

温度の効果を用いた自己組織化状態空間モデルによる 潜在変数とパラメータの推定

Simultaneous Estimation of Latent Variables and Parameters
Using Self-Organizing State Space Model with Temperatures

井上 広明[†]
Hiroaki Inoue

大森 敏明[†]
Toshiaki Omori

1. はじめに

状態空間モデルは潜在変数の存在を仮定した汎用的な時系列モデルで、時系列予測や潜在変数の推定などに用いられている[1, 2, 3]. さらに、状態空間モデルを拡張した自己組織化状態空間モデルが提案されており、潜在変数とパラメータを同時に推定するために様々な分野で応用されている[2]. しかしながら、自己組織化状態空間モデルによる推定結果は推定の初期分布に強く依存し、初期分布次第では正確な推定が行えない場合が存在する.

本研究では、自己組織化状態空間モデルに温度に対応する潜在変数を導入することで初期分布への依存性を改善する方法を提案する. 提案手法では潜在変数の一部として温度の時間変化を考慮することで、局所解が存在しているような問題においても局所解を抜け出し、大域的な推定を実現する. さらに、本研究では、数値実験データを用いた検証実験により、提案手法が従来手法の初期分布への依存性を改善することを示す.

2. 提案手法

本研究では、自己組織化状態空間モデルに温度に対応する潜在変数を導入した新たなモデルを構築する. さらに、構築したモデルに粒子フィルタ[2, 3]を応用することで、従来手法の初期分布への依存性を改善し、潜在変数とパラメータを正確に同時推定する方法を提案する.

2.1. 温度を導入した自己組織化状態空間モデル

温度を導入した自己組織化状態空間モデルのグラフィカルモデルを図1に示す. 従来の自己組織化状態空間モデルではシステムモデルとして潜在変数 $z_{1:N}$ と同時にパラメータ $\Theta_{1:N}$ の時間発展を表現していたのに対し、提案手法ではさらに温度 $T_{1:N}$ の時間発展を考慮している. このように温度 $T_{1:N}$ の時間発展を考慮し高温状態を経由可能とすることで、局所解を抜け出し大域的な推定を行うことが可能となる.

システムモデルについて、タイムステップ n における温度 T_n は次の遷移確率に従うとする.

$$p_{\text{tem}}(T_n | T_{n-1}) \quad (1)$$

さらに、パラメータ Θ_n と潜在変数 z_n の遷移確率は、それぞれ従来の自己組織化状態空間モデルの遷移確率 $p(z_n | z_{n-1}, \Theta_n)$ と $p(\Theta_n | \Theta_{n-1})$ を用いて次のように表現される.

$$p_{\text{tem}}(\Theta_n | \Theta_{n-1}, T_n) \propto p(\Theta_n | \Theta_{n-1})^{\frac{1}{T_n}} \quad (2)$$

$$p_{\text{tem}}(z_n | z_{n-1}, \Theta_n, T_n) \propto p(z_n | z_{n-1}, \Theta_n)^{\frac{1}{T_n}} \quad (3)$$

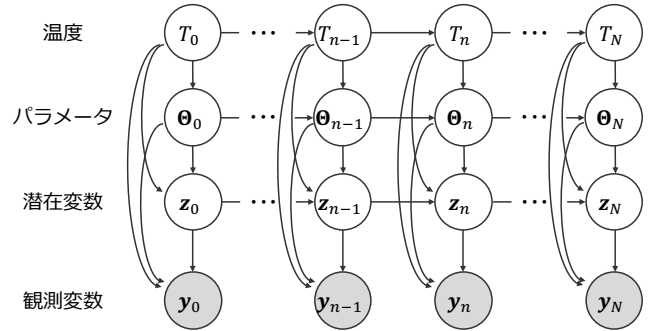


図 1. 温度を導入した自己組織化状態空間モデルのグラフィカルモデル.

温度 T_n を導入することで、高温の状態においては従来の自己組織化状態空間モデルと比較して分布がなだらかな形状を持ち、粒子フィルタにおける粒子が広い範囲を探索しやすくなる.

