Title	時系列データ解析からの帰納的熱力学(第9回『非平衡系の統計物理』シンポジウム,研究会報告)
Author(s)	長谷川, 博; 鷲尾, 隆; 石宮, 由香里
Citation	物性研究 (2002), 77(5): 843-847
Issue Date	2002-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/97181
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

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

概要

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自己回帰移動平均モデルを同定し、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。熱力学第2法則に対応して過剰発熱が実際の時系列データから測定された。

1 背景

現在コンピュータの目覚しい発達によって巨大なデータが蓄積されている。この巨大データ・ベースから如何に有用な規則や法則を取り出すかが重要な課題になっている。最近人工知能や統計科学を用いた規則発見が試みられている [1]。この論文では時系列データから帰納的に熱力学を構築することによって、データから統計法則を導くことを試みる。

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。それは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。例えば自己回帰移動平均モデルやカルマン・フィルタを用いた状態空間モデルなどの線形モデル。ニューロン・ネットワーク、再帰写像などの非線型モデルがある。この論文では AIC を用いて自己回帰移動平均モデルを時系列データから同定する [2]。

（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または数値的にデータから求める。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 $P_{\rm s}(\mathbf{x},\alpha)$ から以下のように定義する。

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

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

[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

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 [3]。

（３）関本・佐々理論から熱力学構築。

関本・佐々理論 [4] 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自己回帰移動平均モデルに、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。

2　試験用零出力原子炉からの時系列データへの適用

我々は最初の試みとして、外部中性子源をもつ試験用零出力原子炉からの時系列データへの適用を考えた。その理由は、（１）熱力学構築が可能なランジュバン方程式タイプの、有効な数理モデルが既に存在していること。すなわち零出力原子炉であるので一点炉近似動特性方程式系 [6] として見なせる。（２）原子炉のシステム同定に、時系列データ解析からの ARMA モデルの適用が成功していること。（３）揺らぎ循環が存在していること [5]。が挙げられる。

（１）一点炉近似動特性方程式系

一点炉近似動特性方程式系 [6] は、連立のランジュバン方程式のモデルである。

$$dn/dt = (\rho - \tilde{\beta})/\Lambda * n + \sum_i \lambda_i \mathcal{C}_i + \mathcal{S} + \xi_0(t)$$

$$d\mathcal{C}_i/dt = \tilde{\beta}_i/\Lambda * n - \lambda_i \mathcal{C}_i + \xi_i(t) \quad i = 1, 2, \cdots$$

ここで、n：中性子濃度、$\mathcal{C}_i$：i 番目の先行核濃度、$\xi_0(t)$、$\xi_i(t)$：ホワイト・ノイズ $\tilde{\beta} = \sum \tilde{\beta}_i$：全遅発中性子比率、$\Lambda$：即発中性子寿命、$\lambda_i$：i 番目の先行核崩壊定数、$\mathcal{S}$：外部中性子源からの中性子流、$\rho$：反応度である。

これらのパラメータ間の関係として、即発中性子寿命は先行核寿命に比較して非常に短いこと $\beta/\Lambda \gg \lambda_i$、また全遅発中性子比率は反応度に比較して大きいこと $\beta \gg \rho$、があげられる。反応度 ρ は負であるが、外部中性子源 $\mathcal{S}$ とバランスして中性子密度が一定な定常状態に移行する。反応度 ρ を微妙に調整することで原子炉の出力を調整できる。

系の時間発展はノイズが入った場合、定常状態の回りで揺らぎ循環がおきる [5]。一点炉近似動特性方程式系はランジュバン方程式系であるので、ポテンシャルの概念を中性子雑音に導入することができる。このとき外部からの制御棒の変化による反応度 ρ の時間変化は、熱力学における外部からの仕事（オペレーション）W に対応する。

（２）ARMA モデルの導出

時系列データから同定される離散時間のモデルとして、我々は実際の時系列データ解析や制御で用いられている AR タイプ・モデルを念頭に置いている [2]。ARMA(n_a,n_c) モデルは、時系列 $x(t)$ についての数理モデルで

$$x(t) + a_1 x(t-1) + \cdots + a_{n_a} x(t - n_a)$$

$$= c_0 e(t) + c_1 e(t-1) + \cdots + c_{n_c} e(t - n_c)$$

で与えられる。$e(t)$ は時刻 t の規格化されたホワイト・ガウシアン・ノイズである。

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。定常状態での中性子雑音時系列データは、カットオフ周波数を５００Ｈｚにセットしたローパスフィルタで事前に処理し、サンプリング周波数４８ｋＨｚでサンプリングしたものを、デジタル信号に再サンプリングしたものである。非定常状態でのデータは、カットオフ周波数を５００Ｈｚにセットしたローパスフィルタとカットオフ周波数を０．１Ｈｚにセットしたハイパスフィルタとで事前に処理している。我々はさらに、オリジナル・データに高精度ローパスフィルタで再処理したものを用いた。

中性子雑音時系列データとして、反応度がそれぞれ $\rho = -2.19\$$, $-1.25\$$, $-0.729\$$, $-0.588\$$, $-0.289\$$ の場合の定常状態でのデータと各定常状態間の非定常状態のデータが記録されている。総データ数を 3,000 づつの 50 組に分けて対応する AR モデルと ARMA モデルを求め、統計的に評価した。赤池情報量基準 (AIC)[2] を基準に統計的に評価すると ARMA(2,2)$\rho = -0.289\$$ を除いて最小の AIC を与えた[1]。ARMA(2,2) での具体的な係数値は以下のようになった。

ρ	-2.19	-1.25	-0.729	-0.588	-0.289
a_1	0.2688	0.1653	0.0319	0.0519	-0.0485
a_2	-0.3975	-0.5097	-0.5274	-0.5586	-0.5546
$\bar{c}_1$	0.7013	0.7419	0.6710	0.7090	0.6559
$\bar{c}_2$	-0.1242	-0.1080	-0.1216	-0.1165	-0.1133

ここで $\bar{c}_1 = c_1/c_0$、$\bar{c}_2 = c_2/c_0$ である。c_0 はデータの分散から直接決定された。

（３）ARMA モデルからの熱力学的理論

(i) 定常確率分布

ARMA(2,2) モデルを２次元のベクター・モデルに書き換える。

$$\mathbf{x}(t) = A\mathbf{x}(t-2) + C_0\mathbf{e}(t) + C_1\mathbf{e}(t-2)$$

$\mathbf{x}^{\mathrm{T}} = (x(t), x(t-1))$、そして行列 A、C_0、C_1 は以下のように与えられる。

$$A = \begin{pmatrix} -a_2 + a_1^2 & a_1 a_2 \\ -a_1 & -a_2 \end{pmatrix}$$

$$C_0 = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 - a_1 c_0 \\ 0 & c_0 \end{pmatrix} \quad C_1 = \begin{pmatrix} c_2 - a_1 c_1 & -a_1 c_2 \\ c_1 & c_2 \end{pmatrix}$$

行列 A の２つの固有値が、２つの指数関数的減衰モードに対応する。

ARMA(2,2) モデルにおける確率分布関数の時間発展を考える。モデルの線形性から確率分布として次のような正規分布、

$$P(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi R(t))}} \exp[-\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot R(t)^{-1}\mathbf{x}]$$

を仮定すると、確率分布関数の時間発展は、共分散行列の時間発展として記述される。

$$R(t) = AR(t-2)A^{\mathrm{T}} + C_0 C_0^{\mathrm{T}} + C_1 C_1^{\mathrm{T}} + C_1 C_0^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} + A C_0 C_1^{\mathrm{T}}$$

パラメータ $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$、$\mathbf{c} = (c_0, c_1, c_2)$ が時間に依存しないとき、ARMA(2,2) モデルは定常分布を持つ。定常分布の共分散行列は以下の方程式を解くことによって求めることができる。

$$R_{\mathrm{s}} - AR_{\mathrm{s}}A^{\mathrm{T}} = C_0 C_0^{\mathrm{T}} + C_1 C_1^{\mathrm{T}} + C_1 C_0^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} + A C_0 C_1^{\mathrm{T}}$$

連立方程式として、定常解を Mathematica で解析的に求めることができる。

(ii) 熱力学的理論

・有効ポテンシャル

有効ポテンシャル $U(\mathbf{x}, \mathbf{a}, \mathbf{c})$ と自由ポテンシャル $F(\mathbf{a}, \mathbf{c})$ を、定常確率分布 $P_{\mathrm{s}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}, \mathbf{c})$ から以下のように定義する。

$$P_{\mathrm{s}}(\mathbf{x}, \mathbf{a}, \mathbf{c}) = \exp[F(\mathbf{a}, \mathbf{c}) - U(\mathbf{x}, \mathbf{a}, \mathbf{c})]、$$

[1] 一点炉近似動特性方程式系は連立のランジュバン方程式のモデルであるから、関本・佐々理論によって熱力学的理論が求まる。一方時系列データから求まる ARMA モデルからも熱力学的理論が求まり、それぞれ統計法則を与える。一般にローパス・フィルター等で時間の粗視化を導入すると、観測している系と背後の熱浴との関係が変化して、いままで測定していた自由度が観測している系から熱浴側に移ることになる。このように時間の粗視化のスケールや解像度に応じて、いろいろな階層のレベルでの有効理論が構築される。

ここで、$\mathbf{a}=(a_1,a_2)$、$\mathbf{c}=(c_0,c_1,c_2)$。共分散行列 R_s を用いると

$$F(\mathbf{a},\mathbf{c}) = -\log[\det(2\pi R_s(\mathbf{a},\mathbf{c})]/2$$

$$U(\mathbf{x},\mathbf{a},\mathbf{c}) = \mathbf{x}\cdot R_s^{-1}\mathbf{x}/2$$

$$\begin{aligned}R_{s11}^{-1} = R_{s22}^{-1} &= (1-a2)((1+a2)(\mathbf{c}\cdot\mathbf{c}) - 2a1c1(c0+c2)\\ &\quad + 2(a1^2 - a2 - a2^2)c0c2)/D、\\ R_{s12}^{-1} = R_{s21}^{-1} &= (1-a2)(a1(\mathbf{c}\cdot\mathbf{c} - 2a2c0c2)\\ &\quad + (1+a1^2-a2^2)(-c0c1 + a1c0c2 - c1c2))/D、\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}D = &(\mathbf{c}\cdot\mathbf{c} - a2c0c2 + (1+a1-a2)(-c0c1+a1c0c2-c1c2))\\ &(\mathbf{c}\cdot\mathbf{c} - a2c0c2 + (-1+a1+a2)(-c0c1+a1c0c2-c1c2))\end{aligned}$$

・熱力学第１法則

熱力学第 1 法則は、

$$\Delta U = W + D$$

ここで仕事 W と散逸 D は連続時間で定義される。しかし測定される時系列データは離散時間上の情報だけを含むし、そのデータから同定される ARMA モデルも離散時間上に定義される。我々は確率分布関数は時間に関して解析関数であり、Lagrange の補間公式で近似されると仮定する。実用上、上の定義式の積分を数値積分との対応で離散時間上での和で近似すると、台形公式に対応して、

$$W \sim \sum_{t=0}^{T-1}\int d\mathbf{x}[U(t+1)-U(t)][P(\mathbf{x},t+1)+P(\mathbf{x},t)]/2$$

$$D \sim \sum_{0}^{T-1}\int d\mathbf{x}[U(t+1)+U(t)][P(\mathbf{x},t+1)-P(\mathbf{x},t)]/2$$

と近似される。さらに精度を上げるためにはシンプソン公式等を用いればよい。

・準静的過程での仕事

このとき確率分布関数はその時刻のパラメータに対応する定常分布になるから、

$$W_{\mathrm{QS}} = F(T) - F(0)$$

準静的過程での仕事は始状態と終状態の自由ポテンシャルの差で与えられる。

・近準静過程での仕事

近準静過程での仕事は、ARMA モデルが成り立つという仮定のもとで計算できる。近準静過程での仕事 W_{ARMA} は準静的過程での仕事 W_{QS} より大きく、

$$\Delta W_{\mathrm{ARMA}} \equiv W_{\mathrm{ARMA}} - W_{\mathrm{QS}} \geq 0$$

となることを示すことができた。[1] 参照。

・実験での非定常過程における仕事

実験での非定常過程では簡単な ARMA モデルは成り立たない。試験用原子炉における制御棒の変化は局所的なモードで励起するために、より大きな過剰発熱が期待される。以下のような不等式が非定常過程における仕事 W_{EX} について期待される。

$$\Delta W_{\mathrm{EX}} \equiv W_{\mathrm{EX}} - W_{\mathrm{QS}} \geq \Delta W_{\mathrm{ARMA}}$$

(iii) 試験炉データからの仕事の計算

試験炉データからの仕事の計算において、（１）係数パラメータは時間について線形に変化する。（２）我々は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非定常時系列データの時間平均を用いて、

$$W_{\mathrm{EX}} \sim \sum_t [\frac{dR_{s11}^{-1}(t)}{dt}x(t)^2 + \frac{dR_{s12}^{-1}(t)}{dt}x(t)x(t-1)$$

と近似できる。同様に ARMA モデルによる人工データから、同様に W_{ARMA} も計算される。

我々は実際の実験データと ARMA モデルの数値シュミレーション・データで解析を行った。結果は以下のようになった。

ρ	$-2.19\$ \to -1.25\$$	$-0.588\$ \to -0.289\$$
W_{QS}	-0.8587	-0.8616
ΔW_{ARMA}	0.00007	0.00015
ΔW_{EX}	0.1035	0.1622
T	41556	14667

この結果は我々の期待した関係式と一致した。ΔW_{ARMA} は非常に小さい値なので、スケーリング性 $\Delta W_{\mathrm{ARMA}} \sim 1/T$ を用いて見積もった。すなわちパラメータ変化を１００倍にしてシュミレーションをして求めた値を 1/100 した値で見積もった。ΔW_{EX} が ΔW_{ARMA} に比較して非常に大きいことは、実験での非定常過程では ARMA モデルと比較して 1000 倍程度の長い時間相関が存在することを意味している。

3 結論

この論文で我々は帰納的熱力学を実際の原子炉の中性子雑音に応用した。詳細釣り合いが破れている故に、有効ポテンシャルは維持発熱を繰り込んだものとして定義された。我々はデータを解析することで過剰発熱、すなわち熱力学第２法則を確かめた。この時過剰発熱は、定常状態から励起した状態の寿命としての意味を持つことがわかった。

我々は化学データの時系列からの帰納的熱力学を構築を試みている。最近の技術の進歩からマイクロ・スケールのビーズや DNA 分子の運動を直接測定できる状況にある [7]。どのスケールで我々が系を観測するかが重要である。このようにして構築できる帰納的熱力学がマクロ・スケールの化学熱力学とどのように関係するんかが興味深い問題である。

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。この研究は文部省科研費特定領域研究「発見科学」と茨城大学 SVBL からの補助を受けている。

参考文献

[1] H.H.Hasegawa, T.Washio and Y.Ishimiya: "Inductive Thermodynamics from Time Series Data Analysis", to appear in "Progresses in Discovery Science", eds. S. Arikawa and A. Shinohara,**LNAI** Springer-Verlag(2001).

[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] H.H.Hasegawa T. Washio and Y.Ishimiya:LNAI**1721**Springer-Verlag(1999)326; LNAI**1967**Springer-Verlag(2000)304.

[4] K. Sekimoto:J.Phys. Soc.Japan,**66**(1997)1234;
K. Sekimoto and S. Sasa:ibid.3326;

[5] K. Tomita and H. Tomita:Prog.Theor.Phys.**51**(1974)1731;
K. Kishida, S. Kanemoto, T. Sekiya and K. Tomita.

[6] ジームス・ドュデルスタット　ルイス・ハミルトン:
原子炉の理論と解析, 成田正邦　藤田文行　共訳, 現代工学社.

[7] 吉川・真山・馬籠：私信.