

# 統計数理

第71巻 第1号

(通巻137号)

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

## 目次

### 特集「諸科学における統計数理モデリングの拡がり」

「特集 諸科学における統計数理モデリングの拡がり」について 横山 雅之 .....	1
重力レンズ解析による宇宙暗黒物質地図と深層学習の応用 [研究詳解] 白崎 正人 .....	5
射影演算子法による統計的時系列データ解析とその応用 [原著論文] 前山 伸也・三分一 史和 .....	25
核融合プラズマ制御に向けたデータ同化システムの開発 [研究ノート] 森下 侑哉・村上 定義・横山 雅之・上野 玄太 .....	47
トレンド除去演算に基づくフラクタル時系列解析の数理 —非定常時系列にみられる $1/f^\beta$ 型ゆらぎ— [総合報告] 清野 健 .....	65
公開データベースを利用したヒト安静時脳活動研究 [研究詳解] 松井 鉄平・地村 弘二・李 鋭祥 .....	81

2023年6月

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3 電話 050-5533-8500(代)

本号の内容はすべて <https://www.ism.ac.jp/editsec/toukei/> からダウンロードできます

ISSN 0912-6112

統  
計  
数  
理

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

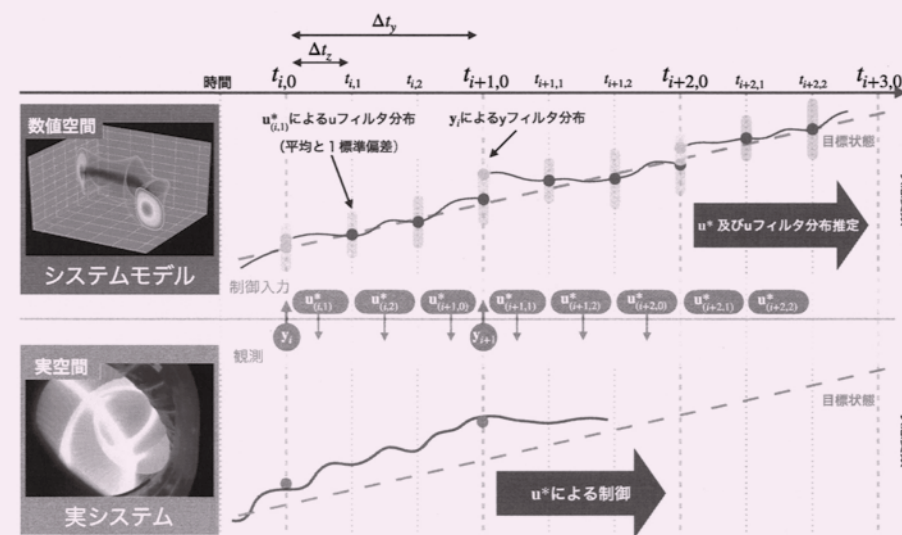
第71巻 第1号

2023

# 統計数理

Vol. 71, No. 1

PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS



統計数理研究所

# 統計数理

(年2回発行)

編集委員長 瀧澤 由美

編集委員 朴 堯星

逸見 昌之

村上 大輔

持橋 大地

吉本 敦

特集担当編集委員 菊地 和平

島谷 健一郎

矢野 恵佑

## 編集室

池田 広樹

川合 純華

長嶋 昭子

脇地 直子

「統計数理」は、統計数理研究所における研究成果を掲載する統計数理研究所「彙報」として1953年に歴史を始め、1985年に誌名を変更し今の形となりました。現在は、統計数理研究所の研究活動に限らず、広く統計科学に関する投稿論文を掲載し、統計科学の深化と発展、そして統計科学を通じた社会への貢献を目指しています。

投稿を受け付けるのは、次の6種です。

- a. 原著論文
- b. 総合報告
- c. 研究ノート
- d. 研究詳解
- e. 統計ソフトウェア
- f. 研究資料

投稿された原稿は、編集委員会が選定・依頼した査読者の審査を経て、掲載の可否を決定します。投稿規程、執筆要項は、本誌最終頁をご参照ください。

また、上記以外にも統計科学に関して編集委員会が重要と認める内容について、編集委員会が原稿作成を依頼することがあります。

その他、「統計数理」に関するお問い合わせは、各編集委員にお願いします。

All communications relating to this publication should be addressed to associate editors of the Proceedings.

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

統計数理研究所

〒190-8562 東京都立川市緑町10-3 電話 050-5533-8500(代)

<https://www.ism.ac.jp/>

© The Institute of Statistical Mathematics 2023

印刷：笹氣出版印刷株式会社

# PROCEEDINGS OF THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS

Vol. 71, No. 1

## Contents

### Special Topic: Expansion of Statistical-mathematical Modelling in Various Research Field

On the Special Topic "Expansion of Statistical-mathematical Modelling in Various Research Field" Masayuki YOKOYAMA .....	1
Mapping of Cosmic Dark Matter with Gravitational Lensing Analyses and Applications of Deep Neural Networks Masato SHIRASAKI .....	5
Statistical Analysis of Time-series Data Using the Projection Operator Method and Its Application Shinya MAEYAMA and Fumikazu MIWAKEICHI .....	25
Development of Data Assimilation System for Fusion Plasma Control Yuya MORISHITA, Sadayoshi MURAKAMI, Masayuki YOKOYAMA and Genta UENO .....	47
Mathematical Foundation of Detrending-operation-based Fractal Scaling Analysis Ken KIYONO .....	65
Recent Studies of Human Resting-state Brain Activity Using a Public Open Database Teppei MATSUI, Koji JIMURA and Ruixiang LI .....	81

表紙の図は本誌 55 ページを参照

June, 2023

Research Organization of Information and Systems

The Institute of Statistical Mathematics

10-3 Midori-cho, Tachikawa, Tokyo 190-8562, JAPAN

# 「特集 諸科学における統計数理モデリングの 拡がり」について

横山 雅之<sup>1,2</sup> (オーガナイザー)

私の統計数理研究所とのつながりは、統計思考院「共同研究スタートアップ事業」への申し込み(2017年度)から始まった。核融合プラズマの熱輸送と呼ばれる課題に関して、蓄積されたデータを統計視点で活用する方法はないか、プラズマ物理とは違った視点で解析することはできないか、という着想があったが、統計の素人が一人でやっても埒があかないということで、勇気を振り絞って申し込んだ。その日のうちに、統計思考院の清水邦夫先生からとても丁寧なお返事をいただき、統計数理研究所の敷居の高さのようなもの(私が勝手に感じていただけであるが)が一気に解消した。面談では、伊庭幸人先生、清水邦夫先生から、私にとって全く新しい視点でのアドバイスをいただき、その後複数回の相談を経て、学術論文として発表することができた。

この貴重な体験を、ぜひとも同僚にも味わってほしいということで、別課題でもスタートアップ事業に申し込んだ。さらに、核融合研究界の多様な課題に、蓄積されているデータを最大限活用することで答えや指針を導き出せるのではないかと、ということで、情報・システム研究機構の研究者交流促進プログラムに応募、採択していただき(2019年度)、半年間統計数理研究所に滞在させていただいた。そこで、統計思考院の菊地和平特任助教(以降、菊地さん)と意気投合し、「時系列データ」をテーマとした自発会合を企画したところ、データを持っている人(以降、諸科学側)、解析手法を主に研究をしている人(以降、統計数理側)の間での議論が予想以上に盛り上がった。閉会後に、諸科学側参加者から、「こういう機会を待っていたんですよ!」と言っただき、菊地さんとともに大いに喜んだことを鮮明に覚えている。

これらの実体験から、たくさんのデータは保有しているものの、それをどのように解析していいか考えあぐねている人、分野知識とは違った統計視点で解析してみたいと思っている人、さらに言えば、統計数理分野とつながるきっかけを探している人が多いことを強く認識した。

そこで、菊地さんと相談して、自発会合の枠を超えて、統計数理研究所の共同研究会として立ち上げることとし、2020年度は「諸科学における大規模データと統計数理モデリング」として採択していただいた。時系列データ自発会合同様に統計数理研究所に集まってワイワイやろうと目論んでいたが、残念ながら、コロナ禍により不可能となった。しかし、いち早く、オンライン開催にマインドを切り替え、しかも、短い日程に詰め込むのではなく、「一日一話題」で「連続開催」という開催形態とすることとした。オンラインの利便性を活用して、夏と冬の2回開催など、機動的な運営を行ってきている。振り返れば、これが幸いして、まさに諸科学分野から、多くの方に講演、および、気軽に参加していただき、さらに、講演後のフリーディスカッションも時間を気にすることなく行うことができた。13時に講演・質疑をいったん閉会し

---

<sup>1</sup> 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所六ヶ所研究センター：〒039-3212 青森県上北郡六ヶ所村大字尾敷字表館 2-166

<sup>2</sup> 統計数理研究所 客員：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

た後、15時頃までディスカッションを行った回もあった。また、そこでの情報交換から、「共同研究スタートアップ」への申し込みが行われた事例もあり、本特集号の中にもそこから展開した成果が含まれている。

この共同研究集会は、2021年度「諸科学における統計数理」(必ずしも大規模データである必要はない)、2022、2023年度「諸科学における統計思考」(思考にフォーカス)と少しずつ名称は変更しているものの、継続して開催している。さらに、私が所属する自然科学研究機構の分野融合事業ワークショップ(2021年度)「諸科学における大規模・多様なデータを基盤としたデータ駆動型研究の萌芽・推進のためのワークショップ」(データ生産・保有側の視点)、(2022年度)「諸科学における統計思考～分野横断の取り組みへ～」(統計思考を基軸とした諸科学分野融合への出口戦略を模索)とのジョイント開催として、さらに多様な分野からの講演勧誘を行った。

このような活動が、今般の統計数理特集号につながったことは望外の喜びである。諸科学と統計数理の融合が生み出した成果であると考ええる。

白崎論文は、大規模な銀河撮像観測データの重力レンズ解析(重力レンズ効果により生じる銀河のわずかな歪みから視線方向にある暗黒物質の存在量を推定)に深層学習を応用して、暗黒物質の正体解明にとって重要な「暗黒物質地図」を明らかにしようとする最近の研究の興隆について、その最前線にいる立場から解説している。前山論文は、射影演算子法の定式化を再訪しつつ、連続時間および離散時間システムへの拡張を行うとともに、その応用例としてプラズマ乱流による構造形成・維持過程を一般化 Langevin 方程式として捉える解釈の提案とその根拠を述べている。森下論文は、核融合プラズマの制御に向けて、既存のデータ同化の枠組みにはなかった制御の要素を含む新たなデータ同化フレームワークの開発について、その数値実験による有効性検証とともにまとめている。清野論文は、物理学や生態信号などで頻繁に現れる非定常なトレンド成分を含む時系列データに対して、R、Python のパッケージ化により簡単に利用できるようになっている解析手法：DFA (Detrended Fluctuation Analysis) の数理的基礎を多くの事例を紹介しながら解説している。松井論文は、大規模な脳活動データベースを共通基盤とした神経科学と数理統計の連携により、従来の心理学や神経科学による描像が、統計的な検証からは必ずしも導かれられない可能性があることを例示しつつ、まさに分野連携が今後の研究進展に重要な役割を果たすことへの期待を述べている。

この特集号への投稿依頼を行う際の留意事項からいくつか抜粋する。(原文ママ：本特集号へ菊地さんの思いが詰まっている。)

- 統計数理モデリング手法を横糸にして、諸分野から様々な研究話題が提供されます。そのため、幅広い読者が手に取ってくれるものとなります。本特集号を通して、統計数理を専門とする研究者層と諸分野間の「分野を超えた新たな研究連携の端緒」となる企画を目指しております。
- 執筆に際しては分かり易く記述することをお願いいたします。例えば専門用語には詳しい説明をつけていただく等ご配慮ください。
- 研究に用いているデータや規模感、データを特徴づける記載、そのデータの扱い方、統計解析手法等について詳しく書いていただけますと幸いです。
- できればご自身の分野またはご自身の研究についての問題提起をお願いいたします。何が今できていないのか、どのような統計手法が必要とされているのか、統計分野との協働の可能性等、今後につながる話題を提供していただけますと幸いです。

本特集号の各著者は、このような視点を大事にして執筆いただいている。その意図が読者の皆様に伝われば幸いである。また、読者の中から、2023年度の共同研究集会で講演やその後

の分野融合活動が興ることも大いに期待している。

統計数理研究所共同研究集会の歴代の所内受入教員である，野村俊一先生，矢野恵佑先生，さらに，本特集号のオーガナイザーとしてもご尽力いただいた島谷健一郎先生に感謝申し上げます。また，諸科学のデータと統計数理の手法が融合した各文献に対して，査読を引き受けていただいた皆様にお礼申し上げます。そして，時系列データ自発会合以降，私が統計数理研究所を舞台として行わせていただいた全ての活動に関して，様々なアイデアを出して献身的に協力して下さった菊地さん(誠に残念ながら，昨年 11 月に急逝されました)に心から感謝するとともに，ご冥福をお祈りいたします。この特集号が無事に刊行されたこと，さらに次の発展への契機となることを天国から喜んでくれていると思います。

# 重力レンズ解析による宇宙暗黒物質地図と 深層学習の応用

白崎 正人<sup>1,2</sup>

(受付 2022 年 5 月 10 日 ; 改訂 6 月 23 日 ; 採択 7 月 6 日)

## 要 旨

大規模な天文観測データの解析により、我々の宇宙には光で直接検出できない(あるいは非常に検出が難しい)物質が存在することが示唆されている。そのような物質は宇宙暗黒物質と呼ばれ、過去から現在まで宇宙の至る所に遍く存在する一方で、その存在は既存の物理学の範疇では説明できない。暗黒物質の正体を解明するために、暗黒物質が宇宙のどこにどれくらい集まっているか—暗黒物質地図—を観測的に明らかにすることは重要である。光で観測することが難しい暗黒物質の地図を描くための有力な手法として、重力レンズ解析が近年注目を集めている。重力レンズ効果とは、遠方にある銀河などの天体の像が、観測者と天体の間に存在する物質の重力によって歪むという一般相対性理論によって予言される現象である。現在、世界各地で進む銀河撮像観測では、重力レンズ効果により生じる銀河のわずかな歪みから視線方向にある暗黒物質の存在量を推定する重力レンズ解析が精力的に行われている。本稿では、現代宇宙論の概要、重力レンズ解析の基礎的な事項をまとめ、近年特に盛り上がりを見せている重力レンズ解析における深層学習の応用について、筆者らの最近の研究内容を交えながら解説する。

キーワード：宇宙暗黒物質、重力レンズ、深層学習、生成モデル、敵対的生成ネットワーク。

## 1. 現代宇宙論の概要

20 世紀初頭にアルベルト・アインシュタインによって発表された一般相対性理論(一般相対論)と呼ばれる物理理論は、我々の宇宙観を大きく変えた。一般相対論では、時間と空間で構成される 4 次元時空は、単なる容器ではなく、動的に進化する物理的な実体とみなされる。宇宙に存在する物質によって、4 次元時空はその形を変え、万有引力として知られていた重力は、時空の歪みとして記述される。エネルギーと 4 次元時空の曲率を結ぶ重力方程式は、アインシュタイン方程式と呼ばれ、宇宙全体の進化を議論する上で基本となる。

宇宙には特別な場所も方向もないという一般的な要請を課すと、アインシュタイン方程式には宇宙が膨張したり収縮するという驚くべき解を見つけることができる。さらに驚くべきは、この解は単なる数学的な産物ではなく、実際に宇宙が膨張していることが観測により明らかになったことだろう。我々から距離  $d$  だけ離れた天体の後退速度  $v$  は、 $v \propto d$  という比例

<sup>1</sup> 国立天文台 研究力強化戦略室：〒181-8588 東京都三鷹市大沢 2-21-1

<sup>2</sup> 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

法則(ハッブル・ルメートルの法則)に従うことが観測的に知られている(著名なレビュー論文として Freedman and Madore, 2010 がある). 宇宙が膨張している観測事実に基づくと、過去の宇宙に存在していた物質は、現在と比べてより高温で高密度の状態であったと考えられる(Gamow, 1946). 宇宙が高温・高密度状態で始まったとするビッグバン宇宙モデルは、過去の宇宙では、あらゆる物質は電離しプラズマとなり、光と物質は頻繁に起こる相互作用により局所的に熱平衡状態を保っていたことを予言する. この“火の玉”状態の過去の宇宙を満たしていた光は、現在マイクロ波(波長2ミリメートル程度の電磁波)における天文観測によって実際に観測されている. 宇宙マイクロ波背景放射(Cosmic Microwave Background; CMB)として知られる火の玉宇宙の残光は、どの方向から見てもほぼ同じ強度で我々に届き、光のスペクトルは約2.7ケルビンの黒体放射で説明できる. 等方的な黒体放射のスペクトルは、ビッグバン宇宙モデルの基本的な予言の一つである(Alpher and Herman, 1948, 1949). CMBの発見(Penzias and Wilson, 1965)により、アーノ・ペンジアスとロバート・W・ウィルソンは1978年にノーベル物理学賞を受賞している.

