

Noise2Noise深層学習 低SN比計測に対する大幅ノイズ 低減フィルタの教師無し学習

2021/8/31

大阪大学産業科学研究所

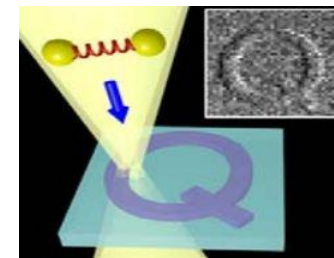
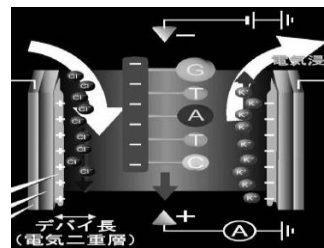
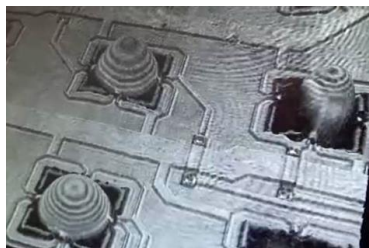
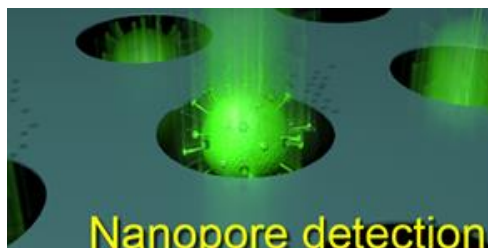
鷺尾 隆

共同研究者 鷹合孝之, 筒井 真楠

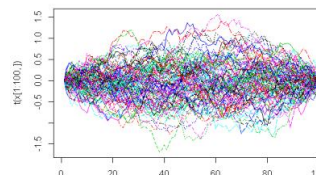
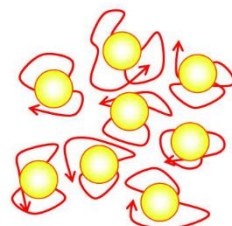
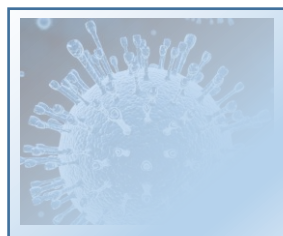
背景 先端計測技術研究の動向

バードウェア計測情報の不完全性の壁

- 複雑，微小，微弱な対象を計測するデバイス・装置が続々と開発されつつある。
 - ナノセンシング、微量計測、量子計測など
 - この分野で日本は世界をリード



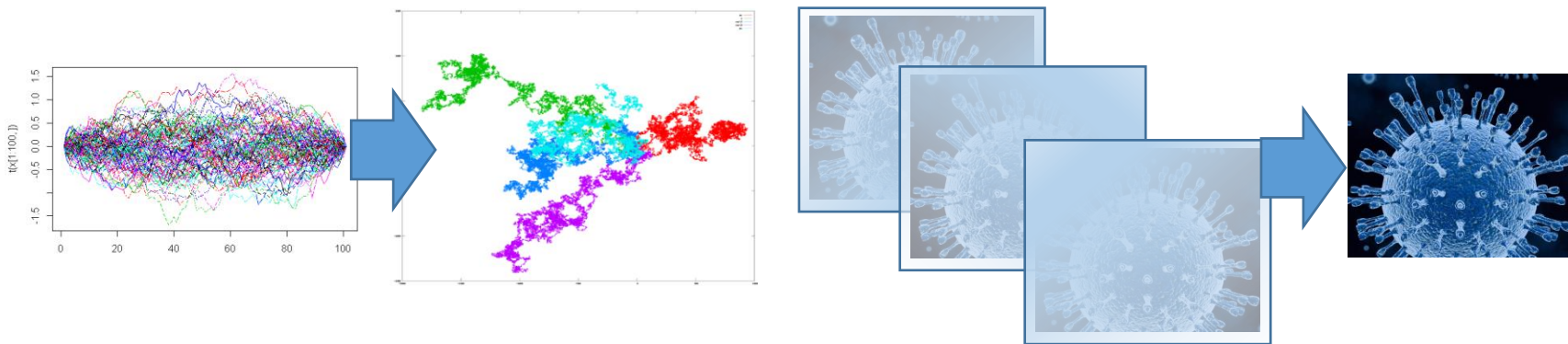
- 多くは計測系や対象が複雑，微小，微弱であるが故に.....
 - 対象の部分的な情報しか観測できない
 - 出力が熱雑音や量子揺らぎの影響を受けやすい



背景 情報科学・統計数理の動向

情報特徴抽出,変換,学習, 複数情報統合技術の発展

- 実用的に高精度な計測・分析結果を得るには...
 - 適切な時空間や特徴空間を選んで変換・推定
 - 必要な特徴を適切に抽出して目的量を推定
 - 適切な複数出力情報の抽出・統合により推定



- 統計処理やパターン認識, 機械学習などの技術
 - 特徴変換・抽出や情報統合により高精度・高信頼な結果を得ることに長じている。

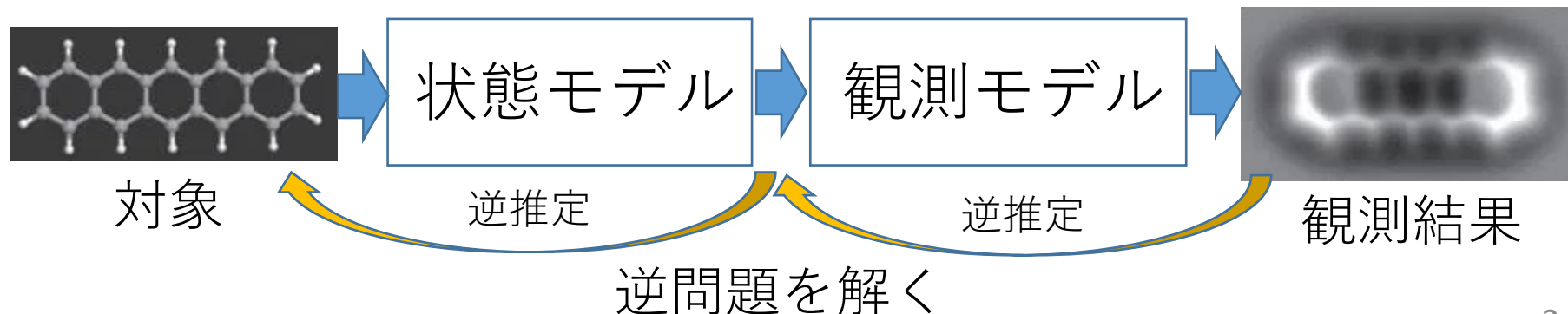
先端計測技術開発において、情報科学・統計数理への期待が高まっている。

背景 情報計測(計測インフォーマティクス) を巡る経緯と状況

国内外の研究状況

- 各計測分野での個別問題の解決技術研究は多数
- 機械学習研究
 - 計測問題を目的とする基礎研究は皆無
 - 最尤推定やノイズ除去など計測問題で役立つ関連研究が行われているに留まる。
- 統計的推定・信号処理・パターン認識手法研究
 - データ生成過程を
 - ✓ 状態生成過程のモデル
 - ✓ 観測過程のモデル (計測過程のモデル)

に区別して観測結果から対象をモデルベース逆推定する研究は多数



背景 情報計測(計測インフォマティクス) を巡る経緯と状況

世界的にも情報科学・統計数理を積極的に先端計測科学研究に取り込む努力は不十分

その背景

- 具体的な計測技術開発に比べ、数理・情報科学は抽象的であり、先端計測に適用して得られる成果の見通しを得にくい。
- 計測科学と情報科学・統計数理の両方を深く理解し橋渡し役として異分野融合に挑戦する人材が不足している。

情報計測(計測インフォマティクス)を巡る経緯と状況

CREST

さかひ
PRESTO

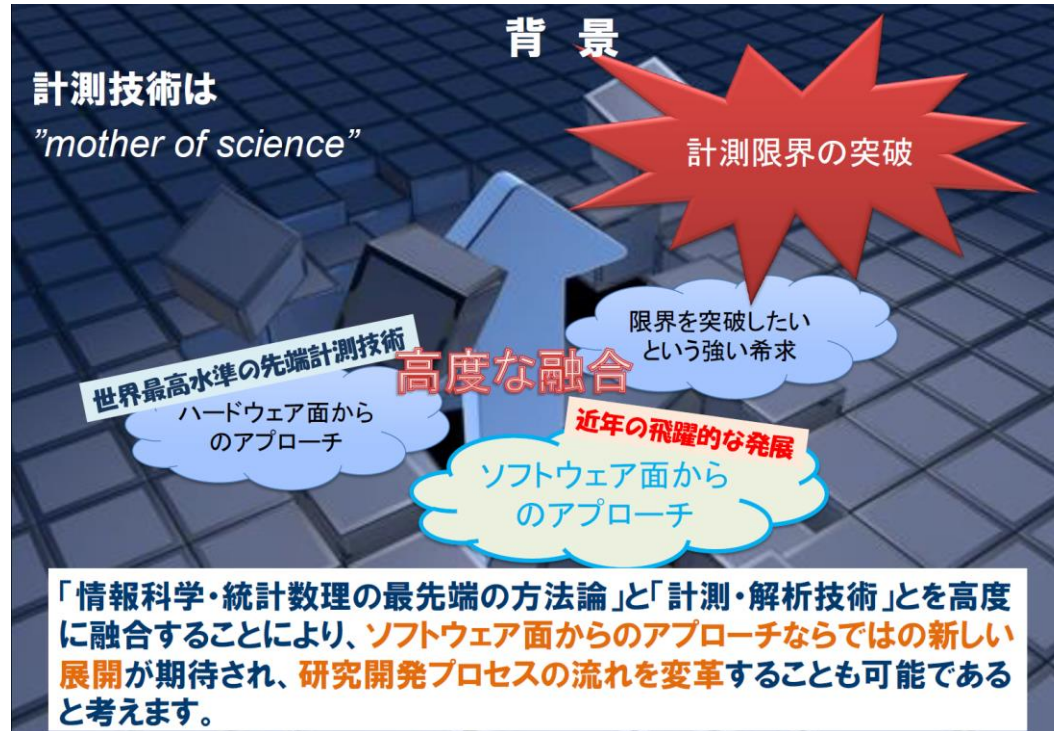
[情報計測] 計測技術と高度情報処理の融合による
インテリジェント計測・解析手法の開発と応用

https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html

研究総括



雨宮慶幸(東大)



副研究総括



北川源四郎(東大)

鷺尾 隆 (大阪大学 産業科学研究所)

機械学習と最先端計測技術の融合深化による
新たな計測・解析手法の展開



情報計測CREST, さきがけが目指す成果



Noise2Noise深層学習
低SN比計測に対する大幅ノイズ低減
フィルタの教師無し学習

背景

近年の先端計測デバイス

超解像顕微鏡, 高性能嗅覚センサ,
ナノデバイス, etc.

- 極限の微小な分子や生体
- 極限解像度の画像
- 極限の短時間現象

近年の測定対象

宇宙, 地球, DNA, 人間の行動, etc.

- 時間・空間の大きな揺らぎ
- 複雑で多くの自由度

極限条件下での複雑な過程を含む計測原理

複雑な過程から生み出される多くのノイズ

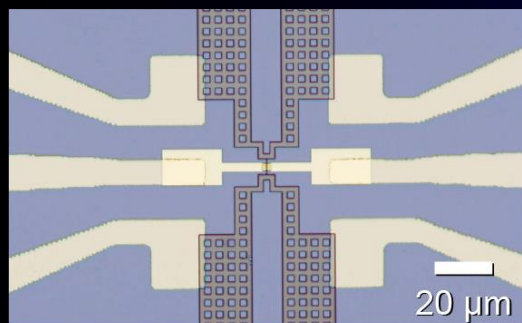
ノイズに埋もれた計測情報から対象現象の高精度
推定を行う高度な推定処理の必要性の高まり

今回のテーマ

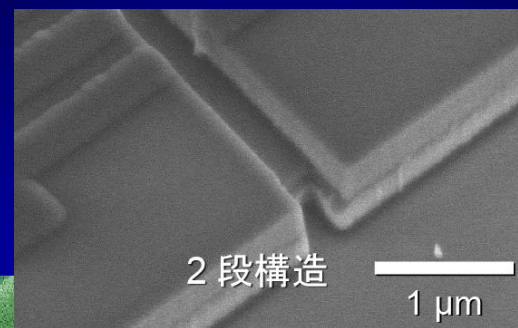
多段狭窄ナノチャンネルを用いるナノ粒子
通過の電流波形計測の効果的なノイズ低減

多段狭窄ナノチャンネルとは

多電極組込み型マイクロ流路

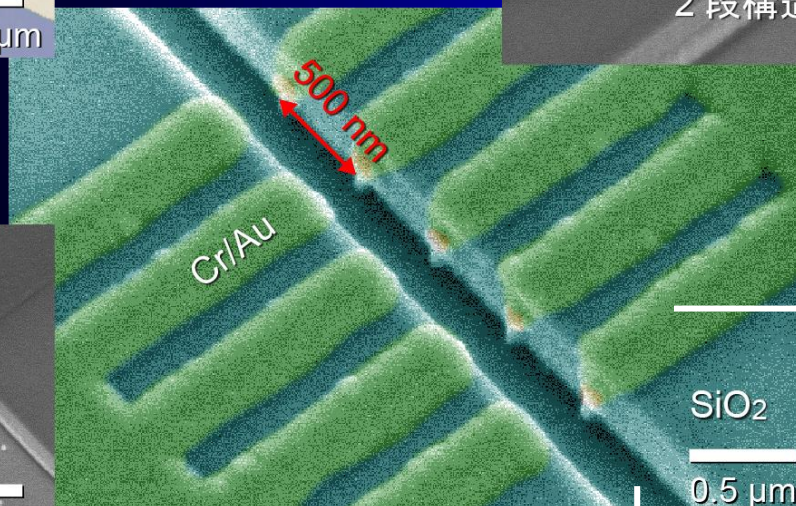
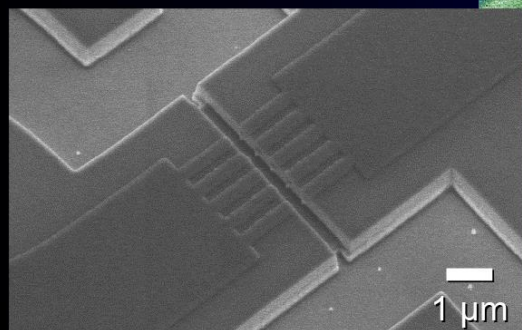


幅 500 nm



2 段構造

1 μm



電極

SiO₂

0.5 μm

電解質溶液

電極間に電圧をかけるとイオン電流がナノチャンネルを通じて流れる。ここに計測対象のナノ粒子が入ってくるとイオンの流れが妨げられ、イオン電流が一時的に減少する。多段狭窄ナノチャンネルでは5段のナノチャンネルが設置されている。

