Reservoir Computer による外力付きカオス時系列モデルの予測と生体リズム研究への応用

発表者：久野証

東京大学工学部計数工学科数理情報工学コース 4 年

December 7, 2023

目次

LD Cycle による生体リズムの研究

概日リズムの研究：LD Cycle

- 常態的な時差ぼけや交代制勤務は、生活習慣病のリスクを高める.
- LD Cycle は生体リズムのモデルに用いられ，光と暗闇の情報が外力として系に加わる.
- 外力や各パラメータの設定により周期的・カオス的な振る舞いを持つ.
- 一般にカオスの予測は難しい.
  - 初期値鋭敏性.

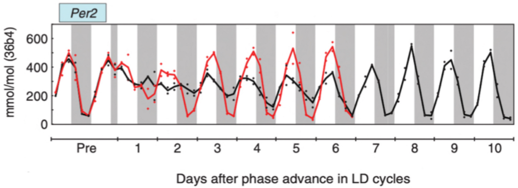


Figure: Day 1 に 8 時間の Jet Lag を受けた時のマウスの Per2 の推移
Image: Fig.2 from [1].

Reservoir Computer を用いたカオス予測 (1/2)

- 右側のアイテム 1
- 右側のアイテム 2

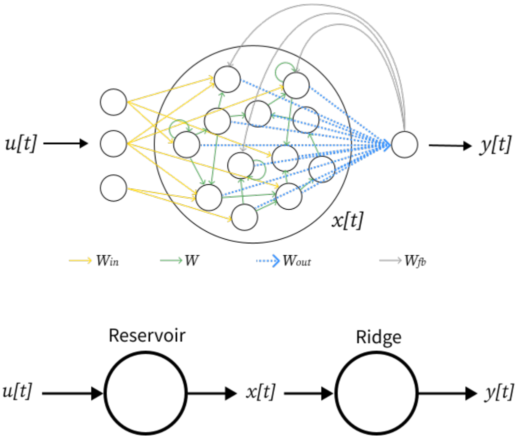
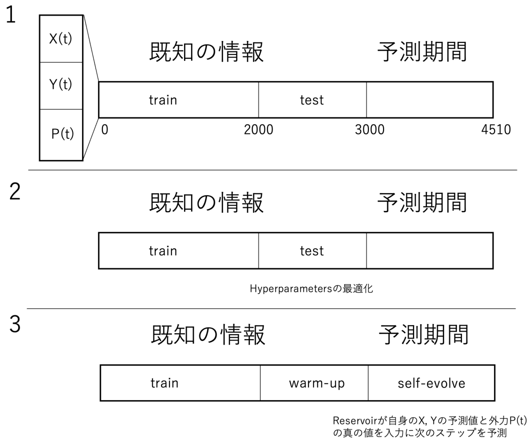


Figure: Reservoir Computer の構造
Image: ReservoirPy, MIT License.

Reservoir Computer を用いたカオス予測 (2/2)

予測の手法

1. 予測する系の時系列データを生成
   - 外力付きの Rössler 方程式の系の場合，変数 X_t, Y_t と外力 P_t から成る配列．
2. Reservior の Hyperparameter の最適化
   - train 期間 で学習を行い， test 期間で教師付きの予測を行う．
   - test 期間での予測値と真の値との誤差を目的関数として， 最適化を行う．
3. self-evolve 予測を行う．
   - train, warm-up 期間 の後， Reservoir に未来予測をさせる．
   - 各ステップの入力は， Reservior の一期前の出力に対して， 外力の真の値だけ修正した配列．



周期外力のある Rössler モデル (1/2)

Rössler 方程式

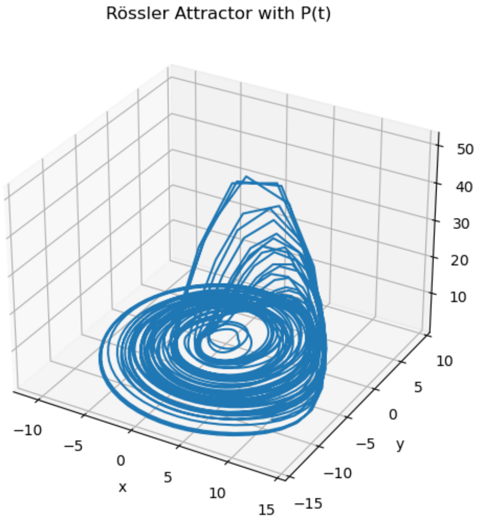
次の方程式を解くことで時系列データを生成する.

$$\frac{dx}{dt} = -y - z + P(t) \tag{1}$$

$$\frac{dy}{dt} = x + ay \tag{2}$$

$$\frac{dz}{dt} = b + z(x - c) \tag{3}$$

ここで, $P(t) := A\sin(t + \theta_p(t))$ とする.
ただし, $p \in \{n \in \mathbb{Z} \mid -12 \leq n \leq 12\}$ とし,
θ_p は 4 日に 1 度外力の位相を $p \cdot 2\pi/24$ だけ早めるような関数.



周期外力のある Rössler モデル (2/2)

- Hyperparameter の最適化は位相シフトが 8 時間である系に対して行う.
- その後，同じ Reservoir で異なる位相シフトを持つ系に対しても予測を行う.
  - 未知の外力に対する Reservoir の予測性能を測る.

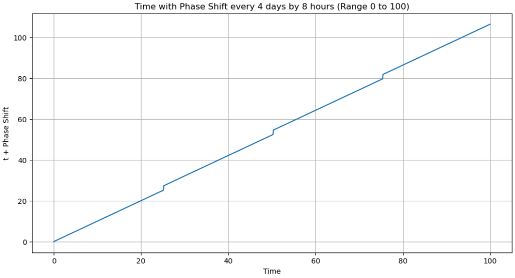


Figure: 4 日に一度 8 時間早めたときの外力の位相

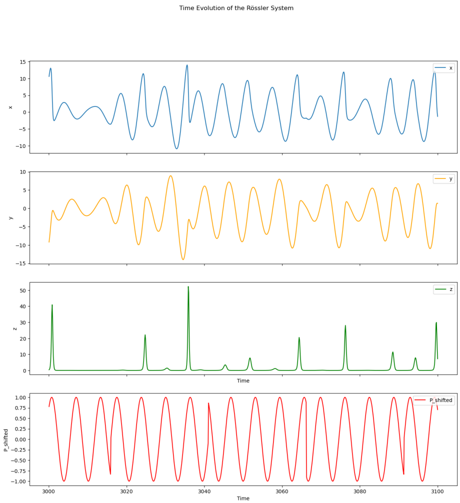


Figure: 位相シフトのある周期外力付きの Rössler システム：上から $x, y, z, P(t)$.

Appendix

Reservoir Computer による予測：手法

$\triangle t = 0.1$ とした.

- Hyperparameters の最適化
  - 学習期間: Rössler システムにおける z 変数が観測できないものとして，x, y 変数 と 外力 $f(t)$ を入力する．期間は $[0, 1000)$.
  - 損失関数を学習期間全体に対して定義された nrmse として最適化：

$$\text{nrmse}(y, M) = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{M-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{M}} \tag{4}$$

  - Hyperparameters は Cell number (N), spectral radius (sr), leaking rate (lr), input scaling (iss), regularization (ridge), random seed(seed).
  - 最適化アルゴリズムは TPE (Tree-structured Parzen Estimator) algorithm.
- Self-evolving 期間
  - warming up： $[1000, 1500]$, Self-evolving 期間: $[1500, 2510]$.

位相シフトのない周期外力を持つ Rössler モデル

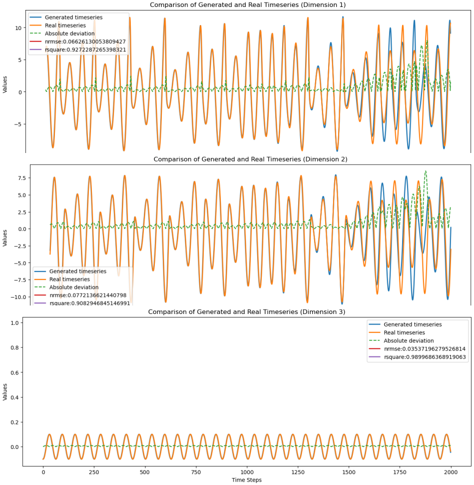


Figure: 位相シフトのない周期外力を持つ Rössler モデル

連立微分方程式：

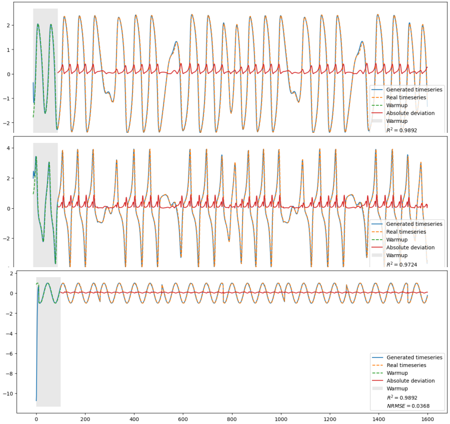
$$\frac{dx}{dt} = -y - z + A\sin(t) \quad (5)$$

$$\frac{dy}{dt} = x + ay \quad (6)$$

$$\frac{dz}{dt} = b + z(x - c) \quad (7)$$

- 外力の振幅 $A = 0.1$，変数 $a = 0.2$，$b = 0.2$，$c = 5.7$，初期条件 $[x, y, z] = [1.0, 1.0, 1.0]$．時間範囲：$[0, 2510]$，系の周期は 2π ．

確定的な位相シフトの周期外力を持つ Van Der Pol モデル



ResercoirPy (v0.3.10)

Hyperparameters の最適化 (1/2)

アルゴリズムの話.

Hyperparameters の最適化 (2/2)

Hyperopt と Optuna の話.

Y. C. Lai et al. (2022) の結果 (1/2)

Reservior Computer は Input, Hidden, Output の三つの層から構成される.

Reservior Computer の構成：Y. C. Lai et al. (2022)

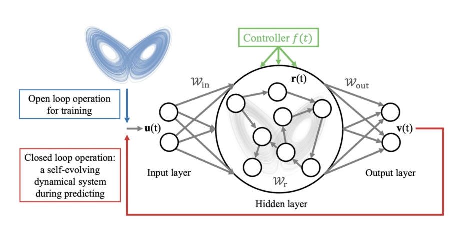


Fig.1 from Y. C. Lai et al. (2022)

- $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{D_{\text{in}}}$: input signal.
- $\mathbf{r}(t) \in \mathbb{R}^{D_r}$: hidden layer state vector.
- $f(t)$: (control) external driving signal.
- $\mathcal{W}_{\text{in}} \in D_r \times D_{\text{in}}$: Weighted input matrix.
- $\mathcal{W}_c$: Controller matrix.
- $\mathcal{W}_r \in D_r \times D_r$: Weighted network matrix inside.
- $\mathcal{W}_{\text{out}} : D_{\text{out}} \times D_r$: Output weighted matrix.

$\mathbf{u}(t)$ に時系列モデル（low/high-dimensional Lorenz-96 climate network, driven chaotic laser system など），$f(t)$ には sinusoidal 関数などを使用する（e.g. $f(t) = A\sin(\Omega t) + F$）.

Y. C. Lai et al. (2022) の結果 (2/2)

学習期間全体の $\mathbf{u}(t)$，全期間の $\mathbf{v}(t)$ を記録する行列をそれぞれ $\mathcal{R}', \mathcal{V}$ とする．

- $\mathcal{W}_{\text{in}}, \mathcal{W}_c, \mathcal{W}_r$ は Reservior の学習に前もってランダムに定められる．
- 学習期間において，$\mathbf{u}(\mathbf{t})$ と $f(t)$ の実データが入力される．学習期間の後の self-evolving 期間では，Reservior による出力 $\mathbf{v}(t)$ と $f(t)$ の実データが予測の入力に用いられる．
  - $\mathbf{r}(t)$ は 学習期間，self-evolving 期間においてそれぞれ次の式で決定される．

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh\left[\mathcal{W}_r \mathbf{r}(t) + \mathcal{W}_{\text{in}}\, \mathbf{u}(t) + \mathcal{W}_c f(t)\right] \tag{8}$$

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh\left[\mathcal{W}_r \mathbf{r}(t) + \mathcal{W}_{\text{in}}\, \mathcal{W}_{\text{out}}\, \mathbf{r}'(t) + \mathcal{W}_c f(t)\right] \tag{9}$$

- 複数の $f(t)$ に対して Reservior を sequential に学習させることで，未知の外力がある場合でも予測できるようにする．また，Hyperparameter に関する最適化を行う（後述）．
- Reservoir に次式における $\mathcal{V}, \mathcal{R}'$ 間の Linear Regression を通じて $\mathcal{W}_{\text{out}}$ を学習させる．

$$\mathcal{W}_{\text{out}} = \mathcal{V} \cdot \mathcal{R}'^{T} \left(\mathcal{R}' \cdot \mathcal{R}'^{T} + \beta \mathcal{I}\right)^{-1} \tag{10}$$

理論的な展開

Resrvoir Computer の理論的な研究としては Bollt (2021) の研究などが挙げられる.

Bollt (2021)

Reservoir Computer の activation function（式 (8), (9) における $\tanh$ 関数）を局所的に線型 activation function $q : \mathbb{R} \ni s \mapsto s \in \mathbb{R}$ とみなすことで，Reservoir 内のダイナミクスに関して次のを得る.

$$\mathbf{v}_{l+1} = \mathbf{W}^{\text{out}} \sum_{j=1}^{\ell} \mathbf{A}^{j-1} \mathbf{W}^{\text{in}} \, \mathbf{u}_{\ell-j+1} \tag{11}$$

式 (11) が VAR(NVAR) の係数行列を表すものだとみなせる.

参考文献

[1] Yamaguchi, Y., Suzuki, T., Mizoro, Y., Kori, H., Okada, K., Chen, Y., Fustin, J. M., Yamazaki, F., Mizuguchi, N., Zhang, J., Dong, X., Tsujimoto, G., Okuno, Y., Doi, M., and Okamura, H. (2013). Mice genetically deficient in vasopressin V1a and V1b receptors are resistant to jet lag. Science (New York, N.Y.), 342(6154), 85 – 90.