

20th SICE Symposium on Computational Intelligence

June 3-4, 2022, Hyogo

第20回コンピューターショナル・インテリジェンス研究会
講演論文集

期 日：2022年6月3日(金)，4日(土)

会 場：淡路夢舞台国際会議場

SICE[®]

主 催：計測自動制御学会 システム・情報部門

企 画：コンピューターショナル・インテリジェンス部会，知能工学部会

協 賛：システム制御情報学会，日本知能情報ファジィ学会，進化計算学会，電気学会，
情報処理学会，日本神経回路学会，日本機械学会，人工知能学会，ヒューマン
インタフェース学会，電子情報通信学会，IEEE Computational Intelligence
Society Japan Chapter (CISJ)，IEEE Systems, Man, and Cybernetics Society Japan
Chapter

カタログ番号 22PG0003

著作権 © 2022

公益社団法人計測自動制御学会(SICE)
〒101-0052 東京都千代田区神田小川町 1-11-9 金子ビル 4 階

カタログ番号 22 PG 0003

著作権は、計測自動制御学会がもっている
ので、個人の使用のための複製以外の
目的で掲載の記事の一部または全文を
複製する場合には、著作権者に許可を求
め規定の複製料を支払うこと。

発行日：2022年6月3日

発行者：公益社団法人計測自動制御学会 システム・情報部門
コンピューターショナル・インテリジェンス部会，知能工学部会

第 20 回コンピューターショナル・インテリジェンス研究会

6月3日(金)

14:00~15:30 (4件) セッション1 座長: 礪川悌次郎(兵庫県立大学)

14:00~ 興奮性シナプス後電位のロングテール 松元唯吹, 信川創(千葉工業 1
14:20 性による Liquid State Machine の記憶容 大学)

量の向上

14:20~ 複数の結合モジュールからなるスパイ 渡邊陸斗, 信川創(千葉工業 5
14:40 キングニューラルネットワークにおけ 大学)

る long-tail 活動分布の評価

14:40~ 脳波の瞬時位相分布に基づいた micro- 大津圭汰, 信川創(千葉工業 9
15:00 state による運転時の脳機能解析 大学), 我妻伸彦(東邦大学),

稲垣圭一郎(中部大学)

15:00~ 機能的ネットワークの媒介中心性によ 戸部真弓菜, 信川創(千葉工 14
15:30 る認知機能推定 業大学), 水上喜美子(金沢

大学), 川口めぐみ(福井大
学), 田中悠二(明石こころ
のホスピタル), 東間正人
(医療法人社団青樹会青和
病院), 高橋哲也(福井大学)

15:50~17:50 (4件) セッション2 座長: 森 禎弘(京都工芸繊維大学)

15:50~ 不確実下でのモデリング駆動型最適化 相吉英太郎, 安田恵一郎, 19
16:20 問題とその解法 田村健一(東京都立大学)

16:20~ 離散最適化向け進化計算手法 Re- 荒木雅則, 船木亮平, 村田 27
16:50 labeling Differential Evolution の改良と離 純一(九州大学)

散・連続変数混合最適化問題への適用

16:50~ 多段階評価を取り入れた対話型差分進 野田和弥, 船木亮平, 村田 35
17:20 化の高速化 純一(九州大学)

17:20~ 介護現場支援のための GNG による介 蕪木梨乃, 土手口直毅, 大 43
17:50 護事例テキストの分析 保武慶, 久保田直行(東京都

立大学)

6月4日(土)

9:00~10:30 (3件) セッション3 座長: 礪川悌次郎(兵庫県立大学)

9:00 ~ Bilevel 多目的進化計算を用いた感度 箱石卓也, 原田智広, 三浦幸也 47

9:30 分析のサンプリング効率向上 (東京都立大学)

9:30 ~ 多変量大脳新皮質学習アルゴリズム 藤野和志(電気通信大学), 青木 53

10:00 のための適応的シナプス調整 健(東京理科大学), 高玉圭樹,
佐藤寛之(電気通信大学)

10:00~ 逐次変分自己符号化器の効率的な学 石曾根毅(明治大学), 樋口知之 61

10:30 習アルゴリズム (中央大学), 中村和幸(明治大学)

10:50~11:50 (2件) セッション4 座長: 信川 創(千葉工業大学)

10:50~ おもちゃのバギーで量子ビットを作 伊丹哲郎, 松井伸之, 礪川悌次 66

11:20 る 郎(兵庫県立大学), 幸田憲明
(松江工業高等専門学校), 橋本
尚典(兵庫県立大学)

11:20~ 複素数を用いたモジュラーファジィ 荒井裕也, 関宏理(大阪大学) 72

11:50 推論モデルの構築と医療診断への応
用

興奮性シナプス後電位のロングテール性による Liquid State Machine の記憶容量の向上

○松元唯吹 信川創 (千葉工業大学)

Enhancement of memory capacity by long-tailed distribution of excitatory postsynaptic potentials

*I. Matsumoto and S. Nobukawa (Chiba Institute of Technology)

Abstract— It is known that the long-tailed distribution of excitatory postsynaptic potentials (EPSPs) enables spontaneous activity in the micro-circuit of the cerebral cortex. Liquid state machine (LSM) is a reservoir computing model, which allows to implement the network structures with high physiological validity typified as long-tailed EPSP distribution. In this study, we constructed two models of LSM with and without the long-tailed of EPSPs. Then, we evaluated them in a memory capacity task. The result showed that the memory capacity with long-tailed of EPSP was higher in comparison with the case without long-tailed of EPSP. This distribution might contribute to enhance the ability of LSM by virtue of its high memory capacity.

Key Words: Excitatory postsynaptic potentials, long-tailed, Liquid State Machine

1 はじめに

大規模なニューロン集団で構成される脳の神経ネットワークでは、学習や記憶、知覚といった高度な認知機能を実現している¹⁾。このような認知機能は、大規模な脳ネットワークに分散した脳領域の相互作用によって生み出される²⁾。また、異なる領域間での相互作用は、時空間的にマルチスケールなゆらぎを発生する²⁾。さらに、特定の大きさのゆらぎは確率共鳴を発生させ、信号の情報量を増加させることができる。特に大脳皮質の神経回路でのゆらぎの生成のメカニズムについて、実験的・計算論的なアプローチが進められている³⁾。

神経回路レベルでのゆらぎは、神経細胞の自発的発火活動によって生み出される。大脳皮質の神経細胞は、不規則にそして持続的に発火しており、その発火率は1Hzと脳の神経活動にしては非常に低周波数の活動がみられる。このような神経活動は、自発的発火活動と呼ばれ、外部からの刺激を必要としない発火活動である。この自発的発火活動の生成メカニズムは、大脳皮質でみられる興奮性シナプス後電位 (EPSP) の分布特徴から示すことができる。EPSP とは、興奮性シナプスによって生じる電位のことであり、その多くは数ミリボルトとごくわずかなものであるが、10mV という非常に大きな電位を持つものもわずかに存在し、EPSP 全体の分布をみると長く裾を引いたロングテールな分布となっている⁴⁾。この EPSP の分布にみられる、多くの弱いシナプス結合の中にわずかにみられる強いシナプス結合の存在が自発的発火活動の発生に大きく寄与していると考えられている³⁾。自発的な発火活動を生じさせる EPSP のロングテール性は、脳の神経回路の情報伝達において重要な役割を果たすとして注目されている。例えば、EPSP のロングテール性を取り入れた連想記憶モデルは、記憶の想起をより促すことができるという研究がある⁵⁾。さらに、EPSP のロングテール性は、自発的な発火活動において決定論的なダイナミクスを生じることも報告されている⁶⁾。決定論的なダイナミクスが生じるということは、自発的な発火活

動を生じさせる EPSP のロングテール性を入出力のあるシステムに取り入れて評価を行えるということである。このように自発的な発火活動を生じさせる EPSP のロングテール性は、高度な認知機能を実現する脳の活動に積極的に関与している。

リザーバーコンピューティングは、リカレントニューラルネットワークモデルから派生して生まれた高速機械学習を可能にする計算の枠組みである。リザーバーコンピューティングの代表的なモデルに Echo State Network(ESN)⁷⁾ や Liquid State Machine(LSM)⁸⁾ がある。これらは、入力層、リザーバー層、出力層の3層構造をとり、ノードの重みの更新を出力層のみで行うため高速な学習が可能である。特に、LSM は、神経回路の主要な計算特性を解明することを狙う計算論的神経科学の流れから生まれた数理モデルである⁸⁾。そのため、リザーバー層には、スパイクニューロンで構成される生物学的妥当性を踏まえたモデルや動的なシナプス結合が用いられる⁹⁾。すなわち、自発的な発火活動を誘導する EPSP のロングテール性を機械学習に取り入れて評価を行うことができる。

本研究では、脳機能を支える上で重要な役割を担う EPSP のロングテール性が、LSM の性能向上に寄与するという仮説を立てた。そこで、この仮説を実証するために、本研究では自発的な発火活動を生じさせる EPSP の分布特徴を考慮したスパイクニューラルネットワークを用いて LSM を構築した。そして、EPSP のロングテール性を考慮した場合と考慮しなかった場合の2つのモデルの違いを、記憶容量タスクによって比較評価した。ここで、EPSP のロングテール性を考慮した場合というのは、EPSP の分布にみられるわずかな強いシナプス結合も含んだモデルのことである。

2 手法

本研究では、各ニューロンがスパイクニューロンモデルの1つである、漏れ積分発火モデルで構成される自発的な発火活動を生じるスパイクニューラ

ルネットワークを使用した³⁾。外部からの入力を受け取り、リザーバーへスパイクを与える入力ニューロン20個 ($N_{in} = 20$) と、相互に情報伝達を行うリザーバー内のニューロン (興奮性ニューロン10000個, 抑制性ニューロン2000個/ $N_E = 10000$, $N_I = 2000$) のモデル式をそれぞれ (1)(2) 式に示す。

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\tau_{in}}(v - V_L) + I_{ex} \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\tau_m}(v - V_L) - g_E(v - V_E) - g_I(v - V_I) \quad (2)$$

$$\text{if } v \geq V_{thr} \text{ mV, then } v(t) \rightarrow V_r \quad (3)$$

(1)(2) 式はどちらも (3) 式に示すように、ニューロンの電位がしきい値 ($V_{thr} = -50$ [mV]) を超えると発火したとみなして、電位をリセット ($V_r = -60$ [mV]) する。ここで、 τ_{in} と τ_m は膜時定数で $\tau_{in} = 20$ [ms], $\tau_m = 20$ [ms]/ 10 [ms] (興奮性ニューロン/抑制性ニューロン), I_{ex} は外部入力, V_L はリセット電流 ($V_L = -70$ [mV]), V_E と V_I はそれぞれ興奮性シナプス電流 ($V_E = 0$ [mV]) と抑制性シナプス電流 ($V_I = -80$ [mV]) である。外部入力 I_{ex} は $[0:0.01]$ で生成される一様乱数である。この外部入力は 1 [ms] ごとに連続的に (1) 式に与えられる。(1) 式で定義される外部入力を受け取るニューロンから (2) 式で定義されるリザーバー内のニューロンへのシナプス荷重は 0.5 [mV] とし、その接続確率は 0.1 でランダムに決定される。また、(2) 式の $g_E(t)$ [ms^{-1}] と $g_I(t)$ [ms^{-1}] によってニューロンはリザーバー内で情報伝達できるようになり、(4) 式によって定義される。

$$\frac{dg_X}{dt} = -\frac{g_X}{\tau_s} + \sum_j G_{X,j} \sum_{s_j} \delta(t - s_j - d_j), \quad X = E, I \quad (4)$$

ここで、(4) 式の τ_s は膜時定数 ($\tau_s = 2$ [ms]), $G_{X,j}$ はシナプス荷重, s_j は j 番目のニューロンからの入力を受けたスパイク時間, d_j は遅延時間である。また、 $\delta(\cdot)$ はディラックのデルタ関数を示している。すなわち、シナプス前ニューロンが時刻 ($t = s_j + d_j$) で発火すると、シナプス後ニューロンにスパイクが伝わる。

EPSP は興奮性シナプスを介してスパイクを受けたニューロンの電位であり、この電位の分布が対数正規分布に従う。本研究では (5) 式に示す対数正規分布の確率密度関数を用いた。

$$p(x) = \frac{\exp[-(\log x - \mu)^2/2\sigma^2]}{\sqrt{2\pi\sigma x}} \quad (5)$$

本研究では、 $\sigma = 1.0$, $\mu = 1 + \log(0.2)$ とした。Fig.1 に本研究で使用した対数正規分布の図を示す。Fig.1 に示すように、 $V_{EPSP} \leq 2$ [mV] を弱シナプス結合, $V_{EPSP} > 2$ [mV] を強シナプス結合とする。また、 $V_{EPSP} > 20$ [mV] は非現実的な数値のため、 $V_{EPSP} > 20$ [mV] の値は採用せず新しい値を計算し直した。

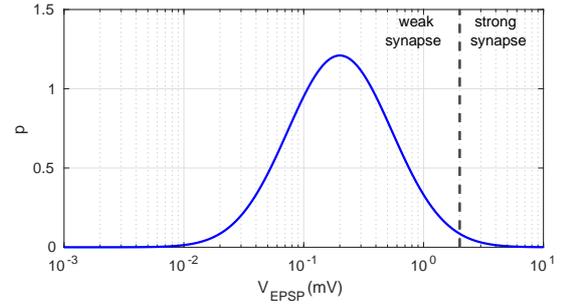


Fig. 1: Long-tailed synaptic weight distribution of EPSP (single logarithmic plot). This plot follows log-normal distribution Eq.(5) ($\sigma = 1.0, \mu = 1.0 + \log(0.2)$). In the figure, the weak synapse means that $V_{EPSP} \leq 2$ [mV], while the strong synapse mean that $V_{EPSP} > 2$ [mV]

EPSP の分布特徴をスパイクニューラルネットワークで利用するためには、この EPSP をシナプス荷重として再定義する必要がある。そこで、興奮性ニューロン同士の結合における膜電位は (6)(7) 式, シナプス荷重は (8) 式で再定義する。また、興奮性ニューロン同士の接続確率は Fig.1 の対数正規分布に従って決定される。

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\tau_m}(v - V_L) - g_E(v - V_E) \quad (6)$$

$$\frac{dg_E(t)}{dt} = -\frac{g_E(t)}{\tau_s} + G_E\delta(t) \quad (7)$$

$$G_E = V_{EPSP}/100 \quad (8)$$

(1) – (8) の方程式を用いてリザーバー層内のスパイクニューラルネットワークは機能する。スパイクニューラルネットワークを構成するニューロンのうち、興奮性-興奮性のシナプス荷重は (5) – (8) の計算結果によって求まるが、それ以外のシナプス荷重は予め設定する。興奮性-抑制性, 抑制性-興奮性, 抑制性-抑制性のシナプス荷重はそれぞれ、 18 [mV], 2 [mV], 2.5 [mV] である。また、スパイクニューラルネットワークを構成するニューロンの接続確率は 0.1 (興奮性-抑制性), 0.5 (抑制性-抑制性), 0.5 (抑制性-興奮性) でランダムに決定される。そして、ニューロン間のシナプス遅延は、興奮性-興奮性のとき $1-2$ [ms], その他の接続は $0-2$ [ms] の区間でランダムとする。

本研究では、 100 [s] の神経活動をシミュレーションした。神経活動を数値化するために、 10000 個の興奮性ニューロンを 100 個の興奮性ニューロン集団にラベル付けた。すなわち、興奮性ニューロン集団1つ1つには、興奮性ニューロンが 100 個ずつ含まれている。そして、興奮性ニューロン集団 100 個の平均発火率 r_X ($X = 1, 2, 3, \dots, 100$) [Hz] を求めた。 $r_X(t)$ は (9) 式で求められる。

$$r_X(t) = 10^3 \frac{S_X(t)}{100\Delta t}, \quad X = 1, 2, 3, \dots, 100 \quad (9)$$

S_X は 0.1 [ms] あたりの X 番目の興奮性ニューロン集団のスパイクの数を示す (spikes/ 0.1 [ms])。さらに、発火

率 $r_X(t)$ はガウシアンフィルタによって平滑化を行った。この平滑化処理で使用したウィンドウの長さは 10[ms] である。

LSM の入力信号の特徴の読み出しを行うリードアウト W_{out} は、リッジ回帰を使用して求めた。このリッジ回帰によって W_{out} が更新され最適化され LSM は訓練される。リッジ回帰は線形回帰モデルの 1 つで、(10) 式で求められる。

$$\mathbf{W}_{out} = ((\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \alpha \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{D})^T \quad (10)$$

\mathbf{X} は入力 $\mathbf{u}(t)$ が LSM に与えられたときの 100 個の興奮性ニューロン集団の 100 秒間の発火率の行列、 α は正則化パラメータ、 \mathbf{I} は単位行列、 \mathbf{D} は教師信号である。シミュレーションによって得られるデータには過渡期が含まれるため、実際に評価に用いたのは [500:99500] の 99000[ms] である。すなわち、 $\mathbf{X} = (\mathbf{r}_X(1), \dots, \mathbf{r}_X(99000))$, $\mathbf{D} = (\mathbf{y}_d(1), \dots, \mathbf{y}_d(99000))$ 。本研究では、 $\alpha = 0.1$ とした。そして、求めた \mathbf{W}_{out} は、(11) 式に示すようにリザーバーの出力 \mathbf{X} と掛け合わせることで LSM の出力 \mathbf{y} を得ることができる。

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{W}_{out} \mathbf{X} \quad (11)$$

3 評価

(11) 式で得られる出力 \mathbf{y} を用いて、LSM の学習性能を記憶容量タスクで評価する。記憶容量 (Memory Capacity) は (12) 式で求められる¹⁰⁾。

$$MC_\tau = \frac{\text{cov}^2(\mathbf{u}_\tau, \mathbf{y})}{\sigma^2(\mathbf{u}_\tau) \sigma^2(\mathbf{y})} \quad (12)$$

記憶容量タスクでは、一般に入力は一様乱数が用いられるため、本研究では、[0:0.01] の一様乱数を生成し入力信号とした。教師信号は $y_d(t) = u(t - \tau)$ で表され、各 τ の値に対して (11) 式によって出力 \mathbf{y} が得られる。ここで、(12) 式で示される記憶容量タスクは、入力信号 \mathbf{u}_τ と教師信号を用いて訓練された出力 \mathbf{y} の相関をみる。例えば、記憶容量が 1 の場合、LSM は訓練されることによって発火率データ (内部状態) から理想の出力に変換することができたということを意味する。また、 τ が大きくなったときにも記憶容量が 1 に近いということは、それだけ過去の情報に対しても LSM は訓練によって柔軟に対処でき理想の出力に変換できるということである。すなわち、過去の情報を保持できるということである。本研究では、 $1[\text{ms}] \leq \tau \leq 1000[\text{ms}]$ で記憶容量を求め評価した。

4 結果

Fig.2 に EPSP のロングテール性を考慮した LSM と考慮しない LSM の記憶容量タスクの結果を示す。一様乱数で生成される入力 I_{ex} は、試行のたびに毎回生成し直した。Fig.2 に示すように、EPSP のロングテール性を考慮した LSM は、考慮しない LSM に比べて $\tau < 100$ [ms] まで高い記憶容量を維持した。つまり、過去の情報が入力されたとき、EPSP のロングテール性を考慮した LSM は与えられた情報を再現できるリザーバー状態をもつことが示された。

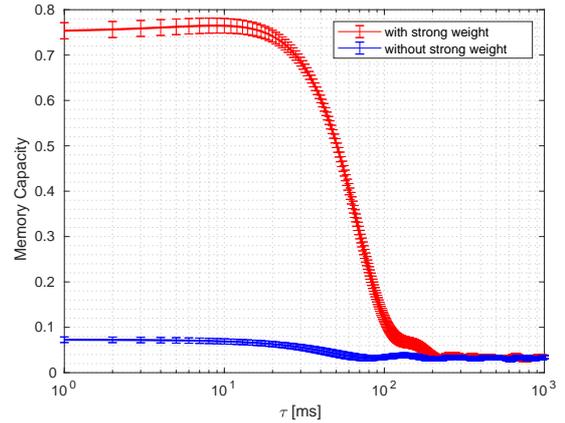


Fig. 2: Dependence of memory capacity on delay τ in the cases with and without strong synapse. The ten-trial-averaged memory capacity and standard deviation for each tau [ms] of LSM with strong weight and without strong weight (single logarithmic plot). The “with strong weight” means that taking both strong synapse and weak synapse in Fig.1 into consideration, while the “without strong weight” means that only taking weak synapse in Fig.1 into consideration. Input I_{ex} given input neurons was regenerated each trial. Here, spikes (5 [Hz]) according to Poisson process gave all reservoir neurons on regular interval in the case without strong synapses to arrange the spiking rate of neuron population with and without strong weight.

5 考察

本研究では、EPSP のロングテール性が大脳皮質の神経回路において自発的な発火活動を誘導し効率的な情報伝達に貢献しているという先行研究から、この性質は機械学習の性能を向上させることができると仮説を立てた。そこで、EPSP のロングテール性の機械学習における影響を評価するために LSM を構築し、記憶容量タスクを用いて性能を評価した。まず、LSM のリザーバー層には自発的な発火活動を生じさせる EPSP のロングテール性を考慮したスパイクニューラルネットワークを使用した。次に、LSM に対して一様乱数で生成した入力信号を与え、そのときの興奮性ニューロン集団 100 個の発火率をシミュレーションによって出力した。そして、この発火率を学習に用いて、LSM の出力を求めた。その結果 Fig.2 に示すように、LSM のリザーバー層に EPSP のロングテール性を取り入れることによって過去の情報を高い精度で再現できることが示された。

ここで、EPSP のロングテール性を考慮した LSM と考慮しない LSM の τ の増加に伴う記憶容量の違いについて考察する。 $\tau < 100$ [ms] においては、EPSP を考慮した LSM は、考慮しない LSM に比べて記憶容量タスクで大きな値をとった。これは、EPSP の分布に見られるロングテールな部分、すなわち、強シナプス結合の存在が大きく今回の結果に関与していると考えられる。EPSP のロングテール性というのは、大脳皮質の神経回路において自発的な発火活動や確率共鳴といった情報伝達において重要な役割を担う³⁾。これらの神経活

動が可能になるのは、EPSP の分布にみられるわずかな強シナプスがニューロン間の大きささまざまな神経経路に情報を伝達でき、再帰的なネットワークの生成ができるからである。一方、弱シナプスのみでは、外部からの入力を与えられたときにはスパイクを発生させることができるが、内部で生じるシナプス入力に対しては活動電位を生じることができない。それゆえ、再帰的なネットワークが生成できず、過去の情報を十分に保持することができない。EPSP のロングテール性を考慮した LSM が過去の情報を保持し再現できたことから、自発的な発火活動を生じさせる EPSP のロングテール性が決定論的なダイナミクスを生じさせることも確認できた⁶⁾。したがって、この EPSP のロングテール性を LSM に取り入れて、他の機械学習のタスクにおいても評価が可能であることが示唆された。

今後は、本研究で得られた EPSP のロングテール性を考慮した LSM の入出力の依存関係の結果から非線形時系列予測においても精度向上が見込めるかについて研究を進めたい。また、本研究ではシミュレーションによってニューロン集団の発火率を出力し、学習を行った。しかし、一般に LSM では発火率ではなくスパイク列、すなわちスパイクパターンを学習に用いることが多い。そのため、本研究で使用した LSM の学習対象をスパイクパターンにしたときに性能の違いが生じるかについても検証と評価を行いたい。

6 おわりに

本研究では、EPSP の分布にみられるロングテール性が LSM の性能にどのように影響するかを記憶容量タスクを用いて評価した。本研究の結果から、EPSP のロングテール性を考慮した LSM は過去の情報をより長い間保持できることが明らかになった。EPSP のロングテール性は、脳機能を支えるだけでなく機械学習に取り入れることで性能向上が見込めることが示唆された。

7 謝辞

本研究は、JSPS 基盤研究 (C) 科研費 22K12183(信川創) の助成を受けたものである。

参考文献

- 1) Olaf Sporns. *Networks of the Brain*. MIT press, 2016.
- 2) Steven L Bressler and Vinod Menon. Large-scale brain networks in cognition: emerging methods and principles. *Trends in cognitive sciences*, Vol. 14, No. 6, pp. 277–290, 2010.
- 3) Jun-nosuke Teramae, Yasuhiro Tsubo, and Tomoki Fukai. Optimal spike-based communication in excitable networks with strong-sparse and weak-dense links. *Scientific reports*, Vol. 2, No. 1, pp. 1–6, 2012.
- 4) Sandrine Lefort, Christian Tamm, J-C Floyd Sarria, and Carl CH Petersen. The excitatory neuronal network of the c2 barrel column in mouse primary somatosensory cortex. *Neuron*, Vol. 61, No. 2, pp. 301–316, 2009.
- 5) Naoki Hiratani, Jun-Nosuke Teramae, and Tomoki Fukai. Associative memory model with long-tail-distributed hebbian synaptic connections. *Frontiers in computational neuroscience*, Vol. 6, p. 102, 2013.

- 6) Sou Nobukawa, Nobuhiko Wagatsuma, and Haruhiko Nishimura. Deterministic characteristics of spontaneous activity detected by multi-fractal analysis in a spiking neural network with long-tailed distributions of synaptic weights. *Cognitive Neurodynamics*, Vol. 14, No. 6, pp. 829–836, 2020.
- 7) Herbert Jaeger. The “echo state” approach to analysing and training recurrent neural networks-with an erratum note. *Bonn, Germany: German National Research Center for Information Technology GMD Technical Report*, Vol. 148, No. 34, p. 13, 2001.
- 8) Wolfgang Maass, Thomas Natschläger, and Henry Markram. Real-time computing without stable states: A new framework for neural computation based on perturbations. *Neural computation*, Vol. 14, No. 11, pp. 2531–2560, 2002.
- 9) Mantas Lukoševičius and Herbert Jaeger. Reservoir computing approaches to recurrent neural network training. *Computer Science Review*, Vol. 3, No. 3, pp. 127–149, 2009.
- 10) Herbert Jaeger. *Tutorial on training recurrent neural networks, covering BPPT, RTRL, EKF and the “echo state network” approach*, Vol. 5. GMD-Forschungszentrum Informationstechnik Bonn, 2002.

複数の結合モジュールからなるスパイクングニューラルネットワークにおける long-tail 活動分布の評価

○渡邊陸斗 信川創 (千葉工業大学)

Evaluation of long-tail activity distribution in spiking neural networks consisting of multiple coupled modules

*R. Watanabe and S. Nobukawa (Chiba Institute of Technology)

Abstract— In recent years, attention has focused on the long-tail nature of EPSPs, which are found in various regions of the brain and are thought to cause many neural functional properties. In this study, we examined whether this long-tail nature of EPSPs is also found in spiking neural networks with embedded associative memory models. We constructed a spiking neural network with a lognormal distribution of EPSPs and embedded an associative memory model. We also tested whether long-tailedness could be obtained from the activation state of the embedded patterns. As a result, it was confirmed that long-tail nature could be obtained from the occupancy time of the embedded patterns. The long-tail property obtained from the occupancy time contributes to the emergence of long-tail property at the functional level of memory at the microcircuit level.

Key Words: Spiking neural network , Associative memory model , Long-tail characteristics

1 はじめに

過去数十年に渡り、ニューロイメージングの研究は脳内の構造的・解剖学的なネットワーク特性や機能的ネットワークとの関連性、および神経活動のダイナミクスについて明らかにされてきた。これらの研究はマイクロサーキットレベル、脳内領域レベル、全脳ネットワークレベルなど複数の時空間スケールで進められている¹⁾²⁾³⁾⁴⁾⁵⁾⁶⁾⁷⁾⁸⁾⁹⁾。

大きな時空間スケールで広く観察される構造的かつ機能的な神経特性の一つとして long-tailed 分布がある⁹⁾¹⁰⁾¹¹⁾。特に long-tailed 分布は興奮性シナプス後電位 (EPSP)¹²⁾¹³⁾ で見られており、近年の調査結果によると long-tailed 特性はモジュール構造内の部分的に独立した神経ダイナミクスからなる複数のネットワーク組織によって生じていることが明らかにされている⁸⁾。また、速い時間スケール ($10^{-3} \sim 10^{-1}$ s) でのスパイク特性や遅い時間スケール ($10^1 \sim 10^3$ s) での長期的な時間相関は時空間 long-tailed 分布に従う¹¹⁾¹⁴⁾¹⁵⁾¹⁶⁾。long-tailed 特性は高次の認知プロセスにおいても観測することができ、認知交代などの二つの解釈ができる曖昧な図を提示されたとき片側の刺激解釈を伴う知覚の優位期間は heavy-tailed ガンマ分布に従うことが明らかにされている¹⁷⁾¹⁸⁾¹⁹⁾²⁰⁾。

大脳皮質ネットワークのマイクロサーキットにおいて、シナプス結合の EPSP の分布は対数正規分布であることが明らかにされている。ほとんどのシナプス結合の EPSP はサブミリボルト (mV) を示すのに対し、ごく少数のシナプス結合は約 (1~10mV) を示す¹²⁾¹³⁾。Teramae らの研究によると EPSP の対数正規分布は不規則で発火率の低い (≤ 1.0 Hz) 自発的なスパイク活動を引き起こし、外部刺激がなくても持続することが分かっている²¹⁾²²⁾²³⁾。また、EPSP の対数正規分布を持つネットワークでは弱いシナプス結合を介したスパイクと強いシナプス結合を介したスパイクに分かれており、確率共鳴現象のメカニズムにおいてそれぞれノイズとシグナルの役割を果たしている²³⁾。小さなシナプ

スを介して十分な量のスパイクを発生させることにより膜電位が静止状態にあるダウン状態 (≈ -70 mV) からアップ状態 (≈ -60 mV) になる。アップ状態では強いシナプスからのスパイク一つでもスパイクが出現する²³⁾。したがって、弱いシナプスによって結合されたニューロンペアの大部分は同期しないが、強いシナプスで結合されたニューロンペアのごく一部ではスパイクが同期しているということである。これらの性質は生理学的知見と非常に一致しており、モデリングアプローチでは自発的な活動がおこるメカニズムとして対数正規 EPSP 分布に着目したものが最も高い生理学的有効性を示している²⁴⁾²⁵⁾²⁶⁾。

そのうえ、対数正規 EPSP 分布は多くの神経活動と機能を生み出すことが明らかにされている²⁷⁾²⁸⁾²⁹⁾³⁰⁾。EPSP の対数正規分布は神経活動の long-tailed 特性として、同期スパイクの大きさがべき乗則に従う神経雪崩を誘発し、海馬の記憶定着を実現するためのスパイクパターンを破壊する²⁸⁾²⁹⁾。また、連想記憶機能を持つスパイクングニューラルネットワークにおいて、EPSP の対数正規分布は記憶能力を向上させることが報告されている²⁷⁾。

この long-tailed な神経活動のメカニズムを解明するために Nobukawa らは対数正規分布に従う EPSP を備えた2つの結合モジュールからなるスパイクングニューラルネットワークを構築し、結合モジュールのスイッチング周期が long-tailed 分布であったことを明らかにした。さらに、強い EPSP 接続の有無が long-tailed 分布の出現に重要であると報告している³¹⁾。しかし、結合モジュールが複数になった時に long-tailed 特性が同じ様に出現するのかや記憶能力が向上するのかなどの研究はまだされていない。

したがって、今回の研究では EPSP の対数正規分布を備えた3つの結合モジュールのスパイクングニューラルネットワークを構成するとともに連想記憶モデルを埋め込んだ時の記憶能力の比較を行い、検討考察する。

2 手法

2.1 スパイキングニューラルネットワーク

本研究では、Fig. 1 のように興奮性・抑制性ニューロン集団で構成された3結合モジュールのスパイキングニューラルネットワークを構築した。モジュール内の興奮性から興奮性へのシナプス荷重はEPSPの対数正規分布に従っている。モジュール外への接続は興奮性から興奮性、興奮性から抑制性となっており3つのモジュール全てに接続されている。

先行研究で2結合モジュールのスパイキングニューラルネットワークを構築しているNobukawaらはTeramaraのEPSPの対数正規分布を用いて自発的活動を生み出すスパイキングニューラルネットワークを使用している³¹⁾²³⁾。本研究でも同様のスパイキングニューラルネットワークを使用して構築する。ネットワークの各ニューロンの膜電位 $v(t)$ は漏れのある積分発火モデルに基づいて与える。

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\tau_m}(v - V_L) - g_E(v - V_E) - g_I(v - V_I) + I_{ex} \quad (1)$$

$$\text{if } v \geq V_{thr} [\text{mV}], \text{ then } v(t) \rightarrow V_r \quad (2)$$

ここでの τ_m , V_E , V_I , V_L は膜崩壊定数であり、それぞれ興奮性シナプス電流、抑制性シナプス電流、漏れ電流を表わしている。また、 I_{ex} は外部入力であり $21 \cdot \delta(t - t_{ex})[\text{mV}]$ によって与えられる。この式で入力時間の t_{ex} はスパイク活動を生み出すきっかけのために与えられる $\Lambda[\text{Hz}]$ のポアソン過程によって決まる。また、興奮性・抑制性のシナプスコンダクタンス $g_E(t)$, $g_I(t)[\text{ms}^{-1}]$ は(3)式で与えられる。

$$\frac{dg_X}{dt} = -\frac{g_X}{\tau_s} \sum_j G_{Xj} \sum_{s_j} \delta(t - s_j - d_j), \quad X = E, I \quad (3)$$

ここでの τ_s は興奮性と抑制性のシナプスコンダクタンスの減衰定数である。 S_j , d_j , G_{Ej} , G_{Ij} はそれぞれ j 番目からの入力シナプスからのスパイク時間、シナプス遅延、興奮性および抑制性シナプスの重みを表わしている。

ニューロンのパラメータの設定は以下のようにした。 $V_L = -70[\text{mV}]$, $V_E = 0[\text{mV}]$, $V_I = -80[\text{mV}]$, $V_{thr} = -50[\text{mV}]$, $V_r = -60[\text{mV}]$, $\tau_m = 20[\text{ms}]$ (興奮性ニューロン), $\tau_m = 10[\text{ms}]$ (抑制性ニューロン), $\tau_s = 2[\text{ms}]$ ²³⁾。(3)式では $\delta t = 0.1[\text{ms}]$ のオイラー法を用いている。また、本研究のシミュレーションはBrian2を用いて行っている(<https://brian2.readthedocs.io/en/stable/index.html>)³³⁾。

モジュール内接続についてのシナプス遅れは0から2[ms]の間で一様乱数によってに設定される。モジュール内の興奮性から抑制性、抑制性から抑制性、抑制性から興奮性のシナプス接続荷重はそれぞれ0.03, 0.0025, 0.003で設定した。また、モジュールの興奮性ニューロンの数 $N_E = 7500$, 抑制性ニューロンの数 $N_I = 1500$ である。モジュール内接続についての接続確率は興奮性からの接続、抑制性からの接続それぞれ0.1, 0.5で設定した。

モジュール外接続の時、興奮性から興奮性、興奮性から抑制性へのシナプス荷重はそれぞれ $G_E = 0.00005$, 0.041であり、接続確率は0.01で設定した。シナプス遅れは一様乱数により、興奮性から興奮性は1から3[ms], 興奮性から抑制性は0から2[ms]の間で値が決められる。

シナプスからの興奮性の入力により静止状態から膜電位が急上昇するEPSPの振幅、 V_{EPSP} は(4)式の対数正規分布の式によって生成される²³⁾。

$$p(x) = \frac{\exp[-(\log x - \mu)^2/2\sigma^2]}{\sqrt{2\pi\sigma x}} \quad (4)$$

ここでは $\sigma=1.0$, 分布の最頻値を $\mu - \sigma^2 = \log 0.2$ で設定した。14[mV]を超える V_{EPSP} の値を無くすために14[mV]を超えた場合は分布から新しい値を取得する。EPSPの分布はモジュール内の興奮性から興奮性へのシナプス結合にのみ用いた。また、 V_{EPSP} をシナプス荷重 G_E に変換するために(5)式を用いた²³⁾¹³⁾。

$$G_E = V_{EPSP}/100 \quad (5)$$

2.2 連想記憶モデル

本研究では長期的な記憶保持を可能にするために構築したネットワークに連想記憶モデルを埋め込んだ。Kanamaruらが提案したヘブ則と連想記憶のメカニズムは複数のモジュールからなるネットワークにいくつかのパターンを記憶させることを可能にした³²⁾。本研究でもKanamaruらが提案したヘブ則と連想記憶を採用した。シナプス結合荷重の強さは(6), (7)式で表わされる。

$$\epsilon_{ij}^E = \begin{cases} \epsilon_{EE} K_{ij} & K_{ij} > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

$$\epsilon_{ij}^I = \epsilon_{IE} |K_{ij}| \quad (7)$$

$$K_{ij} = \frac{1}{Ma(1-a)} \sum_{\mu=1}^P \eta_i^\mu (\eta_j^\mu - a) \quad (8)$$

(8)式での η_i^μ は{0,1}で構成されており、 i 番目のモジュールに格納されている μ 番目のパターンの値を表わしている。また、 M はモジュールの数、 P はパターン数、 a は η に格納されている1の割合である。 ϵ_{EE} , ϵ_{IE} はそれぞれ、モジュール外に向けた興奮性、抑制性へのシナプス結合強度である。今回の研究では $M=3$, $P=2$, $a=0.667$ で設定した。本研究では(9)式のパターンを埋め込んでおり、行列内の列が各モジュールに対応している。特に(9)式の0は各モジュールの非活性状態、1は活性状態を表わしている。本研究ではシミュレーション結果から各パターンの占有時間をヒストグラムとして表わす。今回、埋め込んだパターンは(9)式の[0, 1, 1]と[1, 1, 0]の2パターンであるが、占有時間の定義として発火レートが0.08[Hz]以上であり、なおかつ埋め込んだパターンのどちらか一方が見られている間の時間とする。

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

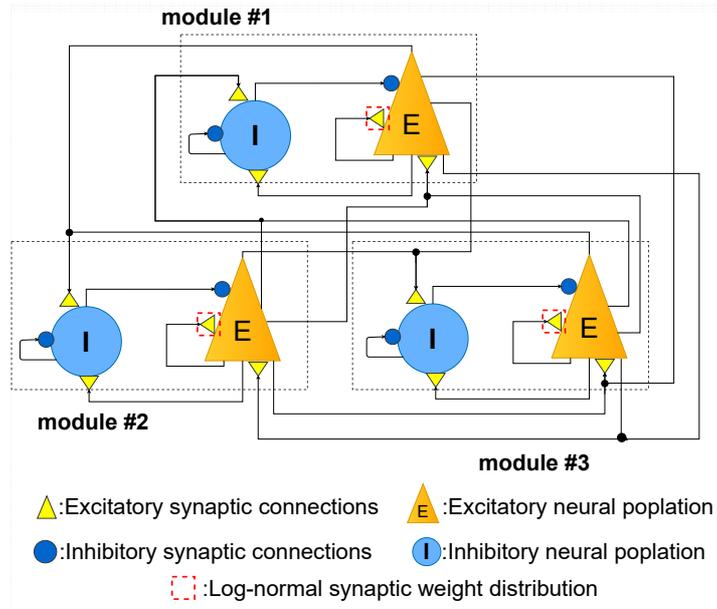


Fig. 1: Spiking neural network of 3 coupled modules constructed. The combined loads enclosed by the red dotted line follow the lognormal distribution of the EPSP

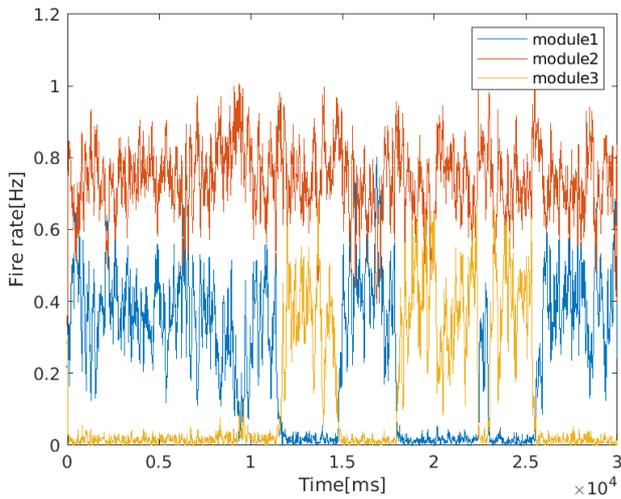


Fig. 2: Firing rate of the excitatory neuron population in each module at $\Lambda = 1.0$ [Hz]. Here, the embedded patterns $[1,1,0]$ and $[0,1,1]$ are alternately recalled due to the switching of activation between modules.

3 結果

Fig. 2は $\Lambda = 1.0$ [Hz] のポアソン入力を与えた興奮性ニューロン集団の発火の時系列である。今回埋め込んだパターンでは#モジュール 2 に他のモジュールより強いシナプス結合荷重を与えている。そのため、Fig. 2を見ると#モジュール 2 は 0.8 [Hz] 程度で常に活性化している。Fig. 2では $0 < t < 1.2$ の時間で#モジュール 1 と 2 が活性化している。これは埋め込んだパターンの $[1,1,0]$ が想起されているということである。また、 $1.2 < t < 1.5$ の時間で#モジュール 2 と 3 が活性化していることから埋め込んだパターンの $[0,1,1]$ が想起されていることになる。

Fig. 3 はシミュレーション時間を 3000 [s] にしたとき

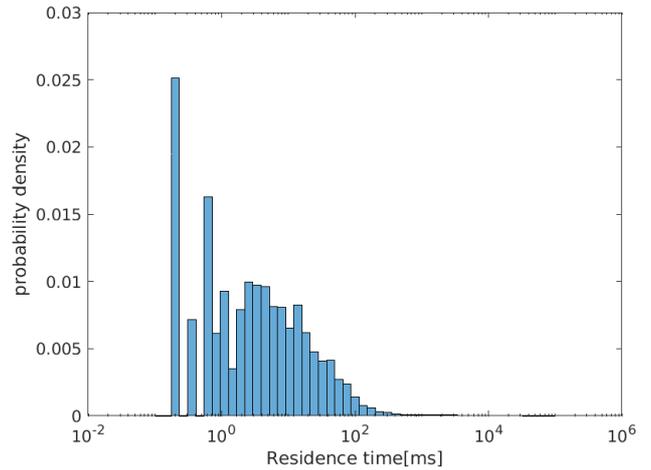


Fig. 3: Probability density of pattern occupancy time

の各パターンの確率密度のヒストグラムである。Fig. 3を見ると占有時間が 0.1 [ms] とき確率密度が最大 0.025 になっている。また、占有時間が長くなると想起する確率が低くなるもののパターンの想起が発生していることが見て取れる。このヒストグラムは long-tailed 分布になっていることから複雑化したスパイクニューラルネットワークでも long-tailed 性が得られていることが分かる。

4 おわりに

本研究では EPSP の対数正規分布をもつ 3 結合モジュールのスパイクニューラルネットワークに連想記憶モデルを埋め込んだ際の long-tailed 性の検証及び埋め込んだパターンが出現しているかを確かめた。結果として埋め込んだ 2 つのパターンがそれぞれ活性化しており、パターンの占有時間から導き出した確率密度のヒストグラムは long-tailed 性であることが確認できた。これはマイクロサーキットレベルで記憶という機

能的レベルの long-tailed 性の創発に寄与していると考ええる。しかし、スパイクニューラルネットワークにおいて本研究で見られた発火レートは自発的発火活動は見られなかった。原因としてモジュール内とモジュール外へ向けたシナプス結合荷重のパラメータの調整がうまくいっていないからだと考え。特にモジュール内の抑制性から興奮性への結合荷重が強すぎるのではないかと考える。今後の展望としてはシナプス結合荷重のパラメータを調整することで自発的発火活動を起こす。また、モジュールをさらに増やすことで埋め込めるパターン数の増大を目指していく予定である。

謝辞

本研究は、JSPS 基盤研究 (C) 科研費 22K12183(信川創) の助成を受けたものである。

参考文献

- Betzell RF, Bassett DS. Multi-scale brain networks. *NeuroImage* 160 (2017) 73–83.
- Yasumatsu N, Matsuzaki M, Miyazaki T, Noguchi J, Kasai H. Principles of long-term dynamics of dendritic spines. *Journal of Neuroscience* 28 (2008) 13592–13608.
- van den Heuvel M, Mandl R, Luijckes J, Pol HH. Microstructural organization of the cingulum tract and the level of default mode functional connectivity. *Journal of Neuroscience* 28 (2008) 10844–10851.
- Hagmann P, Cammoun L, Gigandet X, Meuli R, Honey CJ, Wedeen VJ, et al. Mapping the structural core of human cerebral cortex. *PLoS Biol* 6 (2008) e159.
- Helmstaedter M, Briggman KL, Turaga SC, Jain V, Seung HS, Denk W. Connectomic reconstruction of the inner plexiform layer in the mouse retina. *Nature* 500 (2013) 168–174.
- Goni J, Van Den Heuvel MP, Avena-Koenigsberger A, De Mendizabal NV, Betzel RF, Griffa A, et al. Resting-brain functional connectivity predicted by analytic measures of network communication. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111 (2014) 833–838.
- Barral J, Reyes AD. Synaptic scaling rule preserves excitatory–inhibitory balance and salient neuronal network dynamics. *Nature neuroscience* 19 (2016) 1690–1696.
- Zhigalov A, Arnulfo G, Nobili L, Palva S, Palva JM. Modular co-organization of functional connectivity and scale-free dynamics in the human brain. *Network Neuroscience* 1 (2017) 143–165.
- Buzsaki G, Mizuseki K. The log-dynamic brain: how skewed distributions affect network operations. *Nature Reviews Neuroscience* 15 (2014) 264–278.
- Bullmore E, Sporns O. Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems. *Nature Reviews Neuroscience* 10 (2009) 186–198.
- Mizuseki K, Buzsaki G. Preconfigured, skewed distribution of firing rates in the hippocampus and entorhinal cortex. *Cell reports* 4 (2013) 1010–1021.
- Song S, Sjöström PJ, Reigl M, Nelson S, Chklovskii DB. Highly nonrandom features of synaptic connectivity in local cortical circuits. *PLoS biology* 3 (2005) e68.
- Lefort S, Tomm C, Sarria JCF, Petersen CC. The excitatory neuronal network of the C2 barrel column in mouse primary somatosensory cortex. *Neuron* 61 (2009) 301–316.
- Shinomoto S, Miura K, Koyama S. A measure of local variation of inter-spike intervals. *Biosystems* 79 (2005) 67–72.
- Mizuseki K, Buzsaki G. Theta oscillations decrease spike synchrony in the hippocampus and entorhinal cortex. *Phil. Trans. R. Soc. B* 369 (2014) 20120530.
- Beggs JM, Plenz D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. *Journal of neuroscience* 23 (2003) 11167–11177.
- Levelt WJ. Note on the distribution of dominance times in binocular rivalry. *British Journal of Psychology* 58 (1967) 143–145.
- Borsellino A, De Marco A, Allazetta A, Rinesi S, Bartolini B. Reversal time distribution in the perception of visual ambiguous stimuli. *Kybernetik* 10 (1972) 139–144.
- Walker P. Stochastic properties of binocular rivalry alternations. *Perception & psychophysics* 18 (1975) 467–473.
- Lehky SR. Binocular rivalry is not chaotic. *Proc. R. Soc. Lond. B* 259 (1995) 71–76.
- McCormick DA. Spontaneous activity: signal or noise? *Science* 285 (1999) 541–543.
- Fiser J, Chiu C, Weliky M. Small modulation of ongoing cortical dynamics by sensory input during natural vision. *Nature* 431 (2004) 573–578.
- Teramae Jn, Tsubo Y, Fukai T. Optimal spike-based communication in excitable networks with strong sparse and weak-dense links. *Scientific Reports* 2 (2012).
- Softky WR, Koch C. The highly irregular firing of cortical cells is inconsistent with temporal integration of random EPSPs. *Journal of Neuroscience* 13 (1993) 334–350.
- Hromadka T, DeWeese MR, Zador AM. Sparse representation of sounds in the unanesthetized auditory cortex. *PLoS biology* 6 (2008) e16.
- Sakata S, Harris KD. Laminar structure of spontaneous and sensory-evoked population activity in auditory cortex. *Neuron* 64 (2009) 404–418.
- Hiratani N, Teramae JN, Fukai T. Associative memory model with long-tail-distributed hebbian synaptic connections. *Frontiers in computational neuroscience* 6 (2013) 102.
- Samura T, Ikegaya Y, Sato YD. A neural network model of reliably optimized spike transmission. *Cognitive neurodynamics* 9 (2015) 265–277.
- Omura Y, Carvalho MM, Inokuchi K, Fukai T. A log-normal recurrent network model for burst generation during hippocampal sharp waves. *Journal of Neuroscience* 35 (2015) 14585–14601.
- Nobukawa S, Wagatsuma N, Nishimura H. Deterministic characteristics of spontaneous activity detected by multi-fractal analysis in a spiking neural network with long-tailed distributions of synaptic weights. *Cognitive Neurodynamics* 14 (2020) 829–836.
- Nobukawa S, Nishimura H, Wagatsuma N, Ando S, Yamanishi T. Long-tailed characteristic of spiking pattern alternation induced by log-normal excitatory synaptic distribution. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 32 (2021a) 3525–3537.
- Kanamaru T. Chaotic Pattern Alternations Can Reproduce Properties Of Dominance Durations In Multistable Perception. *Neural Computation*, vol. 29, issue 6 (2017) pp.1696–1720.
- D. F. Goodman, M. Stimberg, P. Yger and R. Brette, "Brian 2: Neural simulations on a variety of computational hardware", *BMC Neurosci.*, vol. 15, no. 1, pp. P199, 2014.

脳波の瞬時位相分布に基づいた micro-state による 運転時の脳機能解析

○大津 圭汰 信川 創 (千葉工業大学)
我妻 伸彦 (東邦大学)
稲垣 圭一郎 (中部大学)

Analysis of brain function during driving by micro-state based on instantaneous phase distribution of EEG

*K. Otsu, S. Nobukawa(Chiba Institute of Technology),
N. Wagatsuma (Toho University) and K. Inagaki(Chubu University)

Abstract— There is a causal relationship between driver proficiency and the frequency of visual-function-related traffic collisions. In recent years, several studies have been conducted on the relationship between driving skill and brain activity. Examples include the relationship between driving skill and the response properties of P300 event-related potentials related to visual attention and functional connectivity. Therefore, we focused on how driver proficiency affects brain activity during driving. In this study, we analyzed the brain during driving from an "emergence" perspective, using microstates based on the instantaneous phase distribution of EEG. The results showed that the expert group showed more state transitions from the frontal to the occipital lobes in the delta band than the beginner group in a highway driving scene.

