原著論文

タブー探索を用いたリカレントニューラルネットワークの構造最適化†

林田 智弘*・西崎 一郎*・末宗 明恵*

リカレントニューラルネットワークは、その構造およびユニット間の接続重みのパラメータを適切に設定することで、時系列データに対して高い精度の予測が可能であるが、多数のユニットから構成されるリカレントニューラルネットワークの構造を最適に設計することは難しい。また、ニューラルネットワークの予測能力は学習用データに対する誤差の最小化だけではなく、学習に使用されない未知のデータに対する汎化能力が必要である。本論文では、効率的な近傍探索が期待できるタブー探索を用いた、汎化能力の獲得も考慮したリカレントニューラルネットワークの構造最適化手法を提案する。いくつかの時系列データに関するベンチマーク問題を用いた実験により、提案手法は、遺伝的アルゴリズムを用いた従来手法と比べて同等あるいはより優れた手法であることを示す。

キーワード：リカレントニューラルネットワーク、構造最適化、タブー探索、時系列データ、進化計算

1. はじめに

十分な数のユニットから構成されるニューラルネットワークは、ユニット間の接続重みなどのパラメータを適切に設定することで、任意の関数に対する高い近似能力を持つことが知られており、文字認識[38]、音声認識[44]、文法推定[50]などの分類問題にフィードフォワード型ニューラルネットワーク(FNN: Feedforward Neural Network)が応用されている。また、ニューラルネットワーク内部でのフィードバックを考慮したリカレントニューラルネットワーク(RNN: Recurrent Neural Network)が、株価予測[37]、気象予測[8]などの時系列データに対して高い予測精度を持つことが報告されている。

ニューラルネットワークは、構成するユニット数が少ない場合には適切な学習を行うことが難しく、逆にユニット数が多すぎる場合には過学習による汎化能力の低下が起こる。このため、ネットワークを構成するユニットの数などのネットワーク構造を設計者が適切に設定する必要があり、設計者が試行錯誤的にネットワークの構造を決定していた[4, 5, 18, 50]。

ニューラルネットワークが高精度の近似、あるいは予測能力を獲得するためには、構成するユニット間の接続重み、学習ルール、ネットワーク構造などを最適

に設定する必要がある[52]。しかし、対象問題に対応した高い精度の予測能力を持つネットワークの構造を決定するためには、多くの調整時間が必要であるため、遺伝的進化計算手法によりネットワークの適切な構造を発見する手法[6, 7, 11, 14, 30, 39, 45, 46, 49]や、接続重みを含めたネットワーク構造を遺伝的進化手法により学習するTWEANN (Topology and Weight Evolving Artificial Neural Network)を基礎とした構造最適化手法[35, 40, 41]、ユニット間の伝達関数の最適化手法[34]などが提案されている。この他にも、ニューラルネットワークの最適化の関連研究が多く報告されている[48]。本論文では、時系列データ予測のためにニューラルネットワークの最適な構造を効率的に発見する手法を提案する。

ここでは、時系列データ予測に適した構造を持つRNNの構造最適化手法をいくつか紹介する。Delgado et al. [11]は、SPEA2 [51]、NSGA-II [10]といった進化的多目的最適化手法を用いて、Elman型RNN [13]の学習誤差と構造の複雑さを最小化する構造最適化手法を提案した。Katagiri et al. [30]は、MCRNN (Multi-Context RNN) [20]を拡張したネットワークモデルに対して局所最適解の保持やエリート保存、自己適応型突然変異[1, 3, 21]などの枠組みを応用した構造最適化手法を提案した。Park [36]は、入力層とフィードバック層からの出力の積をRNNの中間層に与えるニューラルネットワークであるBLRNN (BiLinear RNN) [53]の構造を単一の目的関数により評価し、遺伝的アルゴリズムを用いて定式化された目的関数を最

† Structural Optimization of Recurrent Neural Networks Using Tabu Search

Tomohiro HAYASHIDA, Ichiro NISHIZAKI and Akie SUEMUNE

* 広島大学大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, Hiroshima University

小化する構造最適化手法を提案した。

これまでに提案されているニューラルネットワークの構造最適化手法は、TWEAN[40, 41]のようにネットワーク構造と接続重みを進化的計算手法を用いて更新する手法と、Delgado et al., Katagiri et al., Park などのようにネットワーク構造は進化的計算手法により更新し接続重みは誤差逆伝播法を用いて更新する手法の2種類に分類され、いずれの手法も主として遺伝的アルゴリズムを基礎とした手法である。一方で、類似した構造を持つニューラルネットワークは類似したパフォーマンスを持つと考えられるため、近傍探索を基礎とする手法を採用することで効率的な構造最適化が行えると考えられる。遺伝的アルゴリズムを用いることで広範囲な解が探索されるが、このような近傍探索を行うことは難しい。このため、本論文では、高精度な時系列データ予測を目的としたニューラルネットワークの構造最適化手法として、遺伝的アルゴリズムではなく近傍探索を基礎とするタブー探索[19]を用いた手法を提案する。ただし、時系列データに対する予測問題を取り扱う従来研究[11, 30, 36]と同様に、接続重みの学習については誤差逆伝播法を用いる。また、構造探索の集中化による局所解への収束を避けるために、タブー探索のアルゴリズムを改良している。タブー探索は、近傍探索を基礎としたメタヒューリスティクスの一種であり、探索の集中化戦略と多様化戦略の組み合わせにより効率的な解の探索が行われ、巡回セールスマン問題[15, 22]、スパニングツリーの最短経路問題[9, 28, 29]や、その他多くの最適化問題に適用されている[2, 12, 17, 31, 42]。