CMBには、標準偏差で10万分の1程度の非等方性があることも知られている. 非等方性は、CMBが放たれた過去の宇宙で物質密度に濃淡があったことを示している. 過去の宇宙に存在したわずかな物質密度の偏りを考えると、高密度の領域にはより多くの物質が重力によって集積していくことが予想される. 膨張する宇宙での物質の重力進化の歴史は、CMBによって予想される物質密度の偏りを初期条件にして数値計算によって精密に予言することができる. 数値計算によって予言される物質密度の姿は、図1に示している. 138億年の重力進化を経て、宇宙に存在する物質は網の目状のネットワークを構成し、網の目の節の部分には平均密度の数百倍という高密度領域が現れる. 同時に、単位体積あたりでみると、ほとんどの領域は物質が希薄にしかない低密度領域となっている. 同様の網の目構造は、銀河の空間分布にも現れる. 差し渡し100 Mpc(メガパーセク)の巨大構造は、宇宙大規模構造と呼ばれ、我々の宇宙に存在する最も大きな構造物の一つである. なお、パーセク(pc)は天文学でしばしば用いられる距離単位で、1 pcは $3.09 \times 10^{13}$  kmに対応する. メガパーセクは $10^6$  パーセクを意味する.

CMBの非等方性の様子は、プラズマと光からなる流体に生じる疎密波が、宇宙全体を伝わっ

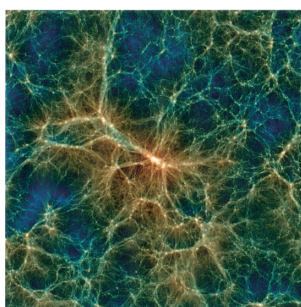


図1. CMB観測で示唆される物質分布の偏りを初期条件にして、物質密度を重力的に進化させる数値シミュレーション結果の一例(Ishiyama et al., 2021). シミュレーションでは膨張する立方体の中を運動する点粒子の重力相互作用を数値的に解くことで、宇宙大規模構造の形成を予言する. ここに示すシミュレーションは、粒子数 $12800^3$ を使った世界最大規模のものである. 図中の白色の領域は高密度領域、暗い色の領域は低密度領域を示している. 図の一辺は約370 Mpcで奥行き方向37 Mpcを投影した宇宙大規模構造が示されている. 図の中心には、1000個程度の銀河が5 Mpc程度の局所的な領域に集中する天体である“銀河団”が形成していることが予想される.

ていく過程を記述する一般相対論的ボルツマン方程式を解くことで、正確に予想できる (e.g. Kodama and Sasaki, 1984; Hu et al., 1997; 小松英一郎, 2019). 20 世紀後半から現在までに、地上望遠鏡と衛星望遠鏡を用いた CMB の非等方性の観測は精力的に行われ、非等方性の球面調和解析と物理モデルの詳細な比較が行われている (e.g. Hinshaw et al., 2013; Aghanim et al., 2020; Choi et al., 2020). 現在までの CMB 観測をもっともよく説明する物理モデルでは、陽子や電子、水素などの通常の物質以外に、重力的にのみプラズマ流体と相互作用する仮想的な物質を必要とする. この仮想的な物質は、暗黒物質と呼ばれ、宇宙全体で通常物質のおよそ 5 倍程度多く存在している必要がある. また、重力相互作用のみをもつ暗黒物質が存在しなければ、銀河などの我々が観測できる天体を形成できないことは理論的に明らかになっている (e.g. Yamamoto et al., 1998; Yoshida et al., 2003). 同時に、暗黒物質は、大小様々な実際の銀河周辺にも存在していることが、銀河内部の星やガスの運動に基づく解析からも示唆されている (最近のレビュー論文として Salucci, 2019, がある). 過去から現在に至るまで遍く存在する暗黒物質は、残念ながら標準素粒子モデルに対応物を持たない. 暗黒物質の正体解明は、現代物理学最大の難問であると同時に、「我々はどこからきたのか?」という人類共通の根本的な問いと密接に関連する興味深い問題である. 暗黒物質がなければ、十分な始原ガスが膠着することで銀河を作ることがない. 銀河ができないということは、自ら光り輝く太陽などの恒星も生まれず、太陽を周回する地球のような惑星も生まれない. 当然ながら、惑星に住む我々人類もこの宇宙に誕生しないことになる.

本稿では、暗黒物質の正体解明のために本質的に重要な暗黒物質の地図を、どのように作成するかに焦点を当てる. 重力相互作用のみをもつ暗黒物質は、それ自身光を発しないので、通常の天文観測で直接検出することは困難を極める. ここでは、暗黒物質の直接検出の有力な手段の一つである「重力レンズ解析」を紹介し、解析に必要な基礎的な事項をまとめる. さらに、近年のデータ科学の進展に伴って盛り上がりを見せる深層学習の応用という観点から、我々の最近の研究成果を交えながら、暗黒物質地図作成の最先端の話題に触れる.

## 2. 重力レンズ効果

重力レンズ効果とは、遠方にある天体から届く光の軌跡が、天体と観測者の間にある物質がつくる重力場によって変化する現象を指す. 一般相対論によれば、重力源が存在すると時空は歪む. 天体から発せられた光線は、歪んだ時空を“まっすぐ”進むため、重力源がない場合と比べると軌跡が変化する. 重力レンズ効果による光線の軌跡の典型的な曲がり角  $\alpha$  は、重力源となる天体の質量  $M$ 、衝突係数  $b$  とすると、次のように書き表せる.

$$(2.1) \quad \alpha = \frac{4GM}{c^2 b}.$$

ここで、 $G$  は万有引力定数、 $c$  は光速である. 具体例として、太陽表面をかすめる星の像がどれほど重力レンズ効果によりずれるかを見積もってみると、 $b = 6.96 \times 10^{10}$  cm,  $M = 1.989 \times 10^{33}$  g を式 (2.1) に代入して、 $\alpha \simeq 1.75$  秒角 (1 秒角は、3600 分の 1 度と等しい) を得る. この曲がり角をアーサー・エディントンが 1919 年に日食を利用して観測し、一般相対論の検証を行ったことは有名である (Eddington, 1920). 重力源の近くを通過する光は、常に重力源に引き寄せられるようにその軌跡を変化させるため、見かけ上重力源はレンズのようにふるまう. これが重力レンズ効果と呼ばれるゆえんである.

重力レンズ効果は、天体と観測者との間に存在する全ての重力源によって引き起こされる. 本稿では、特に宇宙大規模構造が起こす重力レンズ効果に着目する. 宇宙大規模構造によって生じる重力レンズ効果は、コスミックシアア (Cosmic Shear) と呼ばれ、角度的に離れた別々の



銀河が、手前にある大規模構造の重力場を通じてコヒーレントに歪む現象を引き起こす。大規模構造のように広がった質量分布による重力レンズ効果は、弱い重力場で揺らぐ4次元時空を通過する光線が従う測地線方程式を解くことで定量化することができる（著名なレビュー論文として Bartelmann and Schneider, 2001 がある）。

光線の軌跡が十分に小さい見込み角でのみ変化する場合、光線の位置ベクトルは、視線方向の距離  $\chi$  と角度ベクトルによって  $\boldsymbol{x} = (\chi\theta_1, \chi\theta_2, \chi)$  と書ける。この時、大規模構造が作る重力ポテンシャル  $\Phi$  による摂動を受けた角度ベクトル  $\theta_i$  ( $i = 1, 2$ ) と、摂動の影響を受けていない仮想的なベクトル  $\beta_i$  ( $i = 1, 2$ ) との間に、以下のような方程式が成り立つ。

$$(2.2) \quad \beta_i = \theta_i - \frac{2}{c^2} \int_0^{\chi} d\chi' \frac{\chi - \chi'}{\chi} \frac{\partial \Phi}{\partial (\chi' \theta_i)}.$$

式(2.2)は、大規模構造による重力レンズ効果を解析する上で最も基本的な方程式である。なお、式(2.2)は、一様宇宙全体の曲率はない平坦な時空の仮定のもとに導かれる。この仮定はCMB観測により精密に検証され、良い近似であることが知られている (e.g. Aghanim et al., 2020)。さて、摂動を受けていない天体の位置は観測できないので、大規模構造が起こす重力レンズ効果による曲がり角の絶対値は通常観測量ではない。一方で、重力レンズ効果による天体像の変化分は観測可能である(3章で詳しく議論する)。重力レンズ効果による天体像の歪みが十分に小さい場合には、以下のような  $2 \times 2$  の歪み行列によって天体像の歪みを記述することができる。

$$(2.3) \quad A_{ij} = \frac{\partial \beta_i}{\partial \theta_j} \equiv \begin{pmatrix} 1 - \kappa - \gamma_1 & -\gamma_2 \\ -\gamma_2 & 1 - \kappa + \gamma_1 \end{pmatrix}.$$

ここで、 $\kappa$  は収束場 (convergence),  $\gamma_i$  ( $i = 1, 2$ ) は歪み場 (shear) と呼ばれる無次元量である。歪み行列の視覚的な意味をみるには、摂動を受けていない像として単位円  $\beta^T \beta = 1$  を満たす場合を考えると良い。この時、重力レンズ効果を受けた像  $\boldsymbol{\theta}$  では、

$$(2.4) \quad \boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{\theta} = 1,$$

が成り立つ。式(2.4)を代数計算によって変形すると、

$$(2.5) \quad \boldsymbol{s}^T \begin{pmatrix} \lambda_- & 0 \\ 0 & \lambda_+ \end{pmatrix} \boldsymbol{s} = 1,$$

$$(2.6) \quad \boldsymbol{s} = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi \\ \sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix} \boldsymbol{\theta},$$

$$(2.7) \quad \lambda_{\pm} = 1 - \kappa \pm (\gamma_1^2 + \gamma_2^2)^{1/2},$$

$$(2.8) \quad \psi = \tan^{-1} \left( \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right),$$

を得る。よって、重力レンズ効果を受けた円形の像は、角度  $\psi$  だけ傾いた楕円として観測される。

収束場と歪み場は、式(2.2)と(2.3)から、

$$(2.9) \quad A_{ij} = I_{ij} - \Phi_{ij},$$

$$(2.10) \quad \Phi_{ij} \equiv \frac{2}{c^2} \int_0^{\chi} d\chi' \frac{(\chi - \chi')\chi'}{\chi} \frac{\partial \Phi}{\partial (\chi' \theta_i) \partial (\chi' \theta_j)},$$

となることから、重力ポテンシャルの二階微分と関係がある。特に、収束場は、膨張宇宙にお

けるポアソン方程式を介して、物質密度と関係づけられる。光線の軌跡が受ける重力レンズ効果は小さいとして、曲がり角の二次以上の効果は無視すると、式(2.10)における重力ポテンシャルの二階微分は摂動を受けていない位置ベクトル  $\chi'\beta$  を使い計算することができて、以下の表式を得る (Jain et al., 2000)。

$$(2.11) \quad \kappa = \frac{1}{2} (\Phi_{11} + \Phi_{22}) \simeq \frac{4\pi G}{c^2} \int_0^{\chi} d\chi' \frac{(\chi - \chi')\chi'}{\chi} [\rho(\mathbf{x}, t_{|\chi'}) - \bar{\rho}(t_{|\chi'})] a^2(t_{|\chi'}).$$

ここで、 $\mathbf{x} = (\chi'\theta_i, \chi'\theta_j, \chi')$ 、 $\rho(\mathbf{x}, t)$  は時刻  $t$  における 3 次元物質密度、 $\bar{\rho}(t)$  は時刻  $t$  における平均物質密度、 $a(t)$  は膨張宇宙では単位長さが時刻とともに変わる効果を記述する無次元因子である。光速度が有限であることから、時刻  $t$  と視線方向の距離  $\chi$  は独立変数とならず、 $\chi$  は  $t$  に関する依存性を持つため、式(2.11)では  $\chi'$  に対応する時刻として  $t_{|\chi'}$  と書いている。さて、式(2.11)は、収束場を観測することができれば、宇宙大規模構造を投影した地図を描くことができることを意味する。式(2.11)に現れる物質密度は、それ自体が光を発しているかどうかに関係である。よって、重力レンズ効果による観測で収束場の地図を描くことができれば、光を発しない暗黒物質が多数を占める宇宙全体の物質分布の空間的な情報が入手できる。

一般に大規模構造の重力レンズ効果の検出は難しいが、重力レンズ効果には特徴的な天体像の歪みのパターンがある。この特徴的な歪みのパターンをみるために、ある特定の空の位置を原点とする極座標系  $(\theta_1, \theta_2) = (\theta \cos \phi, \theta \sin \phi)$  を導入する。この座標系で、 $e_i$  を  $\theta_i$  方向の単位ベクトルとして、歪み場の正負は通常次のように定義する。

$$(2.12) \quad \begin{cases} \gamma_1 > 0, \gamma_2 = 0 & (\text{像の長軸が } e_1 \text{ に向いている場合}) \\ \gamma_1 < 0, \gamma_2 = 0 & (\text{像の長軸が } e_2 \text{ に向いている場合}) \\ \gamma_2 > 0, \gamma_1 = 0 & (\text{像の長軸が } e_1 + e_2 \text{ に向いている場合}) \\ \gamma_2 < 0, \gamma_1 = 0 & (\text{像の長軸が } e_1 - e_2 \text{ に向いている場合}) \end{cases}$$

この定義は、歪み場が  $180k$  度 ( $k$  は任意の整数) の座標回転について不変になる性質による。式(2.10)から、極座標系での収束場と歪み場は、以下のように与えられる。

$$(2.13) \quad \kappa = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{1}{\theta^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right),$$

$$(2.14) \quad \gamma_t = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} - \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \frac{1}{\theta^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \right),$$

$$(2.15) \quad \gamma_{\times} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \right),$$

ここで、 $\gamma_t$  と  $\gamma_{\times}$  は、角度  $\phi$  を使って以下のように定義される。

$$(2.16) \quad \gamma_t \equiv -\gamma_1 \cos 2\phi - \gamma_2 \sin 2\phi,$$

$$(2.17) \quad \gamma_{\times} \equiv \gamma_1 \sin 2\phi - \gamma_2 \cos 2\phi.$$

定義(2.12)によって、原点を中心とする円の接線に像の向きが並行になる場合  $\gamma_t > 0$ 、 $\gamma_{\times} = 0$  となる。観測量  $X$  について、円環平均

$$(2.18) \quad \langle X \rangle(\theta) = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} X(\theta, \phi),$$

を考えると、 $\partial \Phi / \partial \phi$  の円環平均が 0 になることを使えば、

$$(2.19) \quad \langle \gamma_{\times} \rangle = 0,$$

が成り立つ。これは、円環についての平均を取れば、重力レンズ効果によって引き起こされる像の歪みは常に  $\gamma_\ell$  のみが物理的に意味があることを表す。また、任意の点で  $\langle \gamma_x \rangle = 0$  になるかどうかを確認することで、観測データに重力レンズ効果以外の系統的な誤差が混入していないかを確認できる。

式(2.11)に見られるように、収束場の測定は宇宙物理学上重要であるが、収束場は天体像の拡大と縮小を記述する量(式(2.3)で  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$  とすれば明らか)であるから、直接測定することは難しい。一方で、歪み場には重力レンズ効果特有のパターンがあり、実際の観測データから測定することが可能である。収束場と歪み場の間には、式(2.10)に見られる関係があり、両者とも重力ポテンシャルという単一の物理量から生じる。歪み場と収束場の間の関係は、フーリエ変換

$$(2.20) \quad \bar{\kappa}(\ell) = \int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta \kappa(\theta) \exp(i\ell \cdot \theta),$$

