

## 近似ベイズ推論を用いた発火率推定

## Approximate Bayesian Inference Method for Firing Rate Estimation

渡辺一帆 (PY)<sup>†</sup>, 岡田真人<sup>†‡</sup>

Kazuho Watanabe(PY), and Masato Okada

<sup>†</sup> 東京大学大学院新領域創成科学研究科<sup>‡</sup> 理化学研究所脳科学総合研究センター

kazuho@mns.k.u-tokyo.ac.jp

**Abstract**— We consider the estimation of the firing rate underlying behind a binary sequence that represents the presence of spikes. We derive an approximate Bayesian inference algorithm for it and also provide a method to estimate the prior hyperparameter which determines the smoothness of the estimated firing rate.

**Keywords**— Approximate Bayesian inference, Event rate estimation, Smoothness prior

## 1 はじめに

近年, 多電極測定や長時間記録により神経細胞の活動を測定したスパイク時系列データが大量に得られるようになってきた. スパイク系列の背後に潜む発火率関数を抽出するにはベイズ推定の枠組みが有効である [2][3]. しかしながら, 従来法の多くは発火率の非負性を考慮しておらず, また一般に発火率関数は大きな自由度を持つため, 事後分布を計算するために非常に多くの計算量が必要とされてきた.

本研究では発火率推定のための近似ベイズ推定に基づく方法を与える. 発火率の非負性を考慮した変換を行ない, その上で正規分布による事前分布を仮定することにより効率的な事後分布の近似法を導入する. 本手法は付加的なパラメータを導入し, 発火率の対数尤度関数を 2 次関数で近似することにより, 事前分布との共役性を用いて近似事後分布を解析的に与えることができる. 付加的なパラメータは真の事後分布への近似を最良にするよう最適化することができ, 同時に, 発火率関数の滑らかさを決めるハイパーパラメータの推定を自然に組み込むことができる. 今回用いた例では, 数値積分に基づき真のベイズ法を実現した場合と比べ, 約 2000 倍の速さで推定を行なうことができ, かつ高精度な近似が実現されていることが確認された.

## 2 発火率推定

スパイク時系列データが与えられたとき, 各区間にスパイクが高々 1 つ含まれるように時間を  $N$  個の十分細かい区間に分割した状況を考える.  $i$  番目の区間でのスパイク発火の有無を表す変数を  $x_i \in \{0, 1\}$  とし, そ

れらはパラメータ  $\lambda_i \in [0, 1]$  を持つベルヌーイ試行で独立に与えられたとすると, スパイク系列の同時分布は  $p(\mathbf{x}|\lambda) = \prod_{i=1}^N p(x_i|\lambda_i)$  で与えられる. ここで,  $\mathbf{x} = \{x_i\}_{i=1}^N$ ,  $\lambda = \{\lambda_i\}_{i=1}^N$ ,

$$p(x|\lambda) = \lambda^x(1-\lambda)^{1-x} \quad (1)$$

である. 発火率  $\lambda \in [0, 1]$  の性質を考え  $y = \log \frac{\lambda}{1-\lambda}$  により  $y \in [-\infty, \infty]$  に変換すると (1) 式のモデルは

$$p(x|y) = \exp\{xy - \log(1 + e^y)\} \quad (2)$$

と変形される. ここで, 変換後の発火率  $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^N$  について以下の正規分布により事前分布を仮定する.

$$p(\mathbf{y}) = \sqrt{\frac{|\beta \mathbf{S}_0|}{(2\pi)^N}} \exp\left\{-\frac{\beta}{2}(\mathbf{y} - \mu_0)^T \mathbf{S}_0(\mathbf{y} - \mu_0)\right\} \quad (3)$$

$N \times N$  行列  $\mathbf{S}_0$ ,  $\mu_0 \in R^N$  及び  $\beta > 0$  はハイパーパラメータである.  $\mathbf{S}_0$  の構造により変数  $y_i$  間の滑らかさに関する事前知識を反映することができ,  $\beta$  によりその強さを制御することができる.

