i F_i(x)^2$,如果有 n 个待优化的参数,那么 SS 就描述了一个 $(n+1)$ 维平面,称之为反应平面(response surface).如果优化的参数值较差,那么平面上对应的点的值就很高,随着参数值的不断优化,反应面也朝着最小值倾斜.在本文脑电逆问题中,如果源采用两个偶极子(6 个位置参数待优化),那么式(4)就描述了一个 7 维的平面.单纯形算法的基本思想是:给定 n 维空间中一个单纯形后,求出 $n+1$ 个顶点上的函数值,确定出有最大函数值的点(称最高点)和最小函数值的点(称最低点),然后通过反射、扩展、压缩等方法求出一个较好点,用它取代最高点,构成新的单纯形,或者通过向最低点收缩形成新的单纯形,用这样的方法逼近极小点.与同样需要雅可比导数余差的 Levenberg-Marquardt 算法相反,单纯形法只使用引导搜索方向上每次迭代的余差.由于有较大的初始移动,单一化算法的好处是参数空间的更广泛的采样,迅速地获得最小值,然而,单纯形对初始值敏感,且初始值的选择依赖于先验知识和研究者的经验,同 LM 算法一样,单纯形法易陷入局部最小,为解决这个问题,下面采用混合遗传算法,该法将具有全局寻优能力的遗传算法与具有很高局部搜索效率的局域算法结合起来,从而改善了基本遗传算法的局部搜索能力,提高了优化质量和搜索效率.

混合遗传算法 遗传算法是借鉴生物界自然选择和群体进化机制形成的一种全局寻优算法.与传统的优化算法相比,遗传算法具有如下优点:1)遗传算法是对要寻优参数的编码进行操作,而不是对参数本身.2)遗传算法是从群体出发开始的并行操作,

而不是从一个点开始,因而可以有效地防止搜索过程收敛于局部最优解,有较大可能求得全局最优解.

3)遗传算法的操作均使用随机概率的方式,而不是确定性的规则.4)遗传算法在解空间内采用启发式搜索,其效率优于其他方法.

遗传算法中,将问题空间中的决策变量通过一定编码方法表示成遗传空间的一个个体,它是一个基因型串结构数据;同时,将目标函数值转换成适应值,用来评价个体的优劣,并作为遗传操作的依据.遗传操作包括三个算子:选择、交叉和变异.选择用来实施适者生存的原则,即把当前群体中的个体按与适应值成比例的概率复制到新的群体中,构成交配池(当前代与下一代之间的中间群体).选择算子的作用效果是提高了群体的平均适应值.由于选择算子没有产生新个体,所以群体中最好个体的适应值不会因选择操作而有所改进.交叉算子可以产生新个体,它首先使交配池中的个体随机配对,然后将两两配对的个体按某种方式相互交换部分基因.变异是对个体的某一个或某一些基因值按某一较小概率进行改变.从产生新个体的能力方面说,交叉算子是产生新个体的主要方法,它决定了遗传算法的全局搜索能力.而变异算子只是产生新个体的辅助方法,但也必不可少,因为它决定了遗传算法的局部搜索能力.交叉和变异相配合,共同完成对搜索空间的全局和局部搜索.

遗传算法由于其运算简单和解决问题的有效能力而被广泛应用到众多领域.理论上已经证明,遗传算法能从概率的意义上以随机的方式寻找到问题的最优解.但应用实践表明,在遗传算法的应用中也会出现早熟、局部寻优能力较差等问题.并且一般来说,对很多问题而言,基本遗传算法的求解效果往往不是解决这个问题的最有效方法.

另一方面,梯度法、单纯形法等一些局域优化算法具有很强的局部搜索能力,在遗传算法的搜索过程中融合这些优化方法的思想,构成一种混合遗传算法(Hybrid Genetic Algorithm)是提高遗传算法运行效率和求解质量的一个有效手段^[10].

混合遗传算法的主要特点:1)引入了局部搜索过程.基于群体中各个个体所对应的表现型,进行局部搜索,从而找出各个个体在目前的环境下所对应的局部最优解,以便达到改善全体总体性能的目的.2)增加了编码变换操作过程.对局部搜索过程所得到的局部最优解,通过编码过程将它们变换为新的个体,以便能够以一个性能较优的新群体为基础进

行下一代的遗传进化操作。

本文在对单偶极子定位时,将单纯形法与遗传算法结合起来,在对双偶极子定位时,将阻尼最小二乘法与遗传算法结合起来构成混合遗传算法。

混合遗传算法的基本步骤如下:

- 1) 在一定的编码方案下,随机产生一个初始种群(设种群规模为 N);
- 2) 用相应的解码方法,将编码后的个体转换成问题空间的决策变量,并求得个体的适应值;
- 3) 按照个体适应值的大小,从种群中选出适应值较大的一些个体构成交配池;
- 4) 由交叉和变异这两个遗传算子对交配池中的个体进行操作,并形成临时种群($N - 2$);
- 5) 依概率 P 随机独立地从临时种群中选取 $[(N - 2) * P]$ 个个体,以这些个体为初值,用局域算法寻找极小值点,并取代原来的个体。
- 6) 反复执行步骤 2 ~ 4,直至满足收敛判据为止。

其中,坐标位置分量的数据宽度取 20cm(若以脑中心为坐标原点,相当于 - 10cm 到 10cm 范围),偶极子的位置参数用一个 15 位的二进制字符串表示,称之为染色体,每一位代表 0.006 mm 的精度,变异后的染色体与现存的部分染色体结合产生新的子代,去掉与测量数据有较大匹配误差的染色体.选择算子采用了最优保存策略和比例选择法相结合的思

路,将这两种方法结合的目的在于:在遗传操作中,不仅能不断提高群体的平均适应值,而且能保证最优个体的适应值不减小。

4 模拟计算结果与讨论 (Simulation results and discussion)

具体计算时采用头表面 129 个测量点处的电压数据,分别以单偶极子和双偶极子为模拟脑电的源.单偶极子参数为 (- 0.282, 0, 0.282, 0, 0, 0.1).前三个为位置坐标,单位厘米;后三个为偶极矩,单位纳安·米,以下同.双偶极子参数为 (- 1.0, 3.0, 6.0, 0.577, - 0.577, 0.577);(4.0, 0.0, 0.0, 0.577, - 0.577, 0.577)。

考虑到目标函数空间结构的复杂性,为尽可能保证迭代最终取得目标函数极小值的结果,对参数的初始迭代值按以下方式选择:在解空间随机产生一些点,分别计算其对应的目标函数值,选取其中使目标函数值最小的几个点作为迭代初值的后选,结果见表 1、2.这里定义每个偶极子的定位误差为 $d = \sqrt{(l_x - \hat{l}_x)^2 + (l_y - \hat{l}_y)^2 + (l_z - \hat{l}_z)^2}$, \hat{l}_x 为实际位置, l_x 为估计值.应该指出的是,本文的目的是比较当应用于脑电偶极子定位时,不同优化算法的运行性能,因此在仿真数据中没有考虑噪声,也没有考虑源数目未知的情况。

表 1 单偶极子参数的仿真结果

Tab.1 Simulation results of single dipole parameters

算法	迭代初值	计算结果	GOF	d
Simplex	- 5.246, 2.350, 1.116	- 0.282, 0.000, 0.282	99.99 %	4.198e - 005
LM		- 5.548, 1.522, 0.976	65.86 %	5.524
Simplex	- 0.437, 0.326, - 0.002	- 0.282, 0.000, 0.282	99.99 %	5.601e - 005
LM		- 0.282, 0.000, 0.282	99.99 %	1.790e - 004
HGA	解空间任一随机点	- 0.282, - 0.000, 0.282	99.99 %	6.291e - 004

在以下计算单偶极子源参数时发现:使用 Simplex 算法,从不同的迭代初值开始搜寻,最后得到的点相当接近,表明 Simplex 法的解有相当高的精度,从 GOF 值也可以看出,采用 Simplex 算法, GOF > 98 %,实现了较好定位,但是计算时间要长于 LM;采用 LM 算法,有时 GOF 远远小于 98 %,不能较好定位.HGA 算法虽然也能达到较好定位精度,但计算时间要明显长于 Simplex、LM 算法.在 Intel Pen-

tium4 1.7GHz 微机上,LM、Simplex 算法需几秒钟到几分钟,而 HGA 耗时较多,欲达到相应的精度需几十分钟左右,在对双偶极子源计算时,以上情况更加突出.对于双偶极子的情况,LM 算法的计算速度要快于 Simplex 算法,定位精度则因迭代初值的不同而有不同的变化,两者之间无绝对的标准.对于一个好的算法,鲁棒性和快速性都很重要,应用时应根据具体的要求而定。

另外,Simplex 算法及 LM 算法对迭代初值有一定的要求,若不进行筛选而随机选择,则可能无法得

到合理的解.HGA 则几乎无此要求,从解空间中随机产生的点作初始迭代值,均可得到最优点.

