

時空間的相互作用を含む逆イジング問題の近似解法

加藤 紳也¹, 増田 直紀^{1,2}

¹ 東京大学大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻

² 科学技術振興機構 さきがけ

1 神経活動の同時記録と対数線形モデル

近年, 多数の神経細胞の活動を同時に記録する実験手法が急速に発達している. それに伴い, データから集団活動としての特徴を抽出するデータ解析手法の需要が高まっており, 中でも対数線形モデルを用いた方法に注目が集まっている. 細胞集団の活動状態は, 適切な仮定の下で 2 値変数ベクトル $s = (s_i) \in \{\pm 1\}^N$ として表される. ここで扱う対数線形モデルは, 活動状態 s の実現確率を, s_i の多項式について対数線形な指数型分布族として表現する確率モデルである. 先行研究により, 次に示す 2 次の対数線形モデルは, トカゲ網膜, マウス海馬など複数の神経組織の活動状態を精度よく再現することが知られている [2, 4].

$$p(s) = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i + \sum_{i < j} \theta_{ij} s_i s_j - \psi \right\}. \quad (1)$$

しかし, その後の研究により (1) パラメータ推定の計算コストが高く大きな集団を扱えないこと (2) 空間的な高次相互作用を無視していること (3) 時間的な相互作用を無視していることが主な課題として指摘されている [5].

対数線形モデルの推定は, 統計物理学におけるイジングモデルの逆問題となっており, 与えられたモーメントを満たす分布のパラメータを推定する問題である. これは Boltzmann 学習と等価な問題であるため, その基本的な学習アルゴリズムである勾配法が上述の先行研究でも使用されている. しかし, この方法では更新式の計算にモーメントの推定値を求める必要があり, 細胞数に対して指数的な計算量が必要となってしまう. Boltzmann 学習を近似的にだが高速に行う方法がこれまでに複数提案されている [1]. ただ, 時間的, あるいは高次の空間的相互作用をもつような一般の場合について適用できる方法はほとんど知られていない.

そこで本研究では, 時間的相互作用を考慮しない 2 次対数線形モデルの近似推定法として提案された先行研究 [3] の方法を, 高次の空間的相互作用をもつ場合, 時間的相互作用をもつ場合に対しても適用できるように拡張することを目標とした.

2 摂動展開に基づく推定手法の拡張

観測分布 q について, n 次までのモーメント $\langle F_{I_k}(s) \rangle_q$ ($k \leq n$) が与えられているとする. ただし, I_k は k 個の変数を選ぶ添字, F_{I_k} はその積を取る関数をそれぞれ表す. 新

たなパラメータ $\beta \in [0, 1]$ を導入し，次の分布，

$$p(\mathbf{s}; \beta) = \exp \left\{ \sum_{k=1}^n \sum_{I_k} \theta_{I_k}(\beta) F_{I_k}(\mathbf{s}) - \psi(\beta) \right\},$$

$$\text{s.t. } \langle F_{I_k}(\mathbf{s}) \rangle_p = \beta \langle F_{I_k}(\mathbf{s}) \rangle_q + (1 - \beta) \prod_{i \in I_k} \langle s_i \rangle_q \quad (\forall I_k, \forall k \leq n) \quad (2)$$

を考える．ただし， $\langle \cdot \rangle_q$ は観測平均を表す． $p(\mathbf{s}; 1)$ が求めたい分布で， $p(\mathbf{s}; 0)$ は変数間の独立性を仮定する場合である．情報幾何的には， $p(\mathbf{s}; \beta)$ の集合はこの 2 点を結ぶ η -座標系の測地線である． η -座標系と θ -座標系との双対性により， $p(\mathbf{s}; \beta)$ のエントロピーを $S(\beta)$ として， η_{I_k} と θ_{I_k} との間には $\beta = 0$ において次の関係式が成り立つ．

$$\frac{\partial S}{\partial \eta_{I_k}} = -\beta \theta_{I_k}(\beta). \quad (3)$$

式 (3) より， $S(\beta)$ の β についての Taylor 展開が $\{\eta_{I_k}\}$ の多項式として書けるならば，パラメータ θ_{I_k} の推定値が容易に求まる．そこで，Sessak と Monasson が 2 次の対数線形モデルについて行った [3] のと同様の手法により $S(\beta)$ の摂動項を求めた．この方法は， β の値に対する θ -座標の変化を $\beta = 0$ における Taylor 展開で近似するものである．スピングラスにおける Plefka 展開は，高次パラメータを独立変数とするギブス自由エネルギーの摂動展開であるのに対し，ここで展開されるエントロピーの独立変数は観測可能な統計量である．したがって，一度摂動展開を行って方程式を確立すれば，観測値を代入することで簡単にパラメータを推定することができる．摂動展開の結果， β について 2 次までの展開により， θ_{I_k} の推定値が，

$$\hat{\theta}_{I_k}(\beta) = \beta \frac{\langle \prod_{i \in I_k} (s_i - \eta_i) \rangle_q}{\prod_{i \in I_k} (1 - \eta_i^2)} \quad (4)$$

で与えられることを示した．

次に，時間的相互作用を含むような対数線形モデルについての推定手法を提案した．時間的に隣接する 2 状態 s, s' の同時分布 $p(s, s')$ は， $2N$ 個の 2 値変数からなるベクトルについての確率分布である．状態間の遷移が定常状態にあることは，周辺分布についての任意の k 次モーメント $\langle F_{I_k}(s) \rangle_p, \langle F_{I_k}(s') \rangle_p$ が互いに等しいことと同値である．そこで， n 次 ($n \leq N$) までのモーメントが経験分布に等しい同時分布を，近似的に定常な分布として考えれば，上に述べた方法が適用できる．

具体例として，時間的相互作用を含む最も単純で，かつ，実データへの適用を考える上でも重要だと考えられる次の同時分布 (最小モデル) のパラメータを近似する多項式を求めた．

$$p(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i + \sum_j \theta'_j s'_j + \sum_{i,j} \theta''_{ij} s_i s'_j - \psi \right\},$$

$$\text{s.t. } \langle s_i \rangle_p = \langle s'_i \rangle_p = \langle s_i \rangle_q, \quad \langle s_i s'_j \rangle_p = \langle s_i^t s_j^{t-1} \rangle_q. \quad (5)$$

この分布のエントロピーについて摂動展開を実行し， $\theta_i, \theta'_j, \theta''_{ij}$ について 3 次までの摂動項を求め，近似方程式を導出した．

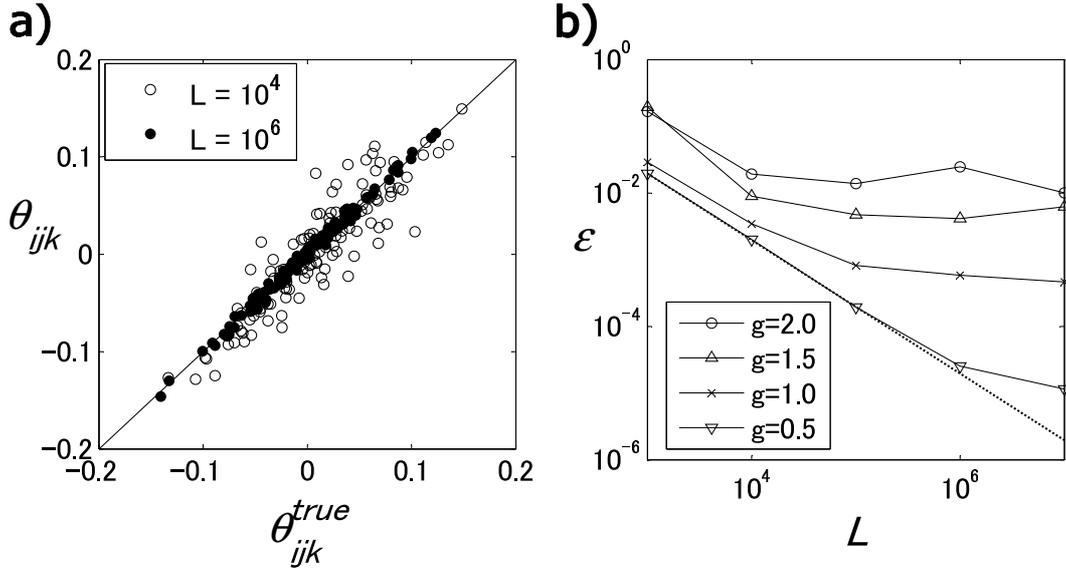


図 1: 3 次相互作用パラメータの推定 . (a), (b) 共に $N = 10$ とした . (a) パラメータの真の値に対する推定値の分布 . 相互作用が弱いとき , 標本数 L を大きくすることで推定精度が向上した . (b) 相互作用が平均 0 , 標準偏差 g/N の正規分布に従うとき , 推定値の , 真の値に対する平均二乗誤差の値を示す .

3 数値実験結果

提案した推定方法の精度を検証するため , 対数線形モデルから人工的にデータを生成し , そのパラメータを推定した . 高次相互作用をもつ場合の例として , 3 次の相互作用項をもつ対数線形モデル ,

$$p(\mathbf{s}) = \exp \left\{ \sum_{i < j < k} \theta_{ijk} s_i s_j s_k - \psi \right\} \quad (6)$$

から MCMC 法 (メトロポリス法) によって 2 値ベクトルの標本を生成した . 標本分布から 3 次までのモーメントの観測値を求め , 式 (4) によって θ_{ijk} の推定値をえた . θ_{ijk} の真の値 (θ_{ijk}^{true}) と比較すると , 相互作用が弱く , 標本が多い場合ほど精度が高くなる傾向が観測された (図 1) . また , θ_{ijk} の θ_{ijk}^{true} に対する平均二乗誤差を調べることで , この傾向を確かめた .

最小モデルについても推定精度を検証するため , 次の遷移確率 ,

$$p(\mathbf{s}^t | \mathbf{s}^{t-1}) = \exp \left\{ \sum_i \theta_i s_i^t + \sum_{i,j} \theta''_{ij} s_i^t s_j^{t-1} - \psi(\mathbf{s}^{t-1}) \right\} \quad (7)$$

で与えられる Glauber dynamics に従う 2 値ベクトル時系列を生成し , モーメントの観測値を求めた . 近似方程式にこれらの値を代入してえられた θ''_{ij} の推定値と真の値とを比較したところ , 相互作用が弱く , 観測時間が長い場合に推定精度が高くなるという結果がえられた .

4 結論

神経活動の同時記録データを解析するために、時間的相互作用や高次の空間的相互作用をもつ対数線形モデルを推定する方法を提案した。数値実験を用いてその精度を評価したところ、相互作用が弱い場合についてこの方法が有効であることが示された。

この手法を用いて実際の神経活動を対数線形モデルとして推定し、集団活動としての特性を分析することが今後の課題として挙げられる。

参考文献

- [1] Y. Roudi, J. Tyrcha, and J. Hertz. Ising model for neural data: model quality and approximate methods for extracting functional connectivity. *Physical Review E*, 79(5):051915, 2009.
- [2] E. Schneidman, M. Berry, R. Segev, and W. Bialek. Weak pairwise correlations imply strongly correlated network states in a neural population. *Nature*, 440(7087):1007–1012, 2006.
- [3] V. Sessak and R. Monasson. Small-correlation expansions for the inverse Ising problem. *Journal of Physics A*, 42(5):055001, 2009.
- [4] A. Tang, D. Jackson, J. Hobbs, W. Chen, J. Smith, H. Patel, A. Prieto, D. Petrusca, M. Grivich, A. Sher, et al. A maximum entropy model applied to spatial and temporal correlations from cortical networks in vitro. *The Journal of Neuroscience*, 28(2):505, 2008.
- [5] F. Yeh, A. Tang, J. Hobbs, P. Hottowy, W. Dabrowski, A. Sher, A. Litke, and J. Beggs. Maximum entropy approaches to living neural networks. *Entropy*, 12(1):89–106, 2010.