

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 4, 2023

目次

- ① 背景
- ② 目的
- ③ これまでの結果
- ④ 理論的な展開
- ⑤ Appendix
 - その他の主な結果
 - ReservoirPy (v0.3.10)
 - Hyperparameters の最適化
 - 先行研究
- ⑥ 参考資料

背景

- 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.

目的

時差ぼけの研究：

- 繰り返しの時差ぼけや交代制勤務は、心臓疾患や代謝不全などの生活習慣病のリスクを高める。
- 概日リズムに対する環境の光暗サイクルの影響を研究するために LD サイクルが使われることがある。
 - ▶ 光・暗闇 12 時間ずつのサイクルを 8 時間進めたり遅らせたりしてマウスの行動リズムを研究する。

- LD Cycle は周期的な挙動を持つが、外力を加えることでカオス的に振る舞うことがある。
- カオスを含む非線形力学系の予測ができれば、未来における概日リズムをより詳細に把握できる。

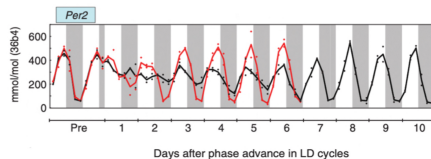


Figure: Day 1 に 8 時間の Jet Lag を受けた時のマウスの Per2 の推移

周期外力付き Rössler 方程式 (1/2)

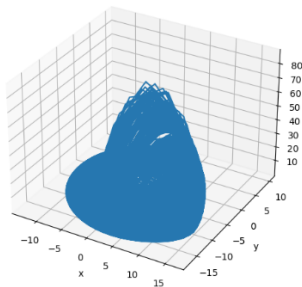


Figure: 位相シフトのある周期外力付きの Rössler システム

- 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：

$$\frac{dx}{dt} = -y - z + A \sin(t + \theta_p(t)) \quad (1)$$

$$\frac{dy}{dt} = x + ay \quad (2)$$

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

- 学習と予測は、 x , y , $A \sin(t + \theta_p(t))$ を対象とする。
- 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 .
- $\theta_p(t)$ 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、まず $p \in \{n \in \mathbb{Z} \mid -12 \leq n \leq 12\}$ をとり、4日に一度 $p \cdot 2\pi/24$ だけ系を早めるようなものとする。

周期外力付き Rössler 方程式 (2/2)

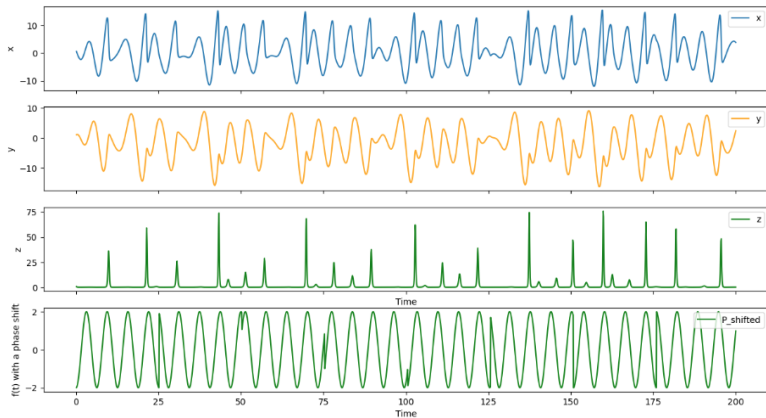


Figure: 位相シフトのある周期外力付きの Rössler システム：
変数ごとと外力の時系列のグラフ

Reservoir Computer による予測：手法

$\Delta t = 0.1$ 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:

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

- ▶ 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: $[1500, 2510]$.

位相シフトのある周期外力を持つ Rössler モデル (1/2)

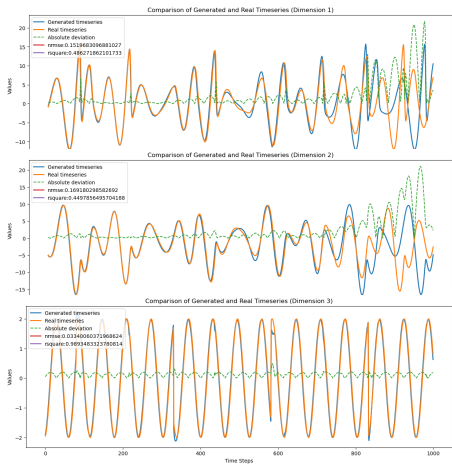


Figure: x , y , 外力の予測
 z は学習・予測に用いられていない

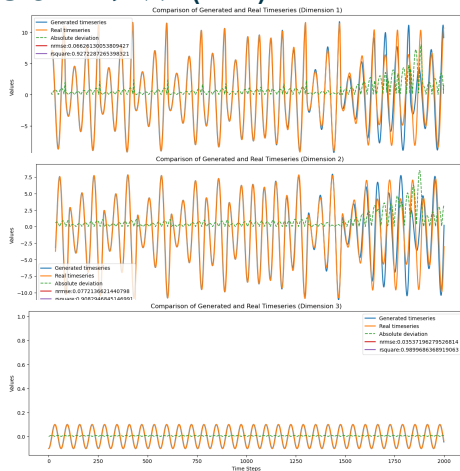


Figure: 参考：外力が $A \sin(t)$ のとき
 予測精度は高くなる

位相シフトのある周期外力を持つ Rössler モデル (2/2)

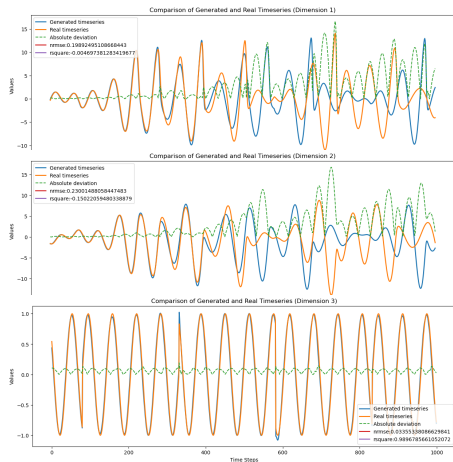


Figure: 異なる位相シフトに対しても同じ Reservoir で予測が可能

まとめと今後の展望

まとめ：

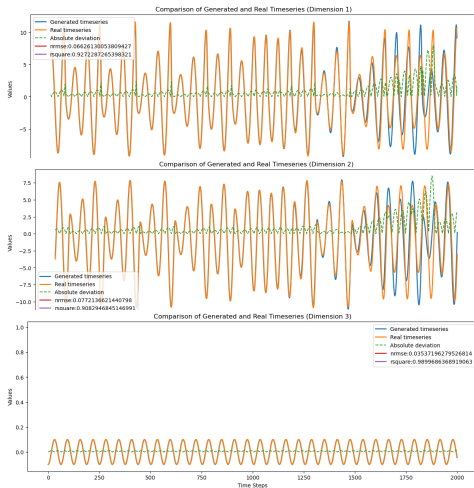
- 位相シフトのある周期外力付きの Rossler 方程式の観測できる変数が限られている場合においても、Reservoir を用いた予測が可能である。
- 同じ Reservoir を使って未知の外力がある場合に対しても期間は短くなってしまうが予測は可能である。

今後の展望：

- より複雑な未知の外力がある場合でも予測できる Reservoir
 - ▶ より複雑な構造を持つ Reservoir を設計する。
- 観測できない変数があり外力があるような力学系の予測に対して、理論的な基盤を与える。
 - ▶ 幾何学的な方向：Taken's embedding theorem
 - ▶ 解析的な方向：Lyapunov function

Appendix

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：

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

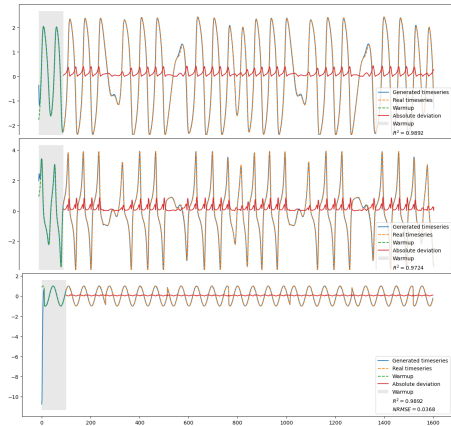
$$\frac{dy}{dt} = x + ay \quad (6)$$

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

- 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 .

Figure: 位相シフトのない周期外力を持つ Rössler モデル

確定的な位相シフトの周期外力を持つ Van Der Pol モデル



ReservoirPy (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)

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

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

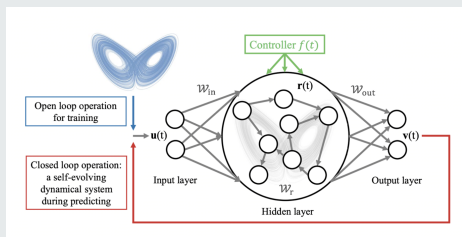


Fig.1 from Y. C. Lai et al. (2022)

- $u(t) \in \mathbb{R}^{D_{in}}$: input signal.
- $r(t) \in \mathbb{R}^{D_r}$: hidden layer state vector.
- $f(t)$: (control) external driving signal.
- $W_{in} \in D_r \times D_{in}$: Weighted input matrix.
- W_c : Controller matrix.
- $W_r \in D_r \times D_r$: Weighted network matrix inside.
- $W_{out} : D_{out} \times D_r$: Output weighted matrix.

$u(t)$ 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 Reservoir 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, $\mathbf{u}(t)$ 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, Reservoir 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.

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

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

- 複数の $f(t)$ に対して Reservoir 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}_{out} を学習させる.

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

理論的な展開

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

Boltt (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.

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

式 (11) が VAR(NVAR) の係数行列を表すものとみなせる.

参考資料

- 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).
- Kong, L.-W., Weng, Y., Glaz, B., Haile, M., and Lai, Y.-C. Digital twins of nonlinear dynamical systems. arXiv:2210.06144 (2022).