

Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky
Slovenská komisia pre vedecké hodnosti

Mgr. Ing. Roman Rosipal, PhD.

Advanced latent and probabilistic mathematical
models for computer modeling and analysis of
brain functionality

Pokročilé latentné a pravdepodobnostné matematické modely pre
počítačové modelovanie a analýzu mozgovej funkcionality

Vedný odbor: 020302 - Aplikovaná informatika

Autoreferát dizertácie na získanie vedeckej hodnosti doktora
technických vied

Bratislava, XXX, 2021

Dizertácia k získaniu vedeckej hodnosti doktora matematických vied sa predkladá ako súbor publikovaných prác vypracovaný podľa platných predpisov a to podľa vyhlášky SKVH č. 65/1977 Zb. z. v znení neskorších predpisov vykonaných vyhláškou SKVH č. 302/1990 Zb. z

Dizertácia bola vypracovaná na Oddelení teoretických metód, Ústav merania SAV v Bratislave. Výsledky publikované v prácach tvoriacich dizertáciu boli získané v rokoch 2005 - 2020 v rámci zapojenia sa autora do riešenia projektov National Aeronautics and Space Administration (NASA), projektu 6. rámcového programu Európskej únie (FP6-EU), projektu Austrian Science Fund (FWF), grantových úloh Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV) a Vedeckej grantovej agentúry VEGA.

Uchádzač: Mgr. Ing. Roman Rosipal, PhD.
Oddelenie teoretických metód
Ústav merania SAV
Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava

Oponenti: ...
...
...
...

Stanovisko k dizertácii vypracoval Ústav merania SAV v Bratislave (pracovisko autora v čase podania dizertácie).

Obhajoba dizertácie sa koná dňa XX.XX.XX o XX:XX hod pred komisiou č. XXX pre obhajoby doktorských dizertácií z vedného odboru „Aplikovaná informatika na XXX, XXX, XXX, v miestnosti č. XXX.

S dizertáciou je možné sa oboznámiť na XXX.

Predseda komisie pre obhajoby doktorských dizertačných prác vo vednom odbore č. 020302 - Aplikovaná informatika

Prof. Ing. Ivo Petráš, DrSc.
Fakulta BERG Technickej univerzity v Košiciach
B. Němcovej 3, 042 00 Košice

Obsah

1	Úvod	1
2	Vedecké ciele a prínosy práce	2
3	Hlavné výsledky dizertačnej práce	2
3.1	Latentná reprezentácia a modelovanie dát	3
3.1.1	Multivariantný prístup	3
3.1.2	Pravdepodobnostný prístup	5
3.2	Modely latentnej reprezentácie - multivariantný prístup	6
3.2.1	Parciálne najmenšie štvorce	6
3.2.2	Nelineárne parciálne najmenšie štvorce	8
3.2.3	Tenzorická reprezentácia EEG	13
3.2.4	Aplikácie modelov KPLS, PARAFAC a Tucker na EEG	16
3.3	Modely latentnej reprezentácie – pravdepodobnostný prístup	19
3.3.1	HGMM model spánku a ospalosti	20
3.3.2	Pravdepodobnostný spánkový model	22
3.3.3	Funkcionálna analýza dát a PSM	27
4	Zhrnutie pre prax a rozvoj adresovanej vednej oblasti	31
5	Literatúra	32
6	Zoznam prác tvoriacich dizertáciu	36
7	Citačný ohlas na predložené práce	37
8	Najdôležitejšie vybrané práce autora	37
8.1	Kapitoly v monografiách	37
8.2	Publikácie vo vedeckých časopisoch	38
8.3	Recenzované príspevky v zborníkoch z vedeckých konferencií	41
8.4	Vedecké projekty a realizácia výsledkov v praxi	44
	Summary	46
	Zusammenfassung	47

1 Úvod

Predkladaná dizertačná práca sa zaoberá problematikou matematického a počítačového modelovania mozgovej funkcionality, ktorej sa autor dlhodobo systematicky venuje. Už počas svojho magisterského štúdia na FEL ČVUT v Prahe, ako aj neskoršieho magisterského štúdia na FMFI UK v Bratislave, sa témou jeho diplomových prác stala oblasť využitia matematických modelov pri analýze mozgových, elektroencefalografických (EEG) signálov. Tematiku rozvíjal aj počas doktorandského štúdia na univerzite West of Scotland, UK.

Dizertačnú prácu tvorí vybraný súbor postdoktorandských prác vytvorených počas jeho pôsobenia v NASA Ames Research Center, USA a neskorších prác na Medical University of Vienna, ako aj prác z posledných rokov na Ústave merania SAV. Práce boli publikované v rokoch 2005 – 2020.

Tematicky sa práca zaoberá dvomi navzájom súvisiacimi oblasťami využitia modelov aplikovanej matematiky a štatistiky, ako aj počítačového modelovania, pri analýze EEG dát. Ich spoločným prvkom je existencia latentnej, nie priamo merateľnej, dátovej štruktúry, respektíve latentného mozgového procesu generujúceho priamo pozorované a merané EEG priebehy na povrchu hlavy. Spoločným cieľom je lepšie pochopenie mozgovej funkcionality.

Prvú oblasť tvorí vývoj a uplatniteľnosť latentných modelov pre dvojrozmerné a tenzorové dátové štruktúry. Navrhované nelineárne metódy regresie, klasifikácie a modelovania založené na jadrovom princípe, ako aj ich systematické a komplexné štúdium predstavujú prínos autora v oblasti aplikovanej matematiky a strojového učenia. Táto oblasť je reprezentovaná súhrnnými prehľadovými prácami vychádzajúcimi z nových prístupov a metód navrhnutých autorom a rozpracovaním ich vlastností a vzťahov vzhľadom na existujúce metódy [RR-1, RR-2, RR-4]. Aplikáciou vyvinutých a adaptovaných metód v oblasti neurofyziológie, presnejšie povedané, použiteľnosťou modelov latentnej dátovej štruktúry pri analýze EEG sa zaoberajú práce [RR-3, RR-7, RR-9]. Práce, a taktiež ich sprievodné publikácie a konferenčné príspevky, poskytujú nový spôsob štúdia oscilačných rytmov kortikálnej aktivácie, ktorý sa týmto spôsobom doteraz systematicky neskúmal.

Druhú oblasť latentného modelovania mozgovej funkcionality tvorí návrh a použiteľnosť pravdepodobnostných grafických modelov pri reprezentácii procesu spánku a únavy. Problematike sú venované práce [RR-5, RR-6, RR-8]. Navrhnutý pravdepodobnostný spánkový model vedie k vytváraniu špecifických kontinuálnych spánkových profilov. Model vychádza z definície väčšieho množstva spánkových mikrostavov, čím sa dosahuje väčšia flexibilita modelovania spánkovej štruktúry a tiež jej časových zmien. Pravdepodobnostný princíp umožňuje odklon od diskkrétnej kategorizácie stavov spánku a pomocou aposteriórnej pravdepodobnosti jednotlivých spánkových mikrostavov umožňuje lepšie modelovať dynamiku spán-

kových zmien. Práca [RR-8] predstavuje ďalšie rozšírenie navrhnutého princípu a je založená na kombinácii zhlukovania a časovej synchronizácie získaných pravdepodobnostných profilov pomocou metód funkcionálnej dátovej analýzy. Klinická validácia navrhnutých modelov a metód vedúcich k novej spánkovej reprezentácii bola študovaná v [RR-6, RR-8].

2 Vedecké ciele a prínosy práce

Cieľom dizertačnej práce je demonštrovať teoretický a aplikačný prínos autora v oblasti modelovania a analýzy funkcionality mozgu. Tento prínos zahŕňa nové formy latentných modelov na analýzu EEG dát, ktoré vedú k návrhu a realizácii systémov a zariadení pre experimentálny a klinický výskum. Ide metódy jadrového učenia a metódy z oblasti grafických pravdepodobnostných modelov. Pre obidve oblasti bolo nutné nielen rozpracovať ich teoretický základ, ale najmä ich validovať a potvrdiť relevantnosť ich použitia pre klinickú prax. Rovnako bolo dôležité rozpracovať aj detaily ich efektívneho numerického riešenia a implementácie.

Súbor predkladaných prác reprezentuje širšie spektrum oblastí zaoberajúcich sa funkcionalitou mozgu. Bolo preto nutné detailne pochopiť riešené problémy a získať dostatočnú znalosť z každej študovanej oblasti. V oblasti štúdia mozgovej funkcionality to predstavuje dôležitý prvok, ktorý umožňuje prekonať prechod od aplikovanej matematiky k relevantnej interpretácii získaných výsledkov a prínosu nových metód pre túto oblasť. Veľmi úzka spolupráca s odborníkmi z neurovednej oblasti počas celého obdobia výskumu pomohla autorovi prekonať tento dôležitý prechod. Môžeme však podotknúť, že viaceré navrhnuté metódy našli uplatnenie aj mimo oblasť neurofyziológie, o čom svedčí široké spektrum vedných oblastí v ktorých boli metódy použité a práce autora citované.

Popri samotnom súbore prác tvoriacich dizertačnú prácu boli autorom publikované viaceré vedecké články vedúce alebo ďalej rozvíjajúce tematiku. Tieto sú citované v odbornej časti. Rovnako na základe predkladaných prác vzniklo niekoľko voľne dostupných súborov podporného softvéru v prostredí MATLAB® (MathWorks, Inc.) ako aj štyroch prototypov priemyselných aplikácií.

3 Hlavné výsledky dizertačnej práce

Súbor predložených prác reprezentuje teoretický a aplikačný vedecký prínos, ktorý je možné rozdeliť do nasledujúcich hlavných oblastí:

- návrh multivariantných (viacrozmerných) latentných metód založených na princípe jadrového učenia a určených pre nelineárnu regresiu, klasifikáciu a modelovanie vzťahov medzi súbormi dát

- poskytnutie prehľadnej unifikácie vzťahov medzi navrhnutými a existujúcimi multivariantnými metódami jadrového učenia, ako aj návrh a prehľad nových trendov rozvoja tejto vednej oblasti
- návrh prístupov, interpretácie riešení a systematickej validácie tenzorickej dekompozície neurofyzilogických dát
- aplikácia študovaných metód latentnej multivariantnej reprezentácie neurofyzilogických dát v oblasti konštrukcie rozhraní mozog-počítač ako aj monitorovania kognitívneho stavu a únavy subjektov
- návrh nového spôsobu a metód modelovania spánkového procesu pomocou pravdepodobnostných grafických modelov
- vypracovanie konceptu reprezentácie spánkového procesu založenom na spojení pravdepodobnostného modelovania a funkcionálnej dátovej analýzy aplikovanej na problém zhlukovania a časovej synchronizácie kriviek
- aplikácia pravdepodobnostného modelovania spánku na širokú množinu spánkových dát, systematická validácia prístupu a jeho klinická relevantnosť

Hlavné výsledky dizertačnej práce detailnejšie popíšeme v nasledujúcom texte.

3.1 Latentná reprezentácia a modelovanie dát

Ľudský mozog predstavuje jeden z najkomplexnejších živých systémov aký poznáme. Nie je to dané len jeho komplexnou anatomickou štruktúrou, ale hlavne jeho funkcionalitou. Z dôvodu tejto komplexnosti si lepšie pochopenie fungovania mozgu vyžaduje aj použitie pokročilých nástrojov matematického a počítačového modelovania. Nie je to preto náhoda, že s vývojom nových metód aplikovanej matematiky, štatistiky alebo strojového učenia sa paralelne rozvíjala tiež oblasť ich využitia pri skúmaní mozgovej funkcionality.

3.1.1 Multivariantný prístup

V mnohých oblastiach merania a analýzy dát sa často stretávame so situáciou, kedy nie sme schopní priamo merať študovanú veličinu, ale len veličiny, ktoré ju nepriamo reprezentujú. Príkladom je nepriame meranie elektrickej kortikálnej aktivity na povrchu hlavy pomocou EEG. Matematicky môžeme danú situáciu definovať nasledovne

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}\mathbf{X} + \mathbf{E} = \mathbf{F}(\mathbf{B} + \mathbf{N}) + \mathbf{E} \quad (1)$$

kde matica $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{N_e \times T}$ reprezentuje súbor EEG meraní na N_e elektródach na povrchu hlavy v T časových okamihoch, matica $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N_c \times T}$ aktiváciu v N_c kortikálnych

oblastiach mozgu a matica $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{N_e \times T}$ súbor externých, nie kortikálnych, signálov považovaných z hľadiska ich zdroju za šum. Matica $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{N_e \times N_c}$ predstavuje tzv. dopredný model priemetu kortikálnej aktivácie na povrch hlavy a je definovaná fyzikálnymi a anatomickými vlastnosťami vrstiev medzi kortexom a povrchom hlavy. Maticu $\mathbf{X}$ často uvažujeme ako dekompozíciu i) kortikálnej aktivácie, ktorej sledovanie je našim cieľom, matica $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_c \times T}$ v (1), a ii) kortikálnej aktivácie, ktorá z hľadiska úlohy predstavuje zložku, ktorá je mimo cieľa štúdia, matica $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{N_c \times T}$ v (1). Príkladom môže byť špecifická elektrická oscilácia, označme ju Osc1 , ktorá je v danom časovom okamihu aktívna v $N_{c1} \subset N_c$ kortikálnych podoblastiach mozgu a ktorú sa snažíme detegovať a monitorovať. Aktivácia Osc1 v danom čase $T_1 \subset T$ sa prejaví v N_{c1} riadkoch a T_1 stĺpcoch matice $\mathbf{B}$. Naopak, z hľadiska definovanej úlohy nie je Osc1 vo zvyšných $N_c - N_{c1}$ kortikálnych podoblastiach prítomná, čo môžeme reprezentovať nulovou hodnotou v príslušných riadkoch a stĺpcoch matice $\mathbf{B}$. Rovnako môžeme z hľadiska zápisu do matíc $\mathbf{B}$ a $\mathbf{N}$ uvažovať o ďalších kortikálnych aktiváciách ktoré sledujeme, alebo ktoré sú mimo nášho záujmu. Keďže dopredný model reprezentovaný maticou $\mathbf{F}$ nepremieta $\mathbf{X}$ homogénne do všetkých elektród na povrchu hlavy, okrem špecifického časového prejavu Osc1 , môžeme pracovať aj so špecifickým priestorovým rozložením sledovanej oscilácie na povrchu hlavy. Úlohou aj v takto na pohľad jednoducho definovanom probléme zostáva, ako z meraní $\mathbf{S}$ získať informáciu o časovej aktivácii a kortikálnom rozložení Osc1 .

Model (1) predstavuje ilustratívny príklad a jeho využitie je hlavne pri probléme inverzného modelovania kortikálnej aktivácie z EEG pozorovaní na povrchu hlavy. Avšak rovnako môžeme uvažovať aj pri modelovaní EEG samotného. Vtedy nahradíme maticu $\mathbf{X}$ súborom premenných nášho záujmu, napríklad priestorovo a frekvenčne špecifických oscilácii prítomných v EEG. Môžeme si všimnúť, že tým rozširujeme problém o ďalšiu modalitu, frekvenčnú charakteristiku. Tým sa dostávame do oblasti tenzorických dát, teda oblasti, v ktorej dáta nie sú reprezentované ako matice (dvoj-dimenzionálny tenzor), ale ako troj- alebo viac-dimenzionálny tenzor. Takýto prístup autor rozvinul práve pre oblasť štúdia mozgovej funkcionality, v ktorej sa tenzorická reprezentácia zdá byť pre modelovanie EEG dát veľmi vhodná. Problematike sa budeme bližšie venovať v časti 3.2.3.

Vráťme sa však k ilustratívnemu modelu (1). V matematickej štatistike existuje niekoľko klasických, dlhodobo študovaných a používaných metód hľadajúcich latentnú reprezentáciu $\mathbf{X}$ v modeli (1). Metóda hlavných komponentov (principal component analysis, PCA) alebo faktorová analýza (factor analysis, FA) predstavujú základné metódy, v ktorých operujúcou štatistikou hľadania latentného podpriestoru je variancia [Jolliffe, 2002, Gorsuch, 2002]. Z novších metód môžeme spomenúť analýzu nezávislých komponentov (independent component analysis, ICA) vo veľkej miere použíwanej pri predspracovaní a analýze EEG a založenú na princípe hľadania štatisticky maximálne nezávislých latentných zdrojov. V časti 3.2 upriamime pozornosť na menej známy model parciálnych najmenších štvorcov a

jeho vzťah k štandardným latentným modelom známym v oblasti matematickej štatistiky, tematike ktorej sa autor systematicky venoval.

Model (1) reprezentuje situáciu, kedy vzťah medzi latentným priestorom a meranými veličinami je lineárny. Pre reálne problémy to však predstavuje značné zjednodušenie. V praxi práve naopak môže mať tento vzťah nelineárnu povahu $\mathbf{S} \sim f(\mathbf{FX})$, kde $f(\cdot)$ reprezentuje neznámu nelineárnu funkciu mapujúcu dáta latentného priestoru na priestor pozorovaných dát. Problému sa autor venoval pri jeho návrhu nelineárneho jadrového modelu parciálnych najmenších štvorcov, ktorý je určený na modelovanie, regresiu a klasifikáciu dát s latentnou štruktúrou.

3.1.2 Pravdepodobnostný prístup

Iný prístup modelovania latentného systému predstavuje trieda pravdepodobnostných grafických modelov (PGM). Ide o triedu modelov operujúcich na princípe podmienenej pravdepodobnostnej závislosti medzi skúmanými veličinami. Tento typ modelov sa často študuje a používa v oblasti pravdepodobnosti, Bayesovskej matematickej štatistiky alebo strojového učenia. Základným prvkom PGM je grafická reprezentácia rozdelenia pravdepodobnosti skúmaných veličín, ktorá faktorizovaným spôsobom zobrazuje súbor nezávislostí, platiacich v danom rozdelení pravdepodobnosti. Grafická reprezentácia a s ňou spojené inferečné pravidlá umožňuje návrh širokého spektra modelov [Bishop, 1995]. Uveďme si to na jednoduchom príklade využívajúcom princíp podmienenej pravdepodobnostnej nezávislosti, ktorý potom rozvedieme a aplikujeme na oblasť modelovania EEG dát.

