2023/2/13　卒業論文発表会

アトラクタ再構成のためのリザバーコンピューティングのhyperparameter tuning

非線形数理講座

08A19031 大石　悟

カオス力学系

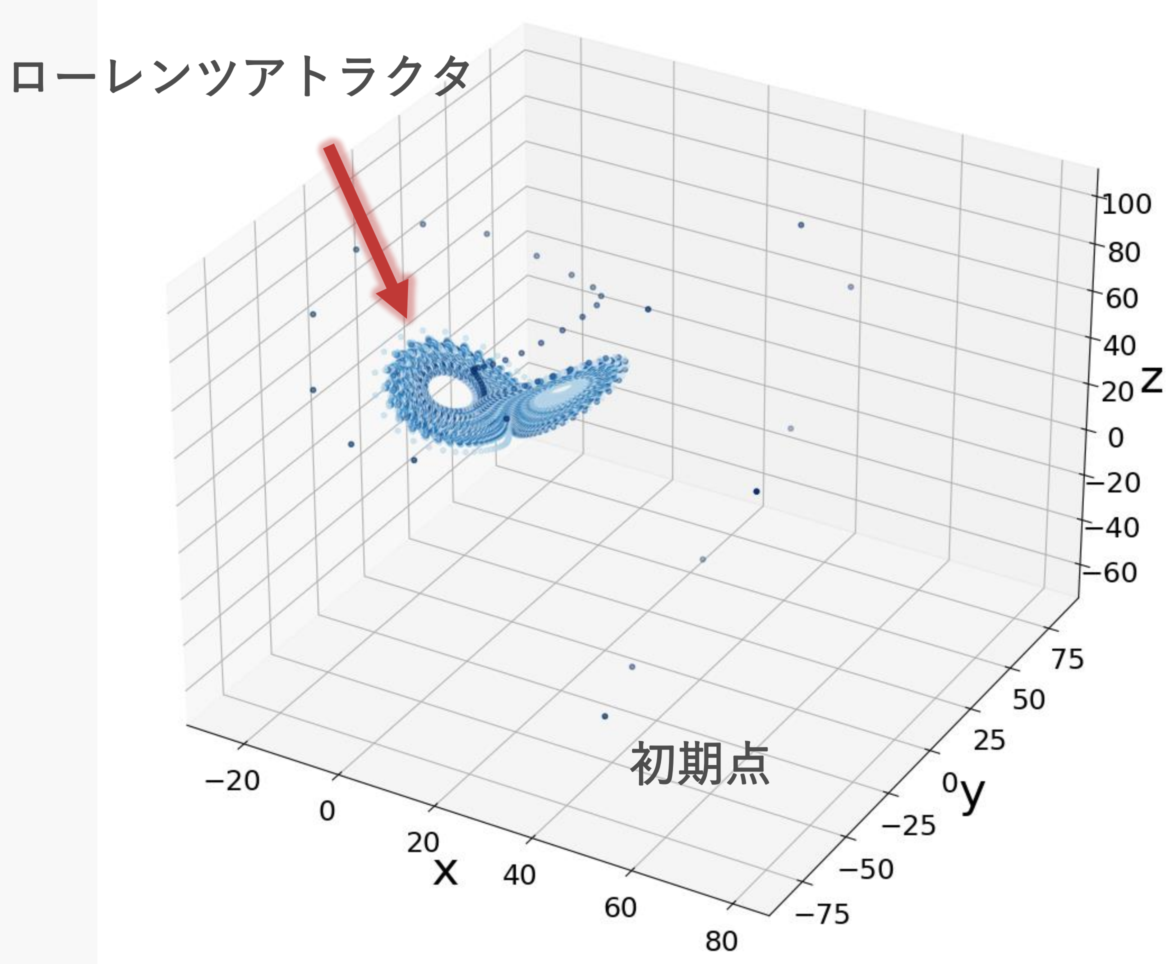
- 決定論的法則に従うが、予測できないほど複雑な軌道をもつ系
  初期値鋭敏性…初期状態が極僅かに異なるだけで、時間発展と共に指数関数的にその差が大きくなる性質（バタフライ効果）
  長期的な予測は原理的に不可能
- 社会・自然界における例
  二重振り子，天候変動，天体の運動，神経の発火（スパイク）

アトラクタ (Attractor)

十分な時間が経過したときに相空間上の軌道が引き付けられる一定の集合

例： Lorenz方程式…大気の熱対流の近似

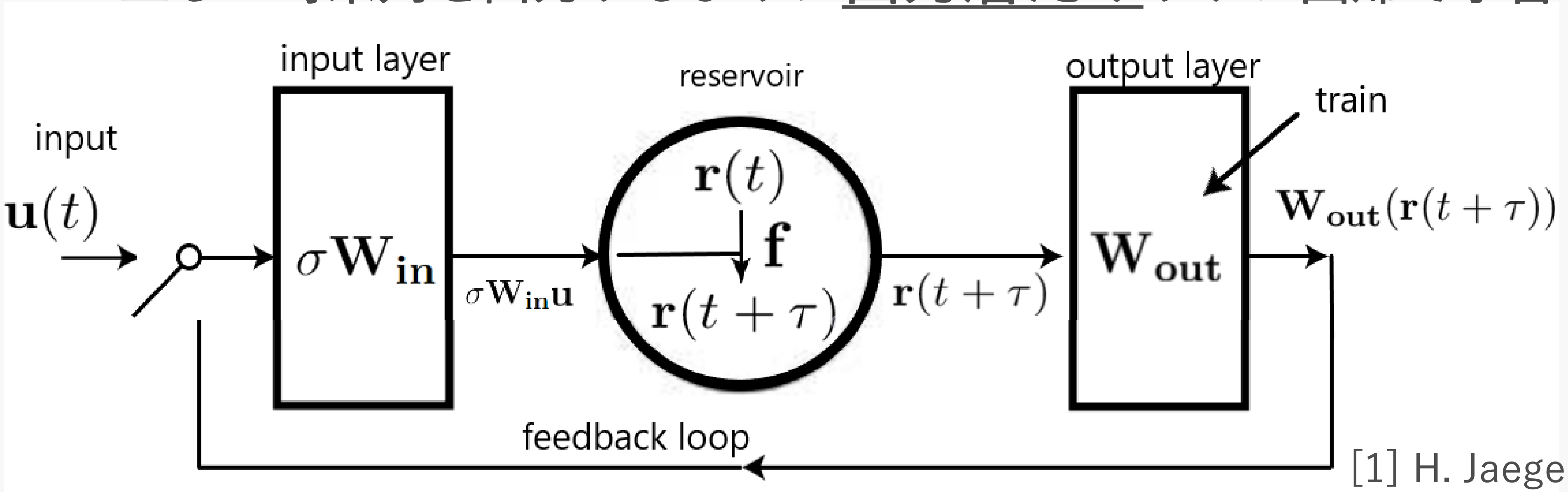
$$\dot{x} = 10(y - x),$$
$$\dot{y} = x(28 - z) - y,$$
$$\dot{z} = xy - 8z/3.$$



【目的】アトラクタの性質の再現（アトラクタ再構成）を達成したカオス時系列予測とその応用

リザバーコンピューティング (RC) [1]

- カオス力学系の時系列予測に適した機械学習アプローチ
  - 観測時系列 $\boldsymbol{u}(t)$ を再帰的構造・非線形性を持った高次元空間 (リザバー空間) へ入力
  - 入力及び時間発展の更新則：$\boldsymbol{r}(t+\tau) = \boldsymbol{f}[\boldsymbol{r}(t), \boldsymbol{u}(t)]$
  - 正しい時系列を出力するように出力層だけリッジ回帰で学習

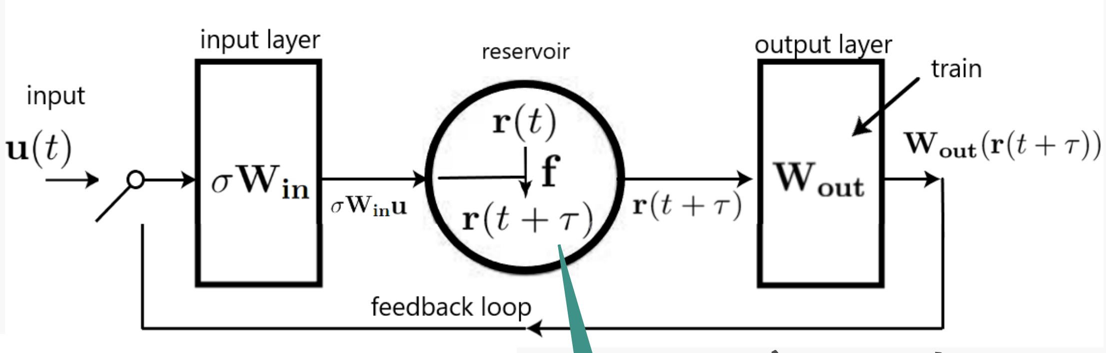


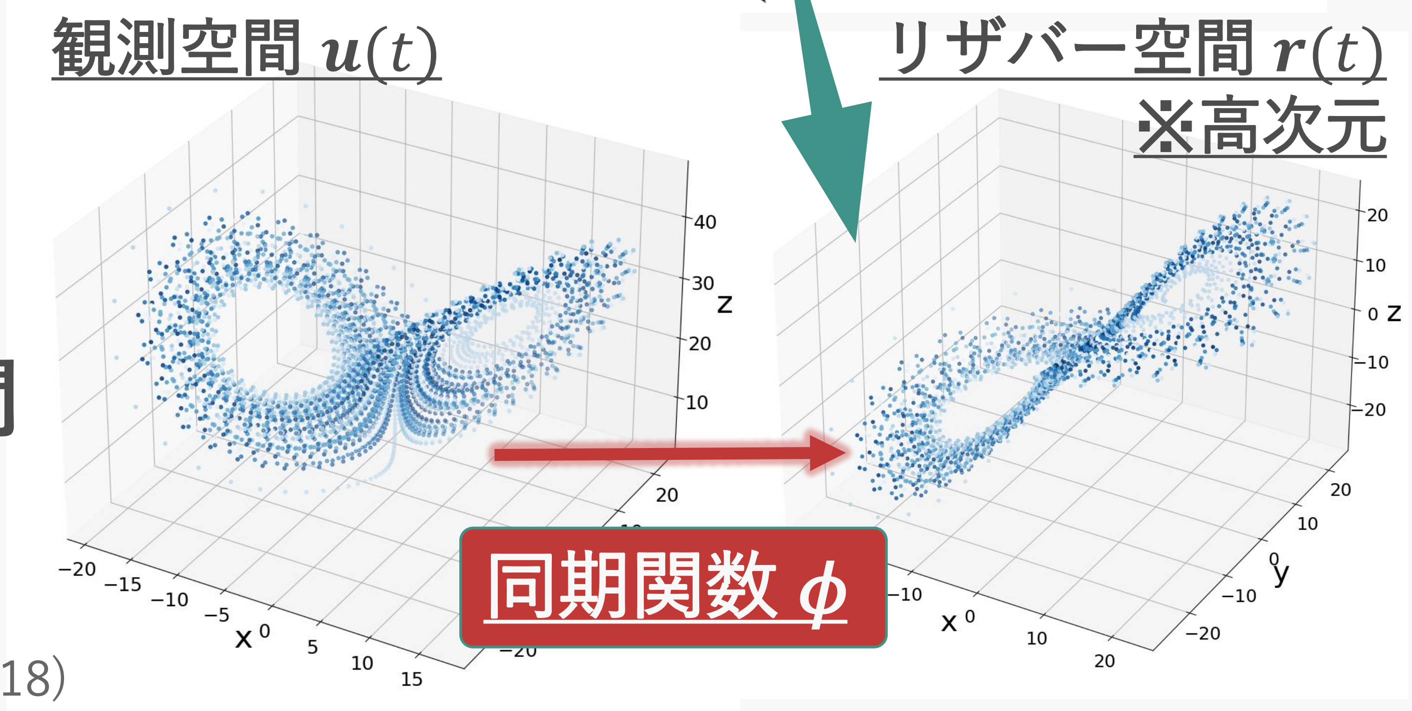
[1] H. Jaeger, GMD Report (2001)

