速度誤差逆伝搬学習アルゴリズムによる非線形力学系のニューラルネットワーク近似

非会員 石井秀教 (松下電器産業)

正員 相吉英太郎 (慶應義塾大学)

Neural Network Approximation to Nonlinear Dynamics by Velocity Error Backpropagation

Hidehiko ISHII, Non-member (Matsushita Electric Industrial Co.,Ltd.), Eitaro AIYOSHI, Member (Keio University)

This paper presents a new type recurrent neural network and its learning algorithm for nonlinear dynamics named "Velocity-Error Backpropagation(VEBP)."

In VEBP, learning is performed by 2 steps: (a)the velocity vector field of reference trajectories is approximated by feedforward neural network with bi-connection layers by backpropagating velocity errors directly. (b)recurrent neural network is constructed by adding integrators and output feedback loops to the trained feedforward neural network.

VEBP has some advantages with conventional learning method for recurrent neural networks named "backpropagation through time (BPTT)." Effectiveness of the presented recurrent neural network and its learning algorithm is demonstrated by simulation results for some examples of nonlinear dynamics.

キーワード : recurrent neural network, approximation, learning algorithm, dynamics, backpropagation

1. はじめに

ニューラルネットワーク (以下 NN と略記する) による近似は、2 層の結合層からなる層状 NN による静的入出力関係の近似と、帰還型 NN による動的な力学系の近似とに大別される。特に任意の精度で近似できることを保証する理論は、Funahashi らによる文献 (1) 以外にも、前者は文献 (2), (3) によっても近似可能性が数学的に立証されており、また後者は離散時間力学系の近似定理が文献 (4) によって与えられている。さらにこれらの近似可能性を保証する理論的研究とは別に、最小自乗的な意味でできる限り出力誤差を小さくする NN 結合係数を求める算法的研究として、文献 (5) の層状 NN の誤差逆伝搬法が有名であり、また相互結合型 NN に対しては、文献 (6) などにおいて、変分法の原理を用いた最急降下法が導入されている。

ところで、非線形力学系の近似モデルの構築方式には

- 近似対象とモデルとの軌道誤差を時間軸上で積分して、その値を最小化する方式
- 近似対象とモデルとの速度場誤差を離散化した状態空間で総和をとり、それを最小化する方式

の 2 つがある。本論文では、後者において NN を用いて非線形の近似モデルを構築する方式を提案する。前者の

方式による NN 近似には、相互結合型 NN に対してその近似可能性が文献 (7) で、また層状 NN の時間軸上の近似アルゴリズムが文献 (8) 等で与えられているが、後者の方式による非線形力学系の近似に 2 結合層の NN を使用した場合、その出力を積分器を用いて帰還した非線形力学系の振る舞いに関する考察はほとんどない。

さらに、このネットワークの最良の結合係数を最小自乗誤差の意味で見いだす算法として、複数の連続時間力学軌道に対する誤差汎関数の合計量を最小化する手法以外に、状態空間上の位置と対応する速度の対を教師データとして、その誤差の合計量を最小化する手法を提案し、特に後者の有用性をいくつかの非線形力学系の軌道の近似と簡単なマニピュレータの逆キネマティクスを求める最急降下ダイナミクスの近似において示す。

2. 帰還型ニューラルネットワークの構造

〈2・1〉 問題の定義 本論文では連続時間系の近似問題

「 P 種の 1 回微分可能な所望出力関数 $\mathbf{x}^p(t) \in \mathbf{R}^N$, $t \in [0, T]$ が与えられたとする。このとき、初期値 $\mathbf{x}^p(0)$ を入力として与えると、それに対応する出力 $\mathbf{x}^p(\cdot)$ が所望出力 $\mathbf{x}^p(\cdot)$ に一致するように、全ての $p = 1, 2, \dots, P$ に対して共通な帰還型 NN の構造を決定する」..... (*)

を取り扱う。この帰還型 NN は、層状 NN の出力が積分器を通して帰還されて、再び入力となるフィードバック構造を持つ NN のことである。また、問題 (*) における近似対象は $\dot{\mathbf{x}}^p(t)$ が $\mathbf{x}^p(t)$ の関数で表すことができる力学系であるという仮定をおく。この仮定のもとでは、問題 (*) に対して、ある関数 $f_d: \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N$ が存在して、初期値 $\mathbf{x}^p(0)$ に対する所望出力軌道 $\mathbf{x}^p(\cdot)$ を生成する系として

$$\dot{\mathbf{x}}^p(t) = f_d(\mathbf{x}^p(t)) \quad (2.1)$$

を想定することができる。

〈2・2〉 相互結合型ニューラルネットワーク 通常、問題 (*) のような軌道を近似する NN としては、その各素子が相互に全て結合された相互結合型 NN が用いられる。この構造式は、

$$\dot{x}_n(t) = -\frac{x_n(t)}{\tau} + \sum_{m=1}^N w_{nm} g(x_m(t)) + \theta_n \quad (2.2a)$$

$$z_m(t) = g(x_m(t)) = 1/(1 + e^{-x_m(t)}) \quad (2.2b)$$

で示される。ここで N はニューロンの数、 x_n は第 n ニューロンの状態変数、 w_{nm} は第 m ニューロンから第 n ニューロンへの結合係数 ($\{w_{nm}\} = W$)、 τ は時定数、 θ_n は閾値、 $g(\cdot)$ はニューロン特性関数である。(2.2) 式のネットワークは、Hopfield 型ネットワーク⁽⁹⁾といわれ、閉区間 $[0, 1]$ 上の連続変数の 2 次関数の最適化に有効であることが知られている⁽¹⁰⁾。なお、(2.2) 式をベクトル表記すると、

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= -\frac{\mathbf{x}(t)}{\tau} + W\mathbf{g}(\mathbf{x}(t)) + \boldsymbol{\theta} \\ &= \mathbf{f}_1(\mathbf{x}(t)) \end{aligned} \quad (2.3)$$

となり、結合層は 1 層である。ただし、 $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t))^T$ 、 $W \triangleq \{w_{nm}\} \in \mathbf{R}^{N \times N}$ 、 $\mathbf{g}(\mathbf{x}(t)) = (g(x_1(t)), g(x_2(t)), \dots, g(x_N(t)))^T$ 、 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_N)^T$ である。

〈2・3〉 2 結合層帰還型ニューラルネットワーク とここで、帰還型 NN を一般的に表すと、

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_N(\mathbf{x}) \quad \mathbf{f}_N: \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N \quad (2.4)$$

となる。この $\mathbf{f}_N$ は NN の構造を表す関数である。問題 (*) において、所望軌道 $\mathbf{x}^p(t)$ を生成する力学系の速度場を与える関数 f_d を NN の関数 $\mathbf{f}_N$ で近似することができれば、所望軌道 $\mathbf{x}^p(t)$ も (2.4) 式の NN の出力 $\mathbf{x}(t)$ で近似できる。この速度場の近似は静的関数の近似であるため、 $\mathbf{f}_N$ は任意の関数を近似することのできる関数族から選ばれたい。このような関数族として、層状 NN を表現する

$$\mathbf{f}_N(\mathbf{x}) = W\mathbf{g}(\mathbf{y}) = W\mathbf{g}(V\mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}) \quad (2.5)$$

の関数族を本論文では用いる。ここに $\mathbf{g}(\mathbf{y}) = (g(y_1), g(y_2), \dots, g(y_M))$ である。ここで y_m は第 m 中間層ニ

Fig. 1 2 結合層帰還型 NN

Fig. 1. Bi-connection Layer Recurrent NN

ューロンへの入力である。このようなネットワークの構造は Fig. 1 のようになり、

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = W\mathbf{g}(\mathbf{y}) = W\mathbf{g}(V\mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}) \quad (2.6)$$

と表現される。このネットワークは 1 層の結合層しかない相互結合型 NN と比較すると、結合層が 1 層増えているので、2 結合層帰還型 NN (Bi-connection layer Recurrent Neural Network: BRNN) と呼ぶことにする。

(2.5) 式の層状 NN については Funahashi の定理⁽¹⁾ から、適当な仮定のもとで f_N が集合 $\mathbf{R}^N$ 上の任意の連続写像 f_d を近似できることが保証される。なお、他の近似定理を構成することのできる関数族、例えばラディアル基底関数⁽¹¹⁾も、速度場の近似関数として用いることができる。

〈2・4〉 相互結合型と 2 結合層帰還型の比較 まず相互結合型 NN について、速度場の近似能力を考えると、(2.3) 式の構造で与えられる関数 $\mathbf{f}_1$ によって、任意の速度場を与える関数 f_d を近似できるかどうかは、一般には保証されない。ただし、文献 (7) によると、相互結合型 NN により所望軌道の近似が可能である。ただし、この定理における近似モデルの相互結合型 NN は、1 次遅れ $-\mathbf{x}(t)/\tau$ を考慮した BRNN

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = -\frac{\mathbf{x}(t)}{\tau} + W\mathbf{g}(V\mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}) \quad (2.7)$$

の出力と結合層の入力をまとめて新たに出力とすることにより、(2.7) 式と等価な相互結合型 NN を構成したもので、あくまでも相互結合型 NN の構造での近似能力を数理的に保証することを目的としたものである。一方、軌道近似のための学習計算には元の BRNN に対して勾配法などに基づく学習アルゴリズムを構築する方がよいが、文献 (7) においてこの学習アルゴリズムは与えられていない。そこで本論文は (2.6) 式の一次遅れのない BRNN

を直接用いた力学系の学習問題とその学習アルゴリズムを考える。

3. 問題の定式化

ここでは、(2.6) 式の BRNN を用いた学習問題を 2 種定式化し、近似問題の誤差関数の V, W, θ に関する勾配を解析的に与える。問題を解くためには、これらの勾配を用いて最急降下法などの適切な最適化手法を用いればよい。

〈3・1〉 軌道誤差最小化問題 (BPTT: Backpropagation Through Time⁽⁸⁾) 軌道誤差最小化問題は、BRNN のモデル式 (2.6) が生成する軌道 $\mathbf{x}^p(\cdot)$ と所望軌道 $\bar{\mathbf{x}}^p(t)$ の 2 乗誤差を (V, W, θ) に対する汎関数とし、これを最小化する問題として (3.1) 式のように定義される。

$$\min_{(V, W, \theta)} E_1[V, W, \theta] = \sum_{p=1}^P \left\{ \int_0^T \|\mathbf{x}^p(t) - \bar{\mathbf{x}}^p(t)\|^2 dt + \|\mathbf{x}^p(T) - \bar{\mathbf{x}}^p(T)\|^2 \right\} \quad (3.1a)$$

$$\text{subj.to } \dot{\mathbf{x}}^p(t) = Wg(V\mathbf{x}^p(t) + \theta) \quad (3.1b)$$

$$\text{where } \bar{\mathbf{x}}^p(\cdot), \mathbf{x}^p(0) = \mathbf{x}_0^p, p = 1, 2, \dots, P; \text{ given} \quad (3.1c)$$

(3.1a) 式の最小化関数の勾配は (3.2) 式のように求められ、 $A \triangleq \{a_{mn}\} \in \mathbf{R}^{M \times N}$, $B \triangleq \{b_{nm}\} \in \mathbf{R}^{N \times M}$, $\lambda \triangleq \{\lambda_m\} \in \mathbf{R}^M$ がそれぞれ V, W, θ に関する誤差汎関数 $E_1[V, W, \theta]$ の勾配となる。この変分法による勾配の詳しい導出は紙面の都合上省略する。なお、この勾配は文献 (12) にある外部入力に対する汎関数の勾配導出と同様に導出可能である。また、文献 (4) も参照されたい。

$$a_{mn} = \sum_{p=1}^P \int_0^T \left\{ \sum_{k=1}^N p_k^p(t) w_{km} g'(y_m^p(t)) x_n^p(t) \right\} dt, \quad m = 1, 2, \dots, M, n = 1, 2, \dots, N \quad (3.2a)$$

$$b_{nm} = \sum_{p=1}^P \int_0^T p_n^p(t) g(y_m^p(t)) dt, \quad n = 1, 2, \dots, N, m = 1, 2, \dots, M \quad (3.2b)$$

$$\lambda_m = \sum_{p=1}^P \int_0^T \left\{ \sum_{n=1}^N p_n^p(t) w_{nm} g'(y_m^p(t)) \right\} dt, \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (3.2c)$$

ただし、随伴変数 $p_n^p(\cdot)$, $n = 1, 2, \dots, N$ は随伴方程式

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \{Wg'(\mathbf{y}(t))V\}^T \mathbf{p}(t) + (\mathbf{x}^p(t) - \bar{\mathbf{x}}^p(t)), \quad \mathbf{p}(T) = \mathbf{x}^p(T) - \bar{\mathbf{x}}^p(T) \quad (3.3)$$

の逆時間解である。

〈3・2〉 速度場誤差最小化問題 (速度誤差逆伝搬法) 所望軌道 $\bar{\mathbf{x}}^p(\cdot)$ とその速度 $\dot{\bar{\mathbf{x}}}^p(t) = \bar{\mathbf{o}}^p(t)$ が与えられ、 $\bar{\mathbf{x}}^p(\cdot)$ と $\bar{\mathbf{o}}^p(\cdot)$ の組を静的入出力関係として関数 f_N によって実現するとき、速度場誤差の最小化問題は、 $\bar{\mathbf{x}}^p(\cdot)$

に対応する f_N の値と所望出力 $\bar{\mathbf{o}}^p(\cdot)$ 間の 2 乗誤差を最小化させる問題として (3.4) 式のようにして定式化される。

$$\min_{(V, W, \theta)} E_2(V, W, \theta) = \sum_{p=1}^P \int_0^T \|\bar{\mathbf{o}}^p(t) - \mathbf{o}^p(t)\|^2 dt \quad (3.4a)$$

$$\text{subj.to } \mathbf{o}^p(t) = Wg(V\bar{\mathbf{x}}^p(t) + \theta) \quad (3.4b)$$

$$\text{where } \bar{\mathbf{x}}^p(\cdot), \bar{\mathbf{o}}^p(\cdot), p = 1, 2, \dots, P; \text{ given} \quad (3.4c)$$

(3.4a) 式の最小化関数の勾配は、通常の誤差逆伝搬法とはほぼ同様に (3.5) 式のように求められ、 $A \triangleq \{a_{mn}\} \in \mathbf{R}^{M \times N}$, $B \triangleq \{b_{nm}\} \in \mathbf{R}^{N \times M}$, $\lambda \triangleq \{\lambda_m\} \in \mathbf{R}^M$ がそれぞれ、 V, W, θ に関する誤差汎関数 $E_2(V, W, \theta)$ の勾配となる。

$$a_{mn} = \sum_{p=1}^P \int_0^T \sum_{k=1}^N (o_k^p(t) - \bar{o}_k^p(t)) w_{km} g'(y_m^p(t)) \bar{x}_n^p(t) dt, \quad m = 1, 2, \dots, M, n = 1, 2, \dots, N \quad (3.5a)$$

$$b_{nm} = \sum_{p=1}^P \int_0^T (o_n^p(t) - \bar{o}_n^p(t)) g(y_m^p(t)) dt, \quad n = 1, 2, \dots, N, m = 1, 2, \dots, M \quad (3.5b)$$

$$\lambda_m = \sum_{p=1}^P \int_0^T \sum_{n=1}^N (o_n^p(t) - \bar{o}_n^p(t)) w_{nm} g'(y_m^p(t)) dt, \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (3.5c)$$

ただし、時間区間を離散化した場合は、(3.4) 式や (3.5) 式の積分 $\int_0^T$ は $\sum_{t=0}^T$ で置き換えられる。

このように速度場の誤差最小化問題の勾配は、速度に関する誤差逆伝搬法を使って求められるので、この勾配を用いたアルゴリズムを速度誤差逆伝搬法 (Velocity-Error BackPropagation: VEBP) と名付け、これを以下に示す。

≪ アルゴリズム 1 速度誤差逆伝搬法 ≫

Step 1. 初期結合係数を $V(1), W(1), \theta(1)$ を決め、 $\kappa = 1$ とする。

Step 2. 誤差関数 $E_2(V, W, \theta)$ とその (V, W, θ) に関する勾配 $A(\kappa)$, $B(\kappa)$, $\lambda(\kappa)$ を計算し、採用した無制約最適化手法に従い、 (V, W, θ) の更新量 $A'(\kappa)$, $B'(\kappa)$, $\lambda'(\kappa)$ を決定する。(無制約最適化手法が最急降下法なら $A' = -A, B' = -B, \lambda' = -\lambda$ となる。他の方法については文献 (13) を参照のこと)

Step 3. $E_2(V, W, \theta) < \varepsilon$ または全ての勾配成分のノルムが微小正数 ε より小さいならば、局所的最適解に到達したと見なし、アルゴリズムを終了する。それ以外の場合は次に進む。

Step 4. 適当な直線探索法を用いて、ステップ幅 (学習係数) $\alpha(\kappa)$ を求める。

Step 5. $V(\kappa + 1) = V(\kappa) + \alpha(\kappa)A'(\kappa)$, $W(\kappa + 1) = W(\kappa) + \alpha(\kappa)B'(\kappa)$, $\theta(\kappa + 1) = \theta(\kappa) + \alpha(\kappa)\lambda'(\kappa)$ とする。

Step 6. $\kappa := \kappa + 1$ とし、Step 2. へ戻る。

〈3・3〉 軌道誤差最小化問題と速度場誤差最小化問題の比較 軌道誤差最小化問題による定式化では、勾配導出時に誤差汎関数の初期値依存性をなくすために、教師データのパターン毎に NN の積分器の初期状態 $\mathbf{x}^p(0)$ と所望軌道の初期状態が一致していることを前提とする。一方、速度誤差逆伝搬法では、状態空間における速度場の近似として所望軌道と所望速度が教師データとなるため、両者に一对一の対応関係が必要である。そのため、力学系でない系の軌道、例えば状態変数の数 $N = 1$ の $x(t) = \sin t$ のように、 $t = 0$ のとき $(x, \dot{x}) = (0, 1)$ 、 $t = \pi$ で $(x, \dot{x}) = (0, -1)$ のように教師データに一对一の関係がない速度場を学習することは不可能である。ただしこの場合も $x(t) = \sin t$ を生成する $N = 2$ の力学系を考えれば学習は可能になる。

相互結合型 NN では、軌道誤差最小化問題のタイプの学習問題しか想定されていないが、本論文が前提としている BRNN では、軌道誤差最小化問題だけでなく、速度場誤差最小化問題のタイプの学習も可能であることが大きな特徴であり、BRNN を Funahashi の方式で等価変換せずに、これに直接適用できるアルゴリズムと考えることができる。

また、速度場誤差最小化 (速度誤差逆伝搬法) では、問題 (3.4) と異なる形式の問題を定式化することができる。問題 (3.4) は、ある初期点から決まる軌道上で、参照モデルの力学系によって定まる速度を近似する問題である。これに対して、参照モデルや初期点による特定の軌道を意識することなく、状態空間上のサンプル点で与えられた速度場を直接近似する問題も考えることができる。状態空間上のサンプル点を P 個とし、そこにおける状態量と所望速度を $(\bar{\mathbf{x}}^p, \bar{\mathbf{o}}^p)$ 、 $p = 1, 2, \dots, P$ とすると、このような問題は

$$\min_{(V, W, \theta)} E_3(V, W, \theta) = \sum_{p=1}^P \|\bar{\mathbf{o}}^p - \mathbf{o}^p\|^2 \quad (3.6a)$$

$$\text{subj.to } \mathbf{o}^p = Wg(V\bar{\mathbf{x}}^p + \theta) \quad (3.6b)$$

$$\text{where } \bar{\mathbf{x}}^p, \bar{\mathbf{o}}^p; \text{ given } p = 1, 2, \dots, P \quad (3.6c)$$

と定式化される。この問題では、特定の軌道上での速度の近似ではないため、時間変数 t に無関係であり、参照モデルの力学系が関数を用いて陽に定義されていなくても、それを NN によって近似することが可能である。

4. シミュレーション

本論文では、随伴方程式を解くことによる時間軸上の誤差逆伝搬計算を行わなくてすむ、2つのタイプの速度場誤差最小化問題 (3.4) と (3.6) の有用性を、いくつかの非線形力学系の例題に対するシミュレーションによって確認する。ここでは、文献 (13) を参考にし、無制約最適化法として共役勾配法、その直線探索法として黄金分割法を用いた。

Fig. 2 所望信号

Fig. 2. desired signal

Fig. 3 BRNN の軌道

Fig. 3. Trajectories of BRNN

〈4・1〉 比較的単純な軌道の学習 Fig. 2 に示す 6 個の軌道

$$x_1^1(t) = a(t-1)(2t^2 - t - 1), \quad (4.1a)$$

$$x_2^1(t) = x_2^5(t) = 2t - t^2, \quad (4.1b)$$

$$x_1^2(t) = 1 - at(t-1)(2t^2 - t - 1) = -x_1^1(t), \quad (4.1c)$$

$$x_2^2(t) = x_2^6(t) = 1 - 2t - t^2 = -x_2^1(t), \quad (4.1d)$$

$$x_1^3(t) = a(t-1)(2t^2 - t - 1), \quad (4.1e)$$

$$x_2^3(t) = 2(1-a)t - (1-a)t^2 + a, \quad (4.1f)$$

$$x_1^4(t) = 1 - a(t-1)(2t^2 - t - 1) = -x_1^3(t), \quad (4.1g)$$

$$x_2^4(t) = 1 - 2(1-a)t - (1-a)t^2 + a = -x_2^3(t), \quad (4.1h)$$

$$x_1^5(t) = x_1^6(t) = 0, \quad t \in [0, 1], \text{ただし } a = 0.4 \quad (4.1i)$$

を所望軌道とし、時間区間 $[0, 1]$ におけるこれらの軌道を時間軸の刻み幅 0.025 で離散化し、各離散点とそこでの速度との対データを学習データ $(\bar{\mathbf{x}}^p, \bar{\mathbf{o}}^p)$ として、合計 $40 \times 6 = 240$ 個のデータを与えた。中間層ニューロンを 20 個として、問題 (3.4) を構成し学習を行ったとこ

Fig. 4 van der Pol 方程式の軌道
Fig. 4. Trajectory of van der Pol's equation

Fig. 5 格子点
Fig. 5. Grid points

ろ、共役勾配法のイテレーション回数が 5000 のときに誤差関数値が 0.197 となった。このとき、学習結果後の軌道と所望軌道を比較するため重ねた図を Fig. 3 に示す。

この軌道は状態平面の右半分と左半分で、 x_2 の進む方向が逆になること、 $x_1 = 0, 1$ のときは x_1 方向に全く変動せず、 $\dot{x}_1 = 0$ が要求されている点で必ずしも単純なダイナミクスではない例である。学習の結果得られた近似モデルの NN に対し、学習させた軌道以外の初期値 $(0.2, 0)$, $(0.2, 0.4)$, $(0.8, 1)$, $(0.8, 0.6)$ から状態を発展させたところ、いずれも $(0, 1)$ または $(1, 0)$ に収束した。これらの結果から、状態平面の左側では $(0, 1)$ を、右側では $(1, 0)$ を定常状態とするような軌道の性質を学習させたところ、得られた NN が初期状態の変動に対してこの性質に関するある程度の汎化能力を示したことが分かる。

〈4・2〉 van der Pol 方程式の近似 非線形力学系の近似例として van der Pol 方程式 ($\varepsilon = 1$)

$$\dot{x}_1(t) = x_2 \quad (4.2a)$$

$$\dot{x}_2(t) = -x_1 + \varepsilon(1 - x_1^2)x_2 \quad (4.2b)$$

を取り上げ、以下の 2 通りの所望出力を与え、学習させた。

- (a) 問題 (3.4) に対応して時間区間 $[0, 25]$ を刻み幅 0.1 で離散化し、各点での速度と対にして 250 個のデータを与えた場合 (Fig. 4)
- (b) 問題 (3.6) に対応して状態空間 (x_1, x_2) 内の $-2.5 \leq x_1, x_2 \leq 2.5$ の正方形の範囲を、刻み幅 0.25 で離散化し各点での速度と対にして 441 個のデータを与えた場合 (Fig. 5)

これら 2 通りの所望出力による教師信号の与え方において、中間層ニューロン数の違いによる計算終了時 (2000 回の学習係数更新時) の誤差関数値の大小を表 1 に示す。また、Fig. 8, Fig. 9 は、それぞれ学習により得ら

表 1 中間層ニューロン数と誤差関数値

Table 1. Number of hidden layer neurons and error function values

教師信号 \ 中間層ニューロン数	9	14
(a)	0.169 (Fig. 6)	0.0384
(b)	1183.01	0.327 (Fig. 7)

れた Fig. 6, Fig. 7 の速度 $\dot{x}_2(t)$ を、 (x_1, x_2) に対して描いたものであり、さらに Fig. 10, Fig. 11 は、NN の出力であるそれらの値と対応する所望値との差を、 x_1, x_2 ともに区間 $[-3, +3]$ を 25 等分した離散点において、円の大きさ (網掛けの円は差が正、白塗りの円は負の値) で表した図である。

以上 2 種類の図で比較すると、教師信号 (a) の場合は教師信号上でのみ近似が行われているのに対し、(b) では教師信号の範囲が大体学習されていることが分かる。また後者の方が多くの中間層ニューロンが必要なのも、状態空間全体の学習に多くの教師データを用いたためと考えられ、一方でリミットサイクルに至るまでのトランジェント軌道の学習も良好に行われている。

〈4・3〉 Langford 方程式の学習 トーラスを持つ系の学習例として、Langford 方程式 ($\alpha = 1, \beta = 0.7, \lambda = 0.6, \omega = 3.5, \rho = 0.25, \varepsilon = 0$)

$$\dot{x}_1 = (x_3 - \beta)x - \omega y \quad (4.3a)$$

$$\dot{x}_2 = \omega x + (z - \beta)y \quad (4.3b)$$

$$\dot{x}_3 = \lambda + \alpha z - \frac{z^3}{3} - (x^2 + y^2)(1 + \rho z) + \varepsilon z x^3 \quad (4.3c)$$

の軌道学習を行った。初期状態を $\mathbf{x}(0) = (0, 0, 0.1)^T$ とし、時間区間 $[0, 160]$ 上の軌道を刻み幅 0.1 で離散化し、前述の場合と同様に 1600 個のデータを教師データ (Fig. 12) として与えた。

中間層ニューロン 13 個のとき、共役勾配法によって結合係数を 6000 回更新したところで誤差関数値 $E = 0.204$ で学習を終了し、その結果得られた近似 NN の軌道を Fig. 13 に示す。この学習後の軌道を見ると、トーラス上に沿う動きを示しているが、トーラスを埋めるような軌道を作るまで至っていない。

Fig.6 BRNN の軌道 (a)
Fig. 6. BRNN's Trajectory(a)

Fig.7 BRNN の軌道 (b)
Fig. 7. BRNN's Trajectory(b)

Fig.8 BRNN の速度場 (a)
Fig. 8. BRNN's Vector Field(a)

Fig.9 BRNN の速度場 (b)
Fig. 9. BRNN's Vector Field(b)

Fig.10 BRNN の速度場誤差 (a)
Fig. 10. BRNN's Vector Field Error(a)

Fig.11 BRNN の速度場誤差 (b)
Fig. 11. BRNN's Vector Field Error(b)

Fig. 12. Trajectory of Langford equation

Fig. 13. BRNN's Trajectory

なお、初期値 $(0.1, 0, 0)$ 、 $t = 1000$ (刻み幅 0.1) までのリアプノフ指数によって、近似度を判定すると、Langford モデルのリアプノフ指数は、 $(0.7310, -0.06782, -0.6724)$ となり、NN のリアプノフ指数は、 $(0.705, -0.0756, -0.6834)$ となった。両者のオーダーはほぼ同じであるため、ある程度の精度の近似ができていると言える。

〈4・4〉 マニピュレータの逆キネマティクスの学習 初期状態に応じて定常状態が複数存在する非線形ダイナミクスの近似として、マニピュレータの所望ハンド位置を与える関節角度を求めるいわゆる逆キネマティクス問題において、それを最急降下法で解く過程の関節角度の変動を NN に埋め込み、近似する。ここでは簡単化のために、Fig. 14 の 2 リンクマニピュレータについて考える。この順キネマティクスモデルは、関節角度を $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ 、ハンド位置を $\mathbf{z} = (z_1, z_2)$ とすると

$$z_1 \triangleq F_1(\mathbf{x}) = l_1 \cos x_1 + l_2 \cos(x_1 + x_2) \quad (4.4a)$$

$$z_2 \triangleq F_2(\mathbf{x}) = l_1 \sin x_1 + l_2 \sin(x_1 + x_2) \quad (4.4b)$$

と表される。ここで、所望ハンド位置 $\bar{\mathbf{z}} = (\bar{z}_1, \bar{z}_2)$ を得る関節角度を求めるために、ハンド位置誤差最小化問題

Fig. 14. 2-link Manipulator

Fig. 15. Vector Field of 2-link Manipulator's Inverse Kinematics

$$\min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \|\bar{\mathbf{z}} - \mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \quad (4.5)$$

を想定し、これに最急降下法を適用すると、ダイナミクスは

$$\dot{x}_i(t) = \sum_{j=1}^2 (\bar{z}_j - F_j(\mathbf{x}(t))) \frac{\partial F_j(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i}, i = 1, 2 \quad (4.6)$$

となる。Fig. 14 で明らかなように、マニピュレータの初期位置を与える初期関節角度に応じて、所望ハンド位置を与える定常状態の関節角度が 2 通りあり、また最急降下則 (4.6) の速度場を示す Fig. 15 はからも定常点が 2 種存在することが分かる。ただし、Fig. 15 は所望ハンド位置を $(\bar{z}_1, \bar{z}_2) = (5, 5)$ 、マニピュレータの腕の長さを $l_1 = 5, l_2 = 3$ としたときのものである。

NN の学習では、問題 (3.4) において $P = 2$ とし、関節角度の 2 種の初期状態 $\mathbf{x}^1(0) = (0, 0)$ 、 $\mathbf{x}^2(0) = (70, 90)$ (単位: 度) を与えたときに (4.6) 式から得られる 2 本の解軌道上において、それぞれ 25 個ずつ速度データを選び、教師信号として学習させた。中間層に 7 個のニューロンを有する NN において、結合係数を 10000 回

Fig. 16. BRNN's State(Degree) Trajectory

Fig. 17. BRNN's Hand Position Trajectory

更新した結果、誤差関数値が 0.7707 となり、学習が終了した。教師信号の軌道と学習の結果得られた NN による軌道の比較を、関節角度とハンド位置に対してそれぞれ Fig. 16, Fig. 17 に示す。

両図から軌道自体はほぼ近似できていることが分かる。ただし、定常状態の近傍の速度の大きさは初期状態付近と比べて小さくなるため、一定時間区間の速度誤差を平均的に最小化する問題 (3.4) においては、定常状態近傍での精度が相対的に悪くなる傾向がある。そこで、定常状態付近での精度向上には、時間経過とともに定常状態に漸近するに従って誤差の評価の重みを大きくする係数を (3.4a) 式の積分に乘じる必要がある。

5. まとめ

本論文では、速度が非線形関数で生成される力学系を、2 結合層を有する通常の層状 NN で近似し、その出力を積分器を通して帰還する構造の帰還型 NN において、速度場を学習する問題の定式化とその学習アルゴリズム (VEBP)

表 2 VEBP と BPTT の比較

Table 2. Comparion : VEBP vs BPTT

特徴	VEBP	BPTT
初期値依存性	無	有
既知教師信号	× (全状態の位置と速度が必要)	○ (全状態が既知である必要がない)
教師信号の連続性	不必要	必要

を提案した。ここで定式化された速度場誤差最小化問題自体、状態空間における軌道を直接学習する問題と比べて、初期条件依存性が排除されるだけでなく、学習アルゴリズムにおいても、時間軸上での誤差逆伝搬計算の必要がないなどの本質的な利点があり、各種の軌道近似問題に有用であることを確認した。VEBP を時間軸上の誤差逆伝搬法 (BPTT) 法と比較し、表 2 に示した。今後の課題としては、非自律系の近似、無駄時間系の近似、入力が存在する非斉次系の近似、近似 NN の安定性解析、定常状態付近での近似精度の向上などが挙げられる。

(平成 12 年 4 月 18 日受付, 同年 11 月 2 日再受付)

文 献

(1) K. Funahashi. "On the approximation realization of continuous mappings by neural networks". *Neural Networks*, Vol. 2, pp. 183-192, 1989.

(2) R. J. Williams and D. Zipser. "A learning algorithm for continually running fully recurrent neural networks". *Neural Computation*, Vol. 1, pp. 270-280, 1989.

(3) K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White. "Multilayer feed-forward networks are universal approximators". *Neural Networks*, Vol. 2, pp. 359-366, 1989.

(4) B. A. Pearlmutter. "Learning state space trajectories in recurrent neural networks". *Neural Computation*, Vol. 1, pp. 263-269, 1989.

(5) D.E.Rumelhart, G.E.Hinton, and R.J.Williams. "A learning representations by back-propagation errors". *Nature*, Vol. 323-9, pp. 533-536, 1986.

(6) M. Sato. "A learning algorithm to teach spatiotemporal patterns to recurrent neural networks". *Biological Cybernetics*, Vol. 62, pp. 259-263, 1990.

(7) K. Funahashi and Y. Nakamura. "Approximation of dynamical systems by continuous time recurrent neural networks". *Neural Networks*, Vol. 6, pp. 801-806, 1993.

(8) P. J. Werbos. "Backpropagation through time: What it does and how to do it". *Proceedings of the IEEE*, Vol. 78, pp. 1550-1560, 1990.

(9) J. J. Hopfield and D. W. Tank. "Neural computation of decisions in optimization problems". *Biological Cybernetics*, Vol. 52, pp. 141-152, 1985.

(10) 相吉英太郎, 吉川厚. 「ニューラルネットワークによる最適化 : その疑問と課題 —もう 1 つの接近法—」. 計測と制御, Vol. 34, No. 5, pp. 358-366, 1995.

(11) E. J. Hartman, J. D. Keeler, and J. M. Kowalski. "Layered neural networks with gaussian hidden units as universal approximations". *Neural Computation*, Vol. 2, pp. 210-215, 1990.

(12) 志水清孝. 最適制御の理論と計算法. コロナ社, 1994.

(13) 相吉英太郎, 志水清孝. 「数値計画法演習」. 朝倉書店, 1985.

石 井 秀 教 (非会員) 1995 年慶應義塾大学理工学部計測工学

科卒業。1997 年慶應義塾大学大学院理工学研究科修士課程修了 (計測工学専攻)。同年松下電器産業 (株) に入社, 現在に至る。1996 年度電気学会論文発表賞受賞。大学院在学中はニューラルネットワークの学習に関する研究に従事。計測自動制御学会, 電子情報通信学会会員。

相 吉 英太郎 (正員) 1975 年慶應義塾大学理工学部計測工学科

卒業。同大学大学院工学研究科修士課程を経て, 1980 年 同博士課程修了 (工学博士)。慶應義塾大学理工学部助手, 専任講師, 助教授を経て, 1996 年教授。最適化の理論と計算方法に関する研究に従事。