卒業論文

Reservoir Computer によるカオス時系列予測と生体リズム研究への応用

03-210622　久野証

指導教員　郡 宏 教授

2024 年 2 月

東京大学工学部計数工学科数理情報工学コース

概要

目次

第 1 章

はじめに

1.1　本研究の位置付け

機械学習, 制御理論, 最適化理論をはじめとしたさまざまな分野での問題において, 舞台となるのはユークリッド空間である. さらに, 応用においてはユークリッド空間に制約条件が備わっていることが多い. この制約をユークリッド空間の部分集合として見るのではなく, 制約そのものを全体の空間として見ることも可能である (例挟んだ方がいいかも). リーマン多様体はそのような空間の表現に適しており, 近年そこではさまざまな工学が展開されている.(ここからざっくり) 特に機械学習とか制御で 2 点間の距離や, それを結ぶまっすぐな線を計算する場面がある. しかし, リーマン多様体はユークリッド空間と大きく異なり困難が伴う. うまく計算できる例もあるけど, 一般的な枠組みでのアルゴリズムはあまり提案されていない.

1.2　本研究の内容

時間対称性に着目して新たなアルゴリズムを提案. いくつかのリーマン多様体上で先行研究でのアルゴリズムと比較.

1.3　本論文の構成

第 2 章では, 以降の章を読み解くのに必要な, リーマン幾何学まわりの定義や性質と, 時間反転対称性という概念を述べる. 第 3 章では, リーマン多様体上の 2 点間の測地線を計算する手法を提案する. 第 4 章では, 提案手法を用いた数値実験を行い, 先行研究でのアルゴリズムと比較する. 第 5 章では, まとめと今後の課題を述べる.

1.4　記法の準備

第 2 章

準備

本章では, 本研究の舞台となる多様体を定義し, それにまつわる重要な概念について述べる. さらに, 本研究のテーマであるリーマン幾何学を概観する. 後に有用になる諸概念などもこの章で述べる.

2.1 多様体

まずは多様体を定義する.

定義 2.1. (定義 6.1 松本). M を位相空間とする. M の開集合 U と写像 $\varphi : U \to \mathbb{R}^m$ が存在して,

$$\varphi : U \to \varphi(U)$$

が同相写像であるとき, (U, φ) を m 次元座標近傍といい, φ を U 上の局所座標系という. 任意の $p \in U$ に対し, $\varphi(p)$ は $\mathbb{R}^m$ の座標を用いて,

$$\varphi(p) = (x_1, x_2, \ldots, x_m)$$

とかけるが, $(x_1, x_2, \ldots, x_m)$ を, (U, φ) に関する p の局所座標という.

定義 2.2. (定義 6.4 松本). $r \geq 1$ を自然数または ∞ とする. 位相空間 M が以下の条件をみたすとき, M を m 次元 C^r 級多様体という.

1. M はハウスドルフ空間である.
2. M の m 次元座標近傍からなる族 $(U_\alpha, \varphi_\alpha)_{\alpha \in A}$ が存在して,
$$M = \bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha$$
が成立する.
3. $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ であるような任意の $\alpha, \beta \in A$ について, 座標変換
$$\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} : \varphi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \to \varphi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta)$$
は C^r 級である.

以後, 断らない限り, M は m 次元 C^∞ 級多様体を指すものとする.

定義 2.3. (定義 8.1 松本) $p \in M$ における方向微分もしくは接ベクトル v とは, p の開近傍で定義された C^∞ 級関数 f に実数 $v(f)$ を対応させる操作であって, 以下の条件をみたすものである.

1. f と g が p の十分小さな開近傍上で一致すれば, $v(f) = v(g)$.
2. 任意の C^∞ 級関数 f, g と $a, b \in \mathbb{R}$ に対して,
$$v(af + bg) = av(f) + bv(g)$$
が成立する.
3. 任意の C^∞ 級関数 f, g に対して,
$$v(fg) = v(f)g(p) + f(p)v(g)$$
が成立する.

p における方向微分全体の集合を接空間といい, T_pM とかく.

定理 2.4. (命題 8.1-8.3 と注意 松本) $p \in M$ に対して, T_pM は m 次元実ベクトル空間をなし, 座標近傍と局所座標系によらない. p のまわりの局所座標系 $(x_1, x_2, \ldots, x_m)$ を選び, p のまわりで定義された C^∞ 級関数 f に対して,
$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right)_p : f \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(p) \qquad (i = 1, 2, \ldots, m)$$
という操作を定義する. このとき,
$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)_p, \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)_p, \ldots, \left(\frac{\partial}{\partial x_m}\right)_p$$
は T_pM の基底をなす.