また、ニューラルネットワークの学習では、学習データに対する誤差の最小化だけではなく、未知のデータに対する汎化能力を持つように工夫されるべきである。ニューラルネットワークを用いた時系列データ予測においては、過去数期分のデータをニューラルネットワークに与えることで、時系列データに対する精度を高められる。しかし、十分な予測精度を得るために必要な過去のデータ量は、データによって変化すると考えられる。このため、対象となる時系列データの予測のためにどの程度まで過去のデータを参照するかを決定する必要がある。

本論文では、以上のことを複合的に考慮して、時系列データ予測に必要な過去のデータ量の決定も含めて、タブー探索を用いて高い予測精度と汎化能力を持つようにニューラルネットワークの構造を最適化する手法を提案する。なお、提案手法の有効性の検証については、複数の時系列データのベンチマーク問題[16, 24, 26, 43, 54]を用いる。

本論文の構成は以下のとおり。2章では、ニューラルネットワークの構造および関連研究について簡単に紹介する。3章では、タブー探索を用いた構造最適化手法について詳述し、4章でいくつかの時系列データを用いた数値実験を行い、従来手法との比較を行うとともに提案手法の有効性を述べる。最後に5章でまとめと今後の課題を述べる。

2. ニューラルネットワークと構造最適化

2.1 ニューラルネットワークのモデル

時系列データを取り扱う場合、一般に過去のデータをフィードバックすることでデータの予測精度が高くなることが期待される。このようなニューラルネットワークのモデルとして、1期前の出力層からの出力を中間層にフィードバックするJordan型ニューラルネットワーク[25]や、1期前の中間層からの出力をフィードバックするElman型ニューラルネットワーク[13]などのRNNが提案されており、さまざまな時系列データ予測に適用されている[8, 11, 30, 37]。MCRNN[23]は、数期前までの中間層からの出力を保持するための複数のフィードバック層を持つ、Elman型RNNを拡張したニューラルネットワークである。また、Elman型RNNは、入力層とフィードバック層からのデータを中間層に与えるが、BLRNN[53]はこれらに加えて、入力層とフィードバック層からの出力の積をRNNの中間層に与える。Elman型RNN、MCRNN、BLRNNの構造をそれぞれ図1-3に示す。

時系列データ $y(t) = (y_1(t), y_2(t), \dots, y_o(t))$, $t=1, 2, \dots$ を考えたとき、 t 期のデータ $y(t)$ は、 $y(t-1)$, $y(t-2)$, ... にも依存していると考えられる。すなわち、時系列データに対する予測とは、 $y(t) = f(y(t-1), y(t-2), \dots)$ なる多変量関数 f を同定することに帰着される。厳密に f を同定できれば、対象データの高精度な予測が可能となるが、このような関数は複雑な非線形関数であると考えられ、これを同定することは一

図1 Elman型RNN

図5 拡張型MCRNN

フィードバック層数 b 、過去の入力の期数 p を最小化する目的関数を追加して、拡張型MCRNNの構造最適化問題を多目的最適化問題として定式化した。拡張型MCRNNを図4と同様にコード化した場合、Elman型RNNよりも遺伝子が長くなるため、学習誤差への影響が小さい接続に対する刈り取りを適用して構造探索を効率化した。また、探索の集中化および多様化のために、探索過程で局所最適解とされた個体および学習誤差の小さい個体を一定数次世代に継承するエリート保存則と、自己適応型突然変異[1]が適用されている。

Park [36]は、BLRNNの構造最適化問題に対して、構造の評価関数をBLRNNを構成するユニット数と出力誤差を用いて次のように定式化した。

$$F = \frac{1}{1 + E + C_n n + C_h h + C_b b} \quad (2)$$

ただし、 n 、 h 、 b は入力層ユニット数、中間層ユニット数、フィードバック層数、 C_n 、 C_h 、 C_b は重みパラメータである。Parkは式(2)に示す単一の目的関数を最小化することで構造最適化を試みている。BLRNNの構造から、中間層ユニット数の変化によりユニット間接続の数の変化が大きくなるため、3つの重みパラメータ C_n 、 C_h 、 C_b について、 C_h に C_n 、 C_b よりも大きな値を割り当てることで効率的な探索が行われている。

3. タブー探索を用いた構造最適化手法

ニューラルネットワークの構造に関して、類似した構造をもつニューラルネットワークのパフォーマンスの差は大きくないが、少しずつ改善していく方向へ構造を調整していくことが可能である。このような調整過程は近傍の集中的な探索とみなすことができ、実行不可能な解も含めた広範囲な探索を行う遺伝的アルゴリズムでは、ニューラルネットワークの構造最適化に

は有効であると考えられる解の近傍の集中的な探索が困難である。従来研究では、遺伝的アルゴリズムを用いたニューラルネットワークの構造最適化手法が提案されてきたが[11, 30, 36]、遺伝的アルゴリズムによる探索では、ニューラルネットワークの構造に関する近傍を集中的に探索することが難しい。これに対して、近傍探索に基づく最適化手法であるタブー探索[19]を用いることで、類似した構造を集中的に探索することができる。さらに、多様化戦略を組み合わせることによって、高いパフォーマンスを持つニューラルネットワークの構造の発見が期待される。

MCRNNの構造は、入力層、中間層のユニット数、およびフィードバック層数により特徴づけられる。さらに、従来研究と同様にユニット間の接続を適切に選択することで、MCRNNの汎化能力の向上が期待される。本論文では、図2に示されるMCRNNに対して、入力層、中間層のユニット数、およびフィードバック層数の最適化にタブー探索[19]を適用したあと、さらにユニット間の接続の有無の最適化に関してもタブー探索を適用して、任意の時系列データに対する高い予測精度を持つようにMCRNNの構造を最適化する手法を提案する。すなわち、提案手法は2つのフェーズからなり、それぞれタブー探索に基づいた構造最適化が行われる。第1段階ではMCRNNを構成するユニット数を決定し、第2段階ではユニット間接続の選択を行う。

