Technical Report of the 2nd Workshop on Latent Dynamics (Jun 22, 2011, Tokyo, Japan)

観測変量と無次元変量の関係に基づくシステム構造変化について

鷲尾　隆*
Takashi Washio

Abstract: 本論ではまず測定論の立場から，観測変量および無次元変量の性質に基づくシステムの一般的構造について振り返る．この構造はシステムのモデルリングにおいて我々が導入する観測過程の性質とシステム自体の性質を明示的に表すことを示す．そして，最後にこのようなシステム構造の監視によって，観測データが示すシステムを支配する機構の変化を捉える可能性について論じる．

Keywords: 測定論，スケールタイプ，レジーム，アンサンブル，システム構造変化

1　まえがき

我々が科学や工学において対象とするシステムの多くでは，それらを支配する機構を直接観測することは難しく，システムの状態を特徴づける変量を観測し，それら観測変量の関係を基に背後の機構やその変化を推定することが多い．その際，システムを構成する機構は現実の世界で実現可能なものであるため，その機構を表す観測変量同士の関係と同型な観測変量値同士の数学的関係式も，何らかの意味で現実に許容されるものである．従って，システムの観測変量関係と同型な観測変量値の関係を表すモデルを得るためは，数学的制約や背景知識の制約に従う特殊な関係式を用いなければならない．このような制約された関係式を用いなければ，システム内の機構の変化を明示的に捉えることは困難である．この観点から，人工知能を指向する機械学習の分野において，BACON[1] という法則式発見システムが研究されて以来，1980 年代から 90 年代にかけて科学的法則式発見と呼ばれるテーマが盛んに研究された．しかしながら，システムの機構を明示的にモデル化するためには，観測データ以外に多くの背景知識を用いる必要があり，未知ないしは不確かな対象のモデル化という大きな現実のニーズに十分応えられたとは言えない．

一方，一般的な機械学習では，上記とは逆にニューラルネットワークや SVR，種々の確率モデルのように観測変量間の任意の関係を表すことができる制約の少ない関係式が用いられることが多い．これは学習に用いるモデルに高い汎用性や汎化能力を求めるためであるが，前述の議論に照らせば必ずしも対象システムの機構を推定してその変化を明示的に捉えるために適した方法論であるとは言えない．

筆者等は上記２つの方法論の特徴を踏まえ，対象システムに関する背景知識は用いずに，測定論を用いて観測変量の測定量としての性質から導いた数学的許容条件と観測データのみから，システムの機構を明示的に表す観測変量関係と同型なモデルを導出する手法を提案した [2]．本論ではこの研究を受け，はじめに次節から測定論の立場から観測変量および無次元変量の性質に基づくシステムの一般的構造について振り返る．この構造はシステムのモデルリングにおいて我々が導入する観測過程の性質とシステム自体の性質を明示的に表すことを示す．そして，最後にこのようなシステム構造の監視によって，観測データが示すシステムを支配する機構の変化を捉える可能性について論じる．

2　測定論とシステムの一般的構造

2.1　システムの構造

物理学を中心とする次元解析の分野では，前世紀前半に以下の２つの定理が導かれた [3, 4]．

Product Theorem *Assuming absolute significance of relative magnitudes of physical quantities, the function* ρ *relating a secondary quantity,* Π*, to the appropriate primary quantities,* $x, y, ...$ *has the form:* $\Pi = \rho(x, y, z, ...) = Cx^a y^b z^c ....$*, where* $C, a, b, c, ...$ *are constants.*

Buckingham Π**-theorem** *If* $\phi(x, y, ...) = 0$ *is a complete equation, then the solution can be written in the form* $F(\Pi_1, \Pi_2, ..., \Pi_{n-r}) = 0$*, where* n *is the number of arguments of* ϕ*, and* r *is the number of basic units*

*大阪大学産業科学研究所，567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1，
e-mail washio@ar.sanken.osaka-u.ac.jp，
The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka Universit, 8-1, Mihogaoka, Ibarakishi, Osaka, 567-0047, Japan