多段狭窄ナノチャンネルによる細胞質量測定的重要性

1 細胞質量測定の可能性

$$F - 6\pi\eta Rv = m \, dv/dt$$

$v(0) = 0$ (矢印)
 F : 電気泳動力
 $6\pi\eta R$: 動粘性係数
 R : 粒子直径

$$v(t) = \frac{F}{6\pi\eta R} (1 - \exp(-\kappa t))$$
$$\kappa = 6\pi\eta R/m$$

加速時間 ~ 0.1 ms (直径 10 μm) [10 ns (100 nm)]



5段のナノチャンネルをナノ粒子 (細胞)が通過するとき記録される電流波形

||

粒子の泳動速度変化



理論計算と運動方程式

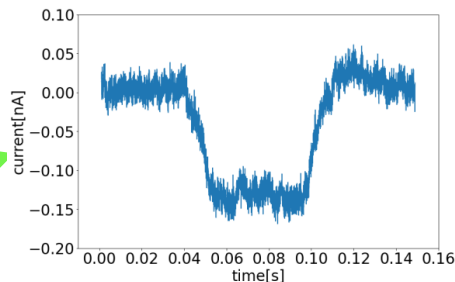
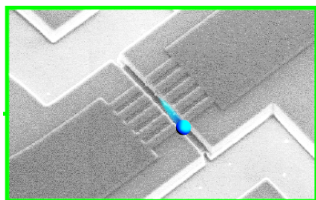


細胞質量の経時変化の検出と細胞増殖過程における制御パターンの究明

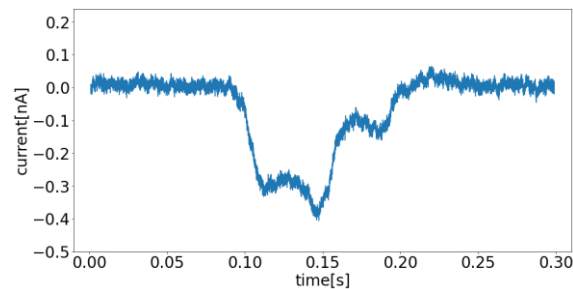
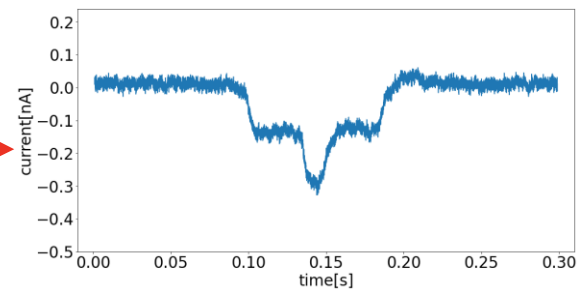
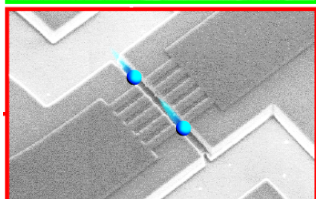
多段狭窄ナノチャンネルによる測定電流波形の例

5段のナノチャンネルを同時に通過する粒子数が1,2,3それぞれの場合に記録された電流波形の例

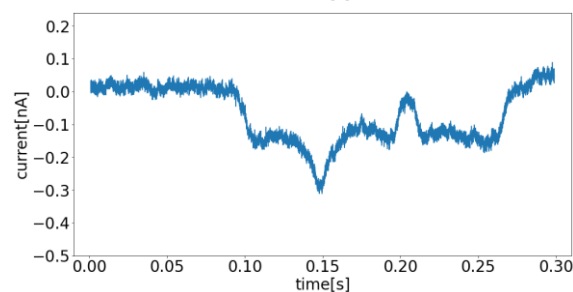
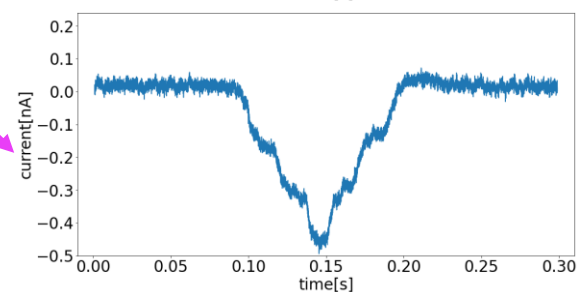
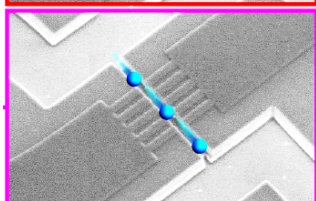
1粒子