RCにおけるアトラクタ再構成 [2]

- 観測空間と
  リザバー空間の間で
  良い性質をもつ
  一般化<u>同期</u>が成立
  さらに、同期が安定

➢ リザバー空間と観測空間で<u>統計的性質</u>が一致

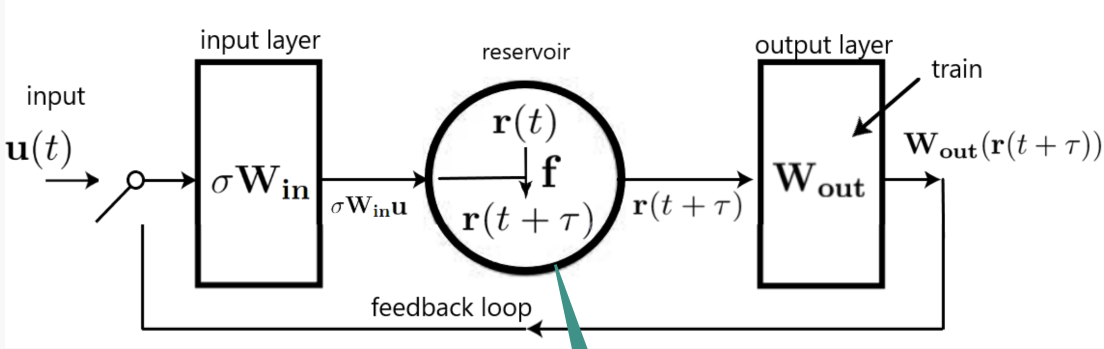


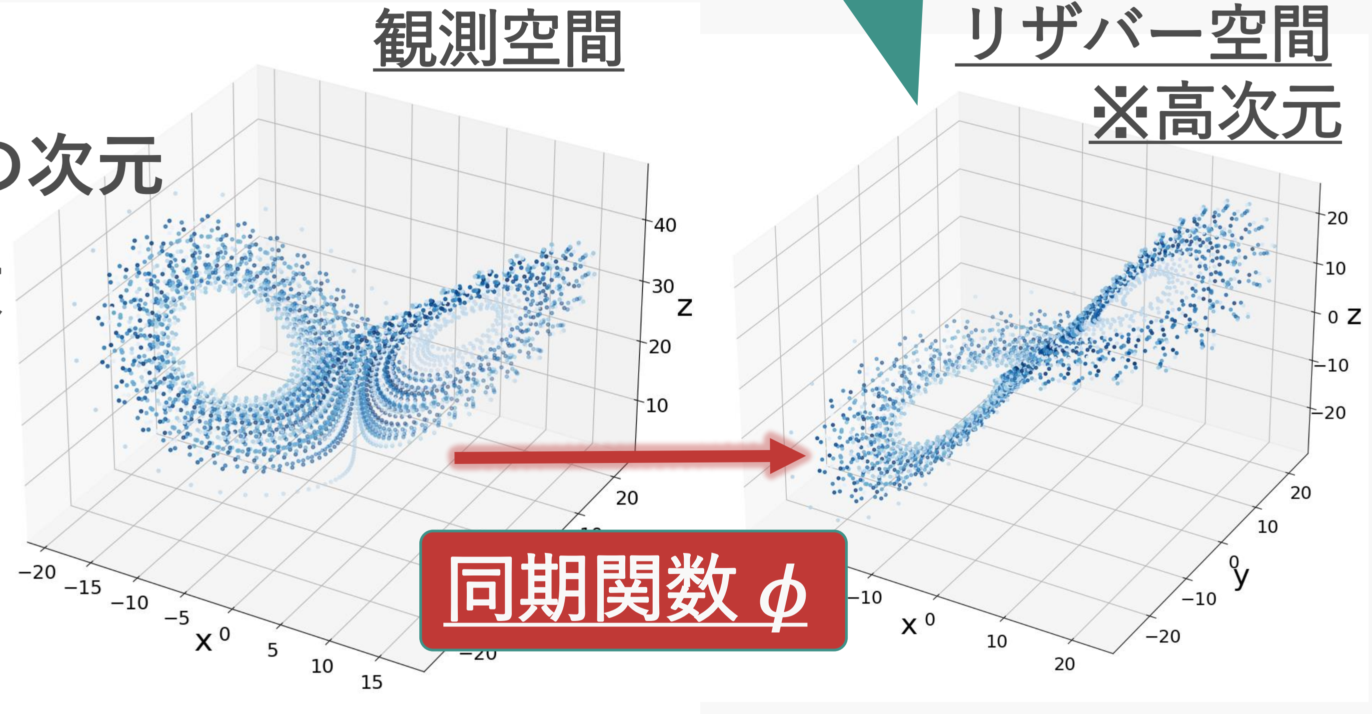


[2] Z. Lu, et al.,Chaos (2018)

アトラクタ再構成の５条件

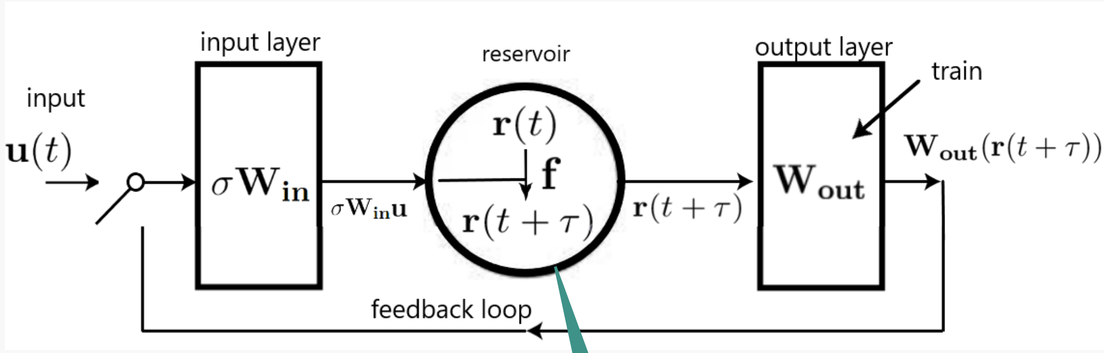
1. ESP（RCの持つ性質）
2. 弱い一般化同期
   (連続<u>同期関数 ϕ</u> が存在)
3. 状態の出力可能性
   リザバーの次元 >> 観測空間の次元
4. Lyapunovスペクトラムが一致
   (アトラクタの統計的特徴量)
5. 同期状態は安定
   (横断リアプノフ指数が負)

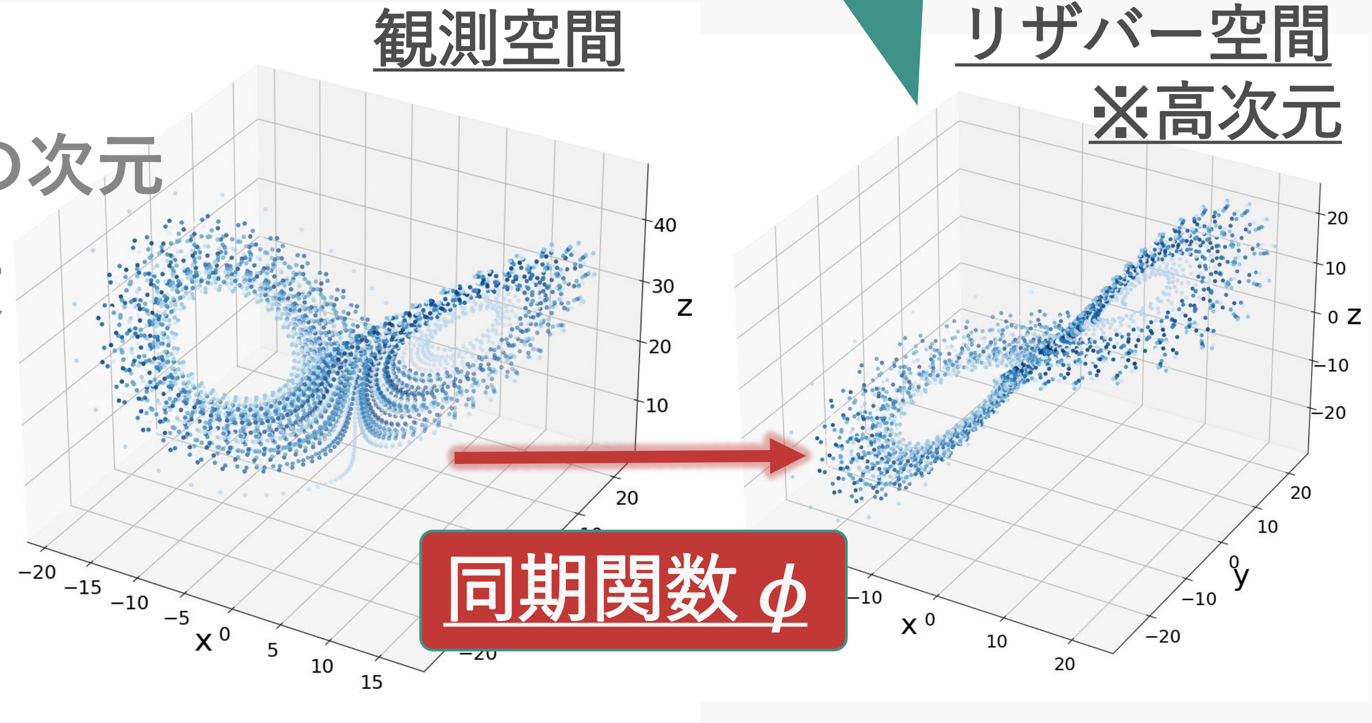




アトラクタ再構成の５条件

1. ESP（RCの持つ性質）
2. 弱い一般化同期
   (連続同期関数 ϕ が存在)
3. 状態の出力可能性
   リザバーの次元 >> 観測空間の次元
4. Lyapunovスペクトラムが一致
   (アトラクタの統計的特徴量)
5. 同期状態は安定
   (横断リアプノフ指数が負)