表 1: 尺度の性質を満たす制約と可能な関係式

No.	尺度の種類 独立変数	 従属変数 (被定義変数)	制約	可能な関係
1	ratio	ratio	$u(kx) = K(k)u(x)$	$u(x) = \alpha_* \lvert x \rvert^\beta$
2.1	ratio	interval	$u(kx) = K(k)u(x) + C(k)$	$u(x) = \alpha_* \lvert x \rvert^\beta + \delta$
2.2				$u(x) = \alpha \log \lvert x \rvert + \beta_*$
3	interval	ratio	$u(kx + c) = K(k, c)u(x)$	不可能
4	interval	interval	$u(kx+c) = K(k, c)u(x)+C(k, c)$	$u(x) = \alpha_* \lvert x \rvert + \beta$

1) 表記 α_*, β_* はそれぞれ α_+, β_+ for $x \geq 0$ and α_-, β_- for $x < 0$ を表す。

in x, y, z..... For all i, Π_i is a dimensionless number.

ここでいう基礎単位 (*basic unit*) とは，長さ $[L]$，質量 $[M]$，時間 $[T]$ のように他の次元とは独立に観測変量のスケーリングを行う単位のことである．上記の定理は各変量が "*absolute significance of relative magnitude*" を表すことを前提としている．すなわち，これらの定理が対象とする数量は，以下で説明する比例尺度 (*ratio scale*) に限られることを意味する．

2.2 観測変量の許容関係

測定論 (*measurement theory*) の立場から，前世紀中葉にスティーヴンスは，物理学や心理学，経済学，社会学などの幅広い問題領域において，各種数量の多くが比例尺度 (*ratio scale*) や間隔尺度 (*interval scale*) などのスケールタイプに分類できるとした [5]．比例尺度量は，質量，絶対温度，圧力，時間間隔，周波数，金額などで，これらの値はすべて絶対的な原点を基準に定められ，そこから測った２つの観測変量の比率はどのような単位を採用しようとも不変 (*invariant*) である．すなわち，単位は，"*Similarity group*: $x' = kx$" という数量の群としての性質を保存する同型写像である．一方，間隔尺度量には，摂氏や華氏の単位の温度やエネルギー，エントロピー，時刻，音程などがある．これらを測る尺度の原点は絶対的なものではなく，我々の定義によって変更可能であり，単位変換に関しては任意の２つの間隔の比が不変である．すなわち，単位は "*Generic linear group*: $x' = kx + c$" という同型写像である．その後，絶対尺度 (*absolute scale*) が彼を引き継ぐ後の研究により加えられた [6]．これは前記 **Buckingham Π-theorem** にも現れたいわゆる無次元変量であり，数量の定義上，異なる測定過程に関してもその値自体が不変であるので，単位を定義することに意味が認められない量である．例として，２つの長さの比や角度（ラジアン），流体力学における Nusselt 数，Reynolds 数などが挙げられる．この変換は "*Identity group*: $x' = x$" である[1]．

その後ルースは，比例尺度と間隔尺度の間の許容関係に関して考察を行った [7]．彼は，もし２つの数量が基礎単位次元を一部でも共有するなら，その関係は２数量のスケールの性質に依存する基礎的な関数で表されると主張した．例えば，x と y が両方とも比例尺度であり，y が x によって連続関数 $y = u(x)$ の形で定義されるとする．仮にその関係が対数関数，即ち $y = \log x$ であると仮定すると，比例尺度 x の群の性質に従い，x にある正数 k を掛け単位を変更することができるが，これによって $u(kx) = \log k + \log x$ となり，$\log k$ 分だけ y の原点が移動してしまう．これは明らかに比例尺度である y の群の性質を破ってしまう．従って，x と y の間の関数関係は対数であってはならないことが判る．このような議論を踏まえ，ルースは比例尺度と間隔尺度には，表 1 に示されるような, 線形関数，べき関数及び対数関数を基本とする非常に限られた関数系の関係のみが許容されることを明らかにした．