を施した後は、比較的単純で

$$(2.21) \quad \bar{\kappa}(\ell) = \tilde{\gamma}_1(\ell) \cos 2\phi_\ell + \tilde{\gamma}_2(\ell) \sin 2\phi_\ell,$$

となる。ここで、 $\tilde{\gamma}_i$  は  $\gamma_i$  のフーリエ変数、二次元波数ベクトル  $\ell = (\ell \cos \phi_\ell, \ell \sin \phi_\ell)$  とした。式(2.21)の実空間への逆変換は、Kaiser and Squires (1993) などにより与えられていて、複素数  $\gamma = \gamma_1 + i\gamma_2$  について、

$$(2.22) \quad \kappa(\theta) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta' \operatorname{Re} [\mathcal{D}^*(\theta - \theta') \gamma(\theta')],$$

$$(2.23) \quad \mathcal{D}(\theta) = \frac{\theta_1^2 - \theta_2^2 + 2i\theta_1\theta_2}{|\theta|^4},$$

となる。

### 3. 銀河撮像観測と重力レンズ効果の推定

2章にまとめた大規模構造による重力レンズ効果を測定するにはどうしたらいいだろうか。まず注意すべきことは、重力レンズ効果による歪みの大きさは極めて小さいことである。典型的な歪みの大きさは、天体の形状を数パーセント歪める程度で、個別の天体について重力レンズ効果を検出するのは至難の技である。一方、大規模構造による重力レンズ効果では、高密度領域を中心とする円の接線方向に像の向きが揃う傾向にあるため、このコヒーレントな歪みのパターンの検出を目指すことが現実的と考えられる。よって、コスミックシアアの検出のためには、大量の銀河の写真を取り、それぞれの銀河の形状を測定しつつ、コスミックシアア特有の歪みパターンを検出するための統計処理が必要となる。大量の銀河の撮像を行うサーベイ観測は銀河撮像観測と呼ばれ、世界各地で盛んに進められている。現時点で運用が終了した銀河撮像観測と、将来の銀河撮像観測について表1にまとめておく。基本的にこれらの銀河撮像観測の主要な科学目標には、コスミックシアアの統計的な検出とその宇宙物理学上の応用が含まれている。例えば、日本では、国立天文台が運用するすばる望遠鏡を用いた銀河撮像観測が行われた。高さ3メートル、重さ3トンの巨大な撮像カメラの名前をとって「Subaru Hyper-Suprime Cam Survey」と名付けられた撮像観測(通称HSC計画)は、2021年度をもって当初の観測計画を終えた。HSC計画では、最終的に1250平方度の観測視野内の約1億の銀河の撮像データを用いて、重力レンズ効果の検出と宇宙大規模構造の進化に関する研究が進められる予定である。ちなみに、観測データが出そろったとしても、解析にはかなりの時間を要す

表 1. 現在までに運用が終了した, あるいは将来計画されている主要な銀河撮像観測. KiDS, DES, HSC が運用終了, Rubin Observatory と Euclid が 2023 年, Roman Space Telescope が 2027 年に運用開始予定となっている. 観測領域が大きいほど, 長距離間の重力レンズ解析の統計誤差は小さくなり, 数密度が大きいほど, 短距離間の解析に有利となる. 地上望遠鏡は, 大気ゆらぎの影響による系統誤差があるが, 一夜ごとに撮像できる銀河の数は多い. 衛星望遠鏡では, 大気ゆらぎの影響がない測定が可能であるが, 大規模な観測を行うための長期運用は一般に困難である. 観測波長帯域が多いと, 銀河の距離決定精度が高くなる. 正式名称は, ♣Kilo-Degree Survey, ♠Dark Energy Survey, ♡Subaru Hyper Suprime-Cam Survey である.

観測名	観測領域 (deg <sup>2</sup> )	銀河の数密度 (deg <sup>-2</sup> )	その他の特徴
KiDS♣	1350	$3.2 \times 10^4$	現時点で観測波長帯域が最多. ヨーロッパ諸国主導.
DES♠	5000	$2.5 \times 10^4$	現時点で最も広視野. 米国主導.
HSC♡	1250	$7.2 \times 10^4$	現時点で最も暗い銀河まで解析. 日本主導.
Rubin Observatory	18000	$9.4 \times 10^4$	地上望遠鏡を用いた観測. 米国主導.
Euclid	15000	$1.0 \times 10^5$	衛星望遠鏡による観測. ヨーロッパ諸国主導.
Roman Space Telescope	2200	$1.6 \times 10^5$	衛星望遠鏡による観測. 米国主導.

る. 例えば, HSC 計画初年度の重力レンズ解析では, 最終的に取得するデータ全体の 10% 程度のデータ量であったにも関わらず, 解析を終えて公表するためのゴーサインが出たのは, データを取得して 2.5 年後であった (e.g. Hikage et al., 2019).

ここで, 実際の観測データからどのように重力レンズ効果の歪み場を測定するのかをまとめておく. 観測される天体の表面輝度を  $f(\theta)$  とすると, 像の中心は実用上次のように計算される.

$$(3.1) \quad \bar{\theta}_i \equiv \frac{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta \theta_i W(|\theta|) f(\theta)}{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta W(|\theta|) f(\theta)}.$$

ここで,  $W(|\theta|)$  は天体の像の大きさをどこまでとるかを定める重み関数である. 同様に二次のモーメントは,

$$(3.2) \quad Q_{ij}^{(\text{obs})} \equiv \frac{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta (\theta_i - \bar{\theta}_i)(\theta_j - \bar{\theta}_j) W(|\theta|) f(\theta)}{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta W(|\theta|) f(\theta)},$$

と書ける. 観測される天体の位置は重力レンズ効果を受けていて, 重力レンズ効果を受けていない位置とは異なる. 一方で, 重力レンズ効果は光子数を保存する過程であるので, 重力レンズ効果の有無によって表面輝度は変更しない. 重力レンズ効果を受けていない天体の像を決めるベクトル  $\beta$ , 本来の表面輝度を  $f^s(\beta)$  と書くと,

$$(3.3) \quad f(\theta) = f^s(\beta),$$

が成り立つ. このことに注意すると, 本来の表面輝度についての二次モーメントは, 式(2.3)を用いて,

$$(3.4) \quad \begin{aligned} Q_{ij}^{(s)} &= \frac{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\beta (\beta_i - \bar{\beta}_i)(\beta_j - \bar{\beta}_j) W(|\beta|) f^s(\beta)}{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\beta W(|\beta|) f^s(\beta)} \\ &= \frac{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta |\det \mathbf{A}| \sum_{k,\lambda} A_{ik}(\theta_k - \bar{\theta}_k) A_{j\lambda}(\theta_\lambda - \bar{\theta}_\lambda) W(|\mathbf{A}\theta|) f(\theta)}{\int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta |\det \mathbf{A}| W(|\mathbf{A}\theta|) f(\theta)} \\ &\simeq \sum_{k,\lambda} A_{ik} Q_{k\lambda}^{(\text{obs})} A_{j\lambda}, \end{aligned}$$

となる．ここで、式(3.4)の最後の等号では、大規模構造による重力レンズ効果は、天体像の大きさの範囲で変化しないとして、歪み行列は像の中心で評価できるとした．さて、天体の形状を表す観測量として、楕円率を以下のように定義しよう．

$$(3.5) \quad \epsilon_1^{\text{obs}} = \frac{Q_{11}^{(\text{obs})} - Q_{22}^{(\text{obs})}}{Q_{11}^{(\text{obs})} + Q_{22}^{(\text{obs})}}, \quad \epsilon_2^{\text{obs}} = \frac{2Q_{12}^{(\text{obs})}}{Q_{11}^{(\text{obs})} + Q_{22}^{(\text{obs})}}.$$

式(3.4)と定義(3.5)を用いると、重力レンズ効果を受けていない円形の天体(i.e. 楕円率が元々0の天体)は、重力レンズ効果によって、

$$(3.6) \quad \epsilon_1^{\text{obs}} = \frac{2(1-\kappa)\gamma_1}{(1-\kappa)^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2}, \quad \epsilon_2^{\text{obs}} = \frac{2(1-\kappa)\gamma_2}{(1-\kappa)^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2},$$

という楕円率を持つことがわかる．一般に、重力レンズ効果を受けていない天体の固有楕円率が $(\epsilon_1^s, \epsilon_2^s)$ のとき、観測される楕円率は式(3.4)に注意すると、 $\delta_i = 2(1-\kappa)\gamma_i / ((1-\kappa)^2 + \gamma_1^2 + \gamma_2^2)$ として、

$$(3.7) \quad \epsilon_1^{\text{obs}} = \frac{\epsilon_1^s + \delta_1 + (\delta_2/\delta^2)[1 - (1-\delta^2)^{1/2}](\delta_1\epsilon_2^s - \delta_2\epsilon_1^s)}{1 + \delta_1\epsilon_1^s + \delta_2\epsilon_2^s},$$

$$(3.8) \quad \epsilon_2^{\text{obs}} = \frac{\epsilon_2^s + \delta_2 + (\delta_1/\delta^2)[1 - (1-\delta^2)^{1/2}](\delta_2\epsilon_1^s - \delta_1\epsilon_2^s)}{1 + \delta_1\epsilon_1^s + \delta_2\epsilon_2^s},$$

$$(3.9) \quad \delta^2 = \delta_1^2 + \delta_2^2$$

と書き表せる (Miralda-Escude, 1991)．実際の銀河撮像観測では、観測される楕円率の標準偏差は0.4程度であり、重力レンズの効果による楕円率はせいぜい $\delta_i \simeq \gamma_i \simeq 10^{-2}$ 程度である．よって、式(3.7)と(3.8)において、 $\delta_i = 2\gamma_i$ として、 $\delta_i$ についてテイラー展開すると、 $\gamma_i$ の一次までの精度で、

$$(3.10) \quad \epsilon_1^{\text{obs}} = \epsilon_1^s + 2\gamma_1 [1 - (\epsilon_1^s)^2] - 2\gamma_2\epsilon_1^s\epsilon_2^s + O(\gamma^2),$$

$$(3.11) \quad \epsilon_2^{\text{obs}} = \epsilon_2^s + 2\gamma_2 [1 - (\epsilon_2^s)^2] - 2\gamma_1\epsilon_1^s\epsilon_2^s + O(\gamma^2),$$

を得る．さらに、応答率 $\mathcal{R} = 1 - \langle (\epsilon_1^s)^2 + (\epsilon_2^s)^2 \rangle / 2$ として、固有楕円率について以下の二次の残差項

$$(3.12) \quad \Delta_{11} \equiv (\epsilon_1^s)^2 - \left\langle \frac{(\epsilon_1^s)^2 + (\epsilon_2^s)^2}{2} \right\rangle,$$

$$(3.13) \quad \Delta_{22} \equiv (\epsilon_2^s)^2 - \left\langle \frac{(\epsilon_1^s)^2 + (\epsilon_2^s)^2}{2} \right\rangle,$$

$$(3.14) \quad \Delta_{12} \equiv \epsilon_1^s\epsilon_2^s,$$

は多数の銀河で平均処理すれば小さくなることを用いると、最終的に歪み場の推定量 $\hat{\gamma}_i$ として、

$$(3.15) \quad \hat{\gamma}_1 = \frac{\epsilon_1^{\text{obs}}}{2\mathcal{R}}, \quad \hat{\gamma}_2 = \frac{\epsilon_2^{\text{obs}}}{2\mathcal{R}}$$

が得られる (Bernstein and Jarvis, 2002)．この歪み場の推定量は、多数の銀河について平均処理しなければ良い推定を与えないことに注意を要する．なお、式(3.15)は、実際のHSC計画で得られた観測データから歪み場を推定する際にも応用されている (e.g. Mandelbaum et al., 2017)．

#### 4. 重力レンズ解析による地図生成

ここで、歪み場から収束場への変換に関する事柄をまとめておこう。3章で見たように、観測データから得られる歪み場の推定量は、重力レンズ効果から生じる歪み場  $\gamma_i$  と天体固有の楕円率  $e_i^s$  の線形和として書ける。歪み場から収束場への変換法則は、フーリエ変数については式(2.21)で与えられる。式(2.21)を使って収束場を推定する方法は、提案者の名を冠して、Kaiser-Squires 変換法(通称 KS 法)と呼ばれる。

KS 法による収束場の推定が現実的な設定でどのようになるか、重力レンズ効果の数値シミュレーション(重力レンズシミュレーション)を使って見てみよう。重力レンズシミュレーションでは、まずはじめに図1に見られるような宇宙大規模構造のシミュレーションを行い、計算された大規模構造を視線方向に並べて、重力レンズの基本方程式(2.2)を解くことで、重力レンズ量である収束場と歪み場を決められた格子上で計算する(e.g. White and Hu, 2000; Hamana and Mellier, 2001)。ここでは、Sato et al. (2009)による重力レンズシミュレーションの結果を用いる。このシミュレーションデータでは、 $5.12^2$  平方度の領域内を  $2048^2$  の格子に区分して、収束場と歪み場がそれぞれの格子で計算されている。観測データを模するために、シミュレーションで計算されている歪み場に標準偏差  $\sigma_\epsilon / (\bar{n}_g \theta_{\text{grid}}^2)^{1/2}$  の正規乱数を与える。 $\theta_{\text{grid}} = 5.12/2048 \text{ deg}$  は格子の見込み角である。デモンストレーションとして、 $\sigma_\epsilon = 0.35$ 、 $\bar{n}_g = 7.2 \times 10^4 \text{ deg}^{-2}$  を仮定する。格子上加えられる正規乱数は、数密度  $\bar{n}_g$  の天体サンプルがあり、天体固有の楕円率が平均0で標準偏差  $\sigma_\epsilon$  の正規分布に従う場合に対応する。本節では、単純化のために、すべての天体は同じ距離だけ観測者から離れていると仮定する。なお、以下では、小スケールの構造を見やすくするため、適当な  $2.5^2$  平方度の領域を切り取って図示することにする。

図2に、天体固有の楕円率がない場合とある場合のKS法による収束場の推定結果を示す。天体固有の楕円率による雑音は、シェイプノイズと呼ばれる。図2の右パネルでは、シェイプノイズの影響で本来観測したい大規模構造が完全に埋もれてしまっていることがわかる。天体の形状は、局所的な天体形成のプロセスにより決定されるので、シェイプノイズはショット雑音のように振舞う。

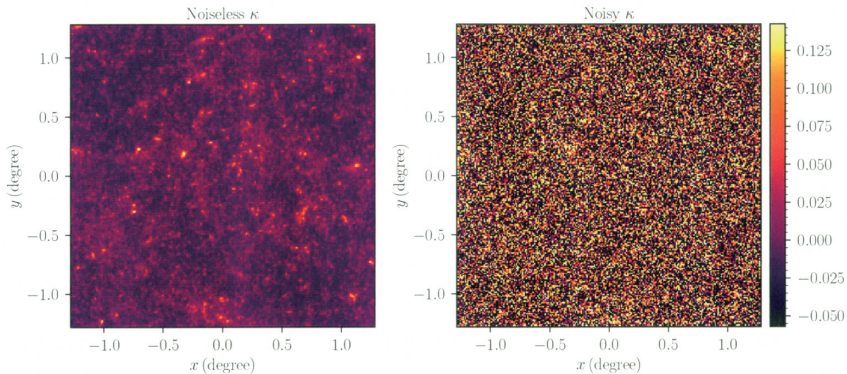


図2. 重力レンズシミュレーション(Sato et al., 2009)を用いた地図生成の例。左図は、固有楕円率による雑音(シェイプノイズ)のない歪み場から式(2.21)を通じて推定した収束場。一方、右図には、シェイプノイズがある場合の推定結果を示す。銀河固有の楕円率の標準偏差を0.35、解析に利用できる銀河の数密度は  $7.2 \times 10^4 \text{ deg}^{-2}$  を仮定した。これらの値は、日本が主導する銀河撮像観測 HSC 計画における観測データと総合的である(Mandelbaum et al., 2017)。

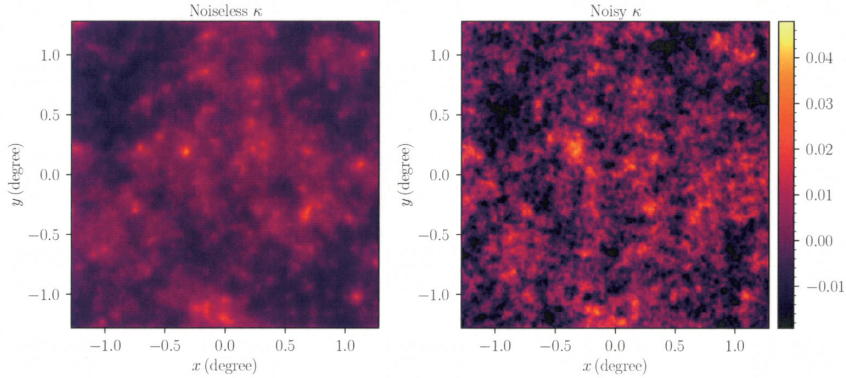


図3. 図2と同じシミュレーションデータで、ウィーナーフィルタ(式(4.1))を施した場合.

