

機関番号：12601

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008～2010

課題番号：20700220

研究課題名（和文） 確率的生成モデルとその学習法の開発－実データ及び脳計測データへの適用－

研究課題名（英文） Probabilistic generative models and learning – application to realistic data and brain measurements –

研究代表者

寺園 泰（TERAZONO YASUSHI）

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・特任研究員

研究者番号：90435785

研究成果の概要（和文）：

脳の電氣的活動に代表される，少数箇所に大きな値を持つ，向きを有する量，すなわち疎（スパース）なベクトル場の生成モデルを仮定し，計測データからその発生源であるブロックスパースなソースベクトル場を推定する問題に取り組んだ。そして，（1）計測過程のモデルがランダム性を有する場合に対する信号源推定のロバスト化法の提案，（2）最も疎なソースである点信号源の完全推定を保証する原理（必要十分条件）の証明，を行った。

研究成果の概要（英文）：

Problems of estimating sparse source vector fields from the measured data of them were addressed by assuming a generative model. These fields can be regarded as block-sparse vectors, that have larger values at smaller points and whose elements have groupwise (blockwise) structure. (1) A source estimation method robust against forward calculation errors was proposed, and (2) A reconstruction principle of point source in linear inverse problems was proved.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2009年度	800,000	240,000	1,040,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
総計	2,900,000	870,000	3,770,000

研究分野：逆問題

科研費の分科・細目：総合領域・情報学・感性情報学・ソフトコンピューティング

キーワード：確率，生成モデル，脳活動，隠れ状態，MEG，逆問題，11-ノルム，疎，スパース，ブロックスパース，ベクトル場，2次錐計画問題

1. 研究開始当初の背景

我々が日常的に接する情報や，あるいは医学的・工学的に計測されるデータといったものを扱う際，それらが一体どのようにして生成されたのかは千差万別である。しかし，共通

の枠組みとして，確率的な生成モデルというもの考えることができる。これにより，ある原因が与えられたときに，今眼前にあるデータが生成される確率はどれくらいかを計算することができる。逆に，今眼前にあるデータから，どの原因がもっともらしく想定さ

れるかという程度も計算することができる。これは一種の統計的推定であると同時に学習であるともいえる。

近年、人間の脳活動を外部から計測できる手法である、脳波計測 (EEG) や脳磁場計測 (MEG) といった計測法が進展し、多チャンネルの同時計測により高度なデータを取得可能になってきている。これらのデータは、脳神経の電気的活動の影響が頭の外部の電位や磁場にあらわれるのを観測している。この影響のあらわれ方は、線形伝達という、数学形式として基本的なものであり、他の幅広い問題に応用可能なものになっている。こうした計測データに対し、信号源 (ソース) であるもとの脳神経の電気的活動の確率的な生成モデルを考え、計測データから神経活動を推測する方法を高度化することは、医学・工学・数理科学的に大きな意義を持つ。

2. 研究の目的

ソースデータの推定のための、扱いやすい確率的な生成モデルの枠組みを確立し、脳活動の計測データからのソースの推定に応用する。

3. 研究の方法

著者らが従来から研究してきた脳活動源推定法 (図を参照) のうち、特にスパース (疎) な推定解を与える忠実性手法をベースとして、以下の方法を行った。

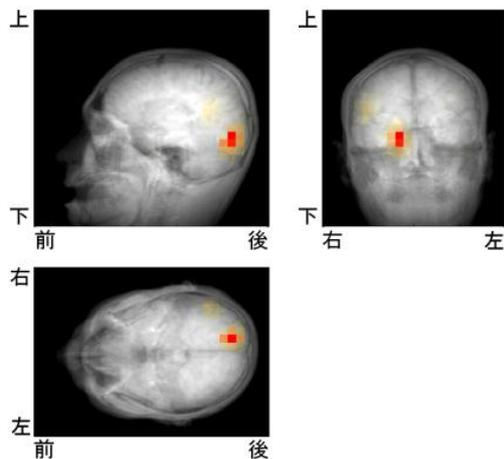


図. 線形性・忠実性同時最適化による視覚活動時の脳活動源の推定結果. 赤く示された領域に活動源が推定されている。

(1) 信号源の生成モデルのみならず、現実には確率的変動を有する計測過程についても確率モデルを仮定する。その全体のモデル

からデータを推定する際に、非凸最適化問題という扱いにくい問題が生じるが、そこからほぼ同様の凸最適化問題を定義することにより、データから、計測過程のブレ・信号源の双方を一度に推定可能とし、計測過程のブレに対してロバストな推定法とすることを旨とした。

(2) 忠実手法について、特に実際の脳の電気的活動がベクトル場であることに注目し、まず、これを正しく扱えることがどういうことかという原理を定義することを目指した。つぎに、定義された原理を可能にするための推定法 (と、その前提となる生成モデル) の必要十分条件を求め、これを数学的に証明することを目指した。

4. 研究成果

(1) 実際の MEG (脳磁場計測) などの脳活動計測データについて無視できない、ノイズや各種変動要因の影響への対策に取り組んだ。

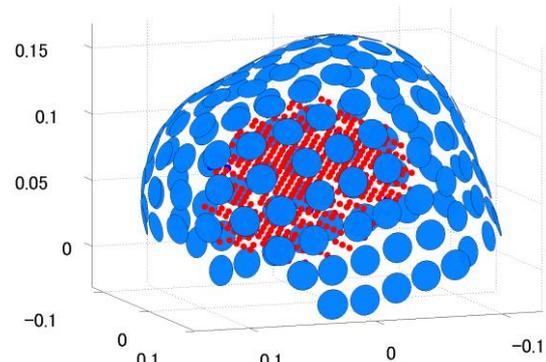


図. MEG (脳磁場計測) で用いられるセンサコイルの配置 (青い円). 頭部を囲むヘルメット状に配置される. 赤い点は計測対象である被験者の脳内に想定する格子点. 逆問題解析では、この格子の各点上で電流密度を計算する。

逆問題解析を行う際には、上の図のようなセンサや頭部の配置情報から、電流密度の伝達関係をあらかじめ計算しておく。これは順問題と呼ばれるプロセスである。このとき、実際には被験者の頭は多少は実験中に多少は動くものであり、また頭部～センサ間の電磁気的な関係も事前計算と全く同一になることは期待しがたい。すなわち、順問題計算には不可避免的に誤差が含まれると考えられる。例えば、位置関係が x, y, z 方向にそれぞれ変動した場合に発生する誤差パターンの例を、次図に示す。Lq は誤差なしの順問題計算による伝達係数、Rq が誤差分に相当する伝達係数である。

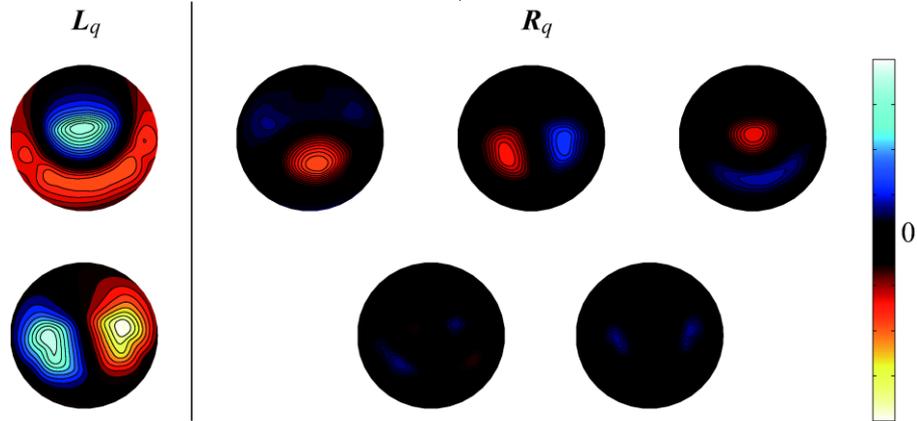


図. ある格子点 q について、伝達 L_q および誤差 R_q に含まれる磁場パターン. 左2つが L_q の列, 右5つが R_q の列. 上段左→右, 下段左→右の順に、大きな特異値に対応するパターンから並んでいる. R_q の第4, 5番のパターンは、強度は弱いものの、複数双極子に由来するように見える.