Uvažujme tri náhodné premenné x , y a z . V tomto kroku môžeme predpokladať ľubovoľné spojité alebo diskrétné rozdelenie pravdepodobnosti týchto premenných. Čo nás však zaujíma, je ich vzájomný vzťah, ktorý uvažujeme v nasledovnej forme

$$p(x, y|z) = p(x|z)p(y|z)$$

Vzťah hovorí o podmienenej nezávislosti medzi premennými x a y za podmienky z a umožňuje nám faktorizovať odhad združených pravdepodobností

$$p(x, y, z) = p(x, y|z)p(z) = p(x|z)p(y|z)p(z) \quad (2)$$

V praxi to znamená realizovateľnosť odhadu často komplikovanej združenej pravdepodobnosti $p(x, y, z)$ pomocou faktorizácie vedúcej k odhadu pravdepodobností $p(x|z)$, $p(y|z)$ a $p(z)$, ktorých modelovanie a odhad je jednoduchší.

Pre názornosť definujme aplikáciu takéhoto modelu na problém pravdepodobnostného modelovania procesu ľudského spánku. Je zrejmé, že jednotlivé stavy mozgu a ich dynamiku počas spánku nevieme priamo merať a predstavujú pre nás latentnú diskretnú premennú, označme ju z . Počas spánku vieme priamo merať množinu fyziologických dát, ako napríklad EEG, svalovú alebo respiračnú aktivitu

a podobne. Hovoríme o súbore spánkových meraní, tzv. polysomnografii (PSG). Zamerajme sa na EEG dáta a označme náhodnou premenou x ich reprezentáciu. Pravdepodobnosť $p(x)$ vieme priamo modelovať a odhadnúť. Pomocou klinických pravidiel vieme z PSG dát definovať množinu diskretných stavov mozgu počas spánku, spánkových fáz, a teda pre každý diskretný stav vieme modelovať podmienenú pravdepodobnosť $p(x|z)$. Rovnako vieme modelovať pravdepodobnosť iných indikátorov daného stavu mozgu, označme ju $p(y)$. Tá je takisto podmienená daným diskretným stavom mozgu a analogicky môžeme uvažovať podmienenú pravdepodobnosť $p(y|z)$. Príkladom formy modelovania pravdepodobnosti $p(x|z)$ môže byť zmes Gausovských rozdelení (funkcií), príkladom $p(y|z)$ diskretné rozdelenie definujúce pravdepodobnosť výskytu daného indikátora pre daný stav mozgu. Indikátorov môžeme mať viac a uvažovať pri nich rovnaký princíp faktorizácie a podmienenej nezávislosti. Priamo namerané EEG dáta a indikátory nám umožnia získať odhady $\hat{p}(x|z)$ a $\hat{p}(y|z)$. Odhad apriórnej pravdepodobnosti $\hat{p}(z)$, reflektujúcej pravdepodobnosť výskytu daného stavu mozgu, môžeme odhadnúť priamo z dát alebo použiť dostupnú znalosť o všeobecnej distribúcii modelovaných fáz spánku. Celý proces inferencie sa potom uzatvára tým, že použijúc známe Bayesovo pravidlo môžeme (2) prepísať do formy

$$\hat{p}(z|x, y) \sim \hat{p}(x|z)\hat{p}(y|z)\hat{p}(z)$$

reprezentujúcu aposteriornú pravdepodobnosť daného stavu mozgu, podmienenú danou sekvenciou EEG dát a hodnotou indikátora. Problematiku bližšie popíšeme v časti 3.3.

3.2 Modely latentnej reprezentácie - multivariantný prístup

3.2.1 Parciálne najmenšie štvorce

Parciálne najmenšie štvorce (partial least squares, PLS) je široká trieda metód na modelovanie vzťahov medzi množinami pozorovaných premenných pomocou extrahovaných latentných premenných. Pozostáva z regresných a klasifikačných úloh, ako aj z techník redukcie rozmerov a modelovacích nástrojov. Základným predpokladom všetkých metód PLS je, že pozorované údaje sú generované systémom alebo procesom, ktorý je riadený malým počtom nie priamo pozorovaných, teda latentných, premenných. Projekcie pozorovaných údajov do ich latentnej štruktúry pomocou PLS vyvinuli Herman Wold a spolupracovníci [Wold, 1985].

Metóde PLS sa venovala veľká pozornosť a bola rozvíjaná hlavne v oblasti chemometrie. Algoritmus sa stal štandardným nástrojom pre spracovanie širokého spektra problémov pracujúcich s chemickými údajmi. Úspech PLS v chemometrii viedol k aplikáciám v iných vedeckých oblastiach vrátane neurofyziológie [RR-3].

Uvažujme základnú formu lineárneho algoritmu PLS určeného na modelovanie vzťahu medzi dvoma súbormi dát (blokmi premenných). Označme $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^N$ priestor premenných predstavujúcich prvý blok a podobne $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^M$ priestor predstavujúci druhý blok premenných. Ďalej uvažujme, že máme k dispozícii n dátových vzoriek z každého bloku premenných. PLS metóda je založená na rozklade matíc premenných $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times N}$ a $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times M}$ na tvar

$$\begin{aligned}\mathbf{X} &= \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E} \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{U}\mathbf{Q}^T + \mathbf{F}\end{aligned}$$

kde $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ sú matice tvorené p extrahovanými latentnými vektormi (premennými), matica $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times p}$ a matica $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{M \times p}$ predstavujú matice váh a $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times N}$, ako aj matica $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{n \times M}$ predstavujú matice zvyškov dekompozície.

Riešenie PLS dekompozície je vo svojej klasickej podobe založené na algoritme nelineárnych iteratívnych čiastkových najmenších štvorcov (NIPALS) [Wold, 1985], ktorého riešením je odhad vektorov $\mathbf{w}, \mathbf{c}$ spĺňajúcich nasledovný vzťah

$$[cov(\mathbf{t}, \mathbf{u})]^2 = [cov(\mathbf{X}\mathbf{w}, \mathbf{Y}\mathbf{c})]^2 = \max_{|\mathbf{r}|=|\mathbf{s}|=1} [cov(\mathbf{X}\mathbf{r}, \mathbf{Y}\mathbf{s})]^2$$

kde $cov(\mathbf{t}, \mathbf{u}) = \mathbf{t}^T \mathbf{u} / n$ označuje odhad kovariancie medzi latentnými vektormi $\mathbf{t}$ a $\mathbf{u}$ tvoriacimi stĺpce matíc $\mathbf{T}$ a $\mathbf{U}$.

Dá sa ukázať, že váhový vektor $\mathbf{w}$ tiež zodpovedá prvému vlastnému vektoru nasledujúceho problému vlastných hodnôt [Höskuldsson, 1988]

$$\mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{X} \mathbf{w} = \lambda \mathbf{w}$$

Latentné premenné $\mathbf{t}$ a $\mathbf{u}$ sa dajú potom odhadnúť ako

$$\mathbf{t} = \mathbf{X}\mathbf{w} \quad \text{a} \quad \mathbf{u} = \mathbf{Y}\mathbf{c}$$

Podobne vieme formulovať problém vlastných hodnôt pre extrakciu odhadov $\mathbf{t}$, $\mathbf{u}$ alebo $\mathbf{c}$ [Höskuldsson, 1988]. Užívateľ potom rieši jeden z týchto problémov vlastných hodnôt a ďalšie latentné vektory alebo vektory váh sú ľahko vypočítateľné pomocou existujúcich vzťahov medzi nimi [RR-2].

PLS je iteračný proces. Po extrakcii latentných vektorov $\mathbf{t}$, $\mathbf{u}$ dochádza k odčítaniu informácie (variance), ktorú tieto vektory reprezentujú, od matíc $\mathbf{X}$ a $\mathbf{Y}$, tzv. krok označovaný ako deflácia. Celý proces odhadu ďalších dvojíc latentných vektorov $\mathbf{t}$ a $\mathbf{u}$ sa následne opakuje. Forma deflácie definuje niekoľko variant PLS.

V knižnej kapitole [RR-2] sa autor spolu s Nicole Krämer systematicky venovali štúdiu variant PLS modelov určených pre problém regresie, klasifikácie a modelovania dát, ako aj ich vzájomných vzťahov. V tejto systematickej štúdii sa zaoberali existujúcimi vzťahmi medzi PLS a PCA a kanonickej korelačnej analýzy (canonical correlation analysis, CCA).

Knižná kapitola dosiahla značný citačný ohlas momentálne viac ako 630 WOS citácií a autor sa domnieva, že tento záujem je hlavne z dôvodu systematického a zrozumiteľného podania danej problematiky, zdôraznenia posledných vedeckých poznatkov o vlastnostiach PLS, ako aj ďalšieho smerovania výskumu v tejto oblasti. Pre zaujímavosť môžeme uviesť, že PLS metóda sa stala súčasťou softvéru MATLAB® (MathWorks, Inc.) a v dokumentácii funkcie *plsregress* tvorí jednu z dvoch citovaných prác práve knižná kapitola [RR-2].

Kapitola sa prehľadovo zaoberá aj nelineárnym, tzv. jadrovým PLS modelom navrhnutým autorom [Rosipal and Trejo, 2001, Rosipal et al., 2003a]. V nasledujúcej podkapitole model v krátkosti popíšeme a budeme sa venovať jeho neskoršiemu teoretickému vývoju a návrhom jeho variant.

3.2.2 Nelineárne parciálne najmenšie štvorce

Jadrové (kernel) metódy [Cristianini and Shawe-Taylor, 2000, Schölkopf and Smola, 2002, Shawe-Taylor and Cristianini, 2004, Vapnik, 1998] sú relatívne nová metológia, ktorá zahŕňa sériu užitočných modelov a algoritmov na analýzu dát. Ich všestrannosť a efektívnosť použitia umožnili, že sa stali štandardným nástrojom pre odborníkov z praxe, ako aj témou pre výučbu aplikovanej štatistiky a kurzov analýzy dát.

Jadrové metódy kombinujú jednoduchosť a výpočtovú efektívnosť lineárnych algoritmov, ako je perceptrónový algoritmus alebo hrebeňová regresia, s flexibilitou nelineárnych systémov reprezentovaných napríklad umelými neurónovými sieťami. Vyznačujú sa taktiež zakomponovaním dôslednosti teoretických prístupov matematickej štatistiky, ako napríklad metód regularizácie v systéme viacrozmernej štatistiky alebo metód štatistickej inferencie [Vapnik, 1998]. V dôsledku spôsobu, akým reprezentujú regresné alebo klasifikačné funkcie, tieto algoritmy zvyčajne transformujú problém odhadu a učenia k jednoduchému problému optimalizácie, ktorý vedie k riešeniu v polynomiálnom čase, dokáže sa vyhnúť problému lokálnych miním, typickým pre neurónové siete, rozhodovacie stromy a iné nelineárne prístupy.

Algoritmy učenia založené na jadrovom učení fungujú na princípe mapovania dát do Hilbertovho priestoru a hľadania lineárnych vzťahov v tomto priestore. Mapovanie sa vykonáva implicitne, to znamená zadaním skalárneho súčinu pre každú dvojicu bodov, a nie priamym mapovaním daných bodov do súradníc uvažovaného Hilbertovho priestoru. Prístup má niekoľko výhod, z ktorých najdôležitejšia je to, že skalárny súčin v danom priestore sa dá vypočítať oveľa jednoduchšie ako súradnice samotných bodov.

Opäť definujme vstupný priestor $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^N$ a uvažujme mapovanie prvkov tohto priestoru $\phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ do vektorového priestoru $\mathcal{F}$. Funkcia, ktorá pre každé dva body $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$ a $\mathbf{x}_j \in \mathcal{X}$ vráti skalárny súčin medzi ich namapovanými vektormi v

priestore $\mathcal{F}$ sa nazýva *jadrová funkcia*.

Definícia 3.1. *Jadrová funkcia k je taká funkcia, že pre všetky $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ platí vzťah $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle_{\mathcal{F}}$, kde ϕ je mapujúca funkcia z $\mathcal{X}$ do Hilbertovho priestoru $\mathcal{F}$ a $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F}}$ označuje skalárny súčin v $\mathcal{F}$.*

Uvažujeme taktiež maticu s prvkami $k_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, tzv. *jadrovú maticu* alebo tiež nazývanú *Gramova matica*. Vďaka tomu, že prvky tejto matice predstavujú skalárny súčin, je to vždy symetrická a pozitívne semidefinitná matica. Gramova matica reprezentuje skalárne súčiny medzi všetkými párami vstupných bodov, to znamená, že úplne určuje relatívne polohy medzi týmito bodmi v priestore $\mathcal{F}$.

Spoločnou vlastnosťou všetkých jadrových algoritmov je to, že hľadáme ich riešenie ako lineárnu funkciu v priestore $\mathcal{F}$

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x})$$

pre nejaký vektor váh (koeficientov) $\mathbf{w}$. Jadrový prístup je potom možné použiť, ak váhový vektor $\mathbf{w}$ vieme vyjadriť ako lineárnu kombináciu vstupných bodov $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i)$, z čoho vyplýva, že funkciu f môžeme vyjadriť nasledovne

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) \quad (3)$$

Vráťme sa späť k samotnej jadrovej funkcii k . Otázkou ostáva, ktoré funkcie môžeme považovať za jadrové a aký je ich vzťah k priestoru $\mathcal{F}$. Využívajúc Moore-Aronszajn vetu [Aronszajn, 1950] vieme, že každej jadrovej funkcii prislúcha tzv. reproducing kernel Hilbert space (RKHS), čo je špeciálny Hilbertov priestor funkcií, ktorý tu označujeme ako $\mathcal{F}$. Tento vzťah platí aj opačne, teda každému RKHS prislúcha jadrová funkcia. Ako už naznačuje Definícia 3.1 a vzťah (3), skalárny súčin v takomto priestore môžeme vypočítať práve cez hodnotu jadrovej funkcie prislúchajúcej k tomuto priestoru. Je to dôležitý aspekt jadrového učenia, pretože priestor $\mathcal{F}$ môže byť vysokodimenzionálny, dokonca nekonečne dimenzionálny. Vyplýva to zo známej Mercerovej vety [Mercer, 1909], podľa ktorej môžeme jadrovú funkciu rozvinúť do potenciálne nekonečného radu

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{F}}} \lambda_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{y}), \quad \sum_{i=1}^{N_{\mathcal{F}}} \lambda_i < \infty, \quad N_{\mathcal{F}} \leq \infty$$

kde $\lambda_i \in \mathbb{R}^+$ sú vlastné čísla a $\{\psi_i(\cdot)\}_{i=1}^{N_{\mathcal{F}}}$ sú vlastné funkcie (eigenfunctions) spĺňajúce vzťah

$$\int_{\mathcal{X}} k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi_i(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y}) = \lambda_i \psi_i(\mathbf{x})$$

vzhľadom na mieru $\mu(\cdot)$ priestoru $\mathcal{X}$. Ide o uplatnenie tzv. spektrálnej vety na integrálny operátor $\Gamma_k : \mathcal{L}_2(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{L}_2(\mathcal{X})$ definovaný ako

$$(\Gamma_k \psi)(\mathbf{x}) := \int_{\mathcal{X}} k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y}), \quad \forall \psi(\cdot) \in \mathcal{L}_2(\mathcal{X})$$

Populárna a veľmi známa metóda support vector machines (SVM), vychádzajúca z princípov teórie štatistického učenia rozvinutej V. Vapnikom [Vapnik, 1998], využíva pri tvorbe svojich algoritmov práve tento princíp jadrového učenia. Postupne boli navrhnuté a študované nelineárne jadrové varianty štandardných lineárnych štatistických metód ako napríklad jadrová verzia PCA (KPCA) [Schölkopf et al., 1998], jadrová verzia metódy hrebeňovej regresie [Saunders et al., 1998] a podobne.

V závere svojho doktorandského štúdia autor navrhol metódu regresie pomocou jadrových parciálnych najmenších štvorcov (KPLS) [Rosipal and Trejo, 2001]. Hoci táto práca bola publikovaná až po získaní titulu PhD, do série najdôležitejších vybraných prác ju autor nezaradil. Práca sa stala odrazovým bodom pre ďalší rozvoj problematiky, návrhov jej modifikácie a rozšírení pre oblasť klasifikácie a modelovania, ako aj jej aplikácie v oblasti EEG [RR-1, RR-4], [Rosipal et al., 2003a, Rosipal et al., 2003b, Trejo et al., 2015]. Tejto tematike sa autor venoval počas post-doktorandského pôsobenia v NASA Ames Research Center (2001-2004). V stručnosti metódu KPLS popíšeme, poukážeme na jej rozšírenia a vzťah k iným metódam jadrového učenia.

Pracujeme opäť s nelineárnou transformáciou vstupných dát $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$ do vektorového priestoru $\mathcal{F}$; t.z. zobrazením $\phi : \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^N \rightarrow \phi(\mathbf{x}_i) \in \mathcal{F}$. Naším cieľom je zostrojiť lineárny PLS model v $\mathcal{F}$. V podstate to znamená, že získame nelineárny model v priestore pôvodných vstupných premenných. Označme symbolom $\Phi \in \mathbb{R}^{n \times N_{\mathcal{F}}}$ maticu, ktorej i -tý riadok je vektor $\phi(\mathbf{x}_i)$. Ako sme už spomenuli, v závislosti od $\phi(\cdot)$ môže $\mathcal{F}$ s $N_{\mathcal{F}} \leq \infty$ reprezentovať vysoko dimenzionálny, dokonca nekonečne dimenzionálny vektorový priestor, s ktorým výpočtovo nevieme pracovať. Avšak v praxi pracujeme iba s n pozorovaniami a riešenie hľadáme ako lineárnu kombináciu vektorov $\{\phi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^n$. Táto situácia je analogická s prípadom, keď matica vstupných údajov $\mathbf{X}$ má viac stĺpcov ako riadkov; t.z. máme do činnosti viac premenných ako meraní. V takom prípade je numericky vhodnejšie pracovať s maticou $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ ako s maticou $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$.

