2020年10月27日　統計数理研究所　オープンハウス

常微分方程式に従う時間依存混合モデル

宮澤　脩一　　総合研究大学院大学　統計科学専攻　博士課程(5年一貫制)4年

目的

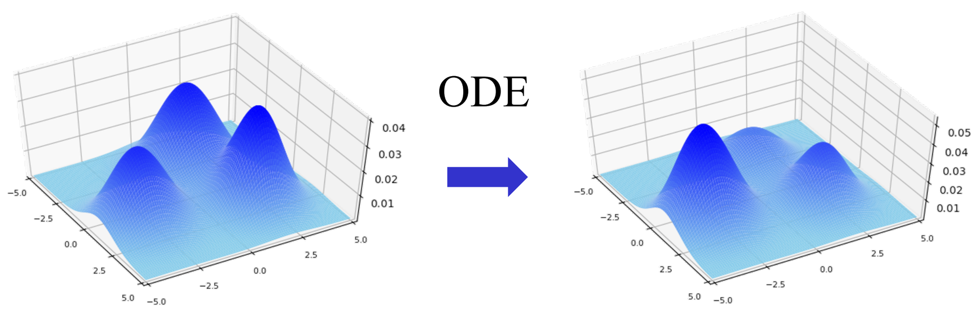
混合分布モデルの混合比が任意の常微分方程式（ODE）に従い時間変化するモデルの構築方法および推論手法を確立する。これにより、ODEシステムをデータ生成過程に組み込んだ混合モデルの構築を可能とし、動的クラスタリングや動的トピックモデルにODEの形式で事前知識を導入できる。

方針

混合分布モデルの混合比を算出するための潜在変数を階層化し、ODEシステムモデルの観測データに当たる変数として扱うことにより、混合モデルとODEシステムモデルを接続する。本資料では、ODEシステムモデルでのパラメータ推定に関する検討に限り報告する。

混合分布モデルと混合比

複数の確率分布を重み付きで混合し、より複雑な確率分布を構成するモデルを混合分布モデルと呼び、以下の形式をとる。



ガウス混合分布モデル（K=3）の確率密度分布および混合比の時間変化の様子

$$p(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k p(\boldsymbol{x}|k)$$

K次元の各モードへの所属確率ベクトルπ を混合比 と呼び、以下のように非負の変数で構成される確率ベクトルとして与えられる。

$$\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \cdots, \pi_K),$$
$$\text{where } \textstyle\sum_{i=1}^{K} \pi_i = 1, \pi_i > 0 \text{ for all } i = 1, \cdots, K$$

この混合比は、負の値も取りうる任意の実数ベクトル $\boldsymbol{y} = (y_1, \cdots, y_K)$ からソフトマックス変換により構成することもできる。

$$\pi_i = \frac{\exp(y_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(y_j)}$$

実数空間上で定義される不等式制約のない確率変数は、正規分布に従う変数として取り扱いが可能になり、階層化が容易になる。本研究では、上記の通り実数空間上で定義される変数 y で混合比を構成した混合分布モデルを考え、さらに潜在変数 y を一般的なODEシステムモデルにおける観測データの代わりに用いることで混合分布モデルとODEシステムモデルを接続する。

