

結合コスト最小化によるエコーステートネットワークの 破滅的忘却の回避

Avoiding catastrophic forgetting in echo state networks by minimizing the connection cost

河合 祐司^{*1}

Yuji Kawai

小笹 悠歩^{*2}

Yuhō Ozasa

朴 志勲^{*1}

Jihoon Park

浅田 稔^{*1}

Minoru Asada

^{*1}大阪大学先導的学際研究機構

Institute for Open and Transdisciplinary Research Initiatives, Osaka University

^{*2}大阪大学工学部

School of Engineering, Osaka University

Catastrophic forgetting is one of big issues in multi-task learning with neural networks. We propose that minimization of the connection cost mitigates catastrophic forgetting in echo state networks. The optimization of connections in reservoirs can yield neural modules (local sub-networks) that differentiate information flow depending on tasks. The task-specific neural activities help to consolidate knowledges of the tasks. We showed that this constraint creates neural modules consisting of negative connections and can improved the performance of multi-task learning. Furthermore, we analyzed the transfer entropy of inter- and intra-modules to show task-specific functional differentiation of the modules.

1. はじめに

ヒトをはじめとした生物は、新しい環境や様々なタスクへ即時的に適応し、生涯を通じて学習し続ける。ヒトの神経ネットワークは異なる機能を有するモジュール構造（部分ネットワーク）を成し、そのモジュールが動的に切り替わることによって、柔軟な認知活動が実現されていると考えられている [Meunier 09]。そのようなヒトの柔軟で適応的な学習のメカニズムの理解は、汎用的な人工ニューラルネットワークの設計において有用となろう。

逐次的に与えられるデータをオンライン学習する枠組みは、人工ニューラルネットワーク分野においても継続学習 (continual learning) として近年注目を集めている [Parisi 18]。しかし、複数タスクの継続学習には、破滅的忘却 (catastrophic forgetting) の問題がある [McCloskey 89]。これは、新しいタスクの学習によって、過去に学習したタスクの情報が上書きされ、複数のタスクの学習を両立できないという問題である。

この破滅的忘却の回避のために、ニューラルネットワークにモジュール構造を取り入れることが提案されている [Bongard 11, Ellefsen 15]。これらの研究に共通するアイデアは、複数のモジュールがそれぞれ異なるタスクに対応するように活動することで、タスク情報の上書きを防ぐことである。また、ネットワークの結合コストの最小化によって、モジュール構造が生み出されることが報告されている [Clune 13]。例えば、脳における結合コストは、軸索長やシナプス強度に相当する。これにより長距離の結合が嫌われ、局所的で密なネットワークとしてのモジュールが現れる。このことを利用して、Ellefsen et al. (2015) は、フィードフォワード型のニューラルネットワークの結合コストを遺伝的アルゴリズムによって最小化することによって、ネットワークにモジュール（タスクにより異なる処理経路）が現れ、複数タスクの継続学習が可能になることを示した。しかし、このモデルはフィードフォワード型であり、静的な情報の流れのみを扱っている。実際の脳においては、リカレント構造による動的な情報の流れの中で、モジュールの切り替えがなされていると考えられる。また、彼らはタスクとモジュールの対応を定量的に評価していない。

そこで本研究は、リカレントニューラルネットワークの一種であるエコーステートネットワーク (echo state network: ESN) に結合コスト最小化を導入するモデルを提案し、それが複数の時系列タスクにおける継続学習の破滅的忘却を回避できることを示す。一般的な ESN はランダム結合のリザーバーネットワークに入力が与えられ、リザーバーから出力への結合重みのみが誤差によって修正される。本モデルでは、リザーバーネットワークの結合を、学習性能最大化と結合コスト最小化を目的関数とした遺伝的アルゴリズムによって最適化する。その結果、リザーバー内にモジュールが現れ、タスクに応じてモジュール内とモジュール間の情報の流れが変化することで、出力重みの学習における破滅的忘却が回避されることが期待される。また、最適化されたリザーバーノード間の移動エントロピーを計算し、タスクごとの情報の流れを解析することで、モジュールの機能分化を明らかにする。

