

高階マルコフ性のシステムに対する新たなデータ同化手法の提案 A New Data Assimilation Method for Higher-Order Markovian Systems

齋藤 元滋¹⁾ 吉田 司¹⁾ 西村 友洋¹⁾ 横谷 暢斗¹⁾
Saito Genji Yoshida Tsukasa Nishimura Tomohiro Yokoya Masato

上野 磯生¹⁾ 北原 亮¹⁾ 森 航哉¹⁾
Ueno Isoo Kitahara Ryo Mori Koya

1 はじめに

我々は人の行動を始めとした非マルコフ性のシステムのデジタルツインの実現を目指している。非マルコフ性のシステムとは、そのシステムの将来状態が現在状態だけでなく、過去状態の履歴にも依存するようなシステムであり、人の行動は非マルコフ性の現象であることが指摘されている [1]。一方でデジタルツイン [2] とは、現実世界の双子をデジタル空間上に構築する技術の総称である。過去/現在の状態をデジタル空間上に再現することで、シミュレーション的に将来の状態を予測することに用いられる。

しかし、現実世界をシミュレーションする場合、モデル誤差、観測誤差、計算誤差などの影響により、現実世界の時間発展プロセスである真のダイナミクスとシミュレーションとの間には誤差が生じる。このような問題に対し、真のダイナミクスからの観測結果でシミュレーションを補正する方法としてデータ同化 [3] が存在する。しかし、パーティクルフィルタを代表とするデータ同化手法は予測時に将来状態が現在状態のみに依存して決まるというマルコフ仮定を課しているため、真のダイナミクスが非マルコフ性を持つ場合、直接的に扱えず、適用が困難になる問題がある。

本研究では、人の行動を始めとした非マルコフ性のシステムにデータ同化を適用させてデジタルツインを実現するため、高階マルコフ性（非マルコフ性）に従うシステムを対象にしたデータ同化手法を提案する。提案手法では、有向グラフ上で記述されるシステムを対象に重み付き有向グラフ表現による高階マルコフ性モデルを用いることで、ベイズフィルタ [4] のマルコフ仮定を高階マルコフ仮定へと拡張する。評価実験では道路ネットワーク上の人の移動のシミュレータによる予測実験により、パーティクルフィルタと比べて提案手法の予測精度が高いことを示す。

2 関連研究

2.1 データ同化技術とベイズフィルタ

データ同化はナッジング [5] を代表とする古典的手法と、ベイズ統計に基づく手法に二分される。前者は観測と予測と真のダイナミクスとの誤差が既知（もしくは経験的に人が決める）ことを前提としているが、本研究ではそれらの誤差は未知と仮定するため後者を扱う。

まずはベイズフィルタの概要を簡潔に述べる。各時刻の観測を z_t 、状態を x_t とおいたときの、予測分布 $p(x_t|z_{1:t-1})$ 、フィルタリング分布 $p(x_t|z_{1:t})$ 、平滑化分布 $p(x_t|z_{1:T})$ 、 $T > t$ と呼ばれる条件付き分布を推定する問題が状態推定問題と呼ばれている。その中でベイズフ

ルタで扱うのは主に予測分布とフィルタリング分布についてである。予測分布は、1 ステップ前のフィルタリング分布の各成分をシステムモデルと呼ばれる $p(x_t|x_{t-1})$ の条件付き確率で時間発展させたものを足し合わせて計算され、フィルタリング分布は、予測分布の各成分に観測モデルと呼ばれる $p(z_t|x_t)$ の条件付き確率を掛け合わせて計算される。

続いて、ベイズフィルタの実装方法で代表的なものを 4 点紹介し、特徴と問題点を述べる。1) カルマンフィルタ [6] は、システムモデルと観測モデルに線形・ガウス型を仮定した手法であり、解析的に計算が可能なのが特徴であるが、正規分布に従う分布しか扱えないので本研究では取り扱わない。2) 拡張カルマンフィルタ [7] は、システムモデルに非線形、観測モデルに線形・ガウス型を仮定した手法であり、システムモデルを線形近似することで、カルマンフィルタと同様に予測・フィルタリング分布を計算する手法である。本研究では、観測モデルの従う分布の形状は未知であると仮定するため取り扱わない。3) アンサンブルカルマンフィルタ [8] は、システムモデルと観測モデルに拡張カルマンフィルタと同じ仮定を置いた手法であり、予測分布はモンテカルロ近似により数値計算され、フィルタリング分布はカルマンフィルタ同様に解析的に計算される。本研究では、観測モデルの従う分布の形状は未知であると仮定するため取り扱わない。4) パーティクルフィルタ [9] は、システムモデルと観測モデルに非線形を仮定した手法であり、予測分布はアンサンブルカルマンフィルタ同様にモンテカルロ近似により数値計算され、フィルタリング分布についてもモンテカルロ近似により数値計算される。フィルタ分布の近似時に粒子の復元抽出が行われる点の特徴であり、分布の形状に制約がなく、多峰性の確率分布も表現可能である。一方で、復元抽出に伴い、状態空間の大きさが拡大した場合に、粒子の退化が発生するという問題がある。分布の形状に制約がないことから、後述する人の行動に対してデータ同化を適応させた先行研究 [10, 11, 12] において用いられているため、本研究では比較手法として取り扱う。