## 3 近似ベイズ法

本研究では (2) 式の生成モデルと (3) 式の前分布を用い, 与えられたスパイク発火のバイナリ系列  $\mathbf{x} = \{x_i\}_{i=1}^N$  から発火率  $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^N$  をベイズ推定することを考える. このとき, 発火率  $\mathbf{y}$  の事後分布は,

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\mathbf{y})p(\mathbf{y})}{\int p(\mathbf{x}|\mathbf{y})p(\mathbf{y})d\mathbf{y}} \quad (4)$$

により定義され, 例えばその平均により発火率  $\mathbf{y}$  を推定することができる. しかしながら, (4) 式の後分布は  $N$  個の変数に関する積分を用いて定義され一般に莫大な計算量が必要になる. そこで本研究では Jaakkola and Jordan[1] によりロジスティック回帰モデルのベイズ推定のために用いられた近似ベイズ法を用いて (4) 式の発火率  $\mathbf{y}$  の事後分布の近似を行なう.

## 3.1 近似事後分布の導出

(4) 式の後分布を計算可能な正規分布により近似するために (2) 式の指数を  $y$  の 2 次関数により近似することを考える.  $f(y) = -\log(e^{y/2} + e^{-y/2})$  とおくと  $f(y)$

の  $y^2$  の関数としての凸性から、 $y^2 = \xi^2$  におけるこの関数の接線を考えると以下の不等式を導くことができる。

$$p(x|y) \geq \exp\left\{\frac{(2x-1)y}{2} + f(\xi) - l(\xi)(y^2 - \xi^2)\right\} \quad (5)$$

ここで  $l(\xi) = \frac{1}{4\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2}\right)$  とおいた。右辺を  $p_{\xi}(x|y)$  とおき、 $i = 1, 2, \dots, N$  に対し  $\xi_i$  (変分パラメータと呼ぶ) を用意し、 $p_{\xi}(x|y) = \prod_{i=1}^N p_{\xi_i}(x_i|y_i)$  とおくと

$$p(x|y)p(y) \geq p_{\xi}(x|y)p(y) \quad (6)$$

が成立する。左辺の代わりに不等式の右辺を規格化したもの、すなわち

$$p_{\xi}(y|x) = \frac{p_{\xi}(x|y)p(y)}{\int p_{\xi}(x|y)p(y)dy} \quad (7)$$

により事後分布を近似する。ここで (5) 式の右辺の指数が  $y$  についての2次関数であることより、 $p(y)$  を (3) 式のように正規分布とすると  $p_{\xi}(y|x)$  も正規分布となる。その平均  $\mathbf{m}$  及び分散共分散行列  $\mathbf{S}^{-1}$  は具体的に以下で与えられる。

$$\mathbf{S}^{-1} = (\beta\mathbf{S}_0 + 2\mathbf{\Lambda})^{-1} \quad (8)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{S}^{-1}\{\beta\mathbf{S}_0\mu_0 + (\mathbf{x} - \mathbf{1}/2)\} \quad (9)$$

ここで  $\mathbf{1}$  は全成分が1の  $N$  次元ベクトル、 $\mathbf{\Lambda}$  は対角成分が  $l(\xi_i)$  であり他の成分は0の  $N \times N$  行列である。

### 3.2 変分パラメータの最適化

上記の近似事後分布は  $\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^N$  に依存する。変分パラメータ  $\xi_i$  を、与えられたデータ  $\mathbf{x}$  に対し (6) 式の近似を最良にするため、次の不等式の右辺を最大化するように最適化する。

$$\int p(x|y)p(y)dy \geq \int p_{\xi}(x|y)p(y)dy \quad (10)$$

$\underline{Z} \equiv \int p_{\xi}(x|y)p(y)dy$  とすると、これは発火率  $\mathbf{y}$  を不観測データとしたときの  $\xi$  の尤度と捉えることができ、不観測データがある際の最尤推定に有効な EM アルゴリズムを用いて  $\xi$  の尤度の最大化を行なう。

$$Q(\xi|\tilde{\xi}) = E_{p_{\tilde{\xi}}}\{\log p_{\xi}(x|y)p(y)\} \quad (11)$$

とおくと  $Q$  を増加させるように  $\tilde{\xi}$  から  $\xi$  への更新を行なうことにより  $\underline{Z}$  を増加させることができる。(5), (3) 式より  $\frac{\partial Q}{\partial \xi_i} = -l'(\xi_i)(E_{p_{\xi}}[y_i^2] - \xi_i^2)$  となり、 $l'(\xi_i) < 0$  より、 $Q$  を最大にする  $\xi_i$  は次式で与えられる。

$$\xi_i^2 = E_{p_{\xi}}[y_i^2] = (\beta\mathbf{S}_0 + 2\mathbf{\Lambda})_{ii}^{-1} + m_i^2 \quad (12)$$