2. モデル概要

2.1 エコーステートネットワークの継続学習

図 1 に提案モデルの概要を示す。以降では簡単のため、入出力が一次元である場合について説明する。時刻 t において、 N 個のリザーバーノードが入力 $u(t)$ をベクトル $\mathbf{W}_{in}$ で重み付けられて受け取る。そして、リザーバーノードの状態 $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t))^T$ は次式により更新される。

$$\mathbf{x}(t+1) = f(\mathbf{W}_{in}u(t+1) + \mathbf{W}\mathbf{x}(t) + \mathbf{W}_{fb}y(t)) \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{W}$ は $N \times N$ のサイズのリザーバー重み行列、 $\mathbf{W}_{in}$ は入力重みベクトル、 $\mathbf{W}_{fb}$ は出力 $y(t)$ のフィードバック重みベクトルであり、これらの重みは学習を通して不変である。今回、関数 f として、ハイパボリックタンジェントを用いた。 $\mathbf{W}$ は行列 $\mathbf{W}_0$ を次式で正規化することで得られる。

$$\mathbf{W} = \alpha \frac{\mathbf{W}_0}{\rho(\mathbf{W}_0)} \quad (2)$$

ここで、 $\rho(\mathbf{W}_0)$ は $\mathbf{W}_0$ の固有値の絶対値の最大値（スペクトル半径）であり、 α は正規化定数である。Ellefsen et al. (2015) のモデルでは、タスクによって入力ノードが異なっていたが、本モデルでは、タスクが異なっても同じノードに入力が与えら

連絡先: 河合祐司, 大阪大学先導的学際研究機構, 〒565-0871
大阪府吹田市山田丘 2-1, kawai@ams.eng.osaka-u.ac.jp

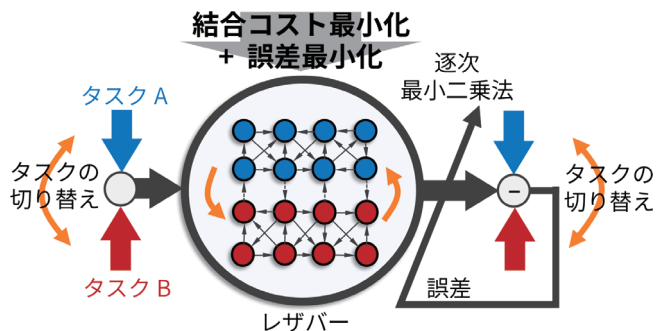


図 1: 提案モデルの概要図。一定時間経つとタスクが別のタスクに切り替わる状況におけるエコー状態ネットワークの継続学習の問題を扱う。結合コスト最小化と誤差最小化を目的関数とする遺伝的最適化により、リザーバーネットワークにモジュール性が現れ、タスクの切り替えに応じてそのモジュールの活動も切り替わることで、複数のタスクの学習が可能になる。

れる。明なタスク切り替え情報が与えられなくても、タスク間の入出力の性質の違いから、リザーバーの活動ダイナミクスが変化することが期待される。

時刻 t において、出力 $y(t)$ を次式により得る。

$$y(t) = \mathbf{W}_{\text{out}}(t)\mathbf{x}(t) \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{W}_{\text{out}}(t)$ は出力重みベクトルである。一般には、この出力重みを線形回帰のバッチ学習により求めるが、今回は、次に説明する逐次最小二乗法の継続学習により求める。

時刻 t における出力重みは次式により更新される。

$$\mathbf{W}_{\text{out}}(t+1) = \mathbf{W}_{\text{out}}(t) + \Delta\mathbf{W}(t) \quad (4)$$

$$\Delta\mathbf{W}(t) = \mathbf{R}(t)\mathbf{x}(t)e(t) \quad (5)$$

ここで、誤差 $e(t)$ は ESN の出力 $y(t)$ と教師信号 $y_d(t)$ の差

$$e(t) = y(t) - y_d(t) \quad (6)$$

である。 $\mathbf{R}(t)$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{R}(t) = \frac{1}{\mu} \left[\mathbf{R}(t-1) - \frac{\mathbf{R}(t-1)\mathbf{x}(t)\mathbf{x}^\top(t)\mathbf{R}(t-1)}{\mu + \mathbf{x}(t)\mathbf{R}(t-1)\mathbf{x}^\top(t)} \right] \quad (7)$$