2.2 人の行動に対するデータ同化技術適用

人の行動に対してデータ同化を適応させる先行研究には [10, 11, 12] などがある。これらは MAS (Multi-Agent Simulation) による移動予測に対してパーティクルフィルタを適応させたものであり、マルコフ仮定を用いてモデル化されている。しかし、人の行動は将来状態が過去の履歴に依存する非マルコフ性の現象であることが指摘されており [1]、現象とデータ同化手法の仮定にはギャップが存在する。

近年の機械学習分野の発展により、RNN (Recurrent

1) NTT Computer and Data Science Laboratories

neural network) [13], LSTM (Long short-term memory) [14], Transformer [15] などの、履歴依存の関係性といった高階マルコフ性を取り扱える予測モデルが登場し、自然言語をはじめとした人の非マルコフ性の現象に対する高い予測精度を持つことが報告されている [16]. さらに、人の行動についてもグラフ構造を用いた高階マルコフモデルで予測することが可能となりつつある [17]. 本研究では [17] の考え方を利用し、高階マルコフモデルに対応できるデータ同化手法を提案する.

3 対象システムとその表記

対象とするシステムについて説明する. 本研究で取り扱う部分観測決定過程のグラフィカルモデルは図 1 で表される.

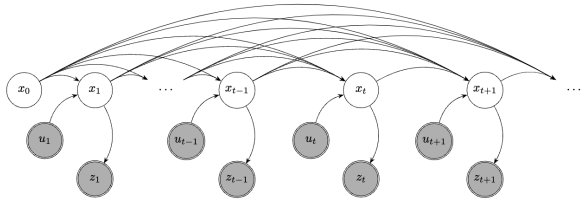


図 1: 本研究で扱うシステムのグラフィカルモデル. x_{t-1} から x_t への状態遷移において, 変数 $x_{t-k}, x_{t-k+1}, \dots, x_{t-1}, u_t$ が関与する. 図は $k = K (K > t + 1)$ の場合を示している.

まず, システムの動作の概要を述べる. 時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ における状態, 制御, 観測をそれぞれ $x_t \in \mathbb{R}^{d_x}, u_t \in \mathbb{R}^{d_u}, z_t \in \mathbb{R}^{d_z}$ と表記する. ここで, $d_x, d_u, d_z \in \mathbb{Z}_{\geq 1}$ である. このダイナミクスではステップ t で制御 u_t が加わると, モデルの内部状態が x_{t-1} から x_t へと遷移し, 遷移後に観測 z_t を得る. このとき, 変数 z_t, u_t は観測可能な量であり, 変数 x_t は観測不可能である.

次に変数の依存関係について述べる. このシステムにおける状態遷移確率 (状態遷移モデル), 観測確率 (観測モデル) は, 最も一般的に記すと $p(x_t | x_{0:t-1}, z_{1:t-1}, u_{1:t}), p(z_t | x_{0:t}, z_{1:t-1}, u_{1:t})$ で与えられる. ここで $a_{1:t'} = (a_t, a_{t+1}, a_{t+2}, \dots, a_{t'})$ である. 一般に 1 階マルコフ性を仮定するベイズフィルタでは次の仮定を置く:

$$\begin{cases} p(x_t | x_{0:t-1}, z_{1:t-1}, u_{1:t}) = p(x_t | x_{t-1}, u_t) \\ p(z_t | x_{0:t}, z_{1:t-1}, u_{1:t}) = p(z_t | x_t) \end{cases} \quad (1)$$

一方で本研究では状態遷移確率に対し, 次の k 階マルコフ性を仮定する:

$$\begin{cases} p(x_t | x_{0:t-1}, z_{1:t-1}, u_{1:t}) = p(x_t | x_{t-k:t-1}, u_t) \\ p(z_t | x_{0:t}, z_{1:t-1}, u_{1:t}) = p(z_t | x_t) \end{cases} \quad (2)$$

このシステムにおいて, ベイズフィルタの基本構成要素である観測 z_t に対する事前分布 pri と事後分布 post を次の式で定義する:

$$\text{pri}(x_t) \stackrel{\text{def}}{=} p(x_t | z_{1:t-1}, u_{1:t}) \quad (3)$$

$$\text{post}(x_t) \stackrel{\text{def}}{=} p(x_t | z_{1:t}, u_{1:t}) \quad (4)$$

4 提案手法

本章では, 提案手法である高階マルコフグラフベイズフィルタ (Higher-Order Markovian Graph Bayesian Filter: HOMG-BF) のアルゴリズムについて記述する. 本手法は通常のベイズフィルタの考え方を基にしており, 道路ネットワーク上の人の移動シミュレーションに対するデータ同化を行うための具体的なベイズフィルタの構成法を与える.

