

局所適応カーネル法によるスパイクレート推定 Spike-rate Estimation with Locally Adaptive Kernel Method

島崎 秀昭 (PY)[†], 篠本 滋[‡]

Hideaki Shimazaki(PY) and Shigeru Shinomoto

[†] 理化学研究所脳科学総合研究センター

[‡] 京都大学大学院理学研究科

shimazaki@brain.riken.jp

Abstract— We propose a locally adaptive kernel method in estimating a spike-rate of a Poisson process. We select local bandwidths with which the estimated rate best fits to the underlying rate within local intervals. In addition, we optimize the local interval lengths so that the estimated rate fits to the underlying rate in an entire observation period. Numerical examples demonstrate that the proposed method performs better than the fixed kernel method and the classical Abramson's adaptive kernel method with regard to the goodness-of-fit to the underlying rate.

Keywords— Spike-rate, Locally Adaptive Kernel Method, Mean Integrated Squared Error

1 序論

神経生理学実験では、外界刺激や動物の行動と神経細胞発火頻度 (レート) との関係が調べられる。発火レートの推定にはヒストグラム法と並んでカーネル法がよく使われる。カーネル法は適当な幅を持つカーネル関数とスパイク時系列の畳み込み積分を行いレートを推定する。推定レートには新たな試行に対する予測能力が高いこと、すなわち汎化誤差が小さいことが求められる。カーネルの幅は汎化誤差に対する影響が大きく、最適化の方法が提案されている (交差検定を用いた最適化法は Rudemo, *Scand. J. Stat.*, 9 65-78, 1982 を、Poisson 性を仮定した方法は本稿補遺を参照)。

神経生理学実験では往々にして、細胞活動が定常的な自発発火状態から刺激の提示や行動の開始に伴い突然大きく変動する様子を観察する。ところが、大域的に最適化した固定カーネル幅を用いる推定は、このように時間尺度が大きく変動するスパイク時系列に対応できない。この問題を解決するためには、局所的に最適化したカーネル幅を用いられたい。

局所適応カーネル法では、最適幅を得るための汎化誤差をどの程度限局して評価すべきかが問題になる。狭い範囲で評価するとカーネル幅は時間的に大きく変動する。一方、広い範囲で評価すると変動が小さくなり固定幅法に縮退する。しかし我々の知る限り、これまでの局所適応法でカーネル幅の変動性の最適化にまで踏み込

んだ手法はない。我々は初めて局所適応幅の変動性を規定するパラメータを導入した。これを推定レートが大域的に汎化誤差を最小化するように最適化することで、局所かつ大域的に最適化された変動レート推定値を得る手法を構築した。

提案する局所適応カーネル法は、固定幅法をその内部に含む。すなわち、データが十分あるときには時間尺度が大きく変動するレートに対応でき、データが少ない場合には、固定幅法に縮退し過剰適合を防ぐことが期待される。我々は、固定幅法及び古典的適応カーネル法である Abramson の方法 [1] との比較において、提案する手法がより優れた適合度を示すことを疑似データを用いて確認した。特に期待された通りデータ数が少ない場合でも安定して使用できることを確認した。

2 方法

汎化誤差として真のレート λ_t と推定量 $\hat{\lambda}_t$ の平均積分二乗誤差 (Mean Integrated Squared Error, MISE),

$$\text{MISE} = \int E(\lambda_t - \hat{\lambda}_t)^2 \rho_t dt, \quad (1)$$

を導入する。 ρ_t は重み付け関数で、誤差の評価範囲を定める。カーネル推定量は $\hat{\lambda}_t = n^{-1} \sum_{i=1}^N k_t(t - t_i)$ で与えられる。ここで $k_t(\cdot)$ は可変カーネル¹⁾、 n を試行回数、 N を全スパイク数、全試行を重ね合わせたスパイク時系列を $\{t_i\}_{i=1}^N$ とする。

