

リザーバーコンピューティングモデルの数理構造解析

齊木 吉隆 (一橋大学 大学院経営管理研究科)

概要

機械学習の利用は分類、画像認識等の静的なものに留まらず、決定論的なダイナミクスに関する時間発展モデリングなど動的な対象へも広がりつつある。研究代表者らは、リザーバーコンピューティングと呼ばれる時系列データの機械学習手法を用いて流体乱流の時系列予測を可能とする時間発展モデリングに 2018 年に世界ではじめて成功させている (Nakai and Saiki, Physical Review E, 2018)。一方、高次元のニューラルネットワークに基づく機械学習モデルがどのように時系列データのもつ背景ダイナミクスを再現しているかについては十分に明らかになっていない。本研究では実質的に有効な次元をもつ部分空間に制限したうえで力学系解析を行い、その部分空間に訓練データの力学系構造が再現されることを明らかにする。

1 共同研究に関する情報

1.1 共同研究を実施した拠点名

- 東京大学 情報基盤センター

1.2 課題分野

- 大規模計算科学課題分野

1.3 参加研究者の役割分担

本共同研究は 4 人体制でおこなわれている。

- 研究代表者 齊木吉隆: 背後にある数学的構造の解明、リザーバーコンピューティングによる数理モデル構築
- 副代表者 中井拳吾 (岡山大学学術研究院 環境生命自然科学学域): トレーニングデータの作成、リザーバーコンピューティングによる数理モデル構築
- その他の共同研究者 小林幹 (立正大学 経済学部): 背後にある数学的構造の解明
- その他の共同研究者 武藤誠 (日本大学 経

済学部 経済学科): トレーニングデータの作成

研究の各側面でスーパーコンピュータが活用されている。

2 研究の目的と意義

機械学習の利用は分類、画像認識等の静的なものに留まらず、決定論的なダイナミクスに関する時間発展モデリングなど動的な対象へも広がりつつある。研究代表者らは、リザーバーコンピューティングと呼ばれる時系列データの機械学習手法を用いて流体乱流の時系列予測を可能とする時間発展モデリングに 2018 年に世界ではじめて成功した。その後、訓練データがもつ力学系的な情報を機械学習モデルが保持するかといった観点の研究も行ってきた。リザーバーコンピューティングによる学習方法は多くの機械学習とは異なり、訓練データに存在しない特性、たとえば力学系基本的な構造である不

動点などが機械学習モデルに見いだせることを申請者らは明らかにしてきた。また、機械学習モデルの力学系理論に基づく解析を実施して、各種不変集合や不変多様体の再現性を調べ、不動点やその固有値、周期軌道などの再現性を確認した。しかし、高次元のニューラルネットワークに基づく機械学習モデルがどのように時系列データのもつ背景ダイナミクスを再現しているかについては十分に明らかになっているとは言い難い。研究代表者等は高次元のニューラルネットワークを用いるリザーバーコンピューティングを調べ、高次元のリザーバー空間において実質的に有効な次元はごく一部に限られていることがわかってきた。そこで、本研究では実質的に有効な次元をもつ部分空間に制限したうえで力学系解析を行い、その部分空間に訓練データの力学系構造が再現されることを明らかにする。そのために、予測誤差の拡大率(不安定性)や縮小率(安定性)を表す指標であるリアプノフスペクトルに着目した解析を実施する。リザーバーコンピューティングを用いた数理モデル構築にスーパーコンピュータを利用した。

力学系理論の分野で長年研究をしてきた研究代表者らが、時間発展モデルの力学系性質に注目して学習可能性を明らかにした。本研究は、力学系理論、数理モデリング、機械学習、大規模計算にまたがる真の学際的・融合的研究であると言える。

3 当拠点公募型研究として実施した意義

リザーバーコンピューティングに基づく物理ダイナミクスの予測に関しては、アメリカのメリーランド大学のグループがこれまでリードしてきたが、リザーバーコンピューティングを用いた流体乱流の数理モデリングならびにそれを用いた予測に、我々、研究代表者と副代表者の

グループがはじめて成功した。拠点公募型共同研究として数学・経済学・大規模計算の学際的なチームを編成して多くのスーパーコンピュータ資源を用いた研究を推進することによって、リザーバーコンピューティングモデルの力学系解析においても我が国が世界をリードすることが期待される。

本研究課題では時系列データの機械学習によるモデリングを行った。時系列データの力学系構造を精度良く学習するためには、大量の時系列データを取得し大規模な計算資源を使うことが必要不可欠である。

このためには、JHPCNの枠組みを最大限に活用することによって研究目標の達成が実現できた。

4 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし

5 今年度の研究成果の詳細

本計算資源を利用した研究では、著名なカオス写像であるエノン写像の時系列データをリザーバーコンピューティングを用いて学習する。構成したリザーバーモデルに対して、計画されていた次の2つの項目に関する研究を行い、論文としてまとめている。

- 研究項目 1: リアプノフスペクトルの再現可能性の検証
- 研究項目 2: 様々な設定下でのリアプノフスペクトルの再現可能性や共通構造の解明

まずはじめに本研究の要である時系列データの学習手法であるリザーバーコンピューティングについて言及した後、研究項目 1、2 の結果について述べる。

リザーバーコンピューティング. 力学系

$$\phi_{n+1} = \mathbf{f}(\phi_n)$$

に関して、変数 $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi_n) \in \mathbb{R}^M$ の時系列データを学習することを考える。まずは、この変数 \mathbf{u} に対して、リザーバー状態ベクトル $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^N$ ($N \gg M$) は次の式で支配されているとする:

$$\mathbf{r}(t+1) = \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\mathbf{u}(t) + \boldsymbol{\xi}). \quad (1)$$

行列 \mathbf{A} , \mathbf{W}_{in} は $N \times N$, $N \times M$ 行列である。リザーバー状態ベクトルの初期値はその各成分を $(0, 1]$ の一様乱数から定めた $\mathbf{r}(-\tau)$ とする。ただし、 $\tau (\gg 1)$ はトランジェント時間のステップ数に相当する。また、 $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \dots, \xi)^T \in \mathbb{R}^N$ はバイアス項である。以下ではリザーバー状態ベクトル \mathbf{r} が属する空間 \mathbb{R}^N をリザーバー空間と呼ぶ。

行列 \mathbf{W}_{in} の各列はただ一つのために $[-\sigma, \sigma]$ の一様乱数から値を与え、それ以外は 0 とする。行列 \mathbf{A} は $D \times N$ 個の非零成分を持つ疎行列とする。 $D \times N$ 個の非零成分は $[-1, 1]$ の一様乱数から値を与える。さらに、行列 \mathbf{A} についてはスペクトル半径が ρ になるように行列のすべての要素を調整する。

$0 < t \leq L$ (学習時間と呼ぶ) での時系列データ $\{\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(t)\}$ が既知の時系列データ $\{\mathbf{u}(t)\}$ の近似になるように \mathbf{W}_{out} を決定する。ここでは次の二次形式が最小値をとるように \mathbf{W}_{out} を決定する:

$$\sum_{l=1}^L \|\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{r}(l) - \mathbf{u}(l)\|^2 + \beta[\text{Tr}(\mathbf{W}_{\text{out}}\mathbf{W}_{\text{out}}^T)]. \quad (2)$$

ただし \mathbf{q} に対して $\|\mathbf{q}\|^2 = \mathbf{q}^T\mathbf{q}$ とし、 $\beta (\geq 0)$ を含む項は \mathbf{W}_{out} の過剰適合を避けるために導入している。この二次形式 (2) を最小化する

解 $\mathbf{W}_{\text{out}}^*$ は次のように書くことができることが知られている:

$$\mathbf{W}_{\text{out}}^* = \delta\mathbf{U}\delta\mathbf{R}^T(\delta\mathbf{R}\delta\mathbf{R}^T + \beta\mathbf{I})^{-1}, \quad (3)$$

\mathbf{I} は $N \times N$ の単位行列、 $\delta\mathbf{R}$, $\delta\mathbf{U}$ はそれぞれ l 行が $\mathbf{r}(l)$, $\mathbf{u}(l)$ となるような行列とする。

また、予測時間 $t > T$ での時系列データ \mathbf{u} は利用できないため、以下のように時間発展させる。

$$\begin{cases} \mathbf{r}(t+1) = \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\hat{\mathbf{u}}(t) + \boldsymbol{\xi}), \\ \hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}^*\mathbf{r}(t). \end{cases}$$

これを機械学習モデルと呼ぶ。また、この機械学習モデルは \mathbf{r} に関する下記の自励力学系

$$\mathbf{r}(t+1) = \tanh(\mathbf{A}\mathbf{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\mathbf{W}_{\text{out}}^*\mathbf{r}(t) + \boldsymbol{\xi}), \quad (4)$$

で記述され、以下では (4) をリザーバーモデルと呼び、このリアプノフ解析を実施する。

学習の際には、学習に用いる変数 $X(t)$ を $\tilde{X}(t) = [X(t) - X_1]/X_2$ のように標準化して用いる。ただし、 X_1 は平均値、 X_2 は標準偏差を表す。予測時間の時系列データ $X(t)$ を $\tilde{X}(t)$ から再現するときは、学習時間の標準化に用いた X_1 と X_2 を用いる。この標準化により σ の調整を避けることができる。

このリザーバーコンピューティングの計算に計算資源の多くを利用している。特に (3) がメインの計算であり、計算上は逆行列は避けつつ、この行列-行列積が適切なサイズになるようにプログラミングし効率よく計算している。

5.1 準備

\mathbf{R}^2 上エノン写像

$$\begin{cases} x_{n+1} = 1 - 1.4x_n^2 + y_n \\ y_{n+1} = 0.3x_n \end{cases}$$

を考察する。 $\mathbf{u}(n) := (x_n, x_{n-1})^T$ として、エノン写像の時系列データ $\{\mathbf{u}(l)\}_{l=1}^L$ を学習デー

タとしてリザーバーモデルを構成する。学習の際には以下のようにハイパーパラメタを設定する。

パラメタ		値
M	入出力の次元	2
N	リザーバー状態ベクトルの次元	70
L	学習データ量	2×10^6
ρ	A のスペクトル半径	0.001~1.0
σ	W_{in} の生成に用いる入力強度	1
ξ	リザーバーモデルのバイアス項	0.1
β	正則化パラメタ	10^{-6}

表 1 リザーバーモデルの構成に用いたパラメタとその値。

リアプノフ指数は不安定性の度合いを評価する指標であるリアプノフ指数 ([1, 2]) を解析する。エノン写像、リザーバーモデル、それぞれのリアプノフ指数、リザーバーモデルの慣性多様体 ([4, 5]) の接空間に制限したリアプノフ指数を以下の記号であらわすことにする。

- Λ_1, Λ_2 ($\Lambda_1 \geq \Lambda_2$): エノン写像のリアプノフ指数 ($(\Lambda_1, \Lambda_2) \approx (0.419, -1.623)$)
- λ_i ($i = 1 \dots N$) ($\lambda_i \geq \lambda_j$ ($i > j$)): リザーバーモデルのリアプノフ指数
- $\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2$ ($\tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2$) リザーバーモデルの慣性多様体の接空間に制限したリアプノフ指数

5.2 研究項目 1: リアプノフスペクトルの再現可能性の検証

5.2.1 様々な行列 A に対するリアプノフ指数

本研究ではリアプノフ解析のためにエノン写像のダイナミクスに対してリザーバーコンピューティングを用いて機械学習モデルを構成する。まず、行列 A のスペクトル半径を $\rho = 0.01$ として得たランダム行列 A と行列 W_{in} に対して、エノン写像の時系列データ $\{u(l)\}_{l=1}^L$ を学習してリザーバーモデルを構

成する。短時間予測結果については、図 1 に図示する。機械学習モデルが生み出す時系列は、エノン写像のそれをよく近似している。

また、機械学習モデルを時間発展させた様子の比較 (図 2) やその長時間発展させて得られた x 変数に関する密度分布の比較 (図 3) を図示する。いずれもモデルはエノン写像のそれらを精度良く捉えており、機械学習モデルがエノン写像のアトラクタを再現していることがわかる。

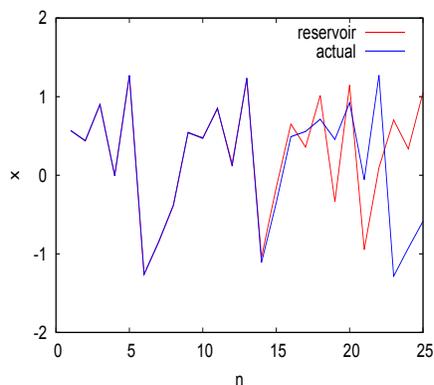


図 1 エノン写像の時系列データを学習して得られた機械学習モデルを用いた時系列予測。機械学習モデルから予測した u_1 変数の時系列 (赤線) と、エノン写像の時系列 (青線) とを比較した。モデルの軌道はある期間までは似た挙動を示していることがわかる。一定時間経過後に乖離が見られるのはダイナミクスのカオス性からの当然の帰結である。

次に行列 A のスペクトル半径を $\rho = 0.001, 0.01, 0.05, 0.08$ と変えて、行列 A と W_{in} をランダムに生成し、それぞれの場合にエノン写像の時系列データ $\{u(l)\}_{l=1}^L$ を学習する。各々のスペクトル半径で異なる 6 つのリザーバーモデルを構成し、そのリアプノフ指数を計算する。図 4 においては各モデルに対してその上位 2 つのリアプノフ指数 λ_1, λ_2 を示してい

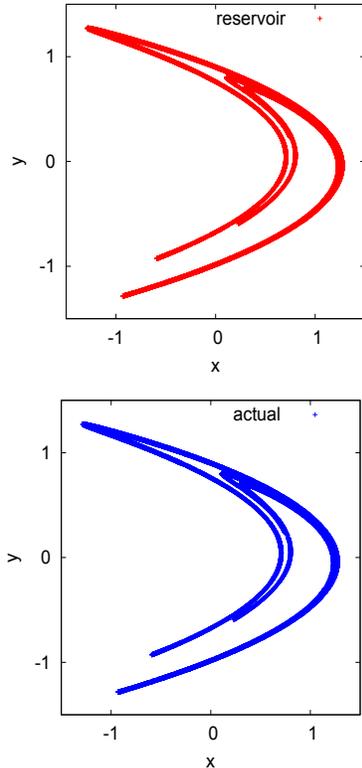


図2 機械学習モデルによる長時間発展の様子。エノン写像の機械学習モデルにより得られた長時間軌道を上段に、エノン写像を直接数値計算して得られた軌道を下段に書き出した。

る。いずれの場合も最大リアプノフ指数 λ_1 はエノン写像のリアプノフ指数 $\Lambda_1 \approx 0.419$ を再現している。スペクトル半径が小さい場合のリザーバーモデルの2番目のリアプノフ指数 λ_2 はエノン写像のリアプノフ指数 $\Lambda_2 \approx -1.623$ を再現しているが、スペクトル半径が大きい場合は $\lambda_2 > \Lambda_2$ となっている。類似の結果は [4] において、他の力学系に対して報告されている。

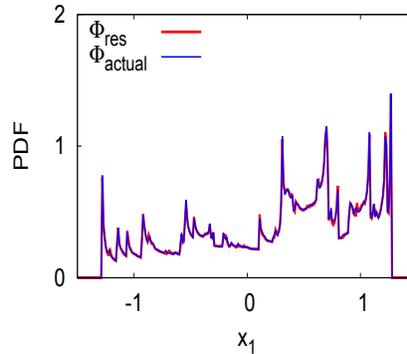


図3 機械学習モデルによる長時間発展で得られた変数 x に関する密度分布。エノン写像の機械学習モデルにより得られた x 変数の出現頻度分布を(赤色)とエノン写像を直接数値計算して得られた x 変数の出現頻度分布(青色)を書き出した。

5.2.2 行列 A のスペクトル半径を変えたあるモデル族のリアプノフ指数

スペクトル半径 ρ とリアプノフ指数の関係をより明確にするために、スペクトル半径が1の行列 A' を一つ定め行列 $A = \rho * A'$ としてスケーリングのみを行う。ただし、行列 W_{in} については一つ定めスケーリングは行わず固定する。それぞれエノン写像の時系列データ $\{u(l)\}_{l=1}^L$ を学習しリザーバーモデルを構成し、リアプノフ指数を計算した(図5)。エノン写像のリアプノフ指数 Λ_1, Λ_2 に対応するリアプノフ指数が、いずれの場合も再現されている。一方で、それ以外のリアプノフ指数については、スペクトル半径を大きくすると徐々に大きくなる。

5.3 研究項目2: 様々な設定下でのリアプノフスペクトルの再現可能性や共通構造の解明

研究項目1ではリザーバー空間でのリアプノフ指数 $\{\lambda_i\}$ を計算した。研究項目2ではリ

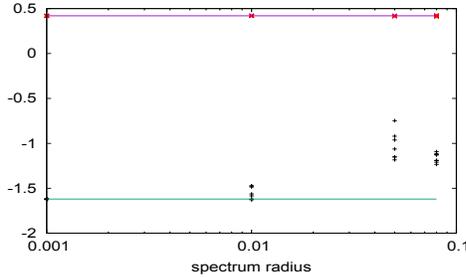


図4 行列 \mathbf{A} のスペクトル半径を決め、 \mathbf{W}_{in} をランダムに生成した場合に構成したリザーバーモデルのリアプノフ指数 λ_1 (\times), λ_2 ($+$). スペクトル半径が小さい ($\rho \leq 0.01$) ときはモデルのリアプノフ指数 λ_1, λ_2 の値は、エノン写像のリアプノフ指数 Λ_1 (紫), Λ_2 (緑) の周辺に分布し、スペクトル半径が大きいく所では Λ_2 の値から乖離している.

ザーバーモデルのリアプノフ指数の中でエノン写像のリアプノフ指数に対応するものが幾何学的にどのように実現されているかを考察する。そのために、リザーバーモデルの慣性多様体の接空間に制限したリアプノフ指数 ($\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2$) を図4で構成した各々のリザーバーモデルに対して計算した(図6)。リザーバーモデルの慣性多様体の接空間に制限したリアプノフ指数は以下の手順で計算する。

- 十分小さい $\epsilon > 0$ を設定し、 ϵ' を $0 < \epsilon' < \epsilon$ とする。あるリザーバーベクトル $r(t)$ に対して次のことを考える。
- 次の3つの条件を満たすように2点 $r(t'), r(t'')$ ($t \ll t' \ll t''$) を求める:
 - $\epsilon' < \|r(t) - r(t')\| < \epsilon$
 - $\epsilon' < \|r(t) - r(t'')\| < \epsilon$
 - $\langle r(t) - r(t'), r(t) - r(t'') \rangle \approx 0$
 ただし、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は内積を意味する。
- $\langle r(t+n) - r(t'+n), r(t+n) - r(t''+n) \rangle \approx 1$ となる $n > 0$ を求める。

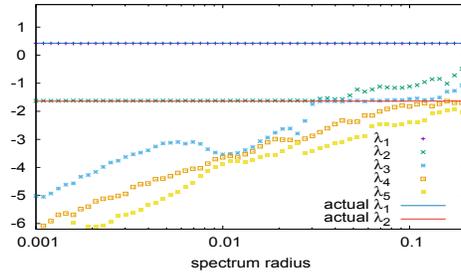


図5 行列 \mathbf{A} のスペクトル半径を変えたモデルに対するリザーバー空間でのリアプノフ指数 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5$. エノン写像のリアプノフ指数 Λ_1, Λ_2 が、 \mathbf{A} のスペクトル半径の選び方によらずロバストにモデルのリアプノフ指数に現れている。図に示した状況において常に $\Lambda_1 = \lambda_1$ であるが、 $\rho < 0.03$ のときに $\Lambda_2 = \lambda_2$, $0.03 < \rho < 0.15$ のときに $\Lambda_2 = \lambda_3$, $0.15 < \rho$ のときに $\Lambda_2 = \lambda_4$ となっている。

- 適当な $k > 0$ に対して、 $\frac{1}{k} \log(\frac{\|v(t+n+k)\|}{\|v(t+n)\|}) =: \tilde{\lambda}_1(t+n)$ と定める。ただし、 $v(t) := r(t) - r(t')$ とし、このベクトルは最大リアプノフベクトルに対応する。
- $v'(t) = v(t)/\|v(t)\|, r(t)$ に対して、次の2つの条件を満たすように点 $r(t''')$ を求める。
 - $\epsilon' < \|r(t) - r(t''')\| < \epsilon$
 - $\langle r(t) - r(t'''), v'(t) \rangle \approx 0$
- 適当な $m > 0$ に対して、 $\frac{1}{m} \log(\frac{\|u(t+m) - (u(t+m) \cdot v'(t))u(t+m)\|}{\|u(t) - (u(t) \cdot v'(t))u(t)\|}) =: \tilde{\lambda}_2(t)$ と定める。ただし、 $u(t) := r(t) - r(t''')$ とし、このベクトルは第二リアプノフベクトルに対応する、グラムシュミットベクトルである。
- $\tilde{\lambda}_1 := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_t \tilde{\lambda}_1(t)$,
 $\tilde{\lambda}_2 := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_t \tilde{\lambda}_2(t)$

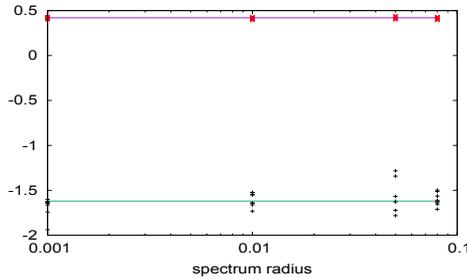


図 6 行列 A のスペクトル半径を変えたモデル毎にその慣性多様体の接空間に制限したリアプノフ指数 $\tilde{\lambda}_1(\times)$, $\tilde{\lambda}_2(+)$ を計算した。スペクトル半径によらず $\Lambda_1 \approx \tilde{\lambda}_1$ に加えて、 $\Lambda_2 \approx \tilde{\lambda}_2$ となっていることがわかる。図 4 と比較するとスペクトル半径 ρ が大きいときに、違いがあらわれ、 $\lambda_2 > \tilde{\lambda}_2 \approx \Lambda_2$ であることがわかる。

いずれの場合も最大リアプノフ指数 $\tilde{\lambda}_1$ はエノン写像のリアプノフ指数 Λ_1 を再現している。図 4 では、スペクトル半径が大きい場合は $\lambda_2 < \Lambda_2$ となっていたが、慣性多様体の接空間に制限して得た 2 番目のリアプノフ指数は $\tilde{\lambda}_2 \approx \Lambda_2$ となっている。

5.4 まとめ

- 行列 A のスペクトル半径が十分小さい場合には、リザーバーモデルの上位二つのリアプノフ指数 λ_1, λ_2 がエノン写像のリアプノフ指数 Λ_1, Λ_2 としてあらわれる。
- スペクトル半径が十分小さくない場合には、リザーバーモデルの 2 つ目、3 つ目などのリアプノフ指数 λ_2, λ_3 がエノン写像のリアプノフ指数 Λ_2 よりも大きな値を取ることがあるが、そのときにはモデルの下位のリアプノフ指数に Λ_2 を再現するものが存在する。
- 実際、モデルの慣性多様体の接空間に制限した 2 つのリアプノフ指数 $\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2$ を計算

すると、 Λ_1, Λ_2 に対応するものが浮き出てくる。

- 行列 A のスペクトル半径が十分に小さい場合のみならず、比較的大きい場合においても多くの場合に、高次元のリザーバー状態空間の中にエノン写像のアトラクタ（ハウスドルフ次元 2 未満）が再構成されて、残りの $N - 2$ 次元は慣性多様体に横断的な安定性が実現されていることが示唆される。例外はエノン写像の第 2 リアプノフ指数 Λ_2 を描写するリザーバーモデルのリアプノフ指数が λ_i から λ_j ($i \neq j$) にスイッチする状況であると考えられる。そのとき、 λ_1 に加えて λ_i, λ_j に対応するリアプノフベクトルがいずれもリザーバーモデルの慣性多様体の接空間とのなす角がほぼゼロとなる。
- リザーバーコンピューティングでは、異なるリザーバー状態ベクトル r_1 と r_2 に対して式 (1) によりそれぞれ時間発展をさせた場合に、その差が 0 に収束することをエコーステイト性と呼ばれる性質がある。ハイパーパラメタの一つであるスペクトル半径が十分小さい時にはエコーステイト性が成り立つことが知られている。

参考文献

- [1] V. Oseledec, A multiplicative ergodic theorem, Trans. Moscow Math. Soc., 19 (1968), 197-231.
- [2] I. Shimada and T. Nagashima, A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical Systems, Progress of Theoretical Physics, 61 (1979), 1605-1616.
- [3] J. D. Hart, Attractor reconstruction with

reservoir computers: The effect of the reservoir 's conditional Lyapunov exponents on faithful attractor reconstruction, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 34 (2024) 4, 043123.

- [4] Z. Lu, B. R. Hunt, E. Ott, Attractor reconstruction by machine learning. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 28 (2018) 6.
- [5] W. Ott, and A. Y. James, Learning about reality from observation. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems* 2.3 (2003) 297-322.

6 今年度の進捗状況と今後の展望

本制度の計算資源を利用することにより当初の予定通り研究項目 1,2 を研究し、重要な知見を得た。これらの知見を活かして、次年度の流体予測モデリングの研究を進める。