まず, 近似事前信念関数について説明する. ベイズフィルタを用いる場合には前述の pri, post の計算が必要になる. 式 (2) の仮定を用いた場合, post の計算式は 1 階マルコフ性を仮定したシステムにおける式と同様になるが, 一方で pri の計算は困難になる. そこで状態 x_t が $(x_{t-k}, x_{t-k-1}, \dots, x_{t-1})$ および u_t によって定まるという性質から, 本研究では $\text{pri}(x_t)$ を次の引数をもつ関数 f によって近似する:

$$\mathcal{P}_t^k \stackrel{\text{def}}{=} \{\text{post}(x_{t-k}), \text{post}(x_{t-k-1}), \dots, \text{post}(x_{t-1})\} \quad (5)$$

$$\text{pri}(x_t) \approx f(\mathcal{P}_t^k, u_t) \quad (6)$$

本論文ではこの f を近似事前信念関数と呼ぶ.

次に, 道路ネットワーク上の人の移動シミュレーションに対するデータ同化のために, グラフ上での近似事前信念関数の具体的な構成について説明する. 頂点 $v^i \in \mathcal{V}$, 有向辺 $e_{i \rightarrow j} \in \mathcal{E}$, 有向辺の重みを与える関数 w から成る重み付き有向グラフ $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, w)$ を考える. 有向グラフの頂点数を $n = |\mathcal{V}|$, 辺数を $m = |\mathcal{E}|$ とする. グラフの頂点上を人が移動するシステムに対して, 人の移動予測を行うことを考える. このとき, 状態 x_t は頂点 v^i のいずれかである.

HOMG-BF ではこのシステムに対して近似事前信念関数を次のように定義する:

$$f(\mathcal{P}_t^k, u_t) = W(w, \mathcal{P}_t^k, u_t) \tilde{\text{post}}(\mathcal{P}_t^k) \quad (7)$$

ここで W は $(w, \mathcal{P}_t^k, u_t)$ から構成される重み行列であり, $\tilde{\text{post}}(x_t)$ は各状態 v^i に対しての確率値を並べたベクトルであり, \mathcal{P}_t^k から構成される. すなわち, 現状態の情報を含む事後信念 \mathcal{P}_t^k から, 有向辺についた重み w に従って次の状態が決まり, その重み w が (\mathcal{P}_t^k, u_t) の関数であるように設計する.

以上をまとめた提案手法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す.

Algorithm 1 HOMG-BF

Input: $u_t, z_t, \mathcal{P}_t^k$

Output: \mathcal{P}_{t+1}^k

- 1: **if** z_t is given **then**
- 2: $\text{pri}(x_t) \leftarrow W(w, \mathcal{P}_t^k, u_t) \tilde{\text{post}}(\mathcal{P}_t^k)$
- 3: $\text{post}(x_t) \leftarrow \eta p(z_t | x_t) \text{pri}(x_t)$
- 4: **else**
- 5: $\text{pri}(x_t) \leftarrow W(w, \mathcal{P}_t^k, u_t) \tilde{\text{post}}(\mathcal{P}_t^k)$
- 6: $\text{post}(x_t) \leftarrow \text{pri}(x_t)$
- 7: **end if**

特に, 本手法ではデータ同化手法の利用者が仮定する状態遷移モデル $p(x_t | x_{t-k:t-1}, u_t)$ と, $W(w, \mathcal{P}_t^k, u_t) \tilde{\text{post}}(\mathcal{P}_t^k)$ を同一のものとして取り扱う. すなわち, 提案手法は

pri をグラフ構造から定義された状態遷移モデルによって直接近似する：

$$\text{pri}(x_t) \approx p(x_t | x_{t-k:t-1}, u_t) = W(w, \mathcal{P}_t^k, u_t) \tilde{\text{post}}(\mathcal{P}_t^k) \quad (8)$$

5 検証実験

本章では、4章で示した提案手法の HOMG-BF の予測精度に関して検証を行う。

5.1 実験条件

本節では、5節の実験で用いた条件の詳細を記述する。一般にデータ同化を使用する際、状態遷移モデルおよび観測モデルを構成しなければならないが、真の状態遷移モデルや観測モデルがあらかじめ与えられることは少ない。そこで実験では**真の状態遷移モデル、真の観測モデル、仮定する状態遷移モデル、仮定する観測モデル**の4つを用意し、検証を行う。これらの定義を5.1.1節及び5.1.2節に示す。また、使用するグラフ構造と人移動の出発地・目的地の構成を5.1.3節で述べる。

真の状態遷移モデルは後述する3階マルコフ性に従うモデルである式(19)を、真の観測モデルは式(22)を用いる。一方で仮定する状態遷移モデルは、1階、2階、3階のマルコフ性に従うモデルとしてそれぞれ式(9)、(16)、(19)を用い、仮定する観測モデルには式(23)を用いる。各モデルの設定値は $\theta = 0.5$, $\theta_{\text{obs}} = 1.0$, $\theta_{\text{noise1}} = 0.5$, $\theta_{\text{noise2}} = 0.3$ を用いる。

