

能動学習・ベイズ最適化：現代的な実験計画法

- 説明変数（実験状況，計測するときのエネルギー，パラメタ，計測箇所などに対応） x に対して，応答変数 y （実験結果に対応）を得るコストが高い状況で

$$y = f(x)$$

なる予測モデルを学習する問題と考えると，よい x を能動的・逐次的に選択したい

能動学習で効率的に

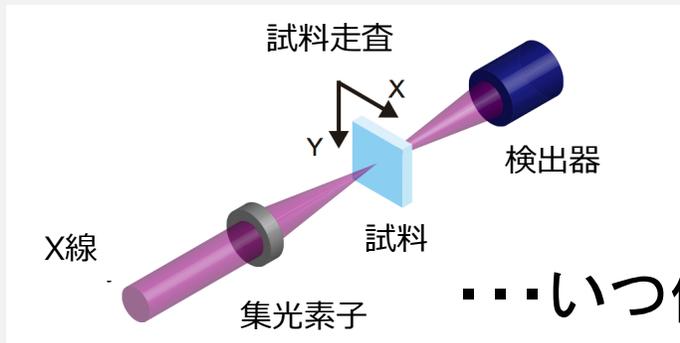
- あるいは，未知の目的関数 $g(x)$ を最大化

$$x^* = \arg \max_x g(x)$$

ベイズ最適化で効率的に

能動学習・ベイズ最適化とその停止基準

総計測時間 =
空間点数 × エネルギー点数 × 1点当り計測時間

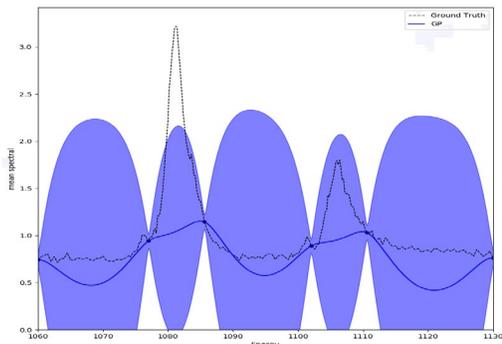


・・・いつ停めたらよい？



能動学習の最適停止基準が必要。

ガウス過程回帰

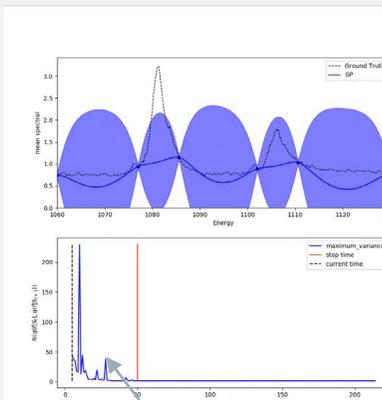


計測による誤差減少量
の上界を導出

期待誤差減少確率を評価し、
実験停止の指標を導出

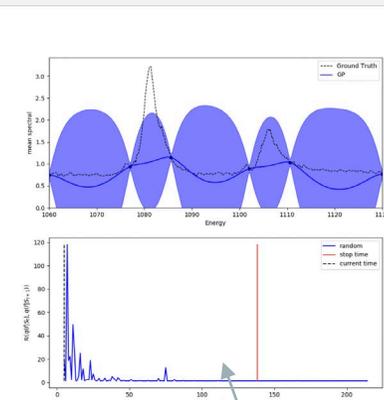
適応型実験デザイン

active learning



適応的計測だと
ここで停めて良い

random sampling



ランダム計測だと
ここまで計測が必要

課題：客観的な指標による計測の停止基準の開発
アプローチ：統計的学習理論（PAC-Bayes理論）と集中不等式
結果：許容できる「誤差 ϵ 」と「早期停止してしまう確率 δ 」の範囲内で可能な限り
早く実験を停める指標を作成できた

変分推論を用いたベイズ的動的モード分解

動的モード分解 (DMD: Dynamic Mode Decomposition) をベイズ的に扱う
 → 欠測データを許し, 予測の不確実性も評価可能

動的モード分解

観測ベクトル $\mathbf{y}_k \in \mathbb{C}^D$ が未知の時間発展 (力学系) $f: \mathbb{C}^D \rightarrow \mathbb{C}^D$ $\mathbf{y}_{t+1} = f(\mathbf{y}_t)$ を従うとして, この f をデータ系列 $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T)$ から特徴づける

$$\mathbf{y}_t \approx \mathbf{U}_K \sum_{k=1}^K \lambda_k^{t-1} \tilde{\mathbf{w}}_k$$