次に、タイムステップ n における観測モデル $p_{\text{tem}}(y_n | z_n, \Theta_n, T_n)$ を潜在変数 z_n 、パラメータ Θ_n 、温度 T_n を用いて次のように表現する.

$$p_{\text{tem}}(y_n | z_n, \Theta_n, T_n) \propto p(y_n | z_n, \Theta_n)^{\frac{1}{T_n}} \quad (4)$$

ここで、 $p(y_n | z_n, \Theta_n)$ は従来の自己組織化状態空間モデルにおける観測モデルである. このように温度 T_n を導入することで、システムモデルと同様に高温の状態においては分布がなだらかな形状を持つ. 提案手法では温度の時間発展を考慮し低温から高温まで遷移可能とすることで、高温状態を経由した上で低温状態に戻ることで、初期分布に依存せず正確な推定を行うことが可能となる.

2.2. 潜在変数とパラメータの同時推定

提案手法では、2.1節で定式化したモデルに対し粒子フィルタを用いることで、潜在変数 $z_{1:N}$ とパラメータ $\Theta_{1:N}$ の同時推定を実現する.

粒子フィルタでは潜在変数 $z_{1:N}$ 、パラメータ $\Theta_{1:N}$ 、温度 $T_{1:N}$ の実現値を持つ粒子と呼ばれるサンプルを各時刻ごとに逐次的に生成し、粒子の密度で同時事後分布 $p_{\text{tem}}(z_{1:N}, \Theta_{1:N}, T_{1:N} | y_{1:N})$ を近似する[2, 3]. タイムステップ n において、各粒子は式(1)-(3)を用いて次のようにサンプルされる.

$$T_n^{(i)} \sim p_{\text{tem}}(T_n^{(i)} | T_{n-1}^{(i)}) \quad (5)$$

$$\Theta_n^{(i)} \sim p_{\text{tem}}(\Theta_n^{(i)} | \Theta_{n-1}^{(i)}, T_n^{(i)}) \quad (6)$$

$$z_n^{(i)} \sim p_{\text{tem}}(z_n^{(i)} | z_{n-1}^{(i)}, \Theta_n^{(i)}, T_n^{(i)}) \quad (7)$$

ここで i は粒子番号である. 次に、サンプルされた各粒子に

[†]神戸大学 大学院工学研究科, Graduate School of Engineering, Kobe University

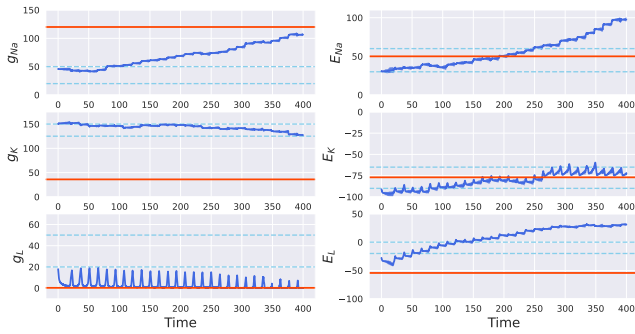


図 2. 従来手法によるパラメータの推定結果. 各図は縦軸がパラメータの値, 横軸が時間を表しており, 青いエリアが推定分布, 赤の実線が真のパラメータの値, 水色の点線が初期分布の範囲を示している.

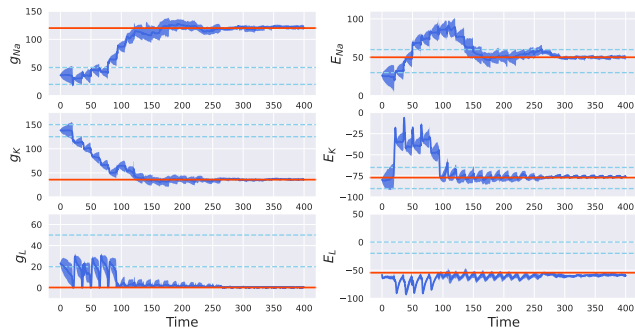


図 3. 提案手法によるパラメータの推定結果. 温度を導入した効果により, 従来手法の結果 (図2) と同様の初期分布を用いているにも関わらず正確な推定が実現できている.

対し, 式(4)を用いて次の通り重みを計算する.

$$w_n^{(i)} = p_{\text{tem}} \left(\mathbf{y}_n \mid \mathbf{z}_n^{(i)}, \Theta_n^{(i)}, T_n^{(i)} \right) \quad (8)$$

さらに, 計算した重みを正規化し, 正規化した重みに基づいて粒子をリサンプリングする. これらの処理を各タイムステップごとに行うことで, 逐次的に潜在変数 $\mathbf{z}_{1:N}$, パラメータ $\Theta_{1:N}$, 温度 $T_{1:N}$ を推定することが可能となる.