Motivovaní princípom jadrového učenia sme v práci [Rosipal and Trejo, 2001] upravili štandardný NIPALS algoritmus na jeho jadrovú verziu. Tu však použijeme riešenie založené na riešení problému vlastných hodnôt, t.z. prístup, ktorý sme použili v [Rosipal et al., 2003a]. Namiesto odhadu vektora váh $\mathbf{w}$ pri riešení (3.2.1) môžeme uvažovať problém odhadu latentného vektora $\mathbf{t}$

$$\mathbf{X}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{t} = \lambda\mathbf{t}$$

a po jeho odhadnutí určiť latentný vektor $\mathbf{u}$ zo vzťahu

$$\mathbf{u} = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{t}$$

Uvažujme teraz rovnakú úlohu v priestore $\mathcal{F}$. Keďže vieme, že pre prvky Gramovej matice $\mathbf{K}$ platí $k_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$, tak daný problém vlastných hodnôt v $\mathcal{F}$ môžeme prepísať ako

$$\mathbf{K}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{t} = \lambda\mathbf{t} \quad (4)$$

a po jeho vyriešení opäť určiť $\mathbf{u}$. Ako sme už vyššie spomínali, pri metóde PLS sa latentné vektory $\mathbf{t}$ a $\mathbf{u}$ získavajú iteračne, teda daný problém vlastných hodnôt sa nerieši naraz, ale po každom kroku na novej matici $\mathbf{K}_{\text{def1}}$, od ktorej bol príspevok $\mathbf{t}$ odčítaný, tzv. deflácia $\mathbf{K}$. Otázkou rôznych foriem deflácie, ale aj formami odhadu samotných latentných vektorov sme sa systematicky zaoberali v knižnej kapitole [RR-2] a pre oblasť jadrového učenia v knižnej kapitole [RR-1].

Pri regresnom KPLS modeli vektor $\mathbf{Y}$ predstavuje maticu závislých premenných. Môže sa jednať o jednu závislú premennú (vektor) alebo niekoľko súčasne meraných závislých veličín [Breiman and Friedman, 1997]. V práci [Rosipal et al., 2003a] sme navrhli model, v ktorom uvažujeme nelineárnu transformáciu $\mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{F}_1$. To vedie k možnosti modelovať vzťahy medzi dvoma mapovanými množinami dát pomocou ich latentných reprezentácií. Riešenie pre latentný vektor $\mathbf{t}$ získame úpravou vzťahu (4) do tvaru

$$\mathbf{K}\mathbf{K}_1\mathbf{t} = \lambda\mathbf{t}$$

kde $\mathbf{K}_1$ reprezentuje Gramovu maticu definovanú jadrovou funkciou k_1 , určujúcou RKHS priestor $\mathcal{F}_1$. Takáto reprezentácia vedie k modelu blízkeho jadrovej kanonickej korelačnej analýze (KCCA), v ktorej však kritériom vzťahov medzi latentnými premennými dvoch množín dát nie je korelácia, ale kovariancia. V [RR-1] sme analyzovali jadrovú verziu hrebeňovej regresie, KPCA a KCCA, ako aj ich vzťah ku KPLS. V tejto knižnej kapitole sme podali systematický prehľad metód a v kontexte koncepcie SVM sme v detailoch podali systematický prehľad tzv. primárnej a duálnej reprezentácie riešenia. To viedlo ku korektnej definícii KCCA, ktorá dovtedy nebola publikovaná.

Vráťme sa k využitiu modelu KPLS pre problém klasifikácie dát. V takomto prípade matica $\mathbf{Y}$ reprezentuje príslušnosť daného merania k danej triede. To naznačuje, že variancia takejto reprezentácie príslušnosti ku klasifikovanej triede alebo triedam nie je dôležitá. V práci [Rosipal et al., 2003a] sme navrhli upravený model tzv. ortonormalizovanej KPLS

$$\begin{aligned} \mathbf{K}\mathbf{Y}(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{Y}^T\mathbf{t} &= \mathbf{K}\tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^T\mathbf{t} = \lambda\mathbf{t} \\ \mathbf{u} &= \tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^T\mathbf{t} \end{aligned}$$

kde $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y})^{-1/2}$ predstavuje maticu nekorelovaných a normalizovaných premenných reprezentujúcich príslušnosť k danej triede.

Princíp ortonormalizácie sa dá využiť obecnnejšie. Napríklad, pri recenzii novej metódy PPCA (principal preserved component analysis) navrhol autor predkladateľom rukopisu úpravu ich metódy, čo prispelo k úspešnej publikácii v časopise *Nature Human Behaviour*. V [Rosipal et al., 2003a] sme poukázali na dôležitý vzťah navrhovanej metódy k Fisherovej lineárnej diskriminačnej analýze (LDA), ako aj riešeniu CCA v prípade, že $\mathbf{Y}$ reprezentuje príslušnosť k dvom klasifikačným triedam (taktiež v [RR-2]). Zdôraznili sme dôležitý aspekt metódy KPLS, ale aj PLS, pre problém klasifikácie. Ukázali sme, že projekcia riešenia nie je obmedzená hodnotou $\mathbf{Y}$, ako v prípade LDA, ale umožňuje nám vyšetrovať možnosti klasifikácie v konštruovaných priestoroch, a to až do hodnoty matice reprezentujúcej danú dátovú množinu (v prípade KPLS hodnota matice $\mathbf{K}$). Pri probléme dvoch tried to znamená, že tieto priemety zodpovedajú v každom kroku priemetu podobnému riešeniu LDA, avšak vždy použijúc novú maticu $\mathbf{K}_{\text{def1}}$ [RR-2]. Navrhli sme metódu KPLS-SVC, kombinujúcu KPLS extrakciu latentnej reprezentácie s následným klasifikačným SVM modelom, tzv. support vektor classification (SVC). Metódu sme navrhli obecné, pre problém klasifikácie do dvoch alebo viacerých tried.

Elegantnosť a vysoká úspešnosť modelu KPLS pre nelineárnu regresiu, klasifikáciu alebo modelovanie vzťahov medzi množinami dát, viedla k značnému ohlasu s viac ako 545 WOS citáciami a implementáciami v prostredí MATLAB, R, alebo Python. V knižnej kapitole [RR-4] sa autor zaoberal problematikou porovnania metódy KPLS s inými variantami nelineárnych PLS modelov. Tieto sú založené na princípe priamej, explicitnej nelineárnej transformácie vstupných premenných $\mathbf{X}$ do nového vektorového priestoru, nelineárnej transformácie odhadnutých latentných vektorov alebo implementácie PLS formou umelých neurónových sietí.

Každý z týchto prístupov má svoje klady a zápory. Nespornou výhodou KPLS je jednoduchá implementácia a aj napriek jednoduchšej výpočtovej náročnosti schopnosť modelovať zložité nelineárne vzťahy medzi množinami dát. Navyše, metóda sa dá redukovať tiež pre prípad, že sa snažíme modelovať nelineárny vzťah pomocou priestoru $\mathcal{F}$, v ktorom vieme explicitne určiť hodnoty bodov. Napr. použijúc polynomiálnu jadrovú funkciu $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + 1)^d$ vedúcu k tvorbe priestoru reprezentujúceho všetky polynomicke členy až do hodnoty d . Tým sa KPLS stáva zovšeobecnením niektorých predtým navrhnutých nelineárnych PLS modelov [RR-4]. Môžeme si všimnúť, že pre $d = 1$ získavame lineárnu verziu PLS, pre ktorú je jadrové riešenie numericky a výpočtovo výhodné v prípade $n \ll N$, teda v situácii, keď máme podstatne menej pozorovaní ako premenných.

3.2.3 Tenzorická reprezentácia EEG

Metóda PLS má svoje korene v oblasti analytickej chémie. Jej rozvoj práve v tejto vednej oblasti je daný štruktúrou dát, napr. spektrálne profily infračervenej alebo hmotnostnej spektrometrie, apod. Na popis dát však často maticová štruktúra nestačí, respektíve nie je vhodná. Príkladom je meranie spektrálnych profilov pri rôznych podmienkach, napr. teplote. To vedie k tenzorickej reprezentácii dát, často označovanej ako viac-cestná analýza (multi-way analysis).

Ako sme naznačili vyššie, práve tenzorická reprezentácia dát sa zdá byť prirodzenou cestou reprezentácie EEG dát, pretože v najbežnejšej forme meriame EEG v čase, na viacerých elektródach a časové úseky reprezentujeme odhadom spektrálnej hustoty.

Naším cieľom v oblasti EEG je odhad špecifických frekvenčne a priestorovo lokalizovaných oscilačných zdrojov, tzv. *atómov* EEG. Zameriame sa preto na dva modely tzv. učenia bez učiteľa (unsupervised learning), a sice model paralelnej faktorovej analýzy (PARAFAC) a Tuckerov model, ktoré sme študovali a úspešne aplikovali v oblasti EEG [RR-7, RR-9].

Paralelná faktorová analýza (PARAFAC)

Troj-cestná metóda PARAFAC rozkladá (tvorí dekompozíciu) tenzora $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$ na matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times F}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J \times F}$ a $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{K \times F}$, ako aj tzv. mixovací (zmiešavací) tenzor (core tensor) $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{F \times F \times F}$. Túto dekompozíciu môžeme pomocou prvkov daných tenzorov a matíc¹ vyjadriť vo forme

$$x_{ijk} = \sum_{f=1}^F g_{fff} a_{if} b_{jf} c_{kf} + e_{ijk} \quad (5)$$

$$i = 1, \dots, I; j = 1, \dots, J; k = 1, \dots, K$$

kde F reprezentuje počet faktorov (komponentov). Dekompozíciu získame minimalizáciou sumy štvorcov odchýlok

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(x_{ijk} - \sum_{f=1}^F g_{fff} a_{if} b_{jf} c_{kf} \right)^2$$

za podmienok

$$\|a_f\|^2 = \sum_{i=1}^I a_{if}^2 = 1, \quad \|b_f\|^2 = \sum_{j=1}^J b_{jf}^2 = 1, \quad \|c_f\|^2 = \sum_{k=1}^K c_{kf}^2 = 1, \quad f = 1, \dots, F$$

¹Hoci je matica 2-dimenzionálny tenzor, budeme v ďalšom texte používať termín matica na odlíšenie od viac-dimenzionálnych tenzorov.

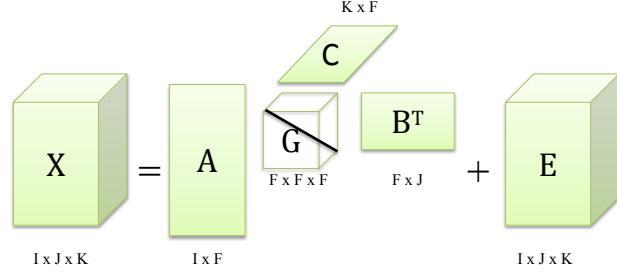
Tenzor $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$ reprezentuje nevysvetlenú časť $\mathbf{X}$, často považovanú za šum alebo chybovú zložku modelu. Ako je znázornené na grafickej schéme modelu (Obr. 1a), mixovací tenzor $\mathbf{G}$ má nenulové prvky iba na hlavnej super-diagonále. V dôsledku toho každý stĺpec $\mathbf{A}$ súvisí iba s jedným stĺpcom $\mathbf{B}$ a jedným stĺpcom $\mathbf{C}$.

Jedna z dôležitých vlastností metódy PARAFAC je jednoznačnosť riešenia. Táto vlastnosť je splnená za relatívne miernych podmienok, a síce stačí, že platí $r_1 + r_2 + r_3 \geq 2F + 2$ [Kruskal, 1989], kde r_1 , r_2 a r_3 reprezentujú tzv. r -hodnosti matíc $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ a $\mathbf{C}$. Definícia r -hodnosti je nasledovná. Ak má ktorákoľvek r_1 -stĺpcová podmatica danej matice plnú stĺpcovú hodnotu a toto neplatí pre niektorú (r_1+1) -stĺpcovú podmaticu, potom je r -hodnosť matice rovná r_1 [Kruskal, 1989]. Toto je dôležitý rozdiel od bilineárnych dekompozícií maticovo orientovaných metód typu PCA, FA alebo ICA, ktorých riešenie je často nejednoznačné v zmysle ľubovoľnej rotácie, a tým pádom vedie k častým problémom s interpretáciou riešení.

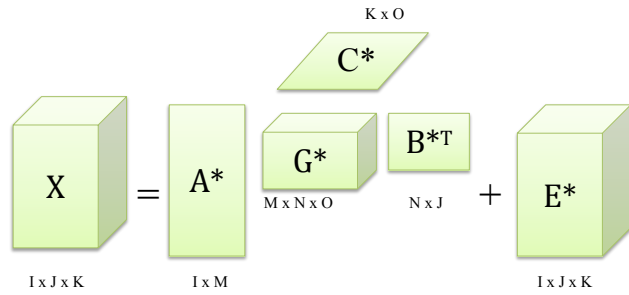
Ďalšou dôležitou vlastnosťou metódy PARAFAC je možnosť uvažovať rôzne formy reštrikcií na stĺpce matíc $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ alebo $\mathbf{C}$. Napríklad pri reprezentácii EEG pomocou odhadu spektrálnej hustoty vedie nezápornosť riešenia k uľahčeniu interpretácie. Ďalšou dôležitou reštrikciou je unimodálnosť, ktorú očakávame pri extrakcii úzkopásmových EEG oscilačných rytmov. Na druhej strane, obmedzenie na ortogonalitu stĺpcov, ako v prípade PCA, nie je zrejme vhodné, pretože nevyplýva z apriórnych znalostí o EEG a očakávanej fyziologickej interpretácie riešenia. Naopak, očakáva sa vzájomne závislá časová aktivácia rôznych atómov alebo atómy môžu tiež zdieľať podobné priestorové umiestnenia na povrchu hlavy. PARAFAC nám umožňuje hľadať riešenia ktoré nie sú ortogonálne. Použité formy reštrikcií v prípade EEG rozoberieme v časti 3.2.4.

Tuckerov model

Tuckerov model predstavuje zovšeobecnenú formu modelu PARAFAC (5), ktorú



(a) Paralelná faktorová analýza (PARAFAC)



(b) Tuckerov model

Obr. 1: Grafické schémy modelov rozkladu tenzorov použitých v štúdiu.

môžeme zapísať v tvare

$$\begin{aligned}
x_{ijk} &= \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sum_{o=1}^O g_{mno}^* a_{im}^* b_{jn}^* c_{ko}^* + e_{ijk}^* \\
i &= 1, \dots, I; \quad j = 1, \dots, J; \quad k = 1, \dots, K \\
\|a_m^*\|^2 &= 1, \quad m = 1, \dots, M \\
\|b_n^*\|^2 &= 1, \quad n = 1, \dots, N \\
\|c_o^*\|^2 &= 1, \quad o = 1, \dots, O
\end{aligned}$$

kde však nepredpokladáme, že matice $\mathbf{A}^*, \mathbf{B}^*, \mathbf{C}^*$ majú rovnaký počet stĺpcov a mixovací tenzor $\mathbf{G}^*$ má ľubovoľnú štruktúru (Obr. 1b). Príspevok každého stĺpca matíc tvoriacich rozklad k danému atómu je definovaný prvkami tenzora $\mathbf{G}^*$, ktorý môžeme chápať ako tenzor váh.

Všeobecne, a na rozdiel od modelu PARAFAC, nie je riešenie Tuckerovho rozkladu jednoznačné [Kiers, 1998, Cichocki et al., 2009]. Akákoľvek ortogonálna rotácia matice $\mathbf{A}^*, \mathbf{B}^*$ alebo $\mathbf{C}^*$ a následná inverzná rotácia $\mathbf{G}^*$ vedie k rozkladu s rovnakou chybou, ale inou interpretáciou. Pri Tuckerovom modeli je taktiež potrebné venovať dostatočnú pozornosť interpretácií extrahovaných komponentov v dôsledku ľubovoľnej štruktúry $\mathbf{G}^*$, ktorá spája stĺpce matíc rozkladu s každým uvažovaným komponentom [Kiers, 1998].

Voľnosť rotácie riešenia a interpretácia $\mathbf{G}^*$ sa vo všeobecnosti rieši buď i) fixáciou vybraných prvkov $\mathbf{G}^*$ na pevné hodnoty (zvyčajne nuly) na základe apriórnej informácie o analyzovanom probléme [Kiers and Smilde, 1998], alebo ii) rotáciou $\mathbf{G}^*$ s cieľom dosiahnuť jej riedku alebo špeciálnu štruktúru (super-diagonálnosť, diagonálne rezy, apod.) [Kiers, 1998]. Ďalšou možnosťou na zlepšenie stability riešenia je, podobne ako v prípade metódy PARAFAC, aplikácia reštrikcií na štruktúru stĺpcov matíc rozkladu (nezápornosť, unimodalita, apod.) [Kiers and Smilde, 1998].

Problémom výberu vhodných reštrikcií pri riešení a interpretácii Tuckerovho modelu pre oblasť analýzy EEG dát sme sa zaoberali v [RR-9], [Rošťáková et al., 2020]. Ukázali sme vhodnosť použitia reštrikcií na nezápornosť a unimodalitu stĺpcov matíc rozkladu a nezápornosti $\mathbf{G}^*$, vedúcej k modelu známemu ako nezáporný Tuckerov rozklad (NTD) [Cichocki et al., 2009]. V práci [RR-9] sme sa zaoberali porovnaním a dôkladnou fyziologickou interpretáciou riešení modelu PARAFAC a NTD, nakoľko správna neurofyziologická interpretácia výsledkov vo väčšine publikovanej literatúry chýba. Hlavné výsledky štúdie popíšeme v nasledujúcej aplikačnej časti 3.2.4.

3.2.4 Aplikácie modelov KPLS, PARAFAC a Tucker na EEG

KPLS

Navrhnutá metóda KPLS, či už pre problém regresie alebo klasifikácie, bola úspešne aplikovaná v mnohých vedných odboroch, o čom svedčí široké spektrum vedeckých časopisov, v ktorých bola použitá a citovaná.

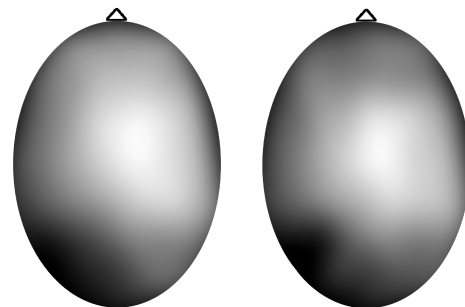
My sa však zameriame na oblasť analýzy EEG dát, konkrétne na oblasť uplatnenia metódy pri konštrukcii protokolov rozhrania mozog-počítač (brain-computer interface, BCI). Tejto problematike sa autor začal venovať počas pôsobenia v NASA Ames Research Center (2001-2004) a je súčasťou jeho súčasného výskumu na Ústave merania SAV.