こうした順問題誤差の要因について、パラメータのずれを確率変数として例えば正規分布に従うと仮定し、事後確率最大化のような推定に組み込むこともできる. これは、ソース・計測ともに確率性を含んだデータの生成モデルを記述したことになる. しかし、その場合、現れる最適化問題は変数同士の積を含み、非凸と呼ばれるものになってしまう. 非凸最適化問題では、一般に、局所最適解が大域的最適解になるとは限らず、求めるべきよい推定解にたどり着くのが非常に困難になる.

そこで、もともと定義した生成モデルとは確率的構成が異なるものの、ロバスト化という点においては同様の方向性の効果を持つように、最適化問題ベースで変数構成の変更を行った. もとの順問題伝達は $y=Lx$, ただし y は計測値, L は伝達係数行列, x はソースである. 順問題誤差を含む場合、これが $y=(L+\Delta L)x$, ただし ΔL は順問題誤差, となる. ΔL と x の両者を未知として推定しようとする、未知量同士の積が現れて困難になる. そこで、 ΔL の主要パターン R を予測して固定し、その大きさと組み合わせを未知量 s で表せば、 $y=Lx+Rs$ と近似できる. この近似により、ロバスト化された推定を凸最適化問題として実行できる. 実際の最適化問題中には、状況がどれだけ理想的と想定されるかをパラメータ C で設定し、 C が大きい時には小さい順問題誤差を想定し、 C が小さい時には大きい順問題誤差を想定して最適化を行うようにした. ベースとなる逆問題解法には、ノルム最小化に基づく劣決定線形逆問題のスパース解法を採用した.

ソースに単一ダイポールを仮定し、これを想定した格子点からずれた点において、シミュレーションを行った. 結果を次の3つの棒グラフに示す.

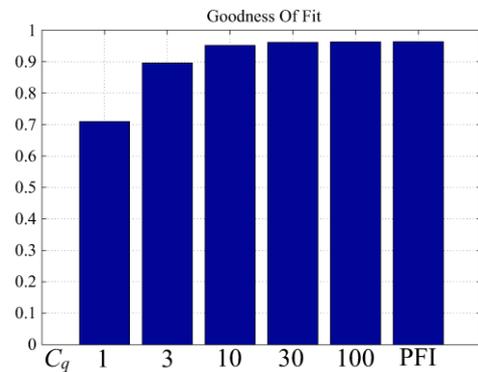


図. 計測磁場をどれだけ正確に説明するか(GOF). C が小さいほど、つまり順問題誤差が大きいと想定するほど、計測磁場をそれほど正確に説明する必要がないという方向で最適化される. C が ∞ (PFI 手法に一致) の時には計測磁場は正確に誤差なく説明される.

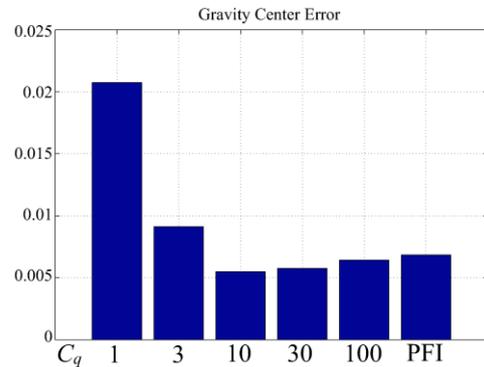


図. 推定ソースの重心と、想定したダイポールとの位置誤差. C が 10 前後の時に、誤差が最小化されることが分かる.

計測磁場をどれだけ正確に説明するかと

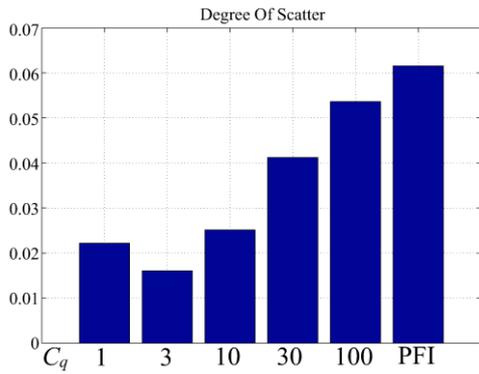


図. 推定ソースが、どれくらい空間的に散らばったか. 想定したのは単一ダイポールなので, 推定も空間的になるべく一点に集中しているのが望ましい. C が 3 前後の時に散らばりが最小化されることが分かる.

