リザバーコンピューティングによる力学系の再現を支える関数的独立性の役割

大石 悟 [1]，山下 洋史 [1]，鈴木 秀幸 [1]，白坂 将 [1]

[1] 大阪大学 大学院情報科学研究科　〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5

あらまし　状態空間再構成とは，観測時系列を高次元空間に移し，未知の力学系の幾何学的構造を再現する手法である．近年注目を集める Reservoir Computing (RC) と呼ばれる機械学習アプローチは，一般化同期によってリザバーと呼ばれる中間層に状態空間再構成が実現できると考えられている．さらに，学習した RC は，時系列の短期予測に成功するだけでなく，元の力学系の定性的な性質を RC の内部機構に保存できることが報告されている．ゆえに，適切に構築した RC は対象の力学系を再現できると考えられている．本研究では，RC における状態空間再構成の質を関数的独立性の視点から定量化する手法を導入し，良質な RC の再構成空間（リザバー）が，力学系の再現能力に貢献することを確認した．
キーワード 状態空間再構成，一般化同期，アトラクタ，リザバーコンピューティング

The role of functional independence in supporting reproduction of dynamical systems by reservoir computing

Satoshi Oishi[1], Hiroshi Yamashita[1], Hideyuki Suzuki[1], and Sho Shirasaka[1]

[1] Graduate School of Information Science and Technology, The University of Osaka
1-5 Yamadaoka Suita, Osaka, 565-0871, Japan

Abstract State space reconstruction is a technique for mapping an observed time series into a higher-dimensional space and reconstructing the geometrical structure of an unknown dynamical system. Reservoir Computing (RC), a trending machine learning approach, is believed that state-space reconstruction can be achieved in the intermediate layer of RC, called reservoir, through generalized synchronization. Moreover, learned RCs have been reported to make short-term predictions and reproduce the qualitative properties of the original dynamical system. In this study, we introduce a method to quantify the quality of state-space reconstruction in RCs from the viewpoint of functional independence, and confirm that RCs with a good reconstruction space (reservoir) can contribute to the reproduction of the dynamical system well.
Key words state space reconstruction, generalized synchronization, attractor, reservoir computing

1.　研究背景

状態空間再構成（State Space Reconstruction）[1] とは，観測時系列を高次元空間に移すことで未知の力学系のもつ幾何学的構造を再現する手法である．状態空間再構成の標準的な手法としては，遅延を与えた時系列を用いて空間座標を構築する遅延座標系 [2], [3] の手法などが知られている．近年注目されている Reservoir Computing (RC) [4] と呼ばれる RNN

（Recurrent Neural Network）のアプローチは，リザバーと呼ばれる RC の中間層に状態空間再構成が実現できていると考えられており，それがカオス時系列処理のタスクを達成できる原理であると考えられている [5], [6].

RC の基本的な枠組みについて述べる．観測対象の力学系の状態 $\boldsymbol{x}(t)$ を観測関数 $\boldsymbol{h}$ によって観測し，観測値 $\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}(t))$ が得られるとき，RC は次のような時間発展をもつ離散力学系として表される．

$$\boldsymbol{r}(t+1) = \boldsymbol{f}[\mathbf{W}_{\text{res}}\boldsymbol{r}(t) + \mathbf{W}_{\text{in}}\boldsymbol{u}(t+1)] \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{r}(t) \in \mathbb{R}^m$ は時刻 t における ESN の内部状態，$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ は活性化関数，$\mathbf{W}_{\text{in}} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ は入力層，$\mathbf{W}_{\text{res}} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ は RC の遷移行列を表す．適切なパラメータで構築された RC は，(1) 式の時間発展を介して対象力学系の状態 $\boldsymbol{x}(t)$ をリザバーの内部状態 $\boldsymbol{r}(t)$ に変換することで，リザバー空間に元の力学系の幾何学的構造を再現する状態空間再構成を達成できると経験的 [5], [6] にも理論的 [7] にも考えられている．RC で時系列予測を行う場合，RC の出力層 $\mathbf{W}_{\text{out}} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ は線形回帰によって学習され，予測 $\hat{\boldsymbol{u}}$ は $\hat{\boldsymbol{u}}(t+1) = \mathbf{W}_{\text{out}}\boldsymbol{r}(t)$ と計算される．さらに，予測 $\hat{\boldsymbol{u}}$ を (1) 式の入力として利用することで，n 時刻先を予測可能な自律力学系と見なすことができる．適切な hyperparameter の下で構成したこの自律 RC は，カオス時系列の短期予測に成功するだけでなく，対象力学系の定性的な性質を保つことが報告されている [5], [6].

遅延座標系による状態空間再構成においては，Takens の埋め込み定理など [2], [3] の再構成を実現するための十分条件が明らかになっているが，RC による状態空間再構成においては，同様の理論的基盤の構築には現段階では至っておらず，ESN 埋め込み予想 [7] として知られる未解決問題である．ゆえに，どのように RC を設計すればアトラクタ再構成を達成できるかは不明であるし，そもそも状態空間再構成を実現できたとしても時系列予測や力学系の再現に成功するとは限らない．そこで，本研究ではまず，RC の状態空間再構成の質を評価する手法を，リザバー層のノード間の関係を関数的独立性の視点から定量化することで開発した。この手法は、遅延座標系における状態空間再構成の質を評価するために用いられてきた連続性統計量 [8] の概念に基づいている。そして、提案手法によって評価した良質な再構成空間（リザバー）は良い力学系の再現に貢献することを確認する．

2.　数値実験

ここでは，ローレンツアトラクタを対象に RC で状態空間再構成および力学系の再現を行った結果を紹介する．本研究で提案する状態空間再構成の質を評価する手法は，連続性統計量 [8] に基づいており，リザバーのノード間の関数の連続性を統計的に定量化することで再構成空間の質を評価する．したがって，リザバーのノード数（リザバー空間の次元）の数だけ，この連続性統計量が計算されることになる．この連続性統計量と RC の hyperparameter の依存性を 図 1 左 に示す．図 1 右 では，Lyaounov 指数と RC の hyperparameter の関係を表す．実線は Lorenz 方程式の真値を表し，プロットは RC のリアプノフ指数を表す．連続性統計量が大きい（状態空間再構成の質が良い）RC の hyperparameter を用いて RC を構築するとき，元の力学系のリアプノフ指数と同じリアプノフ指数をもつ RC を構築できることが分かる．

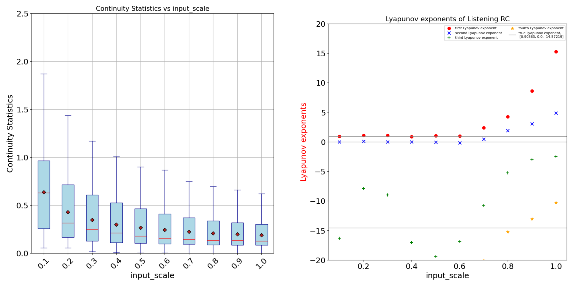

図 1: RC の入力強度と連続性統計量（左）及びリアプノフ指数（右）の関係

謝辞　本研究は，JST 科研費 JPMJAN23F2, JPMJMS2021 の支援を受けて行われました．

参考文献

[1] H. Kantz and T. Schreiber, *Nonlinear Time Series Analysis*. Cambridge University Press, 2004.

[2] F. Takens, *Dynamical Systems and Turbulence, Warwick 1980*, Springer Berlin Heidelberg, 1981.

[3] T. Sauer *et al.*, *J. Stat. Phys.*, vol. 65, 3 1991.

[4] H. Jaeger, *GMD Technical Report*, 148 2001.

[5] J. Pathak *et al.*, *Chaos*, vol. 27, 12 2017.

[6] Z. Lu *et al.*, *Chaos*, vol. 28, 6 2018.

[7] A. Hart *et al.*, *Neural Netw.*, vol. 128, 2020.

[8] L. M. Pecora *et al.*, *Phys. Rev. E.*, vol. 52, 4 1995.