2粒子

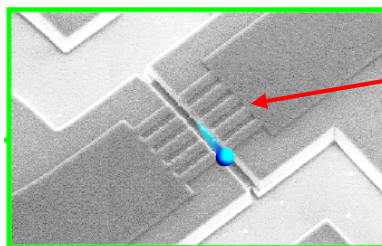


3粒子



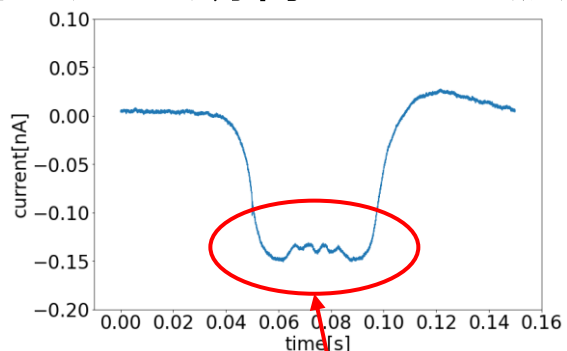
多段狭窄ナノチャンネルによる測定電流波形の例

1粒子計測



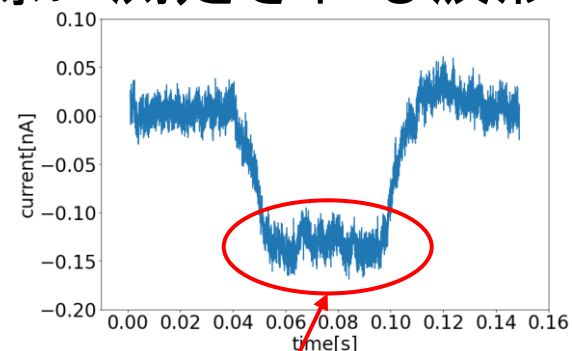
5段のナノチャンネル

計測が期待される波形



5つの小さな落ち込みが見られると期待される。

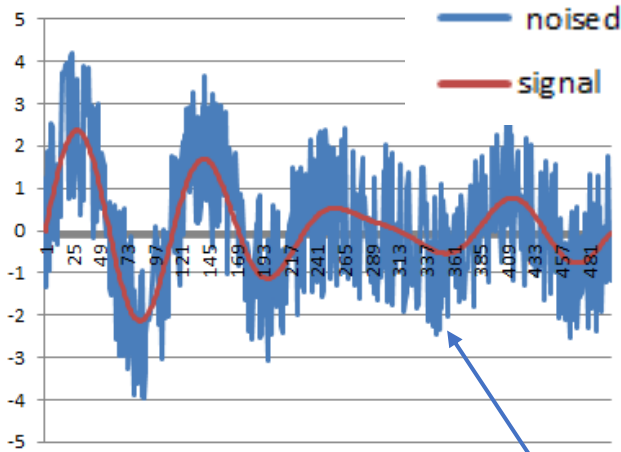
実際に測定される波形の例



5つの小さな落ち込みはノイズのため観測できない。

情報を損なわずにノイズを低減する必要性

従来信号処理法によるノイズ低減 ～フーリエ変換

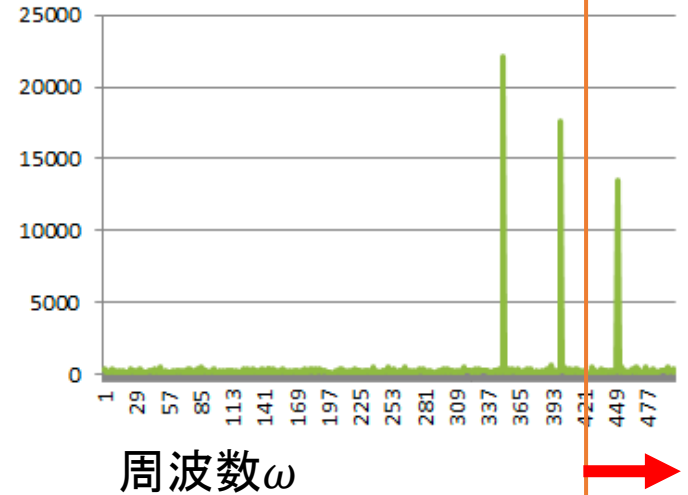


高周波ノイズ

時刻 t

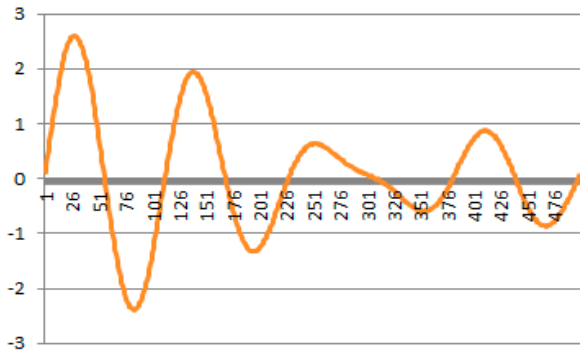
フーリエ変換

$$\mathcal{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$$



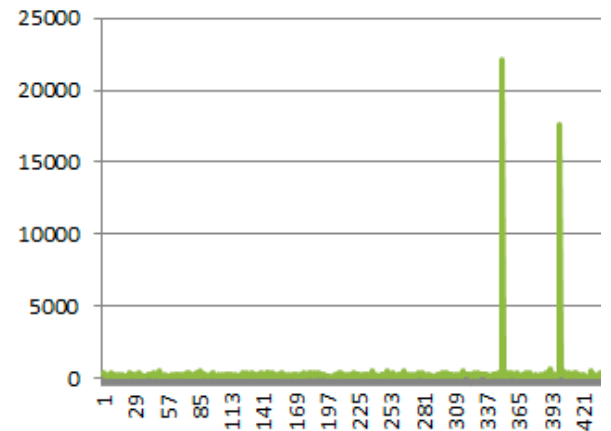
Cut off

processed

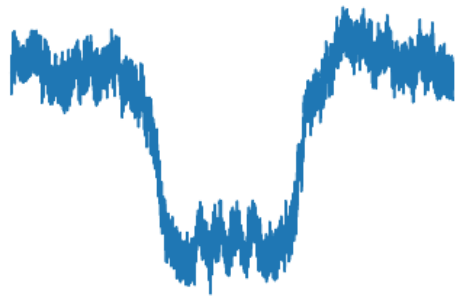


逆フーリエ変換

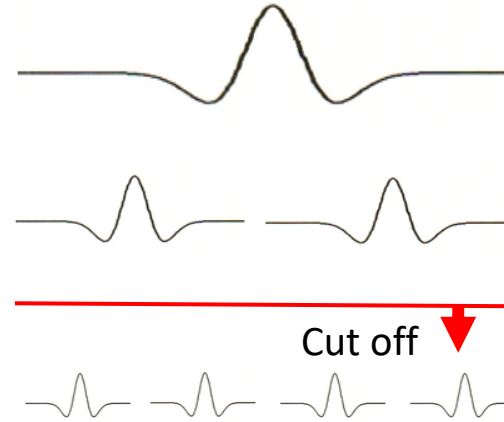
$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$



従来信号処理法によるノイズ低減～ウェーブレット変換



ウェーブレット変換

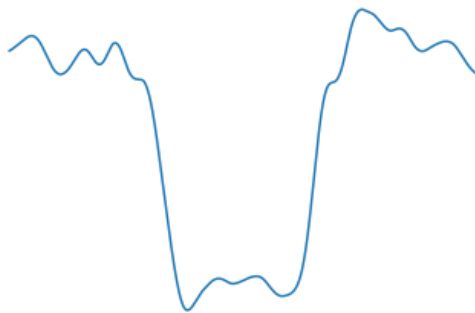


閾値

Cut off

振幅(ウェーブレット係数の絶対値)の小さいものはノイズと考え、閾値を決めてカットオフする。

$$f(t) = \frac{1}{C_\psi} \int_0^\infty \frac{da}{a^2} \int_{-\infty}^\infty (\mathcal{W}_\psi f) \psi_{a,b}(t) db$$



逆ウェーブレット変換

ウェーブレット係数

従来信号処理法と最近の機械学習ノイズ低減法の違い

ノイズ低減とは

ノイズを含む事例ベクトル x , 真の事例ベクトル \tilde{x} とすると,
$$\tilde{x} \approx f(x)$$

となる関数 $f(\cdot)$ を構成することである.

従来法

- f は波高, 周波数の閾値, 物理係数など所与の単純なパラメータを含み, その最適値をデータやデバイスの特性から決定する.
- ノイズの生成・混入過程が既知で線形, あるいは比較的単純である場合には効果的

機械学習による方法

- f は複雑なパラメータを多く含むモデルであり, それらの最適値は学習により過去の計測事例データ $\{(\tilde{x}_i, x_i)\}$ などから獲得する.
- データに対するモデル最適化により, 複雑で不明なノイズ過程を含む対象でも効果的なノイズ低減が可能である.

機械学習によるノイズ低減法の解説 (1)

□ Noise2Clean

予めノイズに汚染されていないきれいな正しい答えが分かっている対象のノイズ付き計測結果から、計測結果と対象の関係を深層学習によって学習し、計測データから正しい対象を推定する計測ノイズ低減器を構成する。

しかし、

多くの先端計測問題では正しい姿が既知である対象の準備が難しい

□ Noise2Noise: 2018年提案

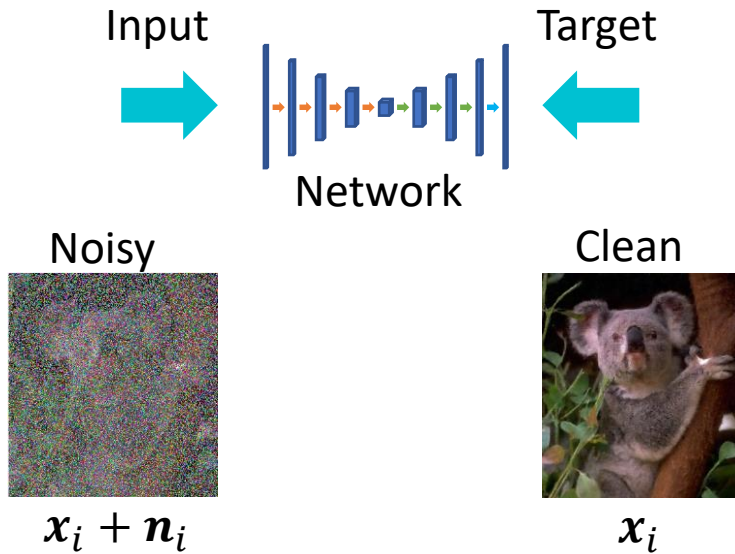
Jaakko Lehtinen, et al.: Noise2Noise: Learning Image Restoration without Clean Data, *In Proc. The 35th International Conference on Machine Learning: ICML2018*, PMLR Vo. 80, pp. :2965–2974 (2018)