3. 実験

本節では, 数値実験データを用いた検証実験を行い, 提案手法の有効性を確認する. まず, 神経細胞の膜電位にノイズが重畳したデータのみが観測される状況を想定し, 神経細胞の数理モデルである Hodgkin-Huxley モデル [2] に従って数値実験データを生成する. さらに, 生成した観測値のみを用いて潜在変数とパラメータの同時推定を行うことで, 従来の自己組織化状態空間モデルによる推定結果と提案手法の推定結果の比較を行う.

従来の自己組織化状態空間モデルを用いて, ノイズが重畳した膜電位のみからパラメータであるナトリウム電流, カリウム電流, 漏れ電流のコンダクタンス g_{Na} , g_{K} , g_{L} と反転電位 E_{Na} , E_{K} , E_{L} を推定した結果を図2に示す. 各図において, 縦軸がパラメータの値, 横軸が時間を表しており, 青いエリアが推定分布, 赤の実線が真のパラメータの値, 水色の点線が初期分布の範囲を示している. 一部のパラメータの初期分布が真のパラメータの値から離れすぎていることからほとんどのパラメータが真の値にたどり着けて

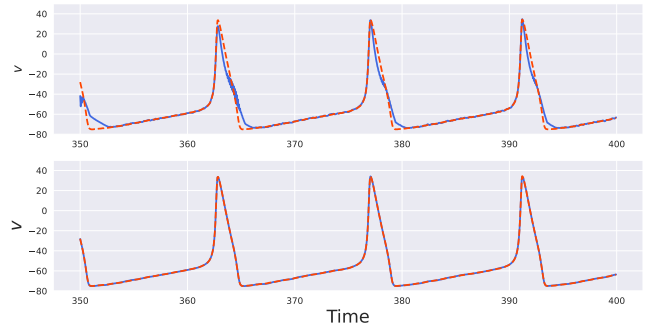


図 4. 従来手法 (上) と提案手法 (下) の膜電位の推定結果. 赤色の破線が真の値, 青色の実線が推定結果を表している.

おらず, ナトリウム電流と漏れ電流の反転電位 E_{Na} , E_{L} については時間が経過するにつれてより離れてしまっている.

次に, 提案手法によるパラメータの推定結果を図3に示す. 提案手法では温度を考慮し, 高温状態での大域的な探索が可能となっていることから, 従来手法と同様の初期分布から推定しているにも関わらず, 初期分布に依存せず真のパラメータの推定が実現できている.

さらに, 潜在変数の一つである膜電位の推定結果を図4に示す. 上図が従来手法による推定結果, 下図が提案手法の推定結果を示しており, 赤色の破線が真の値, 青色の実線が推定結果を表している. 従来手法の結果に比べ提案手法の結果はスパイクタイミングだけでなくその形状も含め正確に膜電位的非線形な動きを捉えられていることが確認できる.

4. まとめ

本研究では, 温度を導入することで自己組織化状態空間モデルの初期分布への依存性を改善する手法を提案した. 提案手法では潜在変数の一部として温度を導入し, 温度の時間発展を考慮することで高温状態の大域的な探索と低温状態での正確な探索の両方を実現している. さらに, 本研究では Hodgkin-Huxley モデルを用いた検証実験を行い, 提案手法を用いることで従来手法の初期分布への依存性を改善可能であることを示した.

謝辞

本研究の一部は, 文部科学省科学研究費補助金 若手研究 [No. JP22K17967], 基盤研究 (B) [No. JP21H3509], 国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化), 国立研究開発法人科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST [Nos. JPMJCR1755, JPMJCR1861, JPMJCR1914], 国立研究開発法人日本医療研究開発機構 脳とこころの研究推進プログラム (領域横断的かつ萌芽的脳研究プロジェクト) の支援のもとで行われた.

参考文献

- [1] Vavoulis, D. V., Straub, V. A., Aston, J. A., and Feng, J., *PLoS Comput. Biol.* **8**, e1002401 (2012)
- [2] Rangapuram, S. S., Seeger, M. W., Gasthaus, J., Stella, L., Wang, Y., and Januschowski, T., *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* **31** (2018)
- [3] Inoue, H., Hukushima, K., and Omori, T., *Entropy* **24**, 115 (2022)