

jh160035-DAJ

ランダム神経回路網における同期解析のための大規模計算

末谷大道（大分大学）

概要 高次元カオス系の信号、あるいは、多自由度のミクロ系の軌道情報など複雑な時系列データを対象として、ランダム神経回路網モデルを利用した学習、及び、低次元モデル化のための数値実験を行い、大規模な神経回路網の持つ集団的な再現性のメカニズムを明らかにすることを目的とする。まず、カオス時系列を入力としたランダム結合神経回路網の応答性に関して、応答の多様性と模倣性を兼ね備えたパラメータ領域について調べ、カオス時系列や音声データ列などいくつかの時系列を学習させた場合の予測性・再現性などの性質を調べた。さらに、ネットワーク内部の同期現象を明らかにすることを目的として、微小な信号を入力として加えるときの内部状態の相関を調べた。これにより、主成分分析など従来の統計科学的手法では意味のある出力を得られない場合でも、正準相関分析により同期の検出が可能になる領域があることを示すことができた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

九州大学情報基盤研究開発センター

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

ランダム神経回路網の動力学研究(末谷)
大規模な並列計算環境の整備(高見)
並列計算環境整備の支援(南里、本田)

2. 研究の目的と意義

人間の脳内の情報処理は、互いに結合した多数のニューロン上を伝達される信号によって行われている。近年、深層学習などの機械学習的手法の進展により、多層に渡る大規模なニューラルネットワーク(神経回路網)モデルを利用した応用分野が幅広く開拓されつつある。すでに、画像認識や音声解析などの分野で華々しい成果を上げてきているが、今後は、時系列解析などを含むさらに複雑なデータに対する解析にも広く適用されていくことが予想される。本研究では、高次元カオス振動子系の発する信号、あるいは、生体分子など多自由度のミクロ系の軌道など複雑な時系列データを

を対象として、ランダム神経回路網モデルを利用した学習、および、低次元モデル化のための数値実験を行う。これらの数値実験を通して、大規模な神経回路網の持つ集団的な再現性のメカニズムと学習能力との関係を明らかにすることが目的である。

大規模な神経回路網では学習過程に困難が伴うと考えられていたが、スパース化などの手法を利用した新しい学習手法を導入することによって深層学習の有効性が確認された。これは、最適化計算の工夫によって大規模な神経回路網を構成することが可能になったことで、これまで考えられなかった領域へも応用されるようになったものである。つまり、規模の拡大によって応用分野の拡大という質の変化を生み出した例である。本研究課題では、比較的小規模な数値計算にとどまっていたこれまでの神経回路網モデルを、大規模な分散並列計算機を利用してさらに大規模なものに拡大することを目指し、従来は考えられなかった大規模なデータに対しても適用範囲を広げ、複雑な時系列データの解析手法を確立することにつなげることが目的である。階層的な大規模神経回路網モデルでの学習手法の開拓、及び、再帰的な結合を持つ大規模なランダム神経回路網の外部入力に対する応答性の解析については、現実の脳神経系の構造や、人間の学習過程に対する新しい知見を提供するものとなることを考える。

拠点側の九州大学では、データ解析や機械学習のための計算を、バッチ処理による分散並列計算機上で効率よく実施するための運用方法の開拓を行うことにより、今後、爆発的に増えることが予想されるこの分野の利用者を獲得することにつながる。また、並列化手法の研究として、非線形反復法の反復方向並列化に対して、時間並列化手法を応用した新しい手法を検討する契機になると考えられる。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

機械学習など神経回路網モデルで使われる数値計算は、デスクトップ PC や比較的小規模のクラスター計算機などで広く実施されてきており、多くの研究者は大学の計算機センターなど大規模な並列計算機上では、これまであまり実施されてこなかった。この理由としては、個々の計算が比較的小規模なため、GPU などの加速機構の利用はあっても、大規模な分散並列化を実施する必要性がなかったこと、また、少数の汎用プログラムを使って繰り返しプロダクションジョブを投入するような使い方ではなく、小規模なプログラムを問題に応じて書き換えて実行する、あるいは、さまざまなネットワーク構成(ユニット数、段数、結合の種類など)の中から最適なものを探るといった形式の実行が多かったため、バッチ実行を主体とする計算機センターでの実施が好まれなかったという面もある。しかし、今後は、大規模なデータを多層の神経回路網で解析するという方向の研究も実施

されていく傾向があり、バックプロパゲーション(誤差逆伝搬)や確率的勾配降下などの手法による最適化計算の規模も大きくなることが予想されるため、大規模な分散並列計算機上での実施が望ましい。そのために、バッチ実行のためのスケジューラとの連携や、分散並列化のためのプログラミング手法の研究を実施する必要がある。