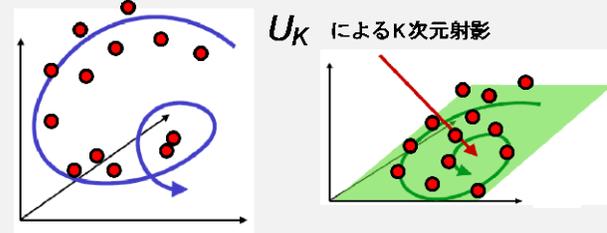
1時点ずらした観測行列を作り, 線形作用Aで時間発展を記述

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} | & | & \dots & | \\ \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 & \dots & \mathbf{y}_T \\ | & | & \dots & | \end{pmatrix}$$

\mathbf{Y}_0 \mathbf{Y}_1 $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{A}\mathbf{Y}_0$

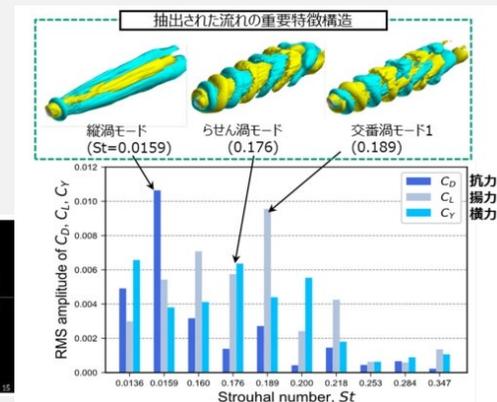
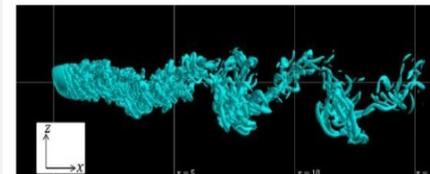
観測データは非常に高次元になりうる (e.g. 画像)

\mathbf{Y} の特異値分解によって K 次元射影行列 \mathbf{U}_K を求め, 射影した空間での作用素 \mathbf{A} の固有値分解をすることで K 次までの固有モード $\{\lambda_k, \tilde{\mathbf{w}}_k\}_{k=1}^K$ を求める.



数値流体力学分野などで, 高次元な画像から, 少数の重要なモードを抽出するのに用いられている.

例: 宇宙から大気圏に再突入するカプセルの姿勢が不安定になる現象の解明のため, カプセル後方の空気流を解析 (JAXA) DMD を用いた解析で, 「縦渦モード」 「らせん渦モード」 「交番渦モード」 に分解
 それぞれのモードがカプセル挙動に与える影響を分析



変分推論を用いたベイズ的動的モード分解

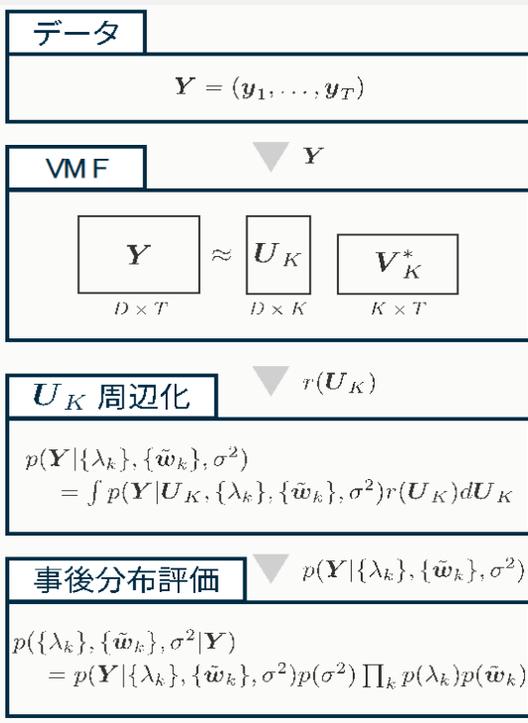
動的モード分解 (DMD: Dynamic Mode Decomposition) をベイズ的に扱う
 → 欠測データを許し, 予測の不確実性も評価可能

DMDの統計モデルを導出

$$p(\mathbf{y}_t | \mathbf{U}_K, \{\mathbf{v}_k\}, \{\tilde{\mathbf{w}}_k\}, \sigma^2) \sim \text{CN} \left(\mathbf{y}_t \mid \mathbf{U}_K \sum_{k=1}^K \mathbf{v}_k \tilde{\mathbf{w}}_k^T, \sigma^2 \mathbf{I} \right)$$

射影行列 \mathbf{U}_K , 固有値 λ_k , 固有モード $\tilde{\mathbf{w}}_k$ から平均
 が定まる複素行列値正規分布

高次元観測空間から低次元空間への射影行列も推定するのは困難



モデルから高次元パラメタ \mathbf{U}_K を排除するために, その事前分布 $r(\mathbf{U}_K)$ を「変分行列分解」手法により導出. \mathbf{U}_K を積分消去して, $\lambda_k, \tilde{\mathbf{w}}_k$ の事後分布を導出