ここで、 μ は忘却係数とよばれるパラメータである。 $\mathbf{R}(t)$ の初期値は $\mathbf{R}(0) = (1/\delta)\mathbf{I}$ で与えられ、 $\mathbf{I}$ は単位行列、 δ は非常に小さい定数である。

2.2 遺伝的アルゴリズムによるリザーバー重みの最適化

一般の ESN では、 $\mathbf{W}_0$ をランダムに決定するが、本モデルでは、 $\mathbf{W}_0$ の個々の要素を遺伝子とする遺伝アルゴリズムにより最適化する。その目的関数には、学習性能の最大化（誤差の最小化）だけでなく、結合コストの最小化も含める。結合コストを定義するために、リザーバーノードを平面格子状に配置する。二つのノード間の結合コストをその間のユークリッド距離と重みの絶対値の乗算で表し、全体の結合コストを、全てのノードの組み合わせについての結合コストの総和で定義する。この目的関数により、空間的に遠い結合を持つ ESN は淘汰されやすくなるため、近傍の密な結合で構成されたモジュールが創発することが期待される。今回、多目的の遺伝的アルゴリズムとして

代表的な、非優越ソート遺伝的アルゴリズム (non-dominated sorting genetic algorithm II: NSGA-II) [Deb 02] を用いる。遺伝的最適化と継続学習の処理の流れを以下に記す。

1. 初期世代として、異なる初期重みを持つ ESN を X 個構成する。
2. 複数のタスクが切り替わる状況での継続学習により、各 ESN が $\mathbf{W}_{\text{out}}$ を更新する。
3. 2. での誤差の最小化と結合コストの最小化を目的関数とする NSGA-II により、 $\mathbf{W}_0$ の異なる次世代の ESN が構成される。
4. 次の世代に移り、2. と 3. を Y 回繰り返す。

3. 実験

3.1 実験設定

今回、リザーバーノード数 N を 36 に設定し、 6×6 の平面格子状に配置した。 $\mathbf{W}_{\text{in}}$, $\mathbf{W}_{\text{fb}}$, $\mathbf{W}_{\text{out}}$ の学習初期値、および、 $\mathbf{W}_0$ の進化初期値は $[-1, 1]$ の一様乱数にした。 $\mathbf{W}$ を得るためのパラメータ α は 1.0 に設定した。

以下の性質の異なる二つのタスクを用いた。

- 正弦波の短期予測：正弦波を入力とし ($u(t) = \sin(\frac{\pi t}{10})$)、1 時刻後の入力を教師信号とする ($y_d(t) = u(t+1)$)。
- 3 ビットパリティチェック：0 か 1 のランダム入力に対して、現在と直近の過去二つの入力において、1 が偶数個あれば教師信号は 0、奇数個あれば 1 とする。

どちらのタスクも入出力は一次元である。16 ステップごとにタスクを入れ替え、480 ステップまで逐次最小二乗法による継続学習を行った。逐次最小二乗法の忘却係数 μ は 0.7 にし、初期設定に用いる δ は 0.1 に設定した。

NSGA-II において、一世代の個体数 X を 500、最大世代数 Y を 1000 に設定した。また、交叉率は 80% とし、80% の確率で一世代内に 1 個体の突然変異が起きるようにした。学習性能を 161 ステップから 480 ステップまでの平均二乗誤差で定義し、その最小化を NSGA-II の一つの目的関数とした。結合コストの最小化を目的関数に含めることの効果を明らかにするために、誤差最小化のみを目的関数とする比較条件を設けた。

リザーバーネットワークにモジュールが創発し、そのモジュールがタスクに応じて異なる機能を有していることを明らかにするために、進化最適化後のリザーバーネットワークの結合のモジュール性と神経活動の情報の流れを評価した。ネットワーク結合のモジュール性の評価には、Newman のモジュラリティ [Newman 06] を用いた。これはモジュール内ノード間の結合の割合から、結合がランダムにされた場合での結合の割合を減じた値である。この値が最も大きくなるモジュール数とノードへのモジュールの割り当てを採用する。神経活動の情報の流れの評価には、移動エントロピー [Schreiber 00] を用いた。今回、あるノードの 1 時刻分の活動から、1 時刻後の別のノードの活動への移動エントロピーを求めた。学習後の 10,000 データ点に対して、全てのノード間の移動エントロピーを計算し、モジュール間の平均移動エントロピーとモジュール内の平均移動エントロピーを求めた。さらに、タスク期間ごとに平均移動エントロピーを計算することで、タスク依存的な情報の流れを可視化した。