BCI je protokol umožňujúci priamu interakciu medzi mozgom a počítačom alebo iným externým zariadením. Deje sa to na základe detekcie zmien v zázname EEG signálu, ktoré súvisia so zmenami mentálneho stavu a následným riadením externého zariadenia v závislosti od týchto zmien. Vieme napríklad, že pri vykonávaní reálneho pohybu, napr. pohybu hornej končatiny, dochádza k zmenám v EEG, ktoré sú veľmi podobné zmenám, keď vykonávame iba mentálnu predstavu pohybu, teda procesu bez fyzickej realizácie pohybu samotného.

V práci [Rosipal et al., 2003a] sme sa venovali problému detekcie reálneho pohybu prstov na ruke pomocou EEG. Ukázali sme, že metóda PLS-SVC dokáže extrahovať frekvenčné a priestorové vzory špecifické pre daného subjekta, s veľmi dôležitou časovou stabilitou (Obr. 2). Presnosť klasifikácie bola vyššia ako 90%. Prístup sme následne použili pri konštrukcii BCI protokolu umožňujúceho na základe mentálnej predstavy pohybu kontrolovať pohyb kurzora na obrazovke alebo pre potreby NASA na ovládanie robotického rovera pohybujúceho sa na povrchu Marsu [RR-3], [Trejo et al., 2003].

Inú formu BCI tvoria protokoly pracujúce s evokovanými odpoveďami mozgu na externý signál. Napríklad sledovaním svetla blikajúceho na určitej frekvencii, môžeme vo vizuálnej kortikálnej oblasti mozgu pozorovať tzv. vizuálny evokovaný potenciál v ustálenom stave (steady state visual evoked potential, SSVEP). Inými slovami, pozorujeme rytmickú odpoveď mozgu reflektujúcu frekvenciu externého

"... In particular, the excellent suitability of polynomial kernel PLSR to this kind of data needs to be pointed out. ... Special thanks go to Roman Rosipal, Slovak Academy of Sciences (Bratislava, Slovakia) for kindly providing the kernel PLSR MATLAB functions." – R. Brendel et al. (2020). *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 205, 104128.



Obr. 2: Projekcie prvého vektora váh modelu PLS, v čase 370 ms od začiatku pohybu, pre 1. deň (vľavo) a 2. deň.

stimulu. V [RR-3] sme použili dizajn blikajúcich šachovníc umiestnených na stranách obrazovky tak, že frekvencia blikania každej šachovnice sa líšila (frekvencie v rozsahu 5 až 7 Hz). Pomocou KPLS klasifikácie sme boli u väčšiny subjektov už po jednom krátkom tréningu schopní dosiahnuť presnosť klasifikácie na úrovni 100% ([urobit spravny link video SSVEP BCI](#)).

Pri mnohých ľudských činnostiach dochádza s narastajúcim časom k zvýšenej mentálnej únave. Kontinuálne a správne monitorovanie mentálnej únavy je veľmi žiadúce hlavne v prostrediach, v ktorých je správne rozhodovanie človeka kritické pre bezpečnosť, ako napríklad kontroly letovej prevádzky alebo riadenie automobilu. Problémom sme sa systematicky a dlhodobo zaoberali [Trejo et al., 2015, Trejo et al., 2007]. Navrhli sme KPLS model učiaci sa rozoznať stav vysokej mentálnej únavy od stavu nízkej únavy na začiatku činnosti a pomocou priemetov do priestoru komponentov KPLS medzi týmito dvomi krajnými stavmi monitorovať progres mentálnej únavy v čase. Prístup sa ukázal ako veľmi účinný v porovnaní s inými existujúcimi prístupmi [Monteiro et al., 2019]. Rovnako nám umožnil identifikovať neurálne koreláty mentálnej únavy, ktoré sa ukázali byť v zhode s neurofyziologickým poznaním daného procesu [Trejo et al., 2015].

”... Finally, from our survey study, we recommend the reader to take a closer look at Trejo et al. [69]. In this work, the authors implemented an MF detection model based on KPLS-DLR that meets most of the desired criteria for a feasible MF detection system in real life. Their model is dynamic, feasible for online implementation, and robust for cross-subject classification. The system is very minimally intrusive, using only two EEG channels and two EOG channels for artifact rejection. The mathematical algorithm implemented is simple but has outstanding performance (97% accuracy). ...” – T. G. Monteiro et al. (2019). *IEEE Transactions on Human-Machine Systems*, 49, 599–610.

PARAFAC & Tuckerov model

Tenzorická dekompozícia EEG dát sa v literatúre objavila relatívne nedávno [Estienne et al., 2001, Miwakeichi et al., 2004]. V prvých publikáciách sme prístup aplikovali na problém monitorovania pracovnej záťaže pomocou EEG [Rosipal et al., 2009], resp. na problém inverzného mapovania aktivácie elementárnych oscilačných zdrojov (atómov) EEG do kortikálnej oblasti [Rosipal et al., 2013]. Ukázalo sa, že pre lepšie pochopenie, nastavenia a hlavne interpretáciu výsledkov dekompozície je potrebné systematickejšie štúdium metodológie na širšej množine experimentov zameraných na rôzne oblasti mozgovej funkcionality. To sa týka napríklad Tuckerovho modelu, kde sa doposiaľ publikované práce zamerali na využitie modelu pre oblasť predspracovania EEG dát, ako snahy identifikovať EEG atómy s jasnou elektrofyzikologickou interpretáciou. V práci [RR-9] sme ukázali výhodnosť NTD modelu pre EEG a taktiež výhodnosť reštrikcie nezápornosti pre priestorové a

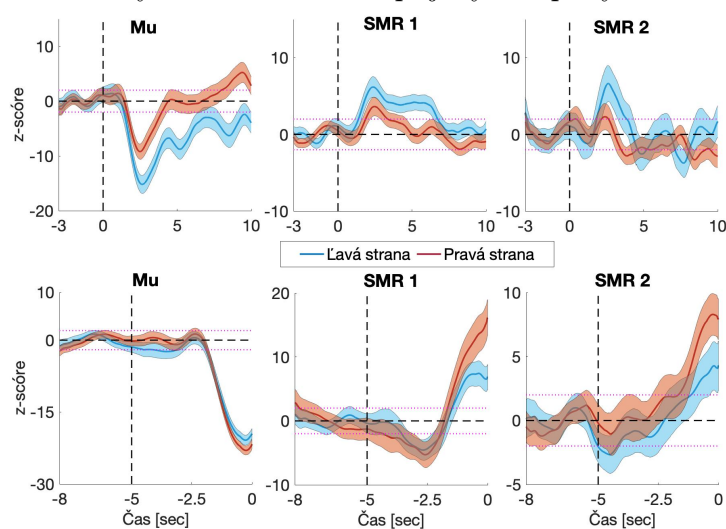
unimodálnej reštrikcie pre frekvenčné komponenty dekompozície. Štúdium viedlo k návrhu viacerých vylepšení metodológie, hlavne použitiu čisto oscilačnej zložky frekvenčného spektra ako vstupnej dátovej reprezentácie, ako aj uplatneniu metód zhlukovania pri hľadaní systematických a fyziologicky interpretovateľných finálnych riešení dekompozície [RR-7, RR-9]. Problematike sa naďalej venujeme, čoho príkladom je navrhnutie a adaptácia dekompozície s bimodálnou reštrikciou priestorových vektorov, čo vedie k lepšej detekcii tangenciálnych kortikálnych zdrojov.

V roku 2013 sme sa začali venovať konštrukcii zariadení a protokolov určených na rehabilitáciu obmedzeného alebo úplne paretického pohybu horných končatín v dôsledku mozgovej príhody. Metodológiu sme postavili na princípe tréningu so zrkadlovým boxom, ako aj princípe BCI. Pri oboch sme aplikovali tenzorické modely na extrakciu špecifických oscilačných EEG atómov spojených s pohybom.

V oblasti BCI to predstavuje nový, doteraz nepoužitý prístup, v ktorom pacient pomocou mentálnej predstavy kontroluje úroveň aktivácie a deaktivácie daného atómu alebo skupiny atómov, t.z. priestorovo a frekvenčne špecifických oscilačných EEG rytmov. Obr. 3 demonštruje rozdiel aktivácie identifikovaných oscilačných rytmov počas stavu relaxácie a mentálnej predstavy u jedného z pacientov. Na Ústave merania SAV sme navrhli a skonštruovali prototyp systému externej robotickej dlahy riadenej navrhnutým protokolom BCI.

V ďalšom kroku sme nahradili robotickú dlahu virtuálnym prostredím (virtual reality, VR), v ktorom pacient pomocou mentálnej predstavy pohybu kontroluje virtuálnu ruku simulujúcu jeho pohybovo poškodenú končatinu.

Z klinického hľadiska, sme v dlhodobej, deväť mesačnej štúdii ukázali, že tré-



Obr. 3: *Príklad aktivácie a deaktivácie troch motorických oscilačných atómov zistených u jedného z trénovaných pacientov. Krivky predstavujú z-skóre a ich rozptyl. Hore: Desať sekúnd procesu motorickej predstavy vzhľadom na referenčnú periódu relaxovaného stavu ($t - 3$ až t_0 s). Dole: Päť sekúnd pred spustením pohybu robotickej dlahy vzhľadom na predchádzajú periódu motorickej predstavy ($t - 8$ až $t - 5$ s).*

ning so zrkadlovým boxom vedie k očakávaným krátkodobým, ale aj dôležitým dlhodobým zmenám oscilačných EEG rytmov spojených s pohybom, nepriamo dokazujúcim očakávané zmeny kortikálnej plasticity [RR-7]. To predstavuje doteraz nepublikovaný výsledok. Tréning so zrkadlovým boxom nám umožňuje identifikáciu atómov spojených s pohybom, typických pre každého jedinca, bez nutnosti vnucovania mentálnej predstavy pohybu. Následne sa takto extrahované atómy použijú pri BCI tréningu, či už s robotickou dlahou alebo VR [Rosipal et al., 2018].

3.3 Modely latentnej reprezentácie – pravdepodobnostný prístup

Spánok nie je v žiadnom prípade monolitický stav, ale zložitý, často cyklický proces rôznych fyziologických modalít odzrkadľujúcich sa v zmenách EEG, ale aj ďalších elektrofyziologických mierach, napr. svalovej alebo respiračnej aktivity. Klinická prax definuje 4 až 5 diskretných fáz spánku a fázu bdelosti (wake). Dve základné fázy spánku sú fáza REM (rapid eye movement), charakteristická prítomnosťou rýchlych pohybov očí, a fáza bez pohybu očí tzv. non-REM (NREM). NREM sa ďalej delí na 3 alebo 4 fázy reprezentujúce prechodné stavy medzi plytkým spánkom na jednej strane a najhlbším spánkom na strane druhej. Pre klinickú klasifikáciu fáz spánku existujú dva základne manuály skórovacích pravidiel i) Rechtschaffen and Kales (R&K) [Rechtschaffen and Kales, 1968]) a ii) AASM [Iber et al., 2007].²

Detekcia spánkových fáz na základe pravidiel oboch manuálov sa vykonáva vizuálne, čo vedie k veľkým rozdielom medzi rôznymi odborníkmi, predovšetkým v dôsledku toho, že je ťažké rozpoznať mnoho potrebných elementov nutných pre klasifikáciu. Navyše variabilita týchto elementov je vágne definovaná. Tým vzniká vážny problém pre automatizáciu procesu klasifikácie, nakoľko neexistuje jednoznačné zaradenie sekvencií spánku do danej fázy (tzv. *ground truth*). Odhaduje sa, že zhoda v klasifikácii medzi odborníkmi sa pohybuje na úrovni $\approx 80\%$ [Younes et al., 2016].

Počas vedeckého pobytu autora na Medical University of Vienna (MUV) sme pristúpili k novému pohľadu na tento problém. Nový pohľad sa dá parafrázovať ako “let the data speak for itself”, inými slovami, snažme sa štruktúru spánku odhaliť na základe dostupných dát a umožniť voľnejšiu reprezentáciu spánkového procesu v porovnaní so striktne definovanou diskretnou množinou R&K spánkových fáz. Samozrejme to vedie k dvom otázkam i) ako takýto nový pohľad interpretovať, hlavne vzhľadom na R&K, a ii) ako overiť jeho relevantnosť vzhľadom na klinické potreby a prax. K týmto zásadným otázkam sme pristúpili nasledovne. Nami navrhnutý pravdepodobnostný spánkový model (PSM) umožňuje zakomponovať a pracovať

²V ďalšom nebudeme rozlišovať medzi týmito dvomi variantami klasifikačných pravidiel a manuálom určené diskretné spánkové fázy budeme označovať ako R&K.

s informáciou o príslušnosti danej spánkovej sekvencie k spánkovej fáze definovanej štandardným aplikovaním R&K skórovacích pravidiel. To umožňuje vrátiť sa od voľnejšej PSM spánkovej reprezentácie späť k štandardnej R&K reprezentácii a tým adresovať prvú otázku. Klinickú relevantnosť akéhokoľvek spánkového modelu chápeme v miere informácie, ktorú nesie o študovanej klinickej vlastnosti. Konkrétne, ak reprezentácia výstupov dvoch odlišných modelov spánku poskytuje rôznu mieru korelácie alebo predikcie danej klinickej vlastnosti, napr. subjektívneho hodnotenia kvality spánku, uprednostníme model s vyššou mierou informácie. Teraz pristúpme k popisu cesty vedúcej k návrhu PSM ako aj modelu samotného.

3.3.1 HGMM model spánku a ospalosti

Jeden z prvých pravdepodobnostných prístupov modelovania spánku je založený na snahe modelovať len tri základné spánkové fázy, a síce REM, NREM a fázu bdlosti [Flexer et al., 2002a, Flexer et al., 2002b]. Model vychádzal z konceptu skrytého Markovovho modelu (hidden Markov model, HMM), teda modelu uvažujúceho množinu latentných stavov (v tomto prípade stavov mozgu reprezentujúcich každú z troch uvažovaných fáz spánku) a pravdepodobnosti prechodu medzi nimi. Súčasťou modelu je aj odhad pravdepodobností generovania priamo pozorovaných veličín, v tomto prípade sekvencií EEG signálu. Model bol navrhnutý s jednoduchou štruktúrou zmesí troch Gaussovských rozdelení (Gaussian mixture model, GMM), kde každá funkcia modeluje pPravdepodobnostné rozdelenie EEG reprezentácie jednej z uvažovaných spánkových fáz. Model reprezentoval nielen nový prístup modelovania spánkoveho procesu pomocou aposteriórnych pravdepodobností daných fáz spánku, ale aj prístup s vyššou časovou rozlíšiteľnosťou operujúcou s 1-sekundovými sekvenciami spánkových dát. Poznamenajme, že R&K skórovacie pravidlá sú založené na vizuálnom skórovaní 30-sekundových sekvencií PSG dát.

Ako sa ukázalo neskôr pri analýze podstatne väčšej databázy spánkových záznamov, model nebol dostatočne flexibilný modelovať distribúciu EEG dát. Autor spolu so spolupracovníkmi preto navrhli model s hierarchickou štruktúrou zmesí Gaussovských rozdelení (hierarchical Gaussian mixture model, hGMM). Tým tiež umožnili rozšíriť množinu skrytých Markovových stavov reprezentujúcich všetky fázy spánku [Rosipal et al., 2006, Rosipal et al., 2007].

Popíšme si model bližšie. Rovnako ako v časti 3.1.2, uvažujme náhodnú premennú x reprezentujúcu namerané EEG dáta a jej pravdepodobnosť $p(x)$.³ Pomocou hGMM modelujeme $p(x)$, čo môžeme zapísať nasledovne

$$p(x) = \sum_{s=1}^S p(x, z_s) = \sum_{s=1}^S p(z_s) p(x|z_s)$$

³V ďalšom texte časti 3.3 nebudeme rozlišovať medzi označením náhodných premenných a ich prípadnou vektorovou realizáciou.

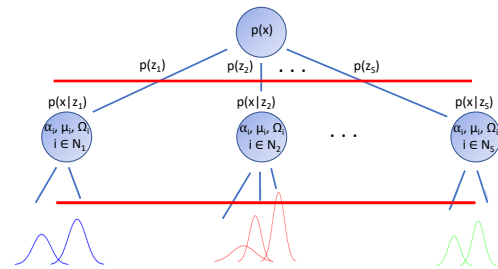
kde z reprezentuje stav mozgu počas spánkovej fázy $s = 1, \dots, S$, a $p(z_s)$ je apriórna pravdepodobnosť spánkovej fázy s . Podmienenú pravdepodobnosť $p(x|z_s)$ modelujeme pre každú spánkovú fázu samostatne pomocou jedného GMM

$$p(x|z_s) = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i p_i(x) = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i \mathcal{N}(x|\mu_i, \Omega_i), \quad \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0$$

kde $\mathcal{N}(x|\mu_i, \Omega_i)$ reprezentuje hustotu viacrozmerného normálneho (Gaussovského) rozdelenia pravdepodobnosti so strednou hodnotou μ_i a kovarianciou Ω_i , ktoré pre d -dimenzionálnu vektorovú reprezentáciu x môžeme písať v tvare

$$\mathcal{N}(x|\mu_i, \Omega_i) = (2\pi)^{-d/2} |\Omega_i|^{-1/2} \exp^{-(x-\mu_i)^T \Omega_i^{-1} (x-\mu_i)}$$

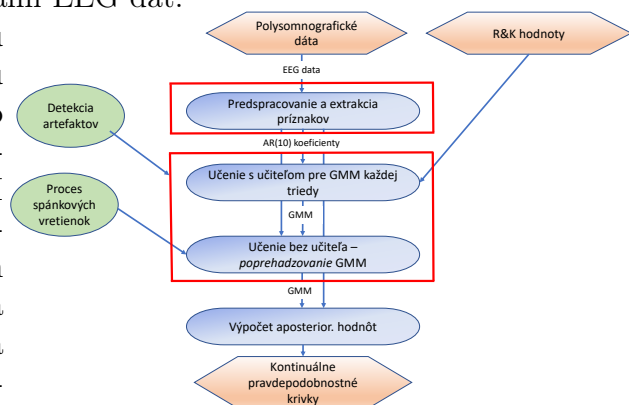
Koeficienty α_i reprezentujú apriórnu pravdepodobnosť generovania EEG sekvencie, získanej počas spánkovej fázy s , k danej pravdepodobnosti $p_i(x)$. N_s reprezentuje celkový počet Gaussovských rozdelení tvoriacich zmes pre modelovanie s -tej spánkovej fázy (Obr. 4).