実用的には、図2に見られるようなショット雑音を抑える目的で、何らかの平滑処理を行うことが多い。例えば、歪み場とシェイプノイズを全て正規乱数とみなして、推定される収束場の分散を最小にするように平滑フィルタを決めることができる (e.g. Seljak, 1998)。結果として得られるフィルタ関数は、ウィーナーフィルタとして広く知られている。歪み場とシェイプノイズが正規分布に従うという仮定の下で、ウィーナーフィルタによって平滑化された収束場は最尤推定量になっている。収束場のフーリエ変換について、ウィーナーフィルタとKS法を組み合わせると、

$$(4.1) \quad \tilde{\kappa}_{\text{WF}}(\ell) = \frac{P_{\kappa\kappa}(\ell)}{P_{\kappa\kappa}(\ell) + \sigma_{\epsilon}^2/(2\bar{n}_{\text{g}})} [\tilde{\epsilon}_1^{\text{obs}}(\ell) \cos 2\phi_{\ell} + \tilde{\epsilon}_2^{\text{obs}}(\ell) \sin 2\phi_{\ell}],$$

という推定もしばしば用いられる。式(4.1)に現れる  $P_{\kappa\kappa}(\ell)$  は、収束場のパワースペクトルと呼ばれる統計量で、雑音のない収束場について、以下のように定義される。

$$(4.2) \quad \langle \tilde{\kappa}(\ell) \tilde{\kappa}^*(\ell') \rangle = (2\pi)^2 \delta(\ell - \ell') P_{\kappa\kappa}(\ell).$$

ここで、 $\delta(\mathbf{x})$  はデルタ関数である。収束場のパワースペクトルは、大規模構造の形成理論を基礎として数値シミュレーションによって較正された数理モデルがあり (e.g. Smith et al., 2003; Takahashi et al., 2012)、事前に高速に計算できる。

図3に、ウィーナーフィルタを用いた推定結果を示す。ウィーナーフィルタは、小スケールで卓越するシェイプノイズを軽減し、重力レンズ効果に特有の大スケールのパターンを強調させていることがわかる。一方で、図2の左パネルと比較すると、ウィーナーフィルタは小スケールに見られる豊かな構造の大部分を均してしまっていることもわかる。実は、宇宙大規模構造に起因する重力レンズ効果では、歪み場と収束場は非正規性をもつことが知られている。よって、現実的な観測データについて、ウィーナーフィルタは必ずしも最適な方法ではない。

より一般に、任意のフィルタ関数によって平滑化された収束場の推定を考えよう。フィルタ関数  $U$  によって平滑化された収束場  $\mathcal{K}$  は、

$$(4.3) \quad \mathcal{K}(\boldsymbol{\theta}) = \int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta' U(\boldsymbol{\theta}') \kappa(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}'),$$

と書ける。Schneider (1996)によれば、同様の収束場は、歪み場の接弦成分(式2.16)を用いて、

$$(4.4) \quad \mathcal{K}(\boldsymbol{\theta}) = \int_{\mathbb{R}^2} d^2\theta' U_t(\boldsymbol{\theta}') \gamma_t(\boldsymbol{\theta}', \boldsymbol{\theta}),$$

とも書き表せる．ここで、 $\gamma_t(\theta', \theta)$  は、 $\theta$  を原点としたときの  $\theta'$  方向に対する接弦成分である．歪み場の接弦成分についてのフィルタ関数  $U_t$  は、あらかじめ定めた  $U$  を用いて、次のように書ける．

$$(4.5) \quad U_t(\theta) = -U(\theta) + \int_0^\theta d\theta' \theta' U(\theta').$$

なお、フィルタ関数  $U$  は、 $\theta = |\theta|$  のみの関数であると仮定した．さらに観測領域が有限であることから、フィルタ関数  $U$  を有限の範囲でのみ非零にとると、実用上便利である．この時、フィルタ関数の境界半径を  $\theta_0$  と取ると、

$$(4.6) \quad U(\theta) = -U_t(\theta) + 2 \int_\theta^{\theta_0} d\theta' \frac{U_t(\theta')}{\theta'},$$

を満たす．式(4.4)は、解析者が自らの研究興味に従って、平滑化のスケールを決められるという意味で有用である．例えば、 $U$  として、有限サイズの正規型フィルタ関数

$$(4.7) \quad U(\theta) = \frac{1}{\pi\theta_G^2} \exp\left(-\frac{\theta^2}{\theta_G^2}\right) - \frac{1}{\pi\theta_0^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_0^2}{\theta_G^2}\right)\right],$$

を選ぶと、歪み場に対するフィルタ関数として、

$$(4.8) \quad U_t(\theta) = \frac{1}{\pi\theta^2} \left[1 - \left(1 + \frac{\theta^2}{\theta_G^2}\right) \exp\left(-\frac{\theta^2}{\theta_G^2}\right)\right],$$

を得る． $\theta > \theta_0$  では  $U = U_t = 0$  として計算する．

図4に、式(4.8)をフィルタ関数として用いた平滑化された収束場の推定結果をまとめる．ここでは一例として、 $\theta_G = 1/60 \text{ deg}$  と  $\theta_0 = 1/4 \text{ deg}$  というスケールを選んだ．これらの平滑化スケールを選ぶと、収束場  $\kappa$  の極大値の位置と、宇宙最大の天体である銀河団の位置に良い対応関係が見られることが知られている (e.g. Hamana et al., 2004; Miyazaki et al., 2007)．図4の左右のパネルを比較すると、収束場の値が大きい局所的な部分は良い一致を見せるのに対し、画像全体の雑音は以前残ったままである．

その他の手法として、ウィナーフィルタによって大スケールの構造を強調させつつ、小スケールの情報はスパース性を仮定して図2の左パネルに見られるような局所的な構造を埋め込んでいくことも研究されている (e.g. Jeffrey et al., 2018)．スパース性を用いる場合、小スケー

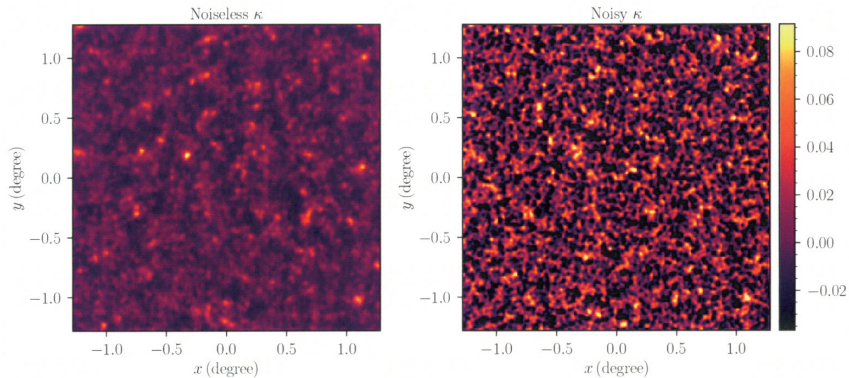


図4. 図2と同じシミュレーションデータで、正規型のスムージングフィルタを施した場合．フィルタ関数として式(4.8)を用いた． $\theta_G = 1/60 \text{ deg}$ 、 $\theta_0 = 1/4 \text{ deg}$  とした．



ルの収束場が何らかの基底関数で記述できることを仮定するが、基底関数の選択には任意性がある。また、最終的に得られる収束場にどれくらい局所的な構造を埋め込むかをコントロールするハイパーパラメータがあるので、問題設定に応じてハイパーパラメータは調整せねばならない(ユニークにハイパーパラメータの値を選ぶことはできない)。いずれにしても、ここに紹介したどのような手法をとっても、宇宙大規模構造が予言する収束場を推定する際には、シェイプノイズに起因する雑音が少なからず残るのが現状である。

## 5. 深層学習ネットワークの応用例

4章で紹介した収束場の推定では、天体固有の楕円率の影響により、観測される宇宙大規模構造の地図には、雑音が含まれることを紹介した。近年の深層学習技術の進展 (e.g. Goodfellow et al., 2016) を受けて、重力レンズ効果の雑音除去を目的とした深層学習技術の応用例がいくつか報告されている。

Jeffrey et al. (2020) では、米国が主導する銀河撮像観測 DES で得られた銀河の楕円率  $\epsilon_1^{\text{obs}}, \epsilon_2^{\text{obs}}$  から、雑音のない収束場への非線形変換

$$(5.1) \quad \kappa(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{F}[\epsilon_1^{\text{obs}}(\boldsymbol{\theta}'), \epsilon_2^{\text{obs}}(\boldsymbol{\theta}')],$$

を考えている。ここで、 $\mathcal{F}$  は、銀河の楕円率から収束場への変換を表す関数である。Jeffrey et al. (2020) では、表現力の高い非線形変換として、U-net と呼ばれる畳み込みニューラルネットワーク(具体的なネットワークの構造は、以下のページにまとめられている: [https://github.com/NiallJeffrey/DeepMass/blob/main/DES\\_mass\\_maps\\_demo/Training\\_example.ipynb](https://github.com/NiallJeffrey/DeepMass/blob/main/DES_mass_maps_demo/Training_example.ipynb))を採用し、ニューラルネットワークに含まれる約 28 万のパラメータは訓練データを用いて決定している。訓練データとしては、重力レンズシミュレーションから模擬的に天体楕円率を生成し、対応する収束場とのペアを 376684 セット用意している。訓練の際には、以下の指標を最小にするようにニューラルネットワークのパラメータを選択する;

$$(5.2) \quad \sum_i [\kappa_{\text{true}}(\boldsymbol{\theta}_i) - \kappa_{\text{CNN}}(\boldsymbol{\theta}_i)]^2,$$

ここで、インデックス  $i$  は、画像のグリッドの位置を決めており、 $\kappa_{\text{true}}$  は雑音のない真の収束場、 $\kappa_{\text{CNN}}$  は式(5.1)により得られる収束場である。Jeffrey et al. (2020) では、平均二乗誤差のみによって結果の優劣が判断されていて、推定された収束場が期待される統計的な性質を持つかどうかについてはあまり言及されていない。

Shirasaki et al. (2019a) では、平滑化された収束場の推定について、観測で得られる収束場が、

$$(5.3) \quad \mathcal{K}_{\text{obs}}(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{K}_{\text{LSS}}(\boldsymbol{\theta}) + \mathcal{K}_{\text{N}}(\boldsymbol{\theta}),$$

のように、重力レンズ効果に起因する  $\mathcal{K}_{\text{LSS}}$  と、天体固有の楕円率から生じる  $\mathcal{K}_{\text{N}}$  の和で書き表せることに注目して、観測画像  $\mathcal{K}_{\text{obs}}$  から雑音  $\mathcal{K}_{\text{N}}$  を差し引くことを考えている。このとき、観測画像から雑音を推定する際には、pix2pix と呼ばれる畳み込みニューラルネットワークによる変換を採用している (Isola et al., 2016)。pix2pix は、様々な画像変換を統一的に扱うことのできるフレームワークの一つで、2種類のニューラルネットワークが互いに競争し合うように訓練することで、高い性能を出すことが知られている。このフレームワークは敵対的生成ネットワーク (Generative Adversarial Networks; GAN) と呼ばれる。観測画像から雑音を推定するニューラルネットワークを生成器  $\mathcal{G}$ 、2種類の画像を入力した際に入力画像に  $\mathcal{G}$  が生成した画像が含まれるかを判別するニューラルネットワークを識別器  $\mathcal{D}$  と呼ぶ時、pix2pix では、以下の最適化問題を解くことで、 $\mathcal{G}$  と  $\mathcal{D}$  のパラメータを設定する;

$$(5.4) \quad \mathcal{G}^* = \arg \min_{\mathcal{G}} \max_{\mathcal{D}} \mathcal{L}_{\text{GAN}}(\mathcal{G}, \mathcal{D}) + \lambda \mathcal{L}_{\text{L1}}(\mathcal{G}),$$

$$(5.5) \quad \mathcal{L}_{\text{GAN}}(\mathcal{G}, \mathcal{D}) = \mathbb{E}_{x,y} \log \mathcal{D}(x, y) + \mathbb{E}_{x,z} \log (1 - \mathcal{D}(x, \mathcal{G}(x, z))),$$

$$(5.6) \quad \mathcal{L}_{\text{L1}}(\mathcal{G}) = \mathbb{E}_{x,y,z} \sum_{\text{pixel}} |y - \mathcal{G}(x, z)|,$$

ここで、 $x$  は入力画像を表すベクトル、 $y$  は出力画像を表すベクトル(今の場合、雑音に対応する)、 $z$  は生成器が画像を生成する際に使う一様乱数を意味する。式(5.4)に現れる  $\lambda$  は、ランダムに生成される画像のうち、出力画像に近いものだけを選ぶ罰則を制御するハイパーパラメータである。なお、罰則項  $\mathcal{L}_{\text{L1}}$  の右辺で、 $\sum_{\text{pixel}}$  は画像のグリッドを走る和を意味する。式(5.4)には、明示的な損失関数は  $\mathcal{L}_{\text{L1}}$  を除けば無く、生成器の性能を向上させるための指標が別のネットワーク  $\mathcal{D}$  の訓練を通じて得られる。画像生成のタスクにおいては損失関数の設定が一般に重要だが、pix2pix では、データ駆動的に損失関数を決められるという長所がある。一方で、いくつかの数値実験を通じて、pix2pix を使った方法では、出力結果が訓練データセットに依存してばらつきを持つことが明らかになった。経験的に、ブートストラップ法によって、訓練データセットを複数用意し、それらに対応した生成器を複数構築した上で、最終的な出力画像は、複数の生成器の推定画像でグリッドごとに中央値を採用するという方針によって、精度が改善することが Shirasaki et al. (2019a) に示されている。

さらに、Shirasaki et al. (2021) では、pix2pix を用いた画像変換による雑音除去を、日本が主導する銀河撮像観測である HSC 計画の観測データに適応し、その有用性を評価している。この研究のために、全天領域をカバーする重力レンズシミュレーションと、HSC 計画による実際の観測データを併用して 2268 例の模擬観測データを作成した (Shirasaki et al., 2019b)。この模擬観測データは、観測データに含まれる現実的な効果(観測された銀河の距離分布、角度分布、天体の明るさや観測条件によって生じる形状測定精度のばらつきなど)を可能な限り含めている。なお、pix2pix の訓練時には、雑音を独立に保つ限り、重力レンズ効果に起因する収束場の独立なりアライゼーション数は 200 程度でよい (Shirasaki et al., 2019a)。よって、訓練に未使用の 1000 例程度のテストデータを用いて、pix2pix による雑音除去性能を厳しく評価することができた。実際に訓練するにあたり、訓練に用いる画像数(もしくは訓練をいつ止めるか)、ブートストラップにより構築する生成器の数、損失関数のハイパーパラメータ  $\lambda$  を様々に変えて、性能が最も高くなる条件を探す必要があった。なお、これは完全に試行錯誤で行わねばならなかったことを強調しておく。必然的にネットワークの構築には時間がかかり、訓練データを手にしてから最終的に論文として採択されるまでに 2 年ほど時間がかかった。

図 5 には、訓練された生成器に、訓練に使われていないテストデータを入力した時、正しく雑音が除去できるかを検証した例を示す。見た目による比較だけでなく、画像のヒストグラムを基準にした性能評価を行い、pix2pix による雑音除去が、(1) 銀河の形状測定の系統誤差、(2) 銀河の距離測定の系統誤差、(3) シミュレーションデータで仮定する数値モデルと現実の宇宙に差異がある場合に生じる系統誤差、に対して強健であることを世界で初めて明らかにした。さらに、雑音を除去した後の収束場の極大値と銀河団の対応関係を調べた。雑音が含まれる状況では、収束場の極大値を探すことで検出できる銀河団の数は、観測視野 21.4 平方度の内で平均 1.39 個であるのに対し、雑音を除去すると平均 15.0 個にまで上昇することがわかった。雑音がない理想的な状況でも、検出できる銀河団の平均数が 24.7 個であることを考えると、雑音除去の恩恵は大きいと言えるだろう。これらの結果は、十分な訓練と検証を行う限り、pix2pix などの深層学習ネットワークが重力レンズ解析にも応用可能であることを示唆している。

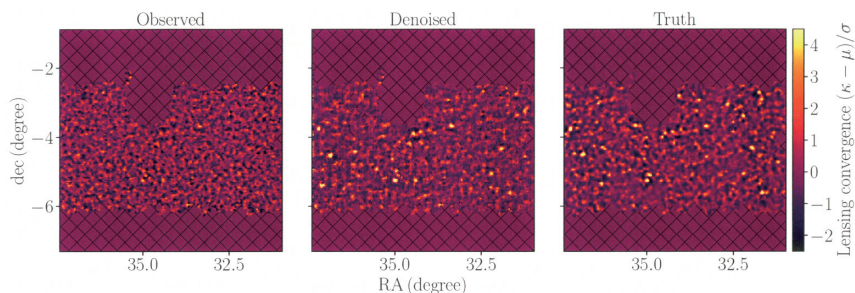


図5. 日本が主導する銀河撮像観測 HSC 計画の観測データを用いた収束場 (Lensing convergence) の雑音除去の一例. 深層学習ネットワーク `pix2pix` により, 観測画像に含まれる雑音を推定し, 観測画像から雑音を取り除く. ここでは, ネットワークの訓練時に未使用だったテストデータを使った検証を示す. 左のパネルが実際の観測画像に対応する雑音を含む収束場, 右に雑音を含まない重力レンズ効果に起因する収束場, 中央に `pix2pix` によって雑音を除去した収束場が描かれている. それぞれのパネルで, 収束場は平均0, 標準偏差1になるように規格化されている. パネルの斜線部は観測銀河が存在しない領域を表す. 雑音入りの画像では収束場が非常に大きなピクセルでのみ物理的に意味があるのに対し, 雑音を除去したあとは, 大部分のピクセルで背後にある大規模構造のパターンを再現できていることが見て取れる.