MISE からカーネルに依存しない項を除いたコスト関数を定義する。

$$\begin{aligned} C_n &\equiv \text{MISE} - \int \lambda_t^2 \rho_t dt \\ &= -2 \int \lambda_t E \hat{\lambda}_t \rho_t dt + \int E \hat{\lambda}_t^2 \rho_t dt. \end{aligned} \quad (2)$$

Rudemo は式 2 第一項の推定に leave-one-out 交差検定を提案した。ここでは交差検定に依らずに推定量を求め、共分散の分割公式と Poisson の仮定を用いることで

$$\int \lambda_t E \hat{\lambda}_t \rho_t dt = \int E[x_t \hat{\lambda}_t] \rho_t dt - \frac{1}{n} E \int k_t(0) x_t \rho_t dt$$

¹⁾例えばガウス型可変カーネルは可変幅 w_t を用いて、 $k_t(s) = (2\pi w_t^2)^{-1/2} \exp(-s^2/2w_t^2)$ 。

を得る. これよりコスト関数の不偏推定量は

$$\hat{C}_n = \frac{2}{n} \int k_t(0)x_t \rho_t dt - 2 \int x_t \hat{\lambda}_t \rho_t dt + \int \hat{\lambda}_t^2 \rho_t dt. \quad (3)$$

で与えられる. さて, 一般的可変幅カーネルによる MISE の不偏推定量は求まったが, 実際の可変幅の探索は容易ではない. そこで次のような階層的なアプローチをとる.

2.1 固定幅カーネル法による局所最適幅

時刻 c 近傍での局所的な最適固定カーネル幅を求める. このために, 中心 c ・幅 W の重み付け関数 $\rho_t(c, W)$ ²⁾ を式 3 に代入しコスト関数 $\hat{C}_n(w, W)$ を得る. 我々はここで W を固定してコスト関数を最小にする w を探すのではなく, α を固定して $w \sim \alpha W$ なる平衡点を探す. これにより, 場所毎の局在区間の幅をその区間内の最適カーネル幅に応じて柔軟に決定できる. 全区間 $t \in [0, T]$ に渡り, 局所固定最適幅 w_t^α を求める. これらは区間 W 内で重なるため, 時刻 t における局所最適幅 \tilde{w}_t^α は w_t^α を $\rho_t(c, W)$ で回帰して得る. α は局所最適幅と局在区間の比を決めるパラメータであり, 0 に近づくほど局所最適幅の変動性は小さくなり固定幅カーネル法に近づく.

2.2 変動カーネル幅制御パラメータの最適化

次に局所最適カーネル幅の変動性を規定するパラメータ α を最適化する. 変動カーネル推定の大局的コスト関数は式 3 において $\rho_t = 1$ ($0 \leq t \leq T$), 0 ($t < 0, T < t$) を用いて推定される. しかし, データに基づいて得た局所最適幅 \tilde{w}_t^α を式 3 に適用するとバイアスが生じる可能性がある. そこで, 交差検定により α を決定する. データを訓練データと試験データの 2 群に分ける. 訓練データを用いて 2.1 に従い \tilde{w}_t^α を求める. 試験データと \tilde{w}_t^α を用いて, コスト関数 $\hat{C}_{n/2}(\alpha)$ を推定する. なお外挿の手法により $n/2$ 試行のデータから n 試行のコスト関数 $\hat{C}_{n|n/2}(\alpha)$ を求めることが出来る³⁾ (証明は割愛). $\hat{C}_{n|n/2}(\alpha)$ を最小化する α^* を求める. 最期に α^* と全データを用いて 2.1 に従い局所最適幅 $\tilde{w}_t^{\alpha^*}$ を求める.

3 結果

図 1 では疑似スパイクデータに対する局所適応カーネル法と固定幅カーネル法を比較した (固定幅の最適化法は補遺を参照). 局所適応カーネル法により, 1[s] 付近での急激な変動への対応及び他の場所での過剰適合が改善された. 提案する手法は, 固定幅法, Abramson の適応幅法 [1] との適合度の定量比較において, 用いるデータ数に依らず最小の誤差を示した (図 2). 特に Abramson の適応幅法が少数データに対して過剰適合を起こすのに対し, 提案手法は安全に使用できることが示された.

²⁾例えば $\rho_t(c, W) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2}} \exp[-(t-c)^2/2W^2]$

³⁾ $\hat{C}_{n|n/2}(\alpha) = -\frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^N \int_0^T k_t(t-t_i)^2 dt + \hat{C}_{n/2}(\alpha)$

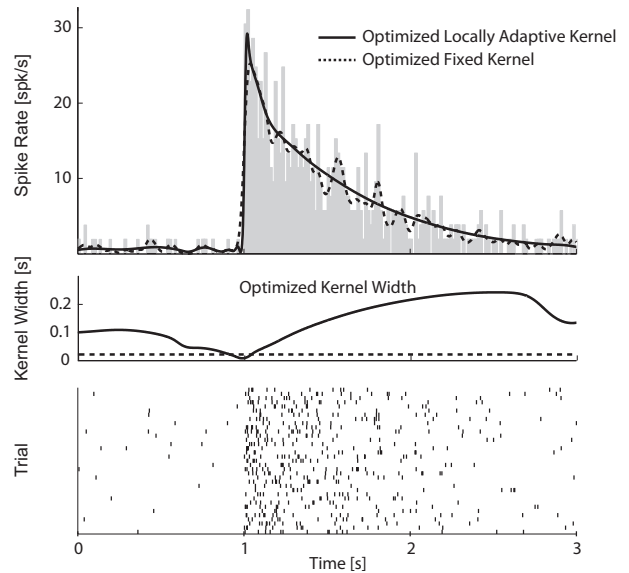


図 1: (A) 局所適応カーネル法 (実線) と固定幅カーネル法による推定レート (点線). (B) 局所適応幅 (実線) と最適固定幅 (点線). (C) スパイク時系列.

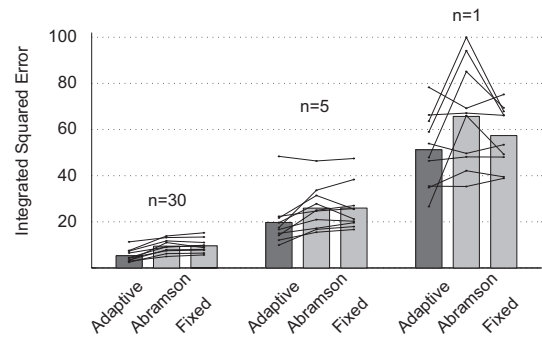


図 2: 適合度比較. 図 1 で用いたレートから試行回数 $n = 1, 5, 30$ のスパイク時系列を作成. 提案する局所適応幅 (Adaptive), 固定幅 (Fixed), Abramson[1] の方法を用いた推定値と真値との積分二乗誤差 (ISE) を計算した. データは各 n に対し 10 回生成. 棒グラフは平均値.

補遺 固定カーネル幅の最適化 (ガウス関数の場合)

カーネル関数として固定幅 w のガウス密度関数 $k(t) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-t^2/2w^2)$ を用いる場合, 最適幅は式 3 にガウス密度関数と $\rho_t = 1$ を代入して得られるコスト関数

$$\frac{N}{w} - \frac{1}{w} \sum_{i < j} \left\{ 4\sqrt{2}e^{-(t_i - t_j)^2/2w^2} - 2e^{-(t_i - t_j)^2/4w^2} \right\}$$

を最小にする w を選択することで得られる. ここで, $\{t_i\}_{i=1}^N$ はスパイク時刻. N は総スパイク数.

参考文献

- [1] Abramson, I. (1982) "On Bandwidth Variation in Kernel Estimates-A Square Root Law" The Annals of Statistics, **10**, 1217-1223