2.3 システム構造の一般化

これらの成果を踏まえ, 筆者等は上述の **Product Theorem** と **Buckingham Π-theorem** を，間隔尺度量を含めた関係に拡張し，以下の２つの定理を得た [2]．

Theorem 1 (Extended Product Theorem) *Assuming primary quantities in a set R are ratio scale-type, and those in another set I are interval scale-type, the function ρ relating a secondary quantity Π to $x_i \in R \cup I$*

[1]スケールタイプには，この他に地震のマグニチュードのような対数間隔尺度 (*logarithmic interval scale*)，徒競走順位のような順序尺度 (*ordered scale*)，学籍番号のような名義尺度 (*nominal scale*) などが知られている．

has one of the forms:

$$\Pi = (\prod_{x_i \in R} |x_i|^{a_i})(\prod_{I_k \in C}(\sum_{x_j \in I_k} b_{kj}|x_j| + c_k)^{a_k}), \qquad (i)$$

$$\Pi = \sum_{x_i \in R} a_i \log|x_i| + \sum_{I_k \in C_{\bar{g}}} a_k \log(\sum_{x_j \in I_k} b_{kj}|x_j| + c_k). \qquad (ii)$$
$$+ \sum_{x_\ell \in I_g} b_{g\ell}|x_\ell| + c_g$$

where all coefficients except Π *are constants, and* C *is a covering of* I, $C_{\bar{g}}$ *a covering of* $I - I_g$ $(I_g \subseteq I)$.

Theorem 2 (Extended Buckingham Π-theorem) *If* $\phi(x, y, z \cdots) = 0$ *is a complete equation, and if each argument is one of interval, ratio and absolute scale-types, then the solution can be written in the form*

$$F(\Pi_1, \Pi_2, ..., \Pi_{n-r-s}) = 0,$$

where n *is the number of arguments of* ϕ, *and* r *and* s *are the number of basic units and that of basic origins of the dimensions in* $x, y, z \cdots$. *For all* i, Π_i *is a dimensionless quantity.*

ここで，新たに基礎原点 (*basic origin*) とは，摂氏温度の次元における水の融点や海抜標高の次元における基準海面のように，他とは独立に間隔尺度の観測変量を決める原点のことである．

前述の拡張前の定理を含め，**(Extended) Product Theorem** において *secondary quantity* Π が無次元変量であるような観測変量の関数 ρ をレジーム (*regime*) という。また，同じく **(Extended) Buckingham Π-theorem** が示す無次元変量間の関係をアンサンブル (*ensemble*) という．アンサンブルの F は任意の関数である．これらの定理は，絶対尺度（無次元），比例尺度，間隔尺度の観測変量から構成される 1 つの関係式が，常に観測変量の基礎単位・原点によって定まる個数のレジームと 1 つのアンサンブルに分解可能であることを示している．たとえば，振り子の停止位置からの変位角 θ は，その最大振幅角 θ_{max}，振り子の長さ ℓ，重力加速度 g，時刻 t とその測定基準原点時刻 t_0 によって

$$\theta = \theta_{max} \sin[(g/\ell)^{1/2}(t - t_0)]$$

と表されるが，これは $\Pi_1 = \theta\theta_{max}^{-1}$, $\Pi_2 = (t - t_0)g^{1/2}\ell^{-1/2}$, $\Pi_1 = sin(\Pi_2)$ のように 2 つのレジームと 1 つのアンサンブルに分解される．

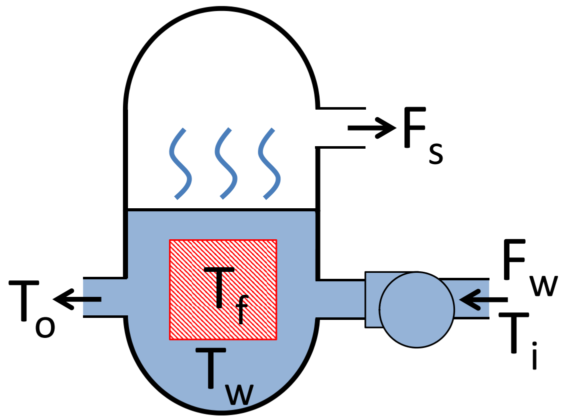

図 1: 容器内熱源の水冷却

3 システム構造変化同定の可能性

前節の議論より，解析対象を表現するのに必要な一連の数量間関係式と，各数量のスケールタイプ及び基礎単位や基礎原点が予め分かれば，上記の分解形式を得ることができる．しかしながら，実際の科学的研究や工学的応用においては，解析対象のメカニズムが未知あるいは不確かであることが多く，逆に実験的な観測データと，その各観測変量の一般的に知られるスケールタイプや基礎単位や基礎原点の情報のみから，それ以上の領域背景知識は用いずに対象に関して上記の分解に当てはまる科学的なモデル式を導きたいというニーズがある．この実現を目的として，筆者等は対象が連立方程式や連立微分方程式で表される場合も含め，システムの観測変量関係と同型な観測変量値の関係を表すモデル式を導出する手法を開発した [2],[8], [9],[10], [11]．これら一連の手法説明は割愛するが，以下では観測データと観測変量の性質のみから，領域背景知識を用いずに一般的なシステム構造を同定可能であるという前提で，それによってどのようなシステム構造変化を捉えることができる可能性があるかを例示したい。

図 1 に示すシステムを取り上げる．容器の中心に単位時間当たり $S_f[J/sec]$ で発熱し，温度が $T_f[K]$ の熱源があるとする．また，右側のポンプを通じて温度 $T_i[K]$ の水を単位時間当たり $F_w[kg/sec]$ で注入する．容器内の水の平均温度を $T_w[K]$ とし，左側出口の水の出口温度を $T_o[K]$，熱源と水の接触面積を $A_{fw}[m^2]$，熱源と水の間の熱伝達率係数を $K_{fw}[J/Km^2sec]$，水の比熱を $C_w[J/Kkg]$ とすると，水が沸騰しておらず定常状態でのこれらの関係式は以下となる．

$$S_f \quad = \quad K_{fw}A_{fw}(T_f - T_w) \ \text{（熱伝達）}$$

$$
\begin{aligned}
S_f &= C_w F_w (T_o - T_i) \quad &(\text{水温上昇}) \\
T_w &= (T_i + T_o)/2 \quad &(\text{平均温度})
\end{aligned}
$$

パラメータ K_{fw}, C_w は既知あるいは推定可能であり，接触面積 A_{fw}，出入り口の水温 T_i, T_o，燃料温度 T_f，流量 F_w が観測可能であるとすると，直接観測できない S_f, T_w を消去して以下の関係を得る．

$$K_{fw} A_{fw} (T_f - T_i/2 - T_o/2) = C_w F_w (T_o - T_i)$$

この式は以下の２つのレジームと１つのアンサンブルに分解できる．

$$
\begin{aligned}
\Pi_1 &= \Pi_2 \ (\text{アンサンブル}) \\
\Pi_1 &= K_{fw} A_{fw} C_w^{-1} F_w^{-1} \qquad (1) \\
\Pi_2 &= (T_o - T_i)(T_f - T_i/2 - T_o/2)^{-1}
\end{aligned}
$$

次に熱源の発熱が大きい，または水の流量が少ないために，水が沸騰していてかつ定常状態である場合を考える．上記に加えて，単位時間当たりの蒸気発生量を $F_s[kg/sec]$，水の単位質量当たりの蒸発熱を $H_s[J/kg]$ とすると，関係式は以下となる．

$$
\begin{aligned}
S_f &= K_{fw} A_{fw} (T_f - T_w) \ (\text{熱伝達}) \\
S_f &= C_w F_w (T_w - T_i) + C_w (F_w - F_s) T_w + H_s F_s \\
&\qquad (\text{水温上昇})
\end{aligned}
$$

式 (1) の場合に加えて，パラメータ H_s も既知あるいは推定可能であり，水温 T_w は沸点なので既知，蒸気発生量 F_s は観測可能であるとすると，観測できない S_f を消去して以下の関係を得る．

$$K_{fw} A_{fw} (T_f - T_w) = C_w F_w (2T_w - T_i) + F_s (H_s - C_w T_w)$$

この式は以下の２つのレジームと１つのアンサンブルに分解できる．

$$
\begin{aligned}
1 &= \Pi_1 + \Pi_2 \ (\text{アンサンブル}) \\
\Pi_1 &= C_w F_w K_{fw}^{-1} A_{fw}^{-1} (2T_w - T_i)(T_f - T_w)^{-1} \quad (2) \\
\Pi_2 &= F_s K_{fw}^{-1} A_{fw}^{-1} (H_s - C_w T_w)(T_f - T_w)^{-1}
\end{aligned}
$$

式 (1) と式 (2) に示される分解のレジームの個数は同じであるが，各レジームに現れる観測変量の組み合わせは全く異なっている．この理由は，式 (1) には沸騰という機構が含まれないのに対し，式 (2) には新たにそれが含まれるためである．この例に示唆されるように，前述したシステムの観測変量関係と同型な観測変量値の関係を表すモデル式を導出する手法を観測データと観測変量情報に適用して，各レジームに現れる観測変量の組み合わせを監視すれば，対象システムを構成する機構の変化を検知できる．更に同手法によって対象システムのモデル式を得れば，具体的にどのような機構の変化が生じたかを知ることができる可能性がある．

4　おわりに

本論では，過去の単位次元解析や測定論，科学的法則式発見，数学的許容制約を満たす観測変量関係と同型なモデル式の導出に関する研究を振り返り，システムの一般的構造が我々が導入する観測過程の性質とシステム自体の性質に明示的に分解して表現されることを示した．そして具体例を通じて，システム構造の監視によって観測データが示すシステムを支配する機構の変化を捉える可能性について論じた．

参考文献

[1] P.W. Langlay, H.A. Simon, G. Bradshaw and J.M. Zytkow: *Scientific Discovery; Computational Explorations of the Creative Process*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts (1987).

[2] T. Washio and H. Motoda: Discovering Admissible Models of Complex Systems Based on Scale-Types and Identity Constraints, In Proc. of Fifteenth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-97), Vol.2, pp.810-817 (1997).

[3] P.W. Bridgman: *Dimensional Analysis*, Yale University Press, New Haven, CT, (1922).

[4] E. Buckingham: On physically similar systems; Illustrations of the use of dimensional equations, Physical Review, Vol.IV, No.4, pp. 345–376 (1914).

[5] S.S. Stevens: On the Theory of Scales of Measurement, Science, Vol.103, No.2684, pp.677–680 (1946).

[6] T. Saito and E. Nojima: Report on one dimensional scale construction, Report of Research Activities on Computer Sciences and Technology, Nippon Univac Sogo Kenkyusho, Inc., Vol.2, No.2, pp. 17-226 (1972).

[7] R.D. Luce: On the Possible Psychological Laws, The Psychological Review, Vol.66, No.2, pp. 81–95 (1959).

[8] T. Washio and H. Motoda: Discovering Admissible Simultaneous Equations of Large Scale Systems, In Proc. of the Fifteenth National Conference on Artificial Intelligence (AAAI-98), pp.189-196 (1998).

[9] T. Washio, H. Motoda and Y. Niwa: Discovering Admissible Model Equations from Observed Data Based on Scale-Types and Identity Constrains, In Proc. of Sixteenth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-99), Vol.2, pp.772-779 (1999).

[10] Takashi Washio, Hiroshi Motoda and Yuji Niwa: Enhancing the Plausibility of Law Equation Discovery, In Proc. of the Seventeenth International Conference on Machine Learning (ICML-00), pp.1127-1134 (2000).

[11] Takashi Washio, Fuminori Adachi and Hiroshi Motoda: Discovering Time Differential Law Equations Containing Hidden State Variables and Chaotic Dynamics, In Proc. of Nineteenth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-05), pp.1642-1644 (2005)