ODEシステムモデル

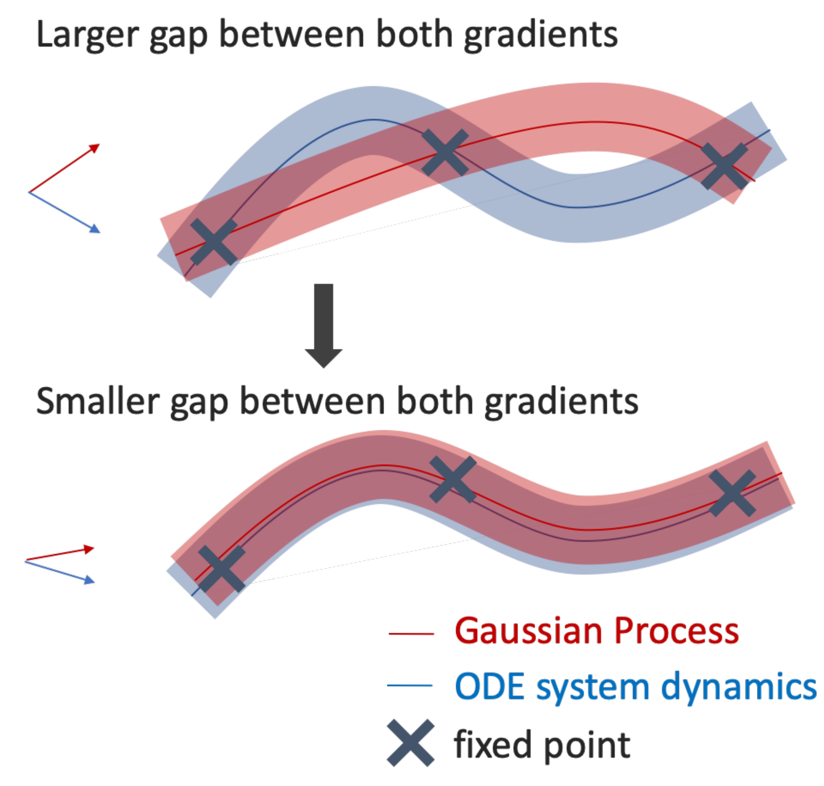
パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を持つ任意のODEに従い時間変化する潜在状態 $\boldsymbol{x}$ を仮定し、$\boldsymbol{x}$ に観測ノイズを加えて観測データ $\boldsymbol{y}$ が生成したとするODEシステムモデルを考える。ここで、観測データが与えられたときに、それらのデータにフィットする未知のODEパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を推定することが課題となる。ある時刻 t における $\boldsymbol{x}$ の微小変化（勾配）を、$\dot{\boldsymbol{x}}(t) \equiv \frac{d}{dt}\boldsymbol{x}(t) = f(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{\theta})$ とし、$\boldsymbol{\theta}$ および初期時刻における状態 $\boldsymbol{x}$ の初期値 $\boldsymbol{x}(t=0)$ が与えられれば、数値積分によりその後の時刻の $\boldsymbol{x}$ も定まる。そのため、様々な $\boldsymbol{\theta}$ で数値積分を繰り返し、$\boldsymbol{y}$ に当てはまりの良い $\boldsymbol{\theta}$ をみつけることで、未知のパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を選択することができる。しかし、$\boldsymbol{\theta}$ の無数の候補で計算負荷の高い数値積分を繰り返すことは非現実的であるため、勾配マッチングと呼ばれる数値積分を避けるベイズ的なODEパラメータ推定手法を利用する。

勾配マッチング

データ観測点におけるODEシステムの勾配と、データにフィッティングした回帰曲線の勾配の差異を小さくするような尤度項を確率モデルに導入する。AGM (Dondelinger et al., 13)[1], FGPGM(Wenk et al., 18)[2] 等、回帰曲線のフィッティングにガウス過程を用いる手法が提案されている。潜在状態 $\boldsymbol{x}$ と パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の事後確率分布が下式に従うとし、MCMC等の近似推論手法を用いてデータ $\boldsymbol{y}$ にフィットするODEのパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を推定する。

$p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\varphi}, \gamma, \sigma) \propto p(\boldsymbol{\theta})$	パラメータ事前分布
$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}\mid\boldsymbol{0}, \boldsymbol{C}_{\boldsymbol{\varphi}})$	ガウス過程事前分布
$\mathcal{N}(\boldsymbol{y}\mid\boldsymbol{x}, \sigma^2\boldsymbol{I})$	観測モデル
$\mathcal{N}(f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}) \mid \boldsymbol{Dx}, \boldsymbol{A} + \gamma\boldsymbol{I})$	勾配マッチのための項

2種類の勾配を合わせることで、ODEシステムに従う状態 $\boldsymbol{x}$ の時間変化を、ガウス過程で近似する様子を右図に示している。データ観測点における勾配を比較し合わせることで、ODEの曲線を近似し、全時刻を通した数値積分計算を回避する。事後確率分布の式の右辺第4項について、$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$ がODEの勾配、$\boldsymbol{Dx}$ がガウス過程の勾配平均、$\boldsymbol{A}$ がガウス過程の勾配の共分散、$\gamma\boldsymbol{I}$ がガウシアンノイズの共分散であり、この確率項が2種類の勾配が近い値を取る様に作用する。



勾配マッチングの模式図

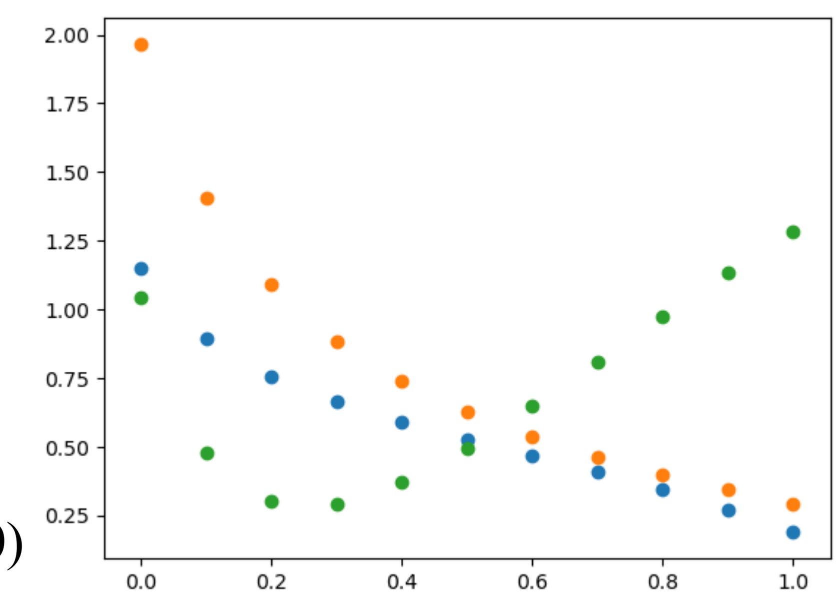
実験

種間競争のある生物種の個体群動態モデルである competitive Lotka-Volterra equation に従ってデータを生成し、勾配マッチング手法を用いてMCMCで未知のパラメータ $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{a})$ を推定する。パラメータの事前分布を対数正規分布、ガウス過程のカーネルをRBFカーネルとする。

competitive Lotka-Volterra equation

$$\dot{x}_i = r_i x_i \left(1 - \frac{x_i + \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j}{\eta_i}\right)$$

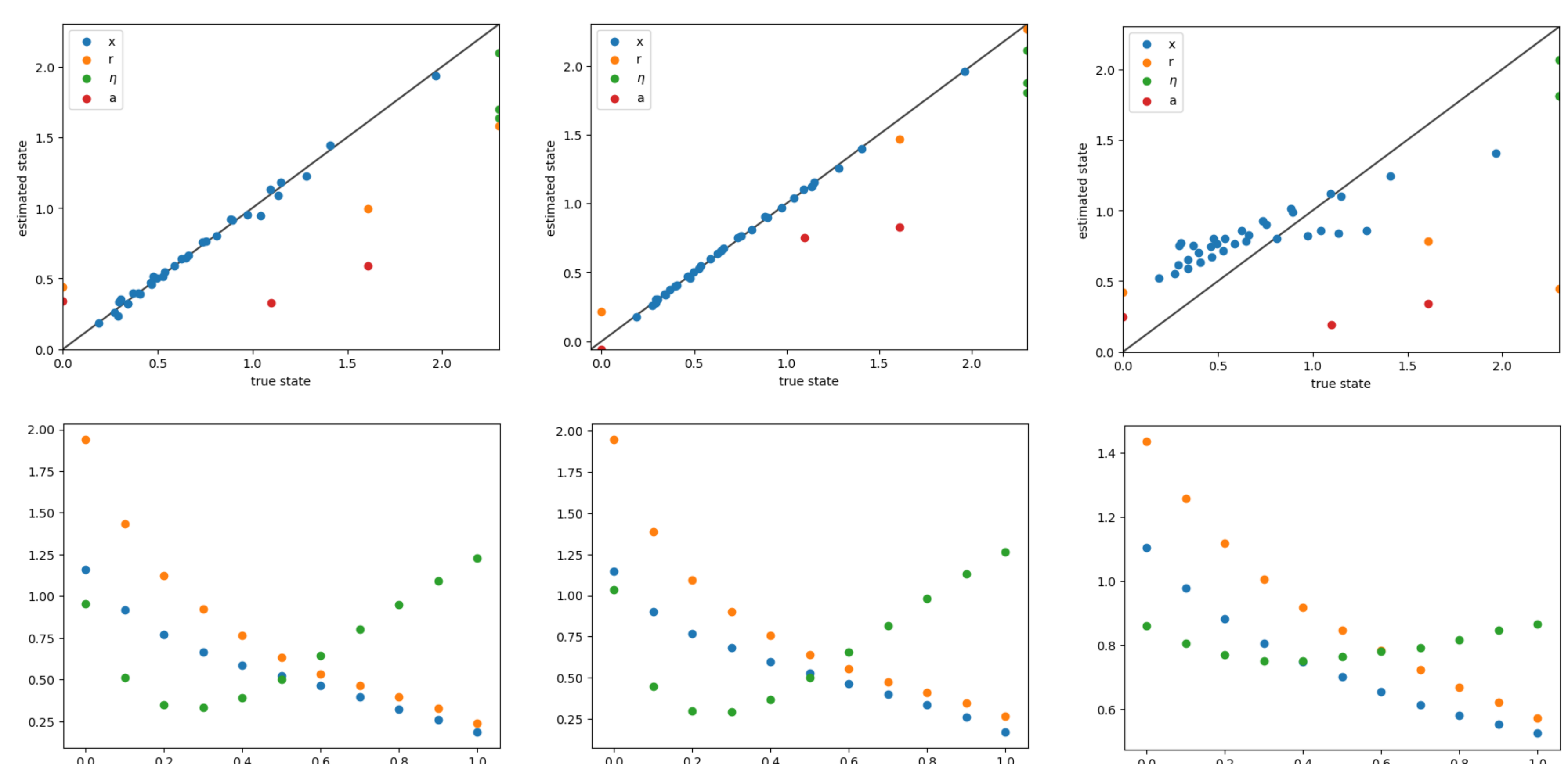
- x_i : i 種の個体数 (≥ 0)
- r_i : i 種の内的自然増加率 (≥ 0)
- η_i : i 種の環境収容力 (> 0)
- a_{ij}: i 種のj 種に対する競争係数 (≥ 0)



実験データ: 3種の個体数の推移

実験結果

上段の図は、真の状態（横軸）と推定された状態（縦軸）を比較している。下段の図は、推定された潜在状態 $\boldsymbol{x}$ の時間推移を示している。左列は、$\boldsymbol{\varphi}$ を最適化せず手動で設定し、$\sigma = 0.01$ とした例である。また、中央列および右列は、$\boldsymbol{\varphi}$ をMLEで最適化し、σ をそれぞれ 0.01, 0.1 とした例である。



観測データ $\boldsymbol{y}$ への状態 $\boldsymbol{x}$ のフィットは、観測ノイズの標準偏差 σ や、ガウス過程のカーネルパラメータ $\boldsymbol{\varphi}$ の値に大きく影響を受ける。また、ODEパラメータの事前分布 $p(\boldsymbol{x})$ の設定を変えることで、推論結果の改善が見込まれる。

参考文献

[1] Dondelinger, F., Filippone, M., Rogers, S., and Husmeier, D. ODE parameter inference using adaptive gradient matching with Gaussian processes. In AISTATS, 2013.

[2] Wenk, P.; Gotovos, A.; Bauer, S.; Gorbach, N.; Krause, A.; and Buhmann, J. M. 2018. Fast gaussian process based gradient matching for parameter identification in systems of nonlinear odes. arXiv preprint arXiv:1804.04378.