対象に関する正しい答えが不明な場合でも、同一対象に関する多数回の独立なノイズ付き計測結果が得られれば、深層学習によってノイズ低減器を得ることができる。

機械学習によるノイズ低減法の解説(2)

Noise2Clean

ノイズ入りデータ $x_i + n_i$ と
クリーンなデータ x_i のペアで学習



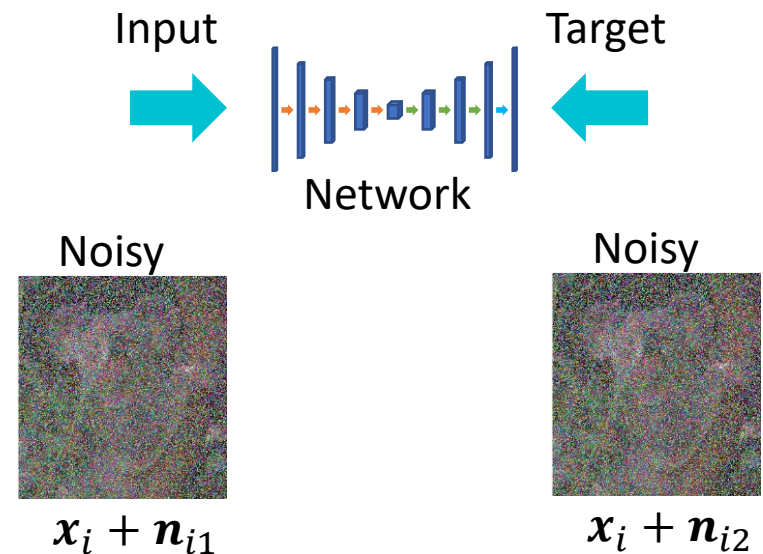
正しい答が必要

ノイズ低減モデル

$$f_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(x_i + n_i) - x_i\|^2]$$

Noise2Noise

ノイズ入りデータ $x_i + n_{i1}$ と
ノイズ入りデータ $x_i + n_{i2}$ のペアで学習



正しい答が不要

ノイズ低減モデル

$$\tilde{f}_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(x_i + n_{i1}) - (x_i + n_{i2})\|^2]$$

Noise2Noise法の性質

ノイズを含む事例のペア $(x_i + n_{i1}, x_i + n_{i2})$ で学習する Noise2Noise と、ノイズを含む事例とクリーンな事例のペア $(x_i + n_i, x_i)$ で学習する Noise2Clean は数学的には等価である。

Noise2Noise

$$\tilde{f}_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(x_i + n_{i1}) - (x_i + n_{i2})\|^2]$$

ノイズを含む事例 $x_i + n_{i1}$ のネットワーク出力 $f(x_i + n_{i1})$ とノイズを含む事例 $x_i + n_{i2}$ の間MSEを最小にするよう学習

同等

仮定

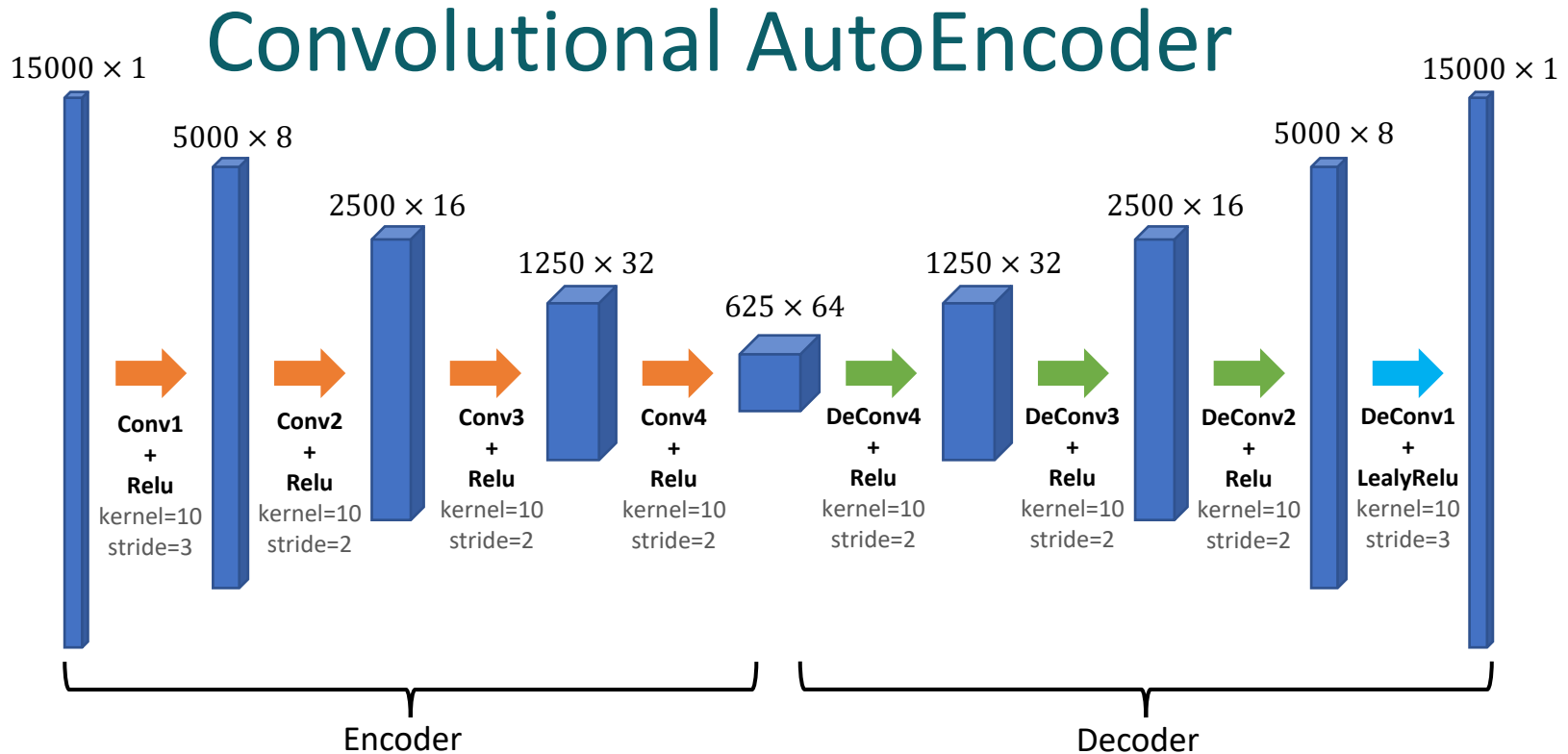
- n_{i1} と n_{i2} は独立同分布 (i.i.d.)
- ノイズは平均ゼロ $\mathbb{E}_i[n_{i1}] = \mathbb{E}_i[n_{i2}] = \mathbf{0}$

Noise2Clean

$$f_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(x_i + n_i) - x_i\|^2]$$

ノイズを含む事例 $x_i + n_{i1}$ のネットワーク出力 $f(x_i + n_{i1})$ とクリーンな事例 x_i の間MSEを最小にするよう学習

複雑な時系列波形に関するNoise2Noise法の実装(1)