いうことと, 順問題誤差にどれだけ耐えられるようにするかということは, トレードオフの関係にある. 推定の結果から見ると, 今回のシミュレーション設定に対しては, C が 3 から 10 程度の時により推定性能が達成されそうである. この値はもちろん, 実際のソースの性質 (単一ダイポールのであるか, 分布的であるか), 実際の誤差の量, 順問題誤差でなく加法的に加わる計測雑音, さらにはいわゆるブレインノイズなどにより変わり, 異なる環境同士では値自体は比較できない. ただし, C の最小~無限大の範囲の中間に, もっともよい性能を示す点が単峰的にみられたことには注目すべきである. これは, C を調整すべきパラメータとして設定するのが有効であることを意味する.

以上のように, ノルム最小化に基づく劣決定線形逆問題のスパース解法に, 順問題誤差を表現する項を陽に組み込み, ロバスト化を図った. 問題は依然として凸最適化問題 (二次錐計画問題) であり, シミュレーションを行っても問題なく実行できた.

順問題誤差の組み込み方には議論の余地があり, 大きなところでは, 誤差項をソースによる成分との関係性で制約するのに加え, それ自体の大きさを評価するような変更が考えられる. また, 順問題誤差の大きさを評価法や, 格子点ごとに異なる適切な C を設定する方法など, 取りうる方策には多くのバリエーションがあり, 今後の検討により性能を向上させる余地が広がっている.

シミュレーション結果は, 順問題誤差をより許容すると GOF は低下していき, 一方, 推定解の良さの指標である重心誤差や散らばり度合いについては, 適切な程度の C を設定したときに最良化されるという, 正則化の一種として妥当な性質を示した. また, ロバス

ト化なしの解法に比べ, 実際に性能が改善されることも示された.

このように, ロバスト化のアイデアを実際に実装することができた. 今後は, これまで議論してきた点を明らかにし, 解決策を講じながら性能を向上させていく予定である.

(2) 特にスパース (疎) という特徴を持つ信号源系列について, その再構成理論に取り組んだ.

スパースであるとは, 要素の集合において, 全体から見て比較的少数の要素のみが非零の値をもち, 他の大部分の要素が 0 となっている様子を指す (次図を参照).

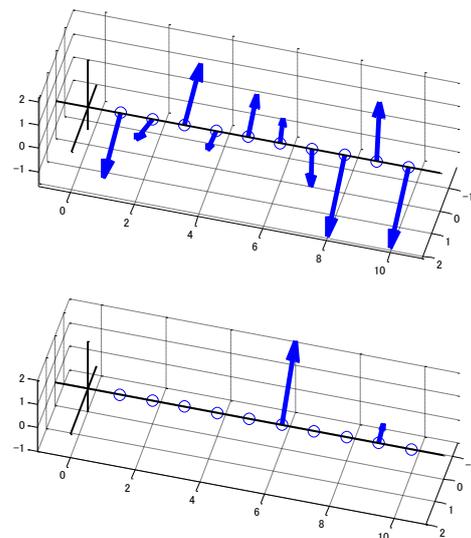


図. 上: 密 (dense) なベクトル場,
下: 疎 (sparse) なベクトル場

多くの分野において, データとは, 数値が一行に並んだもの (すなわちベクトル) か, 数値が縦横に方形に並んだもの (すなわち行列) として表現される. スパースなベクトルあるいは行列は, 信号系列のモデルとして, 画像, 音声, 神経スパイクをはじめとする様々な実データへの応用が考えられると同時に, MEG (脳磁場計測) の脳活動計測データの解析をはじめとする線形逆問題一般においても重要な役割を果たす. 中でも特に, 線型方程式による観測モデルを立てたとき, ソースベクトルの複数の要素がある一つの単位を表すという, いわゆるブロックスパース (スカラ場の離散化でなく, ベクトル場の離散化であるような) 構造を負う場合は, 実データを考える上で重要である. ベクトル場の離散化になる例としては, カラー画像 (一点につき R, G, B の三つの数値が組になる) や, 脳の電氣的活動の様子, すなわち電流密度分布 (一点につき x, y, z の三方向の電流密度