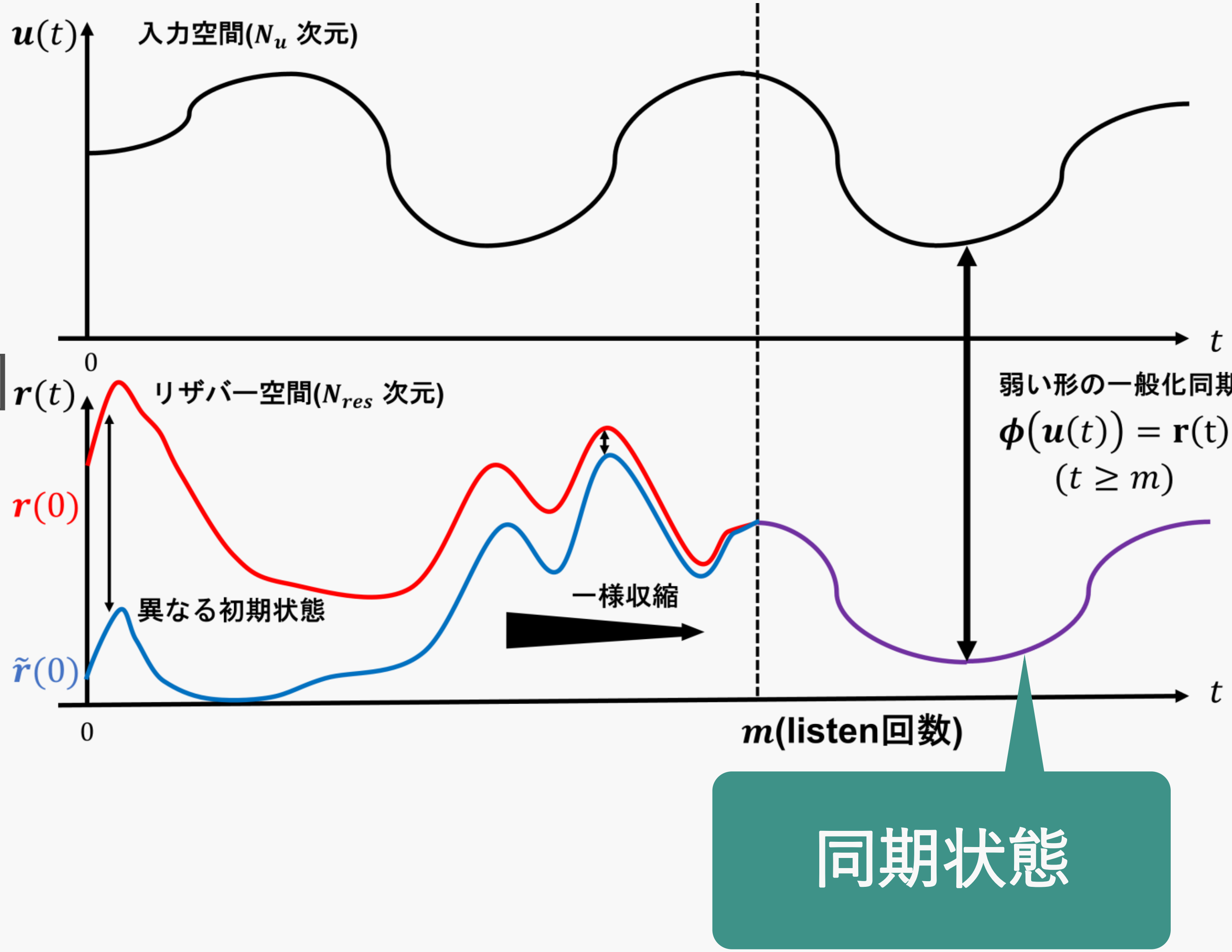
1. ESP

リザバーの初期状態に依らず，
十分な長さの入力データ列から
リザバーの状態が一意に決まる

更新則：$r(t+\tau) = f[r(t), u(t)]$
のfが一様収縮性を持つ
⇒リザバーの状態が収束

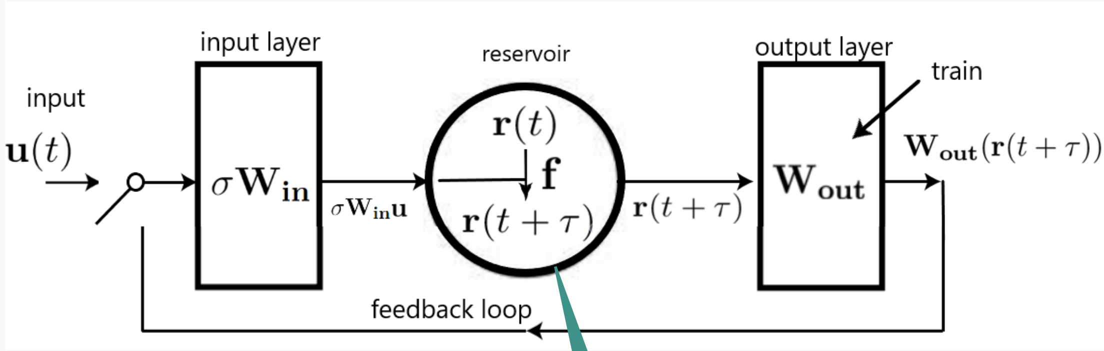
2. 弱い一般化同期

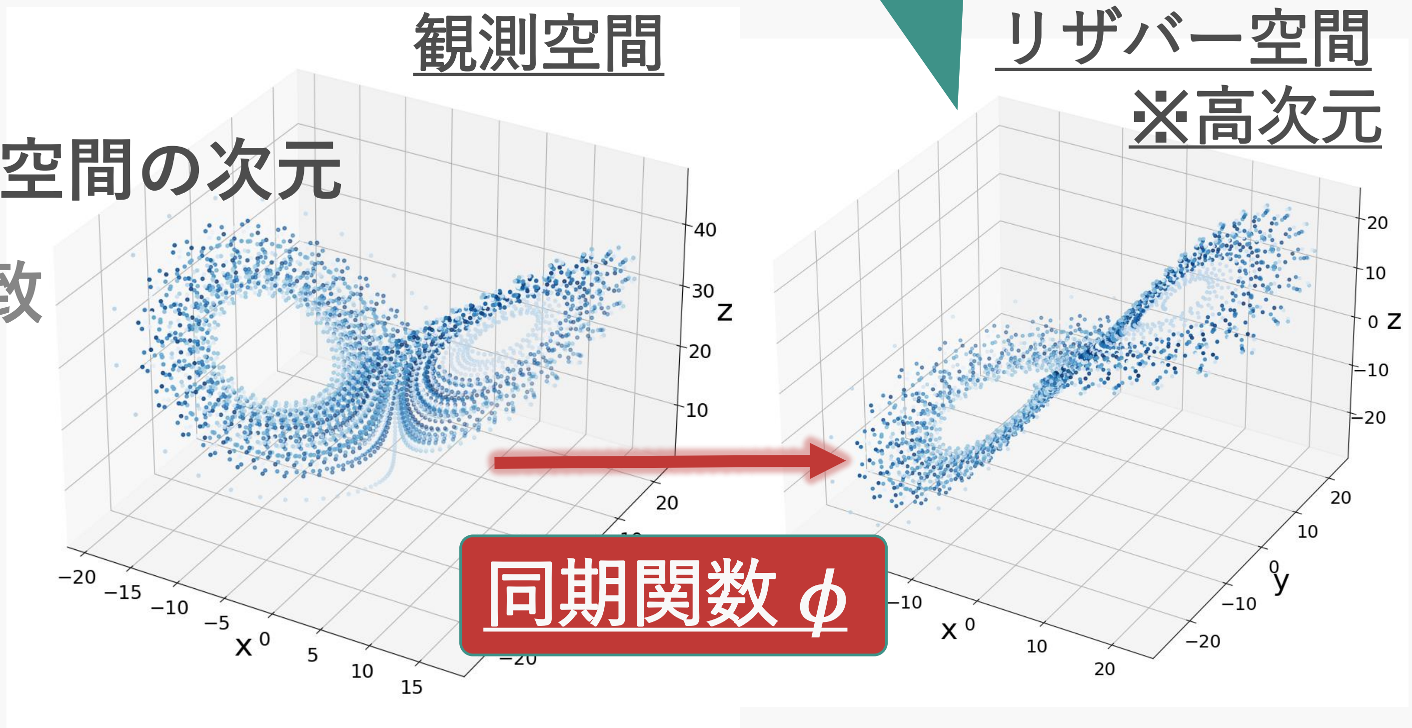
入力系とリザバー空間の間に
連続な同期関数ϕが存在
$\phi(u(t)) = r(t)\ (t \geq m)$