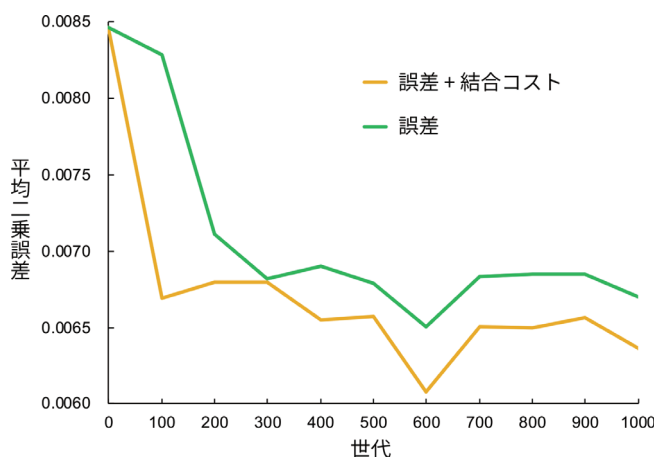


図 2: 各世代内で最小の平均二乗誤差。

3.2 実験結果

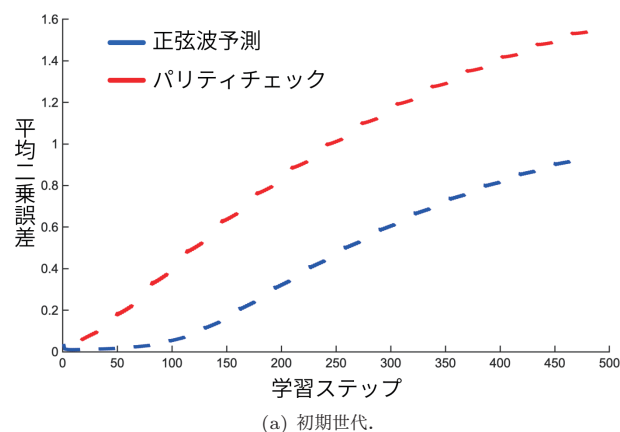
図 2 に、100 世代ごとの各世代における最小の平均二乗誤差を示す。黄色と緑の線がそれぞれ、誤差と結合コストの最小化、誤差のみの最小化の条件での結果である。この図から、結合コストを目的関数に含めることで、学習性能が向上していることがわかる。図 3 に結合コストを目的関数に入れた場合での (a) 初期世代と (b) 最終世代の学習曲線の例を示す。初期のランダムネットワークでは、タスクが切り替わるごとに再学習を繰り返していることがわかる。一方で、最終世代では、タスクが切り替わっても誤差が増大せず、破滅的忘却を回避している。

図 4 に、100 世代ごとのモジュラリティの値の推移を示す。正の結合と負の結合によりネットワークを分けて、それぞれのモジュラリティを解析した。図 4 中の実線から、結合コストを目的関数に含めることで、負の結合ネットワークのモジュラリティが増加したことがわかる。誤差のみを目的関数とした場合であってもモジュラリティの増加は認められるが、結合コストを含めた場合のものよりは大きくはない。一方、図 4 の正の結合のネットワーク（破線）ではどちらの場合であっても、モジュラリティの増加はほとんどなく、ランダム結合のモジュラリティと同等であることがわかる。