Obr. 4: Grafická schéma hGMM.

V počiatočných modeloch sme uvažovali HMM formu, teda snažili sme sa modelovať a odhadnúť pravdepodobnosti prechodov medzi latentnými stavmi. Ako sa však ukázalo, toto neprinieslo očakávanú zmenu, nakoľko výsledná pravdepodobnostná matica prechodov mala tvar blízky diagonálnej matici a teda bola to len samotná hGMM štruktúra separujúca jednotlivé spánkové fázy. Jednou z príčin je “krátka pamäť” HMM v tomto prípade, v ktorom pracujeme s niekoľko hodinovými spánkovými záznamami a v ktorom daná spánková fáza môže trvať niekoľko desiatok minút. Poznamenajme, že naša snaha je modelovať spánkový proces kontinuálne a navrhnuté modely pracujú väčšinou s 3-sekundovými vstupnými sekvenciami EEG dát.

V snahe modelovať spánkovú štruktúru “voľnejšie” ako striktnú R&K kópiu sme navrhli tzv. prístup *poprehadzovania* (reshuffling), v ktorom sa počiatočná štruktúra hGMM odhadne na základe malého množstva EEG sekvencií klasifikovaných pomocou R&K, a v ďalšom kroku sa odhad parametrov modelu vykonáva bez použitia znalosti o R&K príslušnosti danej EEG sekvencie. Model



Obr. 5: Schéma krokov tvorby hGMM.

taktiež využíval odhad pravdepodobnosti prítomnosti tzv. spánkových vretienok (sleep spindles), ktorých výskyt je typický pre hlbšie spánkové fázy a v našom modeli upravuje apriórnu pravdepodobnosť danej spánkovej fázy (Obr. 5).

Prístup vylepšil modelovanie spánkového procesu a ako súčasť európskeho FP6-EU integrovaného projektu SENSATION (project SENSATION) bol nezávislým panelom európskej komisie ohodnotený ako jeden z najlepších výstupov projektu.

V rámci projektu SENSATION bol hGMM úspešne aplikovaný aj na úlohu monitorovania únavy diaľkových šoférov [Rosipal et al., 2007], čo viedlo k pozitívnemu ohlasu aj v tejto oblasti aplikovaného výskumu.

“... The hGMM is proved to be more powerful against Support Vector Machine (SVM) and Linear Discriminant Analysis (LDA) under complicated probability distributions. ...” J.-N. Gu et al. (2011). *Neural Information Processing, LNCS, vol. 7062, 380–387, Springer.*

3.3.2 Pravdepodobnostný spánkový model

Dosiahnuté výsledky napomohli k získaniu ďalšieho financovania výskumu na MUV (grant P19857, Austrian Science Fund (FWF)) – projektu, ktorého bol autor hlavným tvorcom a riešiteľom. Spolu s kolegom Dr. Lewandowskim navrhli iný koncept pravdepodobnostného modelovania spánku [RR-5]. Model sa líši od predchádzajúcich pravdepodobnostných modelov dôležitou vlastnosťou, ktorá spočíva v tom, že sa apriórne neuvažuje rigidná štruktúra diskretných fáz spánku. Namiesto toho uvažujeme vyšší počet spánkových stavov ako R&K – nazveme ich spánkové *mikrostav*y – ktoré sú určené optimalizáciou kritéria na čo najpresnejšie modelovanie pravdepodobnostného rozdelenia nameraných fyziologických údajov.

Podobne ako pri hGMM, uvažujeme krátke, 3-sekundové sekvencie EEG signálu. Pre každú sekvenciu odhadnime autoregresný model rádu d , ktorý označíme $AR(d)$. Inými slovami, každú sekvenciu EEG reprezentujeme vektorom koeficientov $AR(d)$ modelu. V aplikovanej matematike známa Wiener-Khinchinova veta hovorí, že autokorelačná funkcia stacionárneho náhodného procesu v širšom zmysle má spektrálny rozklad $psd(f)$ daný výkonovým spektrom tohto procesu. Pre diskretný náhodný proces môžeme písať

$$psd(f) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} r_{xx}(k) e^{-i(2\pi f)k}$$

kde $r_{xx}(k)$ reprezentuje diskretnú autokorelačnú funkciu daného náhodného procesu. Autokorelačnú funkciu vieme vyjadriť pomocou autoregresných koeficientov a to nám definuje vzťah medzi odhadom výkonovej spektrálnej hustoty danej EEG sekvencie a autoregresnými koeficientami. Ide o tzv. Burgovu metódu odhadu výkonovej spektrálnej hustoty $psd(f)$. Ukázalo sa, že pre $d = 10$ je tento odhad

dostatočný pre zachytenie spektrálnych rozdielov medzi spánkovými mikrostavmi. Treba si uvedomiť, že modelovanie pravdepodobnostných rozdelení pre vysoko dimenzionálne vektorové reprezentácie naráža nielen na výpočtový problém, ale aj presnosť odhadov samotných, majú k dispozícii len konečnú množinu pozorovaní, v našom prípade EEG sekvencií.

Distribúciu EEG sekvencií modelujeme opäť pomocou zmesi Gaussovských rozdelení

$$p(x) = \sum_{m=1}^M p(x, z_m) = \sum_{m=1}^M p(z_m) p(x|z_m) = \sum_{m=1}^M \alpha_m \mathcal{N}(x|\mu_m, \Omega_m)$$

kde $z \in \{1, \dots, M\}$ teraz predstavuje množinu všetkých M spánkových mikrostavov a $p(z_m) = \alpha_m$ je apriórna pravdepodobnosť daného mikrostavu. Tu si treba uvedomiť, že neuvažujeme o jednoznačnom priradení mikrostavu z_m k jednej z R&K spánkových fáz a jednotlivé mikrostavy nemusia nevyhnutne mať všeobecne zadefinovaný klinický a fyziologický význam. Jedným zo spôsobov, ako zabezpečiť klinickú interpretáciu mikrostavov, je pravdepodobnostným spôsobom vypočítať vzťah medzi mikrostavmi a tradičnými R&K fázami spánku. K tomuto odhadu opäť môžeme použiť podmnožinu EEG sekvencií priradených k danej spánkovej fáze pomocou R&K.

Označme množinu R&K hodnôt ako $c \in \{0 = \text{wake}, 1 = S1, 2 = S2, 3 = SWS, 4 = REM\}$, kde uvažujeme tri NREM fázy spánku (ľahký spánok $S1$, spánok $S2$ a hlboký spánok (slow wave sleep, SWS)). Definujme diskretnú podmienenú pravdepodobnosť $p_R(c|z)$, ktorá každému mikrostavu z_m priradí vektor pravdepodobností reprezentujúci príslušnosť k danej R&K spánkovej fáze a pre ktorú platí

$$\sum_{c \in \{0,1,2,3,4\}} p_R(c|z_m) = 1, \quad m = 1, \dots, M$$

Podobne definujme množinu $s \in \{0, 1, 2, 3\}$ reprezentujúcu triedu spánkových vretienok, ktorých prítomnosť je indikátorom a charakteristickým znakom $S2$ a SWS spánkových fáz. Hodnoty 0 až 3 reprezentujú 4 diskkrétne stavy od minimálnej pravdepodobnosti prítomnosti vretienok až po stav vysokej pravdepodobnosti ich prítomnosti [Anderer et al., 2005]. Rovnako pomocou diskkrétnej podmienenej pravdepodobnosti $p_S(s|z)$ môžeme modelovať pravdepodobnosť priradenia mikrostavu z_m k danej hodnote s . Opäť platí

$$\sum_{s \in \{0,1,2,3\}} p_S(s|z_m) = 1, \quad m = 1, \dots, M$$

Uvažujúc podmienenú nezávislosť medzi týmito tromi základnými zložkami modelu, môžeme združenú pravdepodobnosť vyjadriť v tvare

$$p(x, c, s, z) = p(x|z)p_R(c|z)p_S(s|z)p(z)$$

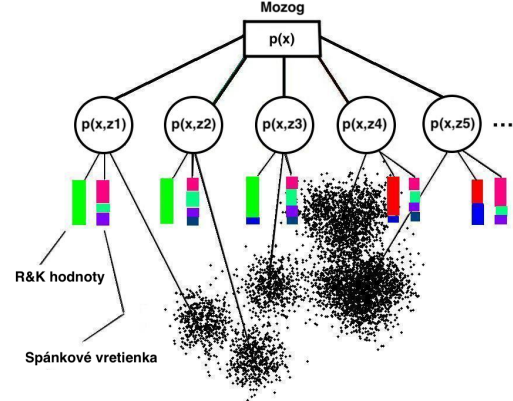
V ďalšom kroku vyjadríme pravdepodobnosť získanú sumáciou cez všetky hodnoty latentnej premennej z , teda všetky mikrostavy. Tým dospejeme k nasledujúcej forme združenej pravdepodobnosti

$$p(x, c, s) = \sum_{m=1}^M p(x|z_m) p_R(c|z_m) p_S(s|z_m) p(z_m) \quad (6)$$

teda modelu, ktorý označíme ako pravdepodobnostný spánkový model (PSM) a ktorý schematicky reprezentuje Obr. 6.

V PSM musíme odhadnúť podmienené pravdepodobnosti $p(x|z_m)$, $p_R(c|z_m)$, a $p_S(s|z_m)$, ako aj apriórnu pravdepodobnosť $p(z_m)$. V [RR-5] sme poskytli detailný rozbor metódy maximalizácie očakávanej hodnoty (expectation maximization, EM) upravenej pre model (6). Tu v krátkosti popíšeme základne kroky tejto úpravy.

Definujme M -rozmerný binárny náhodný vektor z nasledujúcim spôsobom. Ak má latentná náhodná premenná hodnotu m , potom pre m -tý prvok vektora z platí $z_m = 1$ a zvyšné prvky vektora z sú nulové. Tým definujeme nasledujúce identity a označenia

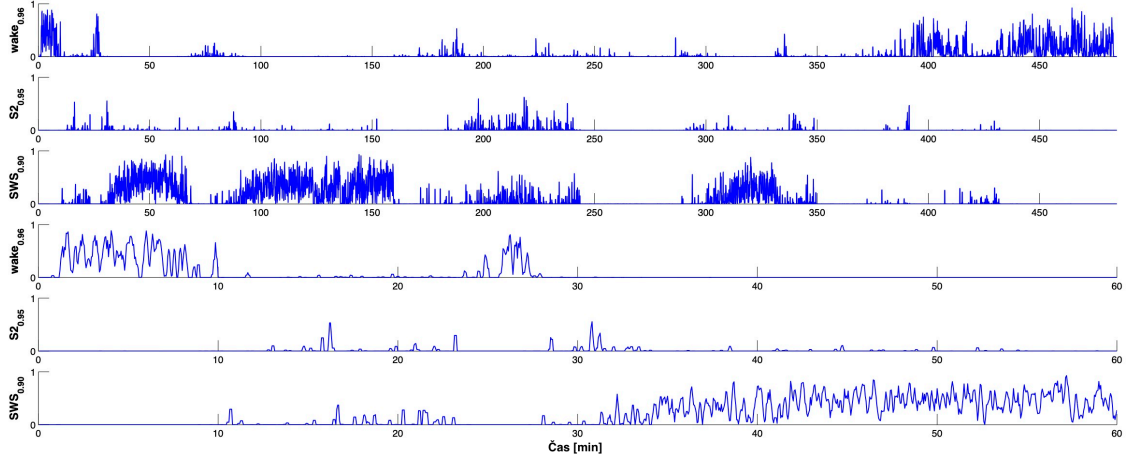


Obr. 6: Grafická schéma pravdepodobnostného spánkového modelu (6).

$$\begin{aligned} p(z) &= \prod_{m=1}^M \alpha_m^{z_m} \\ p(x|z_m = 1) &= \mathcal{N}(x|\mu_m, \Omega_m) \\ p_R(c|z_m = 1) &= \mathcal{H}_{mc} \\ p_S(s|z_m = 1) &= \mathcal{G}_{ms} \end{aligned}$$

Ďalej predpokladajme, že máme k dispozícii sekvenciu N pozorovaní $o_1 = (x_1, c_1, s_1), \dots, o_N = (x_N, c_N, s_N)$, ktoré sa snažíme pomocou PSM modelovať.

E-krok, tzv. *expectation* krok algoritmu EM, je založený na výpočte očakávanej hodnoty z_{mn} vzhľadom na všetky pozorovania $o_1, \dots, o_N$, kde subindex n reprezentuje vektor z pre n -té pozorovanie. Najskôr je potrebné určiť celkovú funkciu vierohodnosti (likelihood) daného modelu. Predpokladajme chvíľu, že z_n sú pozorovateľné. Usporiadajme všetky pozorované vektory x_n do matice $\mathbf{X}$, všetky pozorované R&K hodnoty do vektora $\mathbf{C}$, všetky hodnoty určujúce pravdepodobnosť prítomnosti spánkového vretienka do vektora $\mathbf{S}$ a nakoniec všetky latentné vektory z_n do matice $\mathbf{Z}$. Potom je možné celkovú funkciu vierohodnosti PSM zapísať



Obr. 7: Príklad pravdepodobnostných profilov troch spánkových mikrostavov s odhadnutou $\hat{p}_R(\text{wake}|z_{20}) = 0.96$, $\hat{p}_R(S2|z_2) = 0.95$ a $\hat{p}_R(SWS|z_9) = 0.90$. Horné tri grafy predstavujú priebehy počas celej noci, spodné tri reprezentujú vybraný 60-minútový priebeh.

v tvare

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{C}, \mathbf{S}, \mathbf{Z}; \Theta) = \prod_{n=1}^N \prod_{m=1}^M \alpha_m^{z_{mn}} [\mathcal{N}(x_n | \mu_m, \Omega_m) \mathcal{H}_{mc_n} \mathcal{G}_{ms_n}]^{z_{mn}} \quad (7)$$

kde $\Theta = (\mu, \Omega, \alpha, H, G)$ reprezentuje súbor všetkých parametrov modelu, ktoré je nutné odhadnúť. Použijúc Bayesove pravidlo môžeme aposteriórnu podmienenú pravdepodobnosť z za podmienky x , c a s vyjadriť v tvare

$$p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{C}, \mathbf{S}; \Theta) \propto p(\mathbf{X}, \mathbf{C}, \mathbf{S}, \mathbf{Z}; \Theta) = \prod_{n=1}^N \prod_{m=1}^M [\alpha_m \mathcal{N}(x_n | \mu_m, \Omega_m) \mathcal{H}_{mc_n} \mathcal{G}_{ms_n}]^{z_{mn}}$$

Podmienenú pravdepodobnosť použijeme na výpočet očakávanej hodnoty z_n , ktorú odhadneme pomocou $\gamma(z_{mn})$, tzv. *responsibility* zložky m pre pozorovanie o_n .

M-krok, tzv. *maximization* krok algoritmu EM je založený na odhade parametrov Θ maximalizujúcich očakávanú funkciu vierohodnosti (7). Poznamenajme, že každá zložka súčtu funkcie očakávanej vierohodnosti je nezávislá od ostatných podmienok a je možné ju maximalizovať osobitne. Formu odhadu pre všetky parametre Θ sme popísali v [RR-5] a tu ich nebudeme uvádzať. EM algoritmus je iteračný proces, v ktorom sa E- a M-kroky striedajú až do momentu konverencie.

Vráťme sa k modelu (6) a predpokladajme, že sme pomocou dostupných dát odhadli potrebné parametre modelu Θ a taktiež pomocou porovnania viacerých kritérií výberu modelu sme určili počet mikrostavov. Využijúc širokú databázu spánkových meraní sme v našom prípade určili $M = 20$ [RR-5]. Naším cieľom

je teraz odhad aposteriórnej pravdepodobnosti spánkového mikrostavu m pre ľubovoľné nové pozorovanie $o_i = (x_i, c_i, s_i)$. Použijúc Bayesov vzorec môžeme túto aposteriórnu pravdepodobnosť vyjadriť nasledovne

$$p(z_m|x_i, s_i) = \frac{\hat{p}(z_m)\hat{p}(x_i|z_m)\hat{p}_S(s_i|z_m)}{\sum_{j=1}^M \hat{p}(z_j)\hat{p}(x_i|z_j)\hat{p}_S(s_i|z_j)}$$

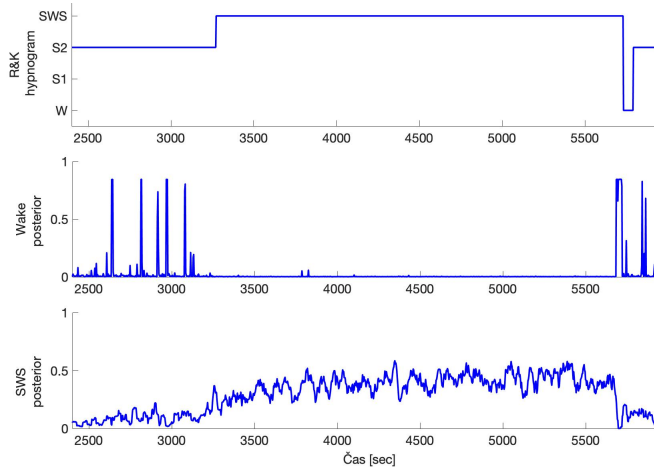
kde $\hat{p}(x|z)$, $\hat{p}_S(s|z)$ a $\hat{p}(z)$ reprezentujú odhady daných pravdepodobností. Všimnime si, že pri odhade nás nezaujíma pravdepodobnosť príslušnosti zvoleného pozorovania k danej R&K spánkovej fáze. Túto aposteriórnu pravdepodobnosť však môžeme získať pomocou odhadu $\hat{p}_R(c|z)$ vo forme

$$p(c|x_i, s_i) = \sum_{m=1}^M p(z_m|x_i, s_i)\hat{p}_R(c|z_m)$$

kde $p(c|x_i, s_i)$ reprezentuje aposteriórnu pravdepodobnosť R&K spánkovej fázy $c \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$. Inými slovami, na odhadnutý vektor $\hat{p}_R(c|z_m)$ sa môžeme pozerieť ako na vektor váh určujúcich “príslušnosť” spánkového mikrostavu $m \in \{1, \dots, 20\}$ k danej R&K spánkovej fáze. Príklad pravdepodobnostných profilov troch spánkových mikrostavov je na Obr. 7. Obrázok 8 demonštruje princíp vytvárania pravdepodobnostných R&K profilov kombináciou profilov spánkových mikrostavov.