### 3.3 ハイパーパラメータの最適化

3.2 と同様の議論によりハイパーパラメータ  $\beta$  についても (11) 式の  $Q$  を増加する更新を行なうことにより  $\underline{Z}$  を  $\beta$  に関して最大化することができ、(6) 式から、これは真の周辺尤度  $Z \equiv \int p(x|y)p(y)dy$  を最大化できると期待される。 $\frac{\partial Q}{\partial \beta} = 0$  とすることにより、 $\beta$  の更新則は

$$\beta = N/\text{Tr}[\mathbf{S}_0\{\mathbf{S}^{-1} + (\mathbf{m} - \mu_0)(\mathbf{m} - \mu_0)^T\}]. \quad (13)$$

## 4 適用例

発火率  $\mathbf{y}$  の変化の滑らかさを仮定する事前分布として  $p(\mathbf{y}) \propto \exp(-\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (y_{i+1} - y_i)^2)$  を用いた場合の適用例を図1に示す。また、このとき収束までに要した

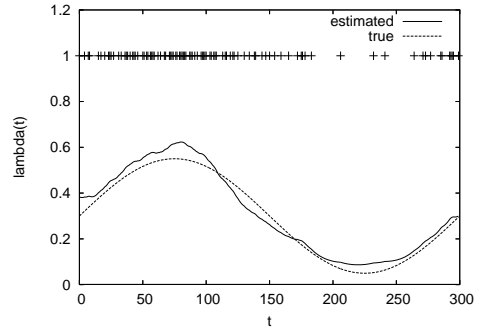


図1:  $N = 300$  のときの適用例 (実線: 推定結果, 点線: 真の発火率, +: 実際のデータ)

計算時間と自由エネルギー  $\bar{F} \equiv -\log Z$  の収束値を表1にまとめる。表には  $\beta$  を同時に推定した場合、このときの  $\beta$  の推定値を初めから固定して用いた場合、及び近似精度の評価のために転送行列法 [3] を用いて (数値計算による) 一変数積分を逐次的に繰り返すことにより真の自由エネルギー  $F \equiv -\log Z$  の値 ( $\beta$  は上の値で固定、(10) 式より  $\bar{F} \geq F$  が成り立つ) を計算した場合の結果を示した。提案手法は数値的に積分を求める方法と比べ、はるかに高速に自由エネルギーの近似値を得ているのがわかる。

表1: 計算時間と自由エネルギー

	$\beta$ 推定	$\beta$ 固定	真のベイズ法
計算時間	1.71	0.57	1197.20
自由エネルギー	166.84	166.84	165.89

## 5 結論

近似ベイズ法によるスパイク発火率推定法を与え、同時に発火率の滑らかさを示すハイパーパラメータの推定法を示した。数値実験により、数値積分に基づく方法と比べ、非常に少ない計算量で精度良くベイズ事後分布を近似できることが示唆された。この手法の近似精度及び真の発火率の推定精度を評価することは今後の課題である。

## 参考文献

- [1] T. Jaakkola and M. Jordan (2000) "Bayesian parameter estimation via variational methods." *Statistics and Computing*, **10**, 25-37.
- [2] S. Koyama, T. Shimokawa and S. Shinomoto(2007) "Phase transitions in the estimation of event rate: a path integral analysis." *Journal of Physics A*, **40**, F383-F390.
- [3] 田中浩之、三浦佳二、渡辺一帆、岡田真人 (2007) "転送行列法を用いた発火率推定." *信学技報*, vol. 107, no. 413, NC2007-96, pp. 55-60.