定義 2.5. (定義 8.3 松本) $c : (-\epsilon, \epsilon) \to M$ を C^∞ 級曲線として, $c(0) = p$ であるとする. 曲線 c の $t = 0$ における速度ベクトルとは
$$\left.\frac{dc}{dt}\right|_{t=0}(f) = \left.\frac{df(c(t))}{dt}\right|_{t=0}$$
で定義される接ベクトル $\left.\frac{dc}{dt}\right|_{t=0} \in T_pM$ のことである. ただし, f は p のまわりで定義された任意の C^∞ 級関数である.

定理 2.6. (定義 8.3 の下 松本) T_pM の基底 $\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)_p, \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)_p, \ldots, \left(\frac{\partial}{\partial x_m}\right)_p\right\}$ を用いて表すと,
$$\left.\frac{dc}{dt}\right|_{t=0} = \frac{dx_i}{dt}(0)\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right)_p$$
ただし, $c(t) = (x_1(t), x_2(t), \ldots, x_m(t))$ は c の局所座標表示である.

定理 2.7. (命題 9.2 松本) 任意の接ベクトル $v \in T_pM$ に対して, p を通る C^∞ 級曲線

$$c : (-\epsilon, \epsilon) \to M \qquad (c(0) = p)$$

が存在して, $\left.\frac{dc}{dt}\right|_{t=0} = v$ が成立する.

定義 2.8. (定義 9.2 松本) M, N をそれぞれ m 次元, n 次元の C^∞ 級多様体, $f : M \to N$ を C^∞ 級とする. 任意の接ベクトル $v \in T_pM$ をとる. 定理 (2.7) により, $\left.\frac{dc}{dt}\right|_{t=0} = v$ となる, p を通る C^∞ 級曲線

$$c : (-\epsilon, \epsilon) \to M \qquad (c(0) = p)$$

が存在する. この曲線を写像 f でうつすと, $q = f(p)$ を通る C^∞ 曲線

$$f \circ c : (-\epsilon, \epsilon) \to N \qquad (f \circ c(0) = q)$$

になる. $t = 0$ における $f \circ c$ の速度ベクトル $\left.\frac{d(f \circ c)}{dt}\right|_{t=0}$ を $w \in T_qN$ とかく. このとき, w は v のみによって決まり, 曲線 c のとり方によらない. v に w を対応させれば, 写像 $T_pM \to T_qN$ が得られる. こうして得られた写像を

$$(df)_p : T_pM \to T_qN$$

とかき, p における $f : M \to N$ の微分とよぶ.

定義 2.9. (定義 7.5 松本) M, N を C^r 級多様体とする. $f : M \to N$ が以下の条件をみたすとき, f を C^s 級微分同相写像という.

1. $f : M \to N$ は全単射である.
2. $f : M \to N$ と $f^{-1} : N \to M$ は, ともに C^s 級写像である.

定義 2.10. (定義 16.1 松本) M の各 $p \in M$ に, p における接ベクトル $X_p \in T_pM$ がひとつずつ対応しているとき, その対応 $X = \{X_p\}_{p \in M}$ を M 上のベクトル場という.

定義 2.11. (松本 16.1 の下) $(U; x_1, \ldots, x_m)$ を M の座標近傍, $X = \{X_p\}_{p \in M}$ を M 上のベクトル場とする. U 上に限れば, X は

$$X = \xi_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \xi_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \cdots + \xi_m \frac{\partial}{\partial x_m}$$

と, U 上の関数 $\xi_i : U \to \mathbb{R}$ によって局所座標表示される. ただし,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right)_p \right\}_{p \in U} \qquad (i = 1, 2, \ldots, m)$$

である.

2.2 リーマン幾何学

定理 2.12. (2.9 do carmo). (M, g) をリーマン多様体とする．$q \in M$ に対し，ある $\epsilon_q > 0$ が存在し，$\exp_q : B(0; \epsilon_q) \subset T_q M \to M$ が $B(0; \epsilon_q)$ から M の部分開集合への微分同相写像となる．

以下の系がただちに従う．

系 2.13. $V_q \coloneqq \exp_q(B(0; \epsilon_q))$ とすると，次が成立する．

$$\exists!\, v \in B(0; \epsilon_q) \quad \text{s.t.} \quad \gamma(q, v, 1) = q', \quad \forall q' \in V_q \tag{2.1}$$

2.3 時間反転対称性

定義 2.14. (時間反転対称性, official な定義なし) 変数 $t \in \mathbb{R}$ に関する常微分方程式があるとする．任意の解 $r(t)$ に対して，$r(-t)$ も解であるとき，この常微分方程式は時間反転対称であるという．また，$r(-t)$ を $r(t)$ の時間反転解という．