Navrhnutý PSM predstavuje flexibilný variant modelovanie spánkového procesu. FaktORIZÁCIA pravdepodobnostného rozdelenia (6), inými slovami predpoklad podmienenej nezávislosti, nám umožňuje pridávať do modelu ďalšie indikátory.

Napríklad indikátory reprezentujúce svalovú, respiračnú alebo pohybovú aktivitu počas spánku, atď. Rovnako môžeme modelovať informáciu z viac-kanálového EEG, kde je však podmienka podmienenej nezávislosti diskutabilná. V takomto prípade vieme reprezentovať danú informáciu kombináciou AR(10) odhadov z viacerých EEG elektród do jedného vektora [RR-8]. Rovnako je model ľahko adaptovateľný aj do formy HMM, v ktorom odhadujeme pravdepodobnosti prechodov



Obr. 8: Príklad pravdepodobnostných priebehov SWS a wake R&K fáz vytvorených kombináciou profilov všetkých 20 spánkových mikrostavov. Horný graf reprezentuje štandardný R&K profil vytvorený aplikovaním R&K pravidiel na 30-sekundové úseky spánkových dát, tzv. hypnogram

medzi spánkovými mikrostavmi. Avšak rovnako ako pri hGMM sa ukázalo, že tento prístup nevedie k modelu poskytujúcemu viac informácie o spánkovom procese, v zmysle ako sme informáciu poskytovanú modelom klinicky validovali v [RR-5, RR-6].

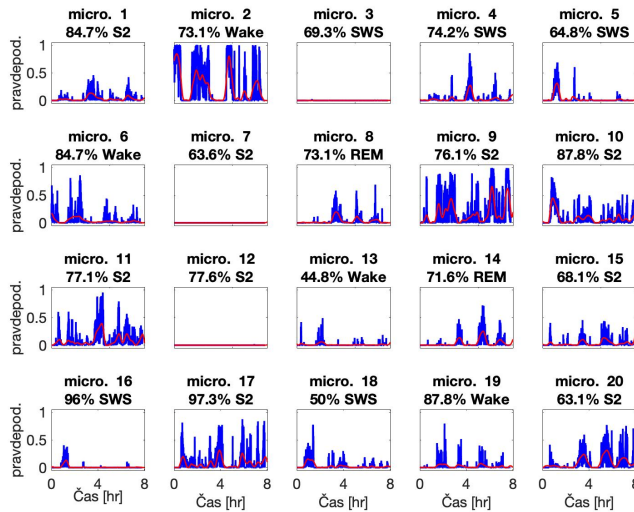
Klinickou validáciou PSM sme sa detailne zaoberali v [RR-6]. Naším cieľom bolo nájsť vzťah medzi PSM reprezentáciou spánku a množinou mier reprezentujúcich subjektívne hodnotenie spánku, fyziologických ako aj neurofyziologických mier a testov uskutočnených pred a po spánku samotnom. Pomocou metódy faktorovej analýzy sme identifikovali tri základne faktory reprezentujúce tieto miery a výsledky testov. Na druhej strane sme z pravdepodobnostných profilov mikrostavov ako aj odvodených R&K pravdepodobnostných profilov definovali širokú množinu mier reprezentujúcich vybrané vlastnosti profilov. Pomocou Spearmanovej korelácie sme sa snažili nájsť signifikantné závislosti medzi uvažovanými dvomi množinami. Ukázalo sa, že na rozdiel od klasickej diskkrétnej reprezentácie spánku pomocou R&K pravidiel (hypnogram), model PSM poskytuje vyššiu mieru korelácie a inherentne obsahuje viac informácie vzhľadom na denné miery.

3.3.3 Funkcionálna analýza dát a PSM

Reprezentácia spánkového procesu pomocou pravdepodobnostných profilov vedie k otázke existencie charakteristických profilov, napr. pre danú vekovú skupinu subjektov alebo profilov spojených s určitou poruchou spánku, napr. v dôsledku cievnej mozgovej príhody a podobne. To nás viedlo k myšlienke pozeráť sa na tieto profily ako na kontinuálne krivky, namiesto snahy reprezentovať ich jednorozmernými mierami. Prirodzeným nástrojom je oblasť funkcionálnej dátovej analýzy (FDA) [Ramsay and Silverman, 2005]. Koncept autor prvýkrát prezentoval v pilotnej štúdii [Rosipal, 2013]. Tému autor ďalej rozvíjal s Dr. Zuzanou Rošťákovou počas jej doktorandského štúdia, ktoré autor viedol. V krátkosti predstavíme hlavné body výskumu, ako aj návrh novej metódy zhukovania (klasterizácie) kriviek. Detailnejší popis metódy a výsledky sme publikovali v [RR-8], [Rošťáková and Rosipal,

2018].

Začnime príkladom reprezentácie spánkového procesu pomocou 20 mikrostavov a im zodpovedajúcich pravdepodobnostných spánkových profilov (Obr. 9). Aby

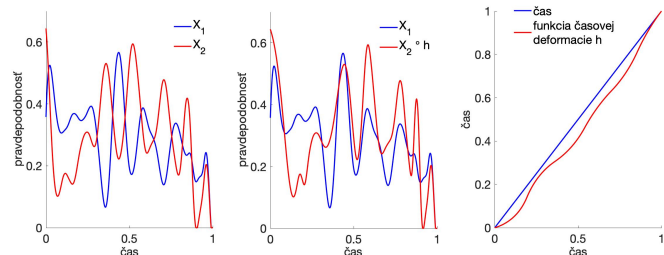


Obr. 9: Príklad pravdepodobnostných kriviek spánku (modrá) pre 20 mikrostavov 41-ročnej zdravej ženy. Vyhladená verzia kriviek spánku je zobrazená červenou farbou. Hodnota v názve je maximálna pravdepodobnosť $\max_{c \in \{wake, S1, S2, SWS, REM\}} \hat{p}_R(c|z_m)$ (transformovaná na percentá), t.z. hodnota určujúca väzbu medzi mikrostavom a R&K fázami spánku.

sme časovo zjednotili skúmané profile, východiskový bod každej krivky bol nastavený na latenciu spánku definovanú ako prvý výskyt troch po sebe nasledujúcich *S1* fáz spánku alebo prvý výskyt fázy *S2*, podľa toho, čo nastalo skôr. Pravdepodobnostné krivky sme vyhladili pomocou funkčiónálnej verzie metódy hlavných komponentov, ktorá je založená na vyhladení príslušnej kovariančnej matice [Yao et al., 2003]. Dôležitým vedľajším produktom metódy je, že vieme predpovedať profile vyhladených kriviek na konci noci, a preto môžeme krivky definovať v rovnakom časovom intervale.

Cieľom zhlukovej FDA je zistiť podskupiny alebo zhluky kriviek tak, aby bola podobnosť v rámci zhluhu (klastra) čo najvyššia a krivky z rôznych zhlukov boli čo najviac odlišné. Štandardné metódy zhluhovania, ako sú *k*-means, *k*-medoids alebo hierarchické zhluhovanie, sa dajú aplikovať na funkcionálne dáta nahradením euklidovskej vzdialenosti medzi vektormi vhodnou mierou vzdialenosti medzi krivkami. Väčšina techník zhluhovania kriviek však naráža na problémy, keď je medzi krivkami časové posunutie (Obr. 10, vľavo).

Uvažujme dvojicu kriviek X_1, X_2 definovaných na spoločnom časovom intervale



Obr. 10: Príklad dvoch pravdepodobnostných kriviek spánku (graf vľavo), ich časovo synchronizované verzie (stredný graf) a zodpovedajúce funkcie časovej deformácie (graf vpravo). Pôvodný čas bol transformovaný do intervalu $[0,1]$.

T . Bez straty všeobecnosti predpokladáme $T = [0, 1]$ a taktiež predpokladáme hladkosť a diferencovateľnosť X_1, X_2 na celom T .

Ak chceme časovo zarovnať (synchronizovať) dvojicu kriviek X_1, X_2 , znamená to nájsť funkciu časovej deformácie $h^* : T \rightarrow T$ z množiny H všetkých striktné rastúcich bijektívnych funkcií definovaných na intervale T a takých, že

$$h^* \in \operatorname{argmin}_{h \in H} S(X_1, X_2, h)$$

za podmienky spoločného začiatočného a koncového bodu

$$h^*(0) = 0 \quad \text{a} \quad h^*(1) = 1$$

a kde S je ľubovoľne kritérium vzdialenosti medzi krivkami. Napr. kritérium definované ako druhá mocnina plochy rozdielu časovo synchronizovných kriviek

$$S(X_1, X_2, h) = \int_T (X_1(t) - (X_2 \circ h)(t))^2 dt \quad (8)$$

je jedno z často používaných kritérií [Gervini and Gasser, 2004]. Operátor $\circ$ predstavuje kompozíciu (zloženie) dvoch funkcií

$$(X \circ h)(t) = X(h(t)), \quad t \in T$$

Obr. 10 zobrazuje príklad dvojice vyhladených pravdepodobnostných kriviek spánku, ich časovú synchronizáciu a odhadované funkcie časovej deformácie.

V literatúre existuje viacero prístupov navrhnutých pre časovú synchronizáciu a zhlukovanie kriviek. Môžeme ich rozdeliť do dvoch skupín

- časová synchronizácia celej sady kriviek pred samotným krokom zhlukovania
- simultánne časové synchronizovanie a zhlukovanie

V sérii experimentov sme pozorovali, že prístupy, pri ktorých časová synchronizácia predchádza kroku zhlukovania, viedli buď i) k deformácii tvarov kriviek, ktoré spôsobilo ich nesprávnu interpretáciu, alebo ii) k zlej časovej synchronizácii. Tento jav sme pozorovali na umelo generovaných krivkách s profilmi podobnými reálnym pravdepodobnostným krivkám spánku a pozorované závery sú v zhode s literatúrou [Tang and Müller, 2009]. Taktiež sme pozorovali, že existujúce metódy simultánnej časovej synchronizácie kriviek a zhlukovania buď neboli aplikovateľné na analýzu spánkových kriviek, alebo viedli k neuspokojivým výsledkom [RR-8]. So zámerom vyriešiť tieto problémy sme navrhli 2-krokový iteračný prístup pre zhlukovanie a časovú synchronizáciu kriviek so zložitými profilmi. Metóda kombinuje kroky zhlukovania a časovej synchronizácie aplikovanej v rámci zhlukov. Celý proces pozostáva z nasledujúcich procedúr:

- **počiatočné zhlukovanie:** Pretože na začiatku nie sú krivky časovo synchronizované, aplikácia štandardných algoritmov ako sú k -means alebo k -medoids nevedie k dobrým výsledkom. Preto v počiatočnom kroku zhlukovania aplikujeme metódu dynamického deformovania času (DTW), s cieľom získať špecifickú maticu vzdialenosti [RR-8](rovnicu (A.1) v Appendix A), na ktorú aplikujeme metódu zhlukovania k -medoids.
- **t-krok:** V rámci každého zhluku aplikujeme časovú synchronizáciu všetkých kriviek tvoriacich zhuk. Experimentálne sme porovnávali existujúce metódy časovej synchronizácie a taktiež ich nami modifikované verzie. Najlepšie výsledky sme dosiahli s modifikovanými verziami metód SMTW (self-modelling time warping), PCS (pairwise curve synchronisation) a ETW (elastic time warping). Metódy a ich modifikácie sme popísali v [RR-8](Appendix B).
- **(t + 1)-krok:** Znovu aplikujeme metódu zhlukovania synchronizovaných kriviek pomocou DTW. S cieľom vyhodnotiť, ako dobre sú krivky zaradené do zhlukov a časovo zosynchronizované, sme navrhli nasledujúce kritérium

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^K \sum_{j: X_j \in C_i} \int_T ((X_j \circ h_j)(t) - \mu_i(t))^2 dt \quad (9)$$

$$\mu_i(t) = \frac{1}{|C_i|} \sum_{j: X_j \in C_i} (X_j \circ h_j)(t)$$

ktoré predstavuje kumulatívny priemer druhých mocnín rozdielov medzi zosynchronizovanými krivkami $X_1 \circ h_1, \dots, X_N \circ h_N$ a reprezentantmi $\mu_1, \dots, \mu_K$ zhlukov, do ktorých boli krivky zaradené. $|C_i|$ definuje počet kriviek v rámci zhluku C_i .

Tieto dva kroky zhlukovania a synchronizácie, sa iteratívne opakujú, až kým nie je splnené jedno zo zastavovacích kritérií [RR-8].

Dvoj-krokovú metódu sme aplikovali na množinu spánkových dát (146 zdravých subjektov) [RR-8], ako aj na množinu spánkových dát pacientov po cievnej mozgovej príhode (21 pacientov) [Rošťáková et al., 2016]. Podarilo sa nám odhaliť spánkové profily signifikantne korelujúce s dennými mierami študovanými v [RR-6], ako aj s mierami zameranými na pozornosť a motorickú presnosť pacientov po cievnej mozgovej príhode (projekt MZ 2013/46-SAV-6). Získané homogénne zhluky mikrostavov reprezentujúcich *SWS*, *wake* a *REM* fázy spánku pripomínali klastrovú štruktúru subjektov s výrazne odlišným subjektívnym skóre kvality spánku, nálady ako aj výsledkami kognitívnych a pozornosťných testov. Profily spánku spojené s jednotlivými zhlukmi predstavujú nový pohľad na reprezentáciu spánkového procesu. Okrem toho, na rozdiel od R&K hypnogramov poskytujú informáciu vedúcu k pochopeniu dynamiky spánku počas celej noci [RR-8].

4 Zhrnutie pre prax a rozvoj adresovanej vednej oblasti

Dizertačná práca sa venuje problematike matematického a počítačového modelovania mozgovej funkcionality. V centre pozornosti je návrh metód na analýzu neurofyziologických dát. Merané neurofyziologické veličiny často len nepriamo reprezentujú mozgové procesy, ktoré sa snažíme detegovať, modelovať alebo monitorovať. Práca opisuje dva súvisiace metodologické prístupy tematicky vychádzajúce z rovnakého predpokladu existencie latentného procesu, ktorý podmieňuje generovanie priamo meraných veličín.

Ukázali sme, že navrhnuté modely majú uplatnenie nielen pri analýze dát, ale stali sa aj súčasťou konštrukcie reálnych systémov. Metódy jadrového učenia sme uplatnili pri konštrukcii prvých foriem rozhraní BCI, umožňujúcich novú formu komunikácie medzi človekom a počítačom a rozširujúcich komunikačné schopnosti človeka s okolím. Neskôr sa autor zásadne podieľal pri návrhu a konštrukcii zariadenia robotической dlahy, ako aj modifikovaného zariadenia založenom na platforme virtuálnej reality, určených pre neurorehabilitačný tréning. V tomto prípade sa do BCI prvku oboch systémov úspešne zakomponovala metóda tenzorickej analýzy EEG dát. Zariadenia sme testovali pri tréningu zameranom na zlepšenie pohybovej schopnosti pacientov po mozgovej cievnej príhode. Vychádzajúc zo získaných výsledkov vidíme potenciál širšieho využitia obidvoch systémov pre klinickú prax.

Môžeme konštatovať, že výsledky tvoriace dizertačnú prácu a navrhnuté metódy nachádzajú uplatnenie nielen v oblasti študovanej autorom. Svedčí o tom použitie metód a citačný ohlas v širšom spektre vedných oblastí. Tu ide hlavne o použitie nelineárnych modelov jadrového učenia ako aj metód tenzorickej reprezentácie a analýzy dát. Implementácie metód sú dostupné vo viacerých softvérových platformách. Autor v programovacom prostredí MATLAB® (MathWorks, Inc.) vytvoril grafické prostredie (APECSgui) umožňujúce prehľadné použitie modelov.

Metódy a výsledky tenzorickej reprezentácie neurofyziologických dát predstavujú prístup, ktorý sa ďalej rozvíja a v študovanej oblasti nachádza stále väčšie uplatnenie. Autor sa tematike naďalej systematicky venuje.

Rovnako si dovoľíme tvrdiť, že výsledky v oblasti modelovania spánkového procesu predstavujú nový pohľad na problém definovania objektívnej spánkovej reprezentácie a prispievajú k prekonaniu limitov súčasných spánkových modelov. Prínos vidíme nielen pri formálnej analýze spánkových dát, ale hlavne pre klinickú prax.

Vychádzajúc z prezentovaných tvrdení o uplatniteľnosti výsledkov dizertačnej práce, môžeme predpokladať, že prezentované poznatky tvoria vhodný základ pre ich ďalší výskum a rozvoj modelov a nástrojov aplikovanej matematiky a strojového učenia v oblasti štúdia mozgovej funkcionality.

