［0617］ リザバーコンピューティング：時系列データの機械学習

リザバーコンピューティング（RC）と呼ばれる機械学習法が近年注目されている[1-3]。RCを用いることで，時系列データのみから，システムの状態を推定・予測することが可能である。様々な領域で応用が進展しており，化学工学分野でもソフトセンサとしてRCを活用する方法が提案されている[4]。化合物の製造プロセスにおけるソフトセンサをRCで実装し，他の方法と比べて高精度な予測が可能であることが示されている。

RCの特徴の一つは，その学習の簡易さである。時間変動するシステムの状態推定や予測にはリカレントニューラルネットワーク（RNN）がよく用いられる。RNNの学習では，入力層・中間層と呼ばれるネットワーク内の結合重み（**図1**（a）の実線矢印）を通常データから決定する。ところが，RNNの学習は一般に容易ではなく，学習の収束に関していくつかの問題が指摘されてきた[1-3]。

これらの問題を解決すべく提案されたRNNの学習法がRCであり，それは「入力層・中間層の結合重みは一切学習せず，乱数によって決定する」という（一見荒っぽい）ものである。肝心の学習は出力層の結合重み（図1（a）の破線矢印）のみおこない，これは最小二乗法と同じ形式になる。最適な重みが一意に決定され，学習の収束問題が存在しない。RCは学習パラメタに関して線形なモデルで入出力時系列間の非線形関係を近似する方法であると言える。

具体例としてRCによる非線形システムの状態推定（ソフトセンサ）を紹介する。時間変動するシステムに対して，「観測が容易な状態量x」と「推定したい状態量z」の2つの時系列データ（教師データ）が得られるとする。状態量zは，通常測定が容易でないが，ある限られた時間のデータは取得可能とする。これらの教師データを用いて，ネットワークの出力値が状態量zを近似するように出力重みを決定する。学習後は，状態量xをネットワークに入力することで，zの推定値を出力する。

図1にLorenz方程式を対象とした場合の結果を示した。Lorenz方程式の変数xを入力して，観測していない変数zがRCを用いて推定可能である。図1（b）はシステムの状態空間，（c）は観測時系列（変数x），（d）の実線は正解である時系列（変数z），破線はRCによる推定時系列である。ほぼ見分けがつかない程度に精度良く正解時系列を推定可能であることがわかる。なお，ここではLorenz方程式を用いたが，RCの対象は微分方程式でモデル化されているものに限らない。入出力にある種の関係さえあれば，必要なのは時系列データのみでありモデルは不要である。

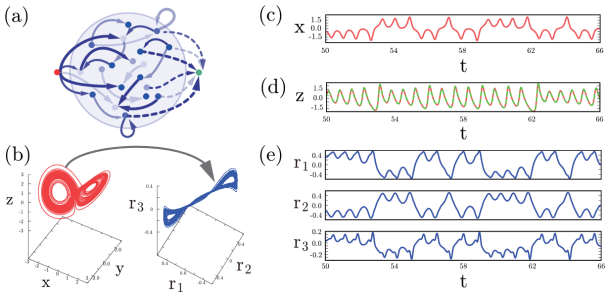


図1 （a）リザバーコンピューティングの概念図，（b）Lorenz系とネットワークの状態空間，（c）Lorenz系の変数xの時系列，（d）Lorenz系の変数zとRCによる変数zの推定時系列，（e）ネットワーク状態の時系列

大胆に学習を簡単化しているにもかかわらず，なぜRCはうまくいくのだろうか。この素朴な問いに答えるために，様々な理論研究がなされている[1-3]。RCでは入力信号によってネットワークの状態r_1，…，r_Nが一意に決定される（同期現象）。図1（e）では$N = 100$の場合を計算し，r_1，r_2，r_3の時系列を表示している。ネットワークの高次元の状態空間において，対象のシステムが観測信号から再構成されていると期待されている（図1（b）右）。実際，いくつかの条件を仮定することで，この同期現象を表す写像の存在（図1の（b）の灰色矢印）が数学的に証明されている[5]。

実用上は，短時間の時系列データで学習をおこないたい場合や，一度学習した結果を他の類似した問題にも転用したい場合などがある。これらの目的のため，一度学習した出力重みを短い時系列データを用いて補正する方法（転移学習法）が提案され，流体乱流の状態推定問題で有効性が示されている[6]。

RCは時間変動するシステムの予測・推定といった，化学工学における重要な課題を小さな計算負荷で解決できる可能性がある。このためRCは今後ますます応用が進むと期待されるが，実用上はデータ駆動の方法のみでは解決できない問題もあるだろう。このような場合は，応用数学的手法だけでなく，化学工学の広範な学術的知見との融合が重要になり，今後ますます活発に研究されていくことが期待される[注1)]。

注1）流体力学分野ではJSTさきがけ研究領域「複雑流動」において，化学工学や応用数学を含む広い分野横断的研究が計画されている。

参考文献

1）小特集リザバーコンピューティング，電子情報通信学会誌，**102**（2）（2019）
2）田中剛平，中根了昌，廣瀬明：リザバーコンピューティング：時系列パターン認識のための高速機械学習の理論とハードウェア，森北出版（2021）
3）Nakajima, K. and I. Fischer（Eds.）：Reservoir Computing: Theory, Physical Implementations, and Applications, Springer（2021）
4）He, Y.-L. *et al.*：*Chem. Intell. Lab. Syst.*, **200**, 15（2020）
5）Grigoryeva, L. *et al.*：*Phys. Rev. E*, **103**, 062204（2021）
6）Inubushi, M. and S. Goto：*Phys. Rev. E*, **102**, 043301（2020）

（東京理科大学理学部第一部応用数学科　犬伏正信）