

時系列データ解析からの帰納的熱力学

長谷川博^{*0}、鷲尾隆⁺、石宮由香里^{*}

^{*} 茨城大学理学部:310-8512 水戸市文京 2-1-1

hiroshih@mito.ipc.ibaraki.ac.jp

⁺ 大阪大学産業科学研究所:567-0047 茨木市美穂ヶ丘 8-1

washio@sanken.osaka-u.ac.jp

我々は時系列データから帰納的に熱力学を構築することを提唱する。近年の統計科学や人工知能の発展を利用して時系列データから数理モデルを構築し、定常確率分布から有効ポテンシャルを定義し、関本・佐々の理論を用いて熱力学を帰納的に構築する。定常確率分布から有効ポテンシャルを決めるので、実際の熱を持たない系に対しても熱力学的理論を構築できる。我々は原子炉の中性子雑音データから Auto-Regressive Moving Average (ARMA) モデルを同定し、制御棒の変化を外からの仕事と見なして、その応答を計算した。揺らぎ循環のある非平衡定常状態に対して定義される有効ポテンシャルは維持発熱を繰り込んだものになる。有効ポテンシャルに対して定義される過剰発熱が実際の非定常過程の時系列データから測定された [1]。

時系列データからの帰納的熱力学

時系列データからの帰納的熱力学は、定常時系列が存在する系に対して、外部操作やパラメータ変化を行ったときの応答を記述する。次の3つの部分からなっている。

(1) 時系列データから数理モデルを構築。

人工知能や統計科学の技巧を用いて、時系列データから数理モデルを構築する。我々は AIC を用いて ARMA モデル [2] を時系列データから同定した。

(2) 定常分布からのポテンシャル導入。

外部操作がないときに定常時系列が存在する系を対象にする。定常確率分布を数理モデルから求める。数理モデルからの解析的導出が難しい場合は数値的にデータから求めても良い。このとき我々はボルツマン分布との類似から有効ポテンシャル $U(\mathbf{x}, \alpha)$ 、自由ポテンシャル $F(\alpha)$ を、定常確率分布 $P_s(\mathbf{x}, \alpha)$ から以下のように定義する。

$$P_s(\mathbf{x}, \alpha) = \exp[F(\alpha) - U(\mathbf{x}, \alpha)]$$

ただし適当な座標値 \mathbf{x} とパラメータ値 α を規準として有効ポテンシャル $U(\mathbf{x}, \alpha)$ を 0 と定める。通常はパラメータ値と座標値に関する最小値を 0 とする。この不定性はエネルギーと同様のものである。

経済系や生物系のような非物理系においても、このように定常確率分布から有効ポテンシャルを導入することができる。このように導入された有効ポテンシャルは、外からの操作に対して物理系におけるエネルギーと同様の役割を演じる [1]。

ここで少し注意が必要である。我々はボルツマン分布との類似から有効ポテンシャル $U(\mathbf{x}, \alpha)$ を定義した。しかし揺らぎ循環がある場合、定常分布が平衡分布からずれてしまう。有効ポテンシャルを基にした仕事 W は、通常の

⁰ Center for Statistical Mechanics, University of Texas, Austin, TX78712, USA.
Tel 1-512-471-7253, Fax 1-512-471-9612, e-mail: hiroshi@physics.utexas.edu

ポテンシャルから定義される仕事から揺らぎ循環による維持発熱を差し引いたものになる。

(3) 関本・佐々理論から熱力学構築。

関本・佐々理論 [3] は熱力学をランジュバン方程式から再構築した理論である。ランジュバン方程式を力の釣り合いの式とみなすことで、エネルギーの保存則を導出、熱を系から熱浴への反作用のする仕事と解釈することで、見事に熱力学第2法則を再構築することに成功した。我々は離散時間のランジュバン方程式と呼ぶべき ARMA モデルに、関本・佐々理論を適用することで熱力学法則の導出を行う。我々は関本・佐々理論を揺らぎ循環 [4] のある非平衡定常状態へ適用した [5]。

試験用原子炉中性子雑音データへの適用

我々は1991年11月に行われた近畿大学原子炉 UTR-KINKI の実験データを用いて解析を行った。時系列データから ARMA モデルを導出し、関本・佐々理論を参考にして揺らぎ循環のある系 [6] に有効ポテンシャルを実際に導出した。

試験炉データからの仕事の計算において、我々は (1) 係数行列が時間に線形に依存する。(2) アンサンブル平均を時間平均で近似できる。すなわち反応度 $\rho(t)$ が非常にゆっくりと ρ_i から ρ_f へ変化し、相関時間の範囲で $\rho(t)$ が一定と見なせる場合、単一の時系列の時間平均で近似できる。と仮定した。この時、試験炉データからの仕事は

$$W_{NS} \sim \text{Tr}[\{R_s^{-1}(\rho_f) - R_s^{-1}(\rho_i)\} \langle \mathbf{x}\mathbf{x}^t \rangle_{ns}]$$

ここで $R_s(\rho)$ は反応度 ρ の定常分布における共分散行列、 $\langle x_i x_j \rangle_{ns}$ は非定常時系列データの時間平均。同様に ARMA モデルによる人工データからの仕事 W_{ARMA} も同様に計算した。我々は実際のデータと人工データで解析を行った結果は以下のような過剰発熱を測定した。

$$W_{NS} \geq W_{ARMA} \geq F(\rho_f) - F(\rho_i)$$

謝辞：中性子雑音データ使用を許していただいた、摂南大学工学部山田澄先生の御好意に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] H.H.Hasegawa T. Washio and Y.Ishimiya:LNAI1721 Springer-Verlag(1999)326; LNAI1967 Springer-Verlag(2000)304.
詳しくは LNAI に現在投稿中論文を参照下さい。
- [2] 尾崎統 北川源四郎 共編:時系列解析の方法, 朝倉書店 (1995).
- [3] K. Sekimoto:J.Phys. Soc.Japan,66(1997)1234;
K. Sekimoto and S. Sasa:ibid.3326.
- [4] K. Tomita and H. Tomita:Prog.Theor.Phys.51(1974)1731.
- [5] 我々は揺らぎ循環のある場合について具体的に研究したが、最近非平衡定常状態熱力学についてより一般的でエレガントな理論が導出されている。
Y. Oono and M. Paniconi:Prog.Theor.Phys.Suppl,130(1998)29;
K. Sekimoto:Prog.Theor.Phys.Suppl,130(1998)17;
T. Hatano and S. Sasa: Phys.Rev.Lett.,86(2001)3463;
H. Tasaki and S. Sasa: 基研研究会 (2001).
- [6] K. Kishida, S. Kanemoto, T. Sekiya and K. Tomita:
J.Nuclear Sci.Tech.13(1976)161.