Key Words: driving, EEG, microstates

1 はじめに

交通事故は世界的に深刻な社会問題となっている¹⁾。ここ数年事故の防止を目的として、カメラやセンサーなどを用いた自動ブレーキなどを中心に、先進運転支援システム(ADAS)の技術が飛躍的に発展・普及してきた²⁾。その結果、交通事故の発生件数は徐々に減少してきている³⁾。

近年は脳波を用いたアプローチにも注目が集まっており、運転行動に着目した脳波計測を伴う研究は池西らなどの運転操作に関係するもの^{4, 5, 6)}、運転時の外乱や疲労の影響を評価したもの^{7, 8, 9)}、感情の状態を評価したものなどがある¹⁰⁾。なかでも盛んに行われている研究は、脳活動から精神的疲労や眠気を推定し交通事故を防止することを目指したものであり¹¹⁾、そのような多くの研究から、局所的脳領野内のdelta帯からbeta帯までのパワースペクトルが、精神的疲労や眠気を反映していることが明らかになっている^{12, 13)}。また最近の研究では、局所的脳領野内に加えて機能的結合の強さや、トポロジー的特徴などの機能的全脳ネットワークの特徴が、運転中の精神的疲労や眠気を強く反映することが報告されている¹⁴⁾。

さらに、運転の熟練度と脳活動の関連性の解明は、ADASの今後の発展や交通安全上の問題を解決するのに重要である^{15, 16)}。熟練度に関連する報告として、Underwoodらによると、不注意などの視覚機能に関連する交通事故は、運転初心者と比較して、運転熟練者の方が発生頻度が少ないという報告がある¹⁷⁾。稲垣らは、Underwoodらを含めた複数の報告を基に、運転の熟練度と視覚的注意に関連する脳機能に注目し、視覚的注意と強い相関関係にある、P300事象関連電位の応答特性の変化を検証した。その結果、P300の潜伏時間が運転熟練者において早くなる事が確認された¹⁸⁾。運転の熟練度に関する神経活動の特徴として、alpha帯のパワーと

正の相関、beta帯のパワーと負の相関があることをLinらが報告している¹⁵⁾。稲垣と丸野らの研究では運転経験の多い被験者は、運転経験の少ない被験者に比べてこの傾向が強化されることを示した^{16, 19)}。また、信川らの研究では運転経験の多い被験者は、ガンマ帯にて機能的結合性の強化が確認されたという報告がある。特に後頭部での機能的結合性の強化が確認されたことから、運転経験によって視覚刺激の神経回路を強化する可能性があると述べている²⁰⁾。運転中の神経活動の変化は知覚、注意、運動機能などの脳機能の統合が含まれる。この神経活動の変化は、脳活動の複雑な相互作用によって引き起こされる可能性がある。

このような複雑な脳活動の解析に関連する、瞬時周波数に着目したmicro-stateを用いた方法が、信川らによって提案された²²⁾。この方法にて、信川らはアルツハイマー病患者群と健常者群に対する解析を行い、患者群にて健常者群とは異なる特有の脳の状態遷移を確認できた、という実績をあげている²²⁾。したがって、この方法を用いることで、従来利用された位相同期指標に基づくPhase Lag Index(PLI)^{20, 21)}と比較しても、脳全体の瞬間的な周波数ダイナミクスを、領野間で分解することなく用いることで、複数の構成要素の相互作用が新たな機能を生み出す、「創発」の観点から脳全体の神経相互作用を捉えられるという仮説を立てた。本研究では、運転初心者、及び運転熟練者の2群に分けた被験者にて、脳全体の瞬時周波数に基づくmicro-stateを用いて、高速道路運転シーンでの脳の状態遷移を評価することで、この仮説を検証する。

2 手法

2.1 被験者

本研究は中部大学工学部ロボット理工学科において20~23歳の健常者15名を対象に行われた。対象者は、健康かつ正常な視力を持つ人かメガネやコンタクトレ

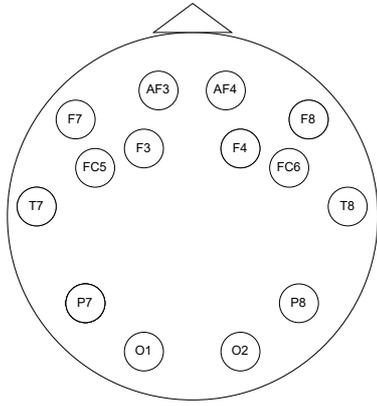


Fig. 1: Location of electrodes used for measurements based on the international 10-20 method.

ンズで正常な視力に矯正されている人である。また被験者は全員が運転免許証を持っていた。被験者は運転の頻度に基づいて2週間に1回以下を運転非熟練者群(以下 beginners 群と呼ぶ), 2週間に1回以上を運転熟練者群(以下 experts 群と呼ぶ)と定義した。その結果 beginners 群は8人, experts 群は7人であった。これらのすべての実験方法はヘルシンキ宣言に基づいて行われ中部大学の研究倫理委員会承認されている。

2.2 脳波の測定方法

脳波の測定は, 60cm 間隔で設置されたモニター (1920 × 1080 ピクセル) に向かって座り, ビデオカメラで撮影した高速道路での運転シーンを2~3分間視聴した。脳波の計測には Emotive EPOC+ を使用した。電極の配置は Fig. 1 の通り国際 10-20 法に基づき配置した。脳波は AF3, AF4, F3, F4, F7, F8, FC5, FC6, P8, P7, T7, T8, O1, O2 の14電極にてサンプリング周波数 128Hz で計測した。

2.3 瞬間周波数分布に基づく脳の動的状態の推定法

本研究では Fig. 2 の通り, 脳波信号の瞬間周波数ダイナミクスを利用して, 脳活動の状態を定義した。まず, 14電極分の脳波データの時系列を周波数範囲 [1:5]Hz (デルタ帯) でバンドパスフィルタにかけた。これは稲垣らによる, 交通シーンの知覚中の P300 事象関連電位に対する運転経験の影響を確認する際に用いられた周波数帯域である¹⁸⁾。次に Hilbert 変換により, 脳波データの瞬間周波数 $IF(t)$ ($-\infty \leq IF(t) \leq +\infty$) を推定した。この瞬間周波数には, 位相スリップと呼ばれる瞬間周波数範囲である 1-5[Hz] から著しくずれた位相ノイズが含まれている。そこで, 瞬間周波数 IF にメディアンフィルタ処理を適用した。次に, 瞬間周波数 $IF_i(t)$ (i : 電極位置) に基づく状態推定処理において, $IF_i(t)$ は全電極間の平均瞬間周波数から以下のように変換する:

$$dIF_i(t) = IF_i(t) - \overline{IF}(t) \quad (1)$$

ここで, $\overline{IF}(t)$ は全電極の平均化された $IF_i(t)$ を示している。また, 全電極間の $dIF_i(t)$ の標準偏差は, Zスコアにより 1.0 に正規化した。そして, beginners 群と experts 群の $dIF_i(t)$ の時系列を, k-means アルゴリズムを用いて k 個の状態にグループ分けした。各グループ (クラスター) は $dIF_i(t)$ の14個の値に基づいて動的な状態に対応する。本研究ではクラスターサイズ $k = 3$ に設定した。本手法では, このような動的な状態遷移は, 脳領域ごとの相互作用を分離することなく脳ネットワーク全体にお

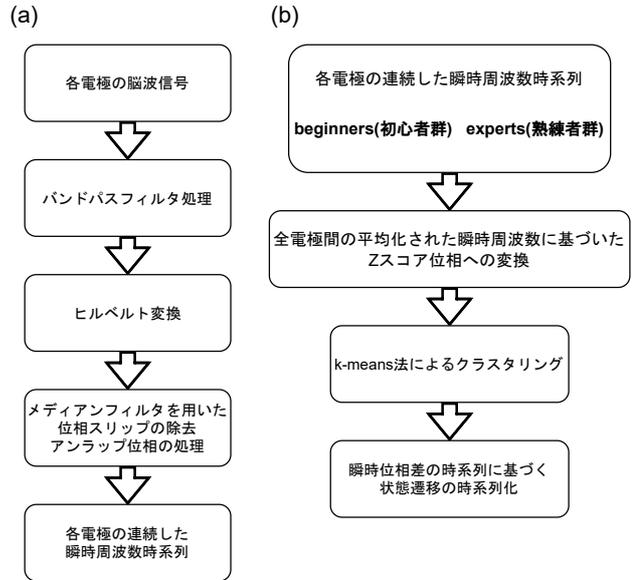


Fig. 2: (a) Estimation process for continuous instantaneous frequency time-series of electroencephalography (EEG) signals. (b) Estimation process for state transition time-series based on instantaneous phase time-series of EEG signals.

ける, 機能的結合性 (FC) の瞬間的な強さの変動によって定義される動的機能的結合性 (dFC) を反映していると仮定する²²⁾。

2.4 統計解析

$dIF_i(t)$ に基づく状態遷移の動的特性を評価するために, 我々は時刻 t [s] から $t + \Delta t$ [s] までの k 個の状態間の遷移確率を評価した。ここで Δt はサンプリング周波数 128Hz より, $\Delta t = 0.0078$ [s] に対応する。beginners 群と experts 群の間のこの遷移確率の差を評価するために, t -検定を用いた。本研究では p 値が 0.05 と 0.01 未満を統計的に有意とみなした。

3 結果

beginners 群と experts 群の被験者における, 高速道路における運転シーンを視聴した際の各状態 (#1, #2, #3) の持続時間における平均 $dIF_i(t)$ を Fig. 3 に示す。両群共に, 前頭先行相, 後頭先行相がそれぞれ #3, #1 であることが確認された。さらに, これらの遷移確率を #1, #2, #3 の状態間で評価した。

Fig. 4 は, beginners 群と experts 群の状態遷移確率の平均値と, 状態遷移確率の t 値を示したものである。その結果, 状態 #3 から #1 の experts 群における確率は, beginners 群に比べて大きくなっており, さらに状態 #3 から #3 の状態遷移が experts 群にて beginners 群より有意に小さくなっている。

4 考察と結論

本研究では, 運転熟練度による運転時の脳全体の神経相互作用を検証するために, beginners 群と experts 群の脳全体の瞬間的な周波数分布に基づいて動的状態を推定する手法を利用した。この手法を適用した結果, experts 群では beginners 群と比較して前頭部先行相の状態を維持するのがより困難であることが確認できた。また, experts 群では beginners 群と比較して, 前頭部先行相から後頭部先行相への状態遷移が多く行われている

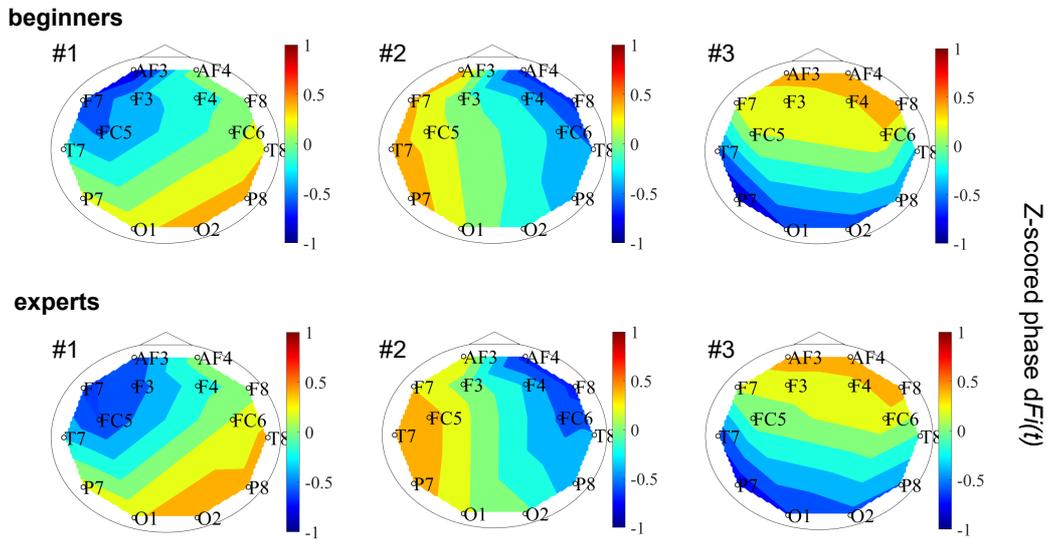
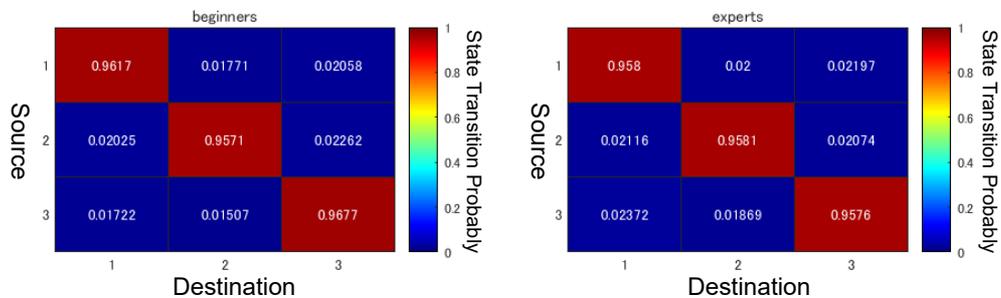


Fig. 3: Mean values of Z-scored phase $d\theta_i(t)$ among subjects in beginners driver (upper part) and experts driver (lower part) groups in duration for each state (#1, #2, and #3).

(a)



(b)

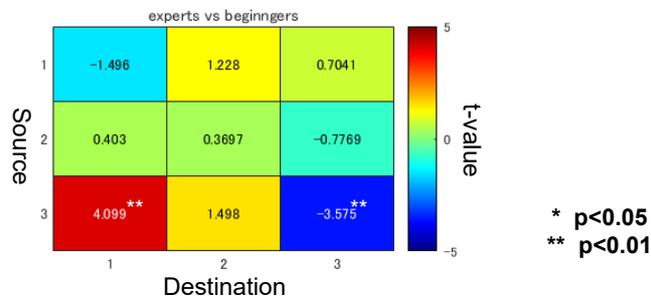


Fig. 4: Mean value of state transition probabilities between driving unskilled (beginners) and driving skilled (experts). (b) t-value of the state transition probability between the beginners and experts groups. a positive (negative) t-value means a higher (lower) probability of experts compared to beginners.

事が確認できた。

我々はこのような状態遷移の変化に関して、能動的な注意過程である、視覚性トップダウン型注意²³⁾と因果関係があるのではと考えた。Lingらの研究によると、視覚性トップダウン型注意に関するテストにて、シータからアルファ(4-24Hz)の範囲で、前頭部のP300事象関連電位のパワーが有意に増加したという報告がある²⁴⁾。これより前頭部での脳活動は視覚性トップダウン型注意と関連があると考えた。しかし、Lingらの報告にはデルタ帯(0.5-4Hz)が含まれていない。だが、デルタ、シータ、アルファ成分は、P300事象関連電位を誘発する要因に敏感であるという報告があり²⁵⁾、稲垣らによる研究

においても、運転熟練者においてデルタ帯(1-5Hz)にてP300の潜伏時間が早くなるという結果が確認されている¹⁸⁾。それゆえ前頭部での視覚性トップダウン型注意とデルタ帯での活動には因果関係がある可能性がある。我々はこれらから experts 群は beginners 群と比較して、視覚性トップダウン型注意に関わる脳機能ネットワークに変化が生じた可能性があると考えた。

本研究で用いた瞬時周波数に着目した micro-state による解析は、脳領域ごとの相互作用を分解することなく、運転熟練度と運転時の脳全体の神経相互作用の関連性を検証出来たと考える。今後の課題として、本手法を用いて高速道路のみならず、より多様な走行シーンでの解

析を行い、それらの結果も踏まえた上で、今回の結果に関してもさらなる考察が必要であると考える。

謝辞

本研究は、JSPS 基盤研究 (C) 科研費 22K12138 の助成を受けたものである。

参考文献

- 1) Sauerzapf, V.A. Road Traffic Crash Fatalities: An Examination of National Fatality Rates and Factors Associated with the Variation in Fatality Rates between Nations with Reference to the World Health Organization Decade of Action for Road Safety 2011–2020, Ph.D.thesis, Thesis, University of East Anglia, Norwich(2012)
- 2) 河喜多心哉：先進運転支援システムの開発動向と実装課題, エレクトロニクス実装学会誌, **23 巻** 3 号, 209/211(2020)
- 3) J.N.P. Agency, The Occurrence of Traffic Accidents and the Traffic Violation Control in 2017, Japanese National Police Agency, Tokyo Japan(2017)
- 4) 池西俊仁, 鎌田崇義, 永井正夫：PARAFAC によるレーンチェンジ時の脳波分析を用いた認知・判断状態の検出(機械力学, 計測, 自動制御), 日本機械学会論文集 C 編, **76 巻** 772 号, 3461/3469(2010)
- 5) 池西俊仁, 鎌田崇義：脳内電流源推定手法を用いた前方車両に対するドライバの操舵意図推定, 日本機械学会論文集, **81 巻** 823 号, 14-00390/14-00390(2015)
- 6) 池西俊仁, 鎌田崇義：脳波を用いた前方車両追従時におけるドライバの加減速意図の推定手法の検討, 自動車技術会論文集, **48 巻** 5 号, 1127/1134(2017)
- 7) Lin, Chin-Teng, et al. “EEG-based brain dynamics of driving distraction.” The 2011 International Joint Conference on Neural Networks. IEEE(2011)
- 8) Lin, Chin-Teng, et al. “Spatial and temporal EEG dynamics of dual-task driving performance.” Journal of NeuroEngineering and Rehabilitation 8.1:11(2011)
- 9) Almahasneh, Hossam, et al. “Deep in thought while driving: An EEG study on drivers’ cognitive distraction.” Transportation research part F: traffic psychology and behaviour, **vol.26**, Part A, 218/226(2014)
- 10) 川崎真弘 他：シータ波とアルファ波を用いた運転技能の向上に伴う喜びと満足度の推定, 人間工学, **46 巻** 5 号, 307/316(2010)
- 11) Q. Abbas and A. Alsheddy, “Driver fatigue detection systems using multi-sensors, smartphone, and cloud-based computing platforms: a comparative analysis.” Sensors, **vol.21**, no.1, p.56(2021)
- 12) S.K. Lal and A. Craig, “A critical review of the psychophysiology of driver fatigue.” Biological psychology, **vol.55**, no.3, 173/194(2001)
- 13) Borghini, Gianluca, et al. “Assessment of mental fatigue during car driving by using high resolution EEG activity and neurophysiologic indices.” 2012 Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. IEEE(2012)
- 14) J. Harvy, N. Thakor, A. Bezerianos, and J. Li, “Between-frequency topographical and dynamic high-order functional connectivity for driving drowsiness assessment.” IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering, **vol.27**, no.3, 358/367(2019)
- 15) C.T. Lin, R.C.Wu, T.P. Jung, S.F. Liang, and T.Y. Huang, “Estimating driving performance based on eeg spectrum analysis.” EURASIP Journal on Advances in Signal Processing, **vol.2005**, no.19, 1/10(2005)
- 16) Inagaki, Keiichiro, Tatsuya Maruno, and Kota Yamamoto. “Evaluation of EEG activation pattern on the experience of visual perception in the driving.” IEICE TRANSACTIONS on Information and Systems, **vol.E103.D**, issue. 9, 2032/2034(2020)
- 17) Underwood, G., Chapman, P., Crundall, D., “Experience and Visual Attention in Driving. In Human Factors of Visual and Cognitive Performance in Driving” CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 89/116(2009)
- 18) Keiichiro Inagaki, Nobuhiko Wagatsuma and Sou Nobukawa, “The Effects of Driving Experience on the P300 Event-Related Potential during the Perception of Traffic Scenes.” MDPI International Journal of Environmental Research and Public Health, **vol.18**, issue.19(2021)
- 19) 丸野達也, 後藤祐哉, and 稲垣圭一郎. “脳波を指標とした運転熟練度の評価に関する検討.” IEICE Conferences Archives. The Institute of Electronics, Information and Communication Engineers(2018)
- 20) Sou Nobukwa, Nobuhiko Wagatsuma, and Keiichiro Inagaki. “Gamma Band Functional Connectivity Enhanced by Driving Experience.”, 2021 IEEE 3rd Global Conference on Life Sciences and Technologies (LifeTech)(2021)
- 21) C. J. Stam, G. Nolte, and A. Daffertshofer, “Phase lag index: assessment of functional connectivity from multi channel EEG and MEG with diminished bias from common sources.”, Human brain mapping, **vol. 28**, no. 11, 1178/1193(2007)

- 22) Sou Nobukwa, Takashi Ikeda, Mitsuru Kikuchi and Tetsuya Takahashi, “Dynamical Characteristics of State Transition Defined by Neural Activity of Phase in Alzheimer ’ s Disease”, *ICONIP Communication in Computer and Information Science*, 46/54(2021)
- 23) Anne M. Treisman, and Garry Gelade. “A Feature-Integration Theory of Attention.”, *Cognitive Psychology*, **vol.12**, issue.1, 97/136(1980)
- 24) Ling, Li, Caterina Gratton, Dezhong Yaho and Robert T. Knight. “Role of frontal and parietal cortices in the control of bottom-up and top-down attention in humans.” *Brain Research*, **vol.1344**, 173/184(2010)
- 25) Yordanova, Juliana ,Devrim, Muge ,Kolev, Vasil ,Ademoglu, Ahmet and Demiralp, Tamer. “Multiple time-frequency components account for the complex functional reactivity of P300.”, *NeuroReport*, **vol.11**, issue.5, 1097/1103(2000)

機能的ネットワークの媒介中心性による認知機能推定

○戸部真弓菜 信川創 (千葉工業大学) 水上 喜美子 (金沢大学)
川口 めぐみ (福井大学) 田中 悠二 (明石こころのホスピタル)
東間 正人 (医療法人社団青樹会青和病院) 高橋 哲也 (福井大学)

Estimation of cognitive functions by betweenness centrality of functional connectivity

*M. Tobe, S. Nobukawa (Chiba Institute of Technology),
K. Mizukami (Kanazawa University), M. Kawaguchi (University of Fukui),
Y. Tanaka (Akashi Mind Hospital), M. Higashima (Medical Corporation Aokikai Seiwa Hospital) and T. Takahashi (University of Fukui)

Abstract— Implementing optimal interventions to maintain cognitive function based on estimating the cognitive function of the elderly people is urgent issue for super aging society. In this study, we investigated the relationship between betweenness centrality (BC) as an index for hub structure in the functional connectivity and cognitive function in the elderly from a topological perspective, using the phase lag index based on phase synchronization. The results revealed site-specific BC characteristics in the temporal lobe in theta band between two groups with different cognitive functions. This finding might contribute to establish bio-marker related to cognitive function of the elderly people.

Key Words: synchronous analysis, betweenness centrality, cognitive function

1 はじめに

近年では、人口に占める高齢者の割合が高まっている。加齢に伴う問題として、認知機能の低下がある。高齢者の認知機能に関する研究では、高齢者の認知機能は心理的幸福 (well-being) に関連することが報告されている¹⁾。特に高齢化が進んだ現代社会においては、認知機能を高く保つことが一人ひとりの well-being の向上につながるだけでなく、広く社会の活性化につながるため重要な問題であると言える。しかし、これまでの認知機能検査では検査者・被験者の両方にとって負担が大きいものであり、それによって適切な介入がしづらいという問題がある。そのため、今よりも簡単に認知機能を推定できるような、脳機能推定のためのバイオマーカーの確立が求められており、それによって認知機能に基づいた最適な介入を行うようにできることが理想である。しかし、これまでの高齢者を対象とした脳波研究は、アルツハイマー病や認知症、うつ病といった疾患のある被験者を対象にしたものが多く、健康な高齢者の脳のネットワークに着目した研究はそれらに比較すると少なかった。アルツハイマー病などの病気がない高齢者においても、加齢は認知機能の低下との関連があることが示されている²⁾など、認知機能の問題は、疾患にはかかわらず加齢によって引き起こされる問題である。そのため健康な状態の高齢者の認知機能にも着目し、認知機能と機能的ネットワークの関連性や、特徴を明らかにすることが必要である。

これまでに用いられてきた脳の解析の方法としては、脳の機能的結合に着目し行われた研究が多い。機能的結合とは、2つの時系列信号間の統計的依存性を調べるものであり、脳の異なる領域間の同期の程度を調べるために用いられる³⁾。健康な高齢者に対する研究としては、機能的結合と創造性に関連性があることが示されているものや⁴⁾、高齢者と若年者とでデフォルトネットワークの違いを調べた研究などが行われている

⁵⁾。機能的結合の指標としては、コヒーレンスや Phase lag index (PLI)、相互情報量などがある。その中でも、ボリュームコンダクションの影響を回避することができるという利点を持つことから、2つの信号間の瞬時位相の差の分布の非対称性に基づく指標である PLI が多く用いられている⁶⁾。

また最近では、機能的結合の解析に加えてネットワーク解析の手法を取り入れ、脳のネットワーク構造をトポロジーとして定量化することで、統合的に捉える研究が行われるようになってきている⁷⁾。グラフ理論に基づく複雑ネットワーク理論の発展に伴って、fMRI、MEG、EEG データによって脳ネットワークを構築し、ネットワークを調べる研究が多く行われている。たとえば、さまざまな臨床的なデータに対し脳の特徴を明らかにするために、クラスタリング係数、スモールワールド性、媒介中心性 (betweenness centrality; BC)、次数中心性などが一般的なネットワーク解析の指標として用いられている⁸⁾。これらは、脳において電極をノード、異なる電極間の機能的な接続をエッジと見なすことで、脳をネットワークとして捉える手法である。ネットワーク解析を使用している例として、うつ病の患者の脳のネットワークを調べた研究では、ノード効率や局所効率、BCの違いからアパシーとうつ病のネットワークの違いを明らかにしたほか⁹⁾、アルツハイマー病の患者と健常者のネットワークの比較により、アルツハイマー病では局所効率とモジュール性が大幅に低下していることを明らかにした¹⁰⁾。このように、脳のネットワーク特性に着目することで、疾患特有の脳の接続の異常を明らかにすることができる。こうした、いくつか種類のあるネットワーク解析指標の中でも BC は、ネットワークの中のハブの特定することができる指標であり、ネットワークの特徴を調べるための中心性の指標として広く用いられている。たとえば、てんかんの患者の脳波を調べた研究では、発作を引き起こすハブを検出

することに使われているほか¹¹⁾、アルツハイマー病の患者の脳のネットワークを調べた研究では症状の重症度とハブの位置に関連性があることが示されている¹²⁾。このように、BCは疾患特有の脳の接続の異常を検出するのに有効な指標である。ここで、BCはネットワークの異なる部分を接続する橋渡しをするノードであるほど値が高くなるという特徴を持つ。そのため、脳をエッジとノードを持つネットワークとして考え、ノードのBCを求めることより、ネットワーク内の情報の流れに大きな影響を持つハブを特定し、脳のネットワークの特徴を明らかにできる。また、疾患のある患者以外に対しての研究においてもBC解析は取り入れられている。健康な高齢者に対するいくつかの研究の例として、高齢者はネットワーク内およびネットワーク間の接続性が全体的に低下していること示されており、加齢に伴う接続性の変化は認知機能の低下に関連していることがわかっている¹³⁾。特に、高齢者のネットワークのBCは若年者と比べていくつかの領域で有意に異なっていることも報告されている¹⁴⁾。

本研究では、高齢者の脳波から推定した脳の機能的ネットワークと認知機能には関連があるという仮説から、認知機能の程度で2群に分けた健康な高齢者の脳波について、機能的結合の指標であるPLIにネットワークを定量的に評価するBCというアプローチを組み合わせることで、脳のネットワークを推定し、認知機能と脳のネットワークの関連性を明らかにする。

2 手法

2.1 被験者

本研究の被験者は健康な高齢者43名である。本研究では、認知機能検査のスコアの高低をもとに高い認知機能群と低い認知機能群の2群に分けた。使用した認知機能検査はファイブコグである。なお、本研究に用いたファイブコグのスコアの値は各被験者ごとの年齢と教育歴について補正された値である。2群に群分けを行ったあとの被験者の基本構成をTable1に示す。参加者全員が研究を開始する前にインフォームド・コンセントを得た。研究プロトコルは福井大学の倫理委員会承認された。また、本研究の全ての手順は、ヘルシンキ宣言に基づいて実施された。

2.2 脳波計測

脳波は、国際10-20法に基づく電極配置に従い、19の電極部位(Fp1, Fp2, F3, F4, C3, C4, P3, P4, O1, O2, F7, F8, T3, T4, T5, T6, Fz, Cz, Pz)から計測した。これらの電極配置は、両耳たぶを基準とした。これらの脳波の測定には、21チャンネルシステム(EEG-1514, 日本光電, 東京)を使用し、サンプリング周波数は500Hzとした。被験者は電氣的に遮蔽され、防音、調光された部屋で、椅子に座って快適に過ごした。計測中は目を閉じた覚醒状態で、3分以上記録した。各被験者の脳波データは1-60Hzのバンドパスフィルタを用いてフィルタリングした。

2.3 Phase Lag Index 解析

2つの電極間の機能的結合の尺度として、Phase Lag Index (PLI)を使用した⁶⁾。PLIは、2つの時系列信号間の瞬時位相差の分布の非対称性を利用した、位相同期の指標である。まずヒルベルト変換によって2つ

の時系列信号間の瞬時位相差 $\Delta\phi(t_k)$ ($k = 1, 2, \dots, N$)を求める($-\pi \leq \Delta\phi \leq \pi$)。得られた時系列信号間の瞬時位相差の時系列 $\Delta\phi(t_k)$ を用い、PLIは(1)式で定義される。

$$PLI = |\langle \text{sign}(\Delta\phi(t_k)) \rangle|. \quad (1)$$

ここで、“sign”は符号関数を表している。 N は時系列におけるデータポイントの数を表し、 $\langle \cdot \rangle$ は $1 \leq k \leq N$ で時間平均をとることを表している。PLIでは、ボリュームコンダクションによる影響を取り除くために、 $\Delta\phi(t_k) = 0, \pi, -\pi$ の場合に $\Delta\phi(t_k) = 0$ に設定する¹⁵⁾。PLIの値の範囲は0から1の間であり、PLI=0は結合がない状態か、 $0 \pmod{\pi}$ を中心とした位相差で結合していることを示している。PLI=1は信号間に完全な位相結合があることを示している。したがって、PLIの値が大きいほど2つの信号間の位相同期が強いことを示す。

本研究では、計測した脳波データを4秒(2048データポイント)を1エポックとし、各被験者ごとに各エポックでのPLIを求め、その後平均化した。それぞれの被験者について、脳波データの最高長は276480データポイント(135エポック)、最小長は45056データポイント(22エポック)、平均長は160848(78.5エポック)のデータを用いた。デルタ(1-4 Hz)、シータ(5-7 Hz)、アルファ(8-13 Hz)、ベータ(14-25 Hz)、およびガンマ(26-40 Hz)の5つの周波数帯(バンド)に分け、それぞれのバンドについて各電極ペア 19×19 の加重隣接行列として求めた。PLIの計算には、MATLABのHERMES toolboxを使用した¹⁶⁾。

2.4 Betweenness Centrality 解析

機能的ネットワークをトポロジー的に評価する手法として、ネットワークの中心性を調べる。本研究では、いくつかある中心性の指標のうち、betweenness centrality (BC)を使用する^{17, 18)}。BCは最もよく使われる中心性の指標であり、ノードのネットワーク上での重要性を表す。

ネットワーク上のあるノード i のBCの値 b_i は式(2)で定義される¹⁸⁾。

$$b_i = \frac{1}{(n-1)(n-2)} \sum_{\substack{h, j \in N, \\ h \neq j, h \neq i, j \neq i}} \frac{\rho_j(i)}{\rho_{ji}} \quad (2)$$

ここで、 N はネットワーク内の全てのノードの集合、 n はノードの数、 i, j, h はノードを表す記号である。 ρ_{ji} は h と j の間の最短経路の数であり、 $\rho_j(i)$ は中でも i を通過する h と j の間の最短経路の数を表している。また、 $(n-1)(n-2)$ で割ることによって、BCの値を $[0, 1]$ の範囲に正規化した。本研究では、各電極ペアに対しPLIを用いて求めた 19×19 の機能的結合の行列を基に、電極をノードとみなして電極ごとのBCの値を求めた。PLIの値は接続の強度として使用した。BCの値の計算にはMATLABのBrain Connectivity Toolboxを使用した^{17, 18)}。

2.5 統計解析

本研究では、認知機能の程度の異なる2つの群間で、BCの値に有意な差があるかを判断するために反復測定分散分析(repeated measure analysis of variance;

Table 1: Basic composition of the participants in two groups of high and low cognitive functioning based on Five-Cognitive Functions (Five-Cog) scores. The p -value of the group difference between the high and low cognitive function groups with $p < 0.05$ are represented by bold characters.

	High-cognitive function group	Low-cognitive function group	p -value
Mean of age (Standard deviation (sd))	69.71 (4.08)	74.23 (4.99)	0.003
Mean of total score of Five Cog (sd)	112.43 (8.96)	89.14 (9.09)	2.930
Male/Female	6/15	7/15	0.822

ANOVA)を行った。被験者間要因として、ファイブコグのスコアに基づいて群分けした、高い認知機能群と低い認知機能群の2群を使用し、被験者内要因としてFp1からPzまでの19個の電極を使用した。ANOVAの結果は、群内および群間の分散分析に基づくF値で表した。統計的に有意な基準として、 α 両側レベル0.05を用い、自由度にはGreenhouse-Geisserの補正を適用した。また、post-hoc t検定を行い、2群の電極ごとの群間比較を行った。post-hoc t検定には、統計的に有意な基準として、 α 両側レベル0.05, 0.01を用いた。

3 結果

認知機能の高さの程度で43人の被験者を2群に分け、PLIによる機能的結合の強さの評価をもとに5つのバンド(デルタ, シータ, アルファ, ベータ, ガンマ)ごとの各電極(ノード)についてのBCの値を求め、2群間での比較を行った。BC解析の反復分散分析(ANOVA)の結果をTable. 2に示す。 p 値が0.05以下の項目を太字で示した。両群の比較の結果、2つの群の被験者内効果において、シータバンドにおける2群間のBC値の有意な群間差が見られた。また、シータバンドにおけるpost-hoc t検定の結果をFig. 1に示す。このFig. 1において、 p 値が0.05以下を*, 0.01以下の箇所を**の印で表している。また、シータバンドにおける両群のBC値の平均と分布をFig. 2に示す。Fig.1のpost-hoc t検定の結果とFig.2の各ノードごとのBCの値の両群のBC値の比較より、Fp2, T4のノードでは高い認知機能群のほうがBCの値が高く、一方、C3, C4, P4のノードでは低い認知機能群のほうがBC値が高い傾向になったことが確認できた。つまり、どちらかの群が一貫して高いBC値を示すのではなく、ノードごとに関係性が異なっていた。

4 考察

本研究では、健康な高齢者の認知機能と脳のネットワーク構造の関係を明らかにすることを目的に、健康な高齢者43人について認知機能の程度によって2群に分け、群間の機能的結合の強さをもとにしたネットワークにおけるBCの値の差を調べた。その結果、シータバンドのT4ノードにおいて、2群のBCの値の間に有意な差があることが確認できた。

まず、シータバンドにおいて認知機能の高い群と低い群の間に有意な差が確認できた理由について考える。一般に、シータバンドの脳波は認知や記憶のパフォーマンスを反映していることがわかっている¹⁹⁾。特に、高齢者ではアルファパワーの低下とシータパワーの増加が見られ、アルツハイマー病の患者では遅い周波数(デルタ, シータ)の脳波の増加、早い周波数の脳波(アルファ, ベータ)の減少が健康な高齢者と比べて更に顕著になることが示されている²⁰⁾。そのため、シータと認知機能は関係性があると言えます、そのことによって

本研究でも認知機能の高さの違いによりシータバンドのネットワークに有意な差が発生した可能性が考えられる。さらに、記憶喪失性軽度認知障害の患者と健康な人の脳のネットワークについてBCを調べた研究においても、側頭極におけるシータバンドで有意差が見られた報告もあり²¹⁾、シータバンドのBCと認知機能の低下は関連している可能性が考えられる。

次に、T4の部位でBCの値に有意差があった理由について考える。高齢者では、認知機能の低下に伴って脳のネットワークそのものに変化が生じていることが考えられる。高齢者の脳のネットワークについての研究において、若年者と比べ高齢者では安静時の脳の機能的結合において、長距離の機能的結合の低下と、短距離の機能的結合の増加が確認されており、この2つのバランスや長距離の機能的結合の低下が認知機能の低下に関連することが報告されている²²⁾。そのことに加え、前頭-頭頂のネットワークは、認知や制御の能力と関わるということがわかっている²³⁾。本実験において認知機能の異なる2群の間で有意差が確認できたノードはT4であり、このノードは側頭部に位置する。BCの値が高いということは、そのノードがハブ構造を持っていることを示しているため、周りとのつながりが比較的高いノードであったことが考えられる。そのため、T4の部位が前頭-頭頂のような認知や制御に関わるネットワークとの関係を持っている可能性が考えられる。これらのことから、高齢者ではネットワークが変化し、そのことが認知機能に影響を及ぼしている可能性が考えられる。

この研究にはいくつかの限界がある。まず、本研究では被験者ごとの認知機能の高さの評価にファイブコグテストの6項目(運動・並行・遅延再生・時計・言語流暢性・類似合計)を足し合わせた合計点数を使用しており、それぞれの項目別のスコアの高さの違いについては反映されていない。そのため、本研究においては、それぞれの認知の状態の違いに関わる評価を行うことができていない。また、被験者ごとのBCの値の分布や、認知に関わる詳しいメカニズムについても不明であり、それらを明らかにすることは今後の課題である。

5 結論

本研究では、脳の機能的結合をもとにしたネットワークにおいて、シータバンドにおいて高齢者の認知機能の程度とネットワーク構造に部位得意的な有意な差があることがわかった。また、本研究では高齢者の認知機能の低下を検出する上で、BCを用いたネットワーク解析が役立つことも示された。今後、高齢者の認知機能に関連するバイオマーカーの確立に貢献する可能性が期待できる。

Table 2: High-cognitive function group vs. Low-cognitive function group based on the repeated measure ANCOVA results figure-value (p-value) and partial η^2 -value in betweenness centrality (BC) analysis results, F and p value with $p < 0.05$ are represented by bold characters.

	Group	Group \times node
delta	$F = 0.602(p = 0.442, \eta^2 = 0.014)$	$F = 1.514(p = 0.140, \eta^2 = 0.036)$
theta	$F = 0.110(p = 0.742, \eta^2 = 0.003)$	$F = 2.561(p = 0.009, \eta^2 = 0.059)$
alpha	$F = 1.554(p = 0.220, \eta^2 = 0.037)$	$F = 0.979(p = 0.441, \eta^2 = 0.023)$
beta	$F = 2.975(p = 0.092, \eta^2 = 0.068)$	$F = 1.196(p = 0.299, \eta^2 = 0.028)$
gamma	$F = 1.813(p = 0.186, \eta^2 = 0.042)$	$F = 1.467(p = 0.191, \eta^2 = 0.035)$

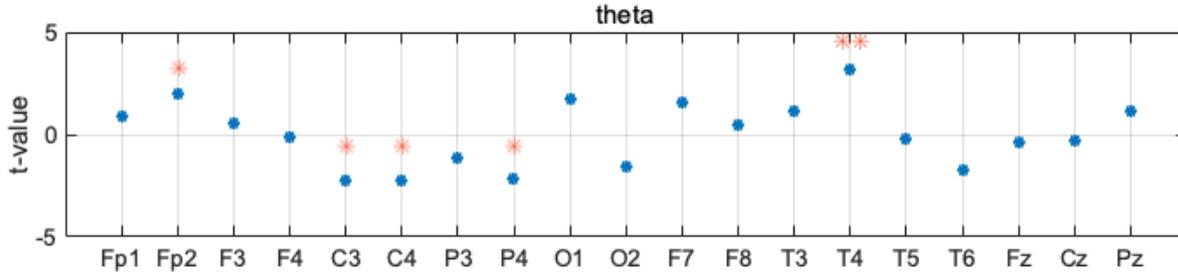


Fig. 1: The result of post-hoc-t-tests for BC between high and low cognitive groups for each node. Positive values correspond high (low) BC value for high (low) cognitive group. (* $p < 0.05$, ** $p < 0.01$)

謝辞

本研究は科研費（基盤 C 金沢大学 研究課題番号:20K07964）の助成を受けたものである。

参考文献

- David J Llewellyn, Iain A Lang, Kenneth M Langa and Felicia A Huppert: Cognitive function and psychological well-being: findings from a population-based cohort, *Age and ageing*, **37**-6, 685/689 (2008)
- Luiz Kobuti Ferreira and Geraldo F Busatto: Resting-state functional connectivity in normal brain aging, *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*, **37**-3, 384/400 (2013)
- Olaf Sporns: Structure and function of complex brain networks, *Dialogues in clinical neuroscience*, (2022)
- Sou Nobukawa, Teruya Yamanishi, Kanji Ueno, Kimiko Mizukami, Haruhiko Nishimura and Tetsuya Takahashi: High Phase Synchronization in Alpha Band Activity in Older Subjects With High Creativity, *Frontiers in human neuroscience*, **14**, 420 (2020)
- R Nathan Spreng and Daniel L Schacter: Default network modulation and large-scale network interactivity in healthy young and old adults, *Cerebral Cortex*, **22**-11, 2610/2621 (2012)
- Cornelis J Stam, Guido Nolte and Andreas Daffertshofer: Phase lag index: assessment of functional connectivity from multi channel EEG and MEG with diminished bias from common sources, *Human brain mapping*, **28**-11, 1178/1193 (2007)
- Martijn P Van Den Heuvel and Hilleke E Hulshoff Pol: Exploring the brain network: a review on resting-state fMRI functional connectivity, *European neuropsychopharmacology*, **20**-8, 519/534 (2010)
- Zulfi Haneef and Sharon Chiang: Clinical correlates of graph theory findings in temporal lobe epilepsy, *Seizure*, **23**-10, 809/818 (2014)
- Bingtao Zhang, Guanghui Yan, Zhifei Yang, Yun Su, Jinfeng Wang and Tao Lei: Brain functional networks based on resting-state eeg data for major depressive disorder analysis and classification, *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, **29**, 215/229 (2020)
- Mahdi Jalili: Graph theoretical analysis of Alzheimer's disease: Discrimination of AD patients from healthy subjects, *Information Sciences*, **384**, 145/156 (2017)
- Giulia Varotto, Laura Tassi, Silvana Franceschetti, Roberto Spreafico and Ferruccio Panzica: Epileptogenic networks of type II focal cortical dysplasia: a stereo-EEG study, *Neuroimage*, **61**-3, 591/598 (2012)
- Marjolein MA Engels, Cornelis J Stam, Wiesje M van der Flier, Philip Scheltens, Hanneke de Waal and Elisabeth CW van Straaten: Declining functional connectivity and changing hub locations in Alzheimer's disease: an EEG study, *BMC neurology*, **15**-1, 145 (2015)
- Jessica S Damoiseaux: Effects of aging on functional and structural brain connectivity, *Neuroimage*, **160**, 32/40 (2017)

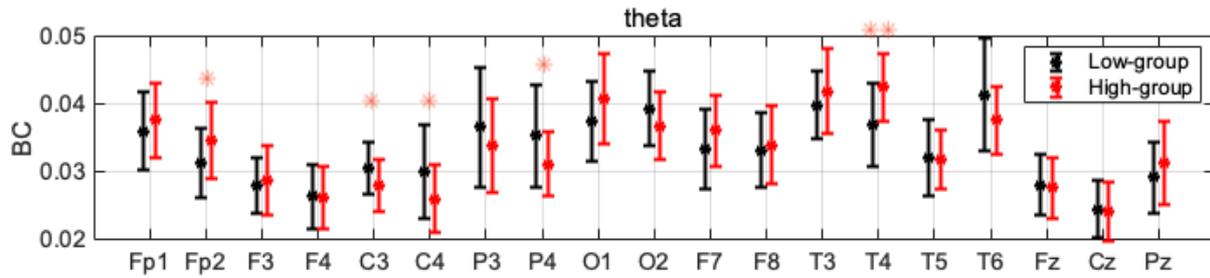


Fig. 2: Mean and standard deviation of BC values for each node in theta band. Red and black error bars indicate the values standard deviation of High-cognitive function group and Low-cognitive function group, and each point represents the average value of BC value in each node. (* $p < 0.05$, ** $p < 0.01$)

- 14) Zhiliang Liu, Lining Ke, Huafeng Liu, Wenhua Huang and Zhenghui Hu: Changes in topological organization of functional PET brain network with normal aging, *PLoS One*, **9-2**, e88690 (2014)
- 15) Paul L Nunez, Ramesh Srinivasan, Andrew F Westdorp, Ranjith S Wijesinghe, Don M Tucker, Richard B Silberstein and Peter J Cadusch: EEG coherency: I: statistics, reference electrode, volume conduction, Laplacians, cortical imaging, and interpretation at multiple scales, *Electroencephalography and clinical neurophysiology*, **103-5**, 499/515 (1997)
- 16) Guiomar Niso, Ricardo Bruña, Ernesto Pereda, Ricardo Gutiérrez, Ricardo Bajo, Fernando Maestú and Francisco Del-Pozo: HERMES: towards an integrated toolbox to characterize functional and effective brain connectivity, *Neuroinformatics*, **11-4**, 405/434 (2013)
- 17) Ulrik Brandes: A faster algorithm for betweenness centrality, *Journal of mathematical sociology*, **25-2**, 163/177 (2001)
- 18) Mikail Rubinov and Olaf Sporns: Complex network measures of brain connectivity: uses and interpretations, *Neuroimage*, **52-3**, 1059/1069 (2010)
- 19) Wolfgang Klimesch: EEG alpha and theta oscillations reflect cognitive and memory performance: a review and analysis, *Brain research reviews*, **29-2-3**, 169/195 (1999)
- 20) C Besthorn, R Zerfass, C Geiger-Kabisch, H Sattel, S Daniel, U Schreiter-Gasser and H Förstl: Discrimination of Alzheimer's disease and normal aging by EEG data, *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*, **103-2**, 241/248 (1997)
- 21) Francesca Jacini, Pierpaolo Sorrentino, Anna Lardone, Rosaria Rucco, Fabio Baselice, Carlo Cavaliere, Marco Aiello, Mario Orsini, Alessandro Iavarone, Valentino Manzo et al.: Amnesic mild cognitive impairment is associated with frequency-specific brain network alterations in temporal poles, *Frontiers in aging neuroscience*, 400 (2018)
- 22) Kilian Abellana-Pérez, Lúdia Vaqué-Alcázar, Dídac Vidal-Piñero, Ali Jannati, Elisabeth Solana, Nuria Bargalló, Emiliano Santarnecchi, Alvaro Pascual-Leone and David Bartrés-Faz: Age-related differences in default-mode network connectivity in response to intermittent theta-burst stimulation and its relationships with maintained cognition and brain integrity in healthy aging, *Neuroimage*, **188**, 794/806 (2019)
- 23) Theodore P Zanto and Adam Gazzaley: Frontoparietal network: flexible hub of cognitive control, *Trends in cognitive sciences*, **17-12**, 602/603 (2013)

不確実下でのモデリング駆動型最適化問題とその解法： 循環・螺旋型システムズアプローチの視点から

○相吉英太郎 田村健一 安田恵一郎（東京都立大学）

Modelling-Driven Optimization Problems with Uncertainty Tolerance and Their Solution Strategies:

From Standpoints of the Circulating and Spiral-up Systems Approaches

Abstract— Working in the framework of the circulating and spiral-up systems approach, we attempt to embed modelling procedures, used to construct approximate models of input–output relationships at the induction stage, into optimization problems formulated at the abduction stage. In particular, for cases in which uncertainty is present in real systems, we show that, by considering worst-case scenarios from a risk-management perspective, we can formulate optimization problems with embedded modelling procedures that might be termed *robust modelling*. As a solution strategy for these problems, we consider a constraint-relaxation method—the *scenario approach*—and discuss how this strategy fits into the framework of the circulating and spiral-up systems approach.