事実 2.15. 測地線方程式は時間反転対称である．

証明. 測地線方程式は以下の通りである．

$$fff$$

□

定理 2.16. 初期値に対する解の微分可能性

第 3 章

提案手法

問題設定を確認する．(M, g) を測地的完備なリーマン多様体, (U, φ) を M のある座標近傍, $(x_1, \ldots, x_m)$ をその局所座標とする．定理 2.12 およびその系 2.13 より, $y_0 \in U$ に対して, ある ϵ_{y_0} が存在して, $y_1 \in V_{y_0} = \exp_{y_0}(B(0; \epsilon_{y_0}))$ に対して, $\gamma(y_0, v_0, 1) = y_1$ なる $v_0 \in B(0; \epsilon_{y_0})$ が一意に存在する．今, この v_0 を計算する問題を考える．[1] 本研究では, この問題を最小化問題に還元する．まず, 目的関数 $f : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \cong T_{y_0}M \times T_{y_1}M \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ を以下のように定義する．

$$f(v_0, v_1) \coloneqq \int_0^1 |\gamma(y_0, v_0, t) - \gamma(y_1, v_1, 1-t)|_2 dt \tag{3.1}$$

次の事実を確認する．

事実 3.1. f の定義域を $B(0; \epsilon_{y_0}) \times \mathbb{R}^m$ に制限する．このとき, ただ一つの最適解 v_0^*, v_1^* が存在して, $\gamma(y_0, v_0^*, 1) = y_1$ をみたす．

証明. 定義より, $f(v_0^*, v_1^*) = 0$ は,

$$\gamma(y_0, v_0^*, t) = \gamma(y_1, v_1^*, 1-t), \quad 0 \leq \forall t \leq 1 \tag{3.2}$$

と同値である．このとき, $\gamma(y_0, v_0^*, 1) = \gamma(y_1, v_1^*, 0) = y_1$ であり, γ の定義より, $\gamma(y_0, v_0^*, t)$ は y_0 と y_1 を結ぶ測地線である．章冒頭の議論から, そのような v_0^* は一意に存在する．また, 式 3.2 は, $\gamma(y_1, v_1^*, t)$ が $\gamma(y_0 . v_0^*, t)$ の時間反転解であることを意味する．つまり, $v_1^* = -\dot{\gamma}(y_0, v_0^*, 1)$ として一意に決定される． □

この事実によって, y_0 と y_1 を結ぶ測地線を計算することは, 以下の最小化問題と等価である．

$$\text{minimize} \quad f(v_0, v_1) \quad \text{s.t.} \quad \|v_0\|_g \leq \epsilon_{y_0}$$

これを最急降下法を用いて解く．最急降下法では, 目的関数の勾配を用いる．ここで次の事実を確認する．

事実 3.2. 任意の $(v_0, v_1) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ に対して, f の勾配 $\nabla f(v_0, v_1)$ が存在する．

証明. リーマン計量の滑らかさと定理 (2.16) より測地線は初期値で偏微分可能. 積分と交換して, ノルムも連続だから okay □

よって勾配が存在するので, 次のような一般的な最急降下法が適用できる. また, 下記のバック

Algorithm 1 最急降下法

Input: 初期点 $(v_0^{(0)}, v_1^{(0)}) \in B(0; \epsilon_{y_0}) \times \mathbb{R}^m$, 探索幅 $\alpha > 0$, 最大反復回数 $N \in \mathbb{N}$, 許容誤差 $\eta > 0$

Output: 解 (v_0^*, v_1^*)

for $i = 0, 1, \ldots, N-1$ **do**
  if $f(v_0^{(i)}, v_1^{(i)}) < \eta$ **then**
    $(v_0^*, v_1^*) = (v_0^{(i)}, v_1^{(i)})$ を出力
  end if
  勾配 $\nabla f(v_0^{(i)}, v_1^{(i)})$ を計算
  $d_i \leftarrow -\nabla f(v_0^{(i)}, v_1^{(i)})$
  $(v_0^{(i+1)}, v_1^{(i+1)}) \leftarrow (v_0^{(i)}, v_1^{(i)}) + \alpha d_i$
end for

トラッキングによって探索幅を適応的に変化させるものもある.

第 4 章

数値実験

第 5 章

まとめと今後の課題

10

謝辞

参考文献

[1] Francisco A. Rodrigues, Thomas K. DM. Peron, Peng Ji, and Jurgen Kurths. The kuramoto model in complex networks. *Physics Reports*, Vol. 610, pp. 1–98, 2016.

付録 A