5 Literatúra

- [Anderer et al., 2005] Anderer, P., Gruber, G., Parapatics, S., Woertz, M., Miaz-hynskaia, T., Klösch, G., and et. al. (2005). An E-Health Solution for Automatic Sleep Classification according to Rechtschaffen and Kales Validation Study of the Somnolyzer 24 $\times$ 7 Utilizing the Siesta Database. *Neuropsychobiology*, 51:115–133.
- [Aronszajn, 1950] Aronszajn, N. (1950). Theory of reproducing kernels. *Transactions of the American Mathematical Society*, 68:337–404.
- [Bishop, 1995] Bishop, C. M. (1995). *Neural Networks for Pattern Recognition*. Clarendon Press, Oxford.
- [Breiman and Friedman, 1997] Breiman, L. and Friedman, J. H. (1997). Predicting Multivariate Responses in Multiple Linear Regression. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 59:3–54.
- [Cichocki et al., 2009] Cichocki, A., Zdunek, R., Phan, A. H., and Amari, S.-I. (2009). *Nonnegative matrix and tensor factorizations: applications to exploratory multi-way data analysis and blind source separation*. John Wiley & Sons.
- [Cristianini and Shawe-Taylor, 2000] Cristianini, N. and Shawe-Taylor, J. (2000). *An Introduction to Support Vector Machines*. Cambridge University Press.
- [Estienne et al., 2001] Estienne, F., Matthijs, N., Massart, D. L., Ricoux, P., and Leibovici, D. (2001). Multi-way modelling of high-dimensionality electroencephalographic data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 58:59–72.
- [Flexer et al., 2002a] Flexer, A., , Dorffner, G., Sykacek, P., , and Rezek, I. (2002a). An automatic, continuous and probabilistic sleep stager based on a hidden markov model. *Applied Artificial Intelligence*, 16:199–207.
- [Flexer et al., 2002b] Flexer, A., Gruber, G., and Dorffner, G. (2002b). A reliable probabilistic sleep stager based on a single eeg signal. *Artificial Intelligence in Medicine*, 33:199–207.
- [Gervini and Gasser, 2004] Gervini, D. and Gasser, T. (2004). Self-modeling warping functions. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B*, 66:959–971.
- [Gorsuch, 2002] Gorsuch, R. (2002). *Factor analysis*. Psychology Press, Hillsdale, NJ.
- [Höskuldsson, 1988] Höskuldsson, A. (1988). PLS Regression Methods. *Journal of Chemometrics*, 2:211–228.

- [Iber et al., 2007] Iber, C., Ancoli-Israel, S., Chesson, A., and Quan, S. (2007). *The AASM Manual for the Scoring of Sleep and Associated Events: Rules, Terminology and Technical Specifications*. American Academy of Sleep Medicine.
- [Jolliffe, 2002] Jolliffe, I. T. (2002). *Principal Component Analysis*. Springer.
- [Kiers, 1998] Kiers, H. A. L. (1998). Recent Developments in Three-Mode Factor Analysis: Constrained Three-Mode Factor Analysis and Core Rotations. In Hayashi, C., Yajima, K., Bock, H.-H., Ohsumi, N., Tanaka, Y., and Baba, Y., editors, *Data Science, Classification, and Related Methods*, pages 563–574, Tokyo. Springer Japan.
- [Kiers and Smilde, 1998] Kiers, H. A. L. and Smilde, A. K. (1998). Constrained three-mode factor analysis as a tool for parameter estimation with second-order instrumental data. *Journal of Chemometrics*, 12:125–147.
- [Kruskal, 1989] Kruskal, J. B. (1989). Rank, Decomposition, and Uniqueness for 3-way and N-way Arrays. In Coppi, R. and Bolasco, S., editors, *Multiway Data Analysis*, pages 7–18. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, The Netherlands.
- [Mercer, 1909] Mercer, J. (1909). Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations. *Philosophical Transactions Royal Society London*, A209:415–446.
- [Miwakeichi et al., 2004] Miwakeichi, F., Martínez-Montes, E., Valdés-Sosa, P. A., Nishiyama, N., Mizuhara, H., and Yamaguchi, Y. (2004). Decomposing EEG data into space-time-frequency components using Parallel Factor Analysis. *NeuroImage*, 22:1035–1045.
- [Monteiro et al., 2019] Monteiro, T. G., Skourup, C., and Zhang, H. (2019). Using eeg for mental fatigue assessment: A comprehensive look into the current state of the art. *IEEE Transactions on Human-Machine Systems*, 49:599–610.
- [Ramsay and Silverman, 2005] Ramsay, J. O. and Silverman, B. W. (2005). *Functional data analysis*. Springer Series in Statistics, New York, second edition.
- [Rechtschaffen and Kales, 1968] Rechtschaffen, A. and Kales, A. (1968). *A Manual of Standardized Terminology, Techniques and Scoring System for Sleep Stages of Human Subject*. U.S. Dept. of Health, Education, and Welfare (Bethesda, MD).
- [Rosipal, 2013] Rosipal, R. (2013). Clustering probabilistic sleep microstate curves: a functional data analysis approach. In Manka, J., Witkovský, V., Tyšler, M., and Frollo, I., editors, *Proceedings of Measurement ’13*, pages 101–104.

- [Rosipal et al., 2006] Rosipal, R., Neubauer, S., Anderer, P., Gruber, G., Parapatics, S., Woertz, M., and Dorffner, G. (2006). talk: A hierarchical gaussian mixture model for continuous high-resolution sleep analysis. In *International Conference on Monitoring Sleep and Sleepiness - from Physiology to New Sensors*, Basel, Switzerland.
- [Rosipal et al., 2007] Rosipal, R., Peters, B., Kecklund, G., Åkerstedt, T., Gruber, G., Woertz, M., Anderer, P., and Dorffner, G. (2007). EEG-Based Drivers' Drowsiness Monitoring Using a Hierarchical Gaussian Mixture Model. In Schmorrow, D. D. and Reeves, L. M., editors, *Foundations of Augmented Cognition*, volume 4565 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 294–303. Springer.
- [Rosipal et al., 2018] Rosipal, R., Porubcová, N., Cimrová, B., and Farkaš, I. (2018). Poster: Mirror-therapy as a way to start bci robot-assisted rehabilitation: a single case longitudinal study of a patient with hemiparesis. In *The Seventh International BCI Meeting*, Pacific Grove, CA.
- [Rosipal et al., 2003a] Rosipal, R., Trejo, L., and Matthews, B. (2003a). Kernel PLS-SVC for Linear and Nonlinear Classification. In *Proceedings of the Twentieth International Conference on Machine Learning*, pages 640–647, Washington, DC.
- [Rosipal and Trejo, 2001] Rosipal, R. and Trejo, L. J. (2001). Kernel Partial Least Squares Regression in Reproducing Kernel Hilbert Space. *Journal of Machine Learning Research*, 2:97–123.
- [Rosipal et al., 2009] Rosipal, R., Trejo, L. J., and Nunez, P. L. (2009). Application of Multi-way EEG Decomposition for Cognitive Workload Monitoring. In Vinzi, V. E., Tenenhaus, M., and Guan, R., editors, *Proceedings of the 6th International Conference on PLS and Related Methods*, pages 145–149, Beijing, China.
- [Rosipal et al., 2003b] Rosipal, R., Trejo, L. J., and Wheeler, K. (2003b). Kernel PLS Smoothing for Nonparametric Regression Curve Fitting: an Application to Event Related Potentials. Technical report, NASA Ames Research Center.
- [Rosipal et al., 2013] Rosipal, R., Trejo, L. J., and Zaidel, E. (2013). Tucker tensor decomposition of multi-session EEG data. In *TML: Tensor Methods for Machine Learning*, Prague, Czech Republic.
- [Rošťáková and Rosipal, 2018] Rošťáková, Z. and Rosipal, R. (2018). Time Alignment as a Necessary Step in the Analysis of Sleep Probabilistic Curves. *Measurement Science Review*, 18:1–6.

- [Rošťáková et al., 2016] Rošťáková, Z., Rosipal, R., and Dorffner, G. (2016). Continuous sleep profiles clustering with a novel 2-step functional data approach. *Journal of Sleep Research*, 25 (Suppl. 1, P508):251–251.
- [Rošťáková et al., 2020] Rošťáková, Z., Rosipal, R., and Seifpour, S. (2020). Tucker Tensor Decomposition of Multi-session EEG Data. In Farkaš, I., Masulli, P., and Wermter, S., editors, *Artificial Neural Networks and Machine Learning – ICANN 2020*, volume 12396 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 115–126. Springer.
- [Saunders et al., 1998] Saunders, C., Gammerman, A., and Vovk, V. (1998). Ridge Regression Learning Algorithm in Dual Variables. In *Proceedings of the 15th International Conference on Machine Learning*, pages 515–521, Madison, Wisconsin.
- [Schölkopf et al., 1998] Schölkopf, B., Smola, A., and Müller, K. (1998). Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. *Neural Computation*, 10:1299–1319.
- [Schölkopf and Smola, 2002] Schölkopf, B. and Smola, A. J. (2002). *Learning with Kernels*. MIT Press, Cambridge, MA.
- [Shawe-Taylor and Cristianini, 2004] Shawe-Taylor, J. and Cristianini, N. (2004). *Kernel Methods for Pattern Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [Tang and Müller, 2009] Tang, R. and Müller, H. G. (2009). Time-synchronized clustering of gene expression trajectories. *Biostatistics*, 10:32–45.
- [Trejo et al., 2007] Trejo, L. J., Knuth, K., Prado, R., Rosipal, R., Kubitz, K., Kochavi, R., Matthews, B., and Zhang, Y. (2007). EEG-based Estimation of Mental Fatigue: Convergent Evidence for a Three-State Model. In D. D. Schmorow and L. M. Reeves, editor, *Foundations of Augmented Cognition*, volume 4565 of *Lecture Notes in Artificial Intelligence*, pages 201–221. Springer.
- [Trejo et al., 2015] Trejo, L. J., Kubitz, K., Rosipal, R., Kochavi, R. L., and Montgomery, L. D. (2015). EEG-Based Estimation and Classification of Mental Fatigue. *Psychology*, 6:572–589.
- [Trejo et al., 2003] Trejo, L. J., Wheeler, K. R., Jorgensen, C. C., Rosipal, R., Clanton, S. T., Hibbs, B. M. A. D., Matthews, R., and Krupka, M. (2003). Multimodal Neuroelectric Interface Development. *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, 11:199–204.
- [Vapnik, 1998] Vapnik, V. (1998). *Statistical Learning Theory*. Wiley, New York.

- [Wold, 1985] Wold, H. (1985). Partial least squares. In S. Kotz and N. L. Johnson, editor, *Encyclopedia of the Statistical Sciences*, volume 6, pages 581–591. John Wiley & Sons.
- [Yao et al., 2003] Yao, F., Müller, H. G., Clifford, A. J., Dueker, S. R., Follett, J., Lin, Y., Buchholz, B. A., and Vogel, J. S. (2003). Shrinkage estimation for functional principal component scores with application to the population kinetics of plasma folate. *Biometrics*, 59(3):676–685.
- [Younes et al., 2016] Younes, M., Raneri, J., and Hanly, P. P. (2016). Staging Sleep in Polysomnograms: Analysis of Inter-Scorer Variability. *Journal of Clinical Sleep Medicine*, 12:885–894.

6 Zoznam prác tvoriacich dizertáciu

- [RR-1] T. D. Bie, N. Cristianini, and **R. Rosipal**. Eigenproblems in Pattern Recognition. In E. Bayro-Corrochano, editor, *Handbook of Geometric Computing: Applications in Pattern Recognition, Computer Vision, Neuralcomputing, and Robotics*, pages 129–170. Springer, 2005. doi:https://doi.org/10.1007/3-540-28247-5_5.
- [RR-2] **R. Rosipal** and N. Krämer. Overview and Recent Advances in Partial Least Squares. In C. Saunders and M. Grobelnik and S. Gunn and J. Shawe-Taylor, editor, *Subspace, Latent Structure and Feature Selection Techniques*, pages 34–51. Springer, 2006. doi:https://doi.org/10.1007/11752790_2.
- [RR-3] L. J. Trejo, **R. Rosipal**, and B. Matthews. Brain-Computer Interfaces for 1-D and 2-D Cursor Control: Designs using Volitional Control of the EEG Spectrum or Steady-State Visual Evoked Potentials. *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, 14(2):225–229, 2006. doi:10.1109/TNSRE.2006.875578.
- [RR-4] **R. Rosipal**. Nonlinear Partial Least Squares: An Overview. In H. Lodhi and Y. Yamanishi, editor, *Chemoinformatics and Advanced Machine Learning Perspectives: Complex Computational Methods and Collaborative Techniques*, pages 169–189. ACCM, IGI Global, 2011. doi:10.4018/978-1-61520-911-8.ch009.
- [RR-5] A. Lewandowski, **R. Rosipal**, and G. Dorffner. Extracting more information from EEG recordings for a better description of sleep. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 108(3):961–972, 2012. doi:10.1016/j.cmpb.2012.05.009.

- [RR-6] **R. Rosipal**, A. Lewandowski, and G. Dorffner. In search of objective components for sleep quality indexing in normal sleep. *Biological Psychology*, 94(1):210–220, 2013. doi:<https://doi.org/10.1016/j.biopsycho.2013.05.014>.
- [RR-7] **R. Rosipal**, N. Porubcová, P. Barančok, B. Cimrová, I. Farkaš, and L. J. Trejo. Effects of Mirror-Box Therapy on Modulation of Sensorimotor EEG Oscillatory Rhythms: A Single-Case Longitudinal Study. *Journal of Neurophysiology*, 121(2):620–633, 2019. doi:doi: 10.1152/jn.00599.2018.
- [RR-8] Z. Rošťáková and **R. Rosipal**. Profiling continuous sleep representations for better understanding of the dynamic character of normal sleep. *Artificial Intelligence in Medicine*, 97:152–167, 2019. doi:<https://doi.org/10.1016/j.artmed.2018.12.009>.
- [RR-9] Z. Rošťáková, **R. Rosipal**, S. Seifpour, and L. J. Trejo. A Comparison of Non-negative Tucker Decomposition and Parallel Factor Analysis for Identification and Measurement of Human EEG Rhythms. *Measurement Science Review*, 20(3):126–138, 2020. doi:<https://doi.org/10.2478/msr-2020-0015>.

7 Citačný ohlas na predložené práce

Použijúc databázu Web of Science (WOS), k dátumu 31.12.2020, bol celkový citačný ohlas (bez autocitácií) na všetky publikované práce autora **1538**. Na predkladané práce bol počet citácií k rovnakému dátumu rovný **900**. Citačný ohlas na jednotlivé predkladané práce: [RR-1] - 48 citácií, [RR-2] - 630 citácií, [RR-3] - 156 citácií, [RR-4] - 45 citácií, [RR-5] - 4 citácií, [RR-6] - 17 citácií, práce [RR-7, RR-8] a [RR-9] sú neskoršie práce z rokov 2019 a 2020 a zatiaľ sú bez WOS citácií.

8 Najdôležitejšie vybrané práce autora

8.1 Kapitoly v monografiách

1. R. Rosipal. Nonlinear Partial Least Squares: An Overview. In H. Lodhi and Y. Yamanishi, editor, *Chemoinformatics and Advanced Machine Learning Perspectives: Complex Computational Methods and Collaborative Techniques*, s. 169–189. ACCM, IGI Global, 2011.
2. R. Rosipal & N. Krämer. Overview and Recent Advances in Partial Least Squares. In C. Saunders and M. Grobelnik and S. Gunn and J. Shawe-

Taylor, editor, *Subspace, Latent Structure and Feature Selection Techniques*, s. 34–51. Springer, 2006.

3. T. D. Bie, N. Cristianini & R. Rosipal. Eigenproblems in Pattern Recognition. In E. Bayro-Corrochano, editor, *Handbook of Geometric Computing: Applications in Pattern Recognition, Computer Vision, Neuralcomputing, and Robotics*, s. 129–170. Springer, 2005.
4. C. Fyfe, D. MacDonald, P. L. Lai, R. Rosipal & D. Charles. Unsupervised learning using radial kernels. In R. J. Howlett and L. C. Jain and J. Kacprzyk, editor, *Radial Basis Function Networks 1: Recent Developments in Theory and Applications*, Series: Studies in Fuzziness and Soft Computing , Vol. 66, s. 193–218, Physica-Verlag, 2001.
5. M. Koska, R. Rosipal, A. Konig & L. J. Trejo. Estimation of human signal detection performance from event-related potentials using feed-forward neural network model. In K. Warwick and M. Karny, editor, *Computer Intensive Methods in Control and Signal Processing: The Curse of Dimensionality*, s. 271–282, Birkhauser, 1997.

8.2 Publikácie vo vedeckých časopisoch

*Vedecké práce v časopisoch evidovaných v Current Contents (CC)*⁴

1. Z. Rošťáková, R. Rosipal, S. Seifpour & L. J. Trejo. A Comparison of Non-negative Tucker Decomposition and Parallel Factor Analysis for Identification and Measurement of Human EEG Rhythms. *Measurement Science Review*, 20(3):126–138, 2020.
2. Z. Rošťáková & R. Rosipal. Profiling continuous sleep representations for better understanding of the dynamic character of normal sleep. *Artificial Intelligence in Medicine*, 97:152–167, 2019.
3. R. Rosipal, N. Porubcová, P. Barančok, B. Cimrová, I. Farkaš & L. J. Trejo. Effects of Mirror-Box Therapy on Modulation of Sensorimotor EEG Oscillatory Rhythms: A Single-Case Longitudinal Study. *Journal of Neurophysiology*, 121(2):620–633, 2019.
4. Z. Rošťáková & R. Rosipal. Time Alignment as a Necessary Step in the Analysis of Sleep Probabilistic Curves. *Measurement Science Review*, 18:1–6, 2018.

⁴V databáze CC sú evidované aj kapitoly v monografiách č. 3. a 4.

5. M. Teplan, I. Bajla, R. Rosipal & M. Rusnak. Feature clustering of intracranial pressure time-series for an alarm function estimation in traumatic brain injury. *Physiological Measurement*, 38:2015–2043, 2017.
6. R. Rosipal, A. Lewandowski & G. Dorffner. In search of objective components for sleep quality indexing in normal sleep. *Biological Psychology*, 94:210–220, 2013.
7. A. Lewandowski, Rosipal & G. Dorffner. Extracting more information from EEG recordings for a better description of sleep. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 108:961–972, 2012.
8. L. J. Trejo, R. Rosipal & B. Matthews. Brain-Computer Interfaces for 1-D and 2-D Cursor Control: Designs using Volitional Control of the EEG Spectrum or Steady-State Visual Evoked Potentials. *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, 14:225–229, 2006.
9. L. J. Trejo, K. R. Wheeler, C. C. Jorgensen, R. Rosipal, S. T. Clanton, B. Matthews, A. D. Hibbs, R. Matthews & M. Krupka. Multimodal Neuroelectric Interface Development. *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, 11:199–204, 2003.
10. R. Rosipal and L. J. Trejo. Kernel Partial Least Squares Regression in Reproducing Kernel Hilbert Space. *Journal of Machine Learning Research*, 2: 97–123, 2001.
11. R. Rosipal, M. Girolami, L. J. Trejo & A. Cichocki. Kernel PCA for Feature Extraction and De-Noising in Nonlinear Regression. *Neural Computing & Applications*, 10:231–243, 2001.
12. R. Rosipal & M. Girolami. An Expectation-Maximization Approach to Nonlinear Component Analysis. *Neural Computation*, 13:505–510, 2001.

