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
大阪大学産業科学研究所

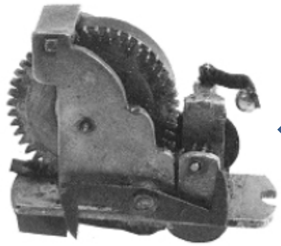
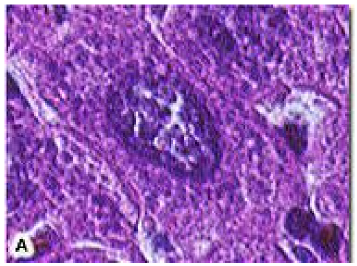
The 2nd Workshop on Latent Dynamics
June 22, 2011, Tokyo, Japan

システム内の機構

- システム内の機構の直接観測は難しい.
  - 機構・メカニズム

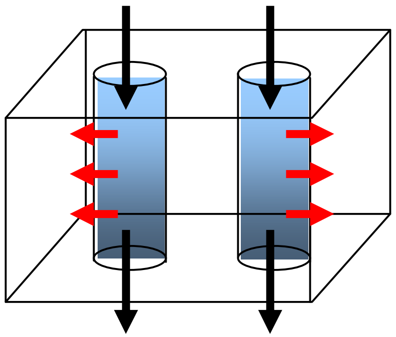
  （大辞林）機械の装置。仕掛け。メカ。物事の仕組み。組織。

  （Wiki）　構造、仕組み


からくり飛び蛙と内部　　細胞　　原子力プラント

- 観測変量関係から機構・その変化を推定する.



$H=H_1+H_2$

$\Delta T_1=T_f-T_{w1}$,　$\Delta T_2=T_f-T_{w2}$

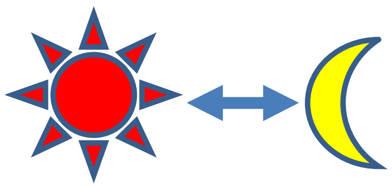
$h_1=\Delta T_1^{-1/4}\omega$,　$h_2=\Delta T_2^{-1/4}\omega$

$H_1=2\pi\gamma L h_1 \Delta T_1$,　$H_2=2\pi\gamma L h_2 \Delta T_2$

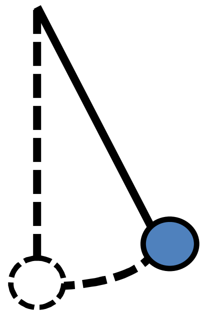
機構と同型な観測変量関係モデル

- システムの機構を表すモデルとは？
  - システムを構成する機構を表すモデルは観測変量同士の関係と同型な数学的関係式である.
  - 現実の制約を満たす数学的関係式のみが許容される.

- モデリングには数学的制約や背景知識制約によって許容される特殊な関係式を用いなければならない.



$$F = G\frac{M_1 M_2}{r^2}$$



$$\theta = \theta_{\max} \sin\{(g/\mathbf{l})^{1/2}(t-t_0)\}$$

科学的法則式発見システムの研究

- 数学的制約や背景知識制約に許容される範囲内で観測変量間の関係式を探索する.
  1980～90年代に人工知能関係の会議やジャーナル（IJCAI, AAAI, MLJなど）で盛んに発表された.

- BACON系：BACON, FAHRENHEIT, ABACUS, IDS, KEPLER
  - NP－困難，実験上のノイズや誤差に敏感
- 次元解析手法導入：求解のcomplexity減　COPER, ABACUS
  - 単位次元が不明の非物理系への適用困難

- しかし，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.

機械学習の枠組み

- 学習に用いるモデルの高い汎用性や汎化能力を得るため，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．

例）線形モデル，ニューラルネットワーク，SVR

- 前述の議論から必ずしも対象システムの機構をモデル化し，その変化を明示的に捉えるために適した方法とは言えないかも。

数学的制約のみを用いるモデリング

- 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，システムの機構を表すモデルを導出 [Washio IJCAI97]

- はじめに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．
- 次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．

観測変量に関する数学的制約

- 測定論(measurement theory)[S.Stevens 1946]
  - 比例尺度(ratio scale)
    - 絶対的原点を有し、測定値の比が不変(invariant)
    - 単位変換: Similarity group: x’ = kx
    - 質量、絶対温度、圧力、時間間隔、周波数、金額
  - 間隔尺度(interval scale)
    - 原点は任意で、測定値の差の比が不変(invariant)
    - 単位変換: Generic linear group: x’ = kx + c
    - 摂氏や華氏の温度、エネルギー、エントロピー、音程
  - {絶対尺度(absolute scale)}
    - 測定値自体が不変(invariant)
    - 単位なし: Identity group: x’ = x
    - ラジアン角、比率、流体力学のNusselt数・Reynolds数

観測変量に関する数学的制約

– 尺度間の数学的許容関係[R.D.Luce 1959]
  - 例えば2つの比例尺度量x, yの関係: y = log x

    ＝＞単位変換　x'=kx

    ＝＞ y' = log x + log k　（y'の比例尺度と矛盾）

Admissible Relation under Scale-Types

independent	dependent	admissible formula
x: ratio	y: ratio	$y=ax^b$
x: ratio	y: interval	$y=ax^b+c$ or $a \log x+b$
x: interval	y: interval	$y=ax+b$

観測変量に関する数学的制約

- 物理学における単位次元解析
  - 比例尺度に関する次元解析定理

    [Buckingham 1922, Buckingham 1914]

    - Product Theorem: x,y,…が比例尺度である時、それらの関係を表す関数ρは

      $\Pi=\rho\ (x,y,z,\ldots)=Cx^a y^b z^c\ldots$

      である。ただし、Πは従属変数、C,a,b,c,…は定数。
    - Buckingham Π-theorem: １つの完全制約式

      $\phi(x_1,x_2,\ldots x_n)=0$は、常に

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

      と書き換え可能である。ここでrは基礎単位の数、各Πは無次元量である。

観測変量に関する数学的制約

- スケールタイプ制約
  - 定理を間隔尺度に拡張[Washio IJCAI97]
    - **Extended Product Theorem:Rを比例尺度量の集合、Iを間隔尺度量の集合としたとき、それらの関係を表す関数ρは以下の何れかである。**

$$\Pi = \left(\prod_{x_i \in R} |x_i|^{a_i}\right)\left(\prod_{I_k \in C}\left(\sum_{x_j \in I_\kappa} b_{kj}|x_j| + c_k\right)^{a_k}\right)$$

$$\Pi = \sum_{x_i \in R} a_i \log|x_i| + \sum_{I_k \in C_{\bar{g}}} a_k \log\left(\sum_{x_j \in I_\kappa} b_{kj}|x_j| + c_k\right) + \sum_{x_m \in I_g} b_{gm}|x_m| + c_g$$

    - **Extended Buckingham Π-theorem:1つの完全制約式 $\phi(x_1,x_2,\ldots x_n)=0$ は、常に**
      $F(\Pi_1,\Pi_2,\ldots,\Pi_{n-r-s})=0$
      と書き換え可能である。ここでrは基礎単位の数、sは間隔尺度の基礎原点の数、各Πは無次元量である。

許容されるシステムモデルの構造

1つの完全制約式$\phi(x_1,x_2,\ldots x_n)=0$

Ensemble

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

Regime

$$\Pi=\left(\prod_{x_i\in R}|x_i|^{a_i}\right)\left(\prod_{I_k\in C}\left(\sum_{x_j\in I_\kappa} b_{kj}|x_j|+c_k\right)^{a_k}\right)$$

Regime

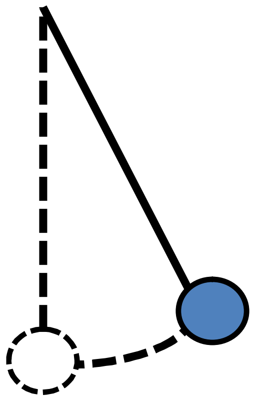
$$\Pi=\sum_{x_i\in R} a_i\log|x_i|+\sum_{I_k\in C_{\bar{g}}} a_k\log\left(\sum_{x_j\in I_\kappa} b_{kj}|x_j|+c_k\right)+\sum_{x_m\in I_g} b_{gm}|x_m|+c_g$$

Regime

$$\Pi=\left(\prod_{x_i\in R}|x_i|^{a_i}\right)\left(\prod_{I_k\in C}\left(\sum_{x_j\in I_\kappa} b_{kj}|x_j|+c_k\right)^{a_k}\right)$$

$$\Pi=\sum_{x_i\in R} a_i\log|x_i|+\sum_{I_k\in C_{\bar{g}}} a_k\log\left(\sum_{x_j\in I_\kappa} b_{kj}|x_j|+c_k\right)+\sum_{x_m\in I_g} b_{gm}|x_m|+c_g$$

Regime



$$\theta=\theta_{\max}\sin\{(g/\mathbf{l})^{1/2}(t-t_0)\}$$

Ensemble $\Pi_1=\sin(\Pi_2)$

Regime

$$\Pi_1=\theta\theta_{\max}^{-1}$$

Regime

$$\Pi_2=(g/\mathbf{l})^{1/2}(t-t_0)$$

Ensemble, Regimeとは？

- Ensemble：無次元量同士の関係

$$\Pi_1 = \sin(\Pi_2)$$

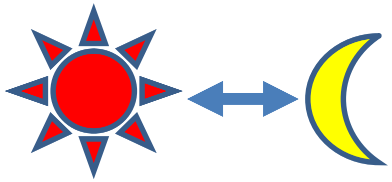
我々の測定方法や測定変数選択によらない不変な対象システムの構造

- Regime　：測定変量と無次元量の関係

$$\Pi_1 = \theta\theta_{\max}^{-1} \qquad \Pi_2 = (g/\mathbf{l})^{1/2}(t - t_0)$$

我々の測定方法や測定変数選択によって切り出した対象システムの構造

万有引力の法則式も1つのEnsembleでありRegimeでもある.



$$F = G\frac{M_1 M_2}{r^2} \Rightarrow 1 = GM_1 M_2 r^{-2} F^{-1}$$

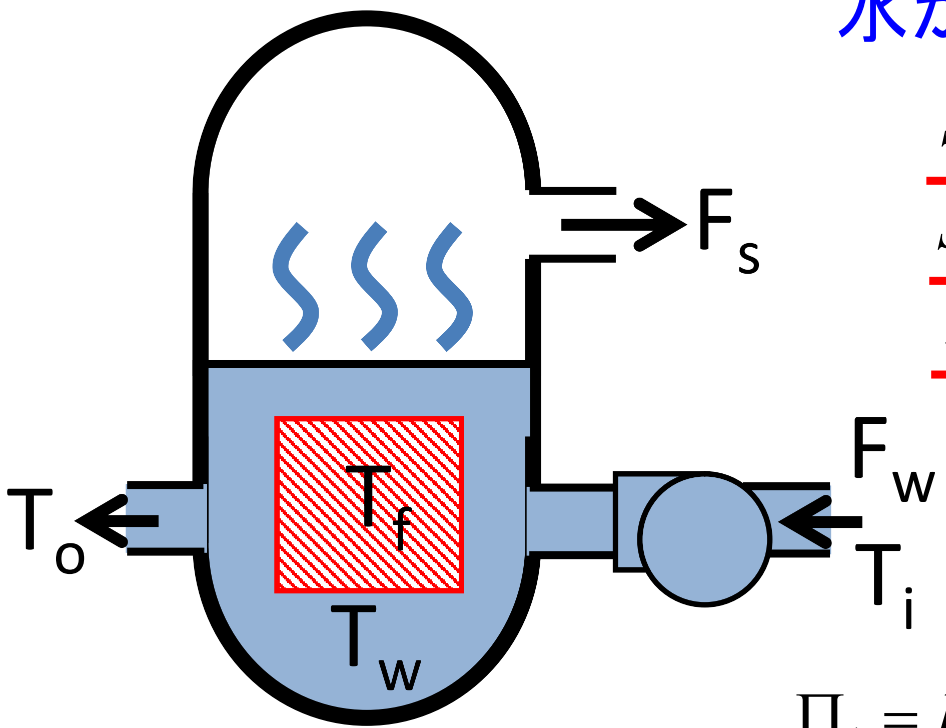
モデル式を導出するアルゴリズム

- 入力：観測データ
  観測変量の尺度，基礎単位・原点
- 出力：1本のモデル式の分解
  [Washio et al. IJCAI97,IJCAI99,ICML2000]
  連立方程式の分解
  [Washio et al. AAAI88,DS2000]
  連立微分方程式の分解
  [Washio et al. IJCAI05]

詳細は割愛

システム構造変化同定の可能性（1）

- システムを構成する機構の変化による構造変化の具体例



容器内熱源の水冷却

水が沸騰しておらず定常状態

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

$$S_f = C_w F_w (T_o - T_i)$$ （水温上昇）

$$T_w = (T_i + T_o)/2$$ （平均温度）

Ensemble $\Pi_1 = \Pi_2$

Regime

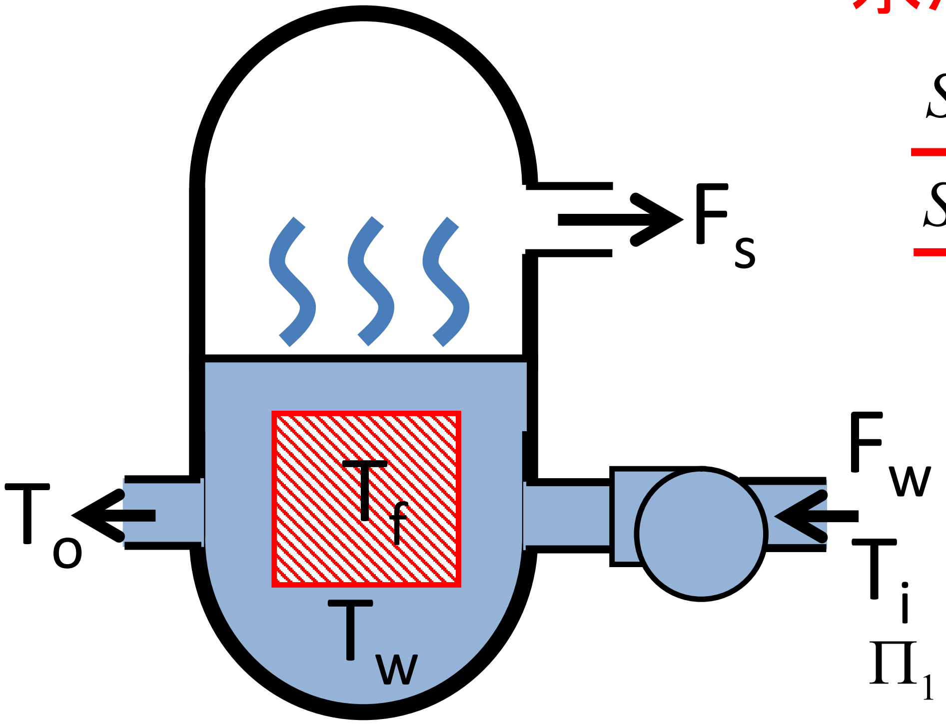
$$\Pi_1 = K_{fw} A_{fw} C_w^{-1} F_w^{-1}$$

Regime

$$\Pi_2 = (T_o - T_i)(T_f - T_i/2 - T_0/2)^{-1}$$

システム構造変化同定の可能性(2)

- システムを構成する機構の変化による構造変化の具体例



容器内熱源の水冷却

水が沸騰していてかつ定常状態

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

$$\underline{S_f} = C_w F_w (T_w - T_i) + C_w (F_w - F_s) T_w + H_s F_s$$ （水温上昇と蒸発）

Ensemble $1 = \Pi_1 \Pi_2 + \Pi_3$

Regime

$$\Pi_1 = K_{fw}A_{fw}C_w^{-1}F_w^{-1}$$

Regime

$$\Pi_2 = (2T_w - T_i)(T_f - T_w)^{-1}$$

Regime

$$\Pi_3 = F_s K_{kw}^{-1} A_{kw}^{-1} (H_s - C_w T_w)(T_f - T_w)^{-1}$$

まとめ

- 測定論や単位次元解析によって与えられる数学的許容制約を満たす対象システムのモデルが，その機構の変化によって分解構造を変化させる実例を示した.
- 一方，人工知能分野における過去の科学的法則式発見手法やその延長線上の研究成果によって、観測データから上記分解を同定する方法が得られている.
- 今後，上記の知見に基づき，対象システムの機構の変化を監視・同定する方法の研究が望まれる.