比較手法としてパーティクルフィルタ (PF) を用い、提案手法のデータ同化の性能を比較する。真の状態遷移モデルから得られる状態遷移結果の確率分布と予測した事後分布の誤差を評価する。誤差の評価には分布間尺度である KL divergence (KL) [18], JS divergence (JS) [19], Wasserstein distance (Wd) [20] を用いる。各設定で 20 回繰り返し実験を行い、その平均値を算出する。

PF は k 階マルコフ性のモデルに直接対応できないため、状態の定義を変更することで1階マルコフ性の形式に変換して用いる (付録 A 参照)。粒子数は 100, 500, 1000 で実験を行う。PF の初期分布には一様分布を用いる。

5.1.1 状態遷移モデルの定義

ここでは真の状態遷移モデル、仮定する状態遷移モデルとして利用するモデルを定義する。目的地 v_{target} への最短経路となる v_i の隣接頂点を v_{shortest} 、頂点 v_i の次数を $d_{v_i} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ と記述する。今後、ベクトル $\tilde{\text{post}}(x_t) \stackrel{\text{def}}{=} (\text{post}(v_1), \text{post}(v_2), \dots, \text{post}(v_n))^T$ を略記して $\text{post}(x_t)$ と記述する。

1 階マルコフモデル

有向辺の重みは式(11)で定義し、状態遷移行列は式(10)、近似事前信念関数は式(9)で定義する：

$$f(\mathcal{P}_t^1, u_t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{P}_G \text{post}(v_{t-1}) \quad (9)$$

$$[\mathbf{P}_G]_{v_i, v_j} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} w(e_{i \rightarrow j}) & \text{if } e_{i \rightarrow j} \text{ is exist} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

$$w(e_{i \rightarrow j}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \theta & \text{if } v_j = v_{\text{shortest}} \\ \frac{1-\theta}{d_{v_i}-1} & \text{if } v_j \neq v_{\text{shortest}} \text{ and } d_{v_i} > 1 \end{cases} \quad (11)$$

ここで、 $\theta \in (0, 1)$ は定数である。

2 階マルコフモデル

前のステップで訪れた頂点に戻れないという non-backtracking 条件を加える。有向辺の重みは1階マルコフモデルと同様に式(11)で定義する。 $\tau \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ を用いて v_τ から $v_{\tau+1}$ への有向辺を \vec{e}_τ 、 v_τ から $v_{\tau-1}$ への有向辺を \overleftarrow{e}_τ と定義し、状態遷移確率を以下で定義する：

$$p_\tau \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} w(\vec{e}_\tau) & \text{if } \tau = t \\ \frac{w(\vec{e}_\tau)}{1 - w(\overleftarrow{e}_\tau)} & \text{if } \vec{e}_\tau \neq \overleftarrow{e}_\tau \text{ and } \tau > t \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

[21] に従い、状態遷移行列を式(14)の $m \times m$ の non-backtracking 行列で定義し、 $m \times n$ の行列 \mathbf{B}_G を式(15)で定義することで、 $\text{post}(x_{t-2})$ の2ステップ後の重み付き有向グラフ上の non-backtracking random walk の周辺分布 $\text{post}(x_t)$ は式(13)の形式で表される：

$$\text{post}(x_t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{B}_G^+ \mathbf{P}_G^2 \mathbf{B}_G \text{post}(x_{t-2}) \quad (13)$$

$$[\mathbf{P}_G]_{e_{i \rightarrow j}, e_{k \rightarrow l}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{if } j \neq k \text{ or } i = l \\ \frac{w(e_{k \rightarrow l})}{1 - w(e_{k \rightarrow i})} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (14)$$

$$[\mathbf{B}_G]_{e_{i \rightarrow j}, k} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{if } k \neq i \\ w(e_{k \rightarrow j}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (15)$$

ここで \mathbf{B}_G の特殊なスパース構造により、擬似逆行 \mathbf{B}_G^+ は正規化までは \mathbf{B}_G^T に等しい。したがって、計算量は辺数 m と予測ステップ数 h の数に対して線形 $O(mh)$ となる。ただし、 h は \mathbf{P}_G^h に対応する。

これらを用いて、 $f_e(\text{post}(x_{t-1}), \text{post}(x_{t-2}))$ を式(17)、 $m \times n$ の行列 \mathbf{B}'_G を式(18)で定義し、近似事前信念関数を式(16)で定義する：

$$f(\mathcal{P}_t^2, u_t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{B}_G^+ \mathbf{P}_G f_e(\text{post}(x_{t-1}), \text{post}(x_{t-2})) \quad (16)$$

$$f_e(\text{post}(x_{t-1}), \text{post}(x_{t-2})) \stackrel{\text{def}}{=} \eta (\mathbf{B}_G \text{post}(x_{t-1})) \odot (\mathbf{B}'_G \text{post}(x_{t-2})) \quad (17)$$

$$[\mathbf{B}'_G]_{e_{i \rightarrow j}, k} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{if } k \neq j \\ w(e_{i \rightarrow k}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18)$$