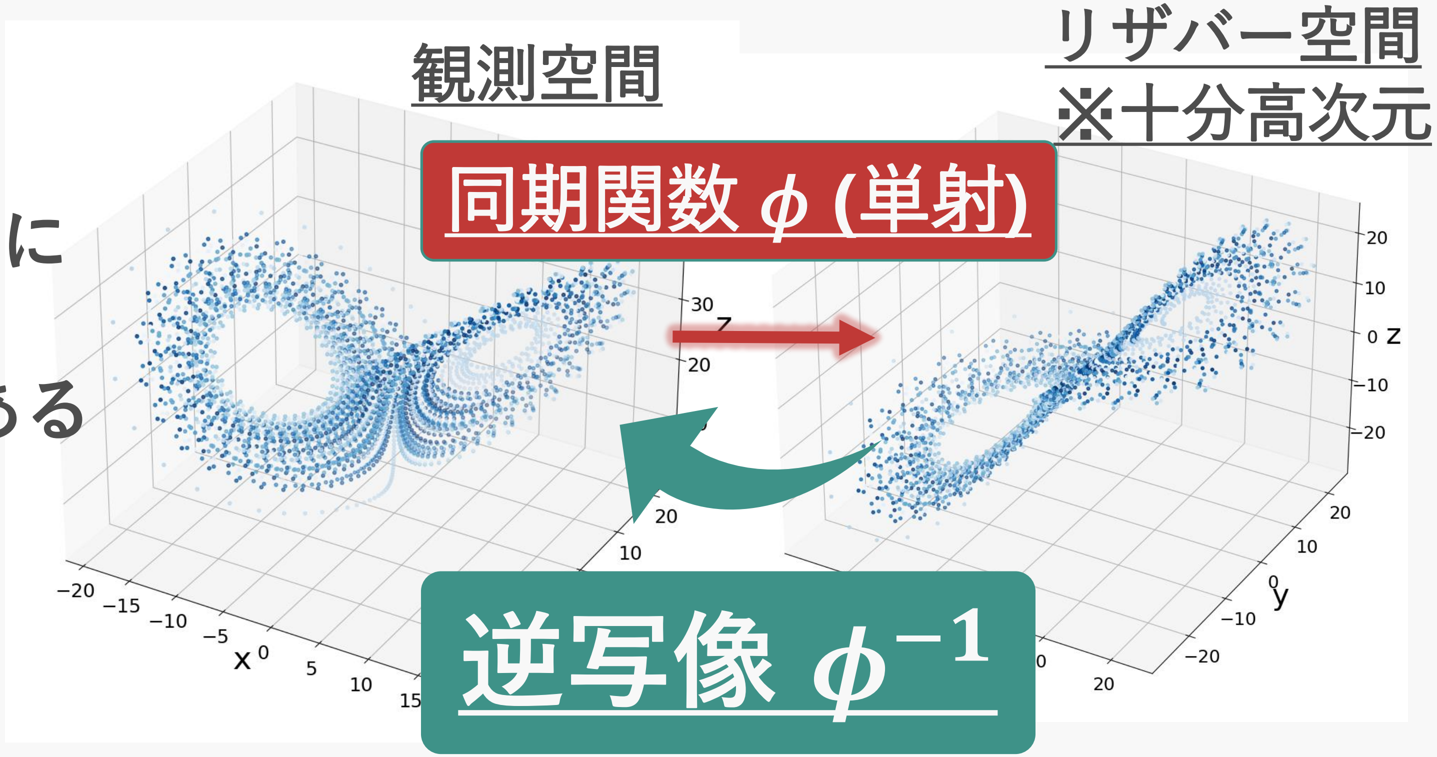


アトラクタ再構成の５条件

1. ESP（RCの持つ性質）〇
2. 弱い一般化同期
(連続同期関数 ϕ が存在) 〇
3. **状態の出力可能性**
リザバー空間の次元 >> 観測空間の次元
4. Lyapunovスペクトラムが一致
(アトラクタの統計的特徴量)
5. 同期状態は安定
(横断リアプノフ指数が負)







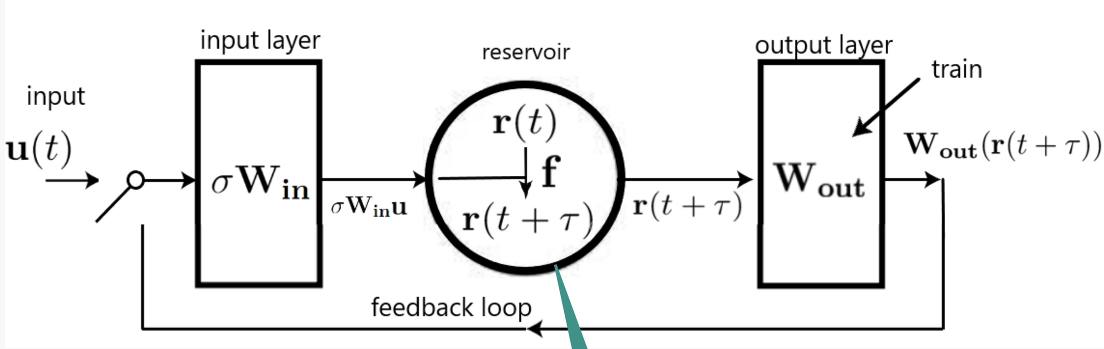
3. 状態の出力可能性

リザバーの予測が成功するために
同期状態から元の空間への
逆写像 ϕ^{-1} を表現する必要がある
⇒同期関数 ϕ が単射(埋め込み)
である必要がある

- 埋め込み定理
  (元のアトラクタの次元)× 2 ＜ (再構成する空間の次元)
  ⇒埋め込みが存在する

  実際は、、観測空間の次元 >> リザバー空間の次元

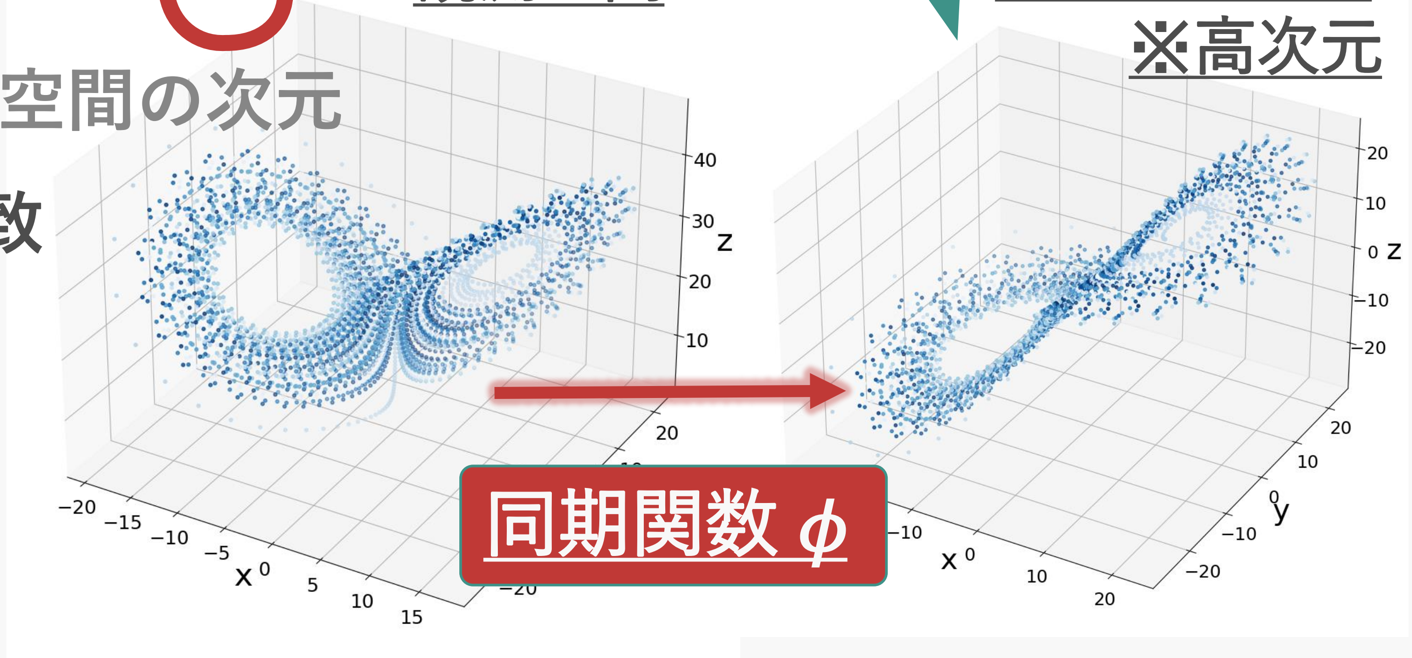
アトラクタ再構成の５条件



1. ESP（RCの持つ性質）
2. 弱い一般化同期
   (連続同期関数 ϕ が存在)
3. 状態の出力可能性
   リザバー空間の次元 >> 観測空間の次元
4. Lyapunovスペクトラムが一致
   (アトラクタの統計的特徴量)
5. 同期状態は安定
   (横断リアプノフ指数が負)

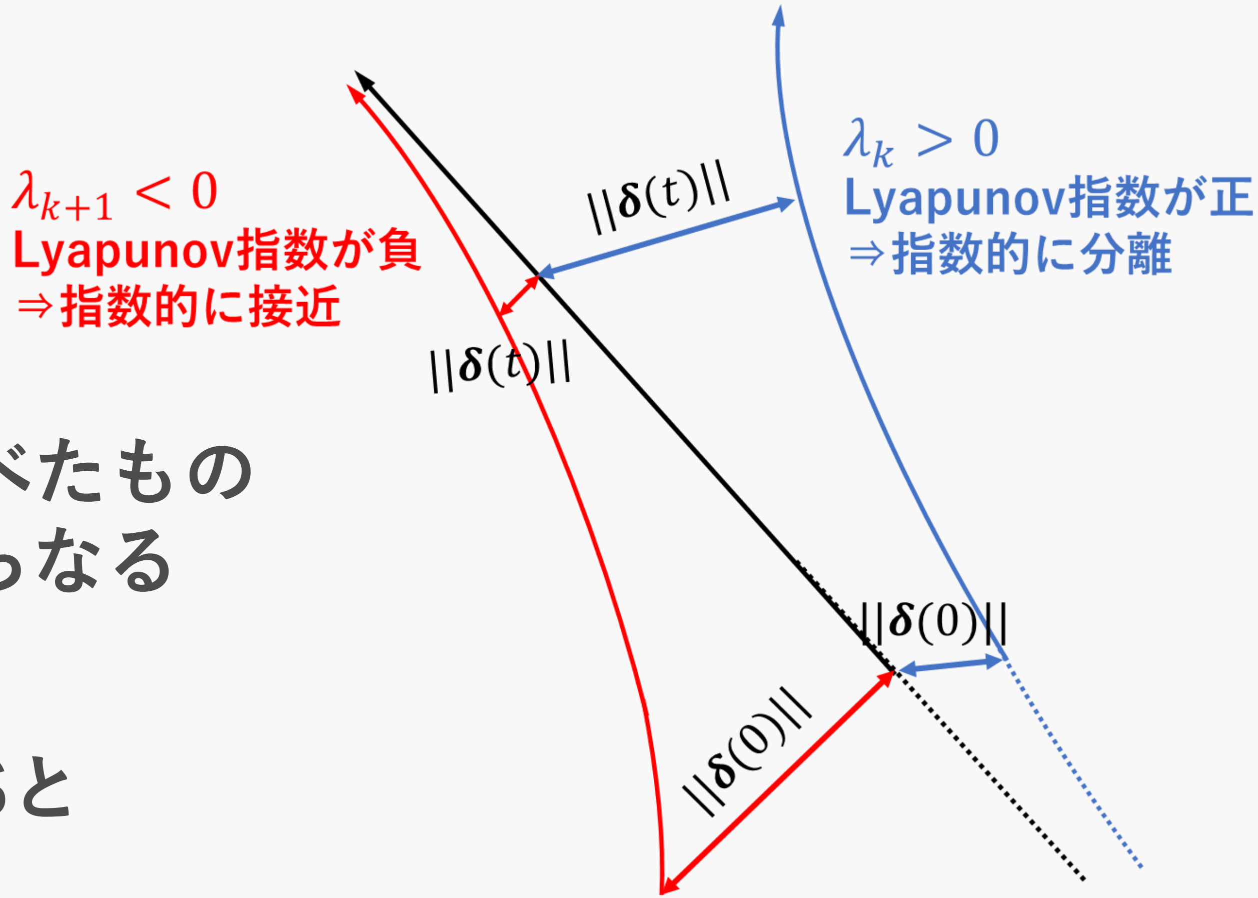
観測空間

リザバー空間
※高次元



Lyapunovスペクトラム (LS)：アトラクタの統計的特徴量

- **Lyapunov指数 λ**
  $||\delta(t)|| \approx ||\delta(0)||e^{\lambda t}$
  十分近い軌道の指数的分離度
- **Lyapunovスペクトラム (LS)**
  Lyapunov指数 λ_k を降順に並べたもの
  相空間の次元と同じ要素数からなる
  LSが計算できる
- **学習済みのRCから計算したLSと**
  元の駆動系のLSを比較
  ⇒<u>RCのアトラクタの再構成の程度を評価できる</u>