表 2 双偶极子参数的仿真结果

Tab.2 Simulation results of two dipole parameters

算法	迭代初值	计算结果	GOF	$d1, d2$
Simplex	- 0.707, 4.257, 7.865	- 1.000, 3.000, 6.000 3.999, - 0.000, 0.000	99.99 %	0.188, 0.013
LM	1.006, - 0.145, - 8.218	- 1.422, 3.943, 7.614 4.406, - 0.346, - 5.934	94.49 %	1.917, 5.958
Simplex	- 2.216, - 0.013, 8.458	- 0.105, 0.020, 0.594 5.012, 0.019, 0.012	94.82 %	6.236, 1.013
LM	7.383, 1.044, - 1.621	- 0.998, 2.991, 5.981 4.132, 0.003, 0.002	99.99 %	0.020, 0.132
HGA	解空间任一随机点	- 0.919, 2.915, 5.890 4.247, - 0.019, 0.019	99.99 %	0.159, 0.248

综上所述可以得出以下结论.利用优化方法可以求解脑电逆问题,在理论上,尽管相对全局优化的混合遗传算法而言,Simplex 及 LM 为局域优化方法,但在实际计算时可根据目标函数值酌情判断所求参数是否满足全局最小.在对单电流偶极子求解时,Simplex 算法是合适的选择,速度快.精度高.而在求解两个偶极子源时,如果考虑时间代价,则可选 LM 算法,如果对更多的偶极子源参数求解,则 LM 算法亦将因迭代初值选择的困难而失效.在不计时间代价的情况下,混合遗传算法仍然是可选择的方法.

参 考 文 献 (References)

- [1] Homma I, Masaoka Y, Hirasawa K, *et al.* Comparison of source localization of interictal epileptic spike potentials in patients estimated by the dipole tracing method with the focus directly recorded by the depth electrodes [J]. *Neuroscience Letter*, 2001, 304(1-2): 1~4.
- [2] He B, Zhang Z, Lian J, *et al.* Boundary element method based cortical potential imaging of somatosensory evoked potentials using subjects' magnetic resonance images [J]. *Neuroimage*, 2002, 16(3): 564~576.
- [3] He B, Yao D, Lian J, *et al.* An equivalent current source model and Laplacian weighted minimum norm current estimates of brain electrical activity [J]. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 2002, 49(4): 277~288.
- [4] Salu Y, Cohen L G, Rose D, *et al.* An improved method for localizing electric brain dipoles [J]. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 1990, 37(7): 699~705.
- [5] Cuffin B N. A method for localizing EEG sources in realistic head models [J]. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 1995, 42(1): 68~71.
- [6] Gerson J, Cardenas V A, Fein G. Equivalent dipole parameter estimation using simulated annealing [J]. *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, 1994, 92(2): 161~168.
- [7] Mosher J, Leahy R, Lewis P. EEG and MEG: forward solutions for inverse methods [J]. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 1999, 46(3): 245~259.
- [8] Musha T, Homma S. Do optimal dipoles obtained by the dipole tracing method always suggest true source localizations? [J]. *Brain Topography*, 1990, 3(2): 143~150.
- [9] Musha T, Okamoto Y. Forward and inverse problems of EEG dipole localization [J]. *Critical Reviews in Biomedical Engineering*, 1999, 27(3-5): 189~239.
- [10] Yen J, Liao J C, Randolph D, *et al.* A hybrid approach to modeling metabolic systems using genetic algorithm and simplex method [A]. *Proceedings of the 11th Conference on Artificial Intelligence Applications (CAIA95)* [C]. Los Angeles, CA: 1995. 277~283.

作者简介

邹凌(1975-),女,博士研究生.研究领域为信号处理,脑电逆问题.

朱善安(1952-),男,教授,博士生导师.研究领域为图像处理,故障诊断,复杂系统建模与控制,生物电现象等.