ここで、 η は正規化定数であり、 \odot はアダマール積である。

3 階マルコフモデル

2階マルコフモデルを、 $\text{pri}(x_t)$ の各成分に対して、 $\text{post}(x_{t-3})$ から離れるほど確率が大きくなるようになるように重みづけして拡張する。潜在グラフの有向辺の重みと状態遷移確率は2階マルコフモデルと同様に式(11)、(12)で定義する。 $\text{eu}(\text{post}(x_{t-2}))$ を式(20)で定義

し、近似事前信念関数を式 (19) で定義する：

$$f(\mathcal{P}_t^3, u_t) \stackrel{\text{def}}{=} \eta \text{eu}(\text{post}(x_{t-2})) \odot \mathbf{B}_G^+ \mathbf{P}_G f_e(\text{post}(x_{t-1}), \text{post}(x_{t-2})) \quad (19)$$

$$\text{eu}(\text{post}(x_{t-2})) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_G \text{post}(x_{t-2}) \quad (20)$$

$$[\mathbf{E}_G]_{i,j} \stackrel{\text{def}}{=} v_i \text{ と } v_j \text{ 間のユークリッド距離} \quad (21)$$

ここで、 η は正規化定数であり、式 (21) は $n \times n$ の行列である。

5.1.2 観測モデル $p(z_t|x_t)$ の定義

真の観測モデルに関して、定数 $\theta_{obs} \in (0, 1)$ に対して、確率 θ_{obs} で観測値 z_t を観測し、確率 $1 - \theta_{obs}$ で観測値を得られないものとする。観測値が得られる場合の真の観測モデルを次の式で定義する：

$$p(z_t|v_i) = \begin{cases} v_i & \text{if } k < \theta_{noise1} \\ v \sim \mathcal{B}(v_i) & \text{if } \theta_{noise1} \leq k < \theta_{noise2} \\ v \sim \mathcal{V} \setminus (\mathcal{B}(v_i) \cup v_i) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (22)$$

ここで $\mathcal{B}(v_i)$ は v_i の隣接頂点であり、 $\mathcal{V} \setminus (\mathcal{B}(v_i) \cup v_i)$ は v_i とその隣接頂点を除いたすべての頂点を表す。 $v \sim \mathcal{B}(v_i), v \sim \mathcal{V} \setminus (\mathcal{B}(v_i) \cup v_i)$ はそれぞれの集合の中から等確率で1つ頂点を選ぶ操作を表す。 $\theta_{noise1}, \theta_{noise2} \in \mathbb{R}_{>0}$ は定数であり、 $\theta_{noise1} + \theta_{noise2} \leq 1$, $\theta_{noise1} > \theta_{noise2}$ を満たす。 k は確率変数であり、 $k \sim U(0, 1)$ でサンプリングされる。

一方で、 z_t は任意の分布として、仮定する観測モデルを次の式で定義する：

$$p(z_t|x_t^{(i)}) = \frac{\eta}{\exp(\text{Wd}(z_t, x_t^{(i)}))^2} \quad (23)$$

ここで η は正規化定数であり、 $x_t^{(i)} = \sum_{i=1}^n \delta(x_t - v_i)$ とする。 δ はディラックのデルタ関数である [22]。 $\text{Wd}(z_t, x_t^{(i)})$ は Wasserstein distance であり、このコスト行列は各頂点間の最短経路長を利用する。この定義は群衆、海洋モデルに対するデータ同化研究 [10, 23] における重み付け方法を参考にしており、補正重みが観測と事前分布の各成分との距離尺度の反比例に従うという仮定を用いている。特に z_t が $z_t = \sum_{i=1}^n \delta(z_t - v_i)$ を満たす分布として得られる場合、 Wd は単に z_t と v_i との距離尺度となり、[10, 23] の仮定と一致する。

5.1.3 グラフ構造と人移動の出発地・目的地

簡易的な道路ネットワークとして図2の有向グラフを用いる。実験において出発地点は緑の頂点、目的地は赤の頂点を用いる。

5.2 実験結果

実験の結果を表1に示す。提案手法の HOMG-BF は 1, 2, 3 階のいずれの状態遷移モデルを使用した場合でもすべての評価指標で比較手法の PF を上回っており、提案手法が PF よりも高精度で予測ができることがわかる。

PF は一般に粒子数を増やすと高精度に予測を行うことができるようになるが、表1から今回の実験系では粒

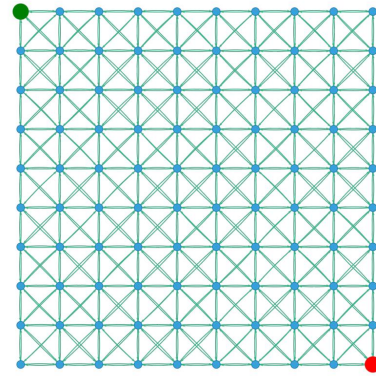


図2: 実験で用いる道路ネットワーク。頂点が 10×10 の格子状に等間隔に配置され、各頂点が近傍と双方向に有向辺で結ばれる。このグラフ上で人が移動するシステムについて予測実験を行う。対角線上の角 (緑, 赤) は人の移動の出発地・目的地として用いる。