Vedecké práce v časopisoch indexovaných vo WOS/Scopus

1. Z. Rošťáková, R. Rosipal & S. Seifpour. Tucker Tensor Decomposition of Multi-session EEG Data. In I. Farkas, P. Masulli, S. Wermter, editors, *Artificial Neural Networks and Machine Learning – ICANN 2020*, vol 12396 of *Lecture Notes in Computer Science*, s. 115–126, Springer, 2020.
2. Z. Rošťáková, G. Dorffner, O. Aydemir & R. Rosipal. Estimation of Sleep Quality by Using Microstructure Profiles. In A. ten Teije, C. Popow, J. H.

Holmes, L. Sacchi, editors, *Artificial Intelligence in Medicine*, volume 10259 of *Lecture Notes in Computer Science*, s. 105–115, Springer, 2017.

3. B. T. Mai Phuong & R. Rosipal. Differences in sleep patterns among healthy sleepers and patients after stroke. *Clinician and Technology*, 44:15–20, 2015.
4. A. Lewandowski, Rosipal & G. Dorffner. On the Individuality of Sleep EEG Spectra. *Journal of Psychophysiology*, 27:105–112, 2013.
5. R. Rosipal, B. Peters, G. Kecklund, T. Åkerstedt, G. Gruber, M. Woertz, P. Anderer & G. Dorffner. EEG-Based Drivers' Drowsiness Monitoring Using a Hierarchical Gaussian Mixture Model. In D. D. Schmorrow, L. M. Reeves, editors, *Foundations Augmented Cognition*, volume 4565 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 294–303, Springer, 2007.
6. L. J. Trejo, K. Knuth, R. Prado, R. Rosipal, K. Kubitz, R. Kochavi, B. Matthews & Y. Zhang. EEG-based Estimation of Mental Fatigue: Convergent Evidence for a Three-State Model. In D. D. Schmorrow, L. M. Reeves, editors, *Foundations Augmented Cognition*, volume 4565 of *Lecture Notes in Computer Science*, s. 201–221, Springer, 2007.
7. L. J. Trejo, R. Kochavi, K. Kubitz, L. D. Montgomery, R. Rosipal & B. Matthews. Measures and models for predicting cognitive fatigue. In J. A. Caldwell, N. J. Wesensten, editors, *Proceedings of SPIE Vol. 5797: Biomonitoring for Physiological and Cognitive Performance During Military Operations*, SPIE Defense & Security Symposium, s. 105–115, 2005.
8. R. Rosipal. Kernel Partial Least Squares for Nonlinear Regression and Discrimination. *Neural Network World*, 13:291–300, 2003.
9. R. Rosipal, M. Koska & I. Farkaš. Prediction of Chaotic Time-Series with a Resource-Allocating RBF Network. *Neural Processing Letters*, 7:185–197, 1998.
10. R. Rosipal, G. Dorffner & E. Trenker. Can ICA improve sleep-spindles detection? *Neural Network World*, 8:539–547, 1998.

Vedecké práce v iných recenzovaných časopisoch

1. L. J. Trejo, K. Kubitz, R. Rosipal, R. L. Kochavi & L. D. Montgomery. EEG-Based Estimation and Classification of Mental Fatigue. *Psychology*, 6:572–589, 2015.

2. R. Rosipal, M. A. Girolami & L. J. Trejo. On Kernel Principal Component Regression with Covariance Inflation Criterion for Model Selection. *Computing and Information Systems*, 13, 2001.
3. R. Rosipal, L. J. Trejo & A. Cichocki. Kernel Principal Component Regression with EM Approach to Nonlinear Principal Components Extraction. *Computing and Information Systems*, 12, 2000.

8.3 Recenzované príspevky v zborníkoch z vedeckých konferencií

Zborníky z konferencií vo WOS/Scopus

1. Z. Rošťáková & R. Rosipal Three-way Analysis of Multichannel EEG Data Using the PARAFAC and Tucker Models. In J. Maňka, J. Švehlíková, J. Witkovský, I. Frollo, editors, *Proceedings of Measurement '19*, s. 127–130, 2019.
2. Š. Korečko, M. Hudák, B. Sobota, M. Marko, B. Cimrová, I. Farkaš & R. Rosipal. Assessment and training of visuospatial cognitive functions in virtual reality: proposal and perspective. In *Proceedings of CogInfoCom: The 9th IEEE International Conference on Cognitive InfoCommunications*, s. 39–43, 2018.
3. Z. Rošťáková & R. Rosipal. Importance of the Time Alignment of the Sleep Probabilistic Curves. In J. Maňka, M. Tyšler, J. Witkovský, I. Frollo, editors, *Proceedings of Measurement '17*, s. 27–30, 2017.
4. A. Krakovská, R. Škoviera & R. Rosipal. Spectral, Complexity and Interdependence Measures of Sleep EEG after Ischemic Stroke. In J. Maňka, M. Tyšler, J. Witkovský, I. Frollo, editors, *Proceedings of Measurement '17*, s. 245–249, 2017.
5. R. Rosipal and L. J. Trejo & P. L. Nunez. Application of Multi-way EEG Decomposition for Cognitive Workload Monitoring. In V. E. Vinzi, M. Tenenhaus, R. Guan, editors, *Proceedings of the 6th International Conference on PLS and Related Methods*, s.145–149, 2009.
6. J. Wallerius, L. J. Trejo, R. Matthews, E. Rosipal & J. A. Caldwell. Robust feature extraction and classification of EEG spectra for real-time classification of cognitive state. In *Proceedings of the 11th International Conference*

on *Human Computer Interaction*, volume 11 of Foundations of Augmented Cognition, s. 302–31, 2005.

7. R. Rosipal R, I. J. Trejo & B. Matthews. Kernel PLS-SVC for Linear and Nonlinear Classification. In *Proceedings of the Twentieth International Conference on Machine Learning (ICML'03)*, s. 640–647, 2003.
8. R. Rosipal, M. Girolami & L. J. Trejo. Kernel PCA Feature Extraction of Event-Related Potentials for Human Signal Detection Task. t In *Artificial Neural Networks in Medicine and Biology (ANNIMAB-1)*, s. 321–326, Springer, 2000. abstract
9. A. K. Barros, R. Rosipal, M. Girolami, G. Dorffner & N. Ohnishi. Extraction of Sleep-Spindles from the Electroencephalogram (EEG). In *Artificial Neural Networks in Medicine and Biology (ANNIMAB-1)*, s. 125–130, Springer, 2000.
10. R. Rosipal & M. Girolami M. An Adaptive Support Vector Regression Filter: A Signal Detection Application. In *Proceedings of the 9th International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN'99)*, volume 2, s. 603–607, 1999.

Ostatné recenzované príspevky v zborníkoch

1. B. Cimrová, I. Farkaš, P. Gergeľ & R. Rosipal. Meranie kapacity vizuálnej priestorovej pracovnej pamäte a schopnosti filtrácie. In *Kognícia a umelý život 2019*, Bratislava, s. 29–32, 2019.
2. B. Cimrová., Z. Rošťáková, M. Varga Doležalová, I. Farkaš, I. & R. Rosipal. Hľadanie súvislostí medzi charakteristikami spánku a kognitívnym výkonom pacientov s ložiskovou ischémiou mozgu. In *Kognice a umelý život 2018*, Brno, s. 11–12, 2018.
3. Z. Rošťáková & R. Rosipal Changes in sleep electroencephalogram in patients following an ischemic stroke. In *Proceedings of ELITECH '18 : 20th Conference of Doctoral Students*, Bratislava, 2018.
4. J. Rybár, B. Cimrová, I. Farkaš, M. Varga Doležalová & R. Rosipal. Špecifiká kognitívneho výkonu pacientov po ložiskovej ischémi mozgu. In *Kognice a umelý život XVI*, Praha, s. 135–141, 2016.

5. A. Krakovska A, R. Škoviera, G. Dorffner, & R. Rosipal. Does the Complexity of Sleep EEG Increase or Decrease with Age? In *Proceedings of Measurement '15*, Manka J., Tysler M., Witkovsky V., Frollo I. (eds.), Smolenice, Slovakia, s. 77–80, 2015.
6. R. Rosipal, B. Cimrová, L. Ruckschloss, Z. Kohút, I. Farkaš & N. Porubcová. Vplyv zrkadlového tréningu na moduláciu motorických rytmov: elektrofyziologicalká a klinická štúdia pacienta s hemiparézou po mozgovom infarkte (The effect of mirror-box training on modulation of motor rhythms: electrophysiological and clinical study of patient with hemiparesis after stroke). In *Kognícia a umelý život 2015*, Bratislava, s. 151–156, 2015.
7. R. Škoviera, Z. Rošťáková, A. Krakovska & R. Rosipal. Spectral and Complexity Characteristics of Sleep EEG Following Ischemic Stroke. In *Proceedings of YBERC: The Sixth Biomedical Conference of Young Biomedical Engineers and Researchers*, s. 108–114, 2014. abstract
8. M. Teplan, I. Bajla, R. Rosipal & M. Rusnák. Intracranial Pressure of Patients After Severe Traumatic Brain Injury: A Pilot Study for Lethality Estimation from Time Series. In *Proceedings of YBERC: The Sixth Biomedical Conference of Young Biomedical Engineers and Researchers*, s. 89–92, 2014.
9. B. Cimrová, I. Farkaš & R. Rosipal. Využitie rozhrania mozog-počítač pri neurorehabilitácii: prehľad aktuálneho výskumu (Application of brain-computer interface in neurorehabilitation: current research overview). In *Kognitívna veda a umelý život II*, Opava, s. 33–38, 2014.
10. R. Rosipal and L. J. Trejo & E. Zaidel. Tucker tensor decomposition of multi-session EEG data. In *TML: Tensor Methods for Machine Learning*, Prague, Czech Republic, 2013,
11. R. Rosipal. Clustering probabilistic sleep microstate curves: a functional data analysis approach. In J. Manka, V. Witkovský, M. Tyšler, I. Frollo, editors, *Proceedings of Measurement '13*, s. 101–104, 2013.
12. L. J. Trejo, R. Rosipal & P. L. Nunez. Advanced Physiological Estimation of Cognitive Status. In *The 27th Army Science Conference*, 2010.
13. R. Rosipal, M. Koska & I. Farkaš. Chaotic time-series prediction using resource-allocating RBF networks. In *Proceedings of Measurement '97*, s. 282–285, 1997.

8.4 Vedecké projekty a realizácia výsledkov v praxi

Zodpovedný riešiteľ a riešiteľ vedeckých projektov (2001–2021)

1. APVV-16-0202, *Vylepšovanie kognície a motorickej rehabilitácie s využitím zmiešanej reality (ECoReMiR)*, **zodpovedný riešiteľ** na ÚM SAV, 2017–2021.
2. APVV-0668-12, *Rozhranie mozog–počítač s adaptívnym robotickým ramenom na rehabilitáciu (BCI-RAS)*, **zodpovedný riešiteľ**, 2013–2017.
3. MZ SR 2013/46-SAV-6, *Zmeny architektúry spánku u pacientov s ložiskovou ischémiou mozgu a ich vplyv na kognitívne funkcie (SleepCog)*, **zodpovedný riešiteľ**, 2013–2016.
4. US Army Research Office, Contract No. W911NF-11-C-0081, *NOIT: Neuro-sensory Optimization of Information Transfer*, riešiteľ, 2011–2015.
5. APVV-0096-10, *Štatistické metódy pre analýzu neistôt v metrológii (STAT-GUM)*, riešiteľ, 2011–2014.
6. US Army Research Office, Contract No. W911NF-08-C-0121, *APECS: Advanced Physiological Estimation of Cognitive Status*, riešiteľ, 2008–2009.
7. Austrian Science Fund (FWF), Contract No. P19857, *Multi-sensor Sleep Modeling Based on Contextual Data Fusion*, riešiteľ, 2007–2010.
8. FP6-EU, Contract No. LSHC-CT-2005-019031, *BAMOD: Breath-gas Analysis for Molecular-oriented Detection of Minimal Diseases*, riešiteľ, 2006–2009.
9. FP6-EU, Contract No. IST 507231, *SENSATION: Advanced Sensor Development for Attention, Stress, Vigilance & Sleep/Wakefulness Monitoring*, **zodpovedný riešiteľ** 2 pracovných balíkov, 2004–2008.
10. NASA CICT/ITSR & NASA IS/HCC, *Development of Brain-Computer interface Protocols*, riešiteľ, 2001–2004.
11. NASA IS/HCC, *Mental Fatigue Monitoring*, riešiteľ, 2001–2004.

Aplikačné výstupy

1. Dizajn a konštrukcia VR-BCI systému pre použitie v klinickej neurorehabilitácii, Ústav merania SAV, 2017–2020.
2. Dizajn a konštrukcia BCI robotickej dlahy pre použitie v klinickej neurorehabilitácii, Ústav merania SAV, 2013–2017.
(<http://aiolos.um.savba.sk/~roman/rrLab/>).

3. GUI systém spracovania signálu a algoritmov strojového učenia na analýzu EEG dát v prostredí MATLAB® (APECSgui), Pacific Development and Technology, LLC, 2011–2016.
4. Počítačový systém na súčasné spracovanie signálov EEG a pohybu očí v reálnom čase (EETrac), US Army Research Office, 2008–2009.
5. Konštrukcia BCI systémov na princípe mentálnej predstavy pohybu a SS-VEP, NASA Ames Research Center, 2001–2004.

Summary

The presented dissertation thesis deals with the issue of mathematical and computer modeling of brain functionality. It is composed of three book chapters [RR-1, RR-2, RR-4] and six author's major articles dealing with the topic [RR-3, RR-5] to [RR-9].

Thematically, the work deals with two interrelated areas of using models of applied mathematics and statistics, as well as computer modeling, in the analysis of electroencephalographic (EEG) data. Their common element is the existence of a latent, not directly measurable, data structure, or a latent brain process generating directly observed and measured EEG waveforms on the surface of the head. The goal of both approaches is a better understanding of brain functionality.

The first area is represented by the development and applicability of latent models for two-dimensional and tensor data structures. The proposal of nonlinear kernel learning methods of regression, classification and modeling and their systematic and comprehensive study represent the author's contribution into the field of applied mathematics and machine learning [RR-1, RR-2, RR-4]. The application of the methods in the field of neurophysiology, more precisely, the applicability of latent data structure models in EEG analysis is addressed in [RR-3, RR-7, RR-9].

The design and applicability of probabilistic graphical models for modeling of the sleep process create the second area of the latent modeling of brain functionality [RR-5, RR-6]. The proposed probabilistic sleep model leads to the creation of specific continuous sleep profiles allowing a better way of modeling sleep dynamics. Work [RR-8] represents a further extension of the sleep process representation by combining steps of clustering and time synchronization of sleep profiles by means of functional data analysis. Clinical validation of the developed methods and models was studied in [RR-6, RR-8].

The aim of the dissertation is to demonstrate the theoretical and practical contribution of the author to the extension of the field of mathematical modeling and analysis of brain functionality.

Zusammenfassung

Die vorgelegte Dissertation befasst sich mit der mathematischen und Computer-Modellierung der Gehirnfunktionalität. Es besteht aus drei Buchkapiteln [RR-1, RR-2, RR-4] und sechs relevanten Artikeln des Autors, die sich mit dem Thema befassen [RR-3, RR-5] bis [RR-9].

Thematisch befasst sich die Arbeit mit zwei miteinander verbundenen Bereichen der Verwendung von Modellen der angewandten Mathematik und Statistik, sowie der Computermodellierung bei der Analyse elektroenzephalographischer Da-

ten (EEG). Ihr gemeinsames Element ist die Existenz einer latenten, nicht direkt messbaren Datenstruktur oder eines latenten Gehirnprozesses, der die direkt beobachteten und gemessenen EEG-Wellenformen auf der Kopfoberfläche generiert. Das Ziel beider Ansätze ist eine verbesserte Einsicht in die Gehirnfunktionalität.

Der erste Bereich wird durch die Entwicklung und Anwendbarkeit latenter Modelle für zweidimensionale Strukturen und Tensordatenstrukturen repräsentiert. Der Vorschlag nichtlinearer Kernel-Lernmethoden der Regression, Klassifizierung und Modellierung sowie auch ihr systematisches und umfassendes Studium stellt den Beitrag des Autors auf dem Gebiet der angewandten Mathematik und des maschinellen Lernens [RR-1, RR-2, RR-4] dar. Die Anwendung der Methoden auf dem Gebiet der Neuropsychologie, genauer gesagt, die Anwendbarkeit der latenten Datenstrukturmodelle in der EEG-Analyse, wurde in den Artikeln [RR-3, RR-7, RR-9] behandelt.

Das Design und die Anwendbarkeit probabilistischer Graphikmodelle für Modellierung des Schlafprozesses bilden den zweiten Bereich der latenten Modellierung der Gehirnfunktionalität [RR-5, RR-6]. Das vorgeschlagene probabilistische Schlafmodell führt zur Erstellung spezifischer kontinuierlicher Schlafprofile, die eine bessere Modellierung der Schlafdynamik ermöglichen. Das Werk [RR-8] stellt eine nachfolgende Erweiterung der Darstellung des Schlafprozesses dar, in dem Clustering-Schritte und Zeitsynchronisation von Schlafprofilen mittels Funktionsdatenanalyse kombiniert werden. Die klinische Validierung der entwickelten Methoden und Modelle werden in den Artikeln [RR-6, RR-8] untersucht.

Das Ziel der Dissertation ist es, den theoretischen und praktischen Beitrag des Autors zur Erweiterung des Feldes der mathematischen Modellierung und Analyse der Gehirnfunktionalität aufzuzeigen.