3.1 タブー探索を用いたユニット数の選択

過去のデータの入力数(入力層ユニット数) n 、中間層ユニット数 h 、フィードバック層数 b で特徴づけられる解を $A^u = (n, h, b)$ としてタブー探索を行い、接続重みを学習した後の近傍解を評価する。ただし、従来のニューラルネットワークの構造最適化手法[11, 30, 36]と同様に、接続重みおよび閾値は学習誤差の最小化だけではなく未知のデータに対する汎化能力の獲得も考慮する。

探索の集中化と多様化

タブー探索では短期メモリおよび長期メモリを用いた探索の集中化と多様化を実現している。 g 回目の探索における解を A_g^u として、 A_g^u の各要素のうちの1つを1だけ増加、もしくは減少させた解の集合、すなわちハミング距離が1である解の集合 $\{(n-1, h, b), (n+1, h, b), (n, h-1, b), (n, h+1, b), (n, h, b-1), (n, h, b+1)\}$ に対して、これから短期メモリに記録された解を除いたものを A_g^u の近傍集合 AN_g^u とする。探索の集中化のために行われる近傍探索では、現在の解 A^u の近傍のうちもっとも評価の高い解に移動し、

これを次期の解とする。すでに探索した解を一定期間短期メモリに記録し、この短期メモリに記録された解への移動を禁止することで、探索の巡回を防ぐ。

短期メモリを用いた近傍探索だけでは、一部の解領域のみの探索となる場合がある。このため、探索領域をいくつかの部分領域に分割して各部分領域における探索回数を保持する長期メモリを用いて、探索の多様化を行う。 d_n, d_h, d_b をそれぞれ入力層ユニット数 n 、中間層ユニット数 h 、フィードバック層数 b に対応する領域分割数、 w_n, w_h, w_b を対応する分割幅としたとき、部分領域は、 $F_{ijk} = \{(n_i, h_j, b_k); (i-1)w_n < n_i \leq iw_n, (j-1)w_h < h_j \leq jw_h, (k-1)w_b < b_k \leq kw_b\}$, $i = 1, \dots, d_n, j = 1, \dots, d_h, k = 1, \dots, d_b$ と表わされる。各部分領域において近傍探索を繰り返す集中的な探索が終われば、探索の多様化のため確率的に別の部分領域に移動し、移動した小領域に含まれるように各パラメータがランダムに決定された初期解が新たに生成され探索が再開される。ここで、 L_{ijk} は部分領域 F_{ijk} におけるこれまでの探索回数、長期メモリに記録される。部分領域 F_{ijk} に移動する確率 p_{ijk} は次式で与えられる。

$$p_{ijk} = \frac{L^{range} - L_{ijk}}{\sum_{i=1}^{d_n} \sum_{j=1}^{d_h} \sum_{k=1}^{d_b} (L^{range} - L_{ij'k'})} \quad (3)$$

ただし、 $L^{range} = \max_{i,j,k} L_{ijk} - \min_{i,j,k} L_{ijk}$ である。式(3)により、これまでの探索回数が少ない部分領域が高い確率で選択されやすくなり、広範囲の探索を可能にしている。

加重誤差による個体評価

学習過程におけるニューラルネットワークの評価にはネットワークの出力と学習用データとの誤差が用いられるが、本論文では、過学習による汎化能力の低下に対応するために、汎化能力も考慮した解の評価を行う。このために、学習用データを学習用と検証用に二分割し、学習誤差と検証誤差のうち大きいものを最小化することで、学習誤差が小さく汎化能力の高いニューラルネットワークの獲得を目指す。ただし、本論文で取り扱うような時系列データにおいて、ある時刻のデータはそれ以前のデータに依存していることが考えられるため、ある期を境界としてデータの分割を行うことがのぞましい。本論文では特定の区間のデータにのみ過剰に適合することを避けることと、計算量とのトレードオフを考慮してデータを3分割してこの操作を2回行う。図6に示されるように、学習用の時系列データ D を3分割したものを D_1, D_2, D_3 とする。ただし、学習用の時系列データの時間的範囲を

$[0, T]$ としたとき、事前に決めた期 T_1, T_2 を D_1, D_2, D_3 の境界とする。

図6 時系列データ D の分割

まず、解 A'' により与えられる構造を持つMCRNNを用いて、 D_1 で誤差逆伝播法により接続重みを学習し、 D_2 で検証を行う。 $0 \leq \tau_t \leq T_1 < \tau_v \leq T_2$ として学習誤差を e_1^t 、検証誤差を e_1^v とする。次に、 $D_1 \cup D_2$ で学習、 D_3 で検証を行い、 $0 \leq \tau_t \leq T_2 < \tau_v \leq T$ として、学習誤差を e_2^t 、検証誤差を e_2^v を計算する。ここで、対象データを o 次元の時系列データとしたとき、 t 期目における、 s 番目のデータのニューラルネットワークからの出力を $\psi_s(t)$ 、教師信号となる時系列データを $y_s(t)$ として、式(4)により誤差を計算する。

$$\left. \begin{aligned} e_i^t &= \sum_{\tau_t} \sum_{s=1}^o (\psi_s(\tau_t) - y_s(\tau_t))^2, & i=1,2, \\ e_i^v &= \sum_{\tau_v} \sum_{s=1}^o (\psi_s(\tau_v) - y_s(\tau_v))^2, & i=1,2. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

解 A'' はこれらの誤差を用いて、

$$E_v(A'') = \lambda \max(e_1^t, e_1^v) + (1-\lambda) \max(e_2^t, e_2^v), \quad \lambda \in [0, 0.5] \quad (5)$$