[3]P. Collet and J. Eckmann. Springer Science & Business Media (2007)

4. Lyapunovスペクトラムが一致

学習済みのRCから計算した正・零
Lyapunov指数が真のLSと近い
⇒類似したアトラクタを生成 (右下)

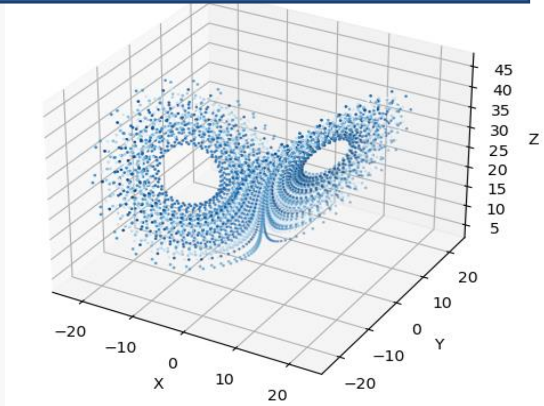
5. 同期状態が安定

横断リアプノフ指数が負
同期状態から分離する指数

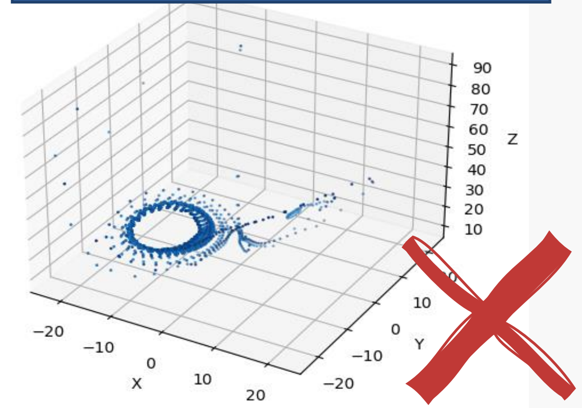
- 一つでも正
  ⇒再構成失敗 (右上)

➢ 横断リアプノフ指数の求め方
リザバー空間の次元は
元の相空間よりはるかに多いため
余分なLSが計算される
⇒この余分なLSが横断リアプノフ指数

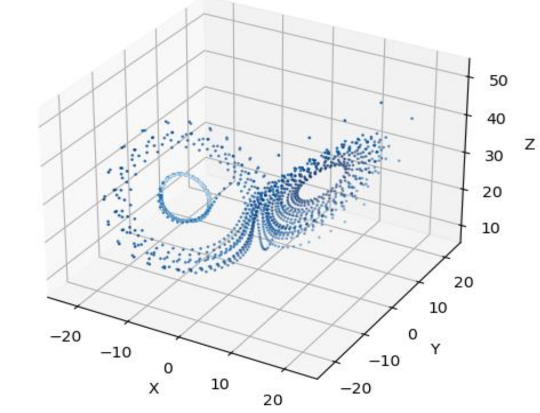
ローレンツ方程式の時系列
真のLS(0.91, 0, -14.6)



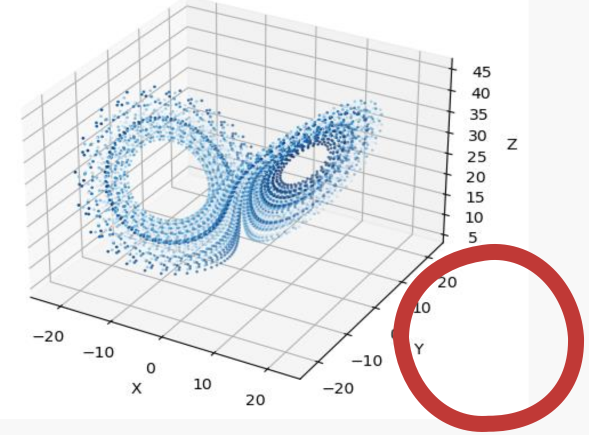
LS=(1.6, 0.23, 0.015,･･)
の予測結果



LS=(0.94, 0.03, -0.070,･･)
の予測結果



LS=(0.92, 0.00059, -0.033,･･)
の予測結果



アトラクタ再構成の５条件

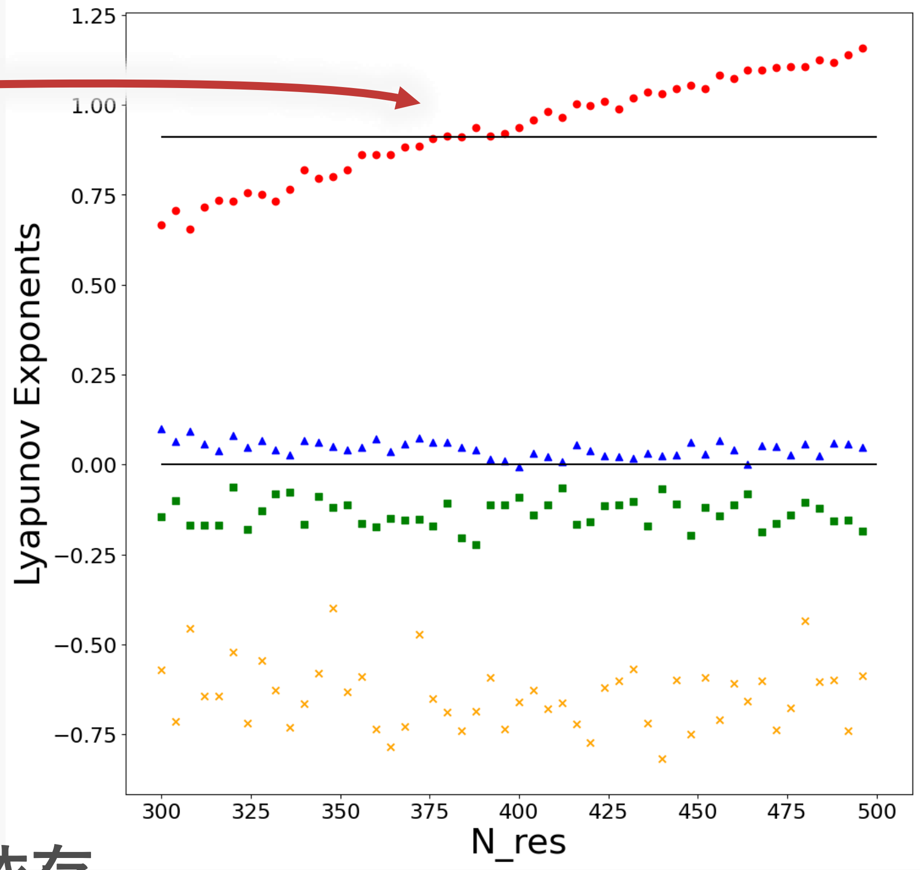
1. 状態の出力可能性
   リザバー空間の次元 >> 観測空間の次元 〇
2. ESP（RCの持つ性質） 〇
3. 弱い一般化同期 〇
   (連続同期関数 ϕ が存在)
4. 正、零Lyapunovスペクトラムが一致
5. 同期状態は安定
   ⇒横断リアプノフ指数が負
   ⇒横断リアプノフ指数はLyapunovスペクトラムから計算可能

本研究の着眼点

Lyapunovスペクトラム
を調整できれば
アトラクタ再構成できそう

- **Lyapunovスペクトラムは Hyperparameterに依存**
  その依存性は連続

LSを調整する
Hyperparameter tuning



Hyperparameter
(リザバーのノード数:N_{res})

課題

- LSはHyperparameterにブラックボックス的に依存
- LSの評価・計算コストが高い

LSを調整する Hyperparameter tuning 方法

- ベイズ最適化、TPE (tree-structured Parzen estimator) [4]
  効率的なHyperparameter探索の手法
- 損失関数E_{cost}を最小化するように探索

$$E_{cost} = \sum_{1\le k\le j} \underline{a_k\left(\lambda_k - \hat{\lambda}_k\right)^2} + \underline{b\chi_{\lambda_{j+1}\ge 0}\left(\hat{\lambda}_{j+1}\right)\hat{\lambda}_{j+1}}$$

$\left(\lambda_j \ge 0\,, \lambda_{j+1} < 0\right)$
$a_k, b > 0$の定数
本研究では全て1

条件④
正、零LSのうち
真の値との誤差

条件⑤
横断 Lyapunov 指数のうち
正のものが存在する
⇒ $\hat{\lambda}_{j+1}$は正の値を取る
⇒この項は正の値をもつ

[4] J. Bergstra et al., ICML. PMLR (2013)

Lyapunovスペクトラムを調整するTuningプロセス

構築
Hyperparameterに基づいて
RCを構築
同期状態まで時間発展

探索
損失関数E_{cost}から
次に探索するHyperparameter
をベイズ最適化、TPEで決定

学習
出力層W_{out}を学習データを
用いてリッジ回帰で学習

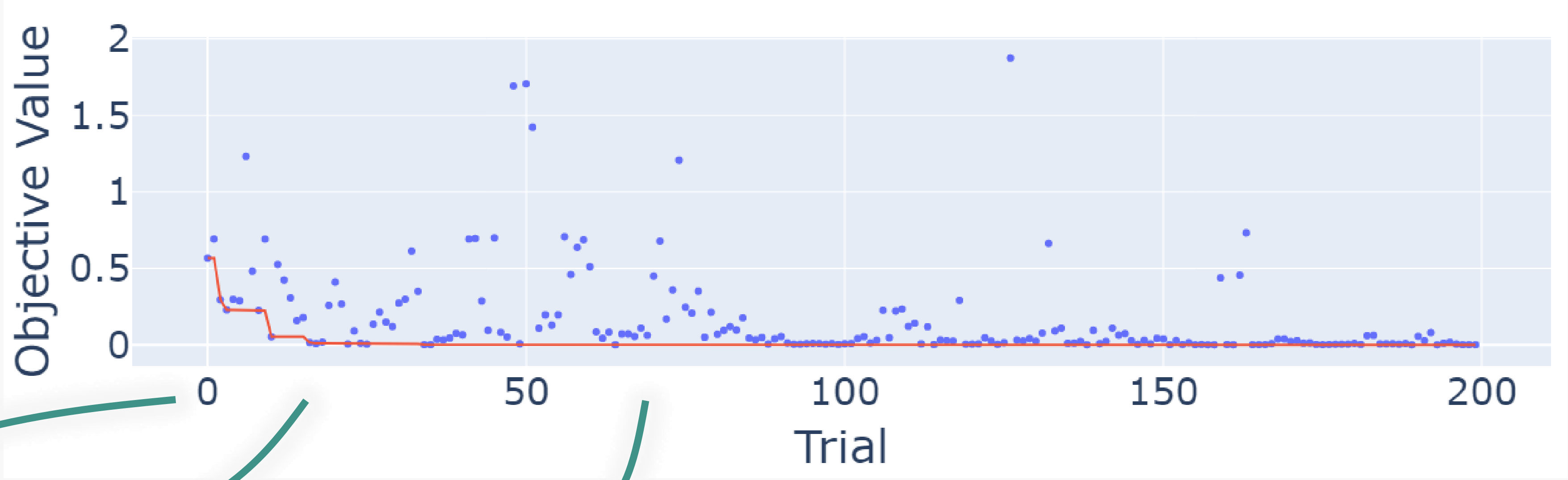
評価
学習済みの出力層と
同期状態のRCから
Lyapunovスペクトラムを計算
損失関数E_{cost}で評価

ベイズ最適化、TPEでTuning可能

Lorenz方程式

$$\dot{x} = 10(y - x),$$
$$\dot{y} = x(28 - z) - y,$$
$$\dot{z} = xy - 8z/3.$$

サンプリング間隔 $\Delta t = 0.02$
4 次の Runge–Kutta 法で
データを生成



Trial=0のLS	Trial=16のLS	Trial=64のLS		真のLS
0.156	1.02	0.916	=	0.91
-0.0175	0.0606	0.00944		0
-0.297	-0.148	-0.0859		-14.6

提案手法でアトラクタ再構成の条件を達成

4. 正、零LSの誤差 小
5. 横断 Lyapunov 指数は全て 負

Tuningでアトラクタ再構成が達成！

Trial=0のLS

0.156
-0.0175
-0.297

Trial=16のLS

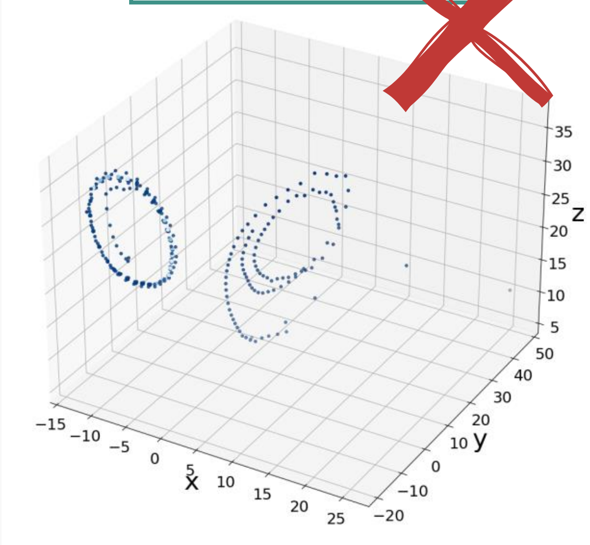
1.02
0.0606
-0.148

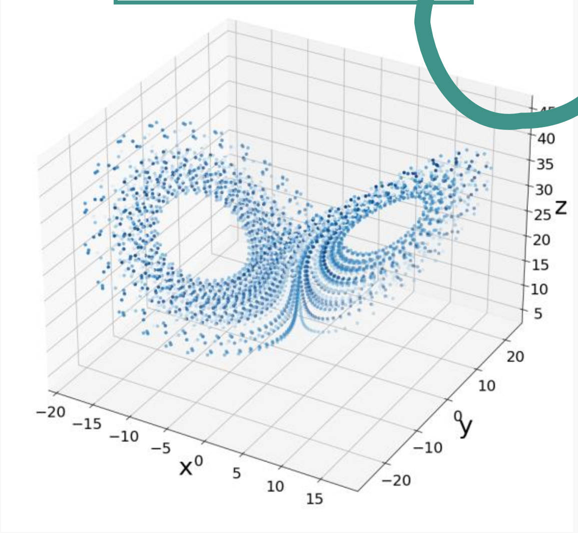
Trial=64のLS

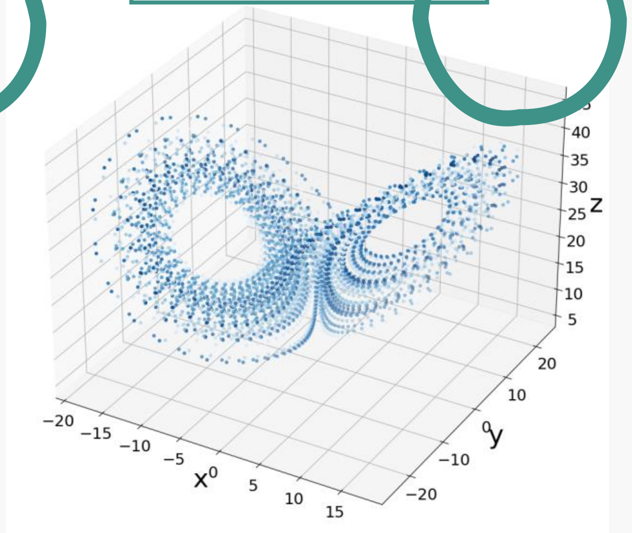
0.916
0.00944
-0.0859

Trial=16,64ともに再構成達成に見える

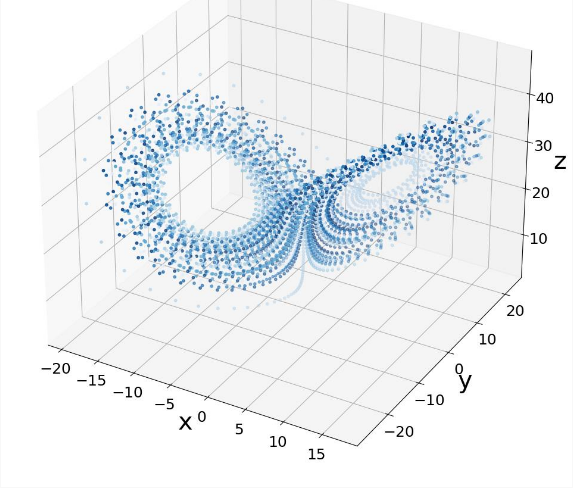
LSの誤差が小さいことで何か違いはあるか??







真の時系列



実験結果(本研究の副次的成果)

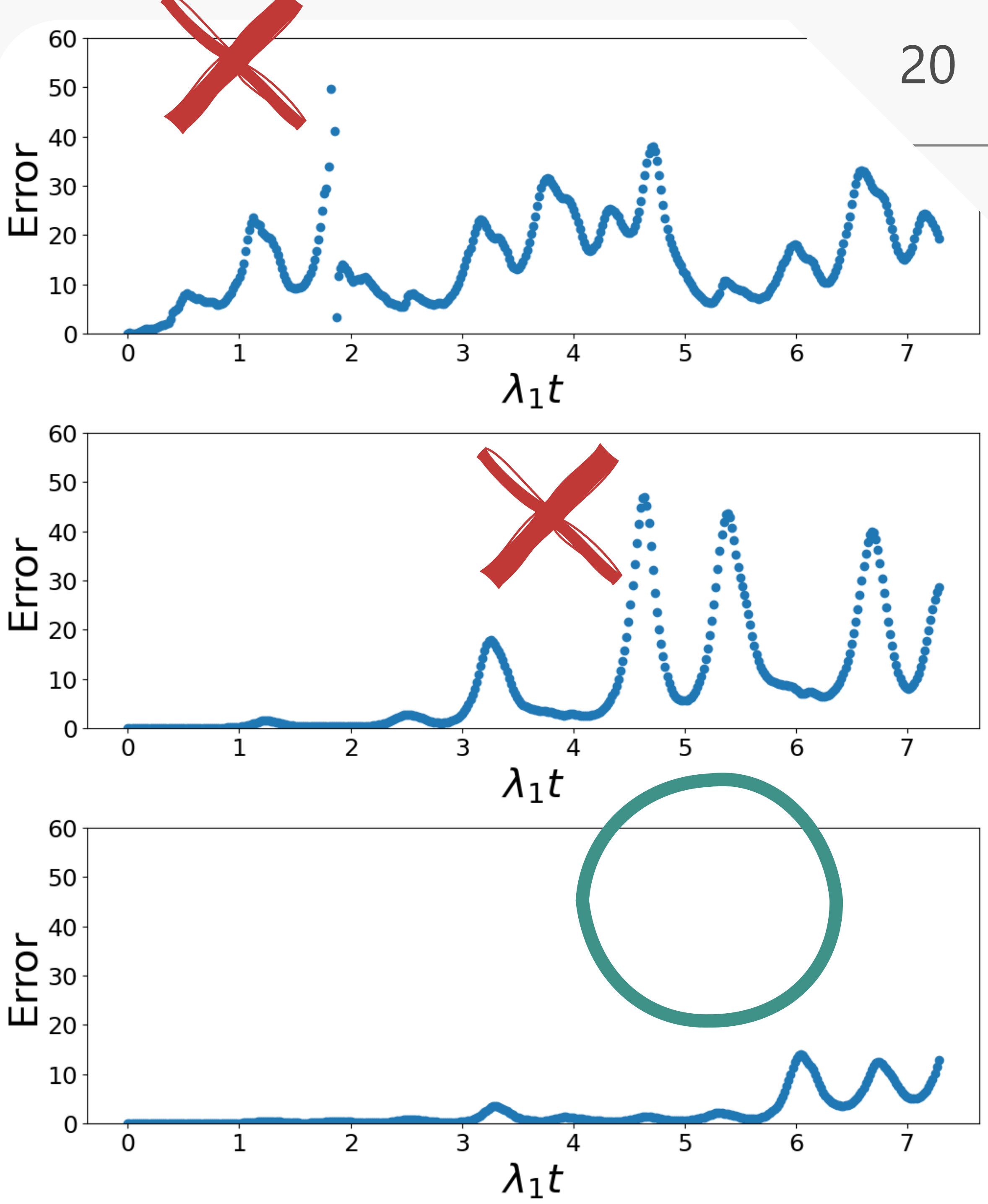
提案手法で条件を達成
4. 正、零LSの誤差 小
5. 横断 Lyapunov 指数は全て 負

アトラクタ再構成！
&
短期予測精度向上！

Trial=0

Trial=16

Trial=64



- 【目的】
  リザバーコンピューティングによるカオス力学系の時系列予測において、アトラクタ再構成が達成されるように最適化すること。

- 【提案手法】
  Lyapunovスペクトラム、横断リアプノフ指数から損失関数を設計
  ベイズ最適化（TPE）でHyperparameter tuning

- 【結果】
  提案手法で最適化したリザバーコンピュータは
  アトラクタ再構成を達成、Tuningは実行可能。
  - 短期予測の精度の向上
  - より少ないノード数でも予測精度を維持できる

カオス力学系の<u>モデルフリー</u>な予測

$$\frac{dx}{dt} = f(x(t))$$

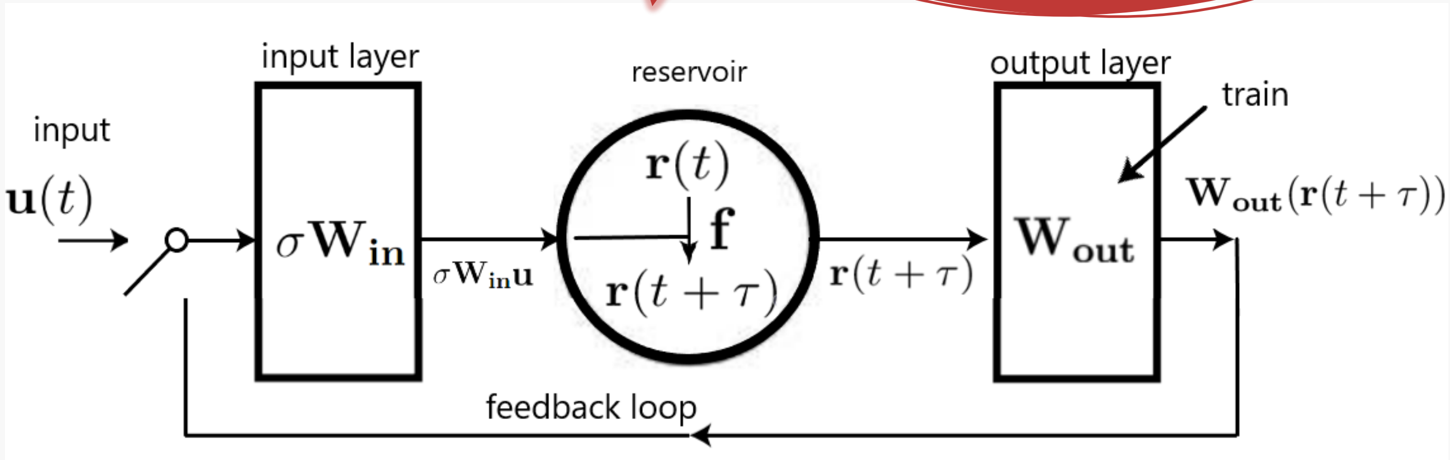
決定論的法則 <u>未知</u>

十分な長さの
<u>データ列のみ</u>

<u>Lyapunovスペクトラム</u>
を精度よく近似[5]

提案手法で
Tuning

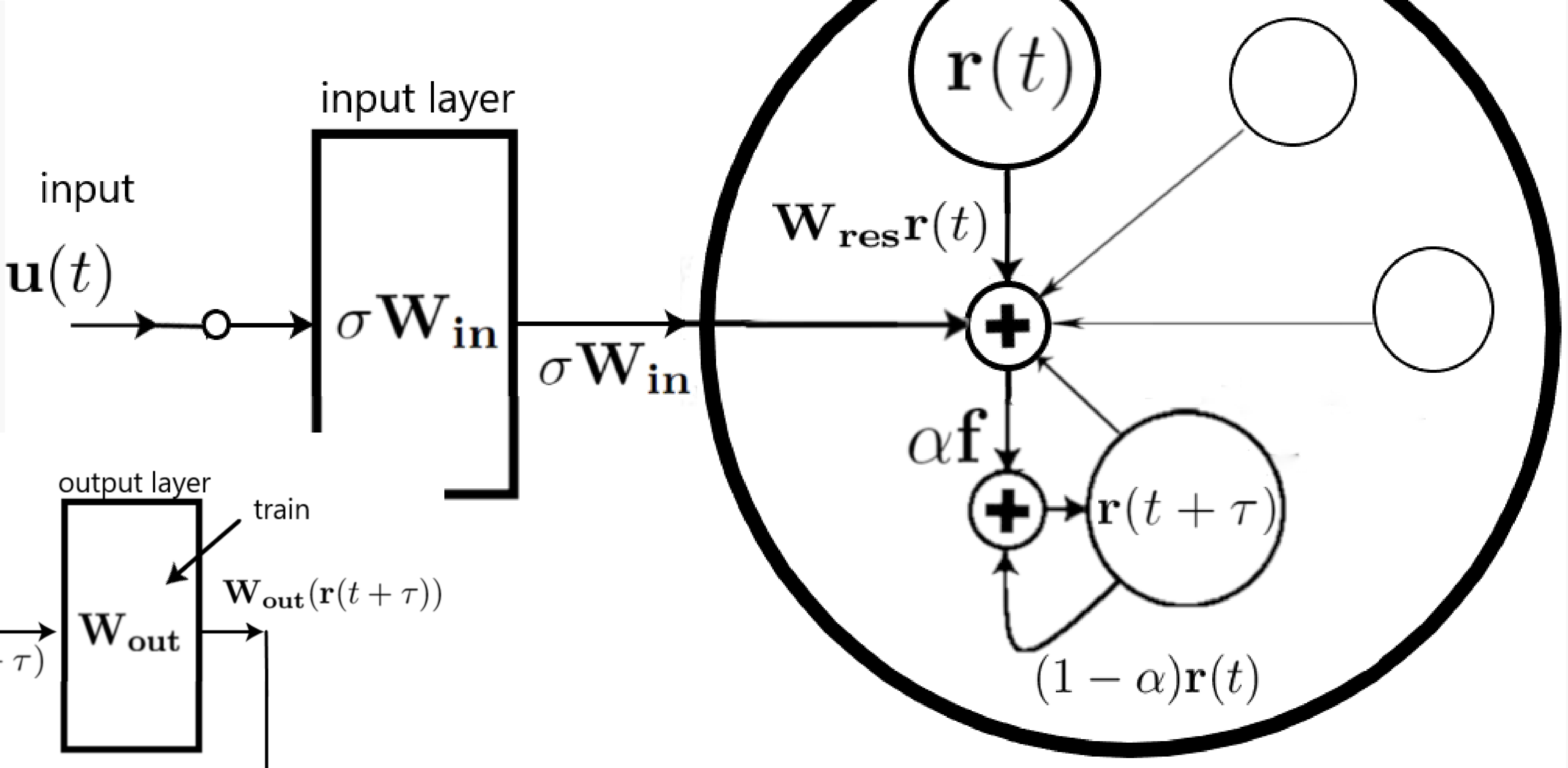
社会・自然界の
様々な系で応用できる

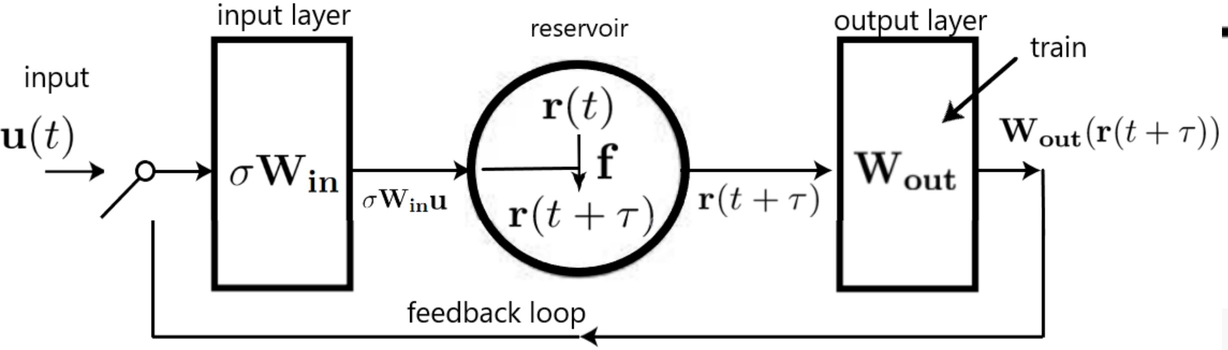


[5]M. Sano and Y. Sawada. Physical Review Letters (1985)

Listening

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}(t+\tau) &= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha \boldsymbol{f}[\boldsymbol{r}(t), \boldsymbol{u}(t)] \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha \mathbf{tanh}[\mathbf{W}_{\mathrm{res}}(t) + \sigma \mathbf{W}_{\mathrm{in}} \boldsymbol{u}(t) + \mathbf{1}]
\end{aligned}
$$

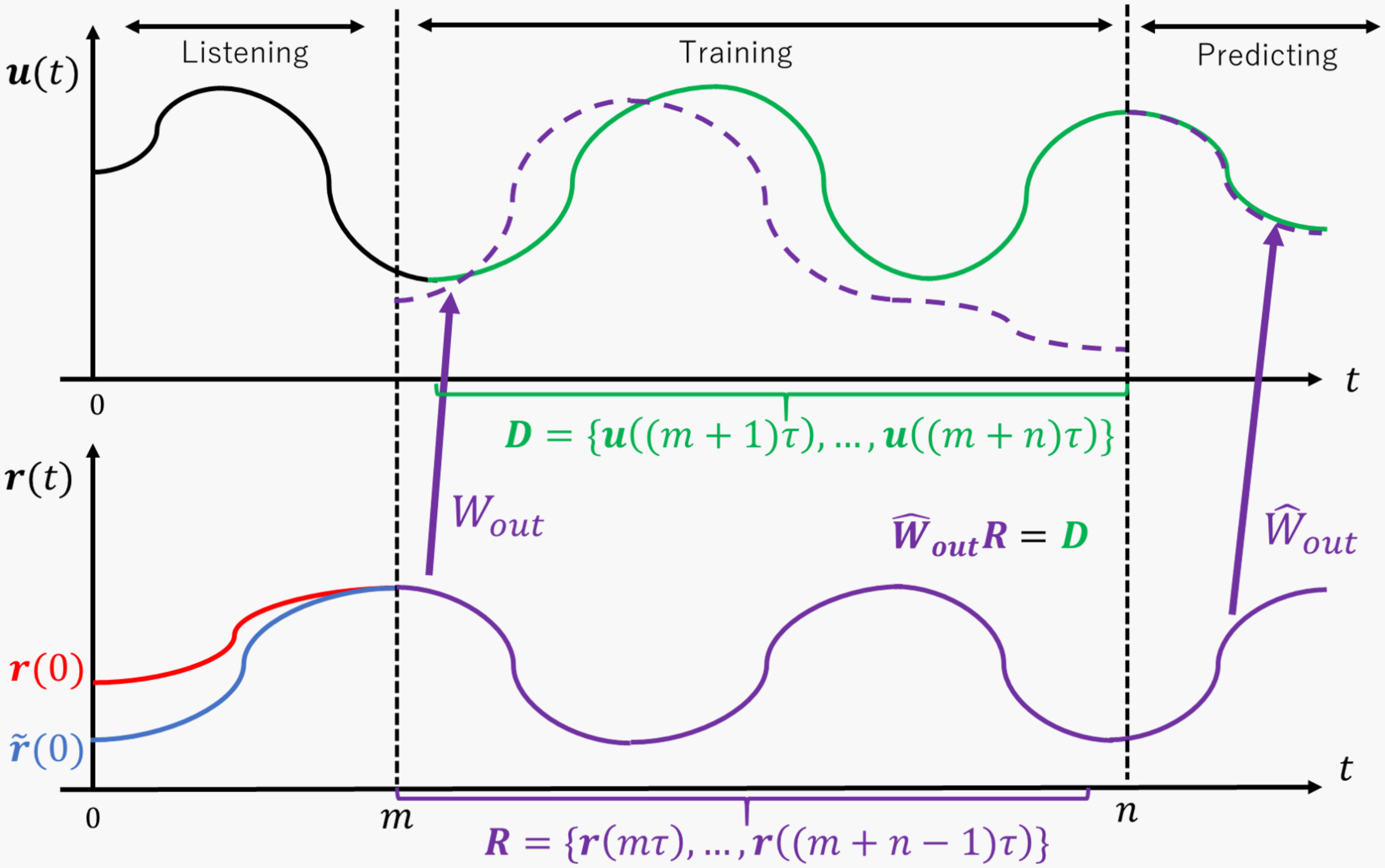




Training, Predicting

$$E_{\mathrm{RR}} = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{D} - \mathbf{W}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{R}\|_{\mathrm{F}}^{2} + \frac{\beta}{2}\|\mathbf{W}_{\mathrm{out}}\|_{\mathrm{F}}^{2}$$

$$\hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{R}^{\top}\left(\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{\top} + \beta\boldsymbol{I}\right)^{-1}$$



$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}(t+\tau) &= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha\boldsymbol{f}[\boldsymbol{r}(t), \hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{r}(t)] \\ &= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha\,\mathbf{tanh}[\mathbf{W}_{\mathrm{res}}(t) + \sigma\boldsymbol{W}_{\mathrm{in}}\hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{r}(t)]\end{aligned}$$

同期状態からLS計算

$$\lambda_k = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \|\mathrm{D}_{\boldsymbol{x}(0)} \boldsymbol{g}^n \boldsymbol{h}_k\|$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}(t+\tau) &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}(t)) \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha \boldsymbol{f}[\boldsymbol{r}(t), \hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{r}(t)] \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha \mathbf{tanh}[\mathbf{W}_{\mathrm{res}}(t) + \sigma \mathbf{W}_{\mathrm{in}} \hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{r}(t) + \mathbf{1}] \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{r}(t) + \alpha \mathbf{tanh}[\mathbf{W}_{\mathrm{all}}\boldsymbol{r}(t) + \mathbf{1}]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{D}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}(t)) &= (1-\alpha)\boldsymbol{I} + \alpha \mathrm{D}\boldsymbol{f}[\boldsymbol{r}(t), \hat{\mathbf{W}}_{\mathrm{out}}\boldsymbol{r}(t)] \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{I} + \alpha {\mathbf{W}_{\mathrm{all}}}^{\top}(\mathbf{tanh})'[\mathbf{W}_{\mathrm{all}}\boldsymbol{r}(t) + \mathbf{1}] \\
&= (1-\alpha)\boldsymbol{I} + \alpha {\mathbf{W}_{\mathrm{all}}}^{\top}(\boldsymbol{I} - \mathbf{tanh}^2[\mathbf{W}_{\mathrm{all}}\boldsymbol{r}(t) + \mathbf{1}])
\end{aligned}$$

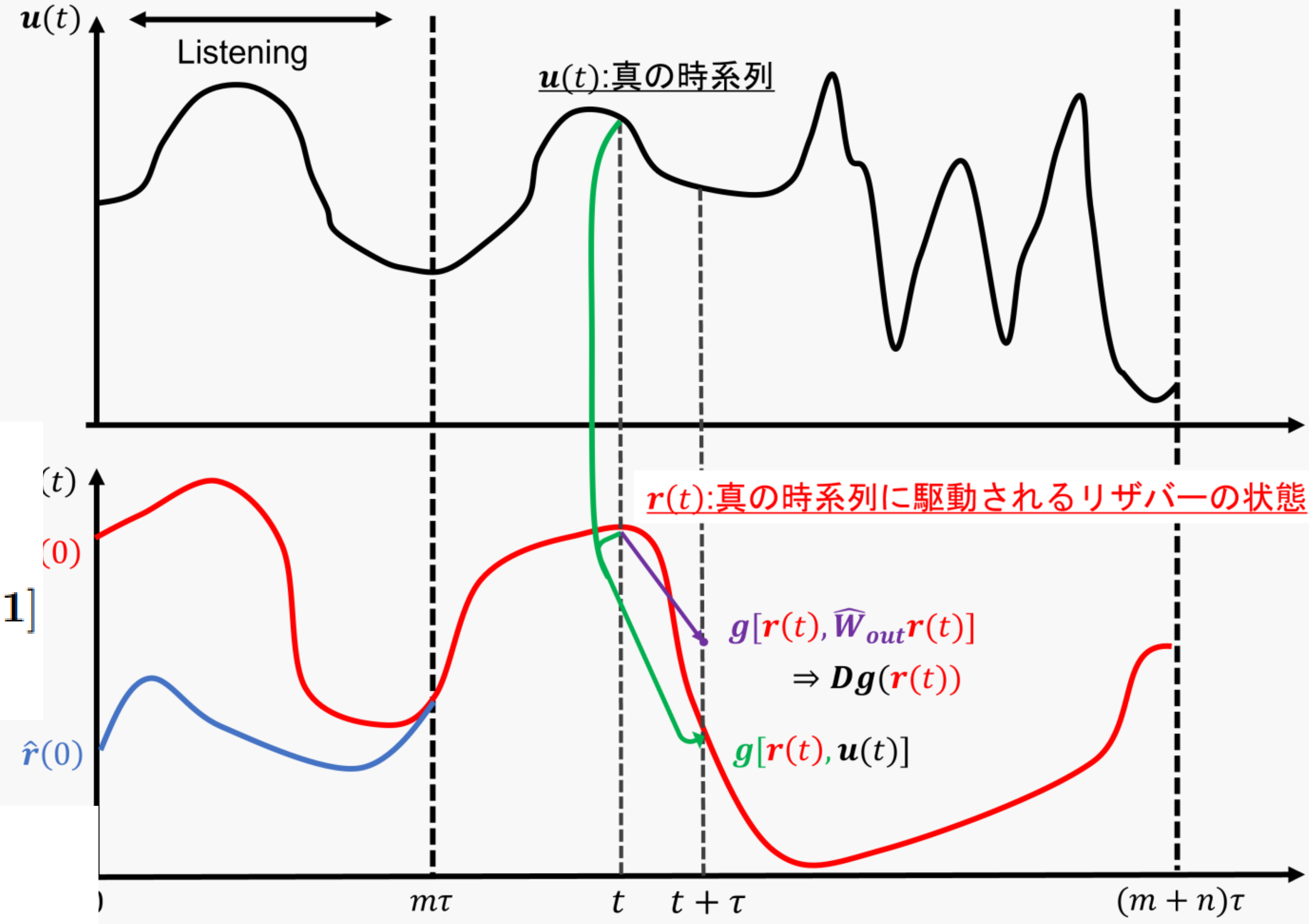


表 2.1: アトラクタの分類

	点 アトラクタ	周期 アトラクタ	準周期 アトラクタ	ストレンジ アトラクタ
アトラクタの 幾何学的構造	点	閉曲線	k-トーラス	フラクタル構造
アトラクタ上の 振る舞い	静止	周期的	準周期的	カオス
n 次元相空間における アトラクタの次元	0	1	n 未満の整数 k	n 未満の非整数
n 次元相空間の場合の Lyapunov スペクトラム	$\lambda_i = 0$ $(i = 1, \cdots, n)$	$\lambda_i = 0$ $(i = 1)$ $\lambda_i < 0$ $(i = 2, \cdots, n)$	$\lambda_i = 0$ $(i = 1, \cdots, k)$ $\lambda_i < 0$ $(i = k + 1, \cdots, n)$	$\lambda_i > 0$ $(i = 1, \cdots, k - 1)$ $\lambda_i = 0$ $(i = k)$ $\lambda_i < 0$ $(i = k + 1, \cdots, n)$

表 1.1: 固定する hyperparameter と hyperparameter の探索範囲

	意味	Tuning 範囲 or 固定した値
N_{res}	リザバーのノード数	閉区間 $[400, 1000]$ 内の間隔が 100 の整数値
σ	入力強度	閉区間 $[0.1, 2.0]$
d	リザバーの結合密度	閉区間 $[0.1, 2.0]$
ρ	$\boldsymbol{W}_{\mathrm{res}}$ のスペクトル半径	閉区間 $[0.1, 1.0]$
α	リザバーの leak 率	閉区間 $[0.99, 1.0]$
β	Ridge 回帰の正則化項	閉区間 $[0, 0.1]$
$\boldsymbol{f}$	リザバーの活性化関数	**tanh** で固定
m	Listen Step 数	2000 で固定
n	Train Step 数	8000 で固定
n'	Lyapunov 指数計算 Step 数	5000 で固定