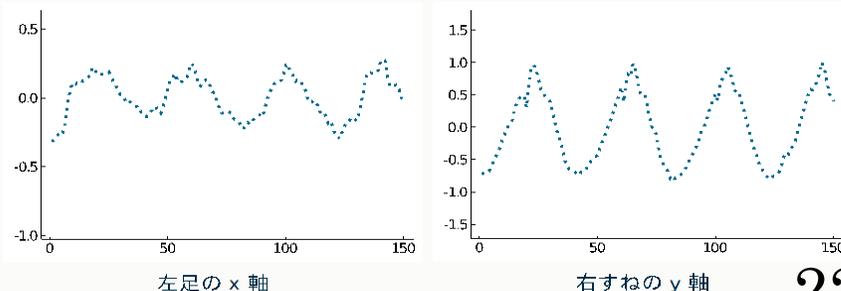
ジャイロセンサーデータ解析

- 入力次元数 $D = 18$
- データ数 $T = 150$
- モード数 $K = 2$

欠測させた時系列データを用いて, 補間, 予測の性能を評価

古典的なベクトル値VARモデルと比較してタイトな信用区間を達成

Bayesian VAR(2) と BDMD-VMF による予測 (平滑化) 分布



畳み込みニューラルネットワークを用いた 単一分子局在型顕微鏡法

蛍光顕微鏡は生物学，医療研究等で使われる光学顕微鏡である．光学顕微鏡は回折限界と呼ばれる物理的な解像度の限界を持つ．単一分子局在型顕微鏡法は回折限界を超えた観測を可能にするが，画像処理の計算コストが高く，リアルタイムでのイメージングが困難である．畳み込みニューラルネットワーク（CNN）を用いた高速，高精度な画像処理方法を開発した．

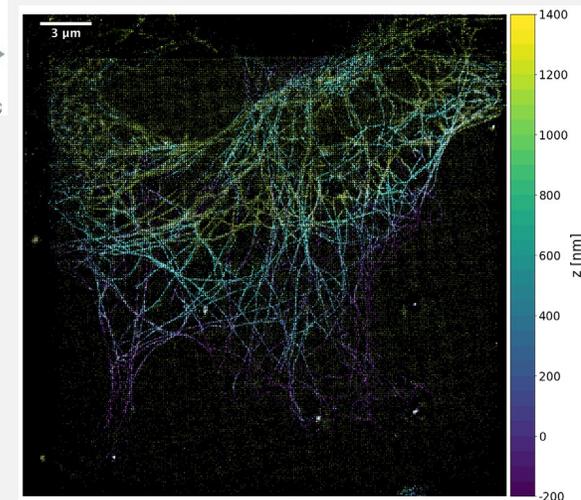
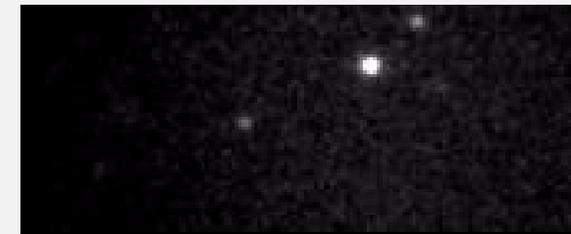
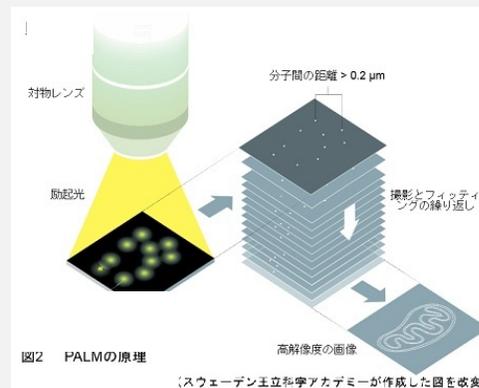
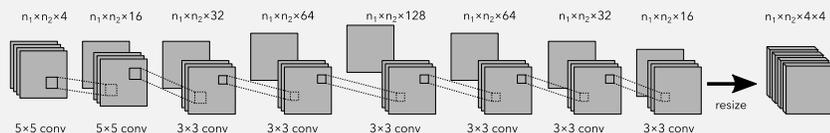
単一分子局在型顕微鏡法

- ・少数の蛍光分子を多数回計測
- ・サブピクセルレベルで分子位置を推定
e.g. ガウシアンフィッティング，圧縮センシング
- ・分子位置推定結果を統合し，回折限界を超えた高解像度の画像を得る

問題点：分子位置推定の計算コストが高い

CNNによる分子位置推定

- ・用いる顕微鏡の観測過程を近似する関数が与えられる
e.g. PSF(Point Spreading Function)
- ・人工的な分子分布から観測データを生成し観測データから分子分布を精度よく推定可能なモデルを学習
- ・運用時はCNNのフォワード計算のみなので高速



微細構造を持つ細胞画像
29,000フレームから
高解像度画像を再構成

圧縮センシングベースの方法と比較して1000倍以上高速に微細構造が観測できる高解像度画像を出力