## 6. 今後の展望

光で観測できない「暗黒物質」の正体解明は, 現代宇宙論に残された難問の一つである. 本稿では, 暗黒物質がつくる宇宙大規模構造の有力な観測手段である重力レンズ解析について紹介した. 重力レンズ解析とは, 観測者と天体までに存在する重力源によって, 観測される天体像が歪められる一般相対論的な効果(重力レンズ効果; 2章)を, 実際の観測データを用いて検出する解析を指す. 特に, 重力レンズ解析で広く行われている宇宙大規模構造の地図の作成では, 天体固有の形状が不定であることに起因する雑音が一般に含まれ(3章), 天文学・宇宙物理学的な情報を観測から得るときに足かせとなっていることをみた(4章). 近年の深層学習研究の進展を受けて, 重力レンズ解析での地図作成時に見られる雑音を深層学習技術によって除去する研究が進んでいる(5章). これまでの研究によれば, シミュレーションによる十分な訓練と検証を行う限り, 深層学習技術の雑音除去性能は, 既存の手法を凌駕していることが明らかになってきた (e.g. Shirasaki et al., 2021).

深層学習による雑音除去の研究の今後の展望について, 筆者の私見をまとめて本稿の終わりとしたい. まず, 現状の深層学習ネットワークによる雑音除去の問題点の一つに, 雑音除去の不確実性を評価できないことがあげられる. 画像変換の研究では, 通常一枚の入力画像に対し, 一枚の出力画像が得られるのみであり, 出力画像にどの程度の不定性があるのかを評価する手立てがない. この問題点を解決する最も単純な方法は, 画像変換のプロセスをベイズ的に行うことだろう. つまり, 観測画像  $\mathbf{y}$  が, 雑音  $\mathbf{n}$  と推定したい画像  $\mathbf{x}$  の和で書けるときの, ベイズの定理より,  $\mathbf{y}$  が得られた時の事後確率分布

$$(6.1) \quad P(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto P(\mathbf{y}|\mathbf{x})P(\mathbf{x}),$$

を求めることである. 事後確率分布  $P(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  が推定できれば, 事後確率を最大にする画像  $\mathbf{x}_{\text{MAP}}$  や, その信頼水準が評価できる. なお, ベイズ的に求まる予測誤差は仮定するモデルに依存することに注意が必要である. 観測的宇宙論の文脈では, 仮定する宇宙膨張の時間進化や重力理論, 銀河形成の物理モデルに依存することが予想される. 近年, データ科学の分野では

モデルの予測誤差を予測する Uncertainty calibration と呼ばれる手法が注目を集めている (e.g. Krishnan and Tickoo, 2020). 同様の手法が観測的宇宙論の分野でも有用かもしれない。

実際にペイズの画像変換により、重力レンズ解析による地図作成の精度向上を狙った研究も出始めている (e.g. Fiedorowicz et al., 2022; Remy et al., 2022). 事後確率を推定する時には、希望する事前確率  $P(x)$  に従って入力画像  $x$  の生成を高速に行う必要がある。もっとも単純には、重力レンズ効果の数値シミュレーションを複数回行うことで画像を生成すればよいのだが、重力レンズシミュレーションには3次元の大規模構造の精密計算が必要となるため、計算コストが高い。Fiedorowicz et al. (2022)では、入力画像が対数正規分布に従う乱数と仮定することで計算コストを抑えているが、この仮定はピクセルの見込み角が小さくなると破綻する (e.g. Taruya et al., 2002; Takahashi et al., 2011). また、Remy et al. (2022)では、 $\log P(x)$  の勾配(スコア関数)を深層学習ネットワークで近似し、一様乱数からスコア関数を通じて  $P(x)$  に従う乱数を得る手法 (e.g. Song and Ermon, 2019) を使って、高解像度の大規模構造地図の作成を試みている。

重力レンズ解析では、重力レンズ効果が雑音に比べ小さいため、雑音の性質 (i.e.  $P(y|x)$ ) は既知であると仮定できることが多い。よって、式(6.1)を使って画像推定をする場合には、結局どのように高速に現実的な  $P(x)$  に従う入力画像を発生させるかという問題を解決することが本質的となる。深層学習技術は、画像生成の分野で特に著しい進展があり、宇宙大規模構造の生成モデルとも親和性があるかもしれない。実際、3次元の宇宙大規模構造の生成モデル (e.g. He et al., 2019; Li et al., 2020) や、重力レンズ効果で本質的な役割を果たす収束場の生成モデル (e.g. Mustafa et al., 2019; Perraudin et al., 2021) が深層学習技術を使って提案されている。なお、これらの深層学習による生成モデルの構築のためには、大量のシミュレーションデータが訓練のために必要となり、計算コストは一般に大きい。さらに、現状の深層学習ネットワークでは、入力画像のピクセル数を大きくすると訓練完了までに時間がかかるので、広視野を確保する将来観測計画に適した生成モデルが構築できるのかどうかは、いまだ不透明なままである。宇宙物理学的な知見に基づいて、計算コストを小さくする試みも行われているが (e.g. Tassev et al., 2013; Giocoli et al., 2020)、深層学習の生成モデルと比較すると残念ながら精度は劣る傾向にある。こういった潮流の中で、宇宙物理学による事前知識と深層学習技術を巧みに結合して、計算コストを下げつつ生成モデルとしての性能を高めるための研究も現れ始めている (e.g. Böhm et al., 2021; Dai and Seljak, 2022)。

天文学における深層学習技術の応用例は、増加の一途を辿っている(ジョージ・スタイン氏のホームページに文献情報のよいまとめがある: <https://github.com/georgestein/ml-in-cosmology>)。図6に、アメリカ航空宇宙局が開発した天体物理データシステム (<https://ui.adsabs.harvard.edu>)で調査したアブストラクトに“Deep learning”を含む天文学に関する論文数をまとめておく。深層学習を単に使ってみた研究はある程度やり尽くされた印象があり、宇宙物理学者や天文学者が納得できる(あるいは許容できる)ニューラルネットワークをデザインするなど、天文学分野の問題解決に特化した研究の進展が望まれる。このためには、既存の研究事例に縛られない柔軟な発想と、宇宙物理学や天文学への深い理解が必要となるだろう。21世紀の新しい研究分野として、天文学と深層学習の境界領域はまさに萌芽的な段階にある。本稿で取り上げた重力レンズ解析における深層学習の応用は単なる一例に過ぎず、他にも思わぬ応用例はあるだろう。天文学上の問題に深層学習技術を応用することによって、真に新規性のある科学的な発見ができるのか確証はない。しかし、宇宙物理学・天文学分野で多数の応用例が報告されていることを鑑みると、「天文学×深層学習」は多くの研究者の興味をそそる研究分野であることは間違いなさそうである。本稿の読者が、研究者となってこの混沌とした境界領域に足を踏み入れるかどうかはあなたの勇気次第だ。最後にノーベル物理学

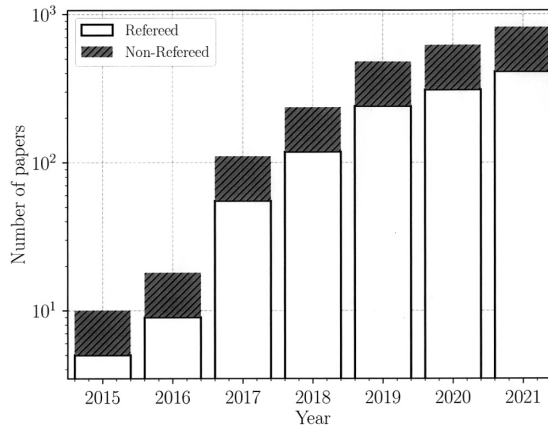


図 6. 2015 年から 2021 年までに発表された天文学に関する論文のうち、アブストラクトに“Deep learning”という語句を含む論文数。実線で囲まれた白抜きの棒グラフは査読制の学術誌に掲載された論文数、ハッチ線が入った棒グラフは査読を受けていない論文数を表す。論文の集計では、アメリカ航空宇宙局が開発した天体物理データシステム (NASA Astrophysics Data System, ADS) を用いた。縦軸を対数にとっているためわかりづらいが、毎年およそ 20–35 パーセント程度の論文は査読審査を通過していない。2020 年以降は、1 日に 1 本以上のペースで深層学習と天文学に関する論文が公表されている。

賞を受賞した著名な研究者スティーブン・ワインバーグの言葉を引用して、本稿の結びとしたい。

“Go for the messes – that’s where the action is.” (Weinberg, 2003)

## 謝 辞

本稿は、筆者らの研究成果 (Shirasaki et al., 2019a, 2019b, 2021) を基に、重力レンズ解析と深層学習技術の接点を紹介したものです。本稿の執筆にあたり、査読者の方からのコメントが有益でした。研究遂行にあたり、国立天文台が運用する共同利用計算機、すばる望遠鏡の取得した観測データが重要な役割を果たしました。国立天文台天文シミュレーションプロジェクト、国立天文台ハワイ観測所、すばる望遠鏡 HSC 計画に関係する皆様に感謝申し上げます。また、重力レンズ解析に深層学習技術を応用するという前例のない試みを進めるにあたり、潤沢な GPU 計算資源の提供と度重なる議論をしてくださった共同研究者の東京大学吉田直紀教授、統計数理研究所池田思朗教授にも感謝申し上げます。最後に、本稿の執筆を推薦してくださった核融合科学研究所横山雅之教授にお礼申し上げます。

## 参 考 文 献

- Aghanim, N., et al. (2020). Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters, *Astronomy & Astrophysics*, **641**, id. A6, <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201833910> (Erratum: *ibid.*(2021). **652**, id. C4).
- Alpher, R. A. and Herman, R. C. (1948). On the relative abundance of the elements, *Physical Review*, **74**(12), 1737–1742, <http://dx.doi.org/10.1103/physrev.74.1737>.

- Alpher, R. A. and Herman, R. C. (1949). Remarks on the evolution of the expanding universe, *Physical Review*, **75**(7), 1089–1095, <http://dx.doi.org/10.1103/physrev.75.1089>.
- Bartelmann, M. and Schneider, P. (2001). Weak gravitational lensing, *Physics Reports*, **340**, 291–472, [http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00082-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00082-X).
- Bernstein, G. M. and Jarvis, M. (2002). Shapes and shears, stars and smears: Optimal measurements for weak lensing, *The Astronomical Journal*, **123**, 583–618, <http://dx.doi.org/10.1086/338085>.
- Böhm, V., Feng, Y., Lee, M. E. and Dai, B. (2021). MADLens, a python package for fast and differentiable non-Gaussian lensing simulations, *Astronomy and Computing*, **36**, id.100490, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ascom.2021.100490>.
- Choi, S. K., et al. (2020). The Atacama Cosmology Telescope: A measurement of the cosmic microwave background power spectra at 98 and 150 GHz, *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, **12**, id.045, <http://dx.doi.org/10.1088/1475-7516/2020/12/045>.
- Dai, B. and Seljak, U. (2022). Translation and Rotation Equivariant Normalizing Flow (TRENFlow) for optimal cosmological analysis, <https://arxiv.org/abs/2202.05282>, <http://dx.doi.org/10.48550/ARXIV.2202.05282>.
- Eddington, A. S. (1920). *Space, Time and Gravitation*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Fiedorowicz, P., Rozo, E., Boruah, S. S., Chang, C. and Gatti, M. (2022). KaRMMA — Kappa reconstruction for mass mapping, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **512**(1), 73–85, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stac468>.
- Freedman, W. L. and Madore, B. F. (2010). The Hubble constant, *Annual Reviews of Astronomy and Astrophysics*, **48**, 673–710, <http://dx.doi.org/10.1146/annurev-astro-082708-101829>.
- Gamow, G. (1946). Expanding universe and the origin of elements, *Physical Review*, **70**, 572–573, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.70.572.2>.
- Giocoli, C., et al. (2020). Testing the reliability of fast methods for weak lensing simulations: WLMOKA on PINOCCHIO, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **496**(2), 1307–1324, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/staa1538>.
- Goodfellow, I., Bengio, Y. and Courville, A. (2016). *Deep Learning*, MIT Press, Cambridge.
- Hamana, T. and Mellier, Y. (2001). Numerical study of statistical properties of the lensing excursion angles, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **327**, id.169, <http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-8711.2001.04685.x>.
- Hamana, T., Takada, M. and Yoshida, N. (2004). Searching for massive clusters in weak lensing surveys, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **350**, id.893, <http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2004.07691.x>.
- He, S., et al. (2019). Learning to predict the cosmological structure formation, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **116**(28), 13825–13832, <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1821458116>.
- Hikage, C., et al. (2019). Cosmology from cosmic shear power spectra with Subaru Hyper Suprime-Cam first-year data, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, **71**(2), id.43, <http://dx.doi.org/10.1093/pasj/psz010>.
- Hinshaw, G., et al. (2013). Nine-year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) observations: Cosmological parameter results, *The Astrophysical Journal Supplement*, **208**, id.19, <http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/208/2/19>.
- Hu, W., Sugiyama, N. and Silk, J. (1997). The Physics of microwave background anisotropies, *Nature*, **386**, 37–43, <http://dx.doi.org/10.1038/386037a0>.
- Ishiyama, T., et al. (2021). The Uchuu simulations: Data release 1 and dark matter halo concentrations, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **506**(3), 4210–4231, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stab1755>.
- Isola, P., Zhu, J., Zhou, T. and Efros, A. A. (2016). Image-to-image translation with conditional adversarial networks, *CoRR*, abs/1611.07004, <http://arxiv.org/abs/1611.07004>.
- Jain, B., Seljak, U. and White, S. D. M. (2000). Ray tracing simulations of weak lensing by large scale

- structure, *Astrophysical Journal*, **530**, id. 547, <http://dx.doi.org/10.1086/308384>.
- Jeffrey, N., et al. (2018). Improving weak lensing mass map reconstructions using Gaussian and sparsity priors: Application to DES SV, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **479**(3), 2871–2888, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/sty1252>.
- Jeffrey, N., Lanusse, F., Lahav, O. and Starck, J.-L. (2020). Deep learning dark matter map reconstructions from DES SV weak lensing data, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **492**(4), 5023–5029, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/staa127>.
- Kaiser, N. and Squires, G. (1993). Mapping the dark matter with weak gravitational lensing, *Astrophysical Journal*, **404**, 441–450, <http://dx.doi.org/10.1086/172297>.
- Kodama, H. and Sasaki, M. (1984). Cosmological perturbation theory, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **78**, 1–166, <http://dx.doi.org/10.1143/PTPS.78.1>.
- 小松英一郎 (2019). 『宇宙マイクロ波背景放射』, 日本評論社, 東京.
- Krishnan, R. and Tickoo, O. (2020). Improving model calibration with accuracy versus uncertainty optimization, *CoRR*, <https://arxiv.org/abs/2012.07923>.
- Li, Y., et al. (2020). AI-assisted superresolution cosmological simulations, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **118**(19), article id. e2022038118.
- Mandelbaum, R., et al. (2017). The first-year shear catalog of the Subaru Hyper Suprime-Cam SSP survey, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, **70**(SP1), id.S25.
- Miralda-Escude, J. (1991). The correlation function of galaxy ellipticities produced by gravitational lensing, *Astrophysical Journal*, **380**, id. 1, <http://dx.doi.org/10.1086/170555>.
- Miyazaki, S., et al. (2007). A Subaru weak lensing survey I: Cluster candidates and spectroscopic verification, *Astrophysical Journal*, **669**, id. 714, <http://dx.doi.org/10.1086/521621>.
- Mustafa, M., et al. (2019). CosmoGAN: Creating high-fidelity weak lensing convergence maps using generative adversarial networks, *Computational Astrophysics and Cosmology*, **6**(1), id. 1, <http://dx.doi.org/10.1186/s40668-019-0029-9>.
- Penzias, A. A. and Wilson, R. W. (1965). A measurement of excess antenna temperature at 4080-Mc/s, *Astrophysical Journal*, **142**, 419–421, <http://dx.doi.org/10.1086/148307>.
- Perraudin, N., Marcon, S., Lucchi, A. and Kacprzak, T. (2021). Emulation of cosmological mass maps with conditional generative adversarial networks, *Frontiers in Artificial Intelligence*, **4**, id. 673062, <http://dx.doi.org/10.3389/frai.2021.673062>.
- Remy, B., et al. (2022). Probabilistic mass mapping with neural score estimation, <https://arxiv.org/abs/2201.05561>, <http://dx.doi.org/10.48550/ARXIV.2201.05561>.
- Salucci, P. (2019). The distribution of dark matter in galaxies, *The Astronomy and Astrophysics Review*, **27**(1), id. 2, <http://dx.doi.org/10.1007/s00159-018-0113-1>.
- Sato, M., et al. (2009). Simulations of wide-field weak lensing surveys I: Basic statistics and non-Gaussian effects, *Astrophysical Journal*, **701**, 945–954, <http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/701/2/945>.
- Schneider, P. (1996). Detection of (dark) matter concentrations via weak gravitational lensing, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **283**, 837–853, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/283.3.837>.
- Seljak, U. (1998). Weak lensing reconstruction and power spectrum estimation: Minimum variance methods, *Astrophysical Journal*, **506**, id. 64, <http://dx.doi.org/10.1086/306225>.
- Shirasaki, M., Yoshida, N. and Ikeda, S. (2019a). Denoising weak lensing mass maps with deep learning, *Physical Review D*, **100**(4), id. 043527, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.100.043527>.
- Shirasaki, M., Hamana, T., Takada, M., Takahashi, R. and Miyatake, H. (2019b). Mock galaxy shape catalogues in the Subaru Hyper Suprime-Cam survey, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **486**(1), 52–69, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stz791>.
- Shirasaki, M., et al. (2021). Noise reduction for weak lensing mass mapping: An application of generative adversarial networks to Subaru Hyper Suprime-Cam first-year data, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **504**(2), 1825–1839, <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stab982>.

- Smith, R. E., et al. (2003). Stable clustering, the halo model and nonlinear cosmological power spectra, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **341**, id.1311, <http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-8711.2003.06503.x>.
- Song, Y. and Ermon, S. (2019). Generative modeling by estimating gradients of the data distribution, <https://arxiv.org/abs/1907.05600>, <http://dx.doi.org/10.48550/ARXIV.1907.05600>.
- Takahashi, R., Oguri, M., Sato, M. and Hamana, T. (2011). Probability distribution functions of cosmological lensing: Convergence, shear, and magnification, *Astrophysical Journal*, **742**, id.15, <http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/742/1/15>.
- Takahashi, R., Sato, M., Nishimichi, T., Taruya, A. and Oguri, M. (2012). Revising the halo fit model for the nonlinear matter power spectrum, *Astrophysical Journal*, **761**, id.152, <http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/761/2/152>.
- Taruya, A., Takada, M., Hamana, T., Kayo, I. and Futamase, T. (2002). Lognormal property of weak-lensing fields, *Astrophysical Journal*, **571**, 638–653, <http://dx.doi.org/10.1086/340048>.
- Tassev, S., Zaldarriaga, M. and Eisenstein, D. (2013). Solving large scale structure in ten easy steps with COLA, *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, **06**, id.036, <http://dx.doi.org/10.1088/1475-7516/2013/06/036>.
- Weinberg, S. (2003). Four golden lessons, *Nature*, **426**, id.389, <http://dx.doi.org/10.1038/426389a>.
- White, M. J. and Hu, W. (2000). A new algorithm for computing statistics of weak lensing by large scale structure, *Astrophysical Journal*, **537**, 1–11, <http://dx.doi.org/10.1086/309009>.
- Yamamoto, K., Sugiyama, N. and Sato, H. (1998). Evolution of small scale cosmological baryon perturbations and matter transfer functions, *Astrophysical Journal*, **501**, id.442, <http://dx.doi.org/10.1086/305841>.
- Yoshida, N., Sugiyama, N. and Hernquist, L. (2003). The evolution of baryon density fluctuations in multi-component cosmological simulations, *Monthly Notice of the Royal Astronomical Society*, **344**, 481–491, <http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-8711.2003.06829.x>.



# Mapping of Cosmic Dark Matter with Gravitational Lensing Analyses and Applications of Deep Neural Networks

Masato Shirasaki<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Research Enhancement Strategy Office, National Astronomical Observatory of Japan

<sup>2</sup>The Institute of Statistical Mathematics

An array of large-scale astronomical observations has firmly confirmed the existence of invisible mass components in the universe. Such invisible materials are referred to as cosmic dark matter. Although the observational studies have indicated that dark matter can exist anywhere from the past to the present, its existence cannot be explained by the Standard Model of particle physics. Mapping of spatial distribution in dark matter density plays a critical role in identifying the nature of cosmic dark matter. Gravitational lensing analyses are among the most powerful approaches to provide a large-scale map of cosmic dark matter from observations. General relativity predicts that intervening cosmic matter distribution causes a coherent distortion of images of background galaxies at large separation. This interesting phenomenon is known as the gravitational lensing effect. Modern galaxy imaging surveys aim to infer the dark matter density in different line-of-sight directions through precise measurement of gravitational lensing effects of billions of galaxies in a wide sky coverage. In this article, we begin with a brief summary of modern cosmology and summarize the basics of gravitational lensing analyses. We then describe recent progress in applications of deep learning to the gravitational-lensing-based mapping of dark matter, including our latest analysis.

# 射影演算子法による統計的時系列データ解析と その応用

前山 伸也<sup>1</sup>・三分一 史和<sup>2</sup>

(受付 2022 年 6 月 13 日; 改訂 9 月 13 日; 採択 9 月 20 日)

## 要 旨

射影演算子法は非平衡統計物理学の分野で開発された数理手法であり、興味ある目的変数の時間発展を、説明変数に対する相関項と無相関項に分離し、一般化 Langevin 形式で記述する。この手法は、データセットに対する実用的な統計的時系列データ解析として利用できる。本研究では、その定式化を再訪しつつ、連続時間および離散時間システムでの任意の目的・説明変数に対する拡張を行った。続いて、類似した時系列データ解析手法として構造ベクトル自己回帰(SVAR)モデルとの比較を行った。射影演算子法は任意の説明変数に対する定式化であり SVAR モデルよりも広い適用範囲を持つこと、説明変数として自己回帰形を用いた場合は SVAR モデルと同等の相関を抽出可能であることを示した。さらに応用例として、プラズマ乱流による帯状流生成・維持過程を一般化 Langevin 方程式として捉える解釈を提案し、射影演算子法による時系列データ解析に基づく根拠を与えた。以上により、物理的解釈を与えるためのデータ解析、および、確率的時系列データのモデリングに対する射影演算子法の有用性を示した。開発した手法は Python からのシンプルな関数呼び出しで利用できるオープンソースコードとして公開し、興味を持った読者は手軽に試すことができる。

キーワード：射影演算子法、連続/離散時間システム、乱流、時系列解析。

## 1. はじめに

### 1.1 本研究の背景

森-Zwanzig の射影演算子法は、非平衡統計物理学の分野で開発された数理手法である。原著にあたる Zwanzig (1961) や Mori (1965) の論文では、主として多粒子系における遅い集団運動とミクロな揺動力を分離する目的で用いられた。ある種の粗視化手法であるとともに、決定論的な運動方程式から確率的な一般化 Langevin 方程式を得る方法論としても知られる。量子系の密度行列の時間発展を記述するマスター方程式、ガラス転移におけるモード結合理論 (川崎, 2009)、分子動力学における散逸粒子動力学モデルの導出 (Español, 1995) といった、多様な分野で射影演算子法の応用がなされてきた。射影演算子法から得られる記憶関数を解析的に導出することは一般に困難であり、実用的な表式を得るために、しばしば、摂動的に高次微小量を無視する、高次相関を低次相関の積として近似する、粒子間力を二体間力の和で表わしつつ時間スケールの分離を仮定するなど、それぞれの現象に応じたアドホックな仮定に依存した理論

<sup>1</sup> 名古屋大学大学院 理学研究科：〒464-8602 愛知県名古屋市千種区不老町

<sup>2</sup> 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

構築が行われてきた。射影演算子法について、非平衡統計力学に焦点を当てて解説している文献として鈴木(2000)、藤坂(1998)、宗像(1996)を挙げておく。

これらとはやや異なる視点から、Unresolved 変数の効果を取り入れた Resolved 変数の時間発展の最適予測という文脈で射影演算子法の定式化を再訪したのが Chorin et al. (2000, 2002) である。以降、この論文を起点として、記憶関数のモデル化や Navier-Stokes 乱流への適用など、多数の論文が報告されている (Stinis, 2004; Chorin and Stinis, 2006; Hald and Stinis, 2007; Stinis, 2013, 2015; Parish and Duraisamy, 2017; Gouasmi et al., 2017)。さらに最近では、分子動力学や乱流現象を対象とした数値シミュレーションデータ解析への応用 (Meyer et al., 2020; Maeyama and Watanabe, 2020) や、射影演算子法と外生変数を含む非線形自己回帰移動平均モデル (NARMAX, nonlinear auto-regression moving average with exogenous inputs) の比較 (Chorin and Lu, 2015; Lin and Lu, 2021)、動的モード分解などの Koopman 学習との関係性が議論されるなど (Lin et al., 2021)、統計的時系列データ解析としての射影演算子法の理論的理解が進展してきている。

射影演算子法はその定式化によって、(i)連続時間システムか離散時間システムか、(ii)射影演算子の選び方、(iii)目的変数と説明変数の関係、(iv)単変量解析か多変量解析か、といった分類ができるが、これらの具体的な区別は第2節の定式化の説明に譲る。

実用的な統計データ解析として射影演算子法を用いるために、記憶関数を近似なしにデータから直接評価している例は少ない。そこで、上述の文献を数値的評価手法によって再分類してみよう。原理的には、Mori (1965) で線形射影のアルゴリズムが提案され、Zwanzig (1980) では高次項を加えることで非線形(有限ランク)射影が構築できることが提案された。Chorin et al. (2002) がおそらく時系列データ解析としての最初の実装例と思われる。時系列データから相互相関関数を計算し、記憶関数に関する式を台形公式で離散的に積分することで記憶関数を数値的に評価した。ただし、評価された記憶関数に関する図は明示されなかった。日本でも、森本人とその同僚により記憶関数の数値的評価がされたが (Okamura, 2006; Mori and Okamura, 2007)、実装方法については「記憶関数に関する式を反復法的に解いた」とのことで、それ以上の詳細な記述はなかった。単変量解析の場合はよく研究されている1つの未知変数についての第2種 Volterra 積分方程式に帰着するため、説明不要と判断したのかもしれない。近年では、Meyer et al. (2020) は反復法による記憶関数の評価手法を提案しており、同時期に、Maeyama and Watanabe (2020) は任意関数を目的変数とする場合の定式化や、Laguerre 展開により記憶項を Markov 埋め込みすることで時間積分する手法を提案している。続く Lin et al. (2021) では多変量解析や離散時間射影演算子法に対する実装がなされ、さらに最近の Lin et al. (2022) の研究では、森の線形射影のアルゴリズムではなく、回帰を用いた非線形射影への拡張がなされている。

## 1.2 本研究の目的と論文構成

本論文では、個別の物理現象に依らない、汎用的な統計的時系列データ解析手法としての射影演算子法の利用に焦点を当てる。この観点からは、1変数や線形射影については多くの計算・応用例が報告されているが、多変量・非線形・任意関数に注目した解析は少なく、これらを複合的に扱った解析は十分に議論がなされていないというのが現状である。こうした現状に対して、本研究では以下の3つの問題

- (1) 任意目的変数に対する射影演算子法の定式化が十分に整理されていないこと
- (2) 時系列データ解析に用いられる自己回帰モデルとの類似点が見られるが、どのような相違点があるか明らかでないこと

(3) 射影演算子法に基づく時系列データ解析をどのように物理解析に適用すれば意味ある結果を得られるかは問題次第だが、応用事例がまだ多くはないこと

を解決することを目的とした。

以降の論文構成は次の通りである。第2節では、問題(1)に関連して、Lin et al. (2021)らの定式化を拡張することで、任意関数に対する連続時間・離散時間射影演算子法を定式化し、それぞれに成り立つ一般化第2種揺動散逸定理を導く。また、これらが実用的な統計的時系列データ解析アルゴリズムとして利用できることを説明する。第3節では、射影演算子法の利用例を示す。第3.1節では、問題(2)に関連して、構造ベクトル自己回帰モデルと射影演算子法による解析を比較する。第3.2節では、問題(3)に関連して、実物理現象への応用事例として長谷川-若谷プラズマ乱流シミュレーション時系列データの解析・モデリングへの適用を行う。最後に、第4節で本研究を総括する。

## 2. 射影演算子法の定式化

ここで考える統計的時系列データ解析の問題設定や変数の記号を定義しよう。統計的時系列データ解析では、図1のような多数の変数の時系列データセットから、変数間の情報を抽出することが目的である。目的変数のデータは  $f^{(l)}(t)$  は連続時間  $t$  (または離散時間  $n$ ) と個々のサンプル  $l$  の次元を持つ。説明変数も同様に時間  $t$  とサンプル  $l$  の次元を持ち、多変量のベクトル  $\mathbf{g}^{(l)}(t) = (g_0^{(l)}(t), g_1^{(l)}(t), \dots)$  である。私たちは、統計平均操作を用いて、 $f^{(l)}(t)$  がどのように  $\mathbf{g}^{(l)}(t)$  と相関するかを評価したい。同様の解析を複数の目的変数に繰り返し行う場合は、目的変数もベクトル  $\mathbf{f}^{(l)}(t)$  となる。統計平均操作  $\langle \dots \rangle$  は、データセットのサンプル  $l$  に関する平均(サンプル平均)により算出される。例えば、異なる時刻  $t+s$  と  $t$  における相互時間相関は以下で与えられる。

$$(2.1) \quad \langle f_i(t+s)g_j(t) \rangle = \frac{1}{S} \sum_{l=0}^{S-1} f_i^{(l)}(t+s)g_j^{*(l)}(t),$$

ここで、 $S$  はサンプル数である。別の統計平均操作の定義としては、エルゴード性を仮定し長時間平均を利用する場合もあり得るが本論文では用いない。以下では、サンプル番号に関する上付き添え字 ( $l$ ) は、曖昧さが生じない場合は表記の簡単のため省略する。

加えて、本論文中で用いる「相関」という語について先に定義を明記しておく。射影演算子法により抽出される、目的変数  $\mathbf{f}(t)$  が説明変数  $\mathbf{g}(t)$  に対して持つ「相関」とは、単に相互時間相関(式(2.1))の意味ではなく、一般化 Langevin 形式(式(2.19), (2.24))に現れる Markov 係数  $\Omega$