子数を増やしてもほぼ性能改善していない。これは PF を適用する際に k 個の状態をまとめて新たな状態を定義したことで、状態空間が大きくなり、大規模な粒子数が必要になっているためだと考えられる。今回取り扱った粒子数の変更は、その状態空間の大きさに対しては、ほんのわずかな変更過ぎないと考えられる。しかしながら粒子数を大きくすると計算時間が多大になるため、取り扱える粒子数には限界がある。

また、PF は仮定する状態遷移モデルを高階のモデルに変えても性能改善がほぼみられない。これは今回実験した粒子数では近似性能が十分でなく、たとえ仮定する状態遷移モデルを真のモデルに近づけても PF の性能が十分でないため、性能差が生まれなかったものだと考えられる。一方で HOMG-BF は仮定する状態遷移モデルを高階のモデルに変えることで、その性能が改善していることがわかる。これにより、HOMG-BF は正しく高階マルコフ性の性質を捉えて予測できていることがわかる。

表1: 真の状態遷移による状態遷移結果の分布と予測結果となる事後分布の差分の時間平均。値が小さいほど真のダイナミクスを正確に予測できている。提案手法ほどの状態遷移モデルを使用した場合でもすべての評価指標で比較手法を上回っている。

手法	仮定する状態遷移モデル	粒子数	KL	JS	Wd
PF	1階: 式(9)	100	1.0702	0.3127	1.2855
PF	1階: 式(9)	500	1.0229	0.2695	1.2136
PF	1階: 式(9)	1000	1.0031	0.2591	1.1970
HOMG-BF	1階: 式(9)	-	0.9640	0.2407	1.1414
PF	2階: 式(16)	100	1.1323	0.3237	1.3171
PF	2階: 式(16)	500	0.9826	0.2572	1.1990
PF	2階: 式(16)	1000	1.0100	0.2589	1.2253
HOMG-BF	2階: 式(16)	-	0.8426	0.2184	0.9952
PF	3階: 式(19)	100	1.1388	0.3373	1.3097
PF	3階: 式(19)	500	0.9880	0.2572	1.2003
PF	3階: 式(19)	1000	0.9712	0.2549	1.1775
HOMG-BF	3階: 式(19)	-	0.8201	0.2126	0.9647

6 おわりに

本研究では、人の行動のような高階マルコフ性の事象を扱う新たなデータ同化手法(高階マルコフグラフベイズフィルタ)を提案し、人の行動のデータ同化の先行研究[10, 12, 11]で用いられるPFと比較を行った。実験では、提案手法のHOMG-BFが比較手法のPFよりも予測精度に優れることを示した。この実験によりPFは使用する粒子数や仮定する状態遷移モデルを増やしてもその予測精度はほぼ上がらないことが確認され、PFの弱点が実験的にも明確となった。

今回はPFに対する粒子数は一部だけであったが、十分に大きな設定を行うことで理論的にはPFの近似性能は上昇する。一方で計算時間が問題となる。そこで今後、提案手法とPFの計算時間に対する比較を行う必要がある。

本論文ではベイズフィルタの構成要素であるpriを近似し、その近似の式を状態遷移モデルで直接代用する方法でその精度が上がるのが明らかになった。一方でpriは本来、状態遷移モデルとは異なる。そのため、priの近似を与える近似事前信念関数を数理的にさらに正しい方法で与えることで、予測精度が改善することが見込まれる。

また、提案手法の有向辺から構成される重み行列 W は、予測対象の行動原理が複雑であったり、未知である場合には定式化は困難となる。一方で、これを解決する方法としてGNN(Graph Neural Networks)を用いて頂点移動を学習する方法が提案されている[17]。我々は今後の展望として、GNNを用いて w をモデル化し、人の行動に関する実データを利用して、高階マルコフグラフベイズフィルタの有用性を実証することを考えている。

参考文献

- [1] Christopher W Lynn and Danielle S Bassett. How humans learn and represent networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 117, No. 47, pp. 29407–29415, 2020.
- [2] Michael Grieves and John Vickers. Digital twin: Mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems. *Transdisciplinary perspectives on complex systems: New findings and approaches*, pp. 85–113, 2017.
- [3] Huizhong Liu, Yaheng Ren, Hang Zhao, Yaoxing Kang, and Lilong Wu. Application research of digital twin technology based on data assimilation method. In *Proceedings of the 2023 International Conference on Power, Communication, Computing and Networking Technologies*, pp. 1–4, 2023.
- [4] Zhe Chen, et al. Bayesian filtering: From kalman filters to particle filters, and beyond. *Statistics*, Vol. 182, No. 1, pp. 1–69, 2003.
- [5] S Lakshminarayanan and John M Lewis. Nudging methods: A critical overview. *Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Applications (Vol. II)*, pp. 27–57, 2013.
- [6] Greg Welch, Gary Bishop, et al. An introduction to the kalman filter. 1995.
- [7] Maria Isabel Ribeiro. Kalman and extended kalman filters: Concept, derivation and properties. *Institute for Systems and Robotics*, Vol. 43, No. 46, pp. 3736–3741, 2004.
- [8] Geir Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using monte carlo methods to forecast error statistics. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, Vol. 99, No. C5, pp. 10143–10162, 1994.
- [9] Neil Gordon. Beyond the kalman filter: Particle filters for tracking applications. In *Fusion 2004: Seventh International Conference on Information Fusion*, 2004.

- [10] Fumiyasu Makinoshima and Yusuke Oishi. Crowd flow forecasting via agent-based simulations with sequential latent parameter estimation from aggregate observation. *Scientific reports*, Vol. 12, No. 1, p. 11168, 2022.
- [11] Akihito Sudo, Takehiro Kashiya, Takahiro Yabe, Hiroshi Kanasugi, Xuan Song, Tomoyuki Higuchi, Shin'ya Nakano, Masaya Saito, and Yoshihide Sekimoto. Particle filter for real-time human mobility prediction following unprecedented disaster. In *Proceedings of the 24th ACM SIGSPATIAL International Conference on Advances in Geographic Information Systems*, pp. 1–10, 2016.
- [12] Jordan Lueck, Jason H Rife, Samarth Swarup, and Nasim Uddin. Who goes there? using an agent-based simulation for tracking population movement. In *2019 Winter Simulation Conference (WSC)*, pp. 227–238. IEEE, 2019.
- [13] Ilya Sutskever, Oriol Vinyals, and Quoc V Le. Sequence to sequence learning with neural networks. *Advances in neural information processing systems*, Vol. 27, , 2014.
- [14] Ralf C Staudemeyer and Eric Rothstein Morris. Understanding lstm—a tutorial into long short-term memory recurrent neural networks. *arXiv preprint arXiv:1909.09586*, 2019.
- [15] Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit, Llion Jones, Aidan N Gomez, Lukasz Kaiser, and Illia Polosukhin. Attention is all you need. *Advances in neural information processing systems*, Vol. 30, , 2017.
- [16] Josh Achiam, Steven Adler, Sandhini Agarwal, Lama Ahmad, Ilge Akkaya, Florencia Leoni Aleman, Diogo Almeida, Janko Al-tenschmidt, Sam Altman, Shyamal Anadkat, et al. Gpt-4 technical report. *arXiv preprint arXiv:2303.08774*, 2023.
- [17] Jean-Baptiste Cordonnier and Andreas Loukas. Extrapolating paths with graph neural networks. In *Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence*, pp. 2187–2194, 2019.
- [18] Solomon Kullback and Richard A Leibler. On information and sufficiency. *The annals of mathematical statistics*, Vol. 22, No. 1, pp. 79–86, 1951.
- [19] Jianhua Lin. Divergence measures based on the shannon entropy. *IEEE Transactions on Information theory*, Vol. 37, No. 1, pp. 145–151, 1991.
- [20] Leonid V Kantorovich. Mathematical methods of organizing and planning production. *Management science*, Vol. 6, No. 4, pp. 366–422, 1960.
- [21] Mark Kempton. Non-backtracking random walks and a weighted ihara’s theorem. *Open Journal of Discrete Mathematics*, Vol. 6, No. 4, pp. 207–226, 2016.
- [22] Paul Adrien Maurice Dirac. *The principles of quantum mechanics*. No. 27. Oxford university press, 1981.
- [23] Jann Paul Mattern, Michael Dowd, and Katja Fennel. Particle filter-based data assimilation for a three-dimensional biological ocean model and satellite observations. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, Vol. 118, No. 5, pp. 2746–2760, 2013.
- [24] RUBIN DB. Using the sir algorithm to simulate posterior distributions. In *Bayesian statistics 3. Proceedings of the third Valencia international meeting, 1-5 June 1987*, pp. 395–402. Clarendon Press, 1988.

A 高階マルコフ過程に対するPFの適用

本研究における実験の比較手法では、PFを用いる。PFは直接的には部分観測マルコフ決定過程(1階マルコフ過程)にしか用いれない。そのため、何らかの調整を施すことで部分観測高階マルコフ決定過程(k 階マルコフ過程)に適用させる必要がある。本研究では、部分観測高階マルコフ決定過程(k 階マルコフ過程)を部分観測

マルコフ決定過程 (1 階マルコフ過程) に変換して扱う。すなわち、取り扱う状態 s_t の定義を変えることによって 1 階マルコフ過程として取り扱う。本節でその適用方法について簡潔に述べる。この PF のアルゴリズムを Algorithm 2 に示す。

Algorithm 2 高階マルコフ過程に適用した PF

Input: $u_t, z_t, \mathcal{X}_{t-1} = \{x'_{t-1|t-1}\}_{m=1}^M$
Output: $\mathcal{X}_t = \{x'_{t|t}\}_{m=1}^M$

- 1: 事後分布のモンテカルロ近似集合 \mathcal{X}_t を空に初期化
- 2: **if** z_t is given **then**
- 3: **for** $m = 1, 2, \dots, M$ **do**
- 4: 各粒子を時間発展: $x'_{t|t-1} \sim p(x'_t | x'_{t-1|t-1}, u_t)$
- 5: 重みの計算: $\beta_t^{(m)} \leftarrow p(z_t | x'_{t|t-1})$
- 6: **end for**
- 7: **for** $m = 1, 2, \dots, M$ **do**
- 8: 重み $\beta_t^{(i)}$ に比例する確率でインデックス $i (1 \geq i \geq M)$ をサンプリング
- 9: \mathcal{X}_t に $x'_{t|t-1}$ を代入
- 10: **end for**
- 11: **else**
- 12: **for** $m = 1, 2, \dots, M$ **do**
- 13: 各粒子を時間発展: $x'_{t|t-1} \sim p(x'_t | x'_{t-1|t-1}, u_t)$
- 14: \mathcal{X}_t に $x'_{t|t-1}$ を代入
- 15: **end for**
- 16: **end if**

まず PF の一般的な構成について述べる。[9] と同様に、確率分布を M 個の粒子 $\{x^{(m)}\}_{m=1}^M$ を用いてモンテカルロ近似し、事前分布の近似粒子を $x_{t|t-1}^{(m)}$ 、事後分布の近似粒子を $x_{t|t}^{(m)}$ と書く。このとき事前分布は $\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \delta(x - x_{t|t-1}^{(m)})$ 、事後分布は $\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \delta(x - x_{t|t}^{(m)})$ と近似できる。事前分布の近似粒子 $x_{t|t-1}^{(m)}$ を用いると、事後分布のモンテカルロ近似は以下で書ける：

$$\text{post}(x_t) \approx \sum_{m=1}^M \beta^{(m)} \delta(x_t - x_{t|t}^{(m)}) \quad (24)$$

$$\beta^{(m)} \stackrel{\text{def}}{=} \eta p(z_t | x_{t|t-1}^{(m)}) \quad (25)$$

この式を各粒子で等しい重みを持つ粒子 $x_{t|t}^{(m)}$ で表現するには、重み $\beta^{(m)}$ で $\{x^{(m)}\}_{m=1}^M$ から M 回の復元抽出を行い、得られた M 個のサンプルを新たに $\{x^{(m)}\}_{m=1}^M$ とすればよい。

続いて、時刻 $t-1$ の事後分布の近似粒子 $x_{t-1|t-1}^{(m)}$ を用いてモンテカルロ近似した時刻 t の事後分布 $\text{post}(x_t) \approx \eta \sum_{m=1}^M p(z_t | x_t) p(x_t | x_{t-1|t-1}^{(m)}, u_t)$ を重点サンプリング [24] の方法に基づき計算をする。 $x_{t-1|t-1}^{(m)}$ をパラメータとして持つ x_t の提案分布 $q(x_t; x_{t-1|t-1}^{(m)})$ からの L 個の独立なサンプルを $\{x_{t-1|t-1}^{(m,1)}, x_{t-1|t-1}^{(m,2)}, \dots, x_{t-1|t-1}^{(m,L)}\}$ とすると、その計算は次の形式で表される：

$$\text{post}(x_t) \approx \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L \beta^{(m,l)} \delta(x_t - x_t^{(m,l)}) \quad (26)$$

$$\beta^{(m,l)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\lambda^{(m,l)}}{\sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L \lambda^{(m,l)}} \quad (27)$$

$$\lambda^{(m,l)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{p(z_t | x_t^{(m,l)}) p(x_t^{(m,l)} | x_{t-1|t-1}^{(m)}, u_t)}{q(x_t; x_{t-1|t-1}^{(m)})} \quad (28)$$

これは m, l に関する二重の和で、 $M \times L$ 個の粒子によるモンテカルロ近似になっている。

ここで k 階マルコフ決定過程に対して PF を適用するために、 k 個の状態組を 1 つにまとめた $x'_t \stackrel{\text{def}}{=} \{x_t, x_{t-1}, \dots, x_{t-k}\}$ を新たな状態空間として定義すると、式 (26), (27), (28) は以下に変形できる：

$$\text{post}(x'_t) \approx \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L \beta^{(m,l)} \delta(x'_t - x_t'^{(m,l)}) \quad (29)$$

$$\beta^{(m,l)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\lambda^{(m,l)}}{\sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L \lambda^{(m,l)}} \quad (30)$$

$$\lambda^{(m,l)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{p(z_t | x_t'^{(m,l)}) p(x_t'^{(m,l)} | x_{t-1|t-1}^{(m)}, u_t)}{q(x'_t; x_{t-1|t-1}^{(m)})} \quad (31)$$

提案分布を $q(x'_t; x_{t-1|t-1}^{(m)}) = p(x'_t | x_{t-1|t-1}^{(m)}, u_t)$ とし、各提案分布からの独立なサンプル数を $L = 1$ として合計 M 個の粒子で事後分布を表現すると、部分観測マルコフ決定過程における PF と同じ形となる。これにより、純粋に PF を適用することができるようになるが、状態空間が非常に大きくなるため、大量の粒子数をもって近似しない限り、その性能は悪化する。