により評価する。本論文では $E_v(A'')$ を解 A'' に対応するMCRNNの加重誤差とよぶ。なお解 A'' は、対応するユニット数を持つMCRNNに対して、すべてのユニット間接続が存在するものとして、誤差逆伝播により接続重みを更新した後、加重誤差(5)によりMCRNNを評価する。これにより、学習誤差と検証誤差をどちらも小さくするような構造のMCRNNが高く評価される。このような個体評価の方法は、交差検定の応用であり、加重誤差(5)が高い個体は未知のデータに対する高い予測能力を持つことが期待される。

一定期間、上記タブー探索により加重誤差の最良値が更新されない、もしくは一定回数の探索が行われれば、MCRNNを構成するユニット数を確定し、次節に示す手順でユニット間接続の選択を行う。

3.2 ユニット間接続の選択

ニューラルネットワークを構成するユニット数が適切に決定されれば、学習精度および未知のデータに対する予測精度の両方が高くなると考えられる。さらに、ユニット間の接続の有無についても、適切に設定することができれば予測精度の向上が期待される。このため、本論文では、3.1節で述べた手順で、入力層ユニット数、中間層ユニット数、フィードバック層数が決定された後、構造最適化の第2段階として、タブー探索を用いてユニット間接続の選択を行う。

まず、探索の効率化のために重要性の低い接続を削除したものを初期解としてタブー探索を行う。3.1節で得られたMCRNNに対して、ユニット間の接続を1本削除し、加重誤差(5)が小さくなる場合、その接続は重要性の低い接続と判断して削除する[30]。これを接続の刈り取りといい、順番に接続の刈り取りを行ったものを初期解として、タブー探索を用いてユニット間の接続の選択を行う。

図7に示されるようなユニット間の接続に関する接続マスクにより特徴づけられる解を A_s^l とする。ただし、 A_s^l は s 回目の探索における解である。 A_s^l からハミング距離が1の解の集合から短期メモリに記録された解を除いたものを A_s^l の近傍集合 AN_s^l とする。

図7 コード化された接続マスク (解 A_s^l)

ただし、ユニット間接続の選択において接続を削除することは、接続重みを0にすることと同義である。有望な初期解を設定していることから、探索の効率化のために第2段階のタブー探索では短期メモリによる集中的な探索のみを行う。また、近傍解の評価は第1段階のタブー探索と同様に、加重誤差(5)により評価する。

3.3 構造最適化手法のアルゴリズム

2段階のタブー探索を用いたMCRNNのユニット数とユニット間の接続の決定に基づき、構造最適化を行う。提案手法のアルゴリズムの概要は以下のとおり。

Step 1. (初期化)初期解 $A_0^u = (n, h, b)$ をランダムに

生成し、 $A_{best}^u = A_0^u$ とする。 $g = 1$ として、Step 2に進む。

Step 2. (ユニット数の決定)

Step 2-1. 解 A_{g-1}^u の近傍集合 AN_{g-1}^u のうち加重誤差(5)が最も小さい解を、 A_g^u とする。

Step 2-2. $E_v(A_g^u) < E_v(A_{best}^u)$ が成り立つ場合、 $A_{best}^u = A_g^u$ として A_{best}^u を短期メモリに追加的に記録する。このとき、短期メモリに記録されている解の数が一定数以上の場合、最も古く記録された解を短期メモリから削除する。一定期間最良解の更新が行われず、あるいは一定回数の近傍探索が行われたら短期メモリを更新してStep 2-3へ。そうでなければ $g = g+1$ としてStep 2-1へ。

Step 2-3. 再初期化が一定回数行われる、あるいは一定期間最良解の更新がなければStep 3へ。そうでなければ、解の再初期化を実施する。すなわち、長期メモリから定義される式(3)を用いて現在の解とは異なる部分領域で新たな初期解を生成し、長期メモリを更新してStep 2-1へ。

Step 3. (ユニット間接続の選択)

Step 3-1. 現在の最良解 A_{best}^u に対応するMCRNNに含まれる接続のうち、削除することで加重誤差 E_v が小さくなる接続を削除したものを、接続選択の初期解 A_0^l とし、 $A_{best}^l = A_0^l$ とする。 $s = 1$ としてStep 3-2へ。

Step 3-2. A_{s-1}^l の近傍集合 AN_{s-1}^l のうち加重誤差(5)が最も小さいものを現在の解 A_s^l として、短期メモリを更新する。

Step 3-3. $E_v(A_s^l) < E_v(A_{best}^l)$ が成り立つ場合、 $A_{best}^l = A_s^l$ とする。

Step 3-4. Step 3-2, 3-3を一定回数繰り返したら、 A_{best}^l を解として終了する。そうでなければ $s = s+1$ としてStep 3-2へ。

提案手法では、Step 2でユニット数の決定、Step 3でユニット間の接続がそれぞれ行われる。

4. 数値実験

複数の時系列データのベンチマーク問題により提案手法の有効性を検証する。提案手法を適用する時系列データとして、太陽黒点数データ(SSD)[54]、レーザー生成データ(LGD)[16]、K.U.Leuvenデータ(KUL)[43]、Mackey-Glassカオス時系列データ(MGC)[33]、Box-Jenkins溶鉱炉データ(BJF)[55]、星の輝度データ(SLD)[56]、IMB株価データ(IBM)[56]、放射能測定装置温度データ(RAT)[56]の8種類を用いる。

本論文では、時系列データを学習用データと汎化能

力測定用データとして2分割し、8種類のベンチマーク問題に対してそれぞれ30試行ずつのシミュレーション実験を行う。すなわち、学習用データは提案手法において図6に示されるようにさらに3分割され、学習および検証用に用いられる。学習用データに対する誤差は、 $\lambda=0.4$ とした加重誤差(5)により評価するものとし、汎化能力測定用データに対する誤差の最小値、最大値、平均値によりニューラルネットワークの構造最適化手法の評価を行う。ただし、 T_g 期分の汎化能力測定用データに関する時刻 τ_g における誤差を $\sum_{s=1}^O (\psi_s(\tau_g) - y_s(\tau_g))^2$ としたとき、汎化能力測定用データに対する誤差は、 $\frac{1}{T_g} \sum \tau_g \sum_{s=1}^O (\psi_s(\tau_g) - y_s(\tau_g))^2$ によ

表1 時系列データの期数

	全期数	学習用 (期数)	汎化能力 測定用 (期数)
SSD	307	270	37
LGD	1600	1400	200
KUL	2000	1700	300
MGC	1200	1000	200
BJF	296	270	26
SLD	600	500	100
IBM	3332	3000	332
RAT	4324	3500	824

表2 実験結果

	SSD	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	100.96	125.26
	最大	184.75	297.41
	平均	139.53	211.36
Katagiri et al.	最小	103.26	158.39
	最大	144.33	257.97
	平均	124.45	213.43
Park	最小	110.29	150.00
	最大	171.72	259.56
	平均	135.86	213.82
	LGD	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	2.97	1.59
	最大	4.72	2.55
	平均	3.99	2.13
Katagiri et al.	最小	12.52	2.34
	最大	43.00	6.98
	平均	19.74	3.69
Park	最小	9.55	2.31
	最大	13.13	5.97
	平均	11.48	3.87
	KUL	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	0.000037	0.000049
	最大	0.000145	0.000120
	平均	0.000059	0.000077
Katagiri et al.	最小	0.000053	0.000053
	最大	0.000151	0.000123
	平均	0.000100	0.000081
Park	最小	0.000089	0.000183
	最大	0.000146	0.000293
	平均	0.000096	0.000223
	MGC	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	0.000000	0.000000
	最大	0.000001	0.000001
	平均	0.000001	0.000001
Katagiri et al.	最小	0.000032	0.000018
	最大	0.000237	0.000192
	平均	0.000080	0.000062
Park	最小	0.000059	0.000167
	最大	0.000104	0.000390
	平均	0.000078	0.000190

	BJF	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	0.0468	0.1802
	最大	0.0661	0.4515
	平均	0.0523	0.2872
Katagiri et al.	最小	0.0483	0.0147
	最大	0.0604	0.0698
	平均	0.0526	0.0379
Park	最小	0.0568	0.5854
	最大	0.0597	0.6790
	平均	0.0586	0.6448
	SLD	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	0.0169	0.0165
	最大	0.0630	0.1014
	平均	0.0387	0.0475
Katagiri et al.	最小	0.2322	0.2382
	最大	0.4007	0.3820
	平均	0.2654	0.2740
Park	最小	0.2147	0.2457
	最大	0.3132	0.3760
	平均	0.2428	0.2618
	IBM	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	2.585	1.529
	最大	2.630	1.991
	平均	2.602	1.658
Katagiri et al.	最小	2.522	1.523
	最大	2.604	1.928
	平均	2.557	1.690
Park	最小	2.809	1.641
	最大	2.973	1.851
	平均	2.906	1.718
	RAT	学習用	汎化能力測定用
提案手法	最小	0.1598	0.2045
	最大	0.2082	0.3021
	平均	0.1776	0.2331
Katagiri et al.	最小	0.1770	0.1270
	最大	0.1868	0.1355
	平均	0.1797	0.1308
Park	最小	0.1812	0.1700
	最大	0.1870	0.1849
	平均	0.1847	0.1773

り評価される。

なお、各種データを2つに分割し、前半を学習用データとして、後半を汎化能力検証用データとして用いる。3.1節で述べたように、加重誤差(5)を評価するために学習用データをさらに3分割する。ただし、Katagiri et al. および Park の構造最適化手法は、それぞれ拡張型 MCRNN, BLRNN を構造最適化を行うネットワークの対象として、本論文の提案手法はこれらのネットワークよりも単純な構造を持つ MCRNN を構造最適化を行う対象のネットワークとする。図2, 3, 5より、BLRNN, 拡張型 MCRNN は、過去のデータを入力する期数を $p = 0$ とすれば MCRNN と同様の構造となる。

各ベンチマーク問題の全期数、学習用データと検証用データの期数を表1に示す。

ニューラルネットワークを用いた8種類の時系列データ予測に対して、Katagiri et al. や、Park と本論文の提案手法を適用した結果を表2に示す。各項目について、3種類の手法で最も誤差が小さく予測精度の高い結果は太字で示される。ただし、本論文では各構造最適化手法の比較のために同一の計算機を用いて実験を行った。

ここで、本論文ではより高いパフォーマンスを持つ構造を発見することが重要であると考え、誤差の最小

値により3種類の手法を比較する。表2より、学習用データに対する誤差の最小値を見ると、IBM 以外で提案手法が最小となっており、誤差の平均値についても、SSD, IBM 以外で提案手法が最小となっている。また、SSD, IBM の学習用データに対する誤差は、従来手法とほぼ同程度となっている。さらに、汎化能力測定用データに対する誤差についても、BJF, IBM, RAT 以外で提案手法が最小となっており、IBM では従来手法とほぼ同等で、概ね従来手法に比べて提案手法は高い汎化能力を獲得できたことがわかる。したがって、時系列データの学習用データと汎化能力測定用データに対する予測誤差がともに小さいことから、提案手法の適用によってニューラルネットワークの予測精度が高くなるような構造を発見することに成功したといえる。特に、LGD では、提案手法は従来手法に比べて良好な結果を得ている。LGD は前半5%を除いて規則的な振動を繰り返すデータであり、このような規則性の高い時系列データに対して提案手法は、従来手法と比べて特に高い予測精度を得ることができた。

数値実験の結果に対して、有意水準を5%とした Wilcoxon の符号付順位検定を行った結果、誤差の最小値は学習用データおよび汎化能力測定用データの両方で提案手法と従来手法に有意に差があり、誤差の

表3 入力層、中間層ユニット数・フィードバック層数

		入力層ユニット数	中間層ユニット数	フィードバック層数
SSD	最小	1	2	0
	最大	7	10	5
	平均	5.6	4.0	1.8
LGD	最小	8	5	1
	最大	12	14	4
	平均	9.6	7.3	2.3
KUL	最小	1	1	0
	最大	2	31	8
	平均	2.0	6.9	1.7
MGC	最小	23	7	2
	最大	27	8	2
	平均	25.0	7.5	2.0
BJF	最小	4	3	0
	最大	6	12	0
	平均	4.1	6.3	0.0
SLD	最小	24	2	0
	最大	42	8	10
	平均	31.1	4.6	1.3
IBM	最小	1	2	0
	最大	2	11	0
	平均	1.0	6.5	0.0
RAT	最小	1	2	0
	最大	3	8	3
	平均	1.2	4.5	1.5

最大値および平均値については有意水準を10%としても有意に差があるとはいえないことが明らかとなった。前述のとおり、MCRNN は、拡張型 MCRNN や BLRNN の特殊な構造の1つでありネットワーク構造が単純であるにも関わらず、これらのネットワークに対する構造最適化手法[30, 36] と比べて、提案手法は複数回の試行における誤差の最小値については優れた結果が得られており、最大値や平均値などについては同等の結果が得られた。このことから、本論文で提案するタブー探索を用いたニューラルネットワークの構造最適化手法は、時系列データ予測のための有効な手法であるといえる。

表3に、提案手法により獲得した MCRNN の入力層ユニット数 n 、中間層ユニット数 h 、フィードバック層数 b の最小値、最大値、平均値を示す。

表3より、MGC や SLD は他の問題よりも入力層ユニット数が多い。これらのベンチマーク問題は他の問題に比べて周期性の高いデータであり、この結果からも、周期性の高い時系列データの予測には、過去のデータが多く必要であることがわかる。

一般に、ニューラルネットワークを構成するユニット数が大きくなると、学習誤差は小さくなるが検証誤差が大きくなる。しかし、表2, 3より、MGC や SLD では、ユニット数が多いにも関わらず、学習誤差と検証誤差はともに小さい。ニューラルネットワークの汎化能力を考慮した加重誤差(5)、および、時系列データ予測に必要な過去のデータの期間数である入力層ユニット数も含めた構造探索を行うことで、学習データのみならず未知の時系列データ予測に対する高い汎化能力を持つ、適切な構造のニューラルネットワークを獲得できたと考えられる。

5. おわりに

本論文では、タブー探索法を用いて MCRNN の入力層ユニット数、中間層ユニット数、フィードバック層数および、各ユニット間の接続を選択する構造最適化手法を提案した。従来研究における進化的計算手法を用いたニューラルネットワークの構造最適化は、遺伝的アルゴリズムに基づく手法が数多く提案されてきた。これに対して、本論文の提案手法は、高いパフォーマンスを持つニューラルネットワークに似た構造をタブー探索を用いて集中的に探索する手法である。MCRNN は、拡張型 MCRNN や BLRNN よりも単純な構造を持つが、複数の時系列データによる数値実験では、従来手法[30, 36] とほぼ同等、あるいはより優れた結果を得ることができた。

一方で、汎化能力が従来手法よりも若干低くなるよ

うな結果もあったため、そのようなデータを分析し、データの特性とニューラルネットワークの構造の関係を明らかにすることによる、手法の改善が今後の課題として考えられる。

参考文献

- [1] S. Agrawal, Y. Dahora, M.K. Tiwari and Y.-J. Son: Interactive particle swarm: A Pareto-adaptive metaheuristic to multiobjective optimization, *IEEE Stansaction, System, Man, and Cybernetics A: Systems and Humans* **38**, pp.258-277, 2008.
- [2] M. Arikan and S. Erol: A hybrid simulated annealing-tabu search algorithm for the part selection and machine loading problems in flexible manufacturing systems, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology* **59**, pp.669-679, 2012.
- [3] T. Back and M. Schutz: Intelligent mutation rate control in canonical genetic algorithms, *Proceedings of 9th International Symposium on Foundations of Intelligent Systems*, ser. LNAI, Z.W. Ras and M. Michalewicz (eds.), Berlin, 3, pp.158-167, 1996.
- [4] A. Blanco, M. Delgado and M.C. Pegalajar: Fuzzy grammatical inference using neural networks, *Mathware and Soft Computing* **5**, pp.133-140, 1998.
- [5] A. Blanco, M. Delgado and M.C. Pegalajar: Fuzzy automation induction using neural network, *International Journal of Approximate Reasoning* **27**, pp.1-26, 2001.
- [6] X. Cai, Z. Zhang, G. Venayagamoorthy and D. Wunsch: Time series prediction with recurrent neural networks using a hybrid PSOEA algorithm, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks & IEEE International Conference on Fuzzy Systems*, Budapest, Hungary, pp.1647-1652, 2004.
- [7] F.E. Cellier and A. Nebot: Multi-resolution time-series prediction using fuzzy inductive reasoning, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks & IEEE International Conference on Fuzzy Systems*, Budapest, Hungary, pp.1621-1624, 2004.
- [8] T.W.S. Chow and C.T. Leung: Neural network based short-term load forecasting using weather compensation, *IEEE Power & Energy Magazine* **11**, pp.1736-1742, 1996.
- [9] R. Cordone and G. Passeri: Solving the quadratic minimum spanning tree problem, *Applied Mathematics and Computation* **218** pp.11597-11612, 2012.
- [10] K. Deb, A. Pratap, S. Agrwal and T. Meyarivan: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II, *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **6**, pp.182-197, 2002.
- [11] M. Delgado, M.P. Cuellar, M.C. Pegalajar: Multiobjective hybrid optimization and training of recurrent neural networks, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics-Part B: Cybernetics* **38**, pp.381-403, 2008.
- [12] A. Duarte and R. Marti: Tabu search and GRASP for the maximum diversity problem, *European Journal*

- of Operational Research* **178**, pp.71–84, 2007.
- [13] J.L. Elman: Finding structure in time, *Cognitive Science* **14**, pp.179–211, 1999.
- [14] J. Fang and Y. Xi: Neural network design based on evolutionary programming, *Artificail Intelligent Engineering* **11**, pp.155–161, 1997.
- [15] M. Gendreau, G. Laporte and D. Vigo: Heuristics for the traveling salesman problem with pickup and delivery, *Computers & Operations Research* **26**, pp.699–714, 1999.
- [16] G. Gershenfeld and A. Weigend: The Santa Fe time series competition data,” 1991[online]. Available: <http://wwwpsych.stanford.edu/~andreas/Time-Series/SantaFe.html>.
- [17] F. Geyik and I.H. Cedimoglu: The strategies and parameters of tabu search for job-shop scheduling, *Journal of Intelligent Manufacturing* **15**, pp.439–448, 2004.
- [18] C. Giles, C. Miller, D. Chen, H. Chen, G. Sun and Y. Lee: Learning and extracting finite state automate with second order recurrent neural networks, *Neural Computation* **4**, pp.393–405, 1992.
- [19] F. Glover and M. Laguna: *Tabu Search*, Kluwer Academic Publishers, 1997.
- [20] B.Q. Huang, T. Rashid and M.-T. Kechadi: Multi-context recurrent neural network for time series applications, *International Journal of Information and Mathe-matical Sciences* **3**, pp.45–54, 2007.
- [21] F. Herrera, M. Lozano and J.L. Verdegay: Tackling real-coded genetic algorithms: Operators and tolls for behavioral analysis, *Artificial Intelligence Review* **12**, pp.265–319, 1998.
- [22] Y.F. Hung and W.-C. Chen: A heterogeneous cooperative parallel search of branch-and-bound method and tabu search algorithm, *Journal of Global Optimization* **51**, pp.133–148, 2011.
- [23] B.Q. Huang, T. Rashid and M.-T. Kechadi: Multi-context recurrent neural network for time-series application, *International Journal of Computational Intelligence* **3**, pp.45–54, 2006.
- [24] R. Hyndman: Time series data library, [online]. Available: <http://www.robjhyndman.com/TSDL/index.htm>.
- [25] M.I. Jorda: Attractor dynamics and parallelism in a connectionist sequential machine, *Proceedings of the 8th Annual Conference of the Cognitive Science Society*, pp.531–546, N.J. Hillsdale: Lawrence Erlbaum Associates, 1986.
- [26] J.-S.R. Jang: IEEE neural networks council standards committee,[online]. Available: <http://neural.cs.nthu.edu.tw/jang/benchmark/>.
- [27] M.A. Kaboudan: Genetic programming prediction of stock prices, *Computational Economics* **16**, pp.207–236, 2000.
- [28] A. Kasperski, M. Makuchowski and P. Zielinski: A tabu search algorithm for the minmax regret minimum spanning tree problem with interval data, *Journal of Heuristics* **18**, pp.593–625, 2012.
- [29] H. Katagiri, T. Hayashida, I. Nishizaki and Q.Q. Guo: A hybrid algorithm based on tabu search and ant colony optimization for k-minimum spanning tree problems, *Expert Systems with Applications* **39**, pp.5681–5686, 2012.
- [30] H. Katagiri, I. Nishizaki, T. Hayashida and T. Kadoma: Multiobjective evolutionary optimization of training and topology of recurrent neural networks for time-series prediction, *The Computer Journal* **55**, pp.325–336, 2012.
- [31] J. Kluabwang, D. Puangdownreong and S. Sujitjorn: Multipath Adaptive Tabu Search for a Vehicle Control Problem, *Journal of Applied Mathematics*, doi: 10.1155/2012/731623 [online], 2012.
- [32] Y.-S Lee and L.-I. Tong: Forecasting energy consumption using a grey model improved by incorporating genetic programming, *Energy Conversion and Management* **52**, pp.147–152, 2011
- [33] M.C. Mackey and L. Glass: Oscillation and chaos in physiological control systems, *Science* **197**, pp.287–289, 1977.
- [34] G. Mani: Learning by gradient descent in function space, in *Proceedings of IEEE International Conference, System, Man, and Cybernetics*, Los Angeles, CA, pp.242–247, 1990.
- [35] 大倉, 岩波: 進化型人工神経回路網の構造進化のための一手法—二十倒立振り子問題への適用—, システム制御情報学会論文誌 **19**, pp.51–58, 2006.
- [36] D.-C. Park: Structure optimization of BiLinear recurrent neural networks and its application to ethernet network traffic prediction, *Information Science*, doi: 10.1016/j.ins.2009.10.005, 2009.
- [37] D.V. Prokhorov, E.W. Saad and D.C. Wunsch: Comparative study of stock trend prediction using time delay, recurrent and probabilistic neural networks, *IEEE Transaction of Neural Networks* **9**, pp.1456–1470, 1998.
- [38] A. Rajavelu, M.T. Musavi and M.V. Shirvaikar: A neural network approach to character recognition, *Neural Networks* **2**, pp.387–393, 1989.
- [39] S. Sarkka, A. Vehtari and J. Lampinen: Competitive study of stock trend prediction using time delay recurrent and probabilistic neural networks, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks & IEEE International Conference on Fuzzy Systems*, Budapest, Hungary, pp.1615–1619, 2004.
- [40] K. Stanley and R. Miikkulainen: Evolving neural networks through augmenting topologies, *Evolutionary Computation* **10**, pp.99–127, 2002.
- [41] K. Stanley and R. Miikkulainen: Efficient reinforcement learning through evolving neural network topologies, *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-2002)*, Morgan Kaufmann, 2002.
- [42] M.H. Sun: A tabu search heuristic procedure for the capacitated facility location problem, *Journal of Heuristics* **18**, pp.91–118, 2012.
- [43] J. Suykens: International workshop on advanced balck-box techniques for nonlinear modeling: theory and apploications, 1998 [online].

- Available: <http://www.esat.kuleuven.ac.be/sista/workshop/index.html>.
- [44] B. de Vries and J.C. Principe: A theory for neural networks with time delays, *Proceedings of the 1990 Conference on Advance in Neural Information Processing Systems* **3**, San Francisco, CA, USA, pp.162-168, 1990.
 - [45] D. Whitley, T. Starkweather and C. Bogard: Genetic algorithms and neural networks: Optimizing connections and connectivity, *Parallel Computation* **14**, pp.347-361, 1990.
 - [46] J.D. Wichard and M. Ogorzalek: Time series prediction with ensemble models, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks & IEEE International Conference on Fuzzy Systems*, Budapest, Hungary, pp.1625-1630, 2004.
 - [47] A. Wright: Genetic algorithms for real parameter optimization, *Foundations of Genetic Algorithms: Proceedings of the First Workshop on the Foundations of Genetic Algorithms and Classifier Systems*, G.J.E. Rawlin (Ed.), Morgan Kaufmann, Los Altos, CA, pp.205-218, 1990.
 - [48] X. Yao: Evolving Artificial Neural Networks, *Proceedings of the IEEE* **87**, pp.1423-1447, 1999.
 - [49] X. Yao and Y. Liu: A new evolutionary system for evolving artificial neural networks, *IEEE Transactions on Neural Networks* **8**, pp.694-713, 1997.
 - [50] A. Zeng, R. Goodman and P. Smyth: Discrete recurrent neural networks for grammatical inference, *IEEE Transactions on Neural Networks* **5**, pp.320-330, 2008.
 - [51] E. Zitzler and L. Thiele: Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength Pareto approach, *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **3**, pp.257-271, 1999.
 - [52] 進化技術ハンドブック基礎編, 電気学会進化技術応用調査専門委員会 (編), 近代科学社, 2010.
 - [53] J. Choi, K. Ko and I. Hong: Equalization techniques using a simplified bilinear recursive polynomial perceptron with decision feedback, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks*, [online] doi:10.1109/IJCNN.2001.938834, 2001.
 - [54] NOAA satellite and information service, [online]. Available: <http://www.ngdc.noaa.gov/ngdc.html>.
 - [55] Gas Furnace Data, [online]. Available: <http://www.austinncc.edu/gcepparo/Series J.htm>.
 - [56] Time Series Data Library, [online]. Available: <http://robjhyndman.com/TSDL/>.
(2014年5月28日 受付)
(2015年4月22日 採録)

[問い合わせ先]

〒739-8527 東広島市鏡山1-4-1
 広島大学大学院工学研究院電気電子システム数理部門
 林田 智弘
 TEL : 082-424-5267
 FAX : 082-422-7195
 E-mail : hayashida@hiroshima-u.ac.jp

著者紹介

はやしだ ともひろ
林田 智弘 [正会員]

2004年広島大学工学部卒業，2006年同大学院工学研究科博士課程前期修了，同年広島大学大学院工学研究科助手，2007年助教，2015年准教授となり，現在に至る．博士(工学)．意思決定およびマルチエージェントシステムに関する研究に従事．

にしざき いちろう
西崎 一郎 [正会員]

1982年神戸大学工学部卒業，1984年同大学院工学研究科修士課程修了，同年新日本製鐵株式会社入社，1990年京都大学経済研究所助手，1993年摂南大学経営情報学部助教授，1997年広島大学工学部助教授を経て，2002年同大学大学院工学研究科教授となり，現在に至る．博士(工学)．意思決定およびゲーム理論に関する研究に従事．

すゑむね あきえ
末宗 明恵 [非会員]

2010年 岡山県立大学情報工学部卒業，同年広島大大学院工学研究科博士課程前期システムサイバネティクス専攻入学．機械学習手法の開発に関する研究に従事．

Structural Optimization of Recurrent Neural Networks Using Tabu Search

by

Tomohiro HAYASHIDA, Ichiro NISHIZAKI and Akie SUEMUNE

Abstract :

A recurrent neural network which its structure and link weights between units are appropriately determined has the ability to adequately predict for time-series data. It is difficult to find an optimal structure of the recurrent neural network minimizing both of the training and the generalization errors. In this paper, we propose an optimization method for structural design of neural networks for time-series data by employing tabu search with efficient neighborhood search. To demonstrate the efficiency and effectiveness of the proposed method, we apply our method to several benchmark problems of time-series data and it delivers superior or equal performance to other existing structural optimization methods.

Keywords : Recurrent neural network, structural optimization, tabu search, time-series prediction, evolutionary algorithm

Contact Address : **Tomohiro HAYASHIDA**

Tomohiro Hayashida, Department of System Cybernetics, Graduate School of Engineering, Hiroshima University

1-4-1, Kagamiyama, Higashihiroshima, Hiroshima, 739-8527, Japan

TEL : +81-82(424) 5267

FAX : +81-82(422) 7195

E-mail : hayashida@hiroshima-u.ac.jp