また、Google が公開している TensorFlow などの機械学習や神経回路網のためのプラットフォームでは、プログラミングは主に Python などのスクリプト言語上で行われている。MPI で並列化された C や Fortran の数値計算プログラムを効率よく実行することが主な目的であった従来の計算機センターで、スクリプト言語によって書かれた計算がどこまで効率よく実行されるのかを検証するために、拠点の並列計算機の利用と分散並列計算の専門家の知見が必要であった。本研究課題でも、多くの計算は Matlab や Python 上で書かれており、ライセンスの問題に加えてバッチジョブ環境での実行方法について検討することは、利用者・管理者双方にとって意義があったと考える。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当しない。

5. 今年度の研究成果の詳細

最初に、再帰結合型のランダム神経回路網モデルに対して、カオス時系列を与えた場合の応答性についての結果を述べる。再帰結合型のランダム

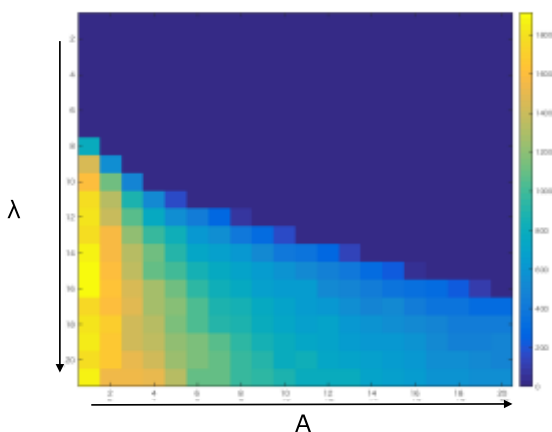


図 1: 異なる初期状態の神経回路網に、同一の時系列を与えた時の応答の差。

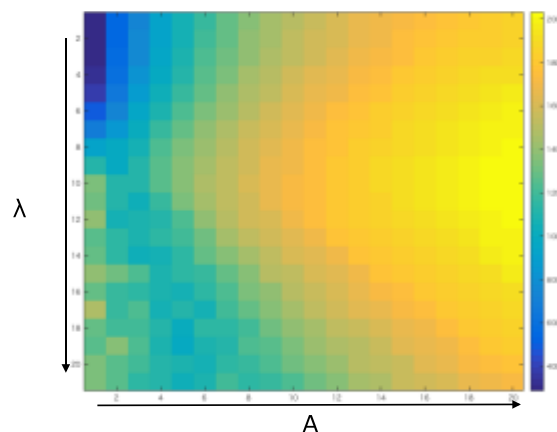


図 2: 同一の初期状態の神経回路網に、異なる時系列を与えた時の応答の差。

神経回路には、その性質を決めるパラメータが多く存在し、それらの値によって挙動が大きく変わることが知られている。ここでは、内部結合係数のスケールパラメータ λ 、および、入力時系列の振幅 A と、応答性の関係を調べた。図 1 は、神経回路網の初期状態がその後の時間変化に与える影響を調べた結果である。入力として同じ時系列を与えた時の内部状態の差を表示しており、明るい色ほど差が大きいことを示している。縦軸が結合係数のスケール λ で横軸が時系列の振幅 A である。濃い青の部分は、神経回路網の内部がどんな状態であっても、同じ入力に対しては同じ状態変化となることを示している。一方、図 2 は、同じ初期状態に準備した神経回路網に対して、異なる時系列を与えた場合の内部状態の差を測定した結果である。明るい色は差が大きい状態を表し、暗い色は差が小さい状態を表す。これら二つの結果を総合すると、神経回路網のパラメータをうまく調整すると、与える時系列の微小な差を拡大するとともに、同一入力に対する再現性を持つ場合があることがわかる。

次に、外部から与えた時系列を予測することができるようにバッチ学習で出力層の係数を決定するためのプログラムを作成し、入力時系列に対する予測可能性を調べた。ここでは、reservoir computing としてスパースなランダム結合を持つエコステートネットワークを構成し、正則化パラメータを導入した pseudo-inverse を求める方式で係数を決定した。入力として、単純な周期関数、準周期関数、カオス時系列などを使い、これらの特徴の違いが予測可能性に与える影響を調べた。

数値実験として、時系列の 1 ステップ先を出力

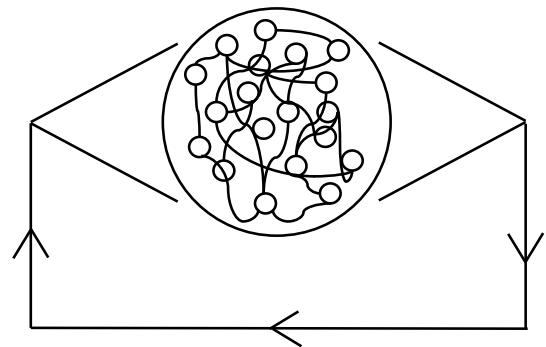


図 3: 神経回路網の出力を入力に使い、力学系を構成する

するように学習したエコステートネットワークを用意して、学習に使った時系列を一定長だけ入力した後、ネットワークの出力を入力にフィードバックし、自励的に振動を生み出す力学系として構成した(図 3)。これにより、与えた時系列から、それを生み出しているシステムを同定し、同じ時系列を再現することができるかを調べることとなる。パラメータ領域をうまく調整すると、周期関数や準周期関数として与えた時系列に対しては、ほぼ完全な再現が可能であり、このパラメータ領域は、図 1 と図 2 で明らかになった領域とほぼ同じであることが分かった。

一方、Lorenz 系と呼ばれるカオス力学系から生み出される時系列に対しては、図 4 に示すように、時系列を完全に再現することはできないことが分かった。しかし、例えばパワースペクトルで見るとこれら二つの時系列はほぼ同様の性質を持つことがわかり、力学系の同定としては、成功していると考えられる。むしろ、元々の力学系が持つ初期値鋭敏性も含めて再現している結果、微小な誤差によって軌道がずれてしまったと解釈できる。

以上のように決定論的に作られている時系列だけでなく、音声など雑音を含む多様な時系列に対

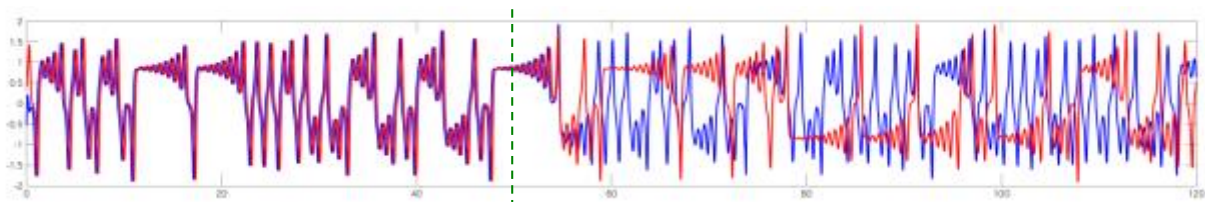


図 4: Lorenz カオスを時系列から力学系として再現した結果。点線の右側が力学系として出力した結果(青)と、もともとの時系列(赤)の比較。

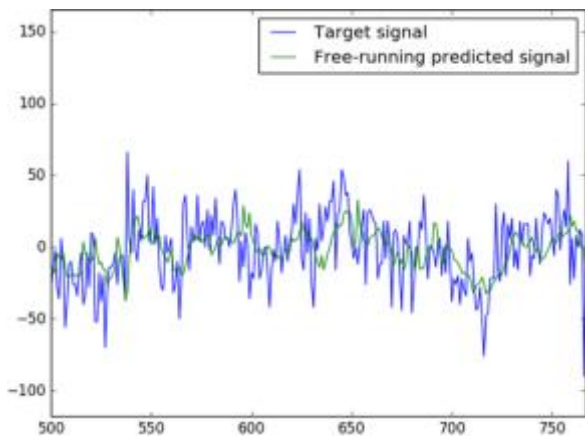


図 5: 入力と教師データとしての音声(青)と実際に出力された予測時系列(緑)の比較。

する応答を調べるため、同様のエコーステートネットワークに対して、マイクから録音した音声時系列データを加えるという実験を実施した。ここでは、自励的な実行ではなく 1 時間ステップ先 (Δt 後) を予測する形での構成とし、教師データとしては入力と同じ音声データとした。この結果得られた予測時系列は、入力音声から雑音を取り除いた形の時系列となっていることが分かった(図 5)。音声信号は基本的に周期的な波形の繰り返しであるが、綺麗な周期関数とは異なり不規則なノイズが乗っているため、学習過程において再現性の低い雑音部分が取り除かれ、共通の音声部分が抽出されたものと考えられる。つまり、エコーステートネットワークを雑音除去フィルタとして利用可能であることを示したことになる。

最後に、同様のリカレントネットワークに対して、微小な振幅の信号を入力として与える場合のネットワークの応答と相関に関する結果について記述する。微小な信号をユニットごとに初期位相を変えて与える場合を考えると(図 6 の上段)、内部の初期状態も異なるため、各ユニットは一見バラバラな振動状態を示す(図 6 の中段)。一見ランダムな状態から意味のある信号を取り出す方法として主成分分析(PCA)などの統計科学的手法が広く用いられているが、このように信号の振幅が小さい場合にはうまくいかない場合が多い。ここで、正準相関分析(CCA)として知られている方法(信号対の相関を最大にするような射影方向を求める)

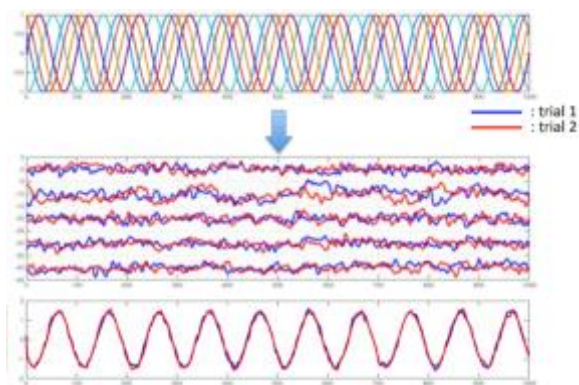


図 6: 上段から順に、位相の異なる入力信号、内部ユニットの振動状態、正準相関分析により抽出した信号を示す。

を各ユニットからの出力に適用すると、PCA では信号抽出ができない場合でも元の信号の回復ができることが分かった。また、このような解析により、たとえ信号入力が微小で内部状態がランダムに見える場合でも、各内部ユニットは入力信号に応じた応答を正しく行っており、多様な入力に対する応答性において優れた分析機であることが明らかになった。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

当初の研究計画では、研究期間の初期段階で、TensorFlow など、機械学習で広く使われている処理系を九州大学の計算機に導入し、Matlab やその他の処理系との比較を含めた基本的な性能測定を実施することとしていた。TensorFlow を実行するための Python の処理系はシステム側にも導入されており、それとは独立に各利用者がそれぞれのホーム下に独自に導入して利用することも可能である。また、Matlab についても、ライセンスを取得している利用者については九州大学の計算機リソース上で利用することも許されている。しかし、シングルノード内での利用が可能であることは確認したものの、メモリ量の制限を超えるような大規模な計算を分散並列化して実行できるかどうかについては、研究期間内に検討することができなかった。バッチスクリプトを工夫して実行することにより、計算ノードごとに独立の計算を実行して、スループットを上げるような手法については

有効であるため、多様な初期条件やハイパーパラメータの値を比較するような目的に適用できる。

一方、末谷の担当となっているランダム神経回路網自体の動力学研究として正準相関分析(CCA)の拡張研究はほぼ計画通りの進捗である。ただし、分散並列計算機上で大規模なランダム神経回路網を効率よく計算できる環境の整備には至らなかったため、九州大学の計算機を利用しない形で得られた成果となっている。これは、主な研究対象が大規模分散並列化を必要とするものでなかったことと、特に Matlab の利用においては、日常の研究ではインタラクティブな環境で実施しており、リモートでの計算機利用より手元の計算機を使う形での研究の方が実施しやすかったことによる。

結局、研究期間を通して、大規模分散並列計算での計算効率を検証するという部分に研究時間を割くことができなかった。これは、本研究課題で対象とした研究内容は、手元の計算機で工夫すれば実施できる規模であったため、その必要性と並列化などの手間を天秤にかけた結果である。当面、通常の研究対象においては、分散並列化が必要なレベルまで大規模な計算を実施することはないと考えるが、スループットジョブとしての利用については、計算結果取得までの時間の短縮という意味で大規模な計算機リソースは魅力的である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

なし

(2) 国際会議プロシーディングス

なし

(3) 会議発表(口頭, ポスター等)

・ H. Suetani, "Macroscopic reliability of high-dimensional chaos in recurrent neural Networks," XXVI Dynamics Days Europe, Corfu, Greece, 口頭発表 (2016).

・ H. Suetani, "Generation of coherent patterns and chaotic itinerancy in random recurrent neural networks based on FORCE-learning approach", International Conference

on Control of Complex Systems and Networks, Heringsdorf, Germany, 口頭発表 (2016).

・ Keiichi Kitajo, Takumi Sase, Yoko Mizuno, Hiromichi Suetani, "Individuality and consistency of human brain responses to noisy visual inputs," 第 39 回日本神経科学大会、口頭発表 (2016).

・ 末谷大道, "ランダム神経回路網によるカオス力学系の学習と一般化同期," 日本物理学会 2016 年秋季大会、口頭発表 (2016).

・ 末谷大道, 高見利也, "echo state network による粒子フィルタの構成とカオス力学系への応用," 日本物理学会 2016 年秋季大会、ポスター発表 (2016).

(4) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし