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

November 30, 2023

目次

研究の目的

- 現実の問題は非線形で，高次元・複雑→完全な数理モデルを作ることは難しい.
- 非線形力学システムの未来予測は一般に困難
  - 特にカオスの場合は初期値鋭敏性により，（外部からの干渉も影響し）不完全な数理モデルでは予測に用いにくい.
- Reservoir Computer を用いて高い精度の予測が可能

Reservoir Computer

内部にランダムニューラルネットワーク（Reservoir）を持つ Recurrent Neural Network の手法．Backpropagation が不必要・出力層のみの学習で計算効率が良い.

- カオス時系列モデルの長期予測は生体リズムの研究に応用可能
  - 位相シフト付きの周期外力を含む LD Cycle モデルは，外力の振幅を強めることでカオス的に振る舞う.
  - 応用：クロニックジェットラグがシフトワーカーの生体リズムにもたらす影響についての研究など.

先行研究

- Bollt, E. On explaining the surprising success of reservoir computing forecaster of chaos? The universal machine learning dynamical system with contrast to VAR and DMD. *Chaos*, 31(1), 013108 (2021).
  - Reservior Computer による力学系時系列モデルの予測の原理に関する説明
  - Reservior Computer と NVAR との関連
- Kong, L.-W., Weng, Y., Glaz, B., Haile, M., and Lai, Y.-C. Digital twins of nonlinear dynamical systems. arXiv:2210.06144 (2022).
  - 外力付き非線形力学系モデルの未来予測
  - 外力の振幅や位相をパラメータに取ることによって biffurcation map（統計量）などを調べる.
  - 観測されない変数がある場合も含めて，外力を実データで更新し続けた場合の continual forecasting を行う.

Y. C. Lai et al. (2022) (1/3)

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)

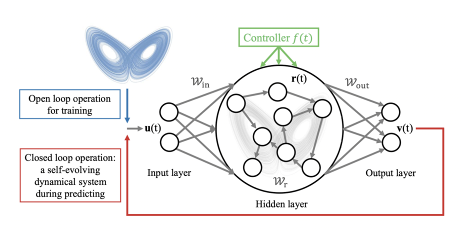

Fig.1 from Y. C. Lai et al. (2022)

- $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{D_{\text{in}}}$: 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) (2/3)

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．

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

$$\mathbf{r}(t+\Delta t) = (1-\alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh\left[\mathcal{W}_r \mathbf{r}(t) + \mathcal{W}_{\text{in}}\, \mathcal{W}_{\text{out}}\, \mathbf{r}'(t) + \mathcal{W}_c f(t)\right] \quad (2)$$

- 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．

$$\mathcal{W}_{\text{out}} = \mathcal{V} \cdot \mathcal{R}'^{T} \left(\mathcal{R}' \cdot \mathcal{R}'^{T} + \beta \mathcal{I}\right)^{-1} \quad (3)$$

Y. C. Lai et al., 2022 (3/3)

A driven chaotic ecological system のモデル：N が観測できなくても予測が可能.

$$\frac{dN}{dt} = I - f(t)NP - qN \quad (4)$$

$$\frac{dP}{dt} = f(t)NP - P \quad (5)$$

$$f(t) = A\sin(\omega_{\mathrm{eco}} t) \quad (6)$$

- P（学習期間のみ）と外力 $f(t)$ を入力に短期予測．定期的に P を実データで更新すれば P, N 両方の contiual forecasting が可能.

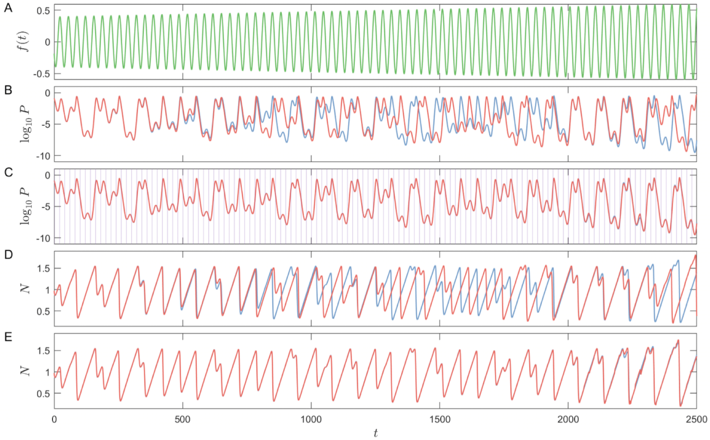

Fig.10 from Y. C. Lai et al. (2022)

現時点での研究結果

周期外力付き Rössler 方程式 (1/2)

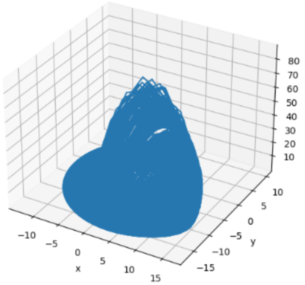

Figure: 位相シフトのある周期外力付きの Rössler システム

- 位相シフト（クロニックジェットラグ）を含む周期外力がある系の予測を Reservoir Computer で行う：

$$\frac{dx}{dt} = -y - z + A\sin(t + \Omega(t)) \tag{7}$$

$$\frac{dy}{dt} = x + ay \tag{8}$$

$$\frac{dz}{dt} = b + z(x - c) \tag{9}$$

- 外力の振幅 $A = 2.0$，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．
- $\Omega(t)$ は t について定期的に位相シフトを与える関数．ここでは，4 日に一度 $[-12, 12]$ の中からランダムに整数 n をとり n 時間分だけ系を早める（遅らせる）ような $\Omega(t)$ を扱う．

周期外力付き Rössler 方程式 (2/2)

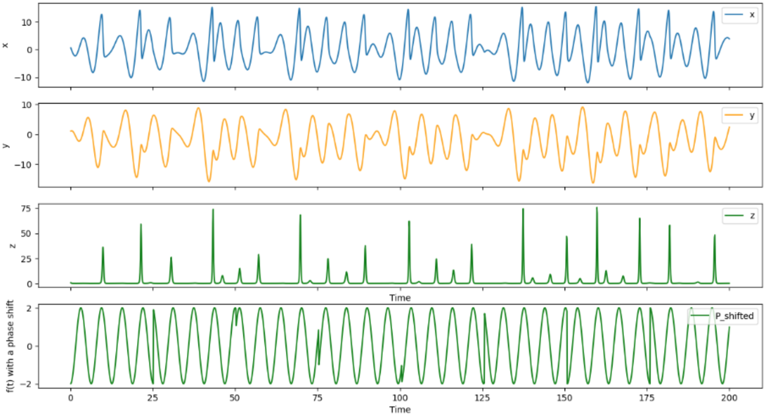

Figure: 位相シフトのある周期外力付きの Rössler システム：
変数ごとと外力の時系列のグラフ

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：

$$\text{nrmse}(y, M) = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{M-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{M}} \tag{10}$$

  - 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: $[1500, 2510]$.
  - 上のように訓練された Reservoir Computer を用いて，確定的な位相シフトの外力が加わったモデルの時系列データに対しても予測し、平均振幅などの統計量を調べる.

結果

結果

結果

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 (1), (2) 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.

Appendix

ReservoirPy (v0.3.10)

ReservoirPy (v0.3.10)

Hyperparameters の最適化

Hyperparameters の最適化：Hyperopt

Hyperparameters の最適化：Optuna

参考資料