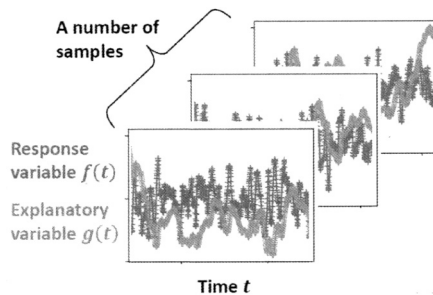


図 1. 目的変数と説明変数の時系列データセット。

と記憶関数  $\Gamma$  を指す意味で用いる。目的変数から相関項 (Markov 項と記憶項) を除いた残差を無相関項  $r(t)$  と呼ぶが、この項が説明変数  $g(t)$  に対して「無相関」であるとは、任意の時刻  $t$  において無相関項  $r(t)$  と説明変数の初期値  $g(0)$  との相互時間相関 (式 (2.1)) が 0 となることを意味する。これらの数式上の表現は第 2.1 節、第 2.2 節で顕わに導く。

## 2.1 連続時間射影演算子法

### 2.1.1 森-Zwanzig 形式

現象を記述する物理量  $\mathbf{u}(t) = (u_0(t), u_1(t), \dots)$  は以下のような連立非線形常微分方程式系に従うとする。

$$(2.2) \quad \frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} = N(\mathbf{u}(t)),$$

ここで、 $t$  は連続時間、 $N$  は任意の非線形作用素である。粒子多体系のような離散系のみならず、流体現象のような連続系においても、Galerkin 法のように基底関数を用いて展開する場合や差分法のように離散格子点で表す場合を考えれば、上記は一般的な問題を記述できる。

目的変数や説明変数は、物理量の何らかの関数  $f(t) = F(\mathbf{u}(t))$ 、 $g(t) = G(\mathbf{u}(t))$  としてあらわされる。実験観測的な例でいえば、計測できる気温 ( $= f$ ) と風速 ( $= g$ ) の関連を調べる際に、これらは気体運動論の立場からは粒子分布関数 ( $= \mathbf{u}$ ) のモーメント量として記述されるが、必ずしも分布関数そのものは計測できない (する必要がない) という状況に対応する。あるいは、高解像度の大規模数値シミュレーションの全情報 ( $= \mathbf{u}$ ) を調べずとも、大きなスケールの変動 ( $= f, g$ ) 間の関係のみ抽出したいなどという状況も当てはまるだろう。

以下の解析では、系全体が統計的定常状態にあると仮定しよう。つまり、任意関数  $f(t)$ 、 $g(t)$  に対して、統計平均  $\langle \dots \rangle$  を用いて定義される時間相関関数は相対時間のみに依存し、

$$(2.3) \quad \langle f(t+s)g(t) \rangle = \langle f(s)g(0) \rangle,$$

という時間並進対称性が成り立つ。このため、初期時刻  $t = 0$  は特別な意味を持たず、初期値  $f^{(l)}(0)$ 、 $g^{(l)}(0)$  は単に定常確率分布から拾い上げられたあるサンプルの値に過ぎない。相対時間のみが意味を持つという意味で、 $\langle f(s)g \rangle \equiv \langle f(t+s)g(t) \rangle$  や  $\langle fg \rangle \equiv \langle f(t)g(t) \rangle$  の表記を適宜用いる。

射影演算子法の議論を進めるに当たり、岡村 (2014) に倣って、以下の 3 つの演算子を定義する。一つ目は射影演算子  $\mathcal{P}$  である。射影演算子は冪等率  $\mathcal{P}\mathcal{P} = \mathcal{P}$  を満たす演算子であり、この段階ではまだこれ以上は特定しない。二つ目は補射影演算子  $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$  であり、 $\mathcal{P}$  の冪等性から  $\mathcal{Q}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}$ 、 $\mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0$  が確認できる。三つめは Liouville 演算子  $\Lambda$  であり (山本・中村, 1999) 、

$$(2.4) \quad \Lambda = \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} = \sum_i N_i(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_i},$$

で定義される。これは物理量  $\mathbf{u}$  の任意の関数に作用し、例えば  $f_i(t) = F_i(\mathbf{u}(t))$  について、

$$(2.5) \quad \frac{df_i(t)}{dt} = \Lambda f_i(t),$$

$$(2.6) \quad f_i(t) = e^{t\Lambda} f_i(0),$$

という性質を満たす。ここで、 $e^{t\Lambda}$  は冪級数展開で定義される演算子指数関数であり、 $f_i(0)$  から  $f_i(t)$  まで時間を  $t$  だけ進める時間進展演算子とみなすことができる。

森-Zwanzig 形式では、任意関数の時間発展式 (2.6) を以下のように射影と補射影に分離する。

$$\begin{aligned}
(2.7) \quad f_i(t) &= e^{t\Lambda} f_i(0), \\
&= e^{t\Lambda} \mathcal{P} f_i(0) + e^{t\Lambda} \mathcal{Q} f_i(0), \\
&= e^{t\Lambda} \mathcal{P} f_i(0) + \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} \mathcal{P} \Lambda e^{s\mathcal{Q}\Lambda} \mathcal{Q} f_i(0) ds + e^{t\mathcal{Q}\Lambda} \mathcal{Q} f_i(0).
\end{aligned}$$

ここで、式(2.7)第1段では初期値を射影と補射影に分離し、続く第2段では Dyson 公式  $e^{t\Lambda} = \int_0^t ds e^{(t-s)\Lambda} \mathcal{P} \Lambda e^{s\mathcal{Q}\Lambda} + e^{t\mathcal{Q}\Lambda}$  を適用している。これにより、初期値の補射影部分  $\mathcal{Q} f_i(0)$  が時間発展とともに射影に入る部分(右辺第2項)と補射影に入り続ける部分(右辺第3項)を分離している。特に後者を

$$(2.8) \quad r_i(t) \equiv e^{t\mathcal{Q}\Lambda} \mathcal{Q} f_i(0),$$

と定義する。このとき、 $r_i(0) = \mathcal{Q} f_i(0)$ 、 $dr_i(t)/dt = \mathcal{Q} \Lambda r_i(t)$  であり、任意の時刻  $t$  について

$$(2.9) \quad \mathcal{P} r_i(t) = 0,$$

として常に射影から除かれることが確認できる。このため、 $r_i(t)$  は無相関項または直交項 (orthogonal dynamics) と呼ばれる。あるいは、乱数的な挙動を期待してノイズ項や揺動項などと呼ばれることもあるが、あくまで  $r_i(t)$  の重要な性質は、定義より常に補射影に入り続けること(式(2.9))であり、必ずしも乱数的に見なせるとは限らない点に注意が必要である (岡村, 2014)。 $r_i(t)$  の定義式(2.8)を用いて、射影演算子による分解を行った式(2.7)を書き換えると

$$(2.10) \quad f_i(t) = e^{t\Lambda} \mathcal{P} f_i(0) + \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} \mathcal{P} \Lambda r_i(s) ds + r_i(t),$$

を得る。式(2.10)を一般化 Langevin 形式と呼び、右辺第1項は Markov 項、第2項は過去の履歴に依存する非 Markov 型の項で記憶項と呼ばれる。特別な場合として、後述する森の線形射影を射影  $\mathcal{P}$  として採用し、さらに説明変数の時間微分項を目的変数として用いる場合、よく知られた一般化 Langevin 方程式の形に帰着する。

### 2.1.2 射影演算子 $\mathcal{P}$ の選択

ここまでは射影と補射影の分解と記憶の獲得という一般的な形式論であるが、実用的な計算を進めるには、射影演算子  $\mathcal{P}$  を具体的に定義する必要がある。冪等率  $\mathcal{P}\mathcal{P} = \mathcal{P}$  を満たす任意の演算子が適用可能であるため幅広い選択肢が考えられるが、ここでは、目的変数  $f_i$  をある説明変数  $\mathbf{g}$  に射影するクラスの演算子を考えることにする。Chorin et al. (2002) は、Zwanzig (1980) の非線形射影を再訪し、説明変数  $\mathbf{g}$  による目的変数  $f_i$  の最適推定を与える射影演算子として、与えられた  $\mathbf{g}$  の下での  $f_i$  の条件付き期待値関数  $E$  を射影演算子として採用した。

$$(2.11) \quad \mathcal{P}_E f_i = E[f_i | \mathbf{g}] = \int f_i \Phi_{f_i | \mathbf{g}}(f_i, \mathbf{g}) df_i,$$

ここで、 $\Phi_{f_i, \mathbf{g}}(f_i, \mathbf{g})$  は  $f_i, \mathbf{g}$  の同時確率密度、 $\Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{g}) = \int \Phi_{f_i, \mathbf{g}}(f_i, \mathbf{g}) df_i$  は  $\mathbf{g}$  の周辺確率密度、 $\Phi_{f_i | \mathbf{g}}(f_i, \mathbf{g}) = \Phi_{f_i, \mathbf{g}}(f_i, \mathbf{g}) / \Phi_{\mathbf{g}}(\mathbf{g})$  は  $\mathbf{g}$  が与えられた下での  $f_i$  の条件付確率密度である。現象を記述する全自由度の物理量  $\mathbf{u}$  の確率密度  $\Phi(\mathbf{u})$  を用いて定義される場合もあるが、上記のように観測量  $f_i, \mathbf{g}$  に関する確率密度のみに縮約できるため、 $f_i, \mathbf{g}$  の観測データが十分にあれば条件付き期待値関数を数値的に評価することが可能である。この関係を図2に模式的に示した。射影として条件付期待値を用いる場合、 $\mathcal{P}_E f_i$  は  $\mathbf{g}$  を引数として  $f_i$  の値を返す非線形関数として与えられる。

同様の観点から、Mori (1965) の射影演算子法を再訪すると、森の線形射影は上記の条件付き期待値の線形近似として与えられる。

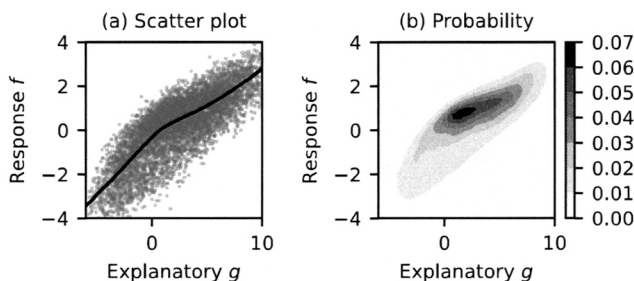


図 2. 統計的データセットと条件付き期待値関数, 射影演算子  $\mathcal{P}$  の関係. 多数のサンプルデータ  $l$  について説明変数  $g^{(l)}$  と目的変数  $f^{(l)}$  を評価することで (a) 散布図, および, (b)  $f, g$  の同時確率密度分布  $\Phi_{f,g}$  を得る. これらから算出した条件付き期待値  $E[f|g]$  を図 (a) 中に実線で表す. 非線形射影  $\mathcal{P}_E$  は条件付き期待値関数で表される非線形曲線, 線形射影  $\mathcal{P}_L$  はその線形近似, 有限ランク射影  $\mathcal{P}_F$  や回帰ベース射影  $\mathcal{P}_R$  は非線形基底または回帰による曲線近似に対応する.

$$(2.12) \quad \mathcal{P}_L f_i = \langle f_i g_j^* \rangle \cdot \langle g g^* \rangle^{-1} \cdot g = \sum_j \sum_k \langle f_i g_j^* \rangle (\langle g g^* \rangle^{-1})_{jk} g_k,$$

ここで,  $\langle f_i g_j^* \rangle = \int f_i g_j^* \Phi_{f_i, g}(f_i, g) df_i dg$  を 2 変数相関と呼ぶ. 上付き添え字 \* は複素共役を表し,  $\langle g g^* \rangle^{-1}$  は逆行列である. 式 (2.12) は目的変数  $f_i$  の説明変数  $g$  に対する多変量線形回帰であり, 線形近似 (図 2 の条件付き期待値関数の直線近似) の範囲で最適推定を与える.

上述の条件付き期待値関数による射影  $\mathcal{P}_E$  は理想的な最適推定であり, 非線形関係も表せるが, 実現象において限られた数の観測データから確率密度分布を構築することは難しい. 一方, 森の線形射影  $\mathcal{P}_L$  は, 線形関係であるため数値実装も簡便であり, 得られた結果も解釈しやすいため広く用いられてきた. これら両者の中に位置する射影演算子をさらに 2 つ紹介する.

一つは, 有限ランク射影 (finite-rank projection) と呼ばれる方法である (Chorin et al., 2002). 説明変数  $g$  は  $u$  の任意の関数であったので, 説明変数として  $g^2, g^3$  などの高次項を加えて森の線形射影を適用することで, 有限の多項式基底による条件付き期待値の非線形近似を構築することができる.

$$(2.13) \quad \mathcal{P}_F f_i = \langle f_i h^* \rangle \cdot \langle h h^* \rangle^{-1} \cdot h,$$

ここで,  $h(g)$  は任意の  $g$  の高次項を含むという意味で, 条件付き期待値の非線形近似 (図 2 の曲線近似) となっているが, アルゴリズムとしては森の線形射影 (2.12) と全く同等に算出できる.

もう一つは, 回帰ベース射影  $\mathcal{P}_R$  と呼ばれる方法である (Lin et al., 2022). 多項式, スプライン, あるいはニューラルネットワークなどの種々の回帰を射影演算子として用いることで, 有限のデータセットから  $f_i$  と  $g$  の非線形関係 (図 2 に対する回帰) を表現する. 射影演算子法への適用としては比較的新しい提案手法であるが, 文献 Lin et al. (2022) では, 回帰ベース射影と森の線形射影や有限ランク射影の比較を行った結果, 回帰ベース射影を用いた方がいくつかのケースで時系列データの再現性が良いこと, 回帰ベース射影のアルゴリズムにおいて線形回帰を用いた場合は森の線形射影と一致することなどが報告されている.