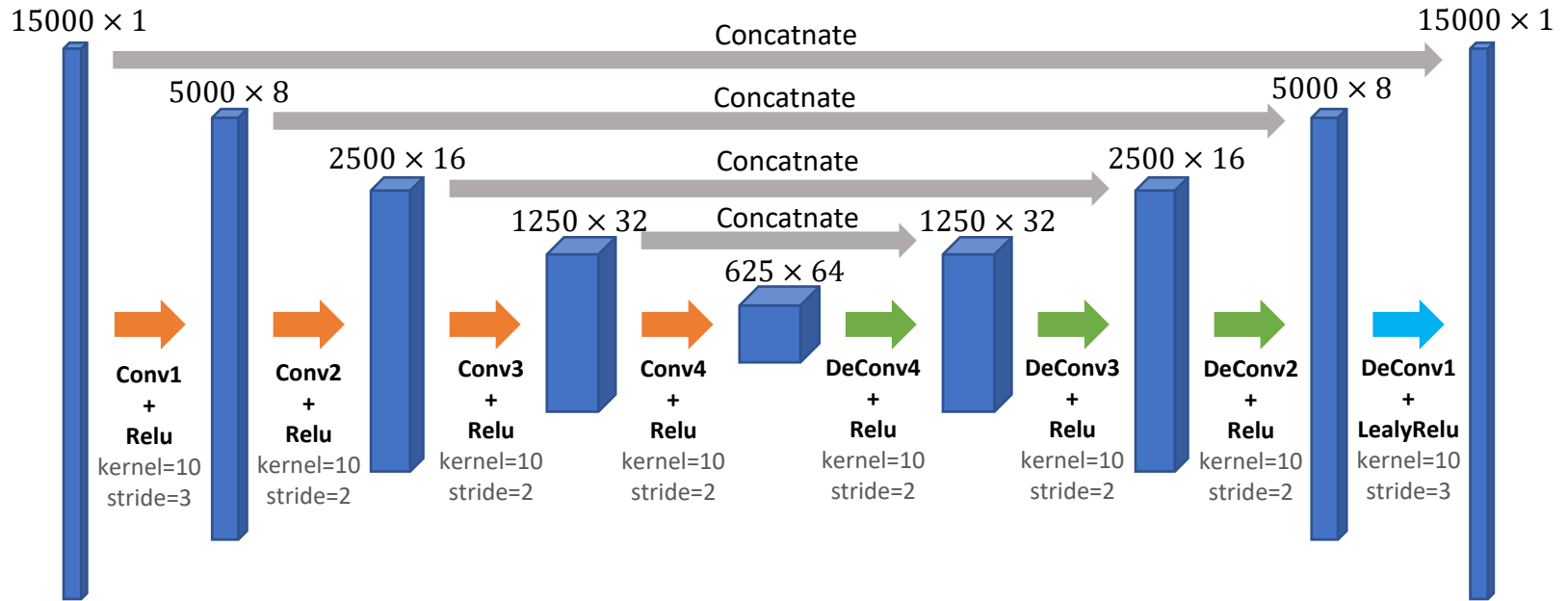
次元削減による情報の圧縮

次元拡大による情報の伸長

- 各層はConvolution層からなる.
- 特徴をぼやけさせる効果があるプーリングは用いずストライドの設定によってデータの次元削減を行う.
- 活性化関数は最終層に LeakyReLU, 他は ReLu を採用

複雑な時系列波形に関するNoise2Noise法の実装(2)

U-net



- AutoEncoder のエンコーダ部からデコーダ部にいくつかパスを設けて、位置情報の強調や収束のしやすさを狙ったもの。
- 画像データの処理に用いられる場合は、画像内の対象物体の位置情報をほど良く残す性質をもつことで知られている。

実験の方法：ノイズ低減性能指標

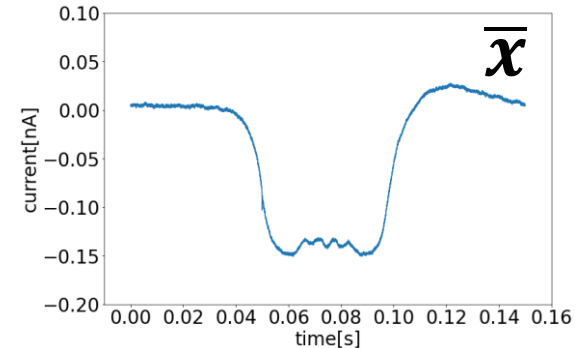
ノイズを含む事例ベクトル： x ，真の事例ベクトル： \tilde{x}

$$\text{ノイズ低減モデル } \hat{x} = f(x)$$

性能評価のためには \hat{x} と \tilde{x} の比較が必要。

しかし， \tilde{x} は一般に不明なため代替ベクトル \bar{x} を用いる。

通過時間間隔の違いのような不確定要素がある
2粒子以上の通過に比べ，1粒子通過の電流変化は定型的であり測定ごとの変動が少ないため，
多数回に亘る波形の平均化操作により揺らぎやノイズを低減できると考えられる。



テスト事例ベクトルの平均

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k$$



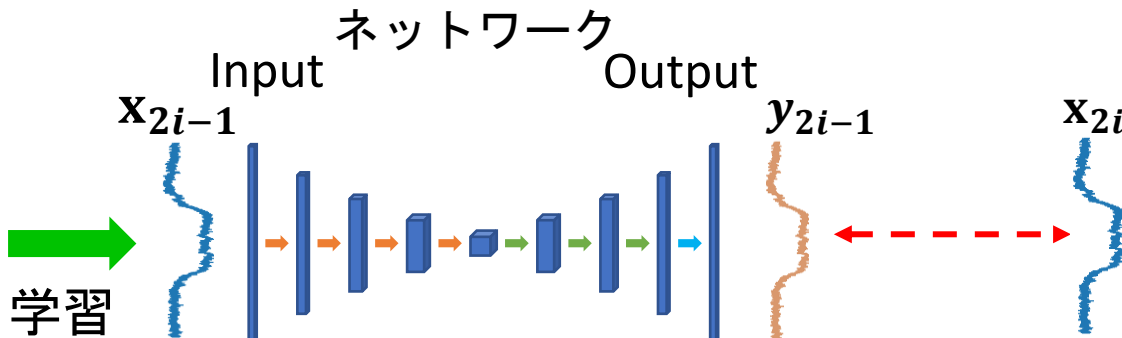
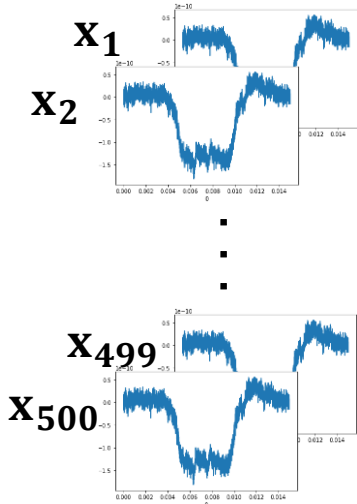
性能を2乗平均誤差で評価

$$\overline{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \|\hat{x}_k - \bar{x}\|^2$$

実験の方法(Noise2Noise学習と検証)

5CV

ノイズ学習用データ500個(250ペア)

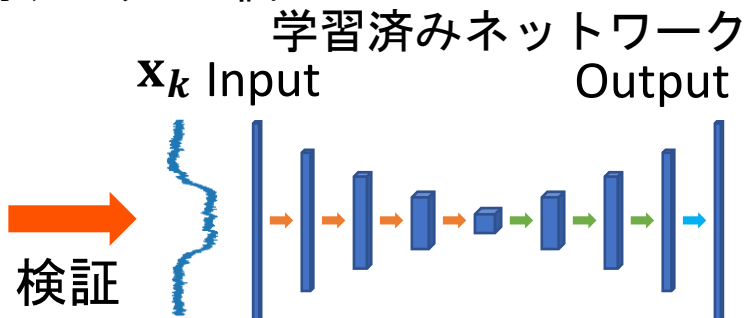
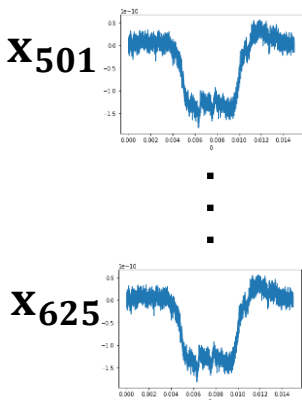


学習

$$Loss = \sum_{i=1}^N \|x_{2i} - y_{2i-1}\|^2 \rightarrow \min$$

(Nはミニバッチサイズ)

ノイズ低減検証用データ125個



検証

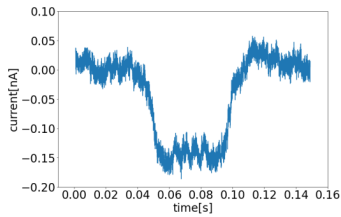
テストデータの平均

$$\bar{x} = \frac{1}{125} \sum_{k=501}^{625} x_k$$

ノイズ除去性能を2乗平均誤差で評価

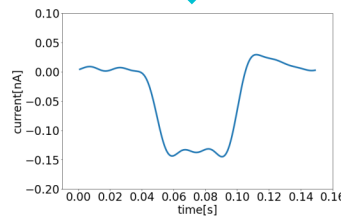
$$\overline{MSE} = \frac{1}{125} \sum_{k=501}^{625} \|\bar{x} - y_k\|^2$$

実験の方法(フーリエ, ウェーブレット)

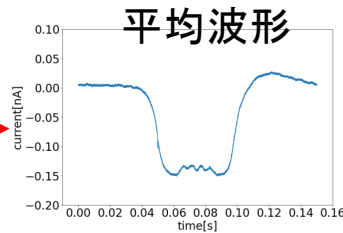


元波形

ノイズ低減(フーリエ)

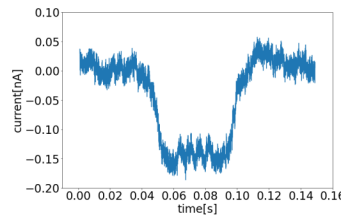


MSE



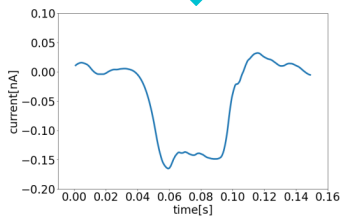
平均波形

1. 周波数の閾値を決めてノイズ低減処理
2. 平均波形との間で平均二乗誤差 (MSE) を計算
3. MSE の全データ分の合計が最小となるよう閾値をグリッドサーチ

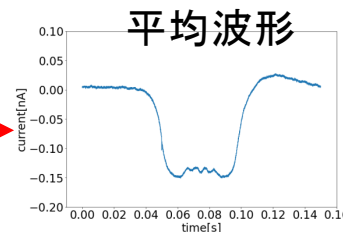


元波形

ノイズ低減(ウェーブレット)



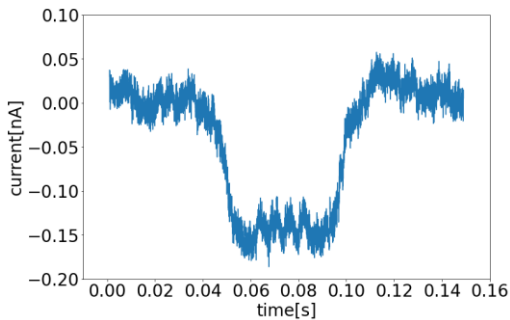
MSE



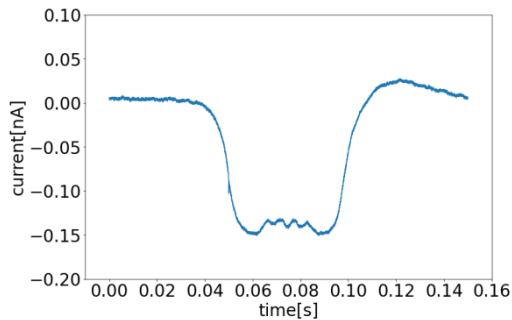
平均波形

1. マザーウェーブレット
Haar, Daubechies, Gaussian, etc.
及びウェーブレット係数の絶対値の
閾値を決めてノイズ低減処理
2. 平均波形との間で平均二乗誤差 (MSE) を計算
3. MSE の全データ分の合計が最小となる
よう閾値をグリッドサーチ

結果(1粒子波形)

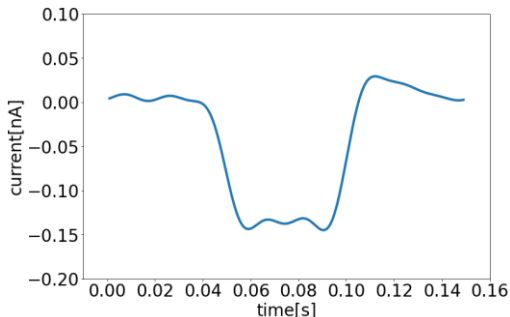


元波形

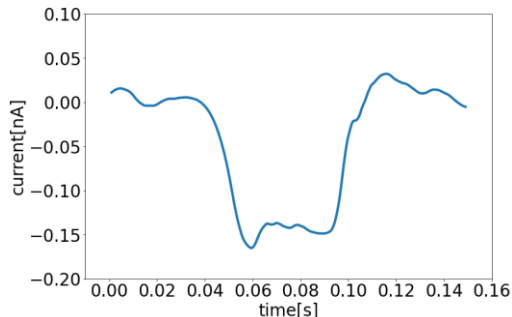


平均波形

元波形の一例と,
全データの平均波形

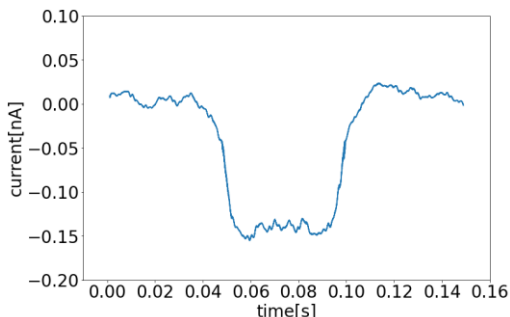


フーリエ変換による
ノイズ低減を行った波形

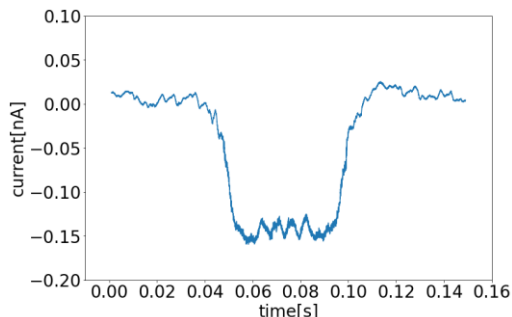


ウェーブレット変換による
ノイズ低減を行った波形

ノイズは低減できているが,
粒子が5段の狭窄部を通り抜
ける様子がほとんど残らない。



AutoEncoder による
ノイズ低減を行った波形



U-netによる
ノイズ低減を行った波形

ノイズが低減できている上,
粒子が5段の狭窄部を通り抜
ける様子が良く残っている。

結果(MSE)

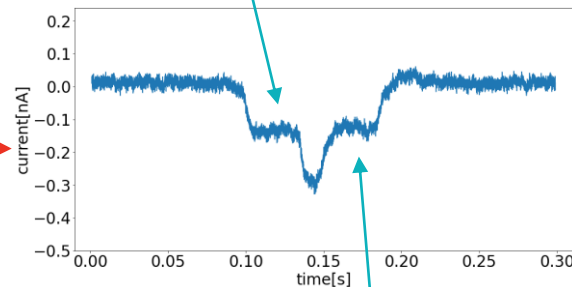
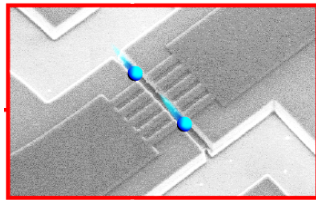
モデル	MSE
フーリエ変換	1.5285×10^{-22}
ウェーブレット変換	1.2036×10^{-22}
AutoEncoder	1.0456×10^{-22}
U-net	1.0395×10^{-22}

MSEで比較しても、フーリエ変換、ウェーブレット変換によるノイズ低減波形よりもAutoEncoder、U-netによるノイズ低減波形の方が平均波形により近いことがわかる。

2粒子通過波形のノイズ低減検証(1)

5段の狭窄部を持つナノチャンネルに、2個のナノ粒子を同時に流した場合の計測電流波形の例

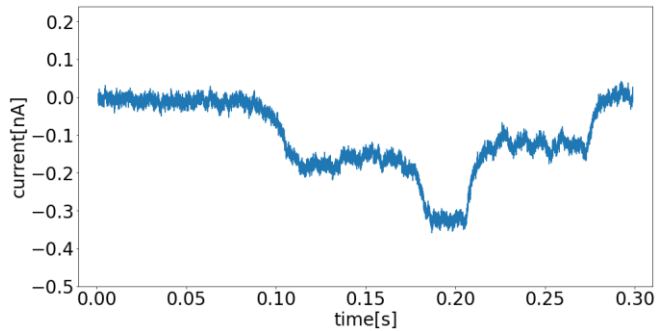
1個目のナノ粒子がナノチャンネルに入ると、チャンネルの部分的閉塞によってイオン電流が減少する。さらに2個目のナノ粒子が入ると、さらにチャンネルの閉塞が強まりイオン電流がもう1段減少する。



細かい電流変化がノイズに埋もれて存在

1個目のナノ粒子がナノチャンネルを抜けると、その分だけイオン電流が回復し、最後に2個目のナノ粒子が抜けることで元の水準まで電流が戻る。

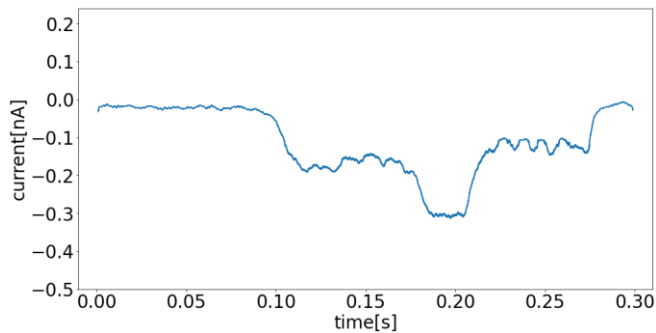
2粒子通過波形のノイズ低減検証(2)



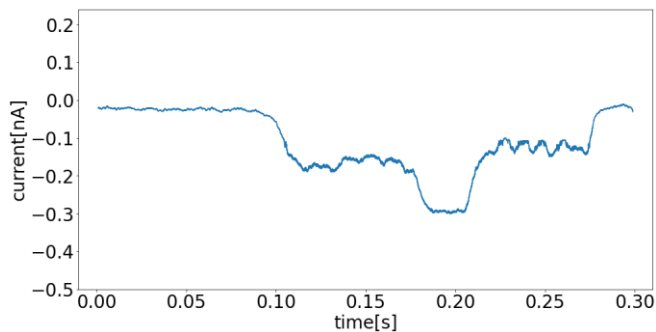
Input

1粒子通過の計測電流波形を用いて学習したノイズ低減モデル

2粒子通過の計測電流波形



AutoEncoderによるノイズ低減波形



U-netによるノイズ低減波形

Output

両モデルとも効果的にノイズ低減を行い、各粒子が狭窄部を通過する際に生じる電流の一時的減少を明確に導いている。

U-netの結果には僅かながらノイズが残留

まとめ

- Noise2Noise手法により， AutoEncoder と U-net を用いたノイズ低減モデルを， ナノチャンネルの1粒子通過計測電流波形から正しい電流波形を知ること無しに教師無し学習した．
- これらのモデルによりノイズを効果的に低減することができた．
- 従来のフーリエ変換やウェーブレット変換を用いる信号処理に比べて， 電流波形の詳細情報を失うことなく効果的なノイズ低減を行えることを確認した．
- 2粒子が同時にナノチャンネルを通過する際の計測電流波形からも， 効果的なノイズ除去が行えることを確認した．

ご紹介

人工知能学会

計測インフォマティクス研究会

HP <http://www.ar.sanken.osaka-u.ac.jp/SIG-MEI/>

先端計測を指向する情報、物理、化学、生物など多方面から…

制御原理

計測原理

推定原理

データ構造

先端計測
デバイス・装置

産官学の研究者と技術者の
成果発表と討論の場

アルゴリズム原理

エッジコンピュー
ティングデバイス

情報処理

エッジコンピュー
ティングアーキテクチャ

AI・機械学習，各方面の計測技術の著名研究者が
幹事・専門連絡委員会を構成

2018年9月21日	第1回@大阪大学産業科学研究所（吹田）	産業界含め40名参加
2019年3月6日	第2回@物質材料研究機構（つくば）	産業界含め130名参加
2019年9月18-19日	第3回@熊本大学パルス研究所	産業界含め60名参加
2020年8月31日	第4回@オンライン開催	産業界含め130名参加
2021年5月11日	第5回PA (Pacific Asia) KDD国際会議Workshop@オンライン開催	
2021年11月26-27日	第6回@オンライン(ハイブリッド)開催予定	

情報計測CREST・さきがけ主催瀬セミナー (Spring-8関係の講演も多数)

<https://measurement-informatics-seminars.jp/>



趣旨 開催方法 参加方法 講演予定 講演記録

エントリー

情報計測オンラインセミナーシリーズ

— 数理・情報科学×計測科学の高度融合による新展開 —

- 第1回 2021/06/26 10:30-11:50 鷲尾 隆 (大阪大学産業科学研究所)
「革新的先端計測の方程式：計測+AI=情報計測」
 - 第2回 2021/07/10 10:30-11:50 小松崎 民樹 (北海道大学電子科学研究所)
「計測介入型AIによる迅速ラマン計測」
 - 第3回 2021/07/31 10:30-11:50 岡田 真人 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)
「ベイズ計測」
 - 第4回 2021/08/07 10:30-11:50 長尾 大道 (東京大学地震研究所)
「情報計測に基づく地震研究の深化」
 - 第5回 2021/08/21 10:30-11:50 赤井 一郎 (熊本大学産業ナノマテリアル研究所)
「放射光計測と機械学習の融合」
 - 第6回 2021/09/04 10:30-11:50 小野 峻佑 (東京工業大学情報理工学院)
「スパース最適化による計測データからの情報再構成」
 - 第7回 2021/09/18 10:30-11:50 日野 英逸 (統計数理研究所)
「能動学習による計測の効率化」
- 第18回まで予定