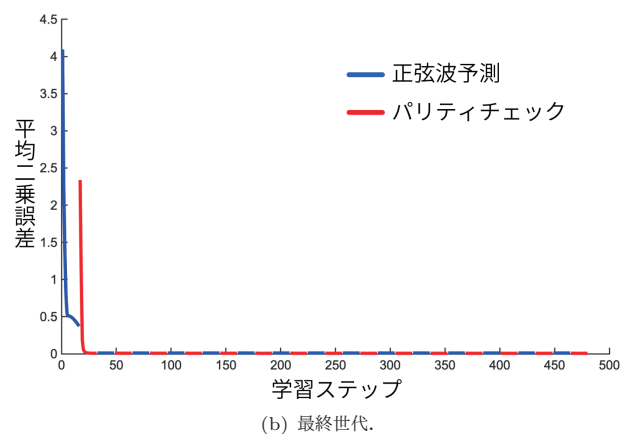
上記のモジュラリティの解析から、最終世代の正負の結合ネットワークのそれぞれにおいて、3 つのモジュールがあることがわかった。それらをモジュール A, B, C とよび、タスクごとのモジュール間とモジュール内の平均移動エントロピーを図 5 に示す（ただし、負の結合ネットワークのモジュールと正の結合ネットワークのモジュールは対応しない）。正弦波予測のときには、移動エントロピーの値が全体的に小さい。しかし、負のモジュール C から A への移動エントロピーが大きく、正のモジュール B への移動エントロピーが比較的大きいことがわかる。一方で、パリティチェックのときには、負のモジュール C 内の移動エントロピーが大きく、また、正のモジュール A と B での移動エントロピーが大きい。このように、タスクに応じて異なる情報の流れが発生し、モジュールごとに異なる情報処理がなされている可能性が示された。

4. 議論と結論

本研究では、ESN のリザーバーに結合コスト最適化を導入することで、リザーバーネットワークにモジュールが現れ、継続学



(a) 初期世代。



(b) 最終世代。

図 3: 学習曲線の例。16 ステップごとにタスクが切り替わる。青：正弦波予測タスク、赤：パリティチェックタスク。

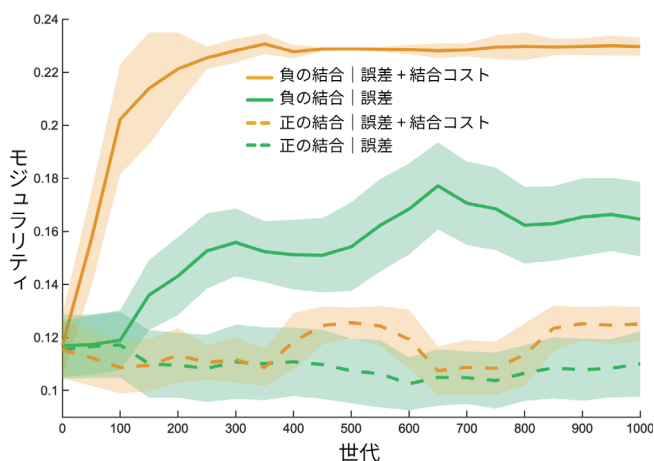


図 4: リザーバーネットワークのモジュラリティ。結合の正負で分けてモジュラリティを求めた。実線と破線はそれぞれ、負と正の結合が作るネットワークのモジュラリティである。塗りつぶし範囲は、その世代における個体間の標準偏差を表す。

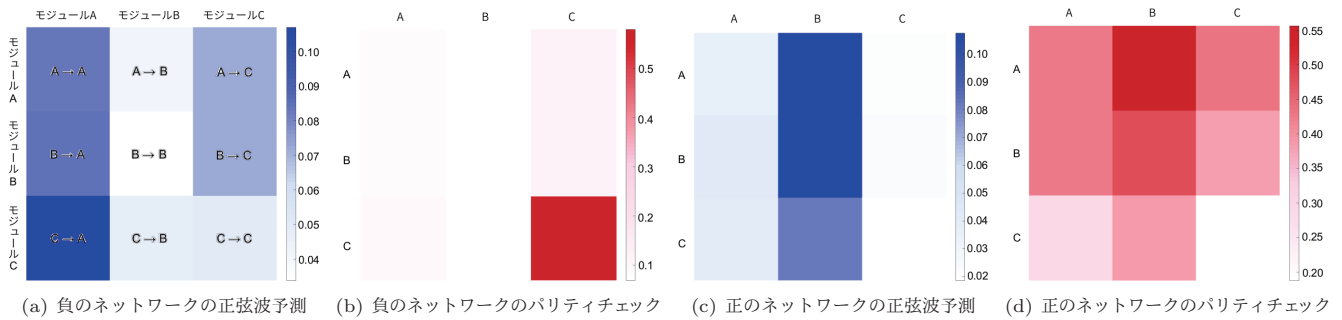


図 5: モジュール間とモジュール内の平均移動エントロピー. それぞれ 3 つのモジュールがあり, 行のモジュールから列のモジュールへの平均移動エントロピーの大きさを色の濃さで表している. 青: 正弦波予測タスク, 赤: パリティチェックタスク.

習における破滅的忘却が回避されることを示した. 直感的には, 結合コストによるネットワークの拘束は学習性能の改善に直接的には寄与せず, むしろ悪化を招く可能性も考えられる. にもかかわらず, 複数タスクの学習において, 結合コスト最小化を目的関数に含めることで学習性能の向上がみられたことは興味深い (図 2). また, モジュール内とモジュール間の平均移動エントロピーの解析から, モジュールがタスクに応じて異なる情報の流れを作ることを明らかにした (図 5). これによって, 複数のタスクの学習が干渉することなく継続学習を可能にしたと考えられる.

モジュラリティの解析から, 正 (興奮性) の結合はモジュール性を持たず, 負 (抑制性) の結合はモジュラーネットワークであることを発見した (図 4). それぞれのネットワークのはたらきを推測する. まず, 興奮性のネットワークはおそらくランダムネットワークであり, 複雑な神経活動を生成する役割があると考えられる. ランダム結合のリザーバーの活動が多様なダイナミクスを含むことによって, ESN は様々な時系列課題の課題が可能になるとされる [Bertschinger 04]. そのため, 一般的な学習性能の向上のために結合のランダム性が必要になる. 一方, 抑制性のモジュラーネットワークは, タスク特有のダイナミクスを生成する役割があると考えられる. ヒトの脳におけるモジュールの切り替えにおいても, 不要なモジュールの活動が抑制されていることが報告されている [Fox 05]. 本研究の結果は, ネットワークの活動が複雑であり, かつ構造を有することが, 継続学習において重要であることを示唆する. このことは, 複数タスク学習におけるニューラルネットワークの構成論だけでなく, 柔軟で適応的な脳のメカニズムの理解につながると期待される. 本モデルの他のタスクへの適用や, 抑制性のモジュラーネットワークの機能のさらなる調査と体系化が今後の課題である.

謝辞

本研究は, JST, CREST, JPMJCR17A4 の支援を受けたものである.

参考文献

[Bertschinger 04] Bertschinger, N. and Natschläger, T.: Real-time computation at the edge of chaos in recurrent neural networks, *Neural Comput.*, Vol. 16, No. 7, pp. 1413–1436 (2004)

[Bongard 11] Bongard, J. C.: Spontaneous evolution of structural modularity in robot neural network controllers, in *Proc. of the 13th GECCO*, pp. 251–258 (2011)

[Clune 13] Clune, J., Mouret, J.-B., and Lipson, H.: The evolutionary origins of modularity, *Proc. R. Soc. B*, Vol. 280, No. 1755, 20122863 (2013)

[Deb 02] Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., and Meyarivan, T.: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II, *IEEE Trans. Evol. Comput.*, Vol. 6, No. 2, pp. 182–197 (2002)

[Ellefsen 15] Ellefsen, K. O., Mouret, J.-B., and Clune, J.: Neural modularity helps organisms evolve to learn new skills without forgetting old skills, *PLoS Comput. Biol.*, Vol. 11, No. 4, e1004128 (2015)

[Fox 05] Fox, M. D., Snyder, A. Z., Vincent, J. L., Corbetta, M., Van Essen, D. C., and Raichle, M. E.: The human brain is intrinsically organized into dynamic, anticorrelated functional networks, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, Vol. 102, No. 27, pp. 9673–9678 (2005)

[McCloskey 89] McCloskey, M. and Cohen, N. J.: Catastrophic interference in connectionist networks: The sequential learning problem, *Psychol. of Learn. Motiv.*, Vol. 24, pp. 109–165 (1989)

[Meunier 09] Meunier, D., Lambiotte, R., Fornito, A., Ersche, K., and Bullmore, E. T.: Hierarchical modularity in human brain functional networks, *Front. in Neuroinform.*, Vol. 3, No. 37 (2009)

[Newman 06] Newman, M. E. J.: Modularity and community structure in networks, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, Vol. 103, No. 23, pp. 8577–8582 (2006)

[Parisi 18] Parisi, G. I., Kemker, R., Part, J. L., Kanan, C., and Wermter, S.: Continual lifelong learning with neural networks: a review, *arXiv:1802.07569* (2018)

[Schreiber 00] Schreiber, T.: Measuring information transfer, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 85, No. 2, pp. 461–464 (2000)