1 はじめに

「実システムの実装・運用→帰納段階→仮説生成段階→演繹段階→実システムの実装・運用」という多段階過程の循環による統合的かつ新たなシステムズアプローチとして「循環・螺旋型システムズアプローチ」が提唱された¹⁾。この多段階過程において、システム最適化を位置付けると、まず、実システムから取得される入出力データを用いて入出力関係を等式制約条件としてモデル化することや、入出力変数の許容性を判別する不等式制約条件の記述が「帰納段階」に相当し、その次の段階として、実システムに関わる主体の目的や実システムに期待する価値を目的関数として記述することで最適化問題の定式化と、求めるべき解の定義がなされるのが「仮説生成段階」に当たる。さらにその次の段階として、上記で定式化された最適化問題に対してその合理解の探索が行われ、得られた解の実システムへの実装に向けたシミュレーションや実験が行われるのが「演繹段階」である。これらのプロセスで用いられる手法を具体的にあげると、帰納段階においては、たとえば *machine learning*²⁾による入出力関係を表す等式制約条件の生成や、*support vector machine*³⁾による許容性判別の不等式制約条件の生成があり、さらに仮説生成における目的関数の生成も、主体の目的や価値を数値化したデータへの応答曲面法⁴⁾の適用によって可能である。そして、演繹段階では、ソルバーと称する様々な最適化手法の適用により、仮説生成段階で定式化された最適化問題の解が得られることになる。以上のプロセスを経て、実システムの実装や運用が実行され、新たな環境の変化や実システム自体の変質、さらに実システムの多様な環境での運用から得られる新たなデータに対応するために、一連のプロセスを再び循環させることで、実システムの進化が持続的に実現するという考え方が、循環・螺旋型システムズアプローチである。

本論文では、以上のような循環・螺旋型システムズアプローチにおける仮説生成段階で定式化される最適化問題に、入出力関係の近似モデル構築のための帰納段階でのモデリング機能を統合化することを第2章で試みる。さらに、第3章では、実システムに不確実性が存在する場合に、危機管理の観点から最悪の状況を想定することで、*min-max* 基準を導入した目的関数の最適化とロバスト性基準を満たす近似モデルの構築を統合化した、不確実下でのモデリング駆動型最適化問題を定式化する。また、このモデリング駆動型最適化問題の解法方略として、不確実変数の値を想定することにより、*scenario* としての新たな近似モデルを仮説生成段階で構築して制約緩和問題を定式化することを繰り返しながら、これらを解く制約緩和法を循環・螺旋型システムズアプローチとして提案する。

2 モデリング駆動型最適化問題の定式化

入力変数 $\mathbf{u} \in R^L$ とそれに対応する出力 $\mathbf{x} \in R^N$ が、関数 $\mathbf{h}: R^L \rightarrow R^N$ によって

$$\mathbf{x} = \mathbf{h}(\mathbf{u}) \quad (1)$$

と関係づけられる静的システムを考える。ただし、この静的システムはいわゆるブラックボックスで、関数 \mathbf{h} は未知であるとする。この実システムに対し、 M 個の基底関数

$$B_m(\mathbf{u}; \mathbf{v}_m) = b(d(\mathbf{u}; \mathbf{v}_m)), m = 1, \dots, M \quad (2)$$

に結合係数 $w_{nm}, m = 1, \dots, M, n = 1, \dots, N$ を乗じた線形結合による近似モデル

$$\mathbf{x}_n = \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}; \mathbf{v}_m)), n = 1, \dots, N \quad (3)$$

を構築する。ここで、(2)の基底関数 B_m を構成する関数 $d: R^L \rightarrow R^1$ は、 L 次元の入力変数 \mathbf{u} を1次元の変数 z に圧縮する関数であり、パラメータ \mathbf{v}_m をもつこの関数と関数 $b: R^1 \rightarrow R^1$ の合成関数が基底関数 B_m であり、このようなすべての基底関数 $B_m, m = 1, \dots, M$ に

対して文献5)~7)などの普遍近似定理が成り立つものと仮定する。また以下では、(3)をまとめてベクトル-行列表記により

$$\mathbf{x} = W\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; V))$$

と記す。ここで、 W はすべての基底関数の結合係数をまとめた行列、 V は基底関数内のすべてのパラメータをまとめた行列で、それぞれ

$$W = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{w}_N^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & \cdots & w_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N1} & \cdots & w_{NM} \end{bmatrix}, V = [\mathbf{v}_1 \cdots \mathbf{v}_M]$$

であり、ベクトル関数 $\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; V))$ は

$$\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; V)) = \begin{bmatrix} b(d(\mathbf{u}; \mathbf{v}_1)) \\ \vdots \\ b(d(\mathbf{u}; \mathbf{v}_M)) \end{bmatrix}$$

を表している。

以下では、第 s 番目の入力データを $\mathbf{u}^{(s)}$ 、これに対応する所望出力を $\mathbf{x}^{(s)}$ とし、 S 個の入出力データの対 $(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{x}^{(s)})$, $s = 1, \dots, S$ が教師データ集合として与えられているとする。このとき、普遍近似定理に基づく出力誤差を考えるため、出力 $\mathbf{x} \in R^N$ のノルム $\|\mathbf{x}\|$ は一様ノルム

$$\|\mathbf{x}\| = \max\{|\mathbf{x}_n| | n = 1, \dots, N\}$$

とし、 S 次元データ空間での出力誤差(入力データに対する出力と所望出力の距離)に対しても、一様ノルムによる距離を用いた出力誤差

$$\left\| \begin{pmatrix} \|W\mathbf{b}(d(\mathbf{u}^{(1)}; V)) - \mathbf{x}^{(1)}\| \\ \vdots \\ \|W\mathbf{b}(d(\mathbf{u}^{(S)}; V)) - \mathbf{x}^{(S)}\| \end{pmatrix} \right\|$$

$$= \max\{\|W\mathbf{b}(d(\mathbf{u}^{(s)}; V)) - \mathbf{x}^{(s)}\| | s = 1, \dots, S\}$$

を考え、この誤差を許容値 ε 以下にするような、結合係数行列 W と基底関数内パラメータ行列 V を求める問題を考える。とくにこの誤差に関する許容条件を満たしたもとの、いわゆる過学習の防止として関数(3)の凹凸性を可能な限り抑えるために、結合係数行列 W の成分の大きさを最小化する不等式制約条件付き最小化問題

$$\min_{(W, V)} \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (4)$$

$$\text{subj. to } \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \quad (5)$$

を「学習問題」と称することにする。ただし、(4)の $\|W\|$ のノルムは自乗ノルムとする。この学習問題(4)(5)を解くことで、その解である最良の結合係数 \bar{W} 、および最良の基底関数内パラメータ \bar{V} を求め、(1)の近似モデル

$$\mathbf{x} = \bar{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; \bar{V}))$$

を構築するのが帰納段階でのモデリングである。なお、深層学習で用いられるいわゆる多層ニューラルネットワークは、(3)の関数 d をさらに基底関数の線形重

ね合わせで近似して入れ子構造にすることを何重にも繰り返すことで、基底関数をより複雑な合成関数にし、その関数内パラメータの個数も増加させて基底関数の多様性を増幅させたものである。したがって、このような多層ニューラルネットワークの学習問題も本質的には問題(4)(5)の構造と見做すことができる。

以上の帰納段階における学習問題を解いて得られる近似モデルを前提とし、近似モデルそのものに対する評価も含めて主体の目的や価値を反映する目的関数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ を構成し、この関数を最小化することによって主体が所望する出力とともに、それを実現する入力を求める逆問題が最適化問題であり、仮説生成段階において

$$\min_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \quad (6)$$

$$\text{where } \mathbf{x} = \bar{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; \bar{V})) \quad (7)$$

と定式化される。この目的関数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ も、主体の目的や価値を反映するデータから数式表現されるが、ここでは議論簡略化のために、目的関数の数式表現はすでになされているとし、また入力 \mathbf{u} および出力 \mathbf{x} に対する許容性を判別する不等式制約条件も必要としない無制約な場合を想定する。このとき、近似モデル(7)を用いて目的関数(6)の出力 \mathbf{x} を消去すると、実システムに対して主体が望ましいとする入力を決定する最適化問題

$$\min_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; \bar{V}))) \quad (8)$$

が定式化される。そしてこの問題を解くことによって、実システムへの実装が可能な入力を求めるのが演繹段階である。問題(8)に含まれる近似モデル中の最良結合係数行列 \bar{W} や最良の基底関数内パラメータ行列 \bar{V} を求める帰納段階の学習問題も含めて2段階形式で記述すると、

$$\min_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; \bar{V}))) \quad (9)$$

$$\text{where } (\bar{V}, \bar{W}) = \operatorname{argmin}_{(V, W)} \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (10)$$

$$\text{subj. to } \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \quad (11)$$

と表すことができる。

本論文では、さらに(9)と(10)(11)を統合した問題

$$\min_{(V, W, \mathbf{u})} cf(\mathbf{u}, W\mathbf{b}(d(\mathbf{u}; V))) + \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (12)$$

$$\text{subj. to } \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \quad (13)$$

を定式化し、モデリングと最適化の異なる機能を統合化した問題として、問題(12)(13)を「モデリング駆動型最適化問題」と称することにする。ここで、最小化

関数(12)では入力 \mathbf{u} が決定変数であるのに対し、制約条件(13)では、 S 個の入出力データ対 $(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{x}^{(s)})$, $s = 1, \dots, S$ に対する近似モデルの精度が(5)と同等に保証されている。この問題は、帰納段階でのモデリングのための学習問題と演繹段階で解かれる最適化問題が、仮説生成段階で統合化された2目的問題であり、パラメータ $c(> 0)$ は、モデリングと最適化のバランスを取る重み係数である。この定式化と同様の考え方が、文献8)~10)などでも提案されているが、そこでは実システムのモデルパラメータの同定と最適化の統合であるのに対し、本論文では、機械学習によるモデリングと最適化機能との統合である。また、文献11)においても、モデリングと最適化の統合化法が提案されているが、設計変数のサンプル点に対するシステムの特徴を表す評価データを用いた応答曲面として目的関数を近似し、そのサンプル点の生成をメタヒューリスティクスの複数の探索点の更新に託す計算手順主導の手法である。

3 不確実下でのモデリング駆動型最適化

3.1 不確実下でのモデリング駆動型最適化問題の定式化

データの取得が可能な入力変数 $\mathbf{u} \in R^L$ とは別に、データの取得が不能な外生的な入力変数 $\mathbf{y} \in R^I$ を有するシステムを考える。以下ではこの種の変数 \mathbf{y} を「不確実変数」と称することにし、不確実下でのモデリングと最適化の統合化を考える。前章と同様に出力変数を $\mathbf{x} \in R^N$ とする静的実システムを考えるが、その未知の入出力関係は

$$\mathbf{x} = \mathbf{h}(\mathbf{u}, \mathbf{y}) \quad (14)$$

であるとし、 $\mathbf{h}: R^L \times R^I \rightarrow R^N$ とする。この実システムに対し、 M 個の基底関数

$$b(d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)), m = 1, \dots, M \quad (15)$$

に結合係数 w_{nm} , $m = 1, \dots, M$, $n = 1, \dots, N$ を乗じた線形結合による近似モデル

$\mathbf{x}_n = \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m))$, $n = 1, \dots, N$ (16) を導入する。ここで、基底関数(15)を構成する関数 $d: R^L \times R^I \rightarrow R^1$ に不確実変数 \mathbf{y} が入力変数 \mathbf{u} とともに導入され、式(16)のベクトル-行列表記は、前章と同様に

$$\mathbf{x} = \mathbf{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{V}))$$

とする。

ここで、不確実変数 \mathbf{y} の値が想定される範囲は集合 Y として与えられているが、その集合上で定義される分布関数などの確率的な情報も不明であるとし、与えられた S 個の入出力データ対 $(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{x}^{(s)})$, $s = 1, \dots, S$ に対し、その出力誤差を最大にするような状況が不確実変数 \mathbf{y} によってもたらされることを、危機管理の観点から想定してその出力誤差が許容誤差 ε

以内であるような近似モデルを構築するものとする。ここで、前章と同様に出力誤差に一樣ノルムを導入すると、出力誤差の許容条件は、前章の不等式制約条件(5)の左辺に相当する式に変数 $\mathbf{y} \in Y$ に関する最大化演算 $\max_{\mathbf{y} \in Y}$ を施した不等式

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \quad (17)$$

で表される。さらに、この許容条件を満たしたもつで、結合係数行列 W の成分の大きさを最小化する学習問題を定式化すると、

$$\min_W \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (18)$$

$$\text{subj. to } \max_{\mathbf{y} \in Y} \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \quad (19)$$

となる。

ところで、ここで誤差の許容条件(17)は、全称記号 \forall を用いた

$$\left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon, \quad n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S, \forall \mathbf{y} \in Y \quad (20)$$

と等価である。最悪の状況を想定した不等式制約条件付き最適化問題は、文献12)で定式化されたが、これと等価であるあらゆる不確定変数に対する不等式制約条件を有する最適化問題が、ロバスト最適化問題と称して文献13)において提唱された。そこで最悪な不確実変数を想定した、ないしはこれと等価なあらゆる不確実変数の値を想定した不等式制約条件をロバスト性基準と称することにし、この基準を導入して出力誤差の許容条件を課した学習問題(18)(19)を「ロバスト学習問題」と称することにする。このようなロバスト学習の概念は、support vector machine (SVM) に対して文献14),15)において提案されているが、カーネル関数としてガウス関数を用いる SVM は、基底関数(15)としてラジアル基底関数を用いる学習問題と本質的に等価であり、本論文でのロバスト学習はこのロバスト SVM の考え方を一般化したものと見做すことができる。また、このロバスト学習問題では、基底関数(15)としてラジアル基底関数を用いる場合を想定し、基底関数内パラメータ行列 V の値は別途与えられるものとし、学習問題(18)(19)の決定変数からは変数 V を除外する。このロバスト学習問題を解いてその解 \bar{W} を最良の結合係数とし、不確実下での近似モデル

$$\mathbf{x} = \bar{W}\mathbf{b}(d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{V})) \quad (21)$$

を構築するのが帰納段階である。

つぎに、対象システムにおいて所望の出力とそれを

実現する入力を求めるための不確実性を考慮した最適化問題を定式化する. 具体的には, 目的関数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ は数式表現されているものとする, 入出力関係(14)の近似モデル(21)を等式条件とする最適化問題は, 前章の問題(6)(7)と同様に

$$\min_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) \quad (22)$$

$$\text{where } \mathbf{x} = \bar{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V)) \quad (23)$$

と定式化することができる. ここでも議論簡略化のため, 決定変数 \mathbf{u} や出力変数 \mathbf{x} に関する不等式制約条件は省略するものとする. また, 問題(22)(23)から出力変数 \mathbf{x} を消去すると,

$$\min_{\mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) \quad (24)$$

と記述されるため, 以降では問題(24)で考察する. ところで, 問題(24)は不確実変数 \mathbf{y} の値が未定であり, この問題を解くことは事実上不可能なため. 不確実変数 \mathbf{y} の値を何らかの基準に基づいて想定することが必要である. この想定の下で最適化問題を解くことにより, 入力 \mathbf{u} の最適な値を確定することができれば, これを実システムに実装することが可能となる. このような不確実な状況下では, 安心・安全を担保するための危機管理の方策の一つとして, 最悪の状況を想定することが合理的とされている. すなわち最小化したい目的関数を最大にするような不確実変数 \mathbf{y} の値の生起を事前に想定し, そのときの近似モデルの出力を考慮した目的関数の値をできる限り改善するいわゆる「min-max 基準」¹⁶⁾の採用が考えられる. 循環・螺旋型システムズアプローチにおける仮説生成段階において, このような危機管理のための想定基準を導入すると, 不確実下での最適化問題として,

$$\min_{\mathbf{u}} \max_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) \quad (25)$$

が定式化される. ここで, 目的関数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ のように不確実変数 \mathbf{y} が考慮されていない場合でも, 近似モデル(21)によって出力変数 \mathbf{x} が不確実変数 \mathbf{y} に依存するため, 目的関数への min-max 基準の導入が意味をもつことになる.

ところで,

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) \leq \sigma$$

を満たす目的関数の上界を表す新たな変数 σ を導入すると, 問題(25)は,

$$\min_{(\sigma, \mathbf{u})} \sigma \quad (26)$$

$$\text{subj. to } \max_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{u}, \bar{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) \leq \sigma \quad (27)$$

と等価に書き換えられる. この問題を本論文での不確実下での最適化問題とし, 「min-max 最適化問題」と称することにする.

最後に, 前章におけるモデリング駆動型最適化問題(12)(13)と同様, 不確実下におけるロバスト学習問題(18)(19)と min-max 最適化問題(26)(27)を統合化した2目的問題を定式化すると,

$$\min_{(W, \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (28)$$

$$\text{subj. to } \max_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{u}, W\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) \leq \sigma \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{y} \in Y} \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} & \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) \right. \\ & \left. - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon \end{aligned} \quad (30)$$

が得られる. ここで, 不等式制約条件(29),(30)において,

$$F(W, \sigma, \mathbf{u}) = \max_{\mathbf{y} \in Y} f(\mathbf{u}, W\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) - \sigma$$

$$G(W)$$

$$\begin{aligned} = \max_{\mathbf{y} \in Y} \max_{s \in \{1, \dots, S\}} \max_{n \in \{1, \dots, N\}} & \left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) \right. \\ & \left. - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon \end{aligned}$$

とおくと, (29),(30)が同時に成り立つことと,

$$\max \{F(W, \sigma, \mathbf{u}), G(W)\} \leq 0$$

が成り立つこととは等価であり, しかもこの外側の比較の max 演算と $F(W, \sigma, \mathbf{u})$ や $G(W)$ の max 演算を交換することができ, 不等式制約条件(29),(30)は最終的に単一の不等式条件

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} \max \{ f(\mathbf{u}, W\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) - \sigma,$$

$$\left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon,$$

$$n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \leq 0$$

にまとめることができる. すなわち, 仮説生成段階において目的関数に適用した min-max 基準と, 帰納段階での近似モデル構築のために導入したロバスト性基準を, 単一の不等式制約条件で統合したことになり, 問題(28)-(30)は最終的に

$$\min_{(W, \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|W\|^2 \quad (31)$$

$$\text{subj. to } \max_{\mathbf{y} \in Y} \max \{ f(\mathbf{u}, W\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) - \sigma,$$

$$\left| \sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon,$$

$$n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \leq 0 \quad (32)$$

と定式化しなおすことができる. この問題を「不確実下でのモデリング駆動型最適化問題」と称することにし, この問題の解法方略と, その循環・螺旋型システムズアプローチでの位置づけを次節で考察する.

3.2 不確実下でのモデリング駆動型最適化問題に対する制約緩和法

不確実下でのモデリング駆動型最適化問題(31)(32)に対する解法として、制約緩和の考え方を適用する。不等式制約条件(32)は、全称記号を用いた不等式

$$\max \{ f(\mathbf{u}, \mathbf{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V))) - \sigma, \\ |\sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| - \varepsilon, \\ n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \leq 0, \forall \mathbf{y} \in Y \quad (33)$$

と等価である。このため、不確実変数 \mathbf{y} の値として想定される集合 Y が非可算無限個の要素からなる場合には、問題(31)(32)は非可算無限個の不等式制約条件を有し、事実上解くことが困難であり、また想定される集合 Y の要素が離散的に与えられてもその個数が非常に多い場合も解くことは容易ではない。そこで不確実変数 \mathbf{y} の想定値の個数をより少数に限定し、不等式制約条件(33)の数を減らした「制約緩和問題」によって問題(31)(32)を代替するのが実際的である。そこで不確実変数の想定サンプルを $\mathbf{y}^{(p)} \in Y, p = 1, \dots, P$ とすると、不確実下でのモデリング駆動型最適化問題(31)(32)に対する制約緩和問題は、

$$\min_{(W, \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|\mathbf{W}\|^2 \quad (34) \\ \text{subj. to } \max \{ f(\mathbf{u}, \mathbf{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}^{(p)}; V))) - \sigma, \\ |\sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}^{(p)}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| - \varepsilon, \\ n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \leq 0, \\ p = 1, \dots, P \quad (35)$$

となる。

制約緩和問題(34)(35)の解が本来解くべきモデリング駆動型最適化(31)(32)の最適解になるかどうかの検証をおこない、この検証によって最適解ではないと判定される場合には、新たな制約条件を制約緩和問題(34)(35)に付加して解きなおすのが文献17),18)の制約緩和法である。このとき、不確実変数 \mathbf{y} の新たな想定値に対応した近似モデルが生成され、その出力誤差の許容条件である不等式制約条件が付加される。制約緩和問題(34)(35)の解を $(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ とするとき、この解が問題(31)(32)の解であるかどうかの検証は、その不等式制約条件(32)が $(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ によって満たされるかどうか、すなわち、不確実変数 $\mathbf{y} \in Y$ に関して最悪状況を想定する $\mathbf{y} \in Y$ に関する最大化問題

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} \max \{ f(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{W}}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\hat{\mathbf{u}}, \mathbf{y}; V))) - \hat{\sigma}, \\ |\sum_{m=1}^M \hat{w}_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| - \varepsilon, \\ n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \quad (36)$$

の最大解 $\hat{\mathbf{y}} \in Y$ が与える最大値を

$$\phi(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}}) = \max \{ f(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{W}}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{y}}; V))) - \hat{\sigma}, \\ |\sum_{m=1}^M \hat{w}_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \hat{\mathbf{y}}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| - \varepsilon,$$

$$n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \}$$

とするとき、

$$\phi(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}}) \leq 0$$

が成り立つかどうかを検証すればよい。もしこの不等式が成り立つならば、 $(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ が不等式制約条件(32)を満たすことになり、 $(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ が不確実下でのモデリング駆動型最適化問題(31)(32)の解となる。一方、

$$\phi(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}}) > 0$$

となる場合は、不等式制約条件(33)の中で、最大化問題(36)の最大解 $\hat{\mathbf{y}} \in Y$ に対応した不等式制約条件

$$\max \{ f(\mathbf{u}, \mathbf{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{y}}; V))) - \sigma, \\ |\sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \hat{\mathbf{y}}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| - \varepsilon, \\ n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \} \leq 0 \quad (37)$$

が $(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ によって最も侵害される。この場合、 $\hat{\mathbf{y}}$ を不確実変数 \mathbf{y} の新たな $P+1$ 番目の想定サンプル $\mathbf{y}^{(P+1)}$ とし、これに対応した新たな近似モデルに対する許容条件(37)を不等式制約条件(35)に付け加えて新たな制約緩和問題とし、これを解きなおすことを繰り返す。最大化問題(36)は、制約緩和問題(34)(35)の解を求めたもとの新たな最悪状況を想定する問題といえ、仮説生成段階での制約緩和問題の定式化と演繹段階でのその求解のあと、さらに仮説生成段階に戻って、制約緩和問題の解に対する最悪状況の想定と新たな緩和問題の構成が繰り返されることになる。

なお、 \max 演算によって単一化した制約条件(35)は分離することができて、制約緩和問題(34)(35)は、

$$\min_{(W, \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|\mathbf{W}\|^2 \quad (38) \\ \text{subj. to } f(\mathbf{u}, \mathbf{W}\mathbf{b}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}^{(p)}; V))) \leq \sigma, \\ p = 1, \dots, P \quad (39)$$

$$|\sum_{m=1}^M w_{nm} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}^{(p)}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)}| \leq \varepsilon, \\ n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S, p = 1, \dots, P \quad (40)$$

と等価になる。ここで式(40)は、入力データ $\mathbf{u}^{(s)}, s = 1, \dots, S$ と不確実変数の想定サンプル $\mathbf{y}^{(p)}, p = 1, \dots, P$ のすべての組合せに対し、近似モデル出力誤差を ε 以下に抑えるという許容条件であり、これらの近似モデルは、文献19)の scenario approach における scenario と見做すことができる。また、式(39)は、不確実変数の想定値に応じたすべての scenario が与える目的関数値を一様に最小化するように近似モデルの結合係数とそれへの入力変数の値を与える条件である。不確実下でのモデリング駆動型最適化におけるこのような scenario に関する問題(38)-(40)を「不確実下でのモデリング駆動型制約緩和問題」と称することにする。

制約緩和問題(38)-(40)を考慮すると、最大化問題(36)の最大値 $\phi(\hat{\mathbf{W}}, \hat{\sigma}, \hat{\mathbf{u}})$ やそれを与える最大解 $\hat{\mathbf{y}} \in Y$ は、 $1 + N \times S$ 個の最大化問題

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} f(\hat{\mathbf{u}}, \hat{W} \mathbf{b}(d(\hat{\mathbf{u}}, \mathbf{y}; V))) - \hat{\sigma} \quad (41)$$

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} \left| \sum_{m=1}^M \hat{w}_{nm} b(d(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_m)) - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon,$$

$$n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S \quad (42)$$

の最大値のさらなる最大値、およびそれを与える最大解として得ることができる。すなわち問題(42)による最悪の scenario の想定は、入出力データ $(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{x}^{(s)})$, $s = 1, \dots, S$ ごとに、かつ出力データ $\mathbf{x}^{(s)}$ のすべての成分 $x_n^{(s)}$, $n = 1, \dots, N$ ごとになされることになる。

以上により、不確実下でのモデリング駆動型最適化問題(31)(32)に対する制約緩和法の手順を、問題の定式化の作業も含めてまとめると、以下のようになる。

Step 1: 近似モデル(16)を構成する基底関数(15)を選定し、近似モデル構築のための入出力データ対 $(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{x}^{(s)})$, $s = 1, \dots, S$ を獲得し、許容誤差の値 $\varepsilon (> 0)$ を設定する。

Step 2: 初期の不確実変数の想定サンプル $\mathbf{y}^{(1)} \in Y$ を選び、 $P(1) = 1$ とし、 $k = 1$ とおく。

Step 3: $P = P(k)$ とした制約緩和問題(38)(40)を構成する。

Step 4: Step 3 の制約緩和問題(38)-(40)を解き、その解を $(\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k))$ とする。

Step 5: $\hat{W} = \hat{W}(k)$, $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}(k)$, $\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}(k)$ とし $1 + N \times S$ 個の最大化問題(41),(42)を解く。問題(41)の最大解を $\hat{\mathbf{y}}^{(0)}(k)$ 、問題(42)の最大解を

$$\hat{\mathbf{y}}^{(n,s)}(k), n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S,$$

これらに対応した最大値をそれぞれ

$$\varphi^{(0)}(k), \varphi^{(n,s)}(k), n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S$$

とし、これらのさらなる最大値を問題(36)の最大値 $\varphi((\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k)))$ とし、この最大値を与える $\hat{\mathbf{y}}^{(0)}(k)$, $\hat{\mathbf{y}}^{(n,s)}(k)$, $n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S$ の一つを最大化問題(36)の最大解 $\hat{\mathbf{y}}(k)$ とする。

Step 6: $\varphi((\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k))) \leq 0$ ならば、 $(\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k))$ を不確実下でのモデリング駆動型最適化問題(31)(32)の解として計算手順を終了し、 $\varphi((\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k))) > 0$ であれば、 $P(k+1) = P(k) + 1$, $\mathbf{y}^{(P(k+1))} = \hat{\mathbf{y}}(k)$, $k \leftarrow k + 1$ として Step 3 へ戻る。

上記の手順を循環・螺旋型システムズアプローチの過程と関係づけると、Step 1 が帰納段階、Step 2,3 が仮説生成段階、Step 4 が演繹段階に対応し、この過程の結果が仮説生成段階に戻されて、scenario として最悪の状況に対応する不確実変数の新たな想定値 $\hat{\mathbf{y}}(k)$ が Step 5 において生成される。そして、仮説生成段階の Step 6 における判定によって手順を終えることができれば、演繹段階で求められた最適入力 $\hat{\mathbf{u}}(k)$ が実システムへ実装されることになる。一方、Step 6 の判定において手順が継続される場合には、新たな最悪の scenario を与える不確実変数のサンプル $\mathbf{y}^{(P(k+1))} (=$

$\hat{\mathbf{y}}(k)$) の想定により、仮説生成段階の Step 3 において新たな緩和問題が生成される。

3.3 制約緩和法の計算手法

本節では制約緩和法の具体的な計算手法に言及する。制約緩和法の手順では、最悪の scenario を想定した新しい不確実変数のサンプルが入力データとして追加される。このため、新しい近似モデルでの精度を維持するためには、不確実変数のサンプルの増加とともに、基底関数を増設することが必要であり、さらにそのためには、入力データと基底関数内パラメータとの対応付けが容易で、その増設が自動的に可能なラジアル基底関数を用いることが得策である。この場合の近似モデルは、変数 (\mathbf{u}, \mathbf{y}) の空間上の $S \times P(k)$ 個のラジアル基底関数

$$B_{(s,p)}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)}) = b(d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)})), \quad s = 1, \dots, S, p = 1, \dots, P(k) \quad (43)$$

を用いて

$$x_n = \sum_{s=1}^S \sum_{p=1}^{P(k)} w_{nsp} B_{(s,p)}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)}), \quad n = 1, \dots, N \quad (44)$$

と表すことができる。ラジアル基底関数(43)を構成する関数 d, b は、それぞれ (\mathbf{u}, \mathbf{y}) 空間上での $(\mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)})$ からのユークリッド距離関数とガウス関数

$$d(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)}) = \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{v}_u^{(s)} \\ \mathbf{v}_y^{(p)} \end{pmatrix} \right\|$$

$$b(d) = \exp(-d^2/r^2)$$

であり、ラジアル基底関数では、基底関数内パラメータ $\mathbf{v}_u^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)}$ に対し、入力変数の第 s 番目のデータ $\mathbf{u}^{(s)}$ と不確定変数の第 p 番目の想定サンプル $\mathbf{y}^{(p)}$ を用いることで、

$$\mathbf{v}_u^{(s)} = \mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{v}_y^{(p)} = \mathbf{y}^{(p)}$$

と容易に設定される。このため、入力変数のデータの個数 S は一定であるのに対し、制約緩和法の更新とともに個数が増加する不確実変数の想定サンプル $\mathbf{y}^{(p)}$ をそのまま基底関数内パラメータ $\mathbf{v}_y^{(p)}$ とすることで、新

しい基底関数を増設することができる。なお、不確実変数 \mathbf{y} の想定サンプルの個数 $P(k)$ の増加とともに、基底関数(43)の個数も増えるため、それに伴って結合係数の3次元配列変数 $W = \{w_{nsp}\}$ の規模も大きくなり、近似モデル(44)の構造自体も変動する。したがって、Step 3 で構成される $P = P(k)$ とした制約緩和問題(38)-(40)を、ラジアル基底関数を用いた場合で正確に記述すると、反復回数 k を引数とした配列変数や基底関数内パラメータ $W(k), V_y(k)$ を用いて、

$$\min_{(W(k), \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|W(k)\|^2 \quad (45)$$

$$\text{subj. to } f(\mathbf{u}, W(k) \mathbf{B}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}^{(p)}; V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k)))) \leq \sigma, \\ p = 1, \dots, P(k) \quad (46)$$

$$\left| \sum_{s'=1}^S \sum_{p'=1}^{P(k)} w_{ns'p'}(k) b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}^{(p)}; \mathbf{u}^{(s')}, \mathbf{y}^{(p')})) \right. \\ \left. - x_n^{(s)} \right| \leq \varepsilon, n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S, \\ p = 1, \dots, P(k) \quad (47)$$

となる. なお, (45),(46)の $W(k)$ は $w_{ns'p'}(k), n = 1, \dots, N, s' = 1, \dots, S, p' = 1, \dots, P(k)$ を成分とする $N \times S \times P(k)$ の配列変数, $V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k)$ はそれぞれ $V_{\mathbf{u}} = [\mathbf{u}^{(1)} \dots \mathbf{u}^{(S)}], V_{\mathbf{y}}(k) = [\mathbf{y}^{(1)} \dots \mathbf{y}^{(P(k))}]$ であり, また

$$\mathbf{B}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k))) = \\ \begin{bmatrix} b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{y}^{(1)})) & \dots & b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{y}^{(P(k))})) \\ \vdots & & \vdots \\ b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(S)}, \mathbf{y}^{(1)})) & \dots & b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(S)}, \mathbf{y}^{(P(k))})) \end{bmatrix} \\ W(k) \mathbf{B}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k))) \\ = \begin{bmatrix} \sum_{s'=1}^S \sum_{p'=1}^{P(k)} w_{1s'p'}(k) b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(s')}, \mathbf{y}^{(p')})) \\ \vdots \\ \sum_{s'=1}^S \sum_{p'=1}^{P(k)} w_{Ns'p'}(k) b(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(s')}, \mathbf{y}^{(p')})) \end{bmatrix}$$

である.

ところで, 制約緩和問題(45)-(47)は, 制約条件付き最適化問題であり, しかもそれに含まれるラジアル基底関数の凹凸性のために, その大域的な最小点を探索することは必ずしも容易ではない. そこで, この問題にペナルティ法を適用して無制約最適化問題

$$\min_{(W(k), \sigma, \mathbf{u})} c\sigma + \frac{1}{2} \|W(k)\|^2 \\ + \gamma \sum_{p=1}^{P(k)} \{(\max \{f(\mathbf{u}, W(k) \mathbf{B}(\mathbf{d}(\mathbf{u}, \mathbf{y}^{(p)}; V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k)))) \\ - \sigma, 0\})^2 \\ + \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^N \left(\max \left\{ \left| \sum_{s'=1}^S \sum_{p'=1}^{P(k)} w_{ns'p'}(k) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}^{(p)}; \mathbf{u}^{(s')}, \mathbf{y}^{(p')})) - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon, 0 \right\} \right)^2 \} \quad (48)$$

に変換して解くことにする. とくに制約緩和法の更新とともに不確実変数の想定サンプルの個数 $P(k)$ が増加し, 結合係数の配列変数 $W(k)$ の規模も増大するため, 問題(48)の解法には, 大域的な収束性において威力のあるメタヒューリスティクスの使用が望まれる. また, この制約緩和問題の解を $((\hat{W}(k), \hat{\sigma}(k), \hat{\mathbf{u}}(k)))$ とすると, ラジアル基底関数を用いる場合の Step 5 で解く不確実変数 \mathbf{y} に関する最大化問題(41),(42)は, それぞれ

$$\max_{\mathbf{y} \in Y} f(\hat{\mathbf{u}}(k), \hat{W}(k) \mathbf{B}(\mathbf{d}(\hat{\mathbf{u}}(k), \mathbf{y}; V_{\mathbf{u}}, V_{\mathbf{y}}(k)))) - \hat{\sigma}(k) \\ \max_{\mathbf{y} \in Y} \left| \sum_{s'=1}^S \sum_{p'=1}^{P(k)} \hat{w}_{ns'p'}(k) b(\mathbf{d}(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}; \mathbf{u}^{(s')}, \mathbf{y}^{(p')})) \right. \\ \left. - x_n^{(s)} \right| - \varepsilon, n = 1, \dots, N, s = 1, \dots, S$$

となるが, これらの最大化関数の凹凸性や微分不可能性により, これらにもメタヒューリスティクスの適用が望まれる.

また, 無制約問題の(48)における関数の凹凸性は, 主として近似関数の凹凸性によるもので, さらにこの関数の凹凸の形状は, ラジアル基底関数を構成するガウス関数内パラメータ r の大きさに影響される. この

値については, 基底関数内パラメータ $(\mathbf{v}_{\mathbf{u}}^{(s)}, \mathbf{v}_{\mathbf{y}}^{(p)}) (=$

$(\mathbf{u}^{(s)}, \mathbf{y}^{(p)}))$ の個数 D , 入力データやサンプルの総個数 T , 任意の2個の入力データ(サンプル)間の最大距離 d_{max} に対して

$$r = d_{max} / (\sqrt{D} \sqrt{T})$$

とするのが経験的によいとされ¹¹⁾, 制約緩和問題(45)-(47)で用いられるラジアル基底関数では, $D = L + I, T = S \times P(k)$ となる. また, d_{max} については, 入力変数の範囲や不確定変数の範囲がたとえば上下限制約

$$U = \{\mathbf{u} | u_l^{low} \leq u_l \leq u_l^{upper}, l = 1, \dots, L\}$$

$$Y = \{\mathbf{y} | y_i^{low} \leq y_i \leq y_i^{upper}, i = 1, \dots, I\}$$

によって限定される場合には, 便宜上

$$d_{max} \\ = \sqrt{\sum_{l=1}^L (u_l^{upper} - u_l^{low})^2 + \sum_{i=1}^I (y_i^{upper} - y_i^{low})^2}$$

とおくことができる.

4 おわりに

循環・螺旋型システムズアプローチにおいて, 帰納段階のモデリング機能として機械学習を想定し, 仮説生成段階でその機能を統合化したモデリング駆動型最適化問題と称する最適化問題の定式化を2章においておこなった. 入出力データを用いた機械学習の機能は, 単に順方向の前向き推論のモデル化であるのに対し, このモデルを前提とした逆向き推論といえる仮説生成段階の最適化問題の定式化こそがシステムの設計・計画に不可欠である. この統合化によって導入される最適化問題の目的関数には, 機械学習で構築されるモデル自体の信頼性などの評価も導入可能である. また, モデル構築のための学習問題では, 教師データに関する誤差に対して普遍近似定理の考え方に基づく一様ノルムを導入し, 教師データごとの許容誤差に関する不等式制約条件として最適化問題に組み込むことにした. これによって, 機械学習で常に用いられるいわゆる自乗誤差最小化規範では本質的に実現しえない, 多数の教師データ間, および出力成分間の誤差に関する Pareto 最適性も担保させることが可能となる. すなわち教師データないしは出力成分ごとに, 許容誤差パラメータ ε を調整することによって, これらの間のトレードオフの調整が可能となる. このような定式化は,

深層学習が対象としている多層ニューラルネットワークの学習にも導入することが可能であり、学習問題を最適化問題に統合化すること自体、機械学習にとっても新たな価値と有用性をもたらすものと考えられる。

また、許容誤差の不等式制約条件化によって、対象システムに不確実性が存在する場合でも、いわゆるロバスト性基準を満たす近似モデルの構築が可能となる。そこで、第3章においては、不確実下で目的関数に導入される min-max 基準とも統合する形で、不確実下でのモデリング駆動型最適化問題の定式化もおこない、この問題の解法として制約緩和法を提示した。この制約緩和法では、まさに仮説生成段階の機能として、不確実変数の値が想定され、これによって scenario としての新たな近似モデルが構築しなおされる。この近似モデルの再構築の際の基底関数の増設には、ラジアル基底関数が有用であることにも言及した。これは、不確実変数の想定値として採用される機械学習の新たな入力データにリンクする形で新たなラジアル基底関数の増設が可能であるためである。入力データにリンクさせた基底関数の設定は、構築される近似モデルの説明や解釈可能性の付与にもつながる点で、旧来から使われているシグモイド基底関数を始めとする他の基底関数より有望といえる。なお、この制約緩和法における基底関数の増設は、機械学習における Boosting²⁰⁾にも通じる考え方であり、このような観点からも機械学習分野への本解法の概念的な拡張も可能であると考えられる。

参考文献

- 1) T. Kaihara, New trends in systems approaches to realized smarter world, in *Innovative Systems Approach for Designing Smarter World*, ed. by T. Kaihara, H. Kita and S. Takahashi, Springer (2021)
- 2) C. M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer (2006)
- 3) V. Vapnik, *The Nature of Statistical Learning Theory*, Springer (2008)
- 4) R. H. Myers and D. C. Montgomery, *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, Wiley Interscience (1995)
- 5) K. Hornik, M. Stinchcombe and H. White, Multilayer feedforward networks are universal approximators, *Neural Networks*, **2**(5), 359-366 (1989)
- 6) E. J. Hartman, J. D. Keeler and J. M. Kowalski, Layered neural networks with Gaussian hidden units as universal approximations, *Neural Computation*, **2**(2), 210-215 (1990)
- 7) F. Girosi and T. Poggio, Networks and the best approximation property, *Biological Cybernetics*, **63**(3), 169-176 (1990)
- 8) Y. Y. Haimes and D. A. Wismer, A computational approach to the combined problem of optimization and parameter identification, *Automatica*, **8**(5), 337-346 (1972)
- 9) D. R. McGrew and Y. Y. Haimes, Parameter solution to the joint system and optimization problem, *Journal of Optimization Theory and Applications*, **13**(5), 582-605 (1974)
- 10) P. D. Roberts, Multilevel approaches to the combined problem of system optimization and parameter identification, *International Journal of Systems Science*, **8**(3), 273-299 (1977)
- 11) S. Kitayama, K. Yasuda and K. Yamazaki, The integrative optimization by RBF network and particle swarm optimization, *IEEJ Trans. on Electronics, Information and Systems*, **128**(4), 636-645 (2008) (in Japanese)
- 12) K. Shimizu and E. Aiyoshi, A new solution to optimization-satisfaction problems by a penalty method, *Automatica*, **18**(1), 37-46 (1982)
- 13) A. Ben-Tal, L. El Ghaoui and A. Nemirovski, *Robust Optimization*, Princeton University Press (2009)
- 14) H. Xu, C. Caramanis and S. Mannor, Robustness and regularization of support vector machine, *Journal of Machine Learning Research*, **10**(51), 1485-1510 (2009)
- 15) A. Takeda, H. Mitsugi and T. Kanamori, A unified classification model based on robust optimization, *Neural Computation*, **12**(3), 759-804 (2013)
- 16) I. Gilboa, *Theory of Decision under Uncertainty*, Cambridge University Press (2009)
- 17) J. W. Blankenship and J. E. Falk, Infinitely constrained optimization problems, *Journal of Optimization Theory and Applications*, **19**(2), 261-281 (1976)
- 18) K. Shimizu and E. Aiyoshi, Necessary conditions for min-max problems and algorithms by relaxation procedure, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **25**(1), 62-66 (1980)
- 19) M. C. Campi, S. Garatti and M. Prandini, The scenario approach for systems and control design, *Annual Reviews in Control*, **33**(2), 149-157 (2009)
- 20) Y. Freund and R. E. Schapire, A Decision-theoretic generation of on-line learning and application to boosting, *Journal of Computer and System Sciences*, **55**(1), 119-139 (1997)

離散最適化向け進化計算手法 Re-labeling Differential Evolution の改良と離散・連続変数混合最適化問題への適用

○荒木雅則 船木亮平 村田純一 (九州大学)

Improvement of Re-labeling Differential Evolution and Its Application to Mixed Integer Optimization Problems

* M. Araki, R. Funaki and J. Murata (Kyushu University)

Abstract— We improve Re-labeling Differential Evolution (RLDE), an evolutionary computation method for discrete optimization, and confirm its validity in efficient solutions to mixed integer optimization problems, which appear in many practical design problems that reflect individual preferences. In these types of optimization problems, numerical evaluations are not available. RLDE efficiently solves discrete optimization problems by re-labeling indices of alleles of discrete variables in the order of fitness values of solutions when the variables are in nominal scale, but this causes local convergence problems. By setting conditions for re-labeling and making other improvements, RLDE achieved better convergence speed and approximate solution accuracy than DE and conventional RLDE.

Key Words: Interactive Evolutionary Computation, Combinatorial Optimization, Differential Evolution

1 はじめに

補聴器といった医療機器のパラメータの調整¹⁾やファッションデザインの作成²⁾³⁾といった問題は、評価者である各個人の好みや感性によって良し悪しが判断されるものを対象とした最適化問題である。このような、「目的関数が主観的価値観を表し明示的ではない」最適化問題においても評価者が1人で問題を解くことのできる最適化手法として対話型進化計算があり、多岐にわたる分野での応用が期待されている⁴⁾。一方、この対話型進化計算では、評価の繰り返しによる評価者本人の疲労が最適化の結果に影響を与えるため、評価回数や評価方法が制限されるという問題点がある。この疲労問題を解消するため、コンピュータから提示された候補を評価する際のユーザインターフェイスの改良、評価の繰り返し回数自体を減らすためのより高性能な進化計算の発案、高速化手法の導入など様々な取り組みが行われている。実数値最適化向けの進化計算手法である差分進化 (Differential Evolution: DE)⁵⁾を活用した対話型差分進化 (Interactive Differential Evolution: IDE) もその対策の一つであり、DE が持つ対比較という単純な評価方法と高い探索性能により、他手法に比べて疲労低減が可能である⁶⁾。

また最適化問題において、評価される対象となる物体やデザインの特徴は、解を構成する各変数の値によって決定づけられる。そしてそれらの解は、離散変数、連続変数、もしくはその両方で構成される。一方で、最適化手法の中には離散変数向けの手法、連続変数向けの手法などその適用に制約があるものが多い。そのため、実際の応用を想定すれば、解に離散変数と連続変数のどちらを含む最適化問題に対しても統一かつ柔軟な適応性を示す高性能な最適化手法の開発が最適化技術分野における重要な課題の1つであると考えられる⁷⁾。これまでは、本来連続値最適化向けである手法を、離散変数を含む最適化問題にも適用するための研究が多く行われてきた⁸⁾⁹⁾。しかし、離散変数が名義尺度、すなわち「要素を識別するために割り振られた識別番号」であり、適切な順序関係を持たない場合があることに注意しなければならない。連続変数の値は

距離や順序を定義できるため、連続値最適化向けの最適化手法もこの距離や順序に基づいて探索や収束の判定を行うことが多い。そのためこのような手法を、離散変数を含む最適化問題向けに適用する際には、離散変数値を意味のある数値として扱えるかどうか探索性能や探索の安定性に関わる。本論文で取り上げる Re-labeling Differential Evolution (RLDE)¹⁰⁾は、連続最適化向けの DE を離散最適化向けに改良した手法の一つであり、名義尺度の離散変数値が適切な順序になるよう、計算途中で変数値を目的関数値の順に応じて割り振り直し、これにより効率的な探索を実現している。

しかしながら、RLDE には改善すべき問題点もある。第一の問題点は、再割り振り操作によって局所最適解に陥りやすくなることがあるということである。この問題の発生には2つの原因があり、1つ目は、探索開始時に個体 (解候補) の分布に偏りがあるときや、探索開始後の早い段階で解空間を満遍なく探索できていないときに再割り振り操作を行うこと、2つ目は、問題の難易度に対して再割り振り操作を開始する世代が早すぎることである。初期個体分布やその後の探索に偏りがある場合、目的関数に関する広範囲かつ十分な情報が入手できず、この不十分な情報に基づく再割り振りは不適切な割り振りになる。これは目的関数が複雑で難易度が高い場合により顕著になる。このことによって大域最適解が求まらない可能性が高まる。

第二の問題点は、局所最適解へ収束してしまった場合にそこから脱出するための仕組みを DE や RLDE が持っていないことである。DE では個体間差分ベクトルを用いて子個体を生成する探索によって、初期に大域的探索を行うため局所最適解に陥りにくい。しかしながら、RLDE では前述の局所最適解に陥る問題が起こったとき、再割り振り操作はその局所最適解への収束を促進するように行われるので、解候補の多様性が急速に失われ、DE に比べ局所最適解から脱出することが極めて困難となる。

そこで本論文では、RLDE が抱える上記の問題点を解消し、さらなる効率的な探索を行うために改良を行った上で、実際の対話型最適化問題で多く見られる散変数と連続変数の混合最適化問題に適用することで、提

案手法の有用性を検証する。

2 Re-labeling Differential Evolution

2.1 Differential Evolution

DE は、実数値最適化向けの進化計算手法であり、アルゴリズムが比較的単純であるにも関わらず優れた探索性能を持つことから、近年注目を集めている。DE における探索の特徴は子個体の生成時に差分ベクトルを用いる点にある。各変数の値の 2 個体間の差を子個体の生成に活用することで、個体が広く分散している探索序盤では大域的な探索を、個体が収束してくる探索終盤では局所的な探索を行うことができ、効率的である。さらに、DE は 1 つの親個体に対し 1 つの子個体を生成し優れた方を選択することで二者択一の評価方法を実現しているため、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) のような全個体を評価し各々に評価点を与える評価方法によるものと比べて、対話型進化計算に適した手法であるといえる。

以下に DE の演算手順を記す。各個体は $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_j, \dots, x_D)$ のように、 D 次元ベクトルになっている。

1. 個体群を初期化する。
2. target vector \mathbf{x} を決定する。これは N 個の全個体から順番に選ばれる。
3. \mathbf{x} 以外の個体から 3 個体 $\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_{r1}, \mathbf{x}_{r2}$ をランダムに選択する。
4. 次式より mutant vector \mathbf{m} を生成する。 $F(F > 0)$ はスケール係数と呼ばれる。

$$\mathbf{m} = \mathbf{x}_b + F(\mathbf{x}_{r1} - \mathbf{x}_{r2}) \quad (1)$$

5. \mathbf{x} と \mathbf{m} を交叉し、trial vector \mathbf{u} を生成する。二項交叉では、交叉率 $C_r (0 \leq C_r \leq 1)$ 、 $(0,1)$ の実数乱数 rand_j 、および $[1, D]$ の整数乱数 j_r に基づき、変数ごとに \mathbf{x} と \mathbf{m} のどちらの値を \mathbf{u} に引き継ぐかを決定する。

$$u_j = \begin{cases} m_j & \text{if } (\text{rand}_j \leq C_r \text{ or } j = j_r) \\ x_j & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

6. \mathbf{x} と \mathbf{u} を比較し、適応度 (目的関数値) が優れたほうを新たな \mathbf{x} として上書きする。
7. ほかの $N - 1$ 個の個体についても順次 \mathbf{x} として扱い、3 から 6 の操作を施す (1 世代)。
8. 2 から 7 の操作を満足解が得られるまで、または最大探索世代数 G_{max} になるまで繰り返す。

しかし、前述のように今回取り扱う離散変数と連続変数の混合最適化問題においては、目的関数の変数のうちの離散変数が名義尺度、すなわち「物を識別するために割り振られた識別番号」である場合があり、その識別番号の割り振り方には順序関係が考慮されているものとそうでないものが考えられる。また特に対話型最適化問題においては、識別番号の割り振り方に順序関係が考慮されている場合でも個々人の主観的価値観次第ではそれが適切な順序関係ではないことがある。このように、本来実数値最適化向け手法である DE を用いて、問題に応じた順序関係を持つような識別番号の割り振り方がなされないままの離散変数を含む最適化問題を解くと、DE における効率的な探索性能の要

である個体間差分ベクトルが大域的探索と局所探索の指標として機能せず、適切な局所探索を行えないため、探索性能の低下や探索の不安定さを招くことがある。

2.2 Re-labeling Differential Evolution

RLDE では、探索を行いながら優れた適応度が期待できる識別番号が数値的に近くなるように割り振り直す操作を行うことで、目的関数の見かけの形状を単調に変え、個体間差分ベクトルを大域的探索と局所探索の指標として正しく機能させるとともに、局所探索を適切に行うことができる。この操作は、識別番号ごとに優れた適応度が期待できる度合いを表す優良度を求める第 1 段階と、その優良度をもとに識別番号を新しく割り振り直す第 2 段階に分けられる。

第 1 段階では、識別番号ごとに優良度を求める。しかし、IDE における評価者は、各変数値に応じた特徴を持つ物体やデザインとして表現される個体に対して対比較を行うだけで、各個体に評価点を与えているわけではない。これを踏まえると、各個体の適応度自体を再割り振りの指標として用いることはできない。そこで、優れた適応度を持つ個体の特徴に対応する識別番号を推定する方法が新たに提案されている。DE では、探索が進むにつれて大域最適解やそれに準ずる局所最適解付近に個体群全体が収束していくとともに適応度の劣る個体は集団から淘汰され、残った個体には共通の識別番号が現れるようになる。そのため、これらの識別番号が優れた適応度の要因となる特徴に対応していると考えられる。すなわち、個体群の中に頻出する識別番号ほど優れているとして、高い優良度を与える。

第 2 段階では、識別番号を優良度が高い順に小さく (または大きく) なるように割り振り直す。ここでは第 1 段階で求めた優良度の降順に識別番号をソートする。ただし、優良度が等しい識別番号に関しては直前の世代での識別番号の大小関係を保持するように新しい識別番号を割り振る。これらの操作は各離散変数について独立して行われる。例として、1 から 6 の自然数を識別番号としてとる離散変数について再割り振り操作を行う様子を Fig. 1 に示す。(a) は個体が空間内に広く分布した初期状態であり、探索によって (b) のように個体群がある程度収束した後、(c) のように再割り振り操作が行われる。

また、進化計算アルゴリズムに解くべき問題を与え、同アルゴリズムが返した解を使用する人やソフトウェアなどの主体は、RLDE によって再割り振りされた新たな識別番号を正しく認識することができないため、これらの識別番号再割り振り操作は進化計算アルゴリズムの内部で完結している必要がある。そこで、RLDE では本来の識別番号と再割り振り操作による新たな識別番号の相互関係を多次元配列 R に保持しておく。配列 R の更新は毎世代行う。

なお、RLDE では離散変数を連続変数と同様に扱うため、実際には探索時の各個体に含まれる離散変数の値は離散値ではなく実数値である。対比較評価を行うときに限り実数値を離散値に丸めた値を遺伝子とする個体が提示され、再割り振り時は実数値の整数部分を新たな識別番号に置き換える計算が行われる。

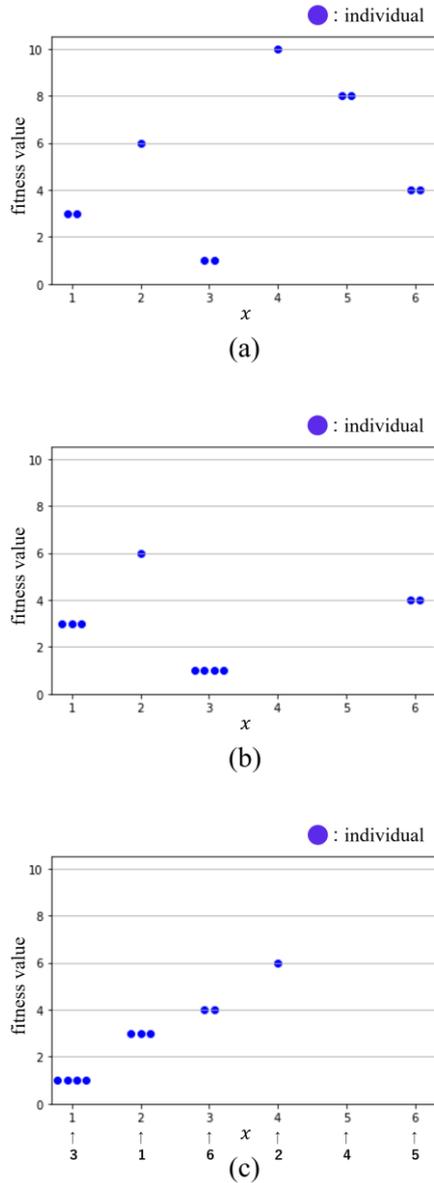


Fig. 1: The process that RLDE sorts indices of alleles.

3 提案手法

RLDE の開発により、種々の離散・連続変数混合最適化問題に対話的に解く効率的な解法が得られた。しかしこの RLDE には、十分な探索が行われなままの再割り振り操作によって局所最適解に陥りやすくなる可能性があるという問題や、局所最適解から脱出するのが困難になるという問題がある。本論文ではこれらの問題の解決及び RLDE のさらなる高性能化のため、3つの手法を提案する。手法1では局所収束の防止、手法2では局所最適解からの脱出、そして手法3では事前情報を利用した新たな交叉方法による収束の高速化をそれぞれ図る。

3.1 初期個体の均等配置と個体群エントロピーによる再割り振り開始条件の設定 (手法1)

従来の RLDE では、探索開始時に個体分布に偏りがあるときや、探索開始後の早い段階で解空間を満遍な

く探索できていないときに再割り振り操作を行ったり、問題の難易度に対して再割り振り操作を開始する世代が早すぎたりすることで局所最適解に陥る危険性があった。また、あらゆる難易度の最適化問題への適用が想定されるにも関わらず、問題の難易度に応じて識別番号の再割り振り開始世代を決める統一的な指標が存在しないために、問題によっては再割り振りが進化計算特有のランダム要素に大きく影響を受けて誤ったものになったり、再割り振りによる効果がほとんど得られなかったりする可能性がある。ここでは、個体群の収束具合を、エントロピーによって数値的に表現し再割り振り操作の開始基準に利用するとともに、初期個体をできるだけ均等になるように配置することで進化計算特有のランダム要素を低減し、エントロピーの初期値を統一する手法を提案する。

まず、個体群の収束具合をエントロピーによって数値的に表現し、再割り振り操作の開始基準に利用する手法について説明する。従来の RLDE における再割り振り操作では、優れた適応度が期待できる度合いを表す優良度を、識別番号ごとに個体群の中での頻出度によって決めていることから、探索が進み個体群がある程度収束したタイミングで再割り振り操作を開始することで、新たな識別番号が探索を適切に反映したものになる。そこで本論文では、各離散変数がとり得る全ての値に対して、その値の個体群内での出現確率を求め、それをもとに各離散変数がとる値のエントロピーを求める。このとき、エントロピーは初期の個体群で最大に、そして個体群が収束するほど小さくなる傾向があり、その個体群の収束速度は問題の難易度に依存する。したがって、このエントロピーを正規化したうえで、あるしきい値を指定することで、あらゆる難易度の問題に共通の再割り振り開始条件を設定することができる。

以下では、各離散変数に関する個体群のエントロピーを用いた再割り振り開始世代を決めるための演算手順を記す。本論文では特徴が異なる(A), (B)の2条件を考案した。その優劣や特徴は実験を通して比較検討する。

1. $k(k = 1, \dots, D_d)$ 番目の離散変数において、識別番号 $l(l = 1, \dots, A_k)$ の個体群内出現回数 $a_{k,l}$ を数え、それを個体数 N で割って個体群内出現率 $p_{k,l}$ を求める。

$$p_{k,l} = \frac{a_{k,l}}{N} \quad (3)$$

2. $p_{k,l}$ から、 k 番目の離散変数に関する個体群の正規化エントロピー $H_k (0 \leq H_k \leq 1)$ を求める。ただし、(4)式において $H_{k,max}$ は k 番目の離散変数に関する個体群のエントロピーの最大値であり、 $p_{k,l} = 0$ のとき、 $\log p_{k,l} = 0$ とする。

$$H_k = - \sum_{l=1}^{A_k} (p_{k,l} \log p_{k,l}) / H_{k,max} \quad (4)$$

3. 以下の2条件(A)(B)のどちらかを再割り振り開始条件とする。

(A) まず、全離散変数について H_k を求め、正規化エントロピーの全離散変数平均 \bar{H} を求める。

$$\bar{H} = \sum_{k=1}^{D_d} H_k / D_d \quad (5)$$

そして、 \bar{H} が事前に指定したしきい値 H_{ref} よ

りも初めて小さくなったとき、次の世代から全離散変数で一斉に毎世代配列 R の更新を行う。

- (B) H_k が事前に指定したしきい値 H_{ref} よりも初めて小さくなったとき、 k 番目の離散変数では次の世代から毎世代配列 R の更新を行う。

次に、初期個体を均等に配置する手法について考える。初期個体を均等に配置することは、初期探索を満遍なく行うことにつながり、これにより局所最適解に陥る危険性を低減できる。また、同じ問題を複数回解く際に、1つの離散変数がとり得る値の総数と探索に用いる個体数が同じであれば、毎回エントロピーの初期値が同じ値になるという利点ももたらす。

初期個体を均等配置する方法はいくつか考えられる。まず、3.3節で述べる変数間の交互作用を考慮すると、Fig. 2(a)のように各変数の定義域を等分し、格子点すべてに個体を生成するのが厳密な均等配置の方法である。しかし、変数の数やそれらの変数の定義域によって必要な個体数が変動するためこの方法は現実的ではない。さらに、RLDEでは各離散変数で独立に再割り振り操作が行われることから、再割り振り操作の基準となるエントロピーに関しても各離散変数で独立に求める。したがって本論文では、Fig. 2(b)のように個体数を固定したうえで、ある単独の変数に注目したときに各個体でその変数にとる値の間隔が等しくなるように初期個体を配置する。具体的には、各変数で独立にその定義域を(個体数-1)個の同じ長さの区間に分割し、分割点と最大値最小値の値を個体にランダムに割り当てる操作をすべての構成変数に関して繰り返す。なお、この操作は実数変数に関する大域的探索に対しても有効であると考えられるため、各実数変数につい

ても行う。

3.2 単純突然変異の導入 (手法 2)

従来のRLDEにおいて早期に局所最適解に陥る危険性が高いことはこれまでも述べてきた。この問題は手法1によってランダム要素を減らし、適切な世代から再割り振り操作を開始することである程度軽減されると考えられるが、再割り振り操作は個体が集まりつつある局所最適解への収束をさらに促すように行われるので、一度局所最適解に陥ってしまうと一般的なDEよりもそこからの脱出が困難である。そこで、局所最適解からの脱出を図り、最終的によりよい満足解を得るため、GAで行われる操作である単純突然変異をRLDEにも取り入れる。GAでは選択、交叉を経て新たに生成された子個体に対して突然変異を行う。DEにおける子個体はトライアルベクトルであるため、このトライアルベクトルに対してGAと同様の突然変異を施す。なお、ここでの「単純突然変異」とはGAにて行われる、個体の変数を一定確率でランダムな値に書き換える操作を意味し、DEでの変異ベクトルの生成に関わる突然変異とは無関係である。突然変異を行うのはトライアルベクトル \mathbf{u} を生成し、ターゲットベクトルとの対比較を行う直前であり、突然変異率 M_p ($0 \leq M_p \leq 1$)に基づいて \mathbf{u} に含まれる各変数 u_j ($j = 1, \dots, D$)に対して(6)式に示す操作をする。 $rand_x$ は(0,1)の乱数であり、各個体の j 番目の変数 x_j の値の範囲が $[x_{j,min}, x_{j,max}]$ であるとき、 $rand_x$ は $[x_{j,min}, x_{j,max}]$ の乱数である。突然変異率が大きいほど乱数 $rand_x$ の影響が大きくなり、よりランダムな探索になる。

$$u_j = \begin{cases} rand_x & \text{if } rand_j \leq M_p \\ u_j & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

例えば解が $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6)$ と表され、 $j = 3$ で突然変異が起こるときはFig. 3のようになる。

\mathbf{u}	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6
	3	2.1	0.52	4.0	1	5.43
	3	2.1	6.30	4.0	1	5.43

Fig. 3: An example of mutation.

3.3 事前情報を利用した交叉方法の見直し (手法 3)

最適化問題の中には、変数の間に交互作用を持つものがある。交互作用とは、ある変数の値によってほかの変数の値の良し悪しが左右されることを指す。シャツのデザインを最適化する問題を例にとると、シャツの模様の良し悪しが色によって変化する場合、模様と色の間に交互作用があると言える。ここでは、変数間交互作用を持つ変数の組み合わせの一部が事前情報として得られている場合に、それを利用して交叉の方法を改良し、収束の高速化を図る。ターゲットベクトルと変異ベクトルの交叉には二項交叉がよく使われるが、二項交叉は変数間の交互作用を考慮していない。この場合、互いに関連しながら目的関数の値に影響を与える複数の変数どうしの数値の関係が交叉によって崩れてしまうことがあり、効率的な探索にならないことがある。そのため先行研究では、DEの演算の中で変数間の交互作用を推定し個体の効率的な進化に活用するものもある¹¹⁾。本論文では交互作用の推定を行わず、

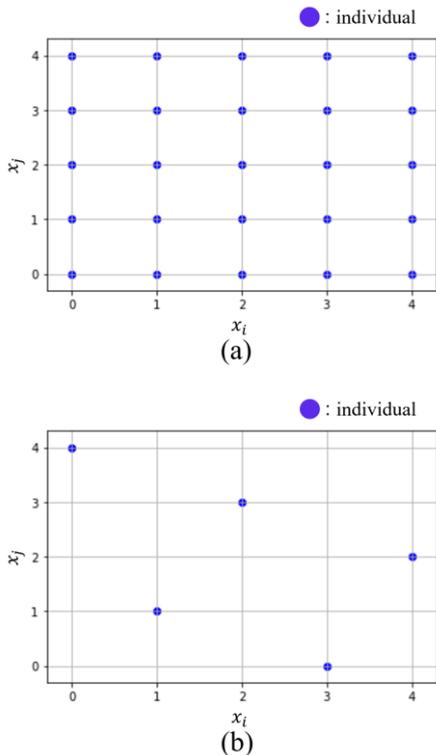


Fig. 2: Two ways to place individuals at equal intervals.

変数間交互作用の一部が事前に分かっているものとして多次元配列 xI で表現しておく。そして、交互作用を持つことが分かっている複数の変数値を、ターゲットベクトルと変異ベクトルの変数値のうちどちらか一方から一斉に引き継ぐことで、互いに関連しながら目的関数値に影響を与える変数値の組み合わせが交叉によって崩されることを防ぐ「変数間交互作用を考慮した二項交叉」（以降 Binomial Crossover Considering Interactions among decision variables: BCCI と略記）を実現する。 xI の長さ L 及びその要素はそれぞれ、既知の交互作用の総数と解ベクトルの要素番号の組になっている。ただし要素の長さが1のときは、その解ベクトルの要素番号を持つ変数に関してほかの変数との交互作用が分かっていることを表す。例えば解が $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ と表されるとき $xI = [[1,2], [3,4,6], 5]$ ならば、 x_1 と x_2 、 x_3 と x_4 と x_6 の間には交互作用があるとわかっており、 x_5 はほかの変数との交互作用が不明である。このとき交叉は Fig. 4 に示す

x	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
	3	2.1	0.05	5.2	1	2.30
m	m_1	m_2	m_3	m_4	m_5	m_6
	0	1.0	0.52	4.0	0	5.43
u	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6
	3	2.1	0.52	4.0	1	5.43

Fig. 4: An example of BCCI.

ように行われる。

4 実験条件

4.1 テスト問題

本論文では、3つのテスト問題P1~P3を用いてコンピュータシミュレーションによる実験を行う。

各問題の詳細は以下に示す通りである。

P1~P3 共通の条件：

- 変数の数 $D = 6$
- 各変数のとる値
解が $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ と表されるとき、
 - ・ x_1, x_3, x_5 は離散変数、
 $x_1, x_3, x_5 \in \{0,1,2,3,4,5,6,7,8,9\}$
 - ・ x_2, x_4, x_6 は連続変数、 $x_2, x_4, x_6 \in [0,5]$
- 既知の変数間交互作用
 $xI = [[1,2], [3,4], [5,6]]$
すなわち、 x_1 と x_2 、 x_3 と x_4 、 x_5 と x_6 の間に交互作用があることが事前に分かっているものとする。ただし実際には全変数間で交互作用を持つ。
- 問題の詳細
各問題は、目的関数 $f_p(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ ($p = 1,2,3$)を最小にする解を求める問題である。 f_p は対話型最適化問題の評価者の主観的価値観を疑似的に表現した関数であり、いずれも多峰性混合ガウス関数 $G(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ (ただし G は全問題で共通)、 $g_{p1}(x_1, x_2)$ 、 $g_{p2}(x_3, x_4)$ 、 $g_{p3}(x_5, x_6)$ の和により構成される。これにより、すべての変数間で交互作用があるが、さらに特定の変数間で特に強い交互作用があり、目的関数値に影響を与

えるような関数を実現している。また、手法1の検証のため、各問題では g_{p1} 、 g_{p2} 、 g_{p3} の難易度や、目的関数値への影響の強さを変化させている。具体的には、峰の数はP1、P2では2つ、P3では6つであり、最も高い峰の高さの比はP1では $G: g_{11}: g_{12}: g_{13} = 3:1:1:1$ 、P2、P3では $G: g_{p1}: g_{p2}: g_{p3} = 6:1:1:1$ となっている。その結果、目的関数の難易度は $f_1 < f_2 < f_3$ の順に高くなる。

以下では、各問題の目的関数について記す。まず多峰性ガウス関数 G は次式で与えられる。

$$G = - \sum_{i=1}^6 a_i \exp \sum_{j=1}^6 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

- G の峰の高さ：

$$(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6) = (30.0, 25.0, 20.0, 15.0, 10.0, 5.0)$$

- 平均：

$$m = \begin{bmatrix} 7.0 & 1.0 & 5.0 & 2.0 & 3.0 & 4.0 \\ 2.0 & 5.0 & 3.0 & 3.0 & 5.0 & 4.0 \\ 9.0 & 3.0 & 2.0 & 1.0 & 9.0 & 1.0 \\ 1.0 & 4.0 & 8.0 & 2.0 & 5.0 & 2.0 \\ 3.0 & 4.0 & 4.0 & 2.0 & 8.0 & 1.0 \\ 5.0 & 5.0 & 2.0 & 4.5 & 9.0 & 5.0 \end{bmatrix}$$

m は m_{ij} を (i, j) 成分とする行列である。

- 分散：

$$s = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

s は s_{ij} を (i, j) 成分とする行列である。

P1：

$$f_1 = \frac{1}{2}(G + g_{11} + g_{12} + g_{13})$$

$$g_{11} = - \sum_{i=1}^2 b_i \exp \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{12} = - \sum_{i=1}^2 b_i \exp \sum_{j=3}^4 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{13} = - \sum_{i=1}^2 b_i \exp \sum_{j=5}^6 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

g_{11} 、 g_{12} 、 g_{13} の峰の高さ： $(b_1, b_2) = (10.0, 5.0)$

f_1 の最小値： $-30.545 \dots$

P2：

$$f_2 = \frac{1}{2}(G + g_{21} + g_{22} + g_{23})$$

$$g_{21} = - \sum_{i=1}^2 c_i \exp \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{22} = - \sum_{i=1}^2 c_i \exp \sum_{j=3}^4 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{23} = - \sum_{i=1}^2 c_i \exp \sum_{j=5}^6 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

g_{21}, g_{22}, g_{23} の峰の高さ: $(c_1, c_2) = (5.0, 2.5)$

f_2 の最小値: $-30.363 \dots$

P3 :

$$f_3 = \frac{2}{3}(G + g_{31} + g_{32} + g_{33})$$

$$g_{31} = - \sum_{i=1}^6 d_i \exp \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{32} = - \sum_{i=1}^6 d_i \exp \sum_{j=3}^4 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

$$g_{33} = - \sum_{i=1}^6 d_i \exp \sum_{j=5}^6 \left\{ \frac{-(x_j - m_{ij})^2}{2s_{ij}^2} \right\}$$

g_{31}, g_{32}, g_{33} の峰の高さ:

$(d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6) = (5.0, 4.0, 3.0, 2.0, 1.0, 0.5)$

f_3 の最小値: $-31.075 \dots$

4.2 比較方法

本論文では、4.1節の各テスト問題に対して、DE、従来のRLDE、本論文の提案手法を導入したRLDEを適用し、各提案手法の特徴を考察する。実験を通して共通の条件は以下の通りである。

実験条件:

- 個体数 $N = 10$
手法1を用いない場合、各個体は空間内にランダムに生成される。
- 最大探索世代数 $G_{max} = 100$
- スケール係数 $F = 1.2$
- 交叉率 $C_r = 0.4$
手法3を用いない場合の交叉方法は通常の二項交叉。
- 手法2を用いる場合の突然変異率 $M_p = 0.05$
- RLDEに関して
 - ・ 初期状態では各離散変数の識別番号の割り振りはランダムに決める。
 - ・ 手法1を用いる場合、正規化エントロピーのしきい値は条件(A)(B)共通で $H_{ref} = 0.7$ とする。手法1を用いない場合、再割り振り操作は2世代目より行う。
- 試行回数100

5.1, 5.2, 5.3, 5.4節ではそれぞれ、手法1, 手法2, 手法3, またそのすべてを導入したRLDEに関してDEや従来のRLDEとの比較を行う。また、手法3は最適化問題の事前情報を活用するものでありDEに対しても有効であることが期待できるため、DEにも導入して検証する。比較項目は以下の2つである。

比較項目:

1. 各世代での最良値について、その平均値を100回の試行結果から求め、最良値平均の100世代目までの推移について比較を行う。
2. 条件(A)(B)間の比較のため、各世代での再割り振り開始回数を記録し、再割り振り開始世代の平均と分散を比較する。これは5.1節でのみ行う。

5 実験結果と考察

5.1 手法1

Fig. 5はP2について、DE、従来のRLDE、手法1の条件(A)(B)を取り入れたRLDEを用いて解き、100世代目までの最良値平均の推移を表したグラフである。まず、従来のRLDEを用いて解いた場合、DEよりも序盤の収束速度を上昇させることができた一方で、DEに比べ中盤以降の最良値平均の精度(f_p の最小値にどれだけ近いかを指す)は悪化している。次に手法1を取り入れたRLDEについて見ると、約10世代目以降再割り振りの影響が表れ始め、RLDEと同等以上に急速な収束が起きたのち、最終的にDEに近い最良値平均が得られた。これらはP1, P3についても同様であった。また特にP1については、DEと同程度の収束値を得るまでの世代数をDEよりも20~30世代ほど短縮できた。このことから、初期個体の均等配置とエントロピーによる再割り振り開始条件によって適切な識別番号再割り振り操作が行われた結果、RLDE本来の特徴である収束の速さと、局所収束の起こりにくさを両立できたと考えられる。また、条件(A)と(B)については差がほとんど見られなかった。さらなる考察のため、以下では条件(A)(B)について、再割り振り開始世代の平均と分散を比較する。

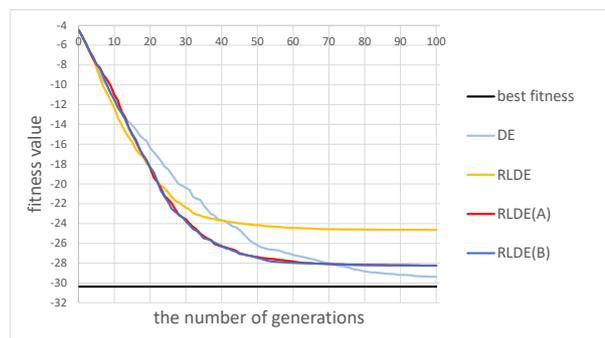


Fig. 5: The average convergences by using proposed method No.1 in P2.

まず Table 1 より、再割り振り開始世代の平均について考察する。目的関数の難易度は $f_1 < f_2 < f_3$ の順に高くなっているため、個体群の収束はこの順に遅くなる。実際に、全ての開始条件と着目変数の組み合わせにおいて再割り振り開始世代の平均は $P1 < P2 < P3$ の順に大きくなっており、個体群の収束が遅いほど再割り振り開始も遅くするというエントロピー条件が正しく

機能していると考えられる。また、条件(B)を用いた場合、変数によって再割り振り開始が1~4世代程度異なるが、その平均は条件(A)を用いた再割り振り開始世代平均値とおおよそ一致する。次に Table 2 に示した、100回の試行における再割り振り開始世代の分散について考察する。まず Table 1 と Table 2 を比較すると、再割り振り開始世代の平均が大きいほど分散も大きい傾向があることが分かる。つまり、上述の Table 1 の結果が示すように、難易度が高いほど再割り振り開始世代は遅くなることから、難易度が高いほど再割り振り開始世代はばらつきやすいと言える。さらに Table 2 より、条件(B)を用いたときの分散の平均は、条件(A)を用いたときの分散よりも大きいことも分かる。

以上のことから、各条件(A)(B)の性質について考察する。条件(B)では、ある変数で偶然収束が早かったり遅かったりした場合に、再割り振り開始世代が直接影響を受けてばらつきやすい一方、条件(A)では、エントロピーの平均値を用いることで偶然性の影響を受けづらくなり、再割り振り開始世代のばらつきが抑制されていると考えられる。しかし、条件(B)を用いた場合は、複数の離散変数間で収束のしやすさに差がある場合にも個体群の収束に基づいた正確な再割り振りが行われやすく、その開始世代は条件(A)を用いた場合と平均的にはほぼ等しい。さらに2つの条件で最良値平均の推移にほぼ差がないことから、問題の難易度や個体群の収束速度に合わせた再割り振りの開始条件としてより適しているのは(B)だと考えられる。

Table 1: The average generations of first re-labeling in each problem.

Condition - Variable	(A) - All	(B) - x_1	(B) - x_3	(B) - x_5	(B) - All (Average)
P1	9.88	10.87	9.09	9.58	9.85
P2	10.92	11.06	9.31	10.68	10.35
P3	11.75	14.19	9.95	11.00	11.71

Table 2: The variance of generations of first re-labeling in each problem.

Condition - Variable	(A) - All	(B) - x_1	(B) - x_3	(B) - x_5	(B) - All (Average)
P1	1182.56	4655.31	2518.19	2946.36	3373.29
P2	1913.36	4129.64	2727.39	4795.76	3884.26
P3	3228.75	13482.03	2856.75	6732.00	7690.26

5.2 手法2

Fig. 6 は P2 について、DE、従来の RLDE、手法2を取り入れた RLDE を用いて解き、100世代目までの最良値平均の推移を表したグラフである。手法2を取り入れた RLDE を用いて解いた場合、DE と同程度かそれ以上の最終世代での最良値平均の精度が得られた。

また、これらは P1, P3 についても同様であった。従来の RLDE では局所収束の影響で中盤以降最良値平均がほぼ横ばいになるが、突然変異を導入することで局所最適解からの脱出が図られ、さらに探索が進んだものと考えられる。また探索序盤に突然変異が起きても最良値平均の精度や収束速度の低下などはみられなかった。このことから、突然変異によるランダム要素がもたらす悪影響は序盤の比較的大域的な探索においてあまり大きくないことも分かる。

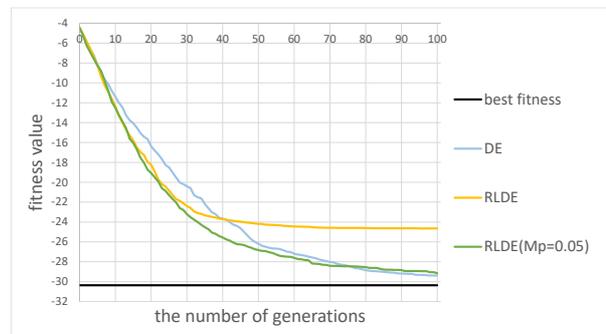


Fig. 6: The average convergences by using proposed method No.2 in P2.

5.3 手法3

Fig. 7 はそれぞれ P2 について、DE、従来の RLDE、手法3を取り入れた DE、手法3を取り入れた RLDE を用いて解き、100世代目までの最良値平均の推移を表したグラフである。手法3を取り入れた RLDE を用いて解いた場合、従来の RLDE を用いて解くよりもそれぞれ探索序盤の収束速度が上昇した。また、これらは P1, P3 についても同様であった。したがって、変数間依存関係を考慮した二項交叉を行い、目的関数の値に大きく影響する変数値の組み合わせを崩さないようにすることで、前世代までの探索情報を利用したより効率的な探索が行えたと考えられる。また DE についても、手法3の導入により同様の効果が得られた。一方で最終世代での最良値平均の精度については、DE と RLDE のそれぞれで従来手法からの改善が見られなかったため、変数間相互作用を考慮した二項交叉による効果は収束の高速化に限られるものと考えられる。

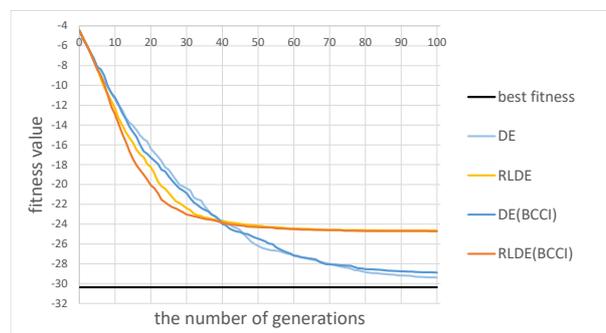


Fig. 7: The average convergences by using proposed method No.3 in P2.

5.4 まとめ

Fig. 8 は P2 について、DE、従来の RLDE、手法1~3をすべて取り入れた RLDE を用いて解き、100世代

目までの最良値平均の推移を表したグラフである。手法 1~3 をすべて取り入れた場合においても Fig. 8 から分かるように、探索序盤では従来の RLDE 以上に急速な収束が見られ、中盤以降も最良値が横ばいになることがなく、探索を通じて DE 以上の最良値の精度が得られていることから、離散・連続変数混合最適化問題において、本論文の各提案手法による効果があると確認できた。

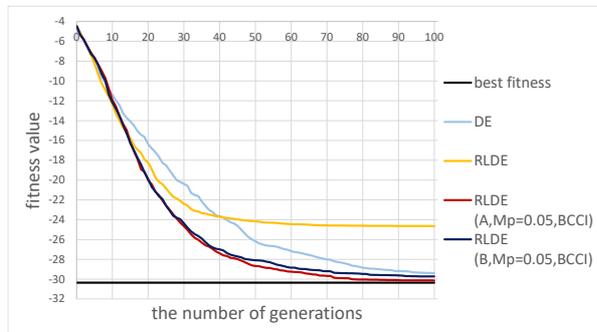


Fig. 8: The average convergences by using all proposed methods in P2.

6 結論と今後の課題

本論文では、対話型問題によくみられる離散変数と連続変数の混合最適化問題に着目し、それに対応できる最適化手法としてRLDEを改良して適用し、その有用性を確かめた。従来のRLDEには局所収束が起りやすいこと、局所最適解から脱出しにくいことという2つの問題が存在するため、この問題を解消しながらRLDEのさらなる高性能化を図るために3つの手法を提案し、そのうえで離散変数と連続変数の混合最適化問題についてシミュレーション実験を行った。実験では、最良値平均の推移をDEや従来のRLDEと比較することで、従来のRLDE以上の収束速度とDE以上の近似解精度が得られることが確かめられた。収束の高速化と解の高精度化は、対話型最適化問題においてユーザ疲労を低減しつつより満足度の高い解を提供できるという効果があり、実際の問題への応用にも期待することができる。

今後の課題としては、正規化エントロピーのしきい値や突然変異率といったパラメータを変化させた場合の性能比較や、変数間相互作用を配列で表現せずに計算途中で推定を行う手法の導入が挙げられる。両者ともさらなる検証を行うことで事前にユーザが決定するパラメータや配列を削減でき、様々な問題に対してRLDEを効果的に適用できるようになると考えられる。

参考文献

- 1) 船木, 高木, 中川, 永田, 松本 : 人工内耳パラメータフィッティングへの対比較ベース対話型差分進化の適用, 第 6 回進化計算学会研究会, 179/181 (2014)
- 2) 鬼沢, 緒形 : インタラクティブ服飾デザイン支援システム, 日本感性工学会論文誌, 9(1), 25/32 (2009)
- 3) 伊藤, 廣安, 三木, 横内 : 対話型遺伝的アルゴリズムにおける嗜好の多様性に対応可能な個体生成方法, 人工知能学会論文誌, 24(1), 127/135 (2009)
- 4) H. Takagi : Interactive Evolutionary Computation: Fusion of the Capabilities of EC Optimization and Human Evaluation, Proceedings of the IEEE, 89(9), 1275/1296 (2001)
- 5) R. Storn and K. Price : Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces, Journal of Global Optimization, 11(4), 341/359 (1997)
- 6) H. Takagi and D. Pallez : Paired Comparison-based Interactive Differential Evolution, World Congress on Nature and Biologically Inspired Computing (NaBIC), 475/480 (2009)
- 7) 北山, 安田 : Particle Swarm Optimization による混合整数計画問題の一解法, 電気学会論文誌 C, 125(5), 813/820 (2005)
- 8) G.C. Onwubolu and D. Davendra : Differential Evolution: A Handbook for Global Permutation-Based Combinatorial Optimization, 81/120, Springer (2009)
- 9) A.L. Maravilha, J.A. Ramirez, and F. Campelo : Combinatorial Optimization with Differential Evolution: A Set-Based Approach, Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO), 69/70 (2014)
- 10) R. Funaki, H. Takano, and J. Murata : Re-Labeling Differential Evolution for Combinatorial Optimization and Interactive Evolutionary Computation, SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration, 9(1), 18/25 (2016)
- 11) 高濱, 阪井 : 差分進化における相関係数に基づく遺伝子のグループ化とグループ単位の交叉の提案, 情報処理学会研究報告, 2018-MPS-120(8), 1/6 (2018)

多段階評価を取り入れた対話型差分進化の高速化

○野田 和弥 (九州大学) , 船木 亮平 (九州大学) , 村田 純一 (九州大学)

Accelerated interactive differential evolution with multi-stage evaluations

*K. Noda, R. Funaki, and Z. Murata (University of Kyushu)

Abstract— The purpose of this research is to accelerate the convergence of the solution in order to solve the issue that the user cannot obtain a satisfactory solution because of the limit on the number of evaluations in interactive evolutionary computation algorithms. The following two improvements were made by incorporating the multi-stage evaluations into the interactive differential evolution, which evaluates the solutions by the pairwise comparison with a light user burden: (1) Generate new individuals around the individuals with good evaluations; (2) If the pairwise comparison loser is better than the winner of another pairwise comparison, the loser remains in the next generation. The performance improvement was confirmed by comparing the proposed method with the existing method.

Key Words: interactive evolutionary computation, optimization

1 序論

1.1 研究背景

最近では、服のデザインや音楽のメロディー生成、画像の処理などを、専門家だけでなく素人でも行う機会が増えている。しかし、自分自身が思い描くアイデアを具体的に表すというのは困難である。そうした活動をより簡略化するために、デザインのような目的関数が数式化できない最適化問題を人間の感性をもとに最適化する目的で対話型進化計算 (Interactive Evolutionary Computation : IEC)^[1,2]が用いられる。

進化計算 (Evolutionary Computation : EC)^[3]とは生物の進化過程から着想を得た最適化手法である。進化計算では解候補を個体と呼び、個体を整数、実数、記号の配列や木構造などで定義される染色体で表現する。初めにランダムに生成された初期集団中の個体を評価し生存選択を行う。そして生存する個体群の染色体情報を用いて新たな染色体を生成する交叉、染色体の一部を変更する突然変異の2つにより、子個体を生成する。子個体群と生存選択した個体群を次世代の集団とする。子個体群のみを次世代の集団とする手法もある。この集団の評価と、子個体の生成を繰り返すことで最適解を取得する。

人間が評価を行う進化計算を対話型進化計算という。対話型進化計算ではユーザ自身が主観的価値観をもとに評価をするので、ユーザの好み、価値観を説明できなくても評価を繰り返すことで解を取得できるというメリットがある。遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm; GA)、粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization; PSO)^[4]、差分進化 (Differential Evolution; DE)^[5]といった進化計算アルゴリズムが対話型進化計算に使用される。

DEは一対比較評価を行うため、ユーザ負担が最も小さい手法であり、GA、PSOと同等以上の探索性能を誇

る^[6]。TGA^[7]というトーナメント方式 GA で一対比較を行い勝ち進んだ対戦数に応じて評価値を設定する手法も考案されたが、DEのほうが有力であることを示した研究^[4]がある。以上のことから DE が対話型進化計算で頻繁に用いられている。

1.2 対話型進化計算の問題点

対話型進化計算の大きな問題としてユーザの疲労蓄積による評価回数の制限があげられる。一般的にユーザが評価できる個体数は10から20個程度、10から20世代までといわれている。限られた個体数、世代数のうちにユーザが納得できる解を得られない場合も多々ある。そこで解の収束を速くするために、目的関数の多峰性領域を単峰性領域になるまで分割し収束点を推定すること^[8]や、進化レベルという解候補が進化した回数^[9]を導入し新たな個体を生成する際の情報として用いることで進化の高速化を行うといった様々な研究が行われている。

1.3 研究目的

対話型進化計算の問題点を解決するために、一対比較の情報しか使用していない DE に GA のような個体の多段階評価情報を加えることで、ユーザ負担は多少増すものの、探索性能の向上につながり少ない世代でユーザが納得できる解を得ることを本研究の目的とする。

2 差分進化 (DE)

2.1 差分進化 (DE) のアルゴリズム

差分進化 (DE)^[5]とは Storn and Prince によって提唱さ

れた最適化手法の 1 つである。DE の特徴は個体群の中から 3 つを選択し、1 つをベースベクトル、残る 2 つのベクトルの差を差分ベクトルすることで、ベースベクトルの性質を引き継いだ新たな個体の生成に使う。探索序盤は個体がまばらに分布しているため、大きな差分ベクトルが与えられ、探索範囲が広い (大局的探索)。しかし、世代が進むにつれ個体同士が集まるようになり、小さな差分ベクトルが与えられ、次世代の個体も近辺に生成されるようになる (局所的探索)。この大局的探索から局所的探索にスムーズに移行できるという点が DE の強みである。

DE にはいくつかの方式があり、DE/base/num/cross の記述方式で表される。base の部分はベースベクトルの選択方法を表しており、num は差分ベクトル対の個数を示している。また、cross の部分に関しては子を生成する際の交叉を表す。bin (binominal crossover) という一定の確率で遺伝子を交換する交叉と、exp (exponential) という指数関数的に減少する確率により遺伝子を交換する交叉がある。DE/rand/1/bin のアルゴリズムは以下のように記述される。変数の数 (次元) を D とすると個体は $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_D)$ と表され、すべての変数は上限値 x_{j_max} 、下限値 x_{j_min} の制約条件を満たしている。

Step 1 N 個の個体で構成される初期集団 P_0 を生成する。集団内の i 番目の個体は $\mathbf{x}_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,D})$ で表される。

Step 2 (target vector) \mathbf{x}_i に対して重複しないように 3 個体 $\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b, \mathbf{x}_c$ をランダムに選択する。 $\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b, \mathbf{x}_c$ 、スケールングファクター $F (0 < F < 2)$ からミュータントベクトル \mathbf{m}_i (mutant vector) を以下のように生成する。

$$\mathbf{m}_i = \mathbf{x}_a + F(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_c)$$

\mathbf{x}_a をベースベクトル (base vector)、 $\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_c$ を差分ベクトルと呼び、この Step 2 のことを突然変異という。

Step 3 ミュータントベクトル \mathbf{m}_i と親であるターゲットベクトル \mathbf{x}_i を交叉することでトライアルベクトル \mathbf{x}_i^{child} (trial vector) を生成する。交叉点 j を全ての要素 $(1, 2, \dots, D)$ からランダムに選出し、トライアルベクトル \mathbf{x}_i^{child} の j 番目の要素を \mathbf{m}_i の j 番目の要素から継承する。他の要素については交叉率 $C_r (0 < C_r \leq 1)$ の確率で \mathbf{m}_i の要素から継承し $1 - C_r$ の確率で親の個体 \mathbf{x}_i の要素を引き継ぐ。この Step 3 のことを交叉という。交叉率が大きいほどミュータントベクトルの影響が大きくなる。

Step 4 生成されたトライアルベクトルが、探索の範

囲外にある時には、探索範囲から超えた分を内側に反転させることでトライアルベクトルを探索範囲領域に収める。

Step 5 トライアルベクトルを評価する。トライアルベクトル \mathbf{x}_i^{child} がターゲットベクトル \mathbf{x}_i よりも優れている場合にトライアルベクトルが次世代に残る生存者となり、ターゲットベクトルをトライアルベクトルに書き換える。

Step 6 全てのターゲットベクトルに対し Step 2 から Step 5 までを行う。

Step 7 Step 6 をユーザが納得のいく解を得られるまで繰り返し行う。この繰り返し回数のことを世代という。シミュレーションではあらかじめ設定された最大世代数までこの試行を繰り返す。

以上が DE/rand/1/bin のアルゴリズムの説明になる。DE/best/1/bin のアルゴリズムは Step 2 においてベースベクトル \mathbf{x}_a をランダムに選定するのではなく、ベスト個体で固定する。

2.2 DE/rand/1/bin, DE/best/1/bin の特性

以下 DE/rand/1/bin を DE(rand)、DE/best/1/bin を DE(best) と記述する。DE(rand) は差分ベクトルに加え、ベースベクトルもランダムに選出され、交叉率 C_r が大きいほどミュータントベクトルの個体情報を引き継ぎやすくなるため、多様な子個体が生成され、探索領域が広がる。つまり DE(rand) には、大局的探索を行うため解の正確性に優れているが、解の収束が遅いという特徴がある。それに対し DE(best) はユーザが選出したベスト個体でベースベクトルを固定するため、ベースベクトルと似た性質を持つ個体が生成されやすく、局所的探索になりやすい。このことから DE(best) は、探索範囲が狭くなり局所解にはまりやすくなるが、解の収束は速いという特徴を持つ。

3 提案手法

3.1 概要

本研究では、ユーザが一对比較に加えて全ての個体に行う多段階評価により、個体の優劣情報を取得し活用することで、解の収束を高速化することを目的とする。ユーザが個体に対して n 段階評価を行うが、GA のような 7 から 10 段階評価といった細かい評価を行うことは、ユーザが評価に悩んだり、複数の個体に同じ評価をしてしまうことに関する心理的ストレスを

感じてしまったりといった懸念があるため n は小さければ小さいほど好ましい。以上のことを踏まえ、 $n=3$ の「良い」、「普通」、「悪い」のような 3 段階評価と $n=5$ の「とても良い」、「良い」、「普通」、「悪い」、「とても悪い」といったような 5 段階評価をユーザが行う。

3.2 n 段階評価 DE(手法 1)

手法 1 の手順は、ユーザが一对評価に加えて、全ての個体に n 段階の評価を行い、その評価が良い個体をベースベクトルとして固定し次世代の個体を生成するというものである。これはベースベクトルにベスト個体を使用する DE(best)と同様に解の収束の高速化を狙っている。また DE(best)ではベスト個体選出の際にユーザが全ての個体から最も良い個体を選ぶのに対し、手法 1 ではユーザの主観による絶対評価を行うので、一对比較での勝者とその時点での best 個体の一对比較を繰り返す DE(best)よりも評価回数が減り、ユーザ負担の軽減が可能である。そのほかの手順は、従来の DE の手順と同じである。

求める解が特に音や動画といった時系列データの場合、DE(best)でのベスト個体の選出のためには今までに評価した個体情報をユーザが記憶する必要があり、ユーザ負担が大きくなってしまいう欠点がある。しかし手法 1 はベスト個体の選出は行わずに個体の絶対評価を活用するため、解が時系列データの時も実用的である。

3.3 n 段階評価 change DE(手法 2)

手法 2 の従来手法と異なる点は、ユーザが一对比較の際にどちらの個体にも多段階の評価を行うため、次世代に残る勝ったグループに属する個体であっても、淘汰される予定の負けたグループにある個体よりも評価が悪かったという場合にその個体同士を交換することである。

目的関数が連続変数で定義可能である場合に関しては、評価値の悪い個体の近辺に次世代の個体を生成したとしても、それは評価値の悪い個体になる可能性が高い。特に DE(rand)でベースベクトルに評価の悪い個体を選択されると、生成される次世代の個体の評価は悪くなってしまいう可能性が高い。

一对比較で負けた個体群には、勝った個体群よりも優れた個体が存在することがある。 n 段階評価を導入することで評価を一对比較より細かく取得でき、勝ち残った個体群に含まれている評価が悪い個体と、負けてしまった個体群に含まれている評価が良い個体を交換できる (解の交換)。この解の交換によって、個体群

の評価値を底上げすることが可能である。実際に解の交換で性能が改善できるということは手法 2 よりも解の交換回数が多く性能に差が出た手法 3 を用いて検証している。

3.4 worst to best change DE(手法 3)

手法 3 の目的は手法 2 と同じで、評価値の悪い個体をもとにトライアルベクトルが生成されても、このトライアルベクトルの評価値は悪くなりやすいため、評価の悪い個体と良い個体の交換を行うことで、ターゲットベクトルの更新回数を増やし探索の効率をよくすることを目的としている。また、結果的には手法 2 よりも解の交換回数が増えるため、解の交換がもたらす探索への効果を検証することも目的とする。

手法 3 の手順を説明する。個体の一对比較を終えた後に勝ったグループの中から最悪個体(worst 個体)の選出と、負けた個体グループの中から最良個体(best 個体)の選出をユーザが行う。これらの worst 個体と best 個体を交換する。その他の手順は従来 DE と同じである。

4 シミュレーション方法

4.1 検証関数

本研究のシミュレーションで扱う目的関数は疑似 IEC ユーザを想定して設計された(1)式で表される混合ガウス関数⁸⁾である。この 4 つのピークを持つ混合ガウス関数を用いる理由は、ユーザが簡単には大域的最適解を得られず、局所的最適解を取得してしまう可能性があるからである。

$$f_1(x_1, \dots, x_D) = - \sum_{i=1}^k a_i \exp \left(- \sum_{j=1}^D \frac{(x_j - \mu_{ij})^2}{2\sigma_{ij}^2} \right) \quad (1)$$

次元数 $D = 10$

ガウス関数の数 $k = 4$

$$\text{振幅 } a = \begin{pmatrix} 3.1 \\ 3.4 \\ 4.1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

平均値

$$\mu = \begin{pmatrix} -1 & 1.5 & -2 & -2.5 & -1 & 1.5 & -2 & -2.5 & -1 & 1.5 \\ 0 & -2 & 3 & 1 & 0 & -2 & 3 & 1 & 0 & -2 \\ -2.5 & -2 & 1.5 & 3.5 & -2.5 & -2 & 1.5 & 3.5 & -2.5 & -2 \\ -2 & 1 & -1 & 3 & -2 & 1 & -1 & 3 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

標準偏差

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 & 1.5 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

この検証関数の最適解の評価値は -3.400 となる。3 段階評価の場合、評価値域の上位 33.3%の個体を「良い」、下位 33.3%の個体を「悪い」それ以外を「普通」という評価を下すように設計した。5 段階評価は同様に評価値域を 5 等分し、上位から順に「とても良い」、「良い」、「普通」、「悪い」、「とても悪い」と判断するよう設計した。

4.2 シミュレーション条件

本研究における IDE シミュレーションの条件を以下に示す。

- ・ 個体数 10
- ・ 次元数 10
- ・ 変数 x_i の最大値 5
- ・ 変数 x_i の最小値 -5
- ・ F 0.8
- ・ C_r 0.8
- ・ 最大世代数 50
- ・ 試行回数 100

4.3 比較方法

疑似 IEC ユーザを想定した検証関数を用いて従来手法である DE(rand)、DE(best)、提案手法の 3 つを比較する。

提案手法のうち手法 3 に関しては DE(rand)と DE(best)のターゲットベクトル群（勝ち残っている個体群）で評価が最も悪かった個体(worst 個体)が使用されたトライアルベクトルの生成回数と、そのトライアルベクトルが一対比較で勝利した回数を記録する。また手法 3 で解の交換をした個体を使用したトライアルベクトルの生成回数と、そのトライアルベクトルが一対比較で勝利した回数も同様に記録することで解の交換が探索の向上につながるのかを検証する。

対話型進化計算でユーザが厳密な最適解を得るのは困難であるため、大域的最適解とシミュレーションで得られた解のユークリッド距離が 1 より小さい場合には、大域的最適解付近の領域に到達し、ユーザが満足できる解(満足解)を得られたと仮定する。ユークリッド距離を 1 に設定した理由は大域的最適解と局所的最適解が最も近い距離が 4 であることや、ガウス関数の σ の値から評価値を計算して、中心から距離が 1 離れ

た点では、評価値の上位 12%程度の値をとることである。

手法 2 と手法 3 は解の交換によって、解の収束が速くなるという反面、局所的探索に陥りやすいことが予想される。そこで 100 試行における満足解到達回数と世代別の評価値の分散を記録して DE(rand)、DE(best)、提案手法で比較し、解の交換による多様性の損失の検証を行う。

5 シミュレーション結果と考察

5.1 手法 1

手法 1 のシミュレーション結果を Fig. 1 に示す。Fig. 1 は 100 試行における従来手法と手法 1 の 50 世代の平均評価値を表している。

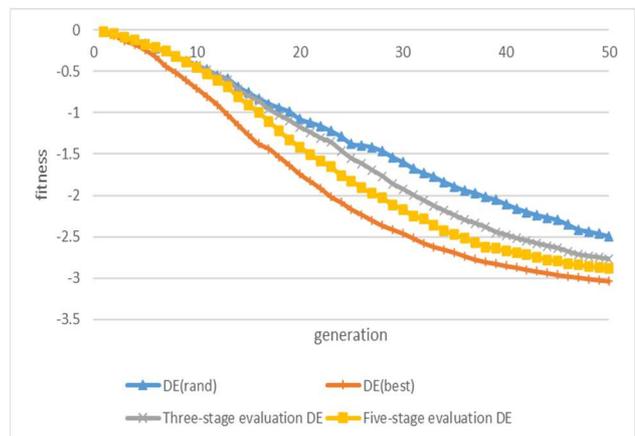


Fig. 1: Comparison of the method 1 and the conventional methods

Fig.1 から、50 世代までに解が収束しておらず、解の収束の速さが DE(rand) < 3 段階評価 DE < 5 段階評価 DE < DE(best)の順であることが確認できる。手法 1 は DE(best)の方法と似ているため、探索範囲も局所的探索になりやすくユーザから細かい評価を得るほど、性能が DE(best)に近づく。解の正確性を重視しない場合には、ベスト個体を全個体から選出するより、数段階で個体の絶対評価を答える方が、ユーザ負担が軽いこともあるので、この手法 1 に有用性がある。

5.2 手法 2

手法 2 のシミュレーション結果は Fig. 2, 3, 4, 5 に示す。また Table 1 に解の交換回数を記録した。Fig.2, 3, 4, 5 は 100 試行における従来手法と手法 2 の 50 世代の平均評価値を表している。

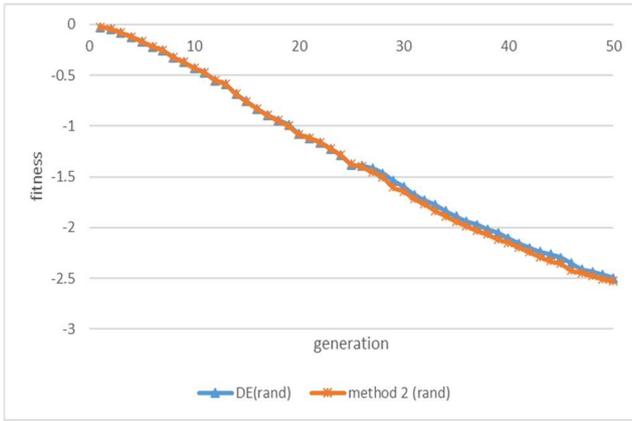


Fig. 2: Comparison of the method 2 (three-stage evaluation) and the conventional method (rand)

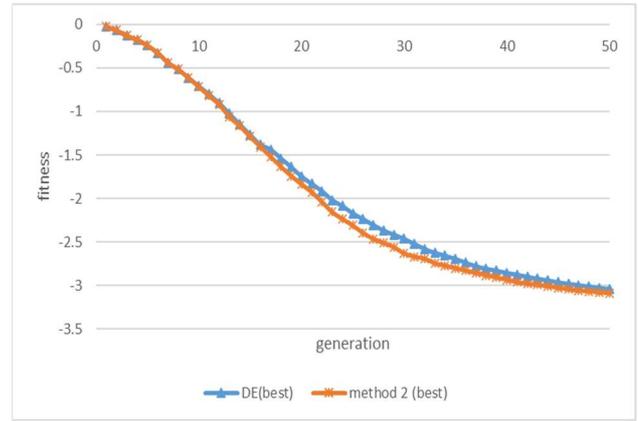


Fig. 5: Comparison of the method 2 (three-stage evaluation) and the conventional method (best)

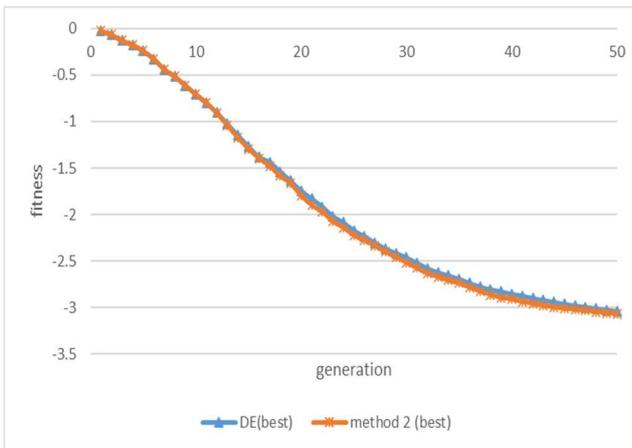


Fig. 3: Comparison of the method 2 (three-stage evaluation) and the conventional method (best)

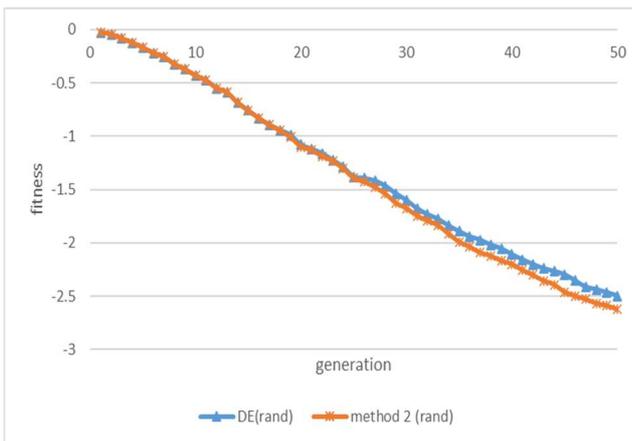


Fig. 4: Comparison of the method 2 (five-stage evaluation) and the conventional method (rand)

Table 1 Exchanging solutions for the method 2

Type of the method 2	The number of solution exchanges
Three-stage (rand)	5.98
Three-stage (best)	6.88
Five-stage (rand)	12.16
Five-stage (best)	12.97

今回のシミュレーション結果から、3段階評価 change DE(rand)、3段階評価 change DE(best)の性能に変化はほとんど見受けられなかった。5段階評価 change DE(rand)に関しては35世代以降からわずかに性能が良くなっているのが確認できた。5段階評価 change DE(best)に関しては23から35世代までの間の性能が向上している。しかし従来手法の DE(rand)、DE(best)と比較した場合に、性能差が大きく出た箇所に着目したとしても数世代分程度の向上しかないため、ユーザ負担を考慮するとこの手法に有用性があるとは言えない。

Table 1は手法2において50世代までに全個体で行われた解の交換回数の1試行あたりの平均値を表している。5段階評価 change DEの解の交換回数は、3段階評価 change DEの2倍を記録した。解の交換により個体の評価が1段階ずつ良くなるとすると、 n 段階評価では一番評価の悪い状態から $n-1$ 回評価が良くなる。同様に3段階評価では1個体につき2段階、5段階評価では4段階も評価が良くなると期待できるため、このような結果となった。探索性能が3段階評価 change DEよりも5段階評価 change DEの方がわずかに向上しているのは、解の交換回数の増加による寄与だと考察できる。5段階評価でも解の収束の速さの向上が微々たるものであった要因は、解の交換回数が2倍になったとはいえ、同じ評価の個体しか存在しない場合に解の交換は行われないため絶対回数が少なかったことである。

解の交換回数を増加させるためにより細かい評価を

得ることで性能の向上が期待できるが、7段階や10段階評価の導入することは、ユーザ負担が大きく好ましくない。

5.3 手法3

手法3のシミュレーション結果はFig. 6、Fig. 7に示す。Fig. 6, 7は100試行における従来手法と手法3の50世代の平均評価値を表している。

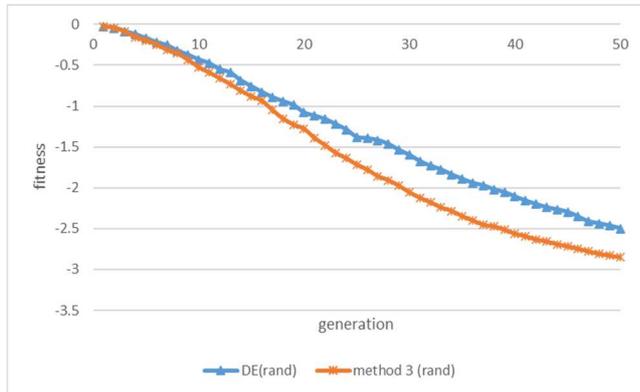


Fig. 6: Comparison of the method 3 (rand) and the conventional method (rand)

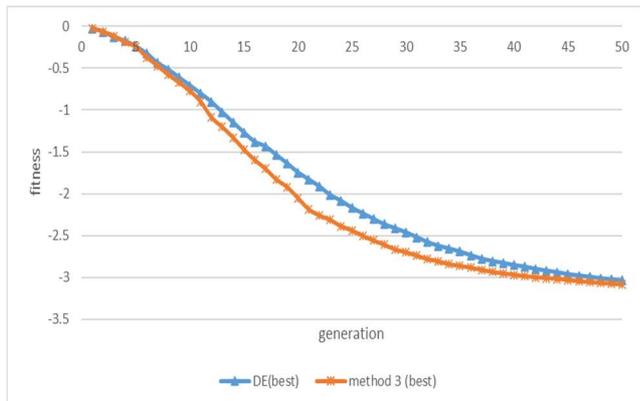


Fig. 7: Comparison of the method 3 (best) and the conventional method (best)

(rand)方式での探索は最大8世代ほど収束が早く、(best)方式の探索においても(rand)方式ほどではないが4から6世代ほど収束が早くなっていることが確認できる。

DE(rand)のworst個体がベースベクトルまたは差分ベクトルに採用された場合、Table 2にworst個体選択回数として記録した。またworst個体の情報を使用したトライアルベクトルがターゲットベクトルとの比較で勝利した回数をトライアルベクトル勝利数として記録し、worst個体選択回数とトライアルベクトル勝利数をもとに勝率を算出した。DE(best)では、worst個体が

差分ベクトルに使用された回数をworst個体選択回数とし、その他の項目についてはDE(rand)と同様である。また手法3に関しては、worst個体が負けた個体群のbest個体と交換されるため、この交換されたbest個体を使用された回数をworst個体選択回数としている。今回のシミュレーション条件にてworst個体の選択回数の期待値は(rand)方式では15000回、(best)方式では11111回である。

Table 2 The trial vector win rate of the method 3 and the conventional methods

The methods	The number of worst individual selections	The number of trial vector wins	Trial vector win rate [%]
DE(rand)	15169	2409	15.9
DE(best)	10817	3098	28.6
The method 3(rand)	15005	3083	20.5
The method 3(best)	10775	4490	41.7

Table 2で従来手法と手法3を比較した結果、手法3(rand)で4.6%、手法3(best)で13.1%の勝率の向上を確認し、解の交換によりターゲットベクトルの更新回数を増やせることを検証できた。Fig. 6, 7からも、このターゲットベクトルの更新回数の増加が探索の高速化につながったと結論付ける。

この手法3をIDEとして実用化する上での問題点は、ユーザ負担が大きくなることである。ユーザが勝ち残った個体群からworst個体、負けた個体群からbest個体を選択することは、明白にDE(best)よりも負担が大きくなるからである。実用化する方策として、問題点であるユーザ負担を軽くするために、個体の評価値を推定し、ユーザがworst個体やbest個体を選出する過程を省略するといった改善が必要である。

5.4 解の交換による多様性の損失

従来手法と手法2、手法3の各世代における評価値の分散の比較をFig. 8, 9に示す。またTable 3に各手法のシミュレーションでの満足解到達回数を記録した。

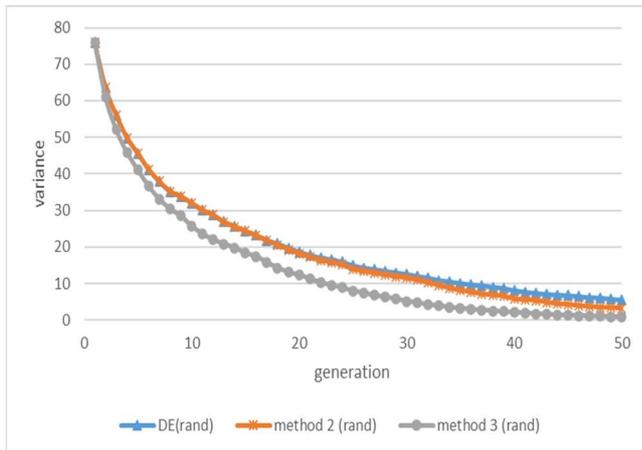


Fig. 8: Variance comparison of the conventional method (rand), the method 2 (rand), and the method 3 (rand)

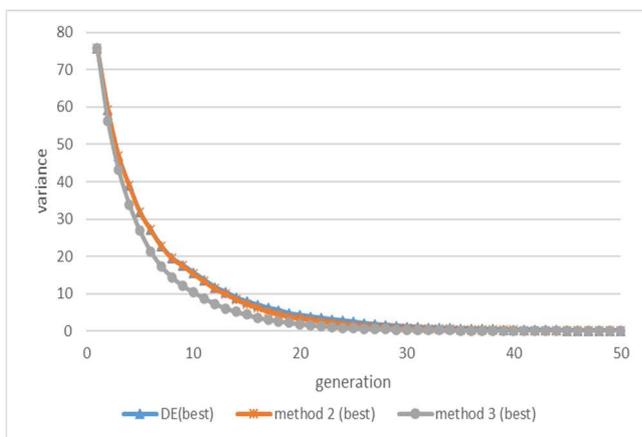


Fig. 9: Variance comparison of the conventional method (best), method 2 (best), and method 3 (best)

Table 3 The number of times the optimal solution is reached

The methods	The number of times the optimal solution is reached by method
DE (rand)	17
Five-stage method 2 (rand)	27
Method 3 (rand)	36
DE (best)	51
Five-stage method 2 (best)	52
Method 3 (best)	50

シミュレーション結果から(rand)方式では分散の値が0に収束していないため、試行によっては満足解に未到達であるが、対照的に(best)方式では個体群が1か所に収束していると判断できる。

分散の値に着目すると従来手法と5段階評価change DEは同じように推移しているが、特に(rand)方式のworst to best change DEでは分散の減少が速いため探索範囲が狭くなってしまっている。(best)方式は、(rand)方式より各手法の分散の差は少なく、(best)方式を用いた各手法の満足解到達回数は同じようになった。

このことから多様性の損失による満足解到達回数への悪影響は微々たるものであると判断できるため、(best)方式に解の交換を取り入れることに有用性がある。

6 結論

本論文では、ユーザが納得できる解をより少ない世代で獲得するために解の収束の高速化を目的とし、DEに多段階評価を組み込むことを提案した。

手法1ではベクトルに評価の良い個体を使用することを提案し従来手法と比較した。手法2はターゲットベクトルの評価の悪い個体を、一対比較で負けてしまったが評価が良かった個体と交換することを提案し、従来手法と比較した。手法3は一対比較で勝ち残った個体群の最悪個体と、敗北した個体群の最良個体の交換を提案し、解の交換の有用性を検証した。

手法1の結果は多段階評価をすることでDE(best)に近い性能を発揮することができ、ベスト個体を選出することが煩わしくなってしまう音源や動画といった時系列データを解とすることは手法1に有用性があると示した。

手法2の結果から探索の高速化はほとんど確認できなかった。手法3の結果により、解の交換がターゲットベクトルの進化回数の増加をもたらした。解の収束の高速化につながるということが検証できた。

ユーザが最悪個体や負けた個体群の最良個体を選出する過程を省略するために評価値の推測などを取り入れられたら、手法3もIDEで実用可能である。

今後の課題としては、一対比較に多段階評価を取り入れることで発生するユーザ負担の大きさや、評価基準の曖昧さがもたらす探索への悪影響を検証する必要がある。

参考文献

- [1] 岡本 一輝・河本 敬子, 対話型進化計算を用いたメタデザインシステム 「差分進化でのスケールングパラメータの検討」, 第81回全国講演論文集, 373/374(2019)
- [2] 竹岸真緒・荒川薫, 言葉の印象を反映したGANによる対話型タイルデザインシステム, 第83回全国大会講演論文集, 127/128, (2021)
- [3] 小野 功, 学生向け解説:「進化型計算アルゴリズム」, 電気学会論文誌C, **122**, 3, 324/329, (2002)
- [4] 石亀 篤司・安田 恵一郎, 群れの知能:Particle Swarm Optimization, 日本知能情報ファジィ学会誌,

20, 6, 829/839, (2008)

- [5] 田川 聖治・差分進化の基礎と並行プログラミング, システム制御情報学会論文誌, **59**, 2, 47/52, (2015)
- [6] 高木 英行・Pallez Denis, 対比較ベース対話型差分進化, 第3回進化計算シンポジウム, 245/251, (2009)
- [7] P. J. Angeline and J. B. Pollack, “Competitive Environments Evolve Better Solutions for Complex Tasks,” 5th Int. Conf. on Genetic Algorithms (ICGA1993), Urbana/Champaign IL, USA, 264/270 (July, 1993)
- [8] 高木 英行・余 俊, 個体間距離順位とフィットネス順位に基づく局所解領域に推定, 第12回進化計算学会研究プログラム, 203/206,(2017)
- [9] 串田 淳一・原 章・高濱 徹行, 進化レベルを用いた対話型 Differential Evolution の高速化手法の提案, 日本知能情報ファジィ学会ファジィシステムシンポジウム講演論文集, 30, 740/744, (2014)

介護現場支援のための GNG による介護事例テキストの分析

○蕪木梨乃 土手口直毅 大保武慶 久保田直行 (東京都立大学)

Text Analysis of Incident Report in Nursing Facilities by using Growing Neural Gas

* R. Kaburagi, N. Doteguchi, T. Obo, N. Kubota (University of Tokyo Metropolitan)

Abstract— As the working population is decreasing in Japan, ICT applications are expected to reduce caregivers' burden in nursing facilities. In this study, we focused on text analysis of incident report in care-giving in order to extract knowledge that can be applied to the sharing for incident prevention. This paper presents a method to extract text features on caregivers' reports in unsupervised manner. We use growing neural gas (GNG) to represent the feature vectors in the multidimensional space.

Key Words: Caregivers, Corpus, Word frequencies, Growing Neural Gas

1 はじめに

近年我が国では、少子高齢化が急速に進み介護現場における人手不足が深刻な問題になっている^{1,2)}。そのような課題に対し、中高年齢者・外国人などの多様な人材の活用や、介護に関する教育など介護の魅力の普及啓発といったアプローチの他に、働きやすい環境の整備といったアプローチとして ICT 活用による介護現場の負担軽減が推進されている³⁾。

介護職員に対する職務時間の調査では、トイレ誘導・介助、おむつ交換、見守り・コール対応、食事準備・介助と言った業務に並び、記録関連の業務に時間が費やされており、職員の記録作成業務に対する負担軽減は解決すべき課題であると言える⁴⁾。

そこで本研究では、介護現場における負担軽減のために、介護における記録業務の ICT 化を行うことを目的とする。その中でも本稿は特に、介護現場における記録業務において作成された事例情報をデータ分析することに着目する。介護事例を分析することにより、現場間でのスムーズな情報共有や、分析結果を元にした介護職員や介護ロボットによる高齢者に対する注意喚起や声かけなどへの活用が期待できる。介護現場において蓄積された事例を、現場の知識共有や、介護職員・ロボットによる高齢者支援時の注意喚起の声かけなどに生かすため、本研究では介護記録のテキストから文書の特徴抽出を行う手法を提案する。具体的には、各文書を構成する単語の TF-IDF 値を算出し、文書をベクトル表現したのち、クラスタリング手法の一つである Growing Neural Gas (以下、GNG) を適用した。

2 先行研究

介護事例の分析を行った研究として、峯崎らの研究が挙げられる。峯崎らは、事故が起きやすい情報を取得することを目的として介護施設で起きた事故・ヒヤリハットを記載した事故事例テキストを使用しテキストマイニングを行った⁵⁾。k-means法やランダムフォレスト、決定木学習といった手法を用いた分析を行うことで、行動の目的と起きやすい事故の種類は関係が深い、事故の重症度と介護士の自己処理能力は関係があるといった介護事故傾向を明らかにした。

また、串間らは介護記録の語彙関係から介護に関する重要な語彙抽出を行い、さらにテキストデータマイ

ニング統合環境TETDM(Total Environment for Text Data Mining)で可視化を行うことにより介護士間で被介護者の状態を共有できる介護記録内容を検討した⁶⁾。介護記録は被介護者の介護状況を反映していると考えられる結果を得たことで、TETDMで介護記録を解析できる可能性を示した。

3 GNG を用いた介護事例テキストの分析

3.1 介護事例テキストの解析

3.1.1 介護事例テキストの収集

介護事例情報の収集には、北海道庁ホームページの老人施設等における事故事例集⁷⁾と介護事業サービスを提供しているハートケアグループホームページの事例集とヒヤリハット⁸⁾から収集する。北海道庁ホームページからは 70 事例、ハートケアグループホームページからは 85 事例を収集し、実験では計 155 事例を分析した。また、いずれのホームページからも 1 つの事例に対し事故の概要情報を収集した。

3.1.2 MeCab による介護事例の形態素解析

日本語を処理する場合は、ほとんどの場合において文を単語に分割する必要がある。この処理のことを形態素解析と呼ぶ。形態素解析器にはいくつか種類があるが、本研究では実行速度が高速であることや、他の環境で利用できるインターフェースが充実していることを理由に、京都大学情報学研究所・日本電信電話株式会社コミュニケーション科学基礎研究所共同研究ユニットプロジェクトを通じて開発されたオープンソース形態素解析エンジンである MeCab¹⁰⁾を用いて形態素解析を行った。

3.1.3 TF-IDF による介護事例のベクトル表現

本研究では、介護事例中に出現する単語により、それぞれの事例をベクトルで表現し、そのベクトルを GNG により分析する。介護事例をベクトルで表現するためには、TF-IDF 手法を用いる。

TF-IDF 手法では、ある単語 t の文章 d における重要度を TF-IDF 値により表現する。TF-IDF 値は、TF 値と IDF 値の組み合わせで計算される。ここで、ある単語 t の文章 d の TF 値は、以下の式で表現される。ただし、

$freq()$ は文章 d における単語 t の出現頻度を数える関数である。

$$tf(t, d) = freq(t, d) \quad (1)$$

ある文章において、中心的な話題となる単語はその文章中で繰り返し出現することが予想される。そのため、TF 値は出現頻度の高い単語はより重要性が高いという考えに基づいて計算される。

また、単語 t の IDF 値は、その単語が含まれる文章数の割合(DF 値)の逆数で表現される。すなわち $|D|$ を文章数、 $|\{d: d \ni t\}|$ を単語 t を含む文章数とすると以下の式で定義される。

$$df(t) = |\{d: d \ni t\}| \quad (2)$$

$$idf(t) = \log \frac{|D|}{df(t)} \quad (3)$$

IDF 値は、特定の文書に偏って出現する単語ほど重要であるという考えに基づいて計算される。

ある単語 t の文章 d における TF-IDF 値は、TF 値と IDF 値の積によって導出される。

$$tfidf(t, d) = tf(t, d)idf(t) \quad (4)$$

前述したように、TF 値はある単語がどれだけ多く出現したかを表し、IDF 値はその単語がどれだけ文書間に偏って出現したかを表現する。TF-IDF 値では、この両者の積を取ることで、より多く出現し、かつ出現に偏りのある単語をより重要であると判断する。

本研究では、各介護事例を形態素解析エンジンである MeCab により形態素解析し、その際に得られた単語の品詞情報から名詞と動詞に限定して TF-IDF による文章のベクトル化を行なった。

3.2 GNG を用いた特徴抽出

Fritzke は、ノードや結合関係の追加・削除を行うことができる GNG を提案した¹³⁻¹⁴⁾。一般には、GNG は Growing Cell Structures (GCS)において必ずしも Delaunay 三角形分割を行わないモデルであるとともに、年齢の概念など Neural Gas (NG)といくつかの特徴を共有する。具体的には、GNG は、サンプルされた入力データに対し、入力データとノードの参照ベクトルとの距離に基づき、ノードや結合関係の追加・削除を逐次的に行う手法であり、クラスタとして認識可能なかたまりに境界を生成しながら、教師無し分類が行える手法である。以下、GNG の手順を述べる。

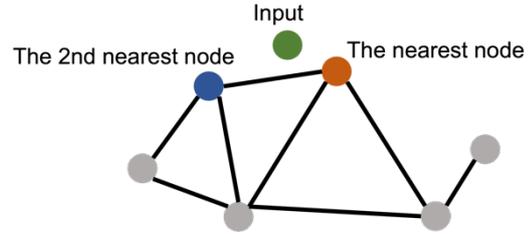
Step 0 初期化として、二つのノードの参照ベクトル w_1 と w_2 をランダムに生成し、結合関係 $c_{1,2} = 1$ 、エッジの年齢 $a_{1,2} = 0$ とする。

Step 1 入力データ v を $p(v)$ に従ってランダムに取得する。ここで v は前節に記載した介護事例の素性ベクトルで構成されている。

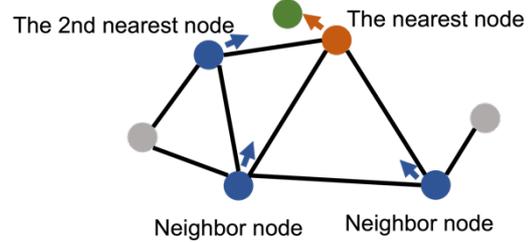
Step 2 入力データ v に対する勝者ノード s_1 と第2勝者ノード s_2 を選択する。

$$s_1 = \arg \min_{i \in A} \|v - w_i\| \quad (5)$$

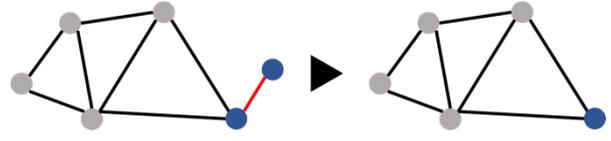
$$s_2 = \arg \min_{i \in A \setminus \{s_1\}} \|v - w_i\| \quad (6)$$



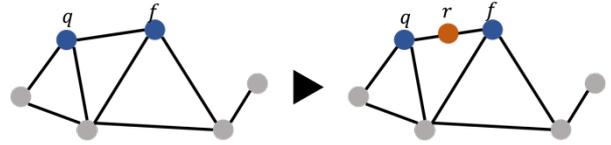
(a)ノードの発火



(b)ノードの移動



(c)ノードの削除



(d)ノードの追加

Fig. 1: GNG の学習方法

Step 3 ノード s_1 について入力データ v との二乗誤差を積算誤差 E_{s_1} に加算する。

$$E_{s_1} \leftarrow E_{s_1} + \|v - w_{s_1}\|^2 \quad (7)$$

Step 4 ノード s_1 およびノード s_2 と結合関係があるノードの参照ベクトルを更新する。ただし、 η_1 と η_2 を学習係数とする($\eta_1 > \eta_2$)。

$$w_{s_1} \leftarrow w_{s_1} + \eta_1 \cdot (v - w_{s_1}), \quad (8)$$

$$w_j \leftarrow w_j + \eta_2 \cdot (v - w_j), \quad \text{if } c_{s_1,j} = 1 \quad (9)$$

Step 5 エッジの年齢を0にリセットする($a_{s_1,s_2} = 0$)。また、ノード s_1 と s_2 との間にエッジが存在しなければ、新たにエッジを作成する($c_{s_1,s_2} = 1$)。

Step 6 ノード s_1 と結合関係のあるすべてのエッジの年齢をインクリメントする。

$$a_{s_1,j} \leftarrow a_{s_1,j} + 1, \quad \text{if } c_{s_1,j} = 1 \quad (10)$$

Step 7 事前に設定した閾値 a_{max} を超える年齢のエッジを削除する($c_{s_1,s_2} = 0$)。その結果、他のノードと結合関係をもたないノードが現れた場合は、当該ノードを削除する。

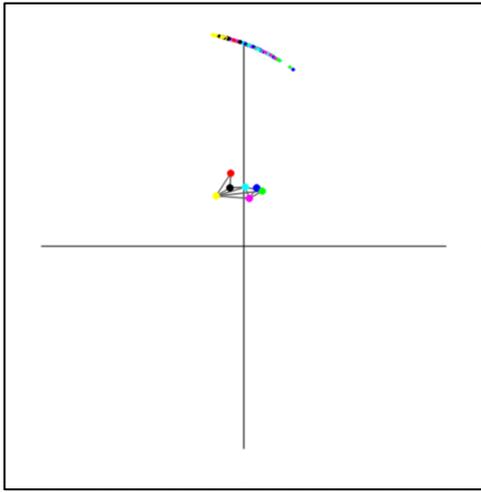


Fig. 2: 各サンプルの分布とGNGの出力結果

Step 8 GNG へのデータ入力が λ 回ごとに、つぎの操作を行う。

- i. 積算誤差が最大のノード q を選択する。

$$q = \arg \max_{i \in A} E_i \quad (11)$$

- ii. ノード q と結合関係のあるエッジの中で最も長いエッジを選択し、このエッジに結合するノードを f とすると、このエッジを2分するようにノード r を挿入する。

$$w_r = 0.5 \cdot (w_q + w_f) \quad (12)$$

- iii. つぎに、ノード q, f 間のエッジを削除し($c_{q,f} = 0$)、ノード q, r および r, f 間にエッジを追加する($c_{q,r} = 1, c_{r,f} = 1$)。

- iv. ノード q, f の積算誤差を以下の式により更新する。

$$E_q \leftarrow E_q - \alpha E_q \quad (13)$$

$$E_f \leftarrow E_f - \alpha E_f \quad (14)$$

- v. 最後に、ノード q, f の積算誤差の平均をノード r の積算誤差とする。

$$E_r = 0.5 \cdot (E_q + E_f) \quad (15)$$

Step 9 すべてのノードの誤差を減らす。

$$E_i \leftarrow E_i - \beta E_i (\forall i \in A) \quad (16)$$

Step 10 終了条件が満たされない場合は、Step2に戻る。

4 実験結果

ここでは、GNGによる介護事例テキストの分析の実験結果を示す。サンプル数は155事例、素性ベクトルの次元は500次元、GNGの最大ノード数は10、学習回数は155000回とした。

Fig. 2は、各サンプルを提案手法により分析した結果を、全データの平均ベクトルを基準としたコサイン類似度を用いることで2次元平面上に表している。ここで、Fig. 2上部の点群は各サンプルの分布を表しており、中央近くのグラフはGNGの各ノードとエッジを表している。なお、各サンプルデータは最近傍のGNGのノードと同じ色で表されている。実験では、最終的なGNGのノード数は7つとなった。

Table 1はGNGにおける各ノードの参照ベクトルの特徴ラベルのうち、ベクトル値の大きいものから順に、

Table 1: 各ノードの参照ベクトルの特徴ラベル

		ノード1	ノード2	ノード3	ノード4
特徴ラベル	1	する	トイレ	居室	利用
	2	利用	ため	ところ	サービス
	3	配膳	転倒	骨折	しまう
	4	間違い	骨折	職員	不明
	5	サービス	右足	ベッド	行方
	6	車椅子	手すり	行っ	送迎
	7	ご飯	便座	車いす	夕食
	8	間違い	利用	左足	転倒
	9	デイサービス	あり	右足	病院
	10	訪問	ところ	ため	オーバー
		ノード5	ノード6	ノード7	
特徴ラベル	1	クレーム	転倒	入所	
	2	起こし	骨折	間違える	
	3	食べ	家族	帰宅	
	4	入り	いす	電動	
	5	しまう	歩行	ベッド	
	6	ヘルパー	利用	移乗	
	7	食事	職員	不足	
	8	朝食	浴室	忘れる	
	9	連絡	訓練	置き場	
	10	イベント	ため	かけ	

Table 2: 介護事例の分類結果の例

サンプル	事故の概要	最近傍ノード
A	お粥とご飯を間違えて配膳する	1
B	トイレよりコールがあり、職員がかけつけるとトイレ内で座り込んでいた。左足骨折。	2
C	職員が居室を巡回中、ベッドから転落して床に倒れているところを発見した。左足骨折。	3
D	デイサービス送迎中の事故。送迎中、急ブレーキをかけてしまった為、後部座席中央に座っていた利用者が前のめりになり足を打撲させてしまった。	4
E	食事介助中、味噌汁を飲んだ際、誤嚥を起こした。	5
F	浴室にて、排水溝部分で足を滑らせ転倒し、右手を床についた。手首骨折。	6
G	鍵の置き場所を間違える	7
H	事業所から自宅へ送る際、玄関にて靴を履き替えるまでは所在を確認できていたが、車両への誘導時に行方不明が判明した。事業所内を捜したが見つからず、事業所の周囲を捜索し、発見した。	1

上位10個を記載したものである。また、Table 2はサンプルデータである介護事例を分析した結果を一部抜粋したものである。

5 考察

Table 2から、サンプルA~Gはそれぞれ、「ご飯、間違い、配膳」、「トイレ、骨折」、「居室、骨折、ベッド」、「送迎、利用(者)」、「食事、(誤嚥を)起こし」、「浴室、転倒」、「置き場、間違える」などといった、各最近傍ノードのTable 1に示した代表的

な特徴ラベルを含んでいるため、提案手法による分類は正しく行えたと言える。

一方で、各参照ラベルの代表的な特徴ラベルには、「利用」がノード1と4に共通して含まれたり、「転倒」がノード2・4・6に共通して含まれたりするなど、各ノード間で共通する特徴ラベルがつけられているにも関わらず、Table 2のサンプルHのように必ずしも最近傍ノードの代表的な特徴ラベルと内容が一致しない事例も存在した。このことから、今後各ノード間で上位にくる特徴ラベルがある程度重複しないような工夫が必要になると考えられる。

またTable 1において、ノード1の「する」のように、サ変動詞が単体で特徴ラベルとして抽出されていることや、ノード4の「不明」と「行方」(元は「行方不明」)のように、複合名詞が分割されて抽出されていることがわかる。加えて、ノード1の「間違え」とノード7の「間違える」のように、表記揺れが発生していることがわかる。今回の研究では形態素解析器としてMeCabを使用したが、上記の対策として今後Sudachiなどの形態素解析器を用いることが挙げられる。Sudachiでは表記揺れの吸収機能や複数の分割単位の併用機能を持っているため、今回よりも正確に単語の重要度を取得することが期待できる。

6 おわりに

本稿では、介護事例中に出現する単語により、それぞれの事例をGNGにより分析する方法を提案した。実験の結果、介護事例をGNGにより分類することが可能であることを示した。今回の実験では、事例の収集を行う施設などを限定せずに分析を行ったため、GNGの参照ベクトルにおける特徴ラベルが一般的な単語に終始したが、今後施設ごとの事例を収集し、それを分析することでその施設に特化した分析結果が得られることが期待できる。

また、今後の課題としてGNGの参照ラベルのうち、各ノードの代表的な特徴ラベルの種類が重複しないようにすること、介護事例の単語の分割単位や表記揺れに対応することが挙げられる。

謝辞

本研究(の一部)は、JST【ムーンショット型研究開発事業】 Grant番号【JPMJMS2034】の支援を受けたものです。

参考文献

- 1) 総務省統計局, 1. 人口 人口減少社会、少子高齢化, <https://www.stat.go.jp/data/topics/topi1191.html>, 閲覧日 2022年5月19日
- 2) 厚生労働省, 介護人材の確保について, <https://www.mhlw.go.jp/file/05-Shingikai-12201000-Shakaiengokyokushougai-hokenfukushibu-Kikakuka/0000047617.pdf>, 閲覧日 2022年5月19日
- 3) 厚生労働省, 2 福祉・介護人材確保対策等について, <https://www.mhlw.go.jp/topics/2016/01/dl/tp0115-1-13-02p.pdf>, 閲覧日 2022年5月19日
- 4) 公益社団法人全国老人福祉施設協議会, 全国老協における生産性向上(業務効率化)に向けた取り組み, <https://www.mhlw.go.jp/content/12301000/000479598.pdf>, 閲覧日 2022年5月19日

- 5) 峯崎智裕, 井上創造: 介護サービス向上に向けた介護事例テキストの分析, マルチメディア, 分散, 協調とモバイル(DICOMO2016)シンポジウム, (2016)
- 6) 串間宗夫, 荒木賢二, 鈴木斎王, 山崎友義, 曾根原登: TETDMを用いた介護記録内容の分析, 第19回日本医療情報学会春季学術大会推薦論文, (2015)
- 7) 北海道庁, 老人施設などにおける事故事例集, <https://www.city.hakodate.hokkaido.jp/docs/2019021200021/files/o-9-3.pdf>, 閲覧日 2022年5月21日
- 8) ハートケアグループ, 事例集とヒヤリ・ハット, <https://www.medi-care.co.jp/community/index.php>, 閲覧日 2022年5月21日
- 9) 山本和英, 実践・自然言語処理シリーズ 第3巻 テキスト処理の要素技術, 株式会社近代科学社, 2021
- 10) MeCab: Yet Another Part-of-Speech and Morphological Analyzer, <http://taku910.github.io/mecab/>, 閲覧日 2021年5月22日
- 11) 久保田直行, 里見将志: 自己増殖型ニューラルネットワークと教師無し分類学習, システム/制御/情報 Vol.52 No. 11, (2008)
- 12) 寄田明宏, 久保田直行: ファジィ評価を用いた進化的ロボットビジョン, 日本知能情報ファジィ学会ファジィシステムシンポジウム講演論文集, (2009)
- 13) B. Fritzke: A Growing Neural Gas Network Learns Topologies, Advances in Neural Information Processing Systems 7, (1995)
- 14) B. Fritzke: Growing Self-organizing Networks -Why?, European Symposium on Artificial Neural Networks, (1996)

Bilevel多目的進化計算を用いた感度分析の サンプリング効率向上

箱石卓也, 原田智広, 三浦幸也 (東京都立大学)

Improving Sampling Efficiency of Bilevel Multi-objective Evolutionary Computation for Sensitivity Analysis

Takuya Hakoishi, Tomohiro Harada and Yukiya Miura (Tokyo Metropolitan University)

Abstract— In constrained optimization problems, sensitivity analysis is essential to analyze the effect of varying the constraints on the optimization results. In this study, we propose a method to improve the sampling efficiency of Bilevel Innovization, a sensitivity analysis method using evolutionary computation. Specifically, while the conventional method considers all the constraint ranges simultaneously, the proposed method is improved to search a wider range while shifting the constraint ranges from small to large sequentially. Experimental results show that the proposed method can obtain samples useful for analysis more efficiently than the conventional method.

Key Words: 進化計算, 感度分析, Bilevel Innovization

1 はじめに

複数制約の下である目的関数を最大, もしくは最小にする解を求める問題を最適化問題という. 最適化問題の解法として, 遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) ⁴⁾ に代表される進化計算がある. 進化計算は, 生物の進化の過程に着想を得た手法であり, 適応度に基づく個体選択, 交叉や突然変異の遺伝的操作による新規個体生成を繰り返すことで最適解を探索する.

最適化問題によって得られた解を実世界の製品やサービスに利用することを考えた場合に, 資金やサイズなど様々な制約を満たす必要がある. このような制約付き最適化問題において, 制約条件の変更が最適化結果に与える影響を分析することは, 問題の性質の理解や制約条件の適切な設定のために重要になる. このような分析は感度分析と呼ばれる ⁷⁾. 感度分析は, 制約条件を変更した際の最適化結果を収集するデータ生成と, 得た結果の観察から制約条件変更による影響を理解するデータ分析の2つの過程からなり, 本研究では前者のデータ生成に着目する.

感度分析法のひとつに Bilevel 最適化 ^{3, 9)} を用いる Bilevel Innovization (BI) ⁸⁾ がある. Bilevel 最適化は, 上位レベルと下位レベルの二層の最適化問題から成り, 上位レベルの個体は下位レベルで問題を解く際に用いる制約値を最適化し, 下位レベルではその上位レベルの個体の制約値を用いて問題を解き, その結果が上位レベルの個体の評価値になる. BI では, 感度分析における制約条件の変更を上位レベル, その制約条件下での最適化を下位レベルと捉えて制約値の最小化と下位レベルの最適化結果の最大化の Bilevel 多目的最適化を適用した方法である. しかし, BI では上位レベルの1つの個体が表す制約値に対して GA を実行して最適解を求めるため, 計算コストが大きくなる問題点がある. また, 一度に制約条件範囲すべてを考慮するため, 非劣解集合から離れた, 制約値に対して評価値が低い解が多く生成される点も問題となる.

この問題点を解決するため, 本研究では, BI を改良し, 従来手法よりも効率的なデータ生成を可能にする

手法を提案する. 具体的には, 一度にすべての制約範囲を考慮するのではなく, 制約範囲を制限しながら探索し, 前世代の解を利用しつつ徐々に広範囲を探索する改良手法を提案する. 提案手法の有効性を検証するため, 多次元ナップザック問題のベンチマーク ¹⁾ を用い, 従来手法と提案手法を比較する. 評価方法として, 従来手法と提案手法を用いて多次元ナップザック問題を解き, 生成された解の個数を比較する. また, 従来手法と提案手法によって得た解の分布や非劣解集合の網羅度を評価する.

本論文の構成は以下の通りである. 第2章では従来手法について説明する. 第3章で提案手法の詳細を示し, 第4章で実験方法を説明, 第5章で実験の結果を述べ第6章でその結果を考察する. 最後に第7章で本研究のまとめと今後の課題を述べる.

2 従来研究

2.1 Bilevel 最適化

Bilevel 最適化は上位レベルと下位レベルの二層からなる最適化問題である. 上位レベルの設計変数値が下位レベルの制約条件となり, 下位レベルではその制約値を用いて問題を解く. 一方, 上位レベルの個体の評価値は下位レベルの最適化結果を用いて算出される. Bilevel 最適化は以下のように定式化できる.

$$\min F(x, y) \quad (1)$$

$$\text{s.t. } G(x, y) \leq 0 \quad (2)$$

$$y = \arg \min_y \{f(x, y) : g(x, y) \leq 0\} \quad (3)$$

$F(x, y), G(x, y)$ はそれぞれ上位レベルの目的関数と制約関数を表し, $f(x, y), g(x, y)$ は下位レベルの目的関数と制約関数を表す. ここで Bilevel 最適化の特徴的な点として, 下位レベルで得た最適解 (y) が上位レベルの個体の目的関数の算出に用いられる点が挙げられる.

2.2 Bilevel Innovization

Bilevel Innovization (BI) ⁸⁾ は感度分析を Bilevel 多目的最適化とみなし, 進化計算を用いて最適化問題を

解くことによって感度分析のためのデータを生成する手法である。具体的に、対象とする最適化問題の制約上限の最小化と目的関数値の最大化（あるいは最小化）の2目的最適化を上位レベルで行い、下位レベルでは、上位レベルで定めた制約条件下で元の問題の最適解を求める。以下では、BIの上位レベルと下位レベルの詳細をそれぞれ説明する。

2.2.1 BIの上位レベル

BIの上位レベルでは多目的進化的アルゴリズムの代表的な手法であるNSGA-II²⁾を用い、制約値の最小化と利益の最大化の2目的問題を解く。上位レベルの個体は下位レベルの分析対象となる最適化問題の制約値を持ち、その制約値を用いて下位レベルでの分析対象の最適化問題を解き、得られた利益を上位レベルの目的の一つとして扱う。分析対象となる最適化問題は一般的に複数の制約関数を持つが、BIでは複数ある制約値を一つに集約することで2目的問題とする。具体的には、制約値は以下の計算に基づいて集約される。

$$K = \sum_{i=1}^L m_i x_i \quad (4)$$

$$m_i = \frac{C_i^{max}}{R} \quad (5)$$

$$R = \sum_{j=1}^L C_j^{max} \quad (6)$$

ここで、 L は制約の次元数を示し、 x_i は個体が示す i 番目の制約値、 K は上位レベルで最適化を行う際の個体の制約値を示す。 C_i^{max} は分析対象の最適化問題の i 番目の制約値の最大値を表す。

上位レベルの最適化に用いるNSGA-IIのアルゴリズムをAlgorithm 1に示す。NSGA-IIではまず、 N 個体のランダムな個体からなる初期母集団 P_0 を生成する。その後、トーナメント選択によって選ばれた親集団 P_t から交叉や突然変異を適用して子集団 Q_t を生成する。生存選択では、母集団と子集団を統合した新たな集団 R_t を生成し、 R_t に対して高速非優劣ソートと混雑度ソートを適用して次世代の母集団 P_{t+1} を選択する。終了条件を満たしていなければ新たな子集団を生成し処理を続ける。本研究では、終了条件として従来研究と同様にMGBM停止基準⁶⁾を使用する。BIでは、各個体の評価時に2.2.2節に示す下位レベルの最適化を実行し、その値を元に評価値を決定する。

2.2.2 BIの下位レベル

下位レベルでは上位レベルで定められた制約上限値のもとで分析対象の最適化問題を解き、その制約下での最適解を求める。本研究では、下位レベルの最適化に遺伝的アルゴリズム¹⁾を用いる。遺伝的アルゴリズムの手順をAlgorithm 2に示す。まず、ランダムな個体からなる母集団 P_0 を生成する。その後、母集団内の評価値に基づいて親個体を選択し、交叉・突然変異を適用して子集団を生成する。最後に、母集団を子集団と入れ替え終了条件を満たしていなければ上記の操作を繰り返す。

Algorithm 1 NSGA-IIのアルゴリズム

```

1:  $N$  個のランダムな個体からなる初期母集団  $P_0$  を生成し、全個体を評価する。
2:  $t = 0$ 
3: while 終了条件 do
4:   トーナメント選択によって親集団  $P_t'$  を選択する。
5:    $P_t'$  から子集団  $Q_t$  を生成し、全個体を評価する。
6:    $P_t \cup Q_t$  となる集団  $R_t$  を生成する。
7:    $R_t$  に対し、高速非優劣ソートを実行し、各ランクの集合  $F_1, \dots, F_{r_{max}}$  を得る。
8:    $P_{t+1} = \emptyset, r = 1$ 
9:   while  $|P_{t+1}| < N$  do
10:    if  $|P_{t+1}| + |F_r| \leq N$  then
11:       $P_{t+1} = P_{t+1} \cup F_r$ 
12:    else
13:      混雑度ソートを実行し、混雑度の大きい個体から順に  $|P_{t+1}| = N$  になるまで個体を  $P_{t+1}$  に追加する。
14:    end if
15:     $r = r + 1$ 
16:  end while
17:   $t = t + 1$ 
18: end while

```

Algorithm 2 遺伝的アルゴリズムの手順

```

1:  $N$  個のランダムな個体からなる初期母集団  $P_0$  を生成し、全個体を評価する。
2:  $t = 0$ 
3: while 終了条件 do
4:   評価値に従い、母集団  $P_t$  から親集団  $P_t'$  を  $N$  個体選択する。
5:   選択された解に対して交叉と突然変異を適用し、 $N$  個の解からなる子集団  $Q_t$  を生成する。
6:   母集団を子集団で入れ替える ( $P_{t+1} = Q_t$ )。
7:    $t = t + 1$ 
8: end while

```

3 提案手法

3.1 設計思想

従来研究で提案されたBIは上位レベルの1つの個体を持つ制約値に対して下位レベルで最適化問題を解き、最適解を求める。そのため、計算コストが大きくなる点や制約条件範囲すべてを考慮するため、非劣解集合から離れた、制約値に対して評価値が低い解が多く生成される点が問題点として挙げられる。そこで本研究では、BIを改良し、従来手法よりも効率的なデータ生成を可能にする手法を提案する。具体的には、一度に制約条件全体を考慮するのではなく、制約上限の小さい領域から探索を開始する。そして、数世代を特定の範囲の探索にあて、一定世代後に制約上限を拡張する。制約上限の拡張後は、直前に得られた解を次世代以降の探索に用いる。これにより、制約条件全体を一度に探索するよりも効率的に感度分析に必要な解集合を獲得することが可能になる。

Algorithm 3 提案手法のアルゴリズム

```
1: 制約下限値  $c_i^l = C_i^{min}$ , 制約上限値  $c_i^u = (C_i^{max} - C_i^{min}) \times 1/m$  ( $i = 1, \dots, L$ )
2: 初期母集団  $P_0$  を生成する.
3:  $t = 0, j = 0$ 
4: while 終了条件 do
5:   if  $t == (m - 1) \times n$  then
6:     制約下限値  $c_i^l = C_i^{min}$ , 制約上限値  $c_i^u = C_i^{max}$ 
7:     これまで得られた全個体から非優劣ソートによって  $N$  個体を選択し,  $P_t$  とする.
8:     else if  $t == (j + 1) \times n$  then  $\triangleright n$  世代ごと
9:        $j = j + 1$ 
10:      制約下限値  $c_i^l = (C_i^{max} - C_i^{min}) \times j/m + C_i^{min}$ , 制約上限値:  $(C_i^{max} - C_i^{min}) \times (j + 2)/m + C_i^{min}$ 
11:      if 制約条件を満たさない個体が存在 then
12:        制約条件のうち下限制約を満たしていない制約の値をその世代における下限値と元の上限值の  $1/m$  の和に置き換え
13:      end if
14:    end if
15:    上位レベル個体の制約条件を用いて, 下位レベルの最適化問題を解く.
16:    下位レベルの結果を上位レベルの個体の評価値に設定する.
17:    NSGA-II の処理
18:     $t = t + 1$ 
19: end while
```

3.2 提案手法の手順

提案手法の流れを Algorithm 3 に示す. 提案手法では, 上位レベルの NSGA-II の最適化において, 探索初期には制約値の上限と下限を全体よりも小さな範囲 (制約上限の小さな範囲) に制限し, 一定世代ごとに制約の上限, 下限を制約上限の最大値方向に変更する. 具体的に, 提案手法では Table 1 に示すように各世代において探索する制約値の上限と下限を変化させる. ここで, n は制約範囲を変更する世代間隔, m は制約範囲の分割数を示す. C_i^{min} と C_i^{max} は元の最適化問題の i 番目の制約の上限, および下限を表す.

初期世代では, 制約下限値は元の最適化問題の制約下限 (C_i^{min}), 制約上限値は制約下限値に制約範囲の $1/m$ 倍を加えた値 ($(C_i^{max} - C_i^{min}) \times 2/m + C_i^{min}$) となる. 以降, n 世代ごとに制約下限値と制約上限値はそれぞれ制約範囲の $1/m$ ずつ増加する. 最終的に, 制約上限値が元の制約上限 (C_i^{max}) に到達する $n \times (m - 1)$ 世代後以降は, 制約下限値, 上限値は元の最適化問題の制約下限値, 上限値とする.

提案手法において, 制約範囲の変更後に前世代で得た個体のうち現世代の制約条件を満たしている個体はそのまま母集団として引き継ぐ. 一方, 制約範囲の変更後に前世代の個体のうち下限制約を満たさない個体が存在する可能性がある. このような個体に対しては下限制約を満たしていない制約の値を x_i としたとき, $x_i = x_i + (C_i^{max} - C_i^{min})/m$ と置き換え, 評価値算出のために下位レベルの探索を実行する. 制約の変更が

完了し, 制約範囲全体の探索に移行する際にはそれまでの世代で得られた個体から非優劣ソートに基づいて個体を選択し, 母集団として用いる. その後, 上位レベルの個体によって与えられる制約条件を下位レベルの用いて最適化問題を解き, その結果を上位レベル個体の評価値に反映する. 上位レベルでは, 下位レベルの評価値と式 (4) で求まる制約値の 2 目的の評価値に対して NSGA-II の処理を行い, 世代を更新する.

4 実験

4.1 実験の目的

提案手法の有効性の検証のため, 従来手法と提案手法を用いて制約付き最適化問題のためのデータ生成実験を行う. 生成された解を比較し従来手法を用いた場合より効率的に解を得ることを示す. 具体的に, 生成された解分布を比較し, 従来手法より優れた非劣解集合が得られていることを確認する.

4.2 多次元ナップザック問題

従来研究では, BI の有効性の検証のため, 多次元ナップザック問題を用いた. 本実験でも, 従来研究と同様に多次元ナップザック問題を用いる.

多次元ナップザック問題は, ナップザック問題において単一の重量制約だけではなく, 複数の重量制約を同時に満たす解を探索する問題である. 多次元ナップザック問題は以下のように表すことができる⁵⁾.

$$\max \sum_{j=1}^d p_j y_j \quad (7)$$

$$\text{s.t.} \sum_{j=1}^d w_{ij} y_j \leq c_i, \quad i = 1, \dots, L \quad (8)$$

$$y_j \in \{0, 1\} \quad (9)$$

d 個の荷物のうち j 番目の荷物の価値は p_j で表せれる. 制約の種類は L 種類あり, j 番目の荷物の i 種類目の制約値を w_{ij} , c_i は i 種類目の制約の上限値を示す. このとき, それぞれの制約を満たしつつ目的関数が最大値を取る集合 y を得ることを目的とする. データ生成の際には, 制約上限 c_i の範囲を最小値の $C_i^{min} = 0$ から全荷物を選択した際の総重量 ($C_i^{max} = \sum_j w_{ij}$) とする. 各荷物の価値と重量の設定は, 従来研究で用いられた多次元ナップザック問題のベンチマークデータセット¹と同様のものを使用した. 制約数は $L = 5$, 荷物数は $d = 100$ であり, 各制約の上限 (総重量 C_i^{max}) は Table 2 のとおりである.

4.3 パラメータ設定

パラメータ設定は従来研究と同様の値を使用する. 上位レベルにおいては, 母集団サイズ 50 とし, 交叉には一様交叉, 一点交叉, 中間交叉の中からランダムに選択して適用する. 突然変異にはランダムウォーク変異を使用する. また, 上位レベルにおいて, 十分な解の数を得るため, 探索開始から 10 世代は停止条件を考慮しない. 下位レベルにおいては, 母集団サイズ 100, 最大世代数を 200 とした. 下位レベルでは, 終了条件として式 (10) を使用し, $\theta = 0.03$ とした. ここで, $f(y)$

¹<http://people.brunel.ac.uk/~mastjjb/jeb/orlib/files/mknapcb1.txt> (2022 年 5 月 25 日アクセス)

Table 1: 提案手法における各世代における制約範囲

世代	下限値	上限値
初期世代	C_i^{min}	$(C_i^{max} - C_i^{min}) \times 2/m + C_i^{min}$
n 世代	$(C_i^{max} - C_i^{min}) \times 1/m + C_i^{min}$	$(C_i^{max} - C_i^{min}) \times 3/m + C_i^{min}$
\vdots		
$j \times n$ 世代	$(C_i^{max} - C_i^{min}) \times j/m + C_i^{min}$	$(C_i^{max} - C_i^{min}) \times (j + 2)/m + C_i^{min}$
\vdots		
$n \times (m - 1)$ 世代以降	C_i^{min}	C_i^{max}

Table 2: 上位レベル個体の持つ制約上限値

制約 1	制約 2	制約 3	制約 4	制約 5
47707	54907	46203	52222	53840

は現在の目的関数値を, $f_{LPR}(y)$ は線形緩和によって求められる最適値を示す.

$$\theta = \frac{f_{LPR}(y) - f(y)}{f_{LPR}(y)} \quad (10)$$

制約条件を満たさない実行不可能解に対しては¹⁾で使用される修復法を適用し, 実行可能解を生成する. 具体的には, 選択されている荷物の中で制約値に対する利益の割合 (p_j/w_{ij}) が低い荷物から制約条件を満たすまで削除し, 実行可能解に修復する. 提案手法のパラメータである制約範囲の変更世代間隔 n と, 領域の分割数 m はそれぞれ以下の値を検討する.

- 変更世代間隔 $n = \{1, 2, 3\}$
- 領域分割数 $m = \{4, 5, 6\}$

初期母集団を変えた 10 試行を行い, すべての試行で得られた解集合を統合して比較する.

4.4 評価基準

提案手法を用いて得た解集合を散布図として示し, 解の分布や非劣解集合の網羅度比較する. また, 定量的な評価として得られた非劣解集合が覆う割合を以下の式 (11) で算出して比較する.

$$OS_{ij} = \frac{\max_{y_j \in A_i} y_j - \min_{y_j \in A_i} y_j}{\max_{y_j \in \cup_k A_k} y_j - \min_{y_j \in \cup_k A_k} y_j} \quad (11)$$

ここで, y_j は j 番目の目的関数値, A_i は i 試行目得られたすべての解の集合を表す. 分母は提案手法と従来手法で各 10 試行実験した結果得られたすべての解集合の中での最大目的関数値と最大目的関数値の差であり, 分子は各試行の最大目的関数値と最大目的関数値の差を表す. OS_{ij} の値が大きいほど広範囲のデータを生成できていると評価する.

5 結果

5.1 提案手法における制約範囲の変更世代間隔と領域分割数の影響

Fig. 1a~1c に制約範囲の変更世代間隔 n を 1 から 3 世代に設定した結果を示す. 図において, 横軸は上位レベル個体の制約値, 縦軸は上位レベル個体の目的関数値を表す. 各点は領域の分割数 m の違いを表し, 青色の点は $m = 6$ の条件で生成された解, オレンジ色の点は $m = 5$ の条件で生成された解, 灰色の点は $m = 4$ の条件で生成された解を示す.

Table 3: 各提案手法によって生成された解の数

	$m = 4$	$m = 5$	$m = 6$
$n = 1$	6877	6939	9547
$n = 2$	7488	7170	7965
$n = 3$	7420	8530	10398

まず, 1 世代ごとに制約の上限値, 下限値を変更し, このときの実験結果を Fig.1a に示す. この結果から, m の値が小さくなるほど非劣解集合から離れた場所に解が生成されている. しかし, m の値が大きくなるほど非劣解集合の分布が一部不連続になっている.

次に, 2 世代ごとに制約の上限値, 下限値を変更した結果を Fig.1b に示す. m の値の変化による影響は 1 世代ごとに制約を変化させた場合と同様に, m が小さいほど非劣解集合から離れた領域に解が生成され, 大きいほど分布が不連続になる特徴が確認された. また, 1 世代ごとに制約を変化させた場合の結果と比べると, 解全体が非劣解集合に近づいていることが確認できる.

最後に, 3 世代ごとに制約の上限値, 下限値を変更した結果を Fig.1c に示す. 1, 2 世代ごとに制約を変更させた場合と比較すると, 非劣解集合付近に解が集中して生成されていることが確認できる.

Table 3 に各提案手法を用いた際に生成された解の個数を示す. Table 3 より, n, m ともに値が大きくなると, 生成される解の個数が増加する傾向があることがわかる.

これらの結果から, n, m ともに値が大きくなると非劣解集合に近い場所に解が生成されやすく, また, 探索終了時まで得られる解の個数が増加する傾向がみられる. また, m の値の増加によって非劣解集合の分布が一部不連続になることがわかった.

5.2 既存手法との比較

提案手法のそれぞれの結果を比較した際, 非劣解集合の網羅度, 解の分布から, $n = 2, m = 6$ の場合が最も優れていると判断し, 既存手法と比較する. Fig. 2 は既存手法と提案手法 ($n = 2, m = 6$) の実行結果を一つの図にまとめたものである. オレンジ色の点は提案手法で生成された解, 青色の点は既存手法で生成された解を示す.

提案手法を用いた場合, 既存手法を用いた場合よりも制約範囲が 0 から約 4000, 約 40000 以上の範囲においてより評価値の良い解, 及び発見できていない範囲の解を得ることができた. さらに, 既存手法と提案手法 ($n = 2, m = 6$) の結果得られた解集合を定量的に評価するために, 式 (11) を用いて制約, 評価値の探索できた範囲と各試行における探索範囲のばらつきを比較する. Table 4 は既存手法と提案手法における制約,

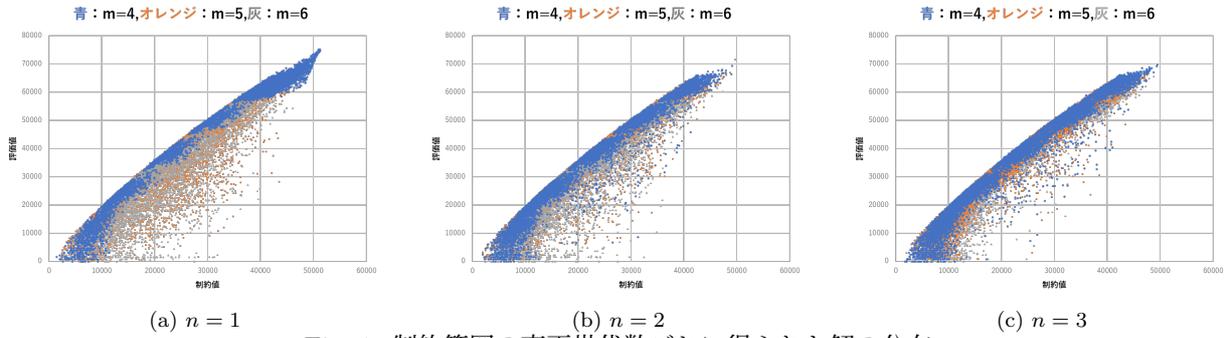


Fig. 1: 制約範囲の変更世代数ごとに得られた解の分布

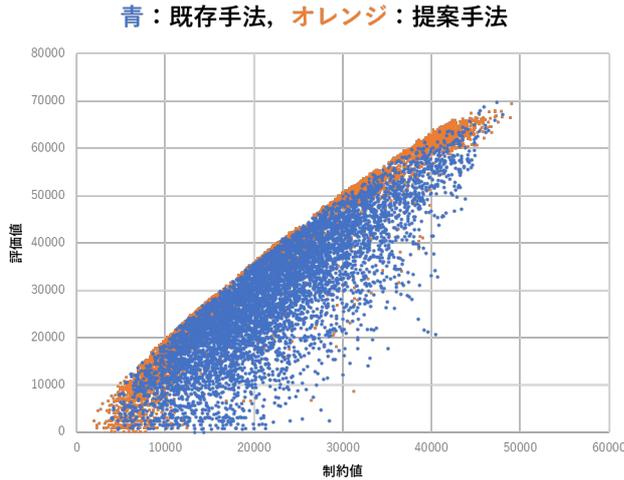


Fig. 2: 既存手法と提案手法 ($n = 2, m = 6$) の実行結果

Table 4: 既存, 提案手法における制約, 評価値の探索範囲の割合の平均と標準偏差

	評価値		制約値	
	平均	標準偏差	平均	標準偏差
既存手法	0.7978	0.1007	0.7649	0.1002
提案手法	0.9271	0.0249	0.8789	0.0347

評価値の探索範囲の割合 (OS_{ij}) の平均と標準偏差を示す。

Table 4 より, 提案手法の方が既存手法よりも評価値, 制約値ともに広範囲の解を網羅的に発見することができている。また, 標準偏差を比較すると, 提案手法の方が既存手法より発見できた解の範囲に試行ごとのばらつきが少なかった。

以上の結果から, 提案手法を用いた方が安定して広範囲の解を網羅的に発見できると言える。

6 考察

提案手法では制約範囲を制限しながら探索するため, 既存手法を用いた場合では発見できなかった制約範囲の両端の解を発見することができた。また, 提案手法同士を比較すると制約範囲の変更世代間隔 n の値が大きくなると生成される下位レベルの解の目的関数値が改善される。これは各制約範囲での探索回数が増えるためである。また, 領域分割数 m の値が大きくなると生成される下位レベルの解の目的関数値が大きくなる。これは m の値が大きくなるほど探索範囲が狭くなるため, 高い評価を持つ解が発見しやすくなるためである。

しかし, 分割数 m を増加させると, 探索範囲を変更する回数が増加するため評価数の増加が問題となる。

7 おわりに

本研究では, 進化計算を用いる感度分析法である Bilevel Innovization において評価回数を削減し, 効率的な感度分析を可能にする手法を提案した。具体的には, 探索時に制約上限の小さい範囲から探索し, 数世代ごとに制約上限を拡張する手法を提案した。また, 制約拡張後は直前に得られている解を次の探索の初期集団に利用することで評価回数削減を目指した。提案手法の有効性検証するため多次元ナップザック問題のベンチマーク問題を用いて従来手法と比較する実験を行った。実験では探索範囲 n を 1, 2, 3 世代ごとに変更, 制約範囲の分割数 m を 4, 5, 6 の条件で実験した。

実験の結果, 探索世代数の変更間隔 n と制約範囲の分割数 m の値を増加させるほどより制約値に対して目的関数値が高い解を得やすくなることがわかった。また, 既存手法と比較すると提案手法は非劣解集合に近い解を多く生成でき, より広い範囲で解を求めることが可能であった。

今後は, 制約範囲の分割数を増加させた際に非劣解集合が一部不連続になってしまうことや, 制約範囲の変更回数が増えるため解の評価数が増加してしまう課題を解決する改良手法を考案する。また, 本研究では, 多次元ナップザック問題を 2 目的問題として解いたが, 他の制約付き最適化問題や多目的問題に適用可能かについても検証する予定である。

参考文献

- 1) P. C. Chu and J. E. Beasley. A genetic algorithm for the multidimensional knapsack problem. *Journal of heuristics*, 4(1):63–86, 1998.
- 2) K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 6(2):182–197, 2002.
- 3) S. Dempe and A. Zemkoho. Bilevel optimization. In *Springer optimization and its applications. Vol. 161*. Springer, 2020.
- 4) D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, 1 edition, 1989.

- 5) H. Kellerer, U. Pferschy, and D. Pisinger. Some selected applications. In *Knapsack Problems*, pp. 449–482. Springer, 2004.
- 6) L. Martí, J. García, A. Berlanga, and J. M. Molina. An approach to stopping criteria for multi-objective optimization evolutionary algorithms: The mgbm criterion. In *2009 IEEE congress on evolutionary computation*, pp. 1263–1270. IEEE, 2009.
- 7) A. Saltelli. Sensitivity analysis for importance assessment. *Risk Analysis*, 22(3):579–590, 2002.
- 8) J. Schulte and V. Nissen. Sensitivity analysis in constrained evolutionary optimization. In *Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference*, pp. 894–902, 2020.
- 9) A. Sinha, P. Malo, and K. Deb. A review on bilevel optimization: From classical to evolutionary approaches and applications. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 22(2):276–295, 2018.

多変量大脳新皮質学習アルゴリズムのための適応的シナプス調整

○藤野和志[†] 青木健[‡] 高玉圭樹[†] 佐藤寛之[†] ([†]電気通信大学, [‡]東京理科大学)

A Study on Synapse Adaptation in Multivariate Cortical Learning Algorithm

*K. Fujino[†], T. Aoki[‡], K. Takadama[†], and H. Sato[†]

([†]The University of Electro-Communications, [‡]Tokyo University of Science)

Abstract— This paper proposes a synapse adaptation methodology in a multivariate cortical learning algorithm (CLA) receiving and predicting multiple time-series data simultaneously. CLA is a time-series data prediction algorithm. To predict multiple time-series data, we employ multiple CLA predictors. One CLA predictor corresponds to one time-series data. Multiple CLA predictors are associated with each other by synapses. However, the synapse relation between multiple CLA predictors harms the multivariate prediction when the multiple time-series data are lowly related. The proposed method evaluates a partial prediction accuracy for each synapse segment and adaptively adds and deletes synapses based on the partial prediction accuracy. This works to suppress the synapses crossing multiple CLA predictors, which harms the simultaneous predictions of multiple time-series data. Experiments using artificial and real-world meteorological data show that the proposed multivariate CLA achieves higher prediction accuracy than the conventional CLA by suppressing the harmful effects caused by synapses crossing multiple predictors.

Key Words: Cortical learning algorithm, Multivariate time-series prediction, Adaptive synapse adjustment

1 はじめに

時系列予測は、適切な未来の意思決定に必要な不可欠な情報技術であり、計算知能の重要な研究課題の一つである。計算知能分野における時系列予測アルゴリズムの一つに、大脳新皮質学習アルゴリズム (Cortical Learning Algorithm, 以下 CLA)^{1, 2, 3)}がある。CLAは、人間の脳新皮質に基づいて考案された階層時間記憶 (Hierarchical Temporal Memory, 以下 HTM)^{4, 5)}を実装したアルゴリズムである。CLAの予測器は、2種類の記憶素子であるカラムとセル、それらに関連付ける結合素子であるシナプスで構成される。タクシーの需要予測⁶⁾や電力消費予測⁷⁾において、CLAが代表的なリカレントニューラルネットワークである長短期記憶 (long short-term memory)⁸⁾よりも高い予測精度を達成することが報告されている。そのため、CLAは、近年有望視されている時系列予測アルゴリズムの一つといえる。

気温や降水量、風速など、複数の時系列データを同時に予測することを多変量予測と呼ぶ。多変量予測は、複数の時系列データを同時に予測することで、単一時系列データの時系列予測だけでは実現不可能な高い精度の時系列予測を実現しようとするものである。従来のCLAは、単一時系列データの時系列予測から多変量予測に拡張できる^{9, 10, 11)}。その拡張方法の一つに、入力する時系列データの数だけ複数のCLA予測器を用いる方法がある^{10, 11)}。本稿では、この複数の予測器を用いるCLAを複数領域CLA (Multi-region CLA, 以下 MRCLA)と呼ぶ。従来のMRCLAは、複数の予測器間にシナプスを追加し、複数の時系列データ間の関連性を予測に利用する。しかし、複数の時系列データ間の関連性が弱い場合、異なる予測器間のシナプスは、予測の弊害になる。

本稿では、MRCLAの多変量予測精度を向上させることを目的に、シナプスの集合であるシナプスセグメントごとの部分予測精度に基づく適応的シナプス調整法を提案する。提案法では、各シナプスセグメントに

着目し、予測への寄与度を評価する。予測への寄与度は、各シナプスセグメントの部分予測精度で表現される。提案法は、各シナプスセグメントの部分予測精度に基づき、そのセグメントにおける追加するシナプス数と削除するシナプス数を決定し、シナプス数を適切に調整する。これにより、関連性が弱い時系列データを扱う予測器間において、横切るシナプス数を抑制することができる。提案法を用いたCLAを適応的シナプス調整に基づく複数領域CLA (MRCLA using adaptive synapse adjustment, 以下 MRCLA-ASA)と呼ぶ。提案法の効果を検証するため、人工的な複数の時系列データと実世界における複数の気象データを用いて、提案するMRCLA-ASAと従来のMRCLAを比較する。

2 大脳新皮質学習アルゴリズム (CLA)

2.1 予測器

Fig. 1に、単一の時系列データを予測する従来CLAの予測器を示す。CLAの予測器をリージョンRと呼ぶ。

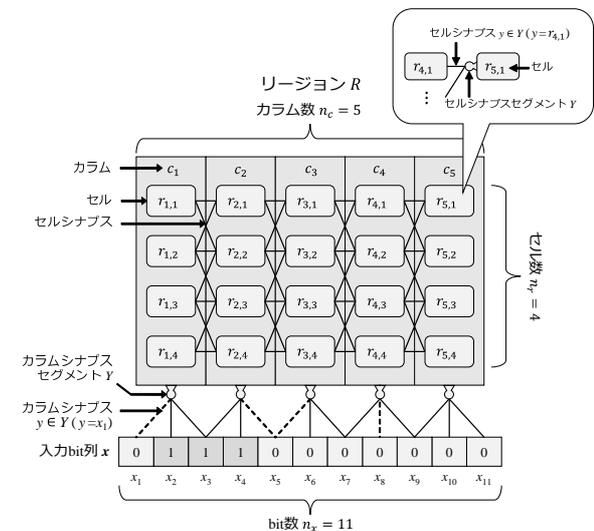
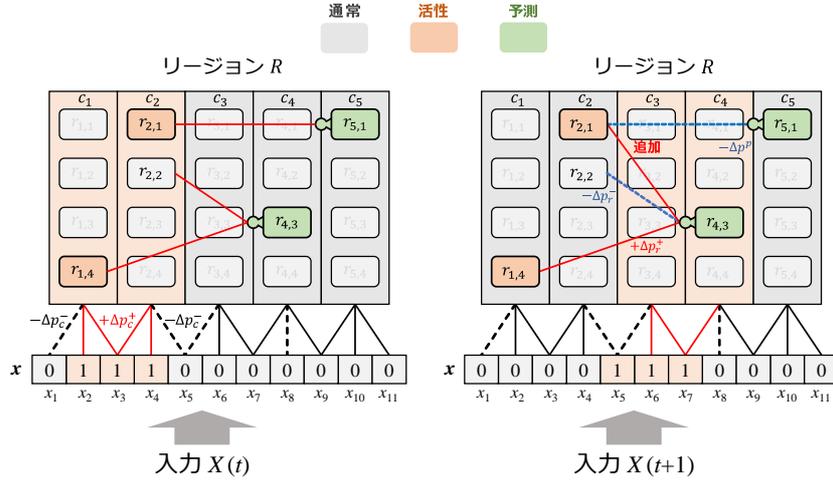


Fig. 1: 単一時系列データのためのCLA予測器



(a) 時点 t Fig. 2: CLA の処理 (b) 時点 $t+1$

各時点 t において、リージョン R は、入力 bit 列 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n_x}) \in \{0, 1\}^{n_x}$ を受け取る。 n_x は、bit 長である。リージョン R は、 n_c 本のカラム c_1, c_2, \dots, c_{n_c} を持つ。各カラム c_i には、通常と活性の 2 状態がある。各カラム c_i は、 n_r 個のセル $r_{i,1}, r_{i,2}, \dots, r_{i,n_r}$ を持つ。各セル $r_{i,j}$ には、通常、活性、予測の 3 状態がある。Fig. 1 は、 $n_x = 11$ の入力 bit 列、 $n_c = 5$ のカラム、 $n_r = 4$ のセルの例である。

シナプス y は、2つの素子を関連付ける役割を持つ。各シナプス y は、シナプスの集合であるシナプスセグメント Y に所属する。シナプス y がシナプスセグメント Y に所属することを $y \in Y$ で表現する。各カラム c_i とセル $r_{i,j}$ は、シナプスセグメント Y を持つ。カラムシナプス $y \in Y$ は、入力 bit 列と関連付けられる。 $y = x_i$ は、カラムシナプス y が bit x_i と関連付けられていることを意味する。セルシナプス $y \in Y$ は、あるセル $r_{i,j}$ と関連付けられる。 $y = r_{i,j}$ は、セルシナプス y がセル $r_{i,j}$ と関連付けられていることを意味する。各シナプスは、接続強度を表現する永続値 $p = [0, 1]$ を持つ。永続値 p には、接続閾値 θ_p がある。 $p \geq \theta_p$ である場合、その永続値を持つシナプス y は、接続状態になる。 $p < \theta_p$ である場合、その永続値を持つシナプス y は、切断状態になる。Fig. 1 では、接続状態のシナプスを実線で、切断状態のシナプスを破線で表現する。

2.2 アルゴリズム

CLA の処理を Fig. 2 に示す。各時点 t において、CLA は、(i) 二値化処理、(ii) 空間プーリング、(iii) 時間プーリング、(iv) デコードを実行する。以下で各処理について述べる。

(i) 二値化処理:

CLA は、時点 t における実数値入力 $X(t) = [X^{\min}, X^{\max}]$ を bit 列 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n_x}) \in \{0, 1\}^{n_x}$ の表現に変換し、入力 bit 列にする。本稿では、チャック方式⁷⁾を用いる。

(ii) 空間プーリング:

CLA は、入力 bit 列 \mathbf{x} の値を活性状態のカラムの組み合わせに変換することで、入力値を内部的に表現する。この処理を空間プーリングと呼ぶ。各カラム c_i において、接続状態のシナプスに関連付けられた値が 1

である bit 数を数える。その後、数えた bit の計数で降順にカラムを選択し、上位 θ_c 本のカラムを活性状態にする。このようにして、空間プーリングでは、入力 bit 列 \mathbf{x} の値を活性状態のカラムの組み合わせに変換する。

Fig. 2 (a) に例を示す。時点 t において、入力 bit 列が $x_2 = x_3 = x_4 = 1$ であったとする。カラム c_1 には、入力 bit $x_2 = 1$ と $x_3 = 1$ にそれぞれ関連付けられる 2つの接続状態のシナプスがあるため、bit の計数は 2 になる。カラム c_2 にも、入力 bit $x_3 = 1$ と $x_4 = 1$ にそれぞれ関連付けられる 2つの接続状態のシナプスがあるため、bit の計数は 2 になる。カラム c_3 から c_5 の bit の計数は、0 になる。 $\theta_c = 2$ の場合、カラム c_1 と c_2 を活性状態にする。

次に、活性状態である全てのカラムにおいて、値が 1 である bit に関連付けられるシナプスの永続値 p を Δp_c^+ 増加させる。また、値が 0 である bit に関連付けられるシナプスの永続値 p を Δp_c^- 減少させる。これにより、入力 bit 列と活性状態のカラムの対応関係を強化する。

Fig. 2 (a) に、永続値 p を更新する例を示す。活性状態であるカラム c_1 と c_2 において、bit $x_2 = x_3 = x_4 = 1$ と関連付けられるシナプスの永続値は、 Δp_c^+ 増加させる。また、bit $x_1 = x_5 = 0$ と関連付けられるシナプスの永続値は、 Δp_c^- 減少させる。

(iii) 時間プーリング:

CLA は、時点 t の入力値 $X(t)$ を時系列の文脈で表現し、次時点 $t+1$ の入力値 $X(t+1)$ を予測する。この処理を時間プーリングと呼ぶ。

初めに、活性状態のカラム内のセルを活性状態にする。活性状態のセルの組み合わせは、時点 t の入力値 $X(t)$ の時系列的文脈を表現する。Fig. 2 (a) では、セル $r_{1,4}$ と $r_{2,1}$ を活性状態にする。接続状態のシナプスで関連付けられた活性状態のセル数が θ_Y 以上のセルシナプスセグメント Y を活性状態にする。また、活性状態のセルシナプスセグメント Y を持つセルを予測状態にする。予測状態のセルの組み合わせは、次時点 $t+1$ に入力値 $X(t+1)$ の時系列的文脈を表現する。Fig. 2 (a) は、 $\theta_Y = 1$ にした場合、セル $r_{1,4}$ と $r_{2,1}$ が予測状態になる例である。

次に、Algorithm 1 で、活性状態のセルシナプスセ

Algorithm 1 従来 CLA のシナプス調整

Input: An active cell-synapse segment Y , which is a cell-synapse segment on a cell $r_{i,j}$ in column c_i

- 1: **procedure** CELL-SYNAPSE UPDATE (An active cell-synapse segment Y)
- 2: **if** column c_i is active at time $t + 1$ **then**
- 3: **Process 1** :
- 4: **for each** cell-synapse $y \in Y$ **do**
- 5: $p \leftarrow \begin{cases} p + \Delta p_r^+, & \text{if associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t, \\ p - \Delta p_r^-, & \text{otherwise.} \end{cases}$
- 6: **end for**
- 7: $n_{\text{cur}} \leftarrow |\{y \in Y \mid \text{associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t\}|$
- 8: $n_{\text{gen}} \leftarrow \max\{n_{\text{max}} - n_{\text{cur}}, 0\}$
- 9: Generate new n_{gen} cell-synapses to active cell-synapse segment Y
- 10: Associate the new cell-synapses with randomly selected n_{gen} active cells at time t
- 11: **else**
- 12: **Process 2** :
- 13: **for each** cell-synapse $y \in Y$ **do**
- 14: $p \leftarrow \begin{cases} p - \Delta p^p, & \text{if associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t, \\ p, & \text{otherwise.} \end{cases}$
- 15: **end for**
- 16: **end if**
- 17: **end procedure**

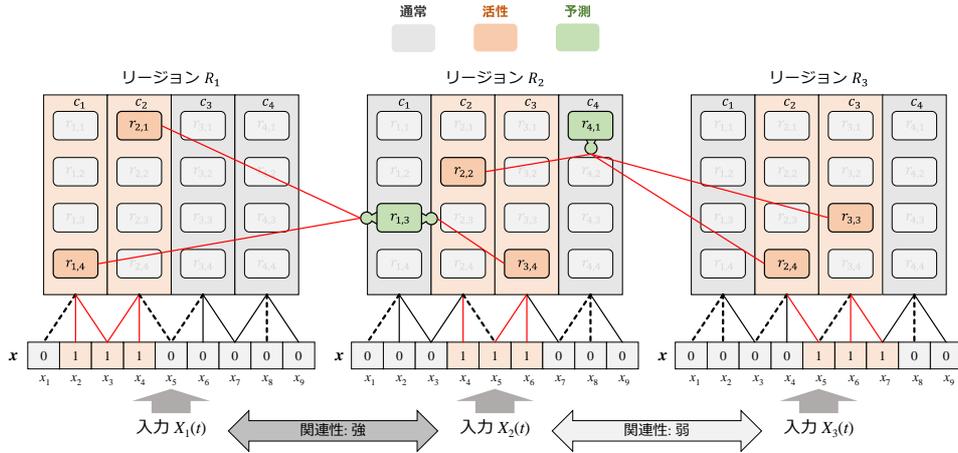


Fig. 3: 複数時系列データのための多変量 CLA 予測器

グメント Y を更新する。次時点 $t+1$ において、予測状態のセル $r_{i,j}$ を含むカラム c_i が活性状態になった場合、**Process 1** を実行する。Fig. 2(b) では、セル $r_{4,3}$ のセルシナプスセグメント Y が該当する。まず、セルシナプスセグメント Y において、時点 t の活性状態のセルに関連付けられたシナプス y の永続値 p を Δp_r^+ だけ増加させる。それ以外のシナプス y の永続値 p は、 Δp_r^- だけ減少させる。その後、時点 t で活性状態であったセルとの間にシナプスを追加する。まず、時点 t で活性状態のセルに関連する接続状態のシナプス数 n_{cur} を数え、追加するシナプス数 $n_{\text{gen}} = \max\{n_{\text{max}} - n_{\text{cur}}, 0\}$ を算出する (Algorithm 1 の行 7, 行 8)。ここでの n_{max} は、最大追加シナプス数である。行 9 において、更新するセルシナプスセグメント Y に、 n_{gen} 本のシナプスを追加する。Fig. 2(b) では、セル $r_{4,3}$ のセルシナプスセグメント Y とセル $r_{2,1}$ の間にシナプスを追加する。また、次時点 $t+1$ において、予測状態のセル $r_{i,j}$ を含むカラム c_i が活性状態にならなかった場合、**Process 2** を実行する。Fig. 2(b) では、セル $r_{5,1}$ のセルシナプスセグメント Y が該当する。セルシナプスセグメント Y において、時点 t の活性状態のセルに関連付けられたシナプス y の永続値 p を Δp^p だけ減少させる。

(iv) デコード:

CLA は、予測状態のセルの組み合わせを予測値 $\hat{X}(t+1)$ にデコードする。本稿では、Column-based decoder¹²⁾ を用いる。

3 複数領域 CLA

3.1 手法

複数の入力値を同時に処理する多変量予測のために、様々な CLA が提案されている^{9, 10, 11)}。その手法の内、複数空間プーリング階層時間記憶 (Multiple Spatial poolers HTM)¹⁰⁾ と多変量 CLA (Multivariate CLA)¹¹⁾ は、複数のリージョンで構成される。本稿では、複数のリージョンで構成される CLA を複数領域 CLA (MRCLA) と呼ぶ。MRCLA の概念図を Fig. 3 に示す。時点 t において、 n 次元の入力ベクトル $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), X_2(t), \dots, X_n(t)) \in \mathbb{R}^n$ を扱うために、MRCLA は、 n 個のリージョン R_1, R_2, \dots, R_n を用いる。Fig. 3 は、3 次元の入力ベクトル $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), X_2(t), X_3(t))$ と 3 個のリージョン R_1, R_2, R_3 の例である。各リージョン R_i において、カラムとセルは、入力ベクトル $\mathbf{X}(t)$ に基づき、活性状態になる。各リージョン R_i でセルシナプスセグメントを活性状態にする際に、MRCLA は、全てのリージョン R_i ($i = 1, 2, \dots, n$) を参照する。

3.2 問題点

従来の MRCLA は、2 節で説明した単一リージョンの CLA と同様の基準で、セルシナプスを調整する。従来の MRCLA が関連性が弱い複数の時系列データを受け取る場合、異なる予測器間を関連付けるシナプスは、多変量予測の弊害になる。この問題を解決するために

Algorithm 2 提案する適応的シナプス調整

Input: An active cell-synapse segment Y , which is a cell-synapse segment on a cell $r_{i,j}$ in column c_i

```

1: procedure CELL-SYNAPSE UPDATE (An active cell-synapse segment  $Y$ )
2:    $\tau \leftarrow \tau + 1$ 
3:   if column  $c_i$  is active at time  $t + 1$  then
4:     Process 1 :
5:     for each cell-synapse  $y \in Y$  do
6:        $p \leftarrow \begin{cases} p + \Delta p_r^+, & \text{if associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t, \\ p - \Delta p_r^-, & \text{otherwise.} \end{cases}$ 
7:     end for
8:      $n_{\text{cur}} \leftarrow |\{y \in Y \mid \text{associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t\}|$ 
9:      $\rho \leftarrow \begin{cases} \frac{(\tau-1) \cdot \rho + 1}{\tau}, & \text{if } \tau \leq \theta_\tau, \\ \frac{(\theta_\tau-1) \cdot \rho + 1}{\theta_\tau}, & \text{otherwise.} \end{cases}$ 
10:     $n_{\text{gen}} \leftarrow \lfloor (1 - \varphi \cdot \rho^w) \cdot \max\{n_{\text{max}} - n_{\text{cur}}, 0\} \rfloor$ 
11:    Generate new  $n_{\text{gen}}$  cell-synapses to active cell-synapse segment  $Y$ 
12:    Associate the new cell-synapses with randomly selected  $n_{\text{gen}}$  active cells at time  $t$ 
13:  else
14:    Process 2 :
15:    for each cell-synapse  $y \in Y$  do
16:       $p \leftarrow \begin{cases} p - \Delta p^p, & \text{if associated cell } r (= y) \text{ is active at time } t, \\ p, & \text{otherwise.} \end{cases}$ 
17:       $\rho \leftarrow \begin{cases} \frac{(\tau-1) \cdot \rho + 0}{\tau}, & \text{if } \tau \leq \theta_\tau, \\ \frac{(\theta_\tau-1) \cdot \rho + 0}{\theta_\tau}, & \text{otherwise.} \end{cases}$ 
18:       $n_{\text{del}} \leftarrow \lfloor (1 - \rho^w) \cdot |Y| \rfloor$ 
19:      Delete worst  $n_{\text{del}}$  cell-synapses on permanence values  $p$  in the segment  $Y$ 
20:    end for
21:  end if
22: end procedure

```

は、正確な予測に関与しないセルシナプスの追加を抑制する必要がある。さらに、正確な予測に関与しないセルシナプスの削除も必要である。

4 提案: 適応的シナプス調整に基づく複数領域 CLA

4.1 概要

本稿では、MRCLA の多変量予測精度を向上させることを目的に、セルシナプスの集合であるセルシナプスセグメントごとの部分予測精度に基づく適応的シナプス調整法を提案する。提案法は、各セルシナプスセグメントの部分予測精度を評価する。また、セルシナプスセグメントの部分予測精度に基づき、セグメントのシナプス数を適応的に調整する。提案法は、セルシナプスセグメントの部分予測精度が低い場合、シナプスの追加を抑制し、かつ、シナプスの削除を強化するように動作する。

Algorithm 2 に、提案法の処理を示す。提案する **Algorithm 2** は、従来のセルシナプスセグメントの更新処理 **Algorithm 1** を代替する。**Algorithm 2** において、**Algorithm 1** との差異を青色で示す。**Algorithm 1** の代わりに **Algorithm 2** を用いる MRCLA を MRCLA-ASA と呼ぶ。

4.2 セルシナプスセグメントの部分予測精度

全てのセルシナプスセグメント Y において、提案法は、活性回数 τ と部分予測精度 ρ を測定する。**Fig. 4** は、セルシナプスセグメント Y に活性回数 τ と部分予測精度 ρ を関連付けている例である。

まず、セルシナプスセグメント Y が活性状態になり、所属するセルを予測状態にした際に、そのセルシナプスセグメント Y の活性回数 τ を 1 増やす (**Algorithm 2** の 5 行目)。セルシナプスセグメント Y の部分予測精度 ρ は、活性回数 τ に対する予測の成功割合に基づいて計算される。値域は、 $\rho = [0, 1]$ である。初期値は、 $\rho = 1$ にする。セルシナプスセグメント Y の部分予測

精度 ρ は、以下の式で算出する。

$$\rho' = \begin{cases} \frac{(\tau-1) \cdot \rho + \kappa}{\tau}, & \text{if } \tau \leq \theta_\tau, \\ \frac{(\theta_\tau-1) \cdot \rho + \kappa}{\theta_\tau}, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 ρ が更新前の部分予測精度、 ρ' が更新後の部分予測精度である。セルシナプスセグメント Y の予測が正しい場合、 $\kappa = 1$ にする (**Algorithm 2** の 9 行目)。セルシナプスセグメント Y の予測が誤っている場合、 $\kappa = 0$ にする (**Algorithm 2** の 17 行目)。

部分予測精度 ρ に対する直近の正誤 κ の影響が極端に減少することを避けるため、閾値パラメータ θ_τ を用いる。

4.3 適応的シナプス調整

提案法は、セルシナプスセグメント Y の部分予測精度 ρ に基づき、そのセルシナプスセグメント Y におけるシナプスの追加と削除をする。

追加するシナプス数 n_{gen} は、以下の式で算出する。

$$n_{\text{gen}} = \lfloor (1 - \varphi \cdot \rho^w) \cdot \max\{n_{\text{max}} - n_{\text{cur}}, 0\} \rfloor, \quad (2)$$

ここでは、 $\varphi = \min(|Y|/n_{\text{max}}, 1)$ であり、セルシナプスセグメント Y におけるシナプスの占有率である。 $|Y|$ を Y に所属するシナプスの数にする。 n_{max} を各セグメントにおける最大追加シナプス数にする。 w を範囲が $[0, 1]$ の指数重みパラメータにする。

セルシナプスセグメント Y の部分予測精度 ρ とシナプス占有率 φ が高いほど、より少ない数 n_{gen} のシナプスが追加される。セルシナプスセグメント Y の部分予測精度 ρ とシナプス占有率 φ が低いほど、より多くの数 n_{gen} のシナプスが追加される。追加するシナプス数 n_{gen} の度合は、指数重みパラメータ w で制御する。

削除するシナプス数 n_{del} は、以下の式で算出する。

$$n_{\text{del}} = \lfloor (1 - \rho^w) \cdot |Y| \rfloor. \quad (3)$$

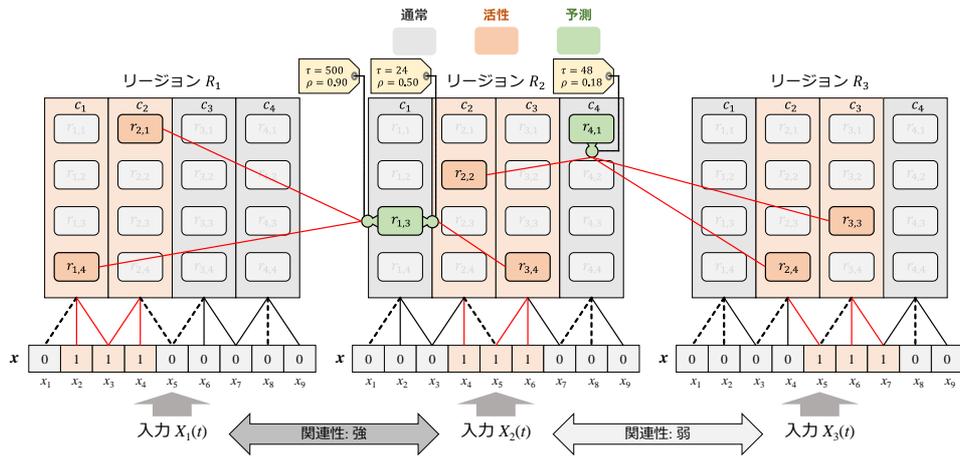


Fig. 4: 時点 t における提案する MRCLA-ASA

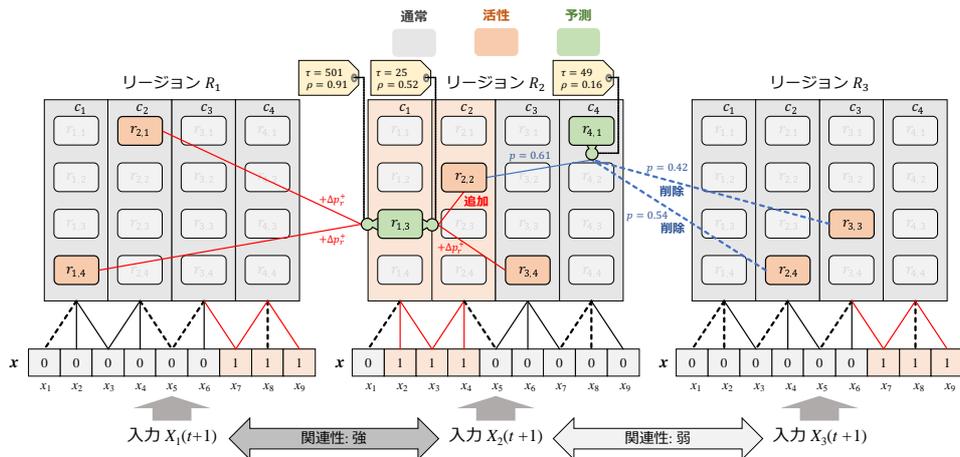


Fig. 5: 次時点 $t + 1$ における提案する MRCLA-ASA

部分予測精度 ρ が高いほど、より少ない数 n_{del} のシナプスが削除される。部分予測精度 ρ が低いほど、より多くの数 n_{del} のシナプスが削除される。

4.4 動作例

Fig. 4 と Fig. 5 に、 X_1 と X_2 の関連性が強く、 X_2 と X_3 の関連性が弱い複数の時系列データの例を示す。Fig. 4 において、 X_1 と X_2 は、協調的な予測ができるため、リージョン R_1 の活性状態のセルと繋がるリージョン R_2 のセルシナプスセグメントの部分予測精度 ρ は、高くなる。一方で、 X_2 と X_3 は、協調的な予測ができないため、リージョン R_3 の活性状態のセルと繋がるリージョン R_2 のセルシナプスセグメントの部分予測精度 ρ は、低くなる。

Fig. 5 に、シナプスの追加と削除の例を示す。次時点 $t+1$ において、リージョン R_2 のカラム c_1 が活性状態になった場合、セル $r_{1,3}$ の予測状態化は、正しかったことになる。この場合、セル $r_{1,3}$ の二つのセルシナプスセグメント Y に、Algorithm 2 の Process 1 を実行し、活性状態化を促進する。永続値の更新後、 $\rho = 0.52$ のように部分予測精度 ρ が低い場合は、新しいシナプスを追加する。次時点 $t+1$ において、リージョン R_2 のカラム c_4 が活性状態にならなかった場合、セル $r_{4,1}$ の予測状態化は、誤っていたことになる。この場合、セル $r_{4,1}$ のセルシナプスセグメント Y に、Algorithm 2 の Process 2 を実行し、活性状態化を抑制する。永続値の更新後、 $\rho = 0.16$ のように部分予測精度 ρ が低い

場合は、永続値 p が小さい順にシナプスを削除する。

4.5 期待される効果

提案法は、適応的シナプス調整によって、各セルシナプスセグメントにおける部分予測精度を高めることで、各リージョンの予測精度を向上させる。複数の入力時系列データの関連性が弱い場合、提案法は、その時系列データに対応するリージョン間を横切るシナプスを削除する。これにより、提案法は、多変量予測に対する悪影響を抑制できる。一方で、複数の入力時系列データの関連性が強い場合、提案法は、その時系列データに対応するリージョン間を横切るシナプスを追加し、維持する。これにより、提案法は、複数の時系列データの関連性を利用した協調的な予測を実現できる。

5 実験設定

5.1 アルゴリズム

Algorithm 2 を適応した提案する MRCLA-ASA と Algorithm 1 を適応した従来の MRCLA を比較する。

5.2 時系列データ

人工的な時系列データと実世界における東京の気象データの 2 種類を用いる。

Table 1: 人工的な時系列データの組み合わせ

	入力 X_1	入力 X_2	入力 X_3
ケース 1	X_{\sin}	X_{saw}	X_{const}
ケース 2	X_{\sin}	X_{saw}	X_{log}
ケース 3	X_{\sin}	X_{saw}	X_{tri}

人工的な時系列データを以下の式で定義する.

$$X_{\sin}(t) = \sin\left(\frac{2\pi t}{100}\right), \quad (4)$$

$$X_{\text{saw}}(t) = \frac{2(t \bmod 100)}{100} - 2 \left\lfloor \frac{2(t \bmod 100)}{100} \right\rfloor, \quad (5)$$

$$X_{\text{tri}}(t) = \left\lfloor \frac{(t \bmod 100)}{25} - 4 \left\lfloor \left\lfloor \frac{(t \bmod 100)}{50} - \frac{1}{2} \right\rfloor - 1 \right\rfloor - 1 \right\rfloor, \quad (6)$$

$$X_{\text{const}}(t) = 0.5, \quad (7)$$

$$X_{\text{log}}(t) = 3.875 \cdot X_{\text{log}}(t-1) \cdot \{1 - X_{\text{log}}(t-1)\}. \quad (8)$$

ここで, $X_{\text{log}}(0) = 0.4$ である. 多変量予測のため, 従来の MRCLA と提案する MRCLA-ASA に, それぞれの単一時系列データを組み合わせて入力する. **Table 1** に, 3つの実験ケースにおける人工的な時系列データの組み合わせを示す. 合計の時点数は, 100,000 にする. この人工的な時系列データを用いた実験では, 波形の周波数によって, 複数の時系列データの関連性が決まる. X_{\sin} と X_{saw} には, 関連性がある. X_{\sin} と X_{tri} には, 関連性がある. X_{\sin} と X_{const} には, 関連性がない. X_{\sin} と X_{log} には, 関連性がない.

東京の気象データは, 1日の平均気温 [$^{\circ}\text{C}$], 1日の合計降水量 [mm], 1日の平均風速 [m/s] の3つの時系列データで構成される. この気象データは, 気象庁のホームページ¹³⁾ で提供されている. データの期間は, 1982年2月10日から2009年6月28日までである. 1日のデータを1時点分のデータにする. また, 合計の時点数は, 10,000 にする. 1日の平均風速のデータには, 欠損が含まれているため, その月の平均風速で補完する.

5.3 パラメータ

$n = 3$ の時系列データの入力し, 同時に予測するために, 従来の MRCLA と提案する MRCLA-ASA では, $n = 3$ のリージョンを用いる. 各リージョンのカラム数を $n_c = 1,024$ にする. また, 活性状態になるカラム数を $\theta_c = 20$ にする. セル数は, $n_r = 4$ にする. 入力ビット列の長さを $n_x = 190$, 値が1になるビット数を $\omega = 10$ にする. また, カラムシナプスの接続閾値 θ_p を 0.1 にする. 永続値の増加量は, $\Delta p_c^+ = 0.1$ にし, 減少量を $\Delta p_c^- = 0.00025225$ にする. セルシナプスセグメント Y の活性閾値 θ_Y を 15 にする. また, セルシナプスの接続閾値 θ_p を 0.3 にする. 永続値の増加量と減少量は, $\Delta p_p^+ = \Delta p_p^- = 0.1$ にする. 永続値の違反減少量は, $\Delta p^p = 0.005$ にする.

提案する MRCLA-ASA では, 活性回数の閾値 θ_r を 1,000 にする.

5.4 評価指標

二乗平均平方根誤差 (root mean squared error, 以下 RMSE)¹⁴⁾ を用いる. 各時系列データにおいて, RMSE を以下の式で算出する.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (X(t) - \hat{X}(t))^2} \quad (9)$$

ここでは, $X(t)$ が時点 t における真の入力値, $\hat{X}(t)$ が $X(t)$ の予測値である. 本稿では, $N = 100$ にし, $N = 100$ 時点毎に二つの MRCLA の RMSE を算出する. また, 比較には, 各 MRCLA を 31 回試行し, 得られた RMSE の平均値を用いる.

6 実験結果と考察

6.1 人工的な時系列データ

Figs. 6–8 に, 従来の MRCLA と, 事前実験によって見出した適切な w に設定した MRCLA-ASA の各時点における RMSE の推移を示す. **Fig. 6 (a)** の $X_{\sin}(t)$ の結果から, 提案する MRCLA-ASA は, 学習初期に RMSE が小さな値に収束する. それに対し, 従来の MRCLA は, 学習初期に RMSE が一時的に減少した後, 0.6 程度まで悪化していることがわかる. 従来の MRCLA では, $X_{\text{const}}(t)$ のリージョンと $X_{\sin}(t)$ のリージョンを横切るセルシナプスが徐々に増加する. これらのセルシナプスは, 正しい予測に寄与せず, $X_{\sin}(t)$ の予測の弊害になる. 一方で, 提案する MRCLA-ASA は, 各時点において, 収束後の低い RMSE を維持する. このことから, 提案する適応的シナプス調整法が正しく機能していることがわかる. 似た状況を **Fig. 7 (c)** でも確認できる. **Fig. 7 (c)** において, 5,000 時点付近から従来の MRCLA の RMSE が悪化している. 一方で, 提案する MRCLA-ASA は, 各時点において, 収束後の低い RMSE を維持する. これらの結果は, 提案する MRCLA-ASA が, リージョン間を横切るセルシナプスを適切に調整できることを示す.

6.2 実世界の気象データ

Fig. 9 に, 提案する MRCLA-ASA の指数重みパラメータ w を変化させた場合の平均 RMSE の結果を示す. 各図では, 参考として従来の MRCLA の平均 RMSE を水平線で示している. また, エラーバーは, 標準偏差を示している.

Fig. 9 (a), (b) と **(c)** から, 特定の w の範囲で, 提案する MRCLA-ASA は, すべての気象データにおいて, 従来の MRCLA よりも低い平均 RMSE を達成していることがわかる. また, 指数重みパラメータ w を調整することで, 提案する MRCLA-ASA の予測精度が向上することがわかる. 実世界の気象データ予測では, $w = 0.05$ が提案する MRCLA-ASA に適切であることがわかる.

Fig. 10 に, 従来の MRCLA と $w = 0.05$ に設定した MRCLA-ASA の各時点における RMSE の推移を示す. **Fig. 10 (a)** の平均気温において, 従来の MRCLA では RMSE を減少させることが困難であることがわかる. 一方で, 提案する MRCLA-ASA では, RMSE が徐々に減少し, 小さい値に収束していることがわかる. この結果から, 提案する MRCLA-ASA が安定した予測を実現できることがわかる. また, **Fig. 10 (b)** と **(c)** から, 従来の MRCLA と提案する MRCLA-ASA の RMSE の推移は, ほぼ同じであることがわかる. 一

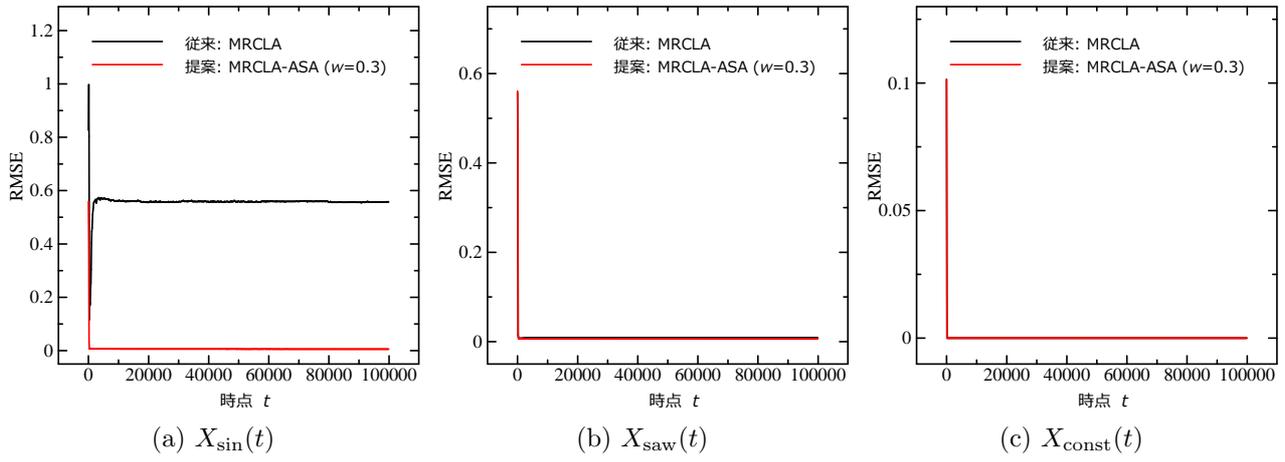


Fig. 6: ケース 1 における時点毎の RMSE の推移

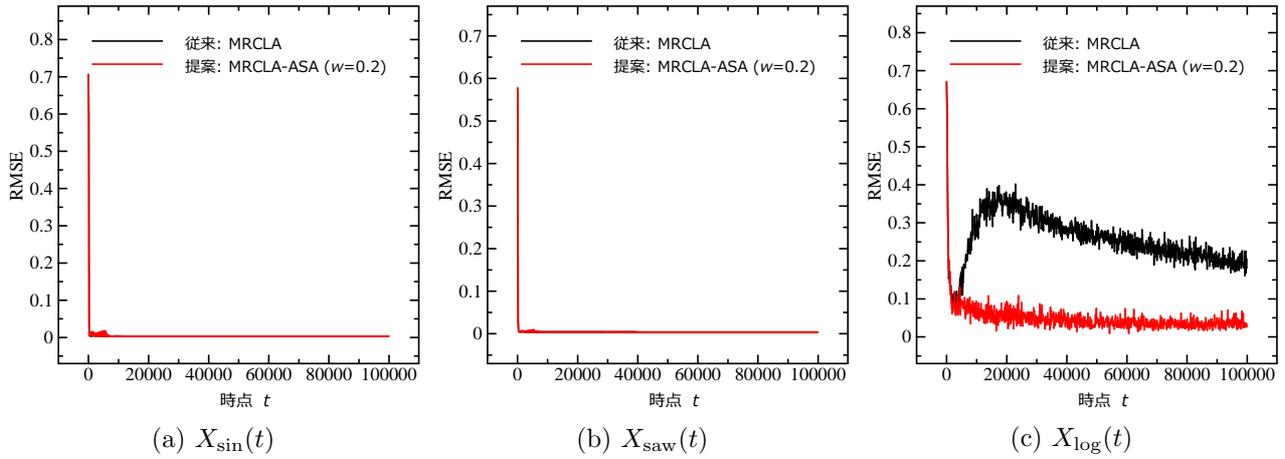


Fig. 7: ケース 2 における時点毎の RMSE の推移

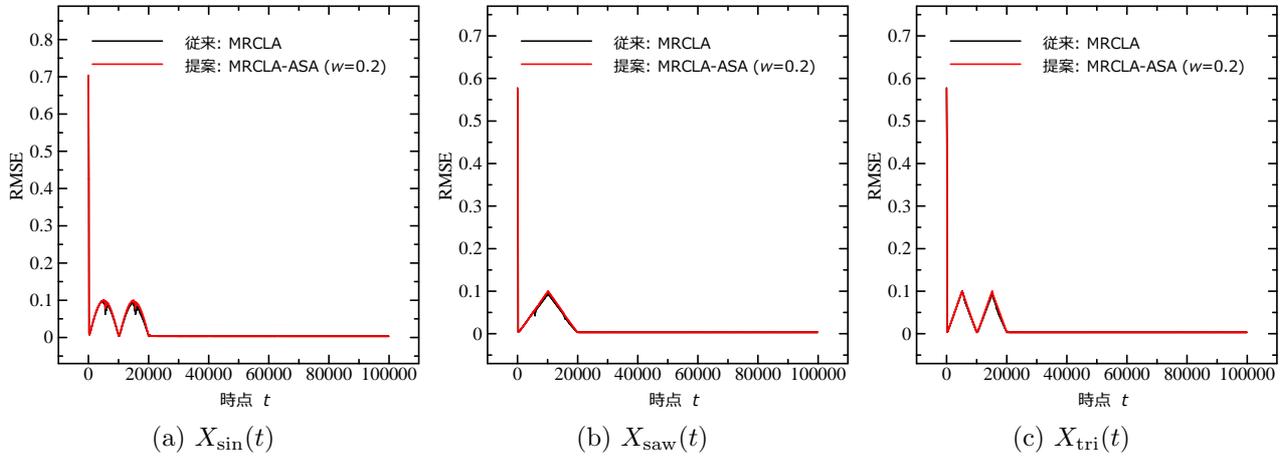


Fig. 8: ケース 3 における時点毎の RMSE の推移

方で、提案する MRCAL-ASA は、従来の MRCLA よりも RMSE の変化の幅が小さくなる傾向が見られる。

これらの気象データを用いた実験の結果から、提案する MRCAL-ASA の有効性が確認された。

7 まとめ

本稿では、MRCLA の多変量予測精度を向上させることを目的に、適応的シナプス調整法を提案した。提案法は、各セルシナプスセグメントの部分予測精度を推定する。その部分予測精度を用いて、セルシナプスセグメントへのシナプスの追加と削除をする。人工的

な時系列データと実世界の気象時系列データを用いた実験の結果、提案法は、多変量予測によって引き起こされる弊害を抑制し、予測精度の向上に寄与することを明らかにした。

今後は、指数重みパラメータ w の自動決定機構を設計する予定である。

参考文献

- 1) J. Hawkins, A. Subutai, and D. Dubinsky, "Hierarchical Temporal Memory Including HTM Cortical Learning Algorithms," *Technical report*, Numenta Inc., 2010.

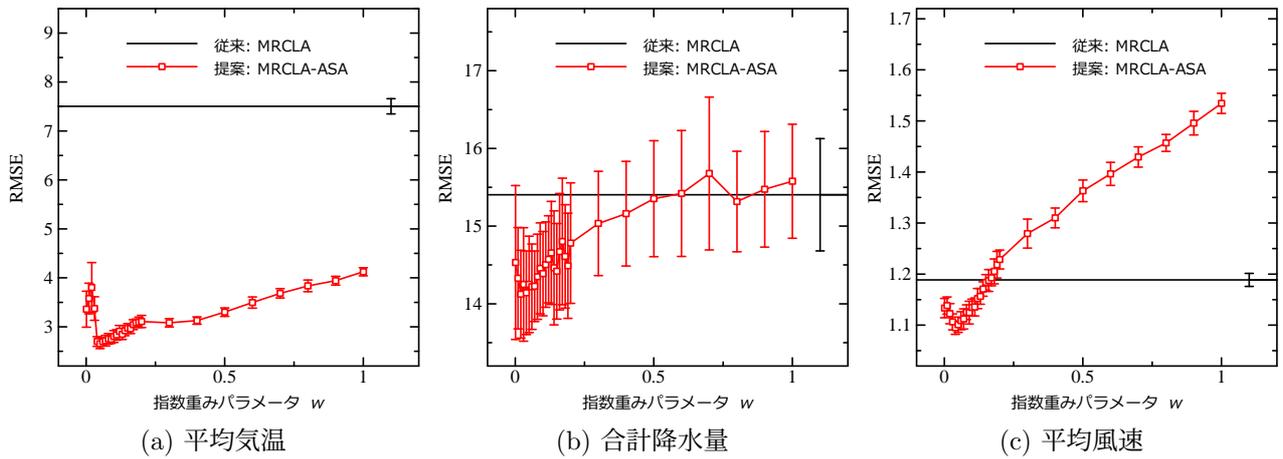


Fig. 9: 実世界の気象データにおける指数重みパラメータ w を変化させた場合の平均 RMSE

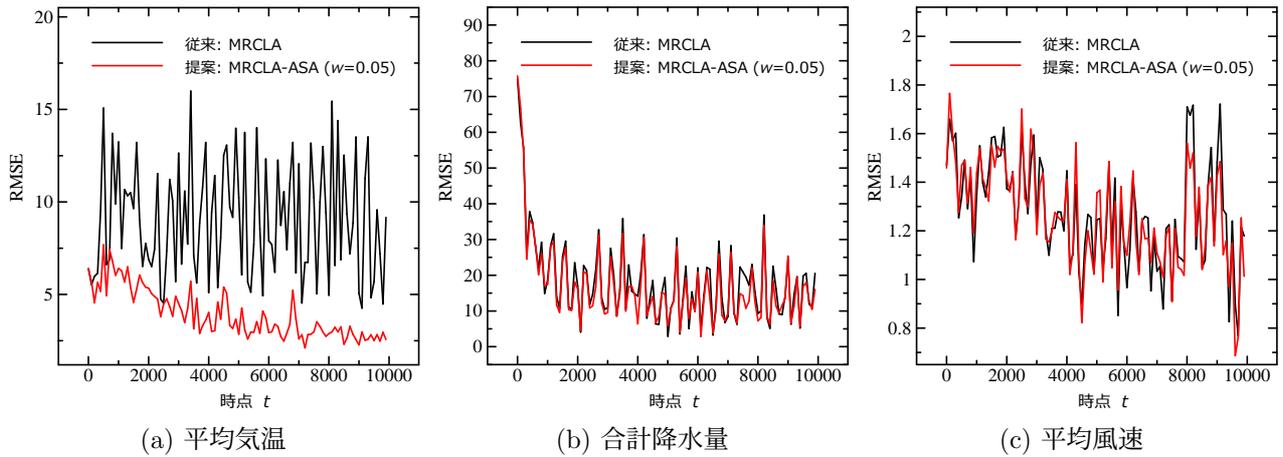


Fig. 10: 実世界の気象データにおける時点毎の RMSE の推移

- 2) J. Hawkins and A. Subutai, "Why Neurons Have Thousands of Synapses, a Theory of Sequence Memory in Neocortex," *Frontiers in Neural Circuits*, Vol. 10, pp. 1–13, 2016.
- 3) HTM.core, <https://github.com/htm-community/htm.core>, Apr. 11th, 2022 access.
- 4) J. Hawkins and S. Blakeslee, *On Intelligence: How a New Understanding of the Brain Will Lead to the Creation of Truly Intelligent Machines*, Times Books, 2005.
- 5) S. Ahmad and J. Hawkins, "Properties of Sparse Distributed Representations and their Application to Hierarchical Temporal Memory," *Technical report*, Numenta Inc., pp. 1–18, 2015.
- 6) Y. Cui, S. Ahmad, and J. Hawkins, "Continuous Online Sequence Learning with an Unsupervised Neural Network Model," *Neural Computation*, Vol. 28, Issue 11, pp. 2474–2504, 2016.
- 7) T. Aoki, K. Takadama, and H. Sato, "Adaptive Synapse Arrangement in Cortical Learning Algorithm," *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics (JACIII)*, Vol. 25, No. 4, pp. 450–466, 2021.
- 8) S. Hochreiter and J. Schmidhuber, "Long Short-Term Memory," *Neural Computation*, Vol. 9, No. 8, pp. 1735–1780, 1997.
- 9) D. Rozado, F. Rodriguez, and P. Varona, "Optimizing Hierarchical Temporal Memory for Multivariable Time-series," *Artificial Neural Networks ICANN 2010*, Vol. 6353, pp. 506–518, 2010.
- 10) H. Zeng, X. Zhao, and L. Wang, "Multivariate Time Series Anomaly Detection on Improved HTM Model," *Proc. in 2021 IEEE International Conference on Computer Science, Electronic Information Engineering and Intelligent Control Technology (CEI)*, pp. 759–763, 2021.
- 11) A. Nagashima, T. Aoki, K. Takadama, and H. Sato, "A Study on Multivariate Complementing Missing Time-series Data," *The 7th UEC Seminar in ASEAN, 2020 and The 2nd ASEAN-UEC Workshop on Energy and AI*, pp. 1–2, 2020.
- 12) T. Aoki, K. Takadama, and H. Sato, "Column-based Decoder of Internal Prediction Representation in Cortical Learning Algorithms," *Proc. in 2020 Joint 11th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 21st International Symposium on Advanced Intelligent Systems (SCIS&ISIS)*, pp. 1–7, 2020.
- 13) Japan Meteorological Agency, <https://www.data.jma.go.jp/gmd/risk/obsdl/index.php>, Apr. 11th, 2022 access.
- 14) J. Armstrong and F. Collopy, "Error Measures For Generalizing About Forecasting Methods: Empirical Comparisons," *International Journal of Forecasting*, Vol. 8, pp. 69–80, 1992.
- 15) S. Shapiro and M. Wilk, "An Analysis of Variance Test for Normality (Complete Samples)," *Biometrika*, Vol. 52 No. 3/4, pp. 591–611, 1965.
- 16) H. Mann and D. Whitney, "On a Test of Whether one of Two Random Variables is Stochastically Larger than the Other," *The Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 18, No. 1, pp. 50–60, 1947.

逐次変分自己符号化器の効率的な学習アルゴリズム

○石曾根毅（明治大学） 樋口知之（中央大学） 中村和幸（明治大学）

An Efficient Algorithm for Learning Sequential Variational AutoEncoders

*T. Ishizone (Meiji University), T. Higuchi (Chuo University),
and K. Nakamura (Meiji University)

Abstract— Sequential variational variational autoencoders (SVAEs) have attracted attention in a wide range of fields such as time series data prediction and feature extraction. SVAEs is a framework that extends variational autoencoders (VAEs) to time series and can infer latent variables and transition structures behind the data. In this study, we propose a method to learn SVAEs more efficiently using sequential Bayesian filtering, and show its effectiveness on multiple synthetic and real data.

Key Words: generative model, time-series, sequential Bayes filtering

1 緒言

ビッグデータ社会と称される現代において、画像処理や自然言語処理など幅広い分野において、人工知能 (AI) が重要や役割を果たしている。画像処理の分野では、深層学習が画像分類の精度を競う ImageNet competition¹⁾ で圧倒的な精度を達成した 2012 年以降、画像生成や高解像度化、深度予測、セマンティックセグメンテーションなどのタスクで数多のブレイクスルーを生み出した^{2, 3, 4, 5)}。先日発表された Imagen⁶⁾ はキャプションに合致する画像を高精度で生成することができ、社会に衝撃を与えた。自然言語処理の分野では、Transformer⁷⁾ の発表以来、対話や感情分析、機械翻訳などの分野で深層学習は著しい成功を収めた^{8, 9)}。これらのように、深層学習はデータから帰納的に情報を抽出し、広範なタスクを解くことができる手法として社会を席卷している。

人工知能による情報抽出のプロセスは、しばしば大規模なデータセットを必要とする。例えば、画像分類におけるベンチマークデータセットである ImageNet は 1400 万枚以上の画像とラベルが収められている。自然言語処理における標準的ベンチマークである GLUE¹⁰⁾ の QQP タスク (質問ペアの等価性を判断するタスク) は 75 万個のデータから構成されている。しかし、現実的には大規模なデータセットが得られない場合の方が多く、深層学習は容易に過学習に陥る。

過学習に対する処方箋として、転移学習や fine-tuning が知られている¹¹⁾。これらの手法では、大規模事前学習済みモデルの重みを固定したり初期値として用いることで、少量のデータ数でも新規のドメインやタスクの問題を解くことが可能になる。しかし、大規模事前学習済みモデルが使えるのは、画像や自然言語を対象とする場合に限られる。例えば、心電図や電力使用量など一般の時系列データを対象とする場合には適切な事前学習済みモデルは存在しない。

このようなデータ数が限られた時系列の学習においては、ヒューリスティクスや帰納的バイアスを活用する計算知能が重要な役割を果たす。一般の時系列データに対して、予測や異常検知の深層学習モデルは、モデル構造に専門知や時系列特有の性質を導入することが多い。

各目標時系列に応じて、多種多様な深層学習モデルが提案される中、それらの学習を効果的に促進できる手法も提案されてきた。本発表では、時系列データに対する深層学習モデルのうち、逐次変分自己符号化器 (SVAEs; sequential variational autoencoders) と呼ばれるモデルクラスに焦点を当てる。SVAEs の学習を促進する手法として、IWAE^{12, 13)} や FIVO¹⁴⁾ が提案されてきたが、これらは粒子効率が悪いという問題を抱えていた。本発表で示す手法は、粒子効率の面でこれら 2 つの手法を凌駕し、複数の合成・実データセットに対して優れた予測精度を示した。

本稿は以下の流れで構成されている。2 章では、SVAEs について具体的なモデルを示す。3 章では、提案手法で活用する ensemble Kalman filter (EnKF) について概説する。4 章では、提案手法について紹介する。5 章では、複数の実・合成データセットに対する実験結果を示す。最後に、6 章で結論を述べる。

2 逐次変分自己符号化器

SVAEs は、変分自己符号化器 (VAE; variational autoencoder) を時系列に拡張したモデルとして表現される。VAE は、符号化器と呼ばれる推論分布 $q_{\varphi}(z|x)$ と復号化器と呼ばれる観測分布 $g_{\theta}(x|z)$ によって構成される。VAE は深層生成モデルの一種であり、生成過程 $g_{\theta}(x|z)$ を得ることが一つの目的である。生成過程が得られることで、未知の観測生成や異常データの判別が可能になる。

VAE では、周辺対数尤度 $\log p_{\theta}(X)$ の下界として定義される変分下界 (ELBO; evidence lower bound)

$$\log p_{\theta}(X) \geq \mathbb{E}_{q_{\varphi}(Z|X)} \left[\log \frac{p_{\theta}(X, Z)}{q_{\varphi}(Z|X)} \right] \quad (1)$$

$$=: \mathcal{L}_{\text{ELBO}}(\theta, \varphi, X), \quad (2)$$

を最大化することによってパラメータ θ, φ を学習する。ELBO の最大化は、周辺事後分布 $p_{\theta}(Z|X)$ と推論分布 $q_{\varphi}(Z|X)$ の擬距離である Kullback-Leibler ダイバージェンスの最小化と等価であるため、推論分布は周辺事後分布を変分近似した変分事後分布とみなすことができる。

SVAEs は VAE の生成過程と推論過程に時間構造を取り入れたモデルの総称であり、推論分布 $q_{\varphi}(z_t|X)$,

Table 1: SVAEs の例

Network	VRNN ¹⁵⁾	SRNN ¹⁶⁾	SVO ¹⁷⁾
推論分布	$q_\varphi(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{1:t-1}, \mathbf{x}_{1:t})$	$q_\varphi(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{t-1}, \mathbf{x}_{1:T})$	$q_\varphi(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{t-1}, \mathbf{x}_{1:T})$
観測分布	$g_\theta(\mathbf{x}_t \mathbf{z}_{1:t}, \mathbf{x}_{1:t-1})$	$g_\theta(\mathbf{x}_t \mathbf{z}_t, \mathbf{x}_{1:t-1})$	$g_\theta(\mathbf{x}_t \mathbf{z}_t)$
状態遷移分布	$f_\theta(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{1:t-1}, \mathbf{x}_{1:t-1})$	$f_\theta(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{t-1}, \mathbf{x}_{1:t-1})$	$f_\theta(\mathbf{z}_t \mathbf{z}_{t-1})$
グラフ			

観測分布 $g_\theta(\mathbf{x}_t | \mathbf{z}_{1:t})$ と状態遷移分布 $f_\theta(\mathbf{z}_t | \mathbf{z}_{1:t-1})$ によって構成される。生成過程は、観測分布と状態遷移分布によって

$$p_\theta(X, Z) = f_\theta(\mathbf{z}_1) \prod_{t=2}^T f_\theta(\mathbf{z}_t | \mathbf{z}_{1:t-1}) \prod_{t=1}^T g_\theta(\mathbf{x}_t | \mathbf{z}_{1:t}) \quad (3)$$

と表現される。ここで、 $\mathbf{z}_{1:t} = \{\mathbf{z}_s\}_{s=1}^t$ 、 $Z = \{\mathbf{z}_t\}_{t=1}^T$ のように時系列を束ねた表現をしていることに留意されたい。SVAEs によって時系列の生成過程が得られれば、未知の時系列データの生成や予測、モデルの乖離を元とした異常検知などが可能となる。

代表的な SVAEs を Table 1 に挙げる。図中のグラフにおける実線は推論過程、点線は生成過程、丸囲みは確率の変数、四角囲みは決定的変数を表している。各モデルの違いは、前述した 3 つの確率分布の構成方法にある。VRNN ¹⁵⁾ では時間前進方向のみの観測を用いて潜在状態を推論している一方、SRNN ¹⁶⁾ や SVO ¹⁷⁾ では時間後進方向も利用している。SVO では状態遷移分布の構成がマルコフ性を満たすのに対し、VRNN や SRNN は非マルコフな状態遷移を仮定している。

3 Ensemble Kalman Filter

EnKF は、式 (3) で表される確率的時系列モデル (PTSM; probabilistic time-series model) において、新しい観測 \mathbf{x}_t に応じて状態 \mathbf{z}_t を逐次的に更新する逐次ベイズフィルタの一種である。EnKF では、各状態分布 $p_\theta(\mathbf{z}_t | \mathbf{x}_{1:s})$ を粒子のアンサンブルによって

$$p_\theta(\mathbf{z}_t | \mathbf{x}_{1:s}) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\mathbf{z}_t | s}^{(i)}(\mathbf{z}_t) \quad (4)$$

と表現する。ここで、 $\mathbf{z}_t^{(i)}$ は観測 $\mathbf{x}_{1:s}$ 条件付きでの第 i 粒子の状態、 $\delta(\cdot)$ はデルタ関数を表す。

オリジナルの EnKF ¹⁸⁾ は、線形な観測モデルと加法的なノイズ

$$\mathbf{x}_t = H_t \mathbf{z}_t + \mathbf{w}_t, \quad \mathbf{w}_t \sim p_{\theta, w}(\mathbf{w}_t). \quad (5)$$

を仮定し、新しい観測に対して

$$\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} \sim f_\theta(\mathbf{z}_t | \mathbf{z}_{1:t-1|t-1}^{(i)}), \quad \forall i \in \mathbb{N}_N \quad (6a)$$

$$\bar{\mathbf{z}}_{t|t-1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)}, \quad (6b)$$

$$\Sigma_{t|t-1}^z = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{t|t-1})(\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{t|t-1})^T, \quad (6c)$$

$$\mathbf{w}_t^{(i)} \sim p_{\theta, w}(\mathbf{w}_t), \quad \forall i \in \mathbb{N}_N, \quad (6d)$$

$$\bar{\mathbf{w}}_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_t^{(i)}, \quad (6e)$$

$$\Sigma_t^w = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{w}_t^{(i)} - \bar{\mathbf{w}}_t)(\mathbf{w}_t^{(i)} - \bar{\mathbf{w}}_t)^T, \quad (6f)$$

$$K_t = \Sigma_{t|t-1}^z H_t^T (H_t \Sigma_{t|t-1}^z H_t^T + \Sigma_t^w)^{-1}, \quad (6g)$$

$$\mathbf{z}_{t|t}^{(i)} = \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} + K_t (\mathbf{x}_t - H_t \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} - \mathbf{w}_t^{(i)}), \quad \forall i \in \mathbb{N}_N, \quad (6h)$$

と粒子を更新する ¹⁹⁾。ここで、 $\mathbb{N}_N = \{1, \dots, N\}$ は N 以下の自然数の集合を表す。

オリジナルの手法を非線形観測モデル

$$\mathbf{x}_t = h_\theta(\mathbf{z}_t) + \mathbf{w}_t, \quad \mathbf{w}_t \sim p_{\theta, w}(\mathbf{w}_t) \quad (7)$$

へと拡張するには、拡張 PTSM

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{z}}_t &= \begin{pmatrix} \mathbf{z}_t \\ h_\theta(\mathbf{z}_t) \end{pmatrix} \\ &\sim \tilde{f}_\theta(\tilde{\mathbf{z}}_t | \tilde{\mathbf{z}}_{1:t-1}) \\ &= f_\theta((I_{d_z} \quad O_{d_x}) \tilde{\mathbf{z}}_t | (I_{d_z} \quad O_{d_x}) \tilde{\mathbf{z}}_{1:t-1}), \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_t &= (O_{d_z} \quad I_{d_x}) \tilde{\mathbf{z}}_t + \mathbf{w}_t = \tilde{H}_t \tilde{\mathbf{z}}_t + \mathbf{w}_t \\ &\sim \tilde{g}_\theta(\mathbf{x}_t | \tilde{\mathbf{z}}_t) = g_\theta(\mathbf{x}_t | (I_{d_z} \quad O_{d_x}) \tilde{\mathbf{z}}_t) \end{aligned} \quad (8b)$$

に対して EnKF を適用すれば良い。

直感的には、EnKF は状態の精度と新しい観測の精度を用いて最適な状態推定値を計算していることに相当する。一方、別の逐次ベイズフィルタである粒子フィルタ (PF; particle filter) では、各粒子の尤度比に応じて状態粒子をリサンプリング (多項分布からサンプリング) する (Fig. 1)。これらの相違点は、EnKF ベースの提案法の PF ベースの先行研究に対する優位性に直結する。

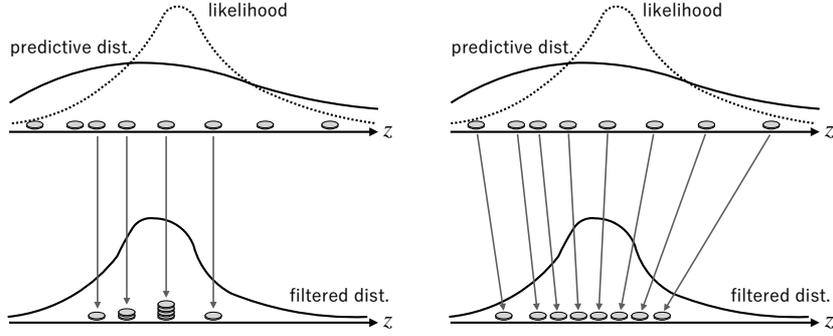


Fig. 1: PF (左) と EnKF (右) のフィルタリングの概念図

Algorithm 1 Ensemble Kalman Variational Objectives

```

1: EnKO( $\mathbf{x}_{1:T}, p_\theta, q_\varphi, N$ ):
2: for  $t \in \{1, \dots, T\}$  do
3:   for  $i \in \{1, \dots, N\}$  do
4:     if  $t = 1$  then
5:        $\mathbf{z}_1^{(i)} \sim q_\varphi(\mathbf{z}_1 | \mathbf{x}_{1:T})$ 
6:     else
7:        $\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} \sim q_\varphi(\mathbf{z}_t | \mathbf{x}_{1:T}, \mathbf{z}_{1:t-1|t-1}^{(i)})$ 
8:        $\mathbf{z}_{1:t|t-1}^{(i)} = \text{CONCAT}(\mathbf{z}_{1:t-1|t-1}^{(i)}, \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)})$ 
9:     end if
10:     $w_t^{(i)} = \frac{p_\theta(\mathbf{x}_t, \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} | \mathbf{x}_{1:t-1}^{(i)})}{q_\varphi(\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} | \mathbf{x}_{1:T}, \mathbf{z}_{1:t-1|t-1}^{(i)})}$ 
11:   end for
12:    $\{\mathbf{z}_{t|t}^{(i)}\}_{i=1}^N = \text{EnKF}(\{\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)}\}_{i=1}^N, \mathbf{x}_t)$ 
13: end for
14: return  $\hat{p}_N(\mathbf{x}_{1:T}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \prod_{t=1}^T w_t^{(i)}$ 

15: EnKF( $\{\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)}\}_{i=1}^N, \mathbf{x}_t$ ):
16: for  $i \in \{1, \dots, N\}$  do
17:    $\mathbf{x}_t^{(i)} \sim g_\theta(\mathbf{x}_t | \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)})$ 
18:    $\boldsymbol{\mu}_t^{x,(i)} = \mathbb{E}_g[\mathbf{x}_t^{(i)}] = h_\theta(\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)})$ 
19: end for
20:  $\bar{\mathbf{x}}_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_t^{(i)}$ 
21:  $\bar{\boldsymbol{\mu}}_t^x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\mu}_t^{x,(i)}$ 
22:  $\bar{\mathbf{z}}_{t|t-1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)}$ 
23:  $\Sigma_t^x = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_t^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}_t)(\mathbf{x}_t^{(i)} - \bar{\mathbf{x}}_t)^T$ 
24:  $\Sigma_t^{z\mu^x} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{t|t-1})(\boldsymbol{\mu}_t^{x,(i)} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_t^x)^T$ 
25:  $K_t = \Sigma_t^{z\mu^x} (\Sigma_t^x)^{-1}$ 
26: for  $i \in \{1, \dots, N\}$  do
27:    $\mathbf{z}_{t|t}^{(i)} = \mathbf{z}_{t|t-1}^{(i)} + K_t(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(i)})$ 
28: end for
29: return  $\{\mathbf{z}_{t|t}^{(i)}\}_{i=1}^N$ 

```

4 提案手法

SVAEsの学習に EnKF を取り入れることで、より観測に適合した生成モデルの学習を可能とする手法 EnKO (ensemble Kalman variational objective) を提案する。EnKO は PF ベースの従来法^{14, 20, 21, 22, 23}) に比べて 3 つの優位性を有している。

1. 粒子効率：PF ベースの手法はリサンプリング時に少数の粒子しか複製されなくなる粒子の退化が生

じることにより、多くの粒子を必要とする。一方、EnKF ベースの提案法では退化が生じないため、少量の粒子数で効率的に学習が行える。

2. 勾配推定量の不偏性：PF ベースの手法では、多項分布からのサンプリング計算による微分不可能性への対処として、近似的な連続緩和した分布²⁴) で計算を行う。これにより、勾配推定量にバイアスが生じてしまうが、提案法では勾配推定量にバイアスは生じない。
3. 勾配推定量の低分散性：実験的に提案法の勾配推定量は低分散であることを示すことができ、安定的な学習を可能とする。

提案法は、目的関数

$$\mathcal{L}_{\text{EnKO}}^N(\theta, \varphi, X) := \mathbb{E}_{Q_E(\mathbf{z}_{1:T}^{(1:N)}, \mathbf{x}_{1:T}^{(1:N)} | X)}[\log \hat{p}_N(\mathbf{x}_{1:T})], \quad (9)$$

$$\hat{p}_N(\mathbf{x}_{1:T}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \prod_{t=1}^T \frac{f_\theta(\mathbf{z}_t^{(i)} | \mathbf{z}_{1:t-1}^{(i)}) g_\theta(\mathbf{x}_t | \mathbf{z}_t^{(i)})}{q_\varphi(\mathbf{z}_t^{(i)} | \mathbf{x}_{1:T}, \mathbf{z}_{1:t-1}^{f,(i)})}, \quad (10)$$

$$Q_E(\mathbf{z}_{1:T}^{(1:N)}, \mathbf{x}_{1:T}^{(1:N)} | X) = \prod_{t=1}^T \prod_{i=1}^N \{q_\varphi(\mathbf{z}_t^{(i)} | \mathbf{x}_{1:T}, \mathbf{z}_{1:t-1}^{f,(i)}) \cdot g_\theta(\mathbf{x}_t^{(i)} | \mathbf{z}_t^{(i)})\}, \quad (11)$$

を最大化することでパラメータを学習する。ここで、 $f_\theta(\mathbf{z}_1 | \mathbf{z}_{1:0}) = f_\theta(\mathbf{z}_1)$, $q_\varphi(\mathbf{z}_1^{(i)} | \mathbf{x}_{1:T}, \mathbf{z}_{1:0}^{f,(i)}) = q_\varphi(\mathbf{z}_1^{(i)} | \mathbf{x}_{1:T})$ であり、 $\hat{p}_N(\mathbf{x}_{1:T})$ は Algorithm 1 の出力に相当する。

5 実験

2 つのデータセットに対し、EnKO, IWAE¹²⁾, FIVO¹⁴⁾ を適用した実験を行った。SVAE としては SVO¹⁷⁾ を用い、学習率 0.001 とした Adam optimizer²⁵⁾ によって学習を行った。また、レイヤー数などのハイパーパラメータはグリッドサーチで選択し、定量的な結果は 3 回の実行の平均値である。

5.1 歩行データ

CMU motion capture library から subject 35 のうち、歩行運動を行っている時系列長 300 の 23 個のデータを取得した。先行研究^{26, 27)} に従い、速度 3 次元、関節角 47 次元のデータを中心化し、16 個の学習用、3 個の検証用、4 個のテスト用データに分割して、粒子数 128 として学習を行った。

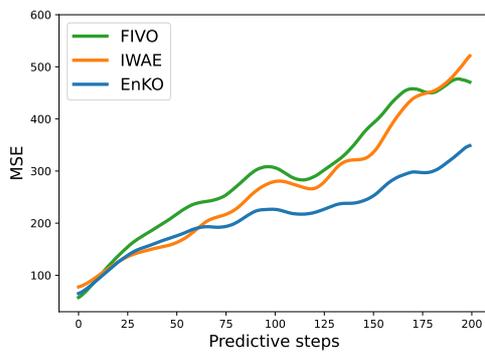


Fig. 2: 歩行データに対する平均予測 MSE

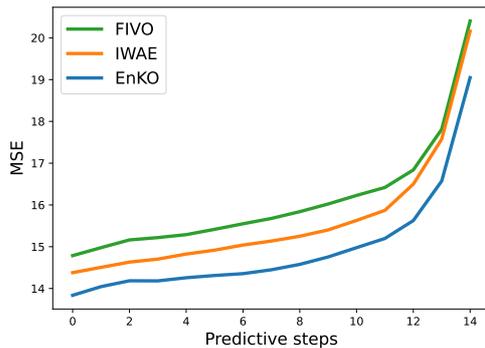


Fig. 3: 回転手書き文字データに対する平均予測 MSE

Fig. 2 は平均予測 MSE を示した結果である。EnKO は、特に長期予測に関して FIVO, IWAE を凌駕していることが分かる。

5.2 回転手書き文字データ

手書き文字データセット MNIST の「3」の数字を 16 種類の等間隔な角度で回転させたデータセット²⁸⁾を取得した。1042 データのうち、360 を学習用、40 を検証用、642 をテスト用に分割した。また、SVO の符号化器・復号化器の外側にそれぞれ CNN, Transposed CNN を追加し、粒子数 32 で学習を行った。

平均予測 MSE を Fig. 3 に示す。提案法は、一貫して FIVO と IWAE を凌駕していることが分かる。これらの結果から、提案法は SVAE の学習能力を向上させていると言える。

6 結言

本稿では、時系列データに対する深層生成モデルとして逐次変分自己符号化器のクラス (SVAEs) を紹介し、SVAEs の学習能力を向上させるための枠組みを提案した。提案法は、既存手法に対して 3 つの優位性 (粒子効率, 勾配推定量の不偏性・低分散性) を有しており、実験的にも予測精度の面で優れていた。

しかし、提案法は、目的関数が理論的に厳密な下界であることを示せない問題を抱えている。これは、EnKF と PF の目的意識の差異にも依拠している。EnKF は地球物理学などの分野でよく用いられる手法であり、計算コストの観点から粒子数をなるべく節約した近似的な性能の良さが求められる。一方、PF は粒子数極限での振る舞いなど推定量の理論的厳密性が担保されているため、両者は適切に使い分ける必要がある。今回の実験では、EnKF ベースの提案法の方が優れていたが、粒子数を十分大きくできる場合や強非線形な系に

対しては PF ベースの既存法の方が優れている場合もあるだろう。

今後の展望として、両者を融合していくことが考えられる。逐次バイズフィルタの文脈では、EnKF と PF を融合した adaptive Gaussian mixture filter や ensemble Kalman particle filter などが提案されている²⁹⁾。これらを SVAEs に適した形に改良して導入していく予定である。

参考文献

- 1) J. Deng, W. Dong, R. Socher, L.-J. Li, K. Li, L. Fei-Fei: “Imagenet: A large-scale hierarchical image database”, in IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, (2009)
- 2) A. Krizhevsky, I. Sutskever, G. E. Hinton: “ImageNet classification with deep convolutional neural networks”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), Vol.25, (2012)
- 3) Z. Wang, J. Chen, S. C. H. Hoi: “Deep learning for image super-resolution: A survey”, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.43, pp.2265–3387 (2021)
- 4) Y. Minga, X. Menga, C. Fana, H. iYu: “Deep learning for monocular depth estimation: A review”, Neurocomputing, Vol.138, pp.14–33 (2021)
- 5) A. Garcia-Garcia, S. Orts-Escolano, S. Oprea, V. Villena-Martinez, P. Martinez-Gonzalez, J. Garcia-Rodriguez: “A survey on deep learning techniques for image and video semantic segmentation”, Applied Soft Computing, Vol.70, pp.41–65 (2018)
- 6) C. Saharia, W. Chan, S. Saxena, L. Li, J. Whang, E. Denton, S. K. S. Ghasemipour, B. K. Ayan, S. S. Mahdavi, R. G. Lopes, T. Salimans, J. Ho, D. J. Fleet, M. Norouzi: “Photorealistic text-to-image diffusion models with deep language understanding”, arxiv preprint arxiv:2205.11487 (2022)
- 7) A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A. N. Gomez, L. Kaiser, I. Polosukhin: “Attention is all you need”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2017)
- 8) J. Devlin, M.-W. Chang, K. Lee, K. Toutanova: “Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding”, in North American Chapter of the Association for Computational Linguistics (NAACL), (2019)
- 9) Z. Lan, M. Chen, S. Goodman, K. Gimpel, P. Sharma, R. Soricut: “Albert: A lite bert for self-supervised learning of language representations”, in International Conference on Learning Representations (ICLR), (2020)
- 10) A. Wang, A. Singh, J. Michael, F. Hill, O. Levy, S. R. Bowman: “Glue: A multi-task benchmark and analysis platform for natural language understanding”, arXiv preprint arXiv:1804.07461 (2018)
- 11) F. Zhuang, Z. Qi, K. Duan, D. Xi, Y. Zhu, H. Zhu, H. Xiong, Q. He: “A comprehensive survey on transfer learning”, arxiv preprint arXiv:1911.02685 (2019)
- 12) Y. Burda, R. Grosse, R. Salakhutdinov: “Importance weighted autoencoders”, arXiv preprint arXiv:1509.00519 (2015)
- 13) J. Domke, D. Sheldon: “Importance weighting and variational inference”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2018)
- 14) C. J. Maddison, J. Lawson, G. Tucker, N. Heess, M. Norouzi, A. Mnih, A. Doucet, Y. Teh: “Filtering variational objectives”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2017)
- 15) J. Chung, K. Kastner, L. Dinh, K. Goel, A. Courville, Y. Bengio: “A recurrent latent variable model for sequential data”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2015)

- 16) M. Fraccaro, S. K. Sønderby, U. Paquet, O. Winther: “Sequential neural models with stochastic layers”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2016)
- 17) A. Moretti, Z. Wang, L. Wu, I. Pe’er: “Smoothing nonlinear variational objectives with sequential Monte Carlo”, in International Conference on Learning Representations (ICLR), (2019)
- 18) G. Evensen: “Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte-Carlo methods to forecast error statistics”, Journal of Geophysical Research: Oceans, Vol.99, No.C5, pp.10 143–10 162 (1994)
- 19) 樋口 知之・上野 玄太・中野 慎也・中村 和幸・吉田 亮 : 「データ同化入門次世代のシミュレーション技術」, 樋口 知之, Ed., 朝倉書店 (2011)
- 20) T. A. Le, M. Igl, T. Rainforth, T. Jin, F. Wood: “Auto-encoding sequential Monte Carlo”, in International Conference on Learning Representations (ICLR), (2018)
- 21) C. A. Naesseth, S. W. Linderman, R. Ranganath, D. M. Blei: “Variational sequential Monte Carlo”, in International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), (2018)
- 22) D. Lawson, G. Tucker, C. A. Naesseth, C. Maddison, R. P. Adams, Y. W. Teh: “Twisted variational sequential Monte Carlo”, in Third workshop on Bayesian Deep Learning, NeurIPS, (2018)
- 23) F. Lindsten, J. Helske, M. Vihola: “Graphical model inference: Sequential Monte Carlo meets deterministic approximations”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), Vol.31, (2018)
- 24) C. J. Maddison, A. Mnih, Y. W. Teh: “The concrete distribution: A continuous relaxation of discrete random variables”, in International Conference on Learning Representations (ICLR), (2017)
- 25) D. P. Kingma, J. Ba: “Adam: A method for stochastic optimization”, in International Conference on Learning Representations (ICLR), (2014)
- 26) J. M. Wang, D. J. Fleet, A. Hertzmann: “Gaussian process dynamical models for human motion”, in IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (TPAMI), Vol.30, No.2, (2008) pp.283–298.
- 27) Z. Gan, C. Li, R. Henao, D. E. Carlson, L. Carin: “Deep temporal sigmoid belief networks for sequence modeling”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2015) pp.2467–2475.
- 28) F. P. Casale, A. Dalca, L. Saglietti, J. Listgarten, N. Fusi: “Gaussian process prior variational autoencoders”, in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), (2018) pp.10 369–10 380.
- 29) S. Vetra-Carvalho, P. J. van Leeuwen, L. Nerger, A. Barth, M. U. Altaf, P. Brasseur, P. Kirchgessner, J.-M. Beckers: “State-of-the-art stochastic data assimilation methods for high-dimensional non-Gaussian problems”, Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography, Vol.70, No.1, pp.1–43 (2018)

おもちゃのバギーで量子ビットを作る Toy buggy as a quantum bit

○伊丹哲郎^a 松井伸之^a 磯川悌次郎^a 幸田憲明^b 橋本尚典^a
^a兵庫県立大学, ^b松江工業高等専門学校

概要 DC モータの駆動により直線運動をする2輪バギー車を、量子コンピュータにおける「量子ビット」として作動させる。我々はこれまで、古典物理に従う装置を使った量子計算システムを提案してきた。その中で、初期に考えていた、質点を模擬するロボットとしてバギー車を位置づける。性能と予想してきた問題点の明確化を図る。

キーワード: artificial intelligence, quantum computing, Bohmian dynamics, square well potential, two-level system as a qubit

1 はじめに

これまで我々は、製造・運用が容易な量子コンピュータ^{7, 4, 16, 17, 6, 14}) のシステムを提案してきた。これはエッジ⁹) 搭載を念頭においたものであるとともに、「システムの動作をプロジェクト従事者が理解できる」ことを強調されるべき点としてきた。この目的のために、古典物理法則あるいは古典物理的な現象論に従う工学システムが、通常の量子コンピュータで使用される磁気スピンや光のかわりに使われた。それは、磁気スピンや光が量子力学という日常論理とはかけ離れた論理⁸) で動くシステムを、日常生活の論理によって動くシステムに引き戻す方がよいのではないかと考えたからであった。最も分かりやすい動きをするのは石ころのような「質点」である。それは投げる力と方向さえ制御すれば目的の場所に当たってくれる。我々はこの石ころに位置センサと駆動機構をつけて適当なフィードバックができるようにした。するとシミュレーション上ではこの質点は量子コンピュータのビット qubit の役割を果たすことが分かった^{18, 10, 11})。なお、位置センサにしても駆動機構にしてもその制御は古典計算機が担う。一方、量子計算の利点はきわめて多くの状態を同時処理できる事である⁵)。そこで古典計算機による制御がシステム速度の律速にならないように工夫することは必須である。ちなみに従来の量子コンピュータであっても量子ビットを巨視的世界から介入して制御するのだから、古典計算機は、そこは強調されないが、図面を見るかぎり²) 当然ながら必要とされている。さて、しかし質点を実装することは、モータの極小化とより本質的には後述のように「まさつ」という壁が立ちただけ、実は困難である。そこで、より扱いやすい普通の工学システムを適用することにした¹²)。ただ、容易に入手できるモータを使い摩擦を単純に無視するならば、「質点」は平面上あるいは直線上を動くおもちゃのバギー車として電子工作によって具体的にデスクトップで作ることができる。つまりおもちゃのバギー車は量子コンピュータのひとつのデモンストレーションとして活用できる。なお量子力学が分かりにくいという問題意識は量子コンピュータ業界の間にも当然あって、「量子を可視化」する電子工作という発想がある^{15, 20})。しかしこれらは複素数値の座標をとる量子ビット qubit の座標を単に可視化するだけである。量子計算の過程で具体的にビットがどのように推移し計算が実行されるか、を見せるものではない。普通の量

子コンピュータ業界の立場であれば、計算を実行するためには電子工作では作れない磁気スピンや光といった対象や工作室をほぼ絶対零度に冷却する巨大な冷凍機が必要だ！なおこのような周辺設備を極限まで小型化してデスクトップ^{21, 1}) にまとめる例もあるが、たかだか5個程度の量子ビットを扱えるだけである。

本報告では直線上を動くバギー車とその位置フィードバック制御器を電子工作で作る。そこには先述のまさつや必ずしも直進しない、位置センシングの不確かさ、フィードバックの遅れという問題が出てくる。これらの問題は qubit の理想的な動作との誤差を生み出す。すなわち本報告の目的は、動作誤差の大きい qubit を実際に作りその誤差が量子計算の Fault tolerance にどのように影響するか、を調べることである。ここで改めて何度でも強調しておくが、我々の「量子バギー」は「おもちゃ」を使うとはいえただの「おもちゃ」ではないことである。量子バギーは単体では 1-qubit であって、本論文を発展させれば 1-qubit の汎用ゲートを作る事ができる。さらにバギーを互いに衝突しないように二つ並べれば 2-qubits が構成でき、フィードバックを工夫することで¹³) CNOT ゲートになる。つまり二つのバギーで任意の量子ゲートを作ることができる。将来的には二つ以上のバギー集団で算術演算⁵) にトライする予定である。もちろん精度は非常に悪い事が予想され、実用化あるいは精度アップのためにはおそらくバギーではなく、より扱いやすい工学システムの適用を考えることになるであろう。

はじめに Sec.2 で量子計算に古典装置を使うという我々の方法を確認する。ここでは、古典装置として最も簡単にみえる質点を使えればよいが「まさつ」の存在が障害になる、という事を明示する。そのような問題がある事を念頭においた上で、あえて Sec.3 では、質点のバギー車による模擬を試みる。すなわち「量子バギー」により量子計算を行う。ここでの量子計算とは量子ビットの遷移の計算である。まさつを無視した計算になるのだが、計算精度においてどのような問題があるか、を確認する。議論を Sec.4 でまとめる。

2 古典装置を使った量子コンピューティング

量子コンピュータの作動は「重ね合わせ原理」に基づけられる¹⁶)。しかし重ね合わせ状態は雑音に弱い。特に熱雑音を遮蔽するためにはシステムを冷却する必要があり、このため冷凍機のような大規模な周辺設備を要する。

この周辺設備の不可避性を嫌い、我々は古典装置だけを使った量子コンピューティングのシステムを提案してきた。これはアフィン形式の状態方程式

$$\dot{x} = g(x)u + F(x) \quad (1)$$

で記述され制御仕様を評価指標

$$\int dt L(x, u) \equiv \int dt \left(\frac{m}{2} u^2 - V(x) \right) \quad (2)$$

の最小化で与えるシステムである。状態変数も入力も多次元と設定する必要がないので、以上の (1), (2) でも以下の (3) でも x は 1 次元である。ここで設計者が適切に定数 H_R を指定し、略記 $\overline{h} \frac{\partial \psi}{\partial x} \psi = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial(\hbar \psi)}{2 \partial x}$ により波動方程式

$$i H_R \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{H_R^2}{2m} \left(\overline{g} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi + V \psi - i H_R F \frac{\partial}{\partial x} \psi \quad (3)$$

を設定する。この (3) を満たす波動関数 $\psi(x; t)$ を使った特別なフィードバック

$$u = \frac{g^2 H_R \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}}{2im |\psi|^2} \quad (4)$$

によりシステムの状態量 x は量子力学的に動く。フィードバック則 (4) の分母がゼロにならない事は保証されている³⁾。直観的に説明すると次のようになる。もし (4) が発散する点 $x_\infty(t)$ を持つなら、その点を運悪く通った粒子は無限大の速度を得て物理系の外に出てしまう。しかしその場合、確率が時間の経過により保存しない事になり、量子力学の基本法則である確率保存法則に反する。つまり、結論としてこのような無限大速度は起こり得ない。さて従ってできるだけ扱いやすい制御システムを採用してこれを量子力学的にフィードバック制御し、状態量をモニタすれば、モニタ結果がビット演算になっている。我々にとってシステムの選定基準は「扱いやすさ」だけだから x も u も共に 1 次元でもよい事は大変に都合が良い。波動関数 $\psi(x; t)$ は、初期時刻の $\psi(x; 0)$ と任意時刻での空間境界条件を決めれば (3) から確定する。この初期条件は量子ビット qubit を初期にどう設定するか、の条件に他ならない (たとえば $|U\rangle$ からの出発なら $\psi(x; 0) = \phi_U(x)$ であって図 5 がその場合である)。

状態方程式 (1) でもっとも簡単なものは質点力学を表現する。従って量子計算を古典装置を使って実行しようとするとき、その古典装置として先ず思いつくのは質点である。質点に働く力を操作して質点の運動を制御することは簡単である。これは石を投げて標的に当てる日常茶飯の状況である。しかし \dot{x} を位置 x の時間変化率と考える限りそれは速度なのだから、我々の「もっとも単純な状態方程式」は、質点の速度を操作せよと言うのである。そのためには質点に駆動装置をつけてその速度が所望の値になるような制御をしない。我々の量子コンピュータはエッジに入れることを想定するのだから、それは「小さな」ものでなければならない。つまり本報告のおもちゃバギー車はデモンストレーションのためなのだが、実用化のためにはその駆動装置つまりモータを非常に小型化せねばならな

いであろう。非常に小さなモータを作るのは、従来の量子コンピュータで周辺設備を小さくすることに比べれば大した要求ではないかもしれないが、大変だ。しかしこのような実用的な問題の他に、駆動装置のついた質点のように振舞うバギー車やロボットを使うとすれば、さらにより本質的な問題がある。それはまさつの作用である。まさつ下では、単純な近似として、

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} - \gamma(x)\dot{x} \quad (5)$$

が現象論的な運動方程式として利用されることが多い。しかし最も一般的な (1), (2) から出発しても (3) のような波動方程式を設定できない。その意味は、質点つまりバギー車を qubit として振舞わせるための (4) のようなフィードバックを、単純化した (5) のような系に対してさえ、入力できない、という事である。特に γ が定数であるときに限り、(2) に替えて

$$\int dt L(x, u; t) \equiv \int dt e^{-\frac{\gamma t}{m}} \left(\frac{m}{2} u^2 - V(x) \right), \quad (6)$$

を取れば、正準運動方程式が (5) を再現する。

このような問題があるのだが、あえてまさつを無視することでバギーを「古典装置による量子計算」の原型モデルあるいはデモンストレーションとして使えるものか、次に確認する。

3 量子バギー

3.1 バギーの製作

我々のバギーは図 1 の構成である。おもちゃ用途のモータ 1 個をタイヤ 2 本に結びダイレクトドライブする。モータはタミヤ楽しい工作シリーズ No.167 でトルク最大の D 型とする。モータドライバは TA7291P を

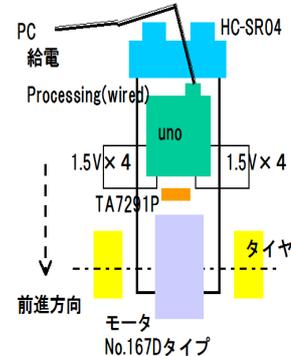


Fig. 1: 量子バギー

使い PWM 入力を可能とする。壁に向けて超音波距離センサ HC-SR04 を搭載し、壁を x 軸原点、壁から離れる方向に x 軸の正方向を取る。バギーの後ろずさりが進モードになる。シミュレーションで確認しておいた初期位置からバギーを出発し壁衝突を避ける。ドライバ制御と超音波距離センサの入力処理は汎用マイコンの Arduino-uno で行う。バギーはワイヤドであって PC からマイコンに給電し、得られた距離は PC 上で Processing が後処理をする。バギーを直線運動する質点と位置づける。質点の質量は前記の搭載物の総和で $m = 0.32[\text{kg}]$ と計測される。この重量をモータで動かすためには $(1.5[\text{V}] \times 4) \times 2 = 12[\text{V}]$ 程度が妥当であっ

た. 状態方程式 (1) で $g(x) = 1$, $F(x) = 0$ であってフィードバック (4) を考慮してバギーは

$$\dot{x} = u = \frac{H_R}{2im} \frac{\psi^* \psi' - \psi \psi'^*}{|\psi|^2} \quad (7)$$

で駆動される. 分母がゼロを回避していることは (4) 直下に確認した通りである. さて, 実際にモータを所定回転数で回すのは PWM 信号なので, 事前テストで PWM 一定値による速度値を計測した. バギーが壁に近づく後進の条件で図 2 を得た. すなわち縦軸は負速度の絶対値である. 前進条件ではバギーが壁から離れ超音波距離センサの計測値が不安定であり, 速度値も確定的な結果を得られなかった. この散布図と正速度を含めた速度と pwm の関係は非線形であり, 本来は非線形関数での補正を要する. しかし本報告では, まずバギーを動かしてみることを優先する. そこで, 散布図を図中の原点を通る直線で近似し, この直線は正速度 (前進) にも適用されるとする. この結果, 制御ダイ

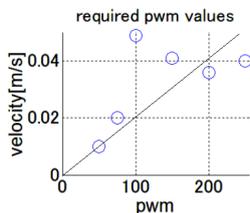


Fig. 2: バギーの速度と要求される pwm 値の関係
プログラムは図 3 となる. 先述の直線関数近似をするの

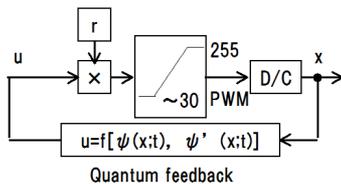


Fig. 3: 制御ダイアグラム

で, フィードバックで作る入力 u から非線形要素を経由する点で定数 r を乗じて PWM 信号を作る. この r 値は,

$$r = \frac{200[\text{pwm}]}{0.04[\text{m/s}]} = 5000 \quad (8)$$

と計算される. なお入力 u の正・負は, バギーの前進 (壁から離れる)・後退 (壁に近づく) をモータドライバで制御することで与える.

3.2 量子フィードバックの作り方

次に量子力学の条件を決める. これは, 質量 m と (2) のポテンシャル $V(x)$ および定数 H_R のパラメータ設定に他ならない. 定数 H_R は (3) から分かるようにプランク定数に相当するが, ここではエネルギー固有値が二つ (二準位) の条件から決める. 先の図 2 で見たとおり, 我々の重量 $m = 320[\text{g}]$ のバギーは電池 $12[\text{V}]$ 弱の条件で高々 $0.05[\text{m/s}]$ 程度の速さでしか走れない. これ以上の速度は PWM では作れないのである. そこで評価指標 (2) において相対的に速度に係るコスト $\frac{m}{2}u^2$ が大きくなるようにして速度 u を抑制せねばならない. シミュレーションで予め確認しておく, $V = 0.001[\text{J}]$ の井

戸型ポテンシャルを採用すればよい事が分かった. 逆に言うと, $V = 0.001$ 程度以外を採用することは, ポテンシャル幅 S において後述の実験室広さ条件に限りがあるため, できない. これを固有関数とともに図 4 にプロファイルを示した. 繰り返しになるが, ポテンシャル

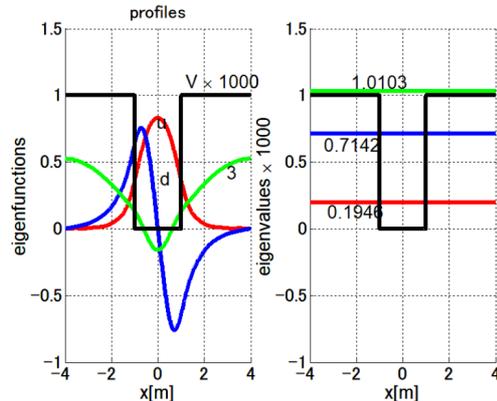


Fig. 4: ポテンシャル, 固有関数と固有エネルギー

は左黒線のように幅 $2 \times S = 2[\text{m}]$, 高さ $V = 0.001[\text{J}]$ の井戸型である. 井戸型とする理由は, このとき二準位条件を

$$\frac{\pi}{2} \leq \frac{S\sqrt{2mV}}{H_R} < \pi \quad (9)$$

と簡易な不等式で表現できるからである. この (9) を満たすように $H_R = 0.01$ と決めた. ポテンシャル $V(x)$ を井戸型にすると (7) に寄与する波動関数を与える固有関数が解析関数で表現できる, という利点もある. なお我々の最適性条件が (2) であって $V(x)$ の前が通常の制御理論と逆符号ととっている. これは保存力ポテンシャル $V(x)$ の下の質点力学を表現していて, バギーがある点 (たとえば $x = 0$ (ゼロ)) に漸近することは保証しない. しかし $V(x)$ の存在は, バギーがどこかに飛び出していくことは防いでくれる. じっさい, 我々の井戸型ポテンシャルの幅を $2 \times S = 2[\text{m}]$ としたのは実験室の広さを考慮し, またバギーがケーブルで PC と結び付けられ, ケーブルの長さ (3[m] 程度) 以上にバギーが動こうとすると引き戻す力が作用する. この引き戻し力は量子フィードバック (7) に反映されていないので, このような力が作用しているバギーの動きをモニタしても, それは量子計算をした事にならない. また図 4 左の赤線が量子ビット 0, 青線がビット 1 を表現し, スピンになぞらえて 0 を上向き u (up の "u"), 1 を下向き d (down の "d") と呼ぶことが多いのでここでは赤線に u , 青線に d を添えた. なお記号 0, 1 では, 0 (ゼロ) が奇関数 (odd) である青線と混同することもあるので使わないものとする. さてこれら "u", "d" いずれも図示のとおり固有関数は無限遠点 (計算上は $x = \pm 4$) でゼロになり, 量子力学的な波が井戸内部に納まっている. 一方で "3" と添えた緑線は波が無限に広がっている. これは図 4 右のエネルギー値のスペクトルが理由づけていて, 赤の "u", 青の "d" がそれぞれ $V = 1$ より下の $0.1946/1000$, $0.7142/1000$ であるのに対して, 第 3 準位の緑は $E_3 = 1.03/1000$ と $V = 0.001$ を超えていることによる. ただ現状のポテンシャルでは E_3 が $V = 0.001$ に非常に近いので, 波を加振したときにポ

テンシャルを飛び越えて無限遠に流れてしまう危険がある。実際、量子計算は u と d の遷移を繰り返すことで実行され、この遷移は波の加振¹⁹⁾でなされる。したがって、 E_3 を出来る限りポテンシャル高さ V から離すようなシステム設計が要求される。

3.3 量子ビット回転の推定：1-qubti

さて直前に述べた波の加振は (3) への振動数 ω_R による強制振動項の追加

$$iH_R \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{H_R^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) + a_C \cdot \cos \omega_R t \left(-iH_R \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (10)$$

でなされる。初期に"u"(上向き"スピン")である量子ビット

$$\psi(x;0) = \phi_u(x) \quad (11)$$

を(10)の加振によって"d"(下向き"スピン") $\phi_d(x)$ に、あるいは d から u に、遷移させることを考える。この遷移は ω_R を共鳴周波数

$$\omega_R = \frac{E_d - E_u}{H_R} \quad (12)$$

に取ることで達成される。その共鳴の度合いは a_C が小さいほど強い。量子計算とは、さまざまな固有状態が重ね合わされた状態をキープしつつその中身、つまり重ね合わせ係数を測定することに帰着する¹⁶⁾。qubit が一つであれば、その「さまざま」とは要するに"u"と"d"であり

$$\psi(x;t) = c_U(t)\phi_u(x) + c_D(t)\phi_d(x) \quad (13)$$

のような重ね合わせが我々の前にある。ゆえに冷凍機のような大規模周辺設備に頼らずに重ね合わせが保持されていて、かつ、時間発展している波動関数、つまり(13)の ψ 、から何らかの兆候を読み取って c_U 、 c_D 値が分かればよいわけである。我々はバギーを(13)の作用下で(7)のフィードバック則で走らせた。条件は $a_C = 0.1$ である。この a_C 値はかなり大きい。かなり大きく取ったのはバギーがじっさいに前進後進する様子を、バギーを動かす電池があまり消費されない間に、見やすくするためである。計測された量子バギーの運動トレンドをシミュレーション結果と比較して図5に示す。トレンドとシミュレーション結果の偏差はかなり大きい。ただ、最初のうち $t \sim 0 \sim 150[s]$ 程度の初期はバギーはシミュレーションをトレースする。また時間全体にわたってシミュレーションがトレンドの包絡線のような形になる。偏差(誤差)が大きいことへの対処は二つあって、

1. フィードバックによって量子的運動をさせる、というそもそもの考え方が間違っている、
2. バギー製作が未熟なためであって、装置の完成度を上げれば結果の偏差は小さくなっていく、

である。我々は後者、2、を採る。それは、初期条件を後述のように変えたときの結果はいずれも、バギーの

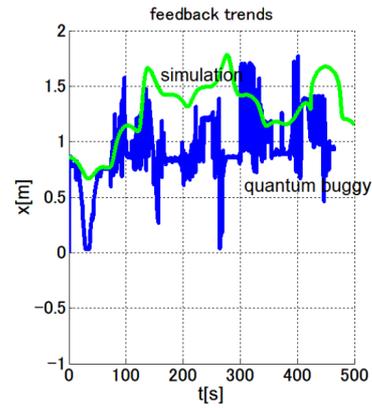


Fig. 5: 運動トレンド：量子バギー vs シミュレーション ($c_U = 1$, $c_D = 0$)

トレンドは初期条件に依存して異なるからである。ただ単にトレンドが違うということではなく、初期の一致、また全体にわたる包絡性、が見られる。この図5のトレンドを分析して3つの時点で2つの複素数 c_U 、 c_D を推定したものが図6の3つのガウス平面に示され

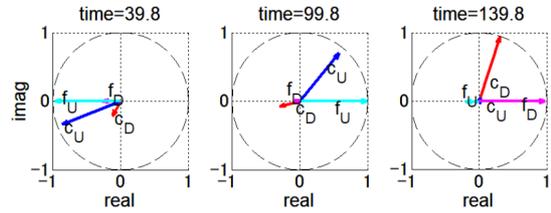


Fig. 6: トレンドによる重ね合わせ状態の推定 ($c_U = 1$, $c_D = 0$)

ている。真値を記号 c_U 、 c_D で、推定値を f_U 、 f_D で表している。「推定」にしてはかなり誤差が大きい。その理由は、主要度の順番に二つあって、

- 先に(13)の7行目で記したように、バギーをとにかく走らせるために加振を強くした (a_C が大きい) こと、
- これも先述のとおり、装置の未完成であること、

である。さて各時点での推定の作業とは、特定の時点 t と、その直前 $t - \Delta t$ あるいは直後 $t + \Delta t$ の位置をモニタし、モニタ結果を使って3元連立線形方程式の係数を決め、その連立方程式¹²⁾を計算すること、に過ぎない。通常の量子コンピュータでは、大規模設備による冷凍といった反SDG's的なエネルギー浪費までして重ね合わせを保持し、その上で計測行程を経ることで c_U 、 c_D 値を得るのである。

図5と比較するために、初期条件が

1. $\psi(0;x) = \phi_d(x)$,
2. $\psi(0;x) = \frac{\phi_u(x) + \phi_d(x)}{\sqrt{2}}$,
3. $\psi(0;x) = \frac{\phi_u(x) - \phi_d(x)}{\sqrt{2}}$,
4. $\psi(0;x) = \frac{\phi_u(x) + i\phi_d(x)}{\sqrt{2}}$

から出発するシステムのフィードバックを受ける量子バギーの運動も実験した。特徴は以下のとおりである。

- 図5の結果と同様に、いずれも、 $t \sim 0 \sim 150[s]$ 程度ではトレンドがシミュレーションをトレースする。またシミュレーション結果が実機の運動軌道を包絡する形になる。
- 2(図8)と3(図9)は、バギー運動軌道の差によって明確に区別される。つまり量子コンピューティングの威力を最初に示したとされる「偽コイン判定問題」⁴⁾は、バギーの運動軌道モニタリングによって遂行する事が可能である。
- 2(図8)と4(図10)は似ているようだが ϕ_d の係数が1と*i*のように違う。つまり両者における ϕ_d の重みは絶対値で見ると同じだが複素数として見るとまったく違う。この違いは量子力学で複素数が本質的に利用される事を意味する。そして両者の下でのフィードバックによるバギー運動はまったく違うという妥当な実験結果になる。
- 1(図7)と4(図10)では、はじめのうちはシミュレーションと実験結果はよく合うが、ある時点からバギーは停止したままになった。これは図2のpwm最小値(~ 30)から回復できないまま運動が終わってしまった事が理由と予想される。
- バギーは直進性が非常に悪いため、ときどき本来の道に手で軽く押すことで元の道に戻す事があった。この点がシミュレータとの違いにどの程度の寄与をしているか、確認必要である。また図2に関しても記したが超音波距離センサの出力が不安定に見える。この点も改修必要である。

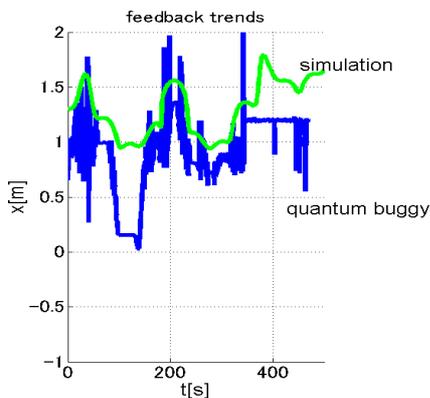


Fig. 7: 運動トレンド：量子バギー vs シミュレーション ($c_U = 0, c_D = 1$)

4 まとめと議論

我々が提案してきている「古典装置を使った量子計算」のデモンストレーションとして、DCモータの駆動により直線運動をする2輪バギー車を、量子コンピュータにおける「量子ビット」として作動させた。バギー車を1次元直線上の模擬質点と位置づけ、フィードバックにより量子的な運動をさせた。その上でバギー車による量子ビットをどの程度までデモンストレーションできるか、を確認した。

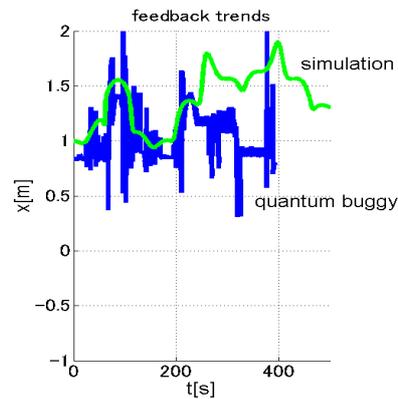


Fig. 8: 運動トレンド：量子バギー vs シミュレーション ($c_U = c_D = \frac{1}{\sqrt{2}}$)

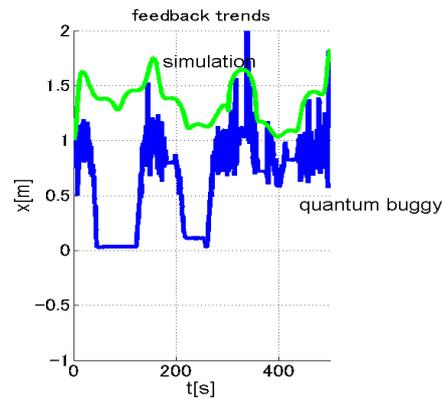


Fig. 9: 運動トレンド：量子バギー vs シミュレーション ($c_U = -c_D = \frac{1}{\sqrt{2}}$)

参考文献

- 1) 量子コンピュータは自作できる? !, <https://mynavi-agent.jp/it/geekroid/2020/07/post-260.html/>.
- 2) <https://www.research.ibm.com/ibm-q/>, 2020.
- 3) K. Berndl, D. Durr, S. Goldstein, G. Peruzzi, and N. Zanghi. On the global existence of bohmian mechanics. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 173, pp. 647–673, 1995.

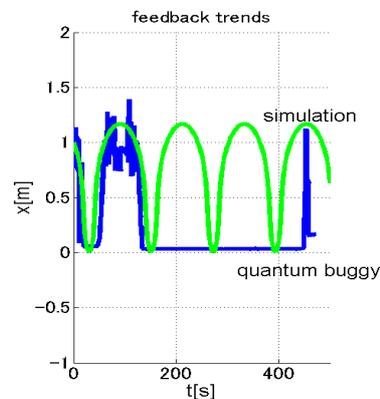


Fig. 10: 運動トレンド：量子バギー vs シミュレーション ($c_U = \frac{c_D}{i} = \frac{1}{\sqrt{2}}$)

- 4) D. Deutsch. Quantum theory, the church-turing principle, and the universal quantum computer. In *Proceedings Royal Society London*, pp. 97–117, 1985.
- 5) T.G. Draper. Addition on a quantum computer. *arXiv:quant-ph/0008033*, 2000.
- 6) Frank Arute et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, Vol. 574, pp. 505–511, 2019.
- 7) R. P. Feynman. Quantum mechanical computers. *Optics News*, Vol. 11, pp. 11–20, 1985.
- 8) Peter Gibbins. *Particles and paradoxes*. Cambridge University Press, 2008.
- 9) Eric Hamilton. What is edge computing: The network edge explained, [https : //www.cloudwards.net/what - is - edge - computing/](https://www.cloudwards.net/what-is-edge-computing/).
- 10) T Itami, N Matsui, and T Isokawa. Quantum computation by classical mechanical apparatuses. In *dcnair2020*. dcnair, 2020.
- 11) T Itami, N Matsui, T Isokawa, N Kouda, and T Hashimoto. Monitoring particle trajectories for wave function parameter acquisition in quantum edge computation. *SICE Journal of Control, Measurement and System Integration*, Vol. 14, pp. 150–156, 2021.
- 12) T Itami, N Matsui, T Isokawa, N Kouda, and T Hashimoto. Algorithm for operating an ordinary engineering system as a quantum bit. *SICE Journal of Control, Measurement and System Integration*, Vol. 15, pp. 96–103, 2022.
- 13) T Itami, N Matsui, T Isokawa, N Kouda, and T Hashimoto. CNOT gate in quantum computer generated by a feedback controller that couples two qubits. In *sice2022*. sice, 2022.
- 14) Stephen Jordan. Quantum algorithm zoo, [https : //quantumalgorithmzoo.org/](https://quantumalgorithmzoo.org/).
- 15) mechatronicsguy. Desktop qubit model – poincare and bloch spheres [https : //tinkerings.org/2018/08/17/desktop - qubit - model - poincare - and - bloch - spheres/](https://tinkerings.org/2018/08/17/desktop-qubit-model-poincare-and-bloch-spheres/).
- 16) M A Nielsen and Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2011.
- 17) Falk Tandetzky. 3 reasons quantum computing is overrated [https : //medium.com/twodigits/3 - reasons - quantum - computing - is - overrated - 9d87d11aa248](https://medium.com/twodigits/3-reasons-quantum-computing-is-overrated-9d87d11aa248).
- 18) 伊丹哲郎, 松井伸之, 磯川悌二郎. 機械装置による量子力学的な計算. 第 62 回自動制御連合会, pp. 1B4-03, 2019.
- 19) 遠藤理平. 14 日で作る量子コンピュータ-Python 版. カットシステム, 2020.
- 20) 漆谷正義, 藤井啓祐, 武田俊太郎, 山崎清仁. Interface/インターフェース: 算数, 電子工作から始める量子コンピュータ. CQ 出版社, 2019.
- 21) 湊雄一郎. 2021 年第四四半期に中国の shenzhen から 50 万円のデスクトップ型量子コンピュータが発売!, [https : //blueqat.com/yuichiro_minato2/86453024 - b2d0 - 4f06 - 8e59 - 71ba61f73d0e/](https://blueqat.com/yuichiro_minato2/86453024-b2d0-4f06-8e59-71ba61f73d0e/).

複素数を用いたモジュラーファジィ推論モデルの構築と医療診断への応用

○荒井裕也 関宏理 (大阪大学)

Construction of modular fuzzy model using complex numbers and its application to a medical diagnosis

*Y. Arai and H. Seki (Osaka University)

Abstract— Researches on the interpretability of fuzzy sets using complex numbers have been actively conducted in recent years. Some fuzzy inference models using complex numbers have been proposed, but due to the difficulty of linguistic interpretation of complex numbers, there is a problem concerning the interpretability of their fuzzy rules and input-output relations. In this paper, we propose two complex rule modules-type fuzzy inference models that take into account the interpretability of complex numbers. We also apply the proposed models to a medical diagnosis, one of the problems in which interpretability is important, and compare them with conventional models.

Key Words: Fuzzy Inference Model, Complex Neuro-Fuzzy System, Medical Diagnosis

1 はじめに

ニューラルネットワークに複素数を用いた学習アルゴリズムは、学習停滞が起こりにくく高速に収束することで知られており¹⁾²⁾³⁾、画像認識やレーダー検知、波動など周期的な特徴をもつ近似に対しては、実数ニューラルネットワークよりも高い精度であることが知られている⁴⁾⁵⁾。また、入出力を複素数にしたニューロファジィ推論システムも提案されており、非線形関数近似や天気予報問題で有効な成果が得られている⁶⁾⁷⁾。一方で、複素数を用いたファジィ集合と解釈性についての研究も近年盛んに行われている。Ramotら⁸⁾⁹⁾は複素ファジィ集合(CFS, Complex Fuzzy Sets)を提案し、振幅項を対応するメンバーシップに対する適合度、位相を相対的なパラメータとして定義した。複素ファジィ集合は風力発電に用いる風向き予想などの分野において成功を収めている。また、Dickら¹⁰⁾は直感主義的ファジィ集合(IFS, Intuitionistic Fuzzy Sets)¹¹⁾を拡張したピタゴリアンファジィ集合(PFS, Pythagorean Fuzzy Sets)を複素領域に拡張している。文献¹⁰⁾では、複素単位円上のメンバーシップと非メンバーシップ、反メンバーシップなどの論理についても議論し、複素数を用いた言語表現の可能性に言及している。ファジィ推論におけるファジィルールの後件部を実数から複素数に拡張した複素ファジィ推論モデルも同様に提案されている¹²⁾¹³⁾¹⁴⁾が、複素数の言語的解釈の難しさから、ファジィ推論モデルを導入するときその入出力関係の解釈可能性に関する問題が存在する。HataとMurase¹²⁾はRNF(Real-valued Neuro Fuzzy)を複素領域に拡張したCVNF(Complex-Valued Neuro Fuzzy)を提案し、RNFに比べパラメータ数を低減し高速な推論を行うことに成功しているが、実数出力を得るために活性化関数を用いることで、ルール部の解釈が難しい側面もある。一方、モジュラーファジィモデル¹⁵⁾が提案され、その有効性が示されている¹⁶⁾¹⁷⁾¹⁸⁾。ファジィ推論はIf-Thenファジィルールで表現され、人間が直感的に理解しやすいものの、入力数が多ければ多いほどその解釈は難しくなる。このことから、少数入力で構成され

るIf-Thenファジィルールは理解しやすく、有用であることが示唆されている¹⁹⁾。

本稿ではモジュラーファジィモデルのうち、偶数の少数入力ルール群と後件部に複素数をもつ複素モジュラーファジィモデルを提案し、そのIf-Thenファジィルールの解釈性について議論する。また、医療診断に応用し、従来モデルとの比較・検討を行う。

2 ファジィ推論モデル

本章ではファジィ推論モデルとして、簡略化ファジィ推論モデルおよびルール群型ファジィ推論モデルについて説明する。

2.1 簡略化ファジィ推論モデル

簡略化ファジィ推論モデルとは²⁰⁾²¹⁾、後件部に実数シングルトンを用いたモデルである。簡略化ファジィ推論モデルは、入力が与えられたとき、ファジィ推論ルールRules- j は次のように記述される。

$$\text{Rules-}j : \text{if } x_1 \text{ is } A_{1,j} \text{ and } x_2 \text{ is } A_{2,j} \text{ and} \\ \dots \text{ and } x_n \text{ is } A_{n,j} \text{ then } y^* \text{ is } y_j$$

ここで、 $A_{i,j}(x_i)$ は i 番目の入力に対応する j 番目のルールに対応するファジィメンバーシップ関数、 y_j はルール後件部の実数シングルトンである。本稿では、メンバーシップ関数 $A_{i,j}(x_i)$ は、次のガウス関数で与えることとする。

$$A_{i,j}(x_i) = \exp\{-(x_i - a_{i,j})^2/b_{i,j}\} \quad (1)$$

ここで、 $a_{i,j}, b_{i,j}$ はそれぞれ対応するメンバーシップ関数 $A_{i,j}$ の平均と分散である。まず、入力 $x^0 = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ が与えられたとき、 j 番目のルールの適合度 $h_j(j = 1, 2, \dots, m)$ は、次のように各メンバーシップ関数の積で与えられる。

$$h_j = \prod_{i=1}^n A_{i,j} \quad (2)$$

そして、ルール適合度と後件部 y_i の加重平均により、出力 y^* は以下のように計算できる。

$$y^* = \frac{\sum_{j=1}^m h_j y_j}{\sum_{j=1}^m h_j} \quad (3)$$

次に、学習方法について述べる。一般的に、簡略化ファジィ推論モデルのファジィルールの学習には最急降下法²²⁾が用いられる学習中に最小化される誤差関数は次の式(4)で与えられる。

$$E = \frac{1}{2}(y^* - T)^2 \quad (4)$$

ここで、 T は理想値である。学習中、各パラメータ $y_j, a_{i,j}, b_{i,j}$ は、次のようにして更新される。

$$\Delta y_j = -\alpha \frac{\partial E}{\partial y_j} \quad (5)$$

$$\Delta a_{i,j} = -\beta \frac{\partial E}{\partial a_{i,j}} \quad (6)$$

$$\Delta b_{i,j} = -\gamma \frac{\partial E}{\partial b_{i,j}} \quad (7)$$

α, β, γ はそれぞれの学習係数である。各パラメータに初期値を与え、式(5)~(7)を繰り返すことで学習を行うことができる。簡略化ファジィ推論モデルでは、ファジィルールごとに前件部メンバーシップ関数を独立に設定し、メンバーシップ関数の平均と分散を独立に調整する。

2.2 ルール群型ファジィ推論モデル

前節で説明した従来の簡略化ファジィ推論モデルでは、システムのすべての入力変数がルール前件部で考慮されるため、入力変数の増加に伴って指数関数的にルールが増加してしまう。そこで本節では各入力組みに対するルール群を用意して推論を行うルール群型ファジィ推論モデル¹⁶⁾¹⁷⁾¹⁸⁾について説明する。

2.2.1 SIRM_s モデル

単一入力ルール群 (Single Input Rule Modules, SIRM_s) 結合型ファジィ推論モデル (以後、SIRM_s モデルと呼ぶ)¹⁷⁾では、各入力に対しルール群を用意し、ルール群には対応する入力だけを前件部に考慮する1入力の If-Then ルールを定義して、ルール群の推論結果の重み付き総和を最終出力とする。これにより、ルール数が大幅に削減され、学習パラメータ数が低減されることで容易に学習を行うことが可能となる。 n 入力1出力に対して、 i 番目のルール群を次のように定義する。

$$\text{Rules-}i : \{ \text{if } x_i \text{ is } A_{i,j} \text{ then } y^* \text{ is } y_{i,j} \}_{j=1}^{m_i}$$

ここで、 m_i は i 番目のルール群内のルール数を表す。入力 x_i が入力されたとき、 i 番目の入力に対するルール群 Rules- i の j 番目のルール適合度 $h_{i,j}$ は、対応するメンバーシップ関数のグレードであり式(8)で与えられ、ルール群の推論結果 y_i^0 は加重平均より式(9)で求められる。

$$h_{i,j} = A_{i,j}(x_i) \quad (8)$$

$$y_i^0 = \frac{\sum_{j=1}^{m_i} h_{i,j} y_{i,j}}{\sum_{j=1}^{m_i} h_{i,j}} \quad (9)$$

簡略化ファジィ推論モデルではすべての入力が同等に取り扱われるが、SIRM_s モデルでは各入力の重要度を設定することでシステムのパフォーマンスを向上させる。SIRM_s モデルの最終出力 y^* は式(10)で与えられる。

$$y^* = \sum_{i=1}^n w_i y_i^0 \quad (10)$$

ここで、 w_i は i 番目のルール群に対する重視度を意味する。SIRM_s モデルも簡略化ファジィ推論モデルと同様に、式(5)~(7)の最急降下法により、各パラメータを更新することができる。

2.2.2 モジュラーファジィモデル

SIRM_s モデルは簡略化ファジィ推論モデルよりもルール数が少なく、高速に学習させることができるが一般的にはその推論結果は単調になりやすい²⁶⁾。いくつかの入力の組み合わせルール群を準備することで推論を行うモジュラーファジィモデルが提案されている¹⁸⁾。モジュラーファジィモデルの例として、3入力1出力の問題に対して、ファジィルールを次のように定義する。

$$\text{Rules-1} : \{ \text{if } x_1 \text{ is } A_{1,j} \text{ and } x_2 \text{ is } A_{2,j} \\ \text{then } y^* \text{ is } y_{1,j} \}_{j=1}^{m_1}$$

$$\text{Rules-2} : \{ \text{if } x_2 \text{ is } A_{2,j} \text{ and } x_3 \text{ is } A_{3,j} \\ \text{then } y^* \text{ is } y_{2,j} \}_{j=1}^{m_2}$$

$$\text{Rules-3} : \{ \text{if } x_3 \text{ is } A_{3,j} \text{ and } x_1 \text{ is } A_{1,j} \\ \text{then } y^* \text{ is } y_{3,j} \}_{j=1}^{m_3}$$

一般に、 n 入力1出力の場合のルール群の数は ${}_n C_2$ となる。 i 番目のルール群における j 番目のルールの適合度は式(11)で与えられ、その後の出力過程は SIRM_s モデルと同様に、式(8)~(10)で求められる。

$$\mu_i = A_{u,j}(x_u) \star A_{v,j}(x_v) \quad (11)$$

ここで、 $u, v (u, v = 1, \dots, n; u \neq v)$ は i 番目ルール群で選択された入力の組み合わせであり、 \star は t-norm である。簡略化ファジィ推論はモデルとしての近似精度は高いが、変数の数の増加に伴いルール数は指数関数的に増加する。一方、SIRM_s モデルのルール数は入力変数の数を n とすると $\sum_{j=1}^n m_j$ で求められ、変数の数が増加してもルール数は線形的にしか増加しない。ただし、モデルの近似精度は必ずしも十分ではない。その上で、モジュラーファジィモデルはルール数の増加を抑え、近似精度も SIRM_s より高いモデルである。また、人間が解釈可能なファジィルールを考える上で、前件部変数は高々2,3個程度が理想であるとされている¹⁹⁾。このことから、解釈可能なファジィ推論モデルという点においてモジュラーファジィモデルのような少数入力により構成されるモデルは有用であると考えられる。4章では、モジュラーファジィモデルを基盤とした複素ファジィ推論を構築し、ファジィ推論における解釈可能な複素数のアプローチとその有用性について触れる。

3 複素入力ルール群ファジィ推論モデル

本章では、上記のモジュラーファジィモデルに対して、ルール適合度および後件部の計算過程に複素数を用いたモデルを構築する。複素数を用いた複素ファジィ

推論モデル¹²⁾¹³⁾¹⁴⁾が提案されているが、ファジィルールに複素数が用いられており、解釈が難しいという問題がある。このことから本章では、ルールがすべて実数値およびファジィ集合で記述され、従来のファジィルールと同様に解釈できる複素モジュラーファジィモデルを提案する。また、提案モデルの学習の一つとして、複素誤差逆伝播法については本章後半に説明する。

3.1 複素モジュラーファジィ推論モデル

従来のモジュラーファジィモデルと同様に、前件部変数に入力の組み合わせに対応するルール群を用意することで推論を行う。入力数を n とすると総ルール群数は ${}_n C_2$ となり、 $p(= 1, 2, \dots, {}_n C_2)$ 番目の入力に対する $q(= 1, 2, \dots, m)$ 番目のファジィルールを次のように定義する。

$$\text{C-Module- } p : \{ \text{if } x_u \text{ is } A_{u,q} \text{ and } x_v \text{ is } A_{v,q} \\ \text{then } y^* \text{ is } y_{p,q} \}_{q=1}^{m_1}$$

ここで、 $u, v(u, v = 1, 2, \dots, n; u \neq v)$ は p 番目のルール群に選ばれた入力の組み合わせの番号である。 $A_{u,q}, A_{v,q}$ はファジィ集合であり、すべての変数は実数である。各ルール群の適合度は、複素数の演算及び誤差逆伝播法を導入するために、式 (12) を用いて、各ルール適合度でそれぞれ組み合わせを作り、統合して複素適合度とする。

$$\begin{aligned} \mu_{p,q}^c &= A_{u,q}(x_u) + iA_{v,q}(x_v) \\ &= A_{p,q}^R(x_u) + iA_{p,q}^I(x_v) \\ &= \mu_{p,q}^R + i\mu_{p,q}^I \\ &= r_{p,q} \exp(i\theta_{p,q}) \end{aligned} \quad (12)$$

後件部は式 (25) のように実数振幅に位相項を加えることで複素後件部とする。

$$\begin{aligned} y_{p,q}^c &= y_{p,q}^R + iy_{p,q}^I \\ &= y_{p,q} \exp(i\theta_{y_{p,q}}) \end{aligned} \quad (13)$$

上付き添え字 R, I はそれぞれ複素数の実部、虚部を表す。適合度のペアを実軸、虚軸にプロットした複素適合度 $\mu_{p,q}^c$ は、Fig. 1 のように複素平面上で振幅 $r_{p,q}$ と位相項 $\theta_{p,q}$ を持つ。複素数を用いた場合、ファジィ推論モデルの推論過程で用いられる加重平均計算の解釈が難しい。そのため、複素領域における振幅をルールの重要度と仮定し計算を行う。たとえば、エアコンの制御では「気温が高い」かつ「湿度が高い」という前件部ルールにおいて、対応する前件部ファジィ集合をそれぞれ $A_{temp,high}, A_{hum,high}$ とし、適合度をそれぞれ $\mu_{temp,high}, \mu_{hum,high}$ とする。数値として高気温かつ高湿度のような入力を与えられた時、 $\mu_{temp,high}$ は 1 に近くなり、 $\mu_{hum,high}$ も 1 に近くなる。このような場合、推論におけるこのルールの出力に与える影響は大きくなるはずであり、同時に振幅 $r_{temp-high,hum-high}$ は 1 を超えて大きくなる。一方、入力が低気温かつ低湿度の場合、 $\mu_{temp,high}$ 及び $\mu_{hum,high}$ は 0 に近づき、振幅 $r_{temp-high,hum-high}$ の振幅は 0 に近くなり、同時に推論におけるルールの出力に与える影響は小さくなる。このように、複素適合度において、ルールの複素

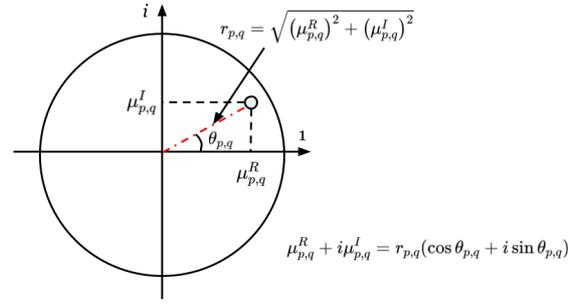


Fig. 1: 振幅項と位相項の側面から見た複素適合度の例
適合度の振幅は推論に対するルールの重要度という意味合いを持ち、位相は入力の情報を表す。

適合度及び後件部の複素数に対して、各ルール群の推論結果 y_p^c を式 (14)~(16) に定義する。

$$y_p^c = \prod_{q=1}^m \mu_{p,q}^c r_{p,q} y_{p,q}^c \quad (14)$$

$$= r_{y_p^c} (\cos \theta_{y_p^c} + i \sin \theta_{y_p^c}) \quad (15)$$

$$= r_{y_p^c} \exp(i\theta_{y_p^c}) \quad (16)$$

ここで、学習に用いる後件部は回転と拡大の情報を保持するため、推論に影響しやすい重要な後件部、及び推論に影響しにくい後件部をうまく反映する必要がある。そのために、ファジィシングルトン型推論モデル²⁹⁾のように、この言及の強さを表す振幅項をルールの重みとして後件部に作用させる。 y_p^c は複素数であるが、最終出力を実数で得るために、振幅項及び位相項それぞれについて独立に計算する。これは各ルール群の出力が複素ファジィ集合で表されており、Ramot ら⁹⁾の複素ファジィ集合の演算方法に基づいている。本項では実数値を得るため、式 (17) の振幅項を出力とする。ルール群ごとのルール重要度複素数 $h_p = r_{h_p} \exp(i\theta_{h_p})$ を作用させ、出力を得る。複素数は順序関係がないため、重要度の定義には議論の可能性があるが、ここでは振幅の大きさを重要度の大きさと考え、これは、最終出力を振幅としていることに起因する。一方で重要度複素数の位相項は相対的なものとなり、複素計算及び CBP の利点を活かすパラメータとして推論に影響する。最終的な出力を式 (17) に定義する。

$$y^* = \left| \sum_{p=1}^n r_{y_p^c} r_{h_p} \exp \left(i \sum_{p=1}^n (\theta_{y_p^c} + \theta_{h_p}) \right) \right| \quad (17)$$

ファジィルールの前件部 $a_{p,q}^{R,I}, b_{p,q}^{R,I}$ (実部: 中心 $a_{p,q}^R$, 幅 $b_{p,q}^R$, 虚部: 中心 $a_{p,q}^I$, 虚部 $b_{p,q}^I$) と後件部 $y_{p,q}^{R,I}$ (実部: $y_{p,q}^R$, 虚部: $y_{p,q}^I$), およびルール重視度 $h_p^{R,I}$ (実部: h_p^R , 虚部: h_p^I) のパラメータに対して、評価関数 $E = \frac{1}{2}(y^* - T)^2$ が最小になるように学習を行う。ここで T は理想出力値である。式 (18)~(21) に従って、各パラメータは最

急降下法に基づき更新される。

$$a_{p,q}^{R,I}(t+1) = a_{p,q}^{R,I}(t) - \alpha \frac{\partial E}{\partial a_{p,q}^{R,I}} \quad (18)$$

$$b_{p,q}^{R,I}(t+1) = b_{p,q}^{R,I}(t) - \beta \frac{\partial E}{\partial b_{p,q}^{R,I}} \quad (19)$$

$$y_{p,q}^{R,I}(t+1) = y_{p,q}^{R,I}(t) - \gamma \frac{\partial E}{\partial y_{p,q}^{R,I}} \quad (20)$$

$$h_p^{R,I}(t+1) = h_p^{R,I}(t) - \delta \frac{\partial E}{\partial h_p^{R,I}} \quad (21)$$

3.2 C-SIRMs ファジィ推論モデル

複素モジュラーファジィモデルでは少数入力であるものの、組み合わせのためルール数が増加する。このことから本節では複素平面を用いた単一入力ルール群結合型ファジィ推論モデル(以後、C-SIRMsモデルと呼ぶ)を作成する。実数値入力 $x(x_1, x_2, \dots, x_{2n})$ が与えられたとき、 $i(= 1, 2, \dots, 2n)$ 番目のルール群は次のように与えられる。

$$\text{C-SIRM-}i : \{ \text{if } x_i \text{ is } A_{i,j} \text{ then } y^c \text{ is } y_{i,j} \}_{j=1}^{m_i} \quad (22)$$

$A_{i,j}$ はファジィ集合であり、また各変数は実数である。前節の複素モジュラーファジィ推論モデルと異なる点は、すべての入力の組み合わせがそれぞれ一つの複素平面で考慮されることに対して、複素数の実部と虚部のペアとなる入力の一つしかないという点である。たとえば、4入力 (x_1, x_2, x_3, x_4) の問題を考えるとき、複素モジュラーファジィモデルの推論の際に考慮される複素適合度の実部と虚部のペアは ${}_4C_2 = 6$ 組であるが、C-SIRMsモデルでは実部と虚部のペアは「 x_1 と x_3 」、 $「x_2$ と x_4 」の2組のみが複素適合度として考慮される。複素適合度および複素後件部は式(23)を用いて式(24)、(25)によって与えられる。

$$\mu_{i,j} = A_{i,j}(x_i) \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \mu_{p,q}^c &= \mu_{2p-1,q} + i\mu_{2p,q} \\ &= \mu_{p,q}^R + i\mu_{p,q}^I \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} y_{p,q}^c &= y_{2p-1,q} + iy_{2p,q} \\ &= y_{p,q}^R + iy_{p,q}^I \end{aligned} \quad (25)$$

各ルール群の推論結果は式(14)によって与えられる。また、複素モジュラーファジィ推論モデルと同様に最終推論結果は式(17)で、式(18)~(21)に従って、最急降下法に基づき更新される。

3.3 複素誤差逆伝播法

複素パターンを学習するために複素領域に誤差逆伝播法を拡張した複素誤差逆伝播法(CBP, Complex Back-propagation)について説明する。先行研究¹⁾²⁾³⁾では、CBPには以下のような特徴があることが示されている。

1. CBPは2次元運動に基づく構造を持つ
2. CBPはネットワークを介して複素信号を一つのユニットとして学習を促進する。
3. ネットワークを介した信号の実部と虚部の両方に基づく学習パラメータの実部と虚部の修正を相互依存的に行う(Fig. 2)。

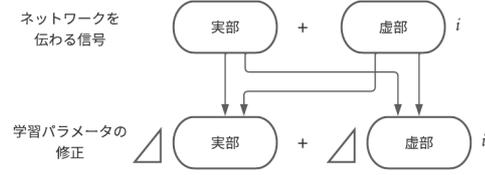


Fig. 2: 複素ニューラルネットワークにおける誤差信号の伝播

この相補的な構造により、学習停滞を防ぐことができる。誤差逆伝播法では、一般的に局所的な最小問題が発生する。一方、CBPでは、この問題は発生しにくい。その結果、複素パターンに対するCBPの学習速度は、誤差逆伝播法に比べて数倍速くなる可能性がある。このように、CBPアルゴリズムは複素パターンの学習に適している。複素数 $z = u + iv$ は、2つの実数 u, v の順序付きペア (u, v) で決まる(定義上、 u と v が異なると (u, v) と (v, u) は異なる)。このように、複素数を2次元の面上の点と考え、複素数を横軸に実部、縦軸に虚数部を持つ長方形の座標として表現することができる。本章ではこの学習法を用いて、後件部を複素数とする複素モジュラーファジィモデルおよびC-SIRMsモデルを構築した。

4 数値実験

本章では、数値実験として提案モデルと従来モデルの比較を行う。まず、各モデルの計算量の比較のため、提案モデルと従来モデルとのファジィルール数とパラメータ数で比較を行う。次に実際に医師が診断した医療データ³⁰⁾を用いて各モデルの評価を行う。

4.1 ルール数およびパラメータ数の比較

従来モデルと比較した場合のファジィルール数について、 n 入力、 m_i 個ファジィ分割の各モデルのルール数をTable 1に、パラメータ数をTable 2に示す。

Table 1: 各ファジィ推論モデルのファジィルール数

簡略化ファジィ推論モデル	$\prod_{i=1}^n m_i$
SIRMsモデル, C-SIRMsモデル	$\sum_{i=1}^n m_i$
モジュラーファジィモデル	$\sum_{i=1}^n m_i$
複素モジュラーファジィモデル	$\sum_{i=1}^n C_2 m_i$

Table 2: 各ファジィ推論モデルのパラメータ数

簡略化ファジィ推論モデル	$\prod_{i=1}^n m_i \times 3$
SIRMsモデル	$\sum_{i=1}^n m_i \times 3 + n$
モジュラーファジィモデル	$\sum_{i=1}^n C_2 m_i \times 3 + n C_2$
C-SIRMsモデル	$\sum_{i=1}^n m_i \times 4 + 2 \times n$
複素モジュラーファジィモデル	$\sum_{i=1}^n C_2 m_i \times 4 + 2 \times n C_2$

以上より、提案モデルのファジィルール数は、後件部及びルール重要度に複素数を用いることでSIRMsモデル及びモジュラーファジィモデルよりもパラメータ数が増加しているが線形的な増加であり、簡略化ファジィ推論モデルのような入力数とファジィ分割数の増加に伴う指数関数的なルール数の増加は抑えられている。

4.2 医療診断データへの応用

本節では、実際に医師が診断した医療データ³⁰⁾を用いて各モデルの評価を行う。このデータは145個の数値データであり、それぞれ5つの説明変数と1つの目的変数から成る正規化データである。この145個のデータのうち、73個を教師データ、72個をテストデータとして、教師データを用いて学習させ、各モデルでの学習結果の出力とテストデータとの比較から正答率を出力する。5つの説明変数はそれぞれ次の意味を持つ。

- Input 1) 相対体重.
- Input 2) 血糖値の減少度
- Input 3) グルコース値
- Input 4) インスリン値
- Input 5) SSPG

今回、上記の5入力であり、C-SIRMsの複素適合度及び後件部のペアを作成する際、今回は「 x_1 と x_2 」、「 x_3 と x_4 」、及び「 x_5 」とする。このように入力が奇数の場合、 x_5 が含まれるペアの複素適合度及び後件部の虚部を0とすることで、通常の推論モデルと同様に学習及び出力を算出することができる。学習回数が10回、100回、1000回のときの正答率、平均二乗誤差、パラメータ数、平均計算時間をそれぞれTable3~6に示す。なお、表内の簡略化ファジィ推論モデル、モジュラーファジィモデル及び複素モジュラーファジィモデルをそれぞれ簡略化モデル、MFモデル、複素MFモデルと表記する。

Table 3から、提案のモデルである複素モジュラーファジィモデルとC-SIRMsモデルは、従来のモデルに対して学習が停滞しにくく高速に計算できていることがわかる。また正答率も高かった。さらに、Table 4から、提案モデルの2つのモデルは順調に収束しており、他のモデルに対して優位な精度をもっていることがわかる。C-SIRMsはSIRMsよりも、複素モジュラーファジィモデルはモジュラーファジィモデルよりも平均二乗誤差は小さくなっていることがわかった。Table 5, 6の結果から、各モデル間ではパラメータ数が大きくなるにつれて平均計算時間は大きくなっていることがわかる。一方で、2つの提案モデルは計算量が従来のモデルよりも多くなってしまうため、平均計算時間では従来モデルに及ばない結果となった。

Table 3: 平均正答率 (%)

学習回数	10	100	1000
簡略化モデル	44.8275	95.1724	95.1724
SIRMsモデル	72.4137	90.8620	92.6206
MFモデル	22.7586	94.1234	93.1034
C-SIRMsモデル	73.7931	87.6206	95.8620
複素MFモデル	60.4329	94.6551	97.9310

Table 4: 平均二乗誤差

学習回数	10	100	1000
簡略化モデル	0.60787	0.04473	0.03420
SIRMsモデル	0.31593	0.07019	0.01455
MFモデル	1.10533	0.04241	0.00837
C-SIRMsモデル	0.52468	0.46113	0.01035
複素MFモデル	0.17280	0.03425	0.00816

Table 5: 各モデルのパラメータ数

簡略化モデル	729
SIRMsモデル	50
MFモデル	100
C-SIRMsモデル	70
複素MFモデル	140

Table 6: 平均計算時間 (s)

学習回数	1000
簡略化モデル	412.112004
SIRMsモデル	179.315453
MFモデル	259.971386
C-SIRMsモデル	302.321783
複素MFモデル	308.850729

5 結論

ルール群型ファジィ推論モデルのうち、1入力1出力のルールを持つSIRMsモデルと、少数入力1出力のルールを持つモジュラーファジィモデルの後件部における複素数の解釈性を考慮した複素入力ルール群ファジィ推論モデルを2つを提案した。次に、実際に医師が診断した5入力1出力の糖尿病医療診断データを用いて、提案モデルによる医療診断システムの構築を行った。学習後の正答率、平均二乗誤差から、提案モデルは、比較したすべての従来モデルと比較して、良好な結果を得ることができた。また、提案モデルの入力数に対しては、ファジィルール数が指数関数的に増加しないことから、簡略化ファジィ推論モデルに比べ計算時間の観点からも、優れたモデルであることが明らかになった。

複素数を用いたファジィルールの解釈は、従来より難しい問題であった。本研究では、すべて実数で表せられるルール内で、適合度計算や後件部を複素数の形にしたことで、従来の解釈ができる複素数を用いたファジィ推論を構築することができた。特に、振幅を一般的な適合度と考え、位相を計算における相対的なパラメータとすることで、解釈性を保ちつつ複素の回転・拡大演算やCBPを導入することができた。また、こうした振幅や位相に対するアプローチは、先行研究で提案された複素ファジィ集合の考え方に由来するものであり、これを用いた推論を定義することは有意義であると考えられる。本稿ではC-SIRMsモデルを複素モジュラーファジィモデルの計算量の削減のために提案したが、数値実験でも良好な結果が得られた。しかしながら、C-SIRMsの複素適合度及び後件部のペアを作成する際、今回は「 x_1 と x_2 」、「 x_3 と x_4 」、及び「 x_5 」としたが、入力順で組み合わせを作るような選択の方法は精度にばらつきが生じる可能性がある。

今後の課題は、医療診断以外に、様々な入力数をもつデータセットに対して実験し、精度や計算時間の推移を確認することが挙げられる。特に、2つの提案モデルの出力は実数であったが、複素数を出力するようにすることで更なる他問題への応用が期待される。たとえば、教師データを複素信号にすることなどが挙げられる。

参考文献

- 1) 新田徹, 古谷立美: 複素バックプロパゲーション学習, 情報処理学会論文誌, Vol.32, No.10, 1319/1329 (1991)
- 2) 新田徹, 古谷立美: 複素バックプロパゲーション学習アルゴリズムの学習特性, 情報処理学会論文誌, Vol.34, No.1,

- 29/38 (1993)
- 3) G. M. Georgiou and C. Koutsougeras : Complex domain backpropagation. IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Analog and Digital Signal Processing, 39, 5, 330/334 (1992)
 - 4) A. Hirose : Complex-valued neural networks, Studies in Computational Intelligence, Springer (2006)
 - 5) A. Hirose: Complex-valued neural networks: Theories and Applications (Series on Innovative Intelligence, 5). World Scientific Publishing Company (2004)
 - 6) C. Li, T. Wu and F. T. Chan : Self - learning complex neuro-fuzzy system with complex fuzzy sets and its application to adaptive image noise canceling. Neuro computing, 121/139 (2012)
 - 7) C. Li and T. Chiang : Complex Neuro-Fuzzy ARIMA Forecasting A New Approach Using Complex Fuzzy Sets, (2011)
 - 8) D. Ramot, R. Milo, M. Friedman and A. Kandel : Complex Fuzzy Sets, IEEE TRANSACTIONS ON FUZZY SYSTEMS, VOL. 10, NO. 2, 171/186 (2002)
 - 9) D. Ramot, M. Friedman, G. Langholz and A. Kandel : Complex Fuzzy Logic, IEEE TRANSACTIONS ON FUZZY SYSTEMS, VOL. 11, NO. 4, 450/461 (2003)
 - 10) S. Dick, R. R. Yager, and O. Yazdanbakhsh : On Pythagorean and Complex Fuzzy Set Operations, IEEE TRANSACTIONS ON FUZZY SYSTEMS, VOL. 24, NO. 5, 1009/1020 (2016)
 - 11) K. T. Atanassov : Intuitionistic Fuzzy Sets, Fuzzy Sets Syst., vol.20, 87/96 (1986)
 - 12) R. Hata and K. Murase: Generation of Fuzzy Rules by a Complex-Valued Neuro-Fuzzy Learning Algorithm, Japan Society for Fuzzy Theory and Intelligent Informatics, Vol.27, No.1, 533/548 (2015)
 - 13) 荒井裕也, 関宏理 : 第 65 回システム制御情報学会研究発表講演会, 754/755 (2021)
 - 14) 丸山大輔, 関宏理 : 第 66 回システム制御情報学会研究発表講演会, 765/766 (2022)
 - 15) T. Watanabe and Y. Takahashi : Hierarchical reinforcement learning using a modular fuzzy model for multi-agent problem, Proceedings of 2007 IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics, Montreal, Canada. 1681/1686 (2007)
 - 16) N. Shigei, H. Miyajima and S. Nagashima : A Proposal of Fuzzy Inference Model Composed of Small-Number-of-Input Rule Modules, Proc. of Int. Symp. on Neural Networks, Part 2, LNCS 5552, 118/126 (2009)
 - 17) 湯湯崎直養, 易建強, 廣田薫 : 複数入力ファジィ制御のための単一入力ルール群結合型ファジィ推論モデルの提案, 日本ファジィ学会誌, vol.9, no.5, 699/790 (1997)
 - 18) N. Shigei, H. Miyajima and S. Nagashima : A Proposal of Fuzzy Inference Model Composed of Small-Number-of-Input Rule Modules, Proc. of Int. Symp. on Neural Networks, Part 2, LNCS 5552, 118/126 (2009)
 - 19) J. M. Mendel, P. P. Bonissone : Transactions on Fuzzy Systems, Fuzzy Systems Toward Human-Explainable Artificial Intelligence and Their Applications, 1/16 (2021)
 - 20) H. Ichihashi : Iterative fuzzy modeling and a hierarchical network. In: Proceedings of the Fourth IFSA Congress, Vol. Engineering, Brussels, 49/52 (1991)
 - 21) 前田幹夫, 村上周太 : ファジィ制御とその応用, システム/制御/応用, 34, 5, 282/287 (1990)
 - 22) L. X. Wang and J. M. Mendel : Back-propagation fuzzy system as nonlinear dynamic system identifiers. In: Proceedings of IEEE International Conference on Fuzzy Systems, 1409/1418 (1992)
 - 23) A. Hirose : Complex-valued neural networks: Theories and Applications, Series on Innovative Intelligence, 5, World Scientific Publishing Company (2004)
 - 24) Z. Chen, S. Aghakhani, J. Man and S. Dick : ANCFIS: A Neurofuzzy Architecture Employing Complex Fuzzy Sets, IEEE TRANSACTIONS ON FUZZY SYSTEMS, VOL. 19, NO. 2, 305/322 (2011)
 - 25) J. Yi, N. Yubazaki and K. Hirota : A Proposal of SIRMs Dynamically Connected Fuzzy Inference Model for Plural Input Fuzzy Control, Fuzzy Sets and Systems, vol.125, no.1, 79/92 (2002)
 - 26) H. Seki, H. Ishii and M. Mizumoto : On the Nonlinear Identification by Functional Type SIRMs Connected Type Fuzzy Reasoning Method, Proc. of Int. Conf. on Industrial Eng. Theory, Applications and Practice, 1441/1446 (2006)
 - 27) H. Leung and S. Haykin : The complex backpropagation algorithm. IEEE Transactions on Signal Processing, 39, 2102/2104 (1991)
 - 28) N. Benvenuto and F. Piazza : On the complex backpropagation algorithm, IEEE Transactions on Signal Processing, 40, 967/969 (1991)
 - 29) 石岩, 水本雅晴 : ファジィシングルトン型推論法を用いたファジィ規則のチューニング, 日本ファジィ学会誌, Vol.9, No.6, 952/958 (1997)
 - 30) D. F. Andrews and A. M. Herzberg, Data: A collection of problems from many fields for the students and research worker, Springer (1985)