成分を持つ)が挙げられる。スパースになるというのは、たとえば脳活動であれば、少数の箇所が他より大きな活動を示し、それ以外の箇所は0と近似してよいような場合に相当する。

線形逆問題では、信号源がある線形な過程、たとえば計測、伝達、フィルタリングなど、を経て観測者に届くとし、観測者が観測情報から信号源を復元しようとする。このとき、観測できる情報が、信号の本来持つ情報より少ないと、信号源の完全な復元は一般に不可能になってしまう。そこで、信号源の性質に一定の仮定を置く。すると、その仮定の範囲内では、信号源が復元できるようになる。こうした枠組みとして、信号源がある確率分布にしたがって生成されると仮定し、観測結果を説明できる中で最も生成確率の高い信号源を算出し、それをもって信号源の推定とする方法がある(最大事後確率推定)。

このように信号源に生成モデルを仮定する際に問題になる点の一つが、その生成モデルを用いた結果得られる信号源の推定量は、必ずしもその生成モデルに従うわけではないということである。この問題への対応は様々考えられるが、ここでは、観測・推定というプロセスを経た際、信号源の有用な情報・特質を保つことを考えた。そして、本研究では1. 推定解がブロックスパースになること、2. 最もブロックスパースなソースである点信号源(空間中の一点のみが非零であるような信号源)が全て正しく復元できること、を規範とすることにした。この規範は、ソースを blockwise L1-ノルムという評価量で評価し、観測結果を説明できるソース候補のうち、最小の評価量を達成するものを選ぶ、という最適化問題を解くことで実現される。この問題は、凸最適化問題という、最適化問題の中でも好ましい性質(局所最適解が必ず大域的最適解にもなる)を持つものになる。

この手法(Point-source Fidelity Inverse, PFI)について、本研究では、次の二つの事実を数学的に証明した(Point-source Reconstruction Principle, Terazono et al., Inverse Problems, 2010)。1. 点信号源の完全再構成は、ソースの従う確率分布を、上位階層ではラプラス分布、下位階層では正規分布をはじめとする等確率線にフラットな部分がない分布、という階層構造(ブロック構造ともいえる)を持つ分布とすることで、最大事後確率推定を行うことにより達成できる。2. また、これら二つの規範を達成できる分布は、そのような階層構造を持つ分布の中では上記の類のみである。さらに、この階層的分布を用いると、3. 推定された信号源がブロックスパースになること、4. ある信号源が推定されたとき、その各々のブロックの数値を、各々のブロックごとの倍率で非

負倍したものを考えると、非負倍した信号源も、その対応する計測値の推定により得られる、すなわち最適性が保たれている。という二つの性質も数学的に証明した(同論文)。特定の場合の数値例で示したのではなく、数学的定理として証明したため、ため、この結果は、多くの逆問題・推定問題において疎なベクトル場を扱う上で依拠すべき基礎になることが期待できる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計1件)

- ① Yasushi Terazono, Norio Fujimaki, Tsutomu Murata, and Ayumu Matani, 'Point source reconstruction principle of linear inverse problems,' Inverse Problems, 査読有, Vol. 26, 2010, 参照番号 115016

[学会発表] (計2件)

- ① 寺園 泰, 生体磁気逆問題のスパース解法の順問題誤差へのロバスト化, 統計数理研究所研究集会「逆問題とその応用」, 2008/10/23, 東京
- ② Yasushi Terazono, 'A Nonlinear Minimum Norm Method for Bioelectromagnetic Inverse Problems Robust Against Forward Calculation Errors,' International Conference on Biomagnetism 2008, 2008/8/25, Sapporo

6. 研究組織

(1) 研究代表者

寺園 泰 (TERAZONO YASUSHI)
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・特任研究員
研究者番号: 90435785

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし