

振幅と周期が時間とともに変化する時系列データの ニューラルネットワークによる予測

小野寺 光永[†] 長嶋 雲兵[†] 吉田 裕亮[†]
青山 智夫^{††} 細矢 治夫[†]

生体の断層イメージを測定する核磁気共鳴のシグナルや Belousov-Zhabotinsky 反応 (BZ) などの振動反応の酸化還元ポテンシャルは、振幅と周期が時間とともに変化していく時系列データである。しかし、従来の統計的手法では振幅変化及び周期変化を同時に追うことは困難であり、その予測は難しかった。そこで本研究では、時間とともに振幅と周期が同時に変化する時系列データの予測を行うために、ニューラルネットワークからなるモデルを構築した。

本モデルを用いて4種類のモデル関数による数値実験を行い、最小自乗法を用いた際の結果と比較したところ、学習区間においては最小自乗法の方が精度が高い傾向にあるが、予測区間においては本モデルの方が精度が高いことがわかった。特に振幅変化の予測では本モデルの方が高い精度を得ることができたことがわかった。

Neural network reproduction of time series data with varying amplitudes and frequencies

MITSUE ONODERA,[†] UMPEI NAGASHIMA,[†] HIROAKI YOSHIDA,[†]
TOMOO AOYAMA^{††} and HARUO HOSOYA[†]

An artificial neural network simulation was applied to the recognition and reproduction of time series data whose amplitudes and frequencies simultaneously change with time. The model is composed of two neural networks respectively predicting the change of amplitudes and frequencies. The results of our model were compared with those of trained by the least squares method using four kinds of model functions. Our model gives higher quality results than the least squares method especially in the prediction of amplitude change.

1. はじめに

生体の断層イメージを測定する核磁気共鳴 (NMR) のシグナルや Belousov-Zhabotinsky 反応 (BZ) などの振動反応の酸化還元ポテンシャルは、振幅と周期が時間とともに変化していく時系列データである。このような時系列データは、化学や物理の分野において多く見ることができ、その予測が必要とされることが多い。

従来、時系列データの周波数解析は、統計的モデル、ニューラルネットワーク (NN) モデル等により行われてきた。自己回帰モデル¹⁾ などの統計的モデルを用いた時系列解析の応用の例は、自然現象のみならず、人口動

態、交通、経済等様々な分野に広がっている²⁾³⁾。これらの解析の多くは、各周期の最大振幅と周期の両方が同時に時間とともに変化しないモデルを使っているが、最近統計的モデルを用いて、振幅や周期が同時に変化する時系列データに対する解析も行われるようになってきた⁴⁾⁵⁾。NMR や BZ 反応のシグナルは、multiple nonstationary frequencies で表されることが知られているが、その近似関数についても調べられている⁶⁾⁷⁾。しかし、従来の統計的モデルを用いて精度の良い近似関数を得るためには、多くの試行錯誤を必要とする。

ニューラルネットワークモデルは、脳における神経細胞の信号伝達系をモデルとした情報処理手法であり、パターン認識、最適化問題など、様々な分野に応用されている⁸⁾。ニューラルネットワークモデルによる時系列現象の解析は、主に株価予測などの経済的な分野で使われている。これまでに、ニューラルネットワークモデルを用いて周期が時間とともに変化しない周期関数の

[†] お茶の水女子大学情報科学科

Department of Information Sciences, Ochanomizu University

^{††} 宮崎大学工学部電気電子工学科

Department of Electrical and Electronic Engineering, Miyazaki University

予測は、精度良く行うことができることが知られていたが⁹⁾、最近、青山らにより、振幅は一定だが周期が変化する時系列データが再現可能であることが報告された¹⁰⁾¹¹⁾。

ところが、NMRのシグナルのような振幅と周期が同時に時間とともに変化する時系列データの予測は、統計的モデル、ニューラルネットワークモデルどちらにおいてもほとんど行われてこなかった。そこで本研究では、ニューラルネットワークによる解析モデルを構築し、振幅と周期が時間とともに変化する時系列データの予測に関してその有効性を調べた。

2. モデル

本モデルでは、時間とともに振幅、周期とも変化する時系列データを表す関数 $F(t_i)$ が、振幅変化を表す関数 $g(t_i)$ と、周期が関数 $h(t_i)$ で変化する周期関数 $\sin(h(t_i))$ の積として式1のように表されると仮定する。

$$F(t_i) = g(t_i) \times \sin(h(t_i)) \quad (1)$$

この仮定の下で、次の処理過程に従いデータ ($F(t_i)$) の予測を行う。(1) 振幅変化を表す関数値 $g(t_i)$ を得る NN を構築し、振幅変化の学習と予測を行う。(2) 周期変化を表す関数値 $h(t_i)$ を得る NN を構築し、周期変化の学習と予測を行う。(3) (1), (2) の結果に1式の関係を用い、求める結果 ($F(t_i)$) を得る。

全体の処理のモデルを Fig.1 に示す。ただし出力層の \times はかけ算を行うことを表し、 w_1, w_2, v_1, v_2 はそれぞれネットワークの重みを表す。

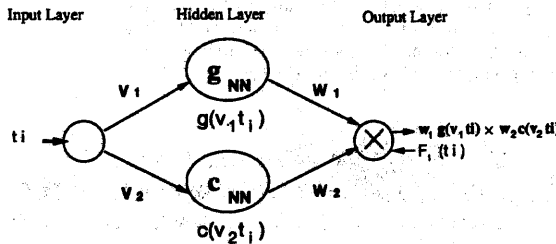


Fig.1. Overview of neural network model for time series where amplitudes and frequencies are changing

g_{NN}, c_{NN} は、それぞれ振幅変化予測を行う NN、周期変化予測を行う NN であり、入力 t_i (時間) に対しそれぞれ $g(t_i), h(t_i)$ を出力する。これらは処理過程 (1), (2) に従いあらかじめ学習を終えたものであり、この全体のモデルの中ではそれぞれ関数の役割を果たすニューロンとなる。従ってこのモデルでは、左から入力された時刻 t_i の出力値が $w_1 g(v_1 t_i) \times w_2 c(v_2 t_i)$ となり、その教師データを $F_1(t_i)$ として、ネットワークの重み

v_1, v_2, w_1, w_2 をバックプロパゲーションにより決定する。次に g_{NN}, c_{NN} の各 NN を説明する。

g_{NN} は、入力層ニューロン数2、中間層ニューロン数15、出力層ニューロン数1の3層から成るパーセプトロン型 NN である (Fig.2)。ただし、入力層のニューロンの一つはバイアスニューロンである。またニューロンの動作関数は、中間層ではシグモイド関数、出力層では線形関数を用いた。出力層において線形関数を用いたのは、 $[0, 1]$ を越える出力を保証するためである。

ネットワークの学習では、少なくとも振幅変換を受ける前のデータの極値は一定であるとする。変換前の極大値が1.0、極小値が-1.0であったと仮定すると、式1より、極大値、極小値の時刻の点列 $\{d_{t_i}\} = \{t_i : \delta F / \delta t_i = 0\}$ について $|F(d_{t_i})| = |g(d_{t_i})|$ の関係式が成り立つ。従って、点列の値 d_{t_i} を入力とした時の出力を $|F(d_{t_i})|$ として学習させることは、振幅変換関数 g を学習させることと等価である。

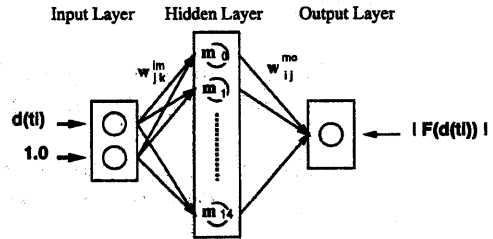


Fig.2. Network for g function

c_{NN} は、中間層が2層から成る4層のパーセプトロン型 NN であり、各層のニューロン数は入力層2、第1中間層20、第2中間層5、出力層1である (Fig.3)。ただし入力層のニューロンの一つはバイアスニューロンである。ニューロンの動作関数は、中間層第1層目はシグモイド関数、出力層では線形関数を用いた。また中間層第2層目では、関数 fitting としての各ニューロンの役割を明確にするため、前層からの出力和に入力時刻の i 乗 ($i=0, \dots, 4$) をかけあわせた値を出力値とした。つまり、中間層第1層目のニューロン j と中間層第2層目のニューロン i の間の重みを $w_{ij}^{m_2}$ 、中間層第1層目の出力値を out_hid1_j とすると、中間層第2層目の出力値 ($out_hid2_i, i=0, \dots, 4$) は式2ようになる。

$$out_hid2_i = \left(\sum_{j=0}^{19} w_{ij}^{m_2} \times out_hid1_j \right) \times t^i \quad (2)$$

ネットワークの学習では、周期を変化させる関数 $h(t_i)$ による変化を受ける以前の周期は一定であったとする。この場合、前節の $\{d_{t_i}\} = \{t_i : \delta F / \delta t_i = 0\}$ で考えると、 $h(t_i)$ の役割は不等間隔の d_{t_i} 、

d_{t_1}, \dots を等間隔に変換することに他ならない。そこで本研究の周期変換予測の学習では入力として $\{d_{t_i}\} = \{t_i : \delta F / \delta t_i = 0\}$ および $\{l_{t_i} : F(l_{t_i}) = 0\}$ を用意し、 d_{t_i} ($i = 0, 1, \dots$) の教師データを $(i+0.5)\pi$ 、 l_{t_i} ($i = 0, 1, \dots$) の教師データを $i\pi$ として学習を行った。教師データを $(i+0.5)\pi, i\pi$ としたのは、本研究では周期表現に sine 関数を用いるからである。

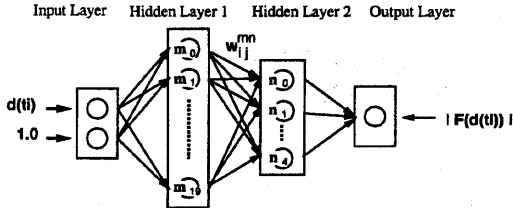


Fig.3. Network for h function

NN の問題点として中間層ニューロン数の任意性があり、この決定により結果が大きく左右される。そこで、 gNN , cNN それぞれにおいて再構築学習法¹²⁾により学習を行い、中間層ニューロン数の最小化を試みた。

3. 数値実験とその考察

数値実験に用いたデータ列を以下に示す。

- (1) $data\ 1[i] = \sin((0.01976i)^2) / (0.01976i)$
($i = 0 \sim 492$, ただし、 $data[0] = 0.0$)
- (2) $data\ 2[i] = \sin((0.01976i)^2) / \exp(0.001976i)$
($i = 0 \sim 492$, ただし、 $data[0] = 0.0$)
- (2) $data\ 3[i] = \sin(100000 / (i + 558)) / (0.002(i + 558))$
($i = 0 \sim 621$)
- (2) $data\ 4[i] = 100 \cos(0.3(i + 11) + 1) \exp(-0.005(i + 11))$
 $+ 25 \cos(0.31(i + 11) + 3) \exp(-0.003(i + 11))$
($i = 0 \sim 1025$)

NN による学習では、上記のデータを $[-1, 1]$ にスケールした。また Fig.1 に示した全体のモデルの各重み v_1, v_2, w_1, w_2 は、簡単のため全て 1.0 としている。

振幅変換関数および周期変換関数予測のための学習回数はそれぞれ 30000 回とした。再構築法での消去は振幅変換関数予測では 300 回に 1 回、周期変換関数予測では 3500 回に 1 回とした。

学習区間は、 $data\ 1 \sim 3$ では 1 ~ 10 周期とした。 $data\ 4$ は NMR などの信号に代表的な multiple nonstationary frequencies の近似関数であるが、予測開始時刻や学習範囲により予測精度の差が大きいことが予想された。そこで予測開始時刻を $t=212$ (case 1)、 $t=399$ (case 2)、 $t=605$ (case 2)、 $t=802$ (case 4) とし、それ以前を学習データとして用いた。予測は全てのデータで学習後 5 周期とした。

また、本研究で作成した NN との性能の比較を行うために、振幅変換関数と周期変換関数をそれぞれ最小自乗法 (LS) により決定し、その関数式を用いて式 1 の関係により予測を行うことを試みた。

Table 1 に $data\ 4$ の case 2 を実行した際の平均誤差と標準偏差を示す。また Fig.4 にそのグラフを示す。グラフ中の実線は実データ、破線は NN の学習と予測の結果、点線は LS の学習と予測の結果をそれぞれ表す。また図中の縦線はそれ以前が学習区間で、それ以降が予測区間であることを表す。

Table 1 の NN による平均誤差をみると、予測第 2 周期目 (第 21 周期) までは平均学習誤差とほぼ同等の精度で予測が行われている。Fig.4 の破線から、誤差が大きくなるのは振幅変換関数の予測精度が次第に悪くなるためであるとわかるが、これは、この学習区間では振幅の減衰を捉えるのに不十分であったためである。一方 Table 5 の LS による平均誤差をみると、NN による結果と比較して学習及び予測の全周期で誤差が大きい。これは Fig.4 の点線より LS の方が振幅変換関数の予測精度が悪いためであるとわかる。

$data\ 1 \sim data\ 4$ のその他の NN の結果においても、 $data\ 3$ を除く全てのデータで少なくとも学習後 1 周期先の予測は学習誤差と同等の精度で行うことができた。しかし、学習区間が長い case 4 では学習誤差自体が大きかった。周期が $1/t$ で長くなる $data\ 3$ では、周期変化を十分にとらえることができず学習誤差が非常に大きかった。 $data\ 1 \sim data\ 4$ の結果を NN と LS で比較すると、学習精度については $data\ 4$ の case 3, 4 のような学習区間が長いデータで LS の方が良かったが、予測精度は $data\ 1$ を除き NN の方が良かった。このことから、NN が LS と比較し外挿に対して有効であるということが出来る。また NN と LS の振幅変換関数の予測精度を比較すると、 $data\ 4$ の case 1 ~ 3 では明らかに NN の方が精度が良く、LS の精度が特に良かったのは、 $data\ 4$ の case 4 の予測開始後の数周期のみであった。このことから、NN は振幅変換関数の予測に特に有効であるという結論を得た。

3.1 ノイズを含むデータの予測

本モデルのノイズを含むデータへの適応性を見るために、 $data\ 1$ と $data\ 4$ に s/n 比が 20 である正規誤差を加え、前節と同様に 5 周期の予測を行った。Table 2 に $data\ 4$ の case 2 を実行した際の平均誤差と標準偏差を示す。また Fig.5 にそのグラフを示す。前節と同様に、グラフ中の実線は実データ、破線は NN の学習と予測の結果、点線は LS の学習と予測の結果をそれぞれ表す。

Table 2 の NN による平均誤差を見ると、予測第 2 周期目までは平均学習誤差と同等の精度で予測が行われている。

Table 1. Mean relative error and standard deviation of data 4

周期	平均誤差 (NN)	標準偏差 (NN)	平均誤差 (LS)	標準偏差 (LS)
学習区間の相対誤差平均	0.144	0.327	0.251	0.684
第 20 周期 (予測)	0.187	0.212	0.202	0.263
第 21 周期 (予測)	0.182	0.084	0.266	0.056
第 22 周期 (予測)	0.290	0.092	0.493	0.103
第 23 周期 (予測)	0.367	0.123	0.807	0.162
第 24 周期 (予測)	0.492	0.148	1.341	0.190

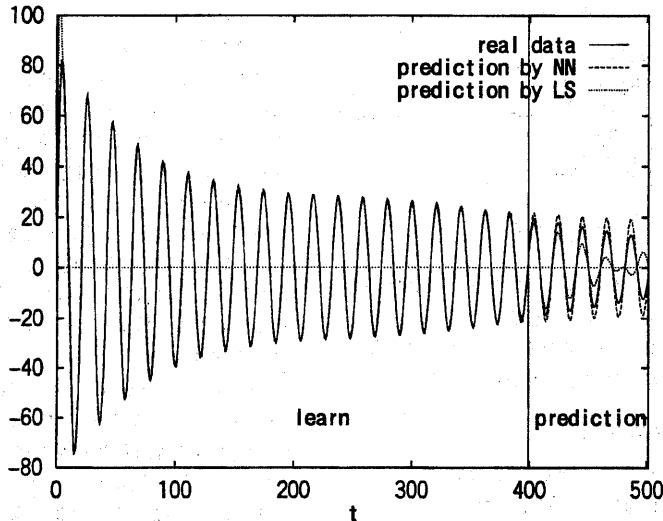


Fig.4. Prediction of data 4(case 2) NN and LS.

一方 LS による予測では、NN による予測と比較して予測第 1 周期の誤差は小さいが、予測周期が進むに従って誤差が大きくなる。これは Fig.5 の点線から LS の振幅変換関数の予測精度が悪いためであることがわかる。

その他の結果においても、NN では学習後の少なくとも 2 周期先の予測が学習誤差と同等の精度で行われ、ノイズを含むデータに対しても本モデルは十分適応可能であった。また LS の結果と比較すると、ノイズを含まないデータの際と同様、特に振幅変換関数の予測で高い精度が得られた。

4. 中間層ニューロン数の最適化

振幅変換関数予測、周期変換関数予測を行う各 NN を、再構築学習法で学習した際の結合荷重値の結果から、中間層ニューロン数の最適数について考察を行う。

4.1 振幅変換関数予測を行う NN

振幅変換関数を求める NN の中間層ニューロン数について説明する。Table 3 に示したのは、各データの実行より得られた振幅変換関数を求める NN の中間層ニューロン数の最適数である。

data 2, data 3 は 12, 13 と他のデータと比較して多く

のニューロンを必要としていることがわかるが、これは再構築法において消去が不十分であったためである。また data 4 では、case 1 から case 3 までは 3, 6, 8 と順に多くのニューロンを必要としているのに対し、case 4 では 6 と少ない。これは本論文には示さなかったが、再構築法を行わない case 4 の実行では振幅変換関数の学習と予測の結果が多少良かったことから、case 4 では再構築法により必要以上にニューロンを消去してしまったためと考えられる。また noise を含むデータは、含まないものと比較して同じかそれより 2 程度多くのニューロンを必要としていることがわかる。

以上の結果より、今回用いた振幅変換関数を予測する NN の中間層ニューロン数はただだか 10 程度で良いという結論を得た。

4.2 周期変換関数予測を行う NN

周期変換関数を求める NN の 2 つの中間層ニューロン数の最適数について説明する。

まず、第 1 中間層ニューロン数の最適化については難しいことがわかった。これは、消去率を極めて低く設定しているためであると考えられるが、これより低い消去率においてもこの層の最適化を再構築法により行うことは難しかった。

Table 2. Mean relative error and standard deviation of noised data 4

周期	平均誤差 (NN)	標準偏差 (NN)	平均誤差 (LS)	標準偏差 (LS)
学習区間の相対誤差平均	0.306	1.089	0.398	2.203
第 20 周期 (予測)	0.423	1.075	0.246	0.287
第 21 周期 (予測)	0.238	0.189	0.370	0.087
第 22 周期 (予測)	0.426	0.623	0.644	0.175
第 23 周期 (予測)	0.499	0.427	1.038	0.202
第 24 周期 (予測)	0.474	0.276	1.703	0.400

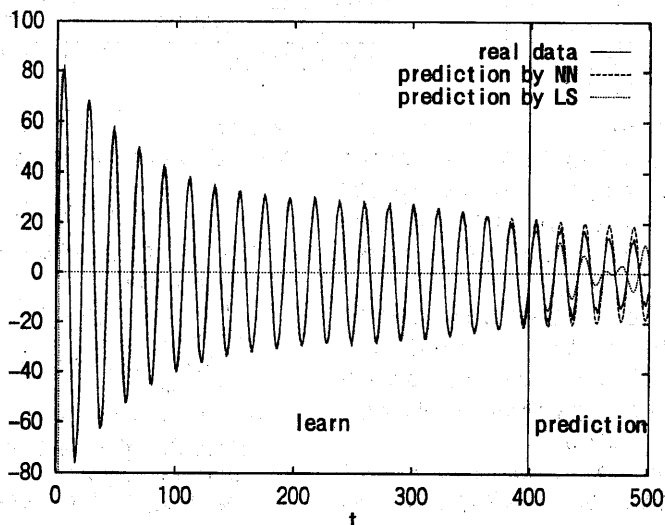


Fig.5. Prediction of noised data 4(case 2) NN and LS.

Table 4 に示したのは周期変換関数を求める NN の第 2 中間層ニューロンを最適化し、式 2 を用いて決定した周期変換関数である。表中の x, y, z は、前層からの入力や重みにより決定される値であり、 t は時間である。

data 1 と data 2 では 2 次式が得られているが、実データの周期変化が t^2 によることから、実データの性質をよくとらえているということが出来る。

data 4 の case 1 では 1 次式が得られたが、data 4 ではそれぞれの周期変化は 1 次関数によるため、得られた関数式はある程度妥当なものである。しかし、実際は二つの周期関数の和で表され、厳密に 1 次関数で表すことができない。case 2 では 2 次式が得られたが、これは case 1 よりも長期間の学習を行うことで二つの周期関数の和で表される微妙な周期変化を学習できたことによる。case 3, case 4 も、case 2 と同様に 2 次式が得られた。特に case 4 では、case 2, case 3 と比較して 2 次式への結合が強くなっていることがわかる。

ノイズを含むデータの結果をみると、data 1 ではノイズを含まない data 1 の結果とほぼ同じ関数式が得られている。data 4 の case 1, case 2 では、どちらも 0 次項を含み、3 つのニューロンを要しているが、得られた関数式はノイズを含まないデータの結果と最高次数が

同じであり、係数も似通っている。これらは NN の平滑能力を示すものである。

以上の結果から、第 2 中間層は、data 3 を除く本研究で用いた全てのデータで、 t^0 から t^2 までの 3 つのニューロンがあれば充分であるということが出来る。これは、周期変換関数予測を行う NN により、各データでその実データの性質と合致する関数式が得られるためであり、本モデルの妥当性が確かめられたということが出来る。

5. 結論と今後の課題

本研究では、NMR のシグナルや BZ 反応などの振動反応の酸化還元ポテンシャルなど化学現象に見られる、時間とともに振幅と周期が同時に変化する時系列データの予測を行うために、ニューラルネットワーク (NN) を用いたモデルを構築し、data 1 ~ data 4 の 4 つのデータを用いて数値実験を行った。各データをモデルに与え学習させた後、学習後 5 周期の予測を行うことを試みた。各数値実験では、最小自乗法 (LS) を用いて関数式を求め、その予測を試みることにより、本モデルの有効性の検証を行った。

Table 3 中間層ニューロンの最適数

データ	最適数
data 1	4
data 2	12
data 3	13
data 4(case 1)	3
data 4(case 2)	6
data 4(case 3)	8
data 4(case 4)	6
noised data 1	4
noised data 4(case 1)	4
noised data 4(case 2)	8

その結果、data 3を除く全てのデータで少なくとも学習後1周期先の予測は学習誤差と同等の精度で行うことができた。しかし、学習区間が長いcase 4では学習誤差自体が大きかった。周期が $1/t$ で長くなるdata 3では、周期変化を十分にとらえることができず学習誤差が非常に大きかった。

LSの結果と比較すると、学習精度はLSの方が高い傾向にあり、特に学習区間が長いデータでその差が顕著であった。しかし予測精度は、data 1を除きNNの方が高かった。特に、NNは振幅変換関数の予測で精度の高い結果が得られることがわかった。

次に、data 1, data 4のcase 1, case 2にs/n比が20のノイズを加え、同様に5周期の予測を行い、本モデルの応用の可能性を検証した。その結果、本モデルにより学習後の少なくとも2周期先の予測が学習誤差と同等の精度で行われ、ノイズを含むデータに対しても本モデルは十分適応可能であった。またLSの結果と比較すると、特に振幅変換関数の予測で高い精度を得られた。

本モデルを構成している2つのNNの中間層ニューロンの最適数については、今回用いた振幅変換関数を予測するNNの中間層ニューロン数はたかだか10程度で良いという結論を得た。周期変換関数の2つの中間層については、第1中間層ニューロン数の最適化を行うことは難しいことがわかった。また第2中間層のニューロン数を最適化することにより、各データでその実データの周期変化と合致する関数式が得られ、本モデルの妥当性が確かめられた。第2中間層ニューロンは、data 3を除く本研究で用いた全てのデータにおいて t^0 から t^2 までの3つのニューロンがあれば充分であるということがわかった。

以上の結果より、本研究で用いたNNモデルは、振幅と周期が時間とともに変化する時系列データの解析に有効であり、LSの結果と比較して高い精度で予測が行われ、特に振幅変化の予測に有効であるということができた。

今後の課題として、data 3のようなタイプのデータに対応させていく必要がある。またノイズを含むさらに

Table 4 周期変換関数予測を行うNNにより得られた周期変換関数

データ	周期変換関数
data 1($\sin(t^2)/t$)	$1.03\pi t^2$
data 2($\sin(t^2) \exp(-t)$)	$0.88\pi t^2$
data 4(case 1)	$0.64yt$
data 4(case 2)	$0.14\pi t^2 + 1.82yt$
data 4(case 3)	$0.09\pi t^2 + 2.24yt + 0.03z$
data 4(case 4)	$0.54\pi t^2 + 1.26yt$
noised data 1	$1.13\pi t^2$
noised data 4(case 1)	$0.84yt - 0.06z$
noised data 4(case 2)	$0.14\pi t^2 + 1.76yt - 0.04z$

多様なデータの予測を行っていく必要があり、ノイズを除去するためのフィルタの作成なども必要である。

参考文献

- 1) 北川源四郎, 時系列解析プログラミング, 岩波書店, 東京, 1993.
- 2) 赤池弘次監修, 時系列解析の実際 I, 朝倉書店, 東京, 1994.
- 3) 赤池弘次監修, 時系列解析の実際 II, 朝倉書店, 東京, 1995.
- 4) 南慶一郎, 河田聡, 時間で特性が変化する信号の新解析手法 — 時間-周波数解析, インターフェース, **20** (1994), 110-121.
- 5) M. West, *Bayesian Inference in Cyclical Component Dynamic Linear Models*, *Journal of the American Statistical Association*, **90** (1995), 1301-1312.
- 6) G. L. Bretthorst, *Bayesian Spectrum Analysis on Quadrature NMR Data with Noise Correlations*, *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, J. Skilling (Ed.), Kluwer Acad. Publs., Dordrecht, 1989, pp. 261.
- 7) G. L. Bretthorst, *Bayesian Model Selection: Examples Relevant to NMR*, *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, J. Skilling (Ed.), Kluwer Acad. Publs., Dordrecht, 1989, pp. 377.
- 8) 萩原将文, ニューロ・ファジィ・遺伝的アルゴリズム, 産業図書, 東京, 1994.
- 9) 上村龍太郎, 回帰ニューラルネットワークによる時系列パターンの復元, 情報処理学会人工知能研究会報告, **70** (1990), 1-10.
- 10) 青山智夫, 井須芳美, 長嶋雲兵, 階層型ニューラルネットワークによる時系列現象の予想, *IPSJ Sig Notes*, **95-HPC-59** (1995), 13-17.
- 11) 小野寺光永, 長嶋雲兵, 吉田裕亮, 青山智夫, 細矢治夫, 振幅と周期が時間とともに変化する時系列データのニューラルネットワークによる予測 *IPSJ Sig Notes*, **95-HPC-63** (1996), 13-18.
- 12) 市川紘, 階層型ニューラルネットワーク 非線形問題解析への応用, 共立出版, 東京, 1993.