### 2.1.3 森の線形射影 $\mathcal{P}_L$ に対する一般化 Langevin 形式と第 2 種揺動散逸定理

本論文では射影演算子として説明変数の初期値  $g(0)$  に対する森の線形射影  $\mathcal{P} = \mathcal{P}_L$  (式 (2.12)) を採用する. 繰り返しになるが, 統計的定常性を仮定しているため初期時刻  $t = 0$  というのは単に便宜的な呼び方で, その起点からの相対時間のみが意味をもつ. なお, 説明変数  $g$

に高次項が含まれるとして再定義すれば、有限ランク射影  $\mathcal{P}_F$  も内包される。以下では表記の簡略化のため下付き添え字 (L) は省略する。このとき、無相関項  $r_i$  の性質(式(2.9))は、

$$(2.14) \quad \langle r_i(t) \mathbf{g}(0) \rangle = 0,$$

となり、 $r_i(t)$  は任意の時刻  $t$  で説明変数の初期値  $\mathbf{g}(0)$  と相関を持たないことが分かる<sup>1)</sup>。

森の線形射影(式(2.12))を用いて、一般化 Langevin 形式(2.10)の各項を書き下してみよう。まず右辺第1項の Markov 項は

$$(2.15) \quad e^{t\Lambda} \mathcal{P} f_i(0) = \sum_j \Omega_{ij} g_j(t),$$

$$(2.16) \quad \Omega = \langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1},$$

ここで、 $\Omega$  は Markov 係数行列と呼ばれ、統計的定常性(2.3)により時間依存性を持たず同時刻相関  $\langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle = \langle \mathbf{f}(0) \mathbf{g}^*(0) \rangle = \langle \mathbf{f}(t) \mathbf{g}^*(t) \rangle$  のみで決まる定数行列であるため、時間進展演算子  $e^{t\Lambda}$  の影響を受けない。次に、式(2.10)右辺第2項の記憶項は

$$(2.17) \quad \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} \mathcal{P} \Lambda r_i(s) ds = - \int_0^t \Gamma_{ij}(s) g_j(t-s) ds,$$

$$(2.18) \quad \Gamma(s) = - \langle \Lambda \mathbf{r}(s) \mathbf{g}^*(0) \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} = \left\langle \mathbf{r}(s) \frac{d\mathbf{g}^*(0)}{dt} \right\rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1},$$

ここで、 $\Gamma(s)$  は記憶関数(行列)である。途中、 $\langle \Lambda \mathbf{r}(s) \mathbf{g}^*(0) \rangle + \langle \mathbf{r}(s) \Lambda \mathbf{g}^*(0) \rangle = 0$  を用いた。式(2.18)は記憶関数と無相関項  $r_i(t)$  の間に成り立つ関係を示しており、一般化第2種揺動散逸定理と呼ばれる。特に、力学的時間発展を記述する文脈ではしばしば目的変数として説明変数の時間微分項  $\mathbf{f} = d\mathbf{g}/dt$  が採用され、この場合  $\Gamma(s) = \langle \mathbf{r}(s) \mathbf{r}(0) \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1}$  というよく知られた形に帰着する。ただし、この定理が物理学における Langevin 方程式と同様にマクロな摩擦とミクロな揺らぎの関係を表わす第2種揺動散逸定理としての物理的意味を持つためには、 $\mathbf{r}(t)$  がランダムな揺らぎに関する運動であることが保証される必要がある(岡村, 2014)。最終的に、森の線形射影を適用した場合の一般化 Langevin 形式(2.10)は

$$(2.19) \quad \mathbf{f}(t) = \Omega \cdot \mathbf{g}(t) - \int_0^t \Gamma(s) \cdot \mathbf{g}(t-s) ds + \mathbf{r}(t),$$

となる。任意の説明変数  $\mathbf{g}(t)$  と目的変数  $\mathbf{f}(t)$  に対する定式化であり、Markov 係数  $\Omega$  や記憶関数  $\Gamma(s)$  は2.3節で後述するように、 $\mathbf{g}(t)$  と  $\mathbf{f}(t)$  の時系列データセットから直接評価できる。Markov 項は同時刻の説明変数のみから目的変数を  $\mathbf{f}(t) \sim \Omega \cdot \mathbf{g}(t)$  として推定する条件付き期待値の線形近似であり、記憶項は  $\mathbf{g}(t-s)$  の過去の履歴をもとに  $\mathbf{f}(t)$  の推定値を改良する項と言える。無相関項  $\mathbf{r}(t)$  は、式(2.14)の意味で、説明変数とは無相関に変動する部分を表わす。

## 2.2 離散時間射影演算子法

前節では連続時間システムに対する射影演算子法の定式化を行った。一方、社会現象などの応用例では離散時間システムも存在し、また実験計測や数値シミュレーションで得られるデータも離散時間点であることから、離散時間システムに対する射影演算子法も開発されてきた(Munakata, 1994; Darve et al., 2009)。導出の要は連続時間システム同様、時間発展とともに補射影に入り続ける部分を抽出することである。離散時間システムでは、現象を記述する物理量は以下の連立非線形差分方程式系に従うとする。

$$(2.20) \quad \mathbf{u}(n+1) = \mathbf{N}(\mathbf{u}(n)),$$



ここで、離散時間  $n$  は整数であり、 $N$  は任意の非線形作用素である。離散時間システムでは、Liouville 演算子のような連続的な時間進展演算子は定義できない。代わりに、物理量  $\mathbf{u}$  の任意の関数  $F(\mathbf{u})$  に作用し、新たな合成関数を生成する Koopman 演算子  $\mathcal{M}$  を以下で定義する (Arnold and Avez, 1968; アーノルド・アベズ, 1972)。

$$(2.21) \quad \mathcal{M}F \equiv F \circ N.$$

定義より、任意の関数  $f(n) = F(\mathbf{u}(n))$  に対して Koopman 演算子を作用させると、 $\mathcal{M}f(n) = \mathcal{M}F(\mathbf{u}(n)) = F(N(\mathbf{u}(n))) = F(\mathbf{u}(n+1)) = f(n+1)$  として、1 ステップだけ時間進展させる演算子と見なすことができる。

連続時間システムの場合 (式 (2.7)-(2.10)) と同様に、目的変数  $f_i(n)$  の時間発展を射影と補射影に分離することで、以下の一般化 Langevin 形式を得る。

$$(2.22) \quad \begin{aligned} f_i(n) &= \mathcal{M}^n f_i(0), \\ &= \mathcal{M}^n \mathcal{P}f_i(0) + \mathcal{M}^n \mathcal{Q}f_i(0), \\ &= \mathcal{M}^n \mathcal{P}f_i(0) + \sum_{m=1}^n \mathcal{M}^{n-m} \mathcal{P} \mathcal{M} r_i(m-1) + r_i(n), \end{aligned}$$

ここで、離散時間 Dyson 公式  $\mathcal{M}^n = \sum_{m=1}^n \mathcal{M}^{n-m} \mathcal{P} \mathcal{M} (\mathcal{Q} \mathcal{M})^{m-1} + (\mathcal{Q} \mathcal{M})^n$  を用いた。また、無相関項を  $r_i(n) = (\mathcal{Q} \mathcal{M})^n \mathcal{Q} f_i(0)$  として定義し、任意の時間ステップ  $n$  について、

$$(2.23) \quad \mathcal{P} r_i(n) = 0,$$

として常に射影から除かれる部分を抽出した。

射影演算子として森の線形射影 (2.12) を採用する場合、一般化 Langevin 形式 (2.22) は以下の形式に書き下される。

$$(2.24) \quad \mathbf{f}(n) = \Omega \cdot \mathbf{g}(n) - \sum_{m=1}^n \Gamma(m) \cdot \mathbf{g}(n-m) + \mathbf{r}(n),$$

ここで、Markov 係数および記憶関数は

$$(2.25) \quad \Omega = \langle \mathbf{f} \mathbf{g}^* \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1},$$

$$(2.26) \quad \Gamma(m) = -\langle \mathcal{M} \mathbf{r}(m-1) \mathbf{g}(0) \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* \rangle^{-1} = \langle \mathbf{r}(m) \mathbf{g}(1) \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* (1) \rangle^{-1},$$

である<sup>2)</sup>。無相関項の性質を表わす式 (2.23) は、式 (2.14) と同様に、任意の時間ステップ  $n$  における無相関項  $r_i(n)$  が説明変数の初期値  $\mathbf{g}(0)$  に対して相関を持たないことを意味する。式 (2.26) 右辺は、離散時間射影演算子法において、任意の目的変数に対して拡張された一般化第 2 種揺動散逸定理であり、筆者の知る限り本論文で新規に導かれた結果である。先行研究 Munakata (1994); Lin et al. (2022) では、式 (2.26) 中辺を指して揺動散逸定理と呼ばれた。この場合、第 2.3 節で説明する通り記憶関数の構築自体は可能であるが、背後の全物理量に依存する Koopman 演算子  $\mathcal{M}$  を直接評価できないために、得られた記憶関数が揺動散逸定理を満たすかどうかという数値的検証はできない。一方、本導出では  $\mathbf{r}(t)$ ,  $\mathbf{g}(t)$  のみで表されるため、射影演算子法により記憶関数や無相関項をデータセットから構築したのちに、記憶関数が式 (2.26) 右辺を満たすかどうかという数値的検証に用いることができる。特別な場合として、目的変数として説明変数の次ステップの値  $\mathbf{f}(n) = \mathbf{g}(n+1)$  を用いる場合、Lin et al. (2021) で示された離散時間システムにおける通常の一般化第 2 種揺動散逸定理  $\Gamma(m) = \langle \mathbf{r}(m) \mathbf{r}(0) \rangle \cdot \langle \mathbf{g} \mathbf{g}^* (1) \rangle^{-1}$  に帰着する。

### 2.3 実用的時系列データ解析アルゴリズムとしての射影演算子法

当初述べた通り，私たちの目的は，図1のような複数サンプルから成る統計的時系列データセットを元に，射影演算子法を適用して変数間の相関を抽出することである．具体的には，Markov 係数行列  $\Omega$  と記憶関数行列  $\Gamma(t)$  を算出することで，目的変数  $f(t)$  を説明変数  $g(t)$  に対して相関を持つ Markov 項と記憶項，相関を持たない無相関項に分離して評価する．ここで，一般化 Langevin 形式を導く際に統計的定常状態を仮定しているため，適用に際しては，解析に用いるデータについて定常性の検定を行うことが推奨される．

Markov 係数  $\Omega$  については，データセットに対しサンプル平均をとって同時刻相関行列  $\langle fg \rangle$  と  $\langle gg \rangle$  を作成し，その逆行列  $\langle gg \rangle^{-1}$  を算出すれば，直ちに定義式(2.16)または(2.25)の通りに評価できる．

記憶関数については，定義式(2.18)や(2.26)には未評価の無相関項  $r(t)$  を含むためそのままでは評価できない．連続時間システムの場合，一般化 Langevin 形式(2.19)に  $dg(0)/dt \cdot \langle gg \rangle^{-1}$  をかけて統計平均をとることで，記憶関数  $\Gamma(t)$  に関する第2種 Volterra 積分方程式を得る．

$$(2.27) \quad \Gamma(t) = A(t) + \int_0^t \Gamma(s) \cdot B(t-s) ds,$$

$$(2.28) \quad A(t) = \left\langle [f(t) - \Omega \cdot g(t)] \frac{dg}{dt} \right\rangle \cdot \langle gg \rangle^{-1},$$

$$(2.29) \quad B(t-s) = \left\langle g(t-s) \frac{dg}{dt} \right\rangle \cdot \langle gg \rangle^{-1},$$

ここで，行列  $A(t)$  と  $B(t)$  はデータセットに対するサンプル平均から直ちに評価できる量である．式(2.27)は，時間積分をデータセットの時間刻み幅  $\Delta t$  について2次精度台形公式を用いて  $\int_0^{\Delta t} \Gamma(s) \cdot B(t-s) ds = [\Gamma(0) \cdot B(\Delta t) + \Gamma(\Delta t)B(0)]\Delta t/2 + \mathcal{O}(\Delta t^2)$  と近似することによって，初期値解  $\Gamma(0) = A(0)$  から逐次的に解くことができる (Maeyama and Watanabe, 2020)．同様に，離散時間システムに対しては， $n-1$  時間ステップ目に対する一般化 Langevin 形式(2.24)に Koopman 演算子  $\mathcal{M}$  を作用させ， $g(0) \cdot \langle gg \rangle^{-1}$  をかけて統計平均をとることで，以下の Volterra 和分方程式 (Volterra summation equation) を得る．

$$(2.30) \quad \Gamma(n) = C(n) + \sum_{m=1}^{n-1} \Gamma(m) \cdot D(n-m),$$

$$(2.31) \quad C(n) = -\langle [f(n) - \Omega \cdot g(n)]g \rangle \cdot \langle gg \rangle^{-1},$$

$$(2.32) \quad D(n-m) = -\langle g(n-m)g \rangle \cdot \langle gg \rangle^{-1},$$

こちらも，データセットから評価される行列  $C, D$  をもとに， $n \geq 1$  に対して  $\Gamma(1) = C(1)$  から逐次的に計算できる．なお，もともと一般化 Langevin 形式は  $f_i(t)$  の各成分  $i$  について独立であったので，上記の Volterra 積分(和分)方程式についても必ずしも記憶関数  $\Gamma(t)$  の行列全体を一度に解く必要はなく，各行  $i$  に対する列ベクトル  $\Gamma_{ij}(t) (j = 0, 1, \dots)$  について独立に解くことができ，計算メモリ容量に対する制約を軽減できる．最後に，無相関項  $r(t)$  については，すでに Markov 係数や記憶関数が評価できたので，各サンプル ( $l$ ) に対して目的変数  $f^{(l)}(t)$  から Markov 項と記憶項を除いた残差として求める．

定式化の部分で触れたように，Markov 係数  $\Omega$  や記憶関数  $\Gamma(t)$  は統計平均量であり，目的変数  $f(t)$  が説明変数  $g(t)$  に対してどのように相関を持つかをデータセットから抽出したものである．例えば，第3.2節では，乱流の非線形相互作用項のデータセットに対して射影演算子法を適用し，評価された記憶関数を元に，記憶項が流れの駆動または減衰に働くか，記憶時間はどのように決定されるかなどの物理的性質を議論した．このことは，射影演算子法により

Markov 係数や記憶関数といった時系列データセットの持つ相関を抽出することで、物理的解釈を得るためのデータ解析手法として利用できることを示す例である。

Maeyama and Watanabe (2020) の論文では単変量射影演算子法 ( $f(t)$  も  $g(t)$  も一変数) の実装を行ったが、第 3.1 節の解析を行うに当たって多変量射影演算子法 ( $f(t)$  も  $g(t)$  も多変数) の実装を行い、その解析プログラムをオープンソースコードとして公開した (<https://github.com/smaeyama/mzprojection/>)。これらは Python の関数として提供され、モジュール (mzprojection.py) をインポートすることで利用できる。連続時間射影演算子法の場合、時間刻み幅  $\text{delta\_t}$ 、目的変数  $f$ 、説明変数と初期時刻における時間微分  $g, \text{dgd}t0$  の時系列データセットを用意した後に、

$$\text{Omega, Gamma} = \text{mzprojection\_multivariate}(\text{delta\_t}, g, \text{dgd}t0, f)$$

の関数呼び出しで、Markov 係数  $\text{Omega}$ 、記憶関数  $\text{Gamma}$  を取得する。離散時間射影演算子法の場合も同様に、解析したい目的変数と説明変数の時系列データセットに対し、

$$\text{Omega, Gamma} = \text{mzprojection\_multivariate\_discrete\_time}(g, f)$$

とすればよい。シンプルな関数呼び出しで射影演算子法の評価が行えるので、興味を持った読者はぜひ自身の持つデータセットに試してみしてほしい。

#### 2.4 時系列データモデリングへの応用

Markov 係数と記憶関数が目的・説明変数間の相関を抽出したものである一方で、無相関項  $r(t)$  は、目的変数  $f(t)$  の内、変数の初期値  $g(0)$  に対して相関を持たずに時間変動する部分を抽出したものである。一般には背後のダイナミクス  $u(t)$  から決定される量であり、単純な乱数過程で近似できるとは限らない。しかし、もしこれを何らかのモデルで与えられるとするならば、目的変数  $f(t)$  を説明変数  $g(t)$  に依存する Markov 項・記憶項と無相関項のモデル  $r(t)$  のみで閉じた形で表すことができる。例えば、第 3.1 節や第 3.2 節では、無相関項を有限の振幅・時定数を持つ乱数過程でモデル化した場合に、元のデータセットをどの程度再現できるかについて議論した。このように、射影演算子法は統計的時系列データの相関の解析だけでなく、時系列データの統計的性質の再現を目的とした一般化 Langevin モデリングへも応用可能である。

一般化 Langevin 形式 (2.19) または (2.24) に基づいて再現性シミュレーションを行う場合、離散時間系では記憶関数の次数  $n$  が大きくない場合には、説明変数の過去のデータをストレージし、記憶項を直接評価することができる。一方、連続時間系では、シミュレーションの時間刻み幅が細かい場合、ストレージしておく過去の説明変数のデータ量が膨大になり、計算機のメモリ制約から計算困難に陥る。論文 Maeyama and Watanabe (2020) では、連続時間射影演算子法における記憶項の計算アルゴリズムが提案された。記憶関数が、

$$(2.33) \quad \Gamma(t) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{C_p}{p!} \left(\frac{t}{\tau}\right)^p e^{-t/\tau},$$

として、係数行列  $(C_p)_{ij}$  および時定数  $\tau$  を用いて展開できる場合、記憶項  $M(t) \equiv -\int_0^t \Gamma(s) \cdot g(t-s) ds = -\int_0^t \Gamma(t-s) \cdot g(s) ds$  は、

$$(2.34) \quad M(t) = \sum_{p=0}^{\infty} C_p \cdot M_p(t),$$

$$(2.35) \quad M_p(t) = -\frac{1}{p!} \int_0^t \left(\frac{t-s}{\tau}\right)^p e^{-(t-s)/\tau} g(s) ds,$$

$$(2.36) \quad \frac{dM_p(t)}{dt} = \begin{cases} -g(t) - \frac{M_0(t)}{\tau}, & (\text{for } p = 0) \\ \frac{M_{p-1}(t) - M_p(t)}{\tau}, & (\text{for } p \geq 1) \end{cases}$$

として表わされる．つまり，記憶項を計算するために説明変数  $g(t)$  の過去の履歴をすべてストレージしておく必要はなく，近似に必要な次数  $p$  だけの変数  $M_p$  に対して Markov 埋め込みされる．初期値  $M_p(t=0) = 0$  から式 (2.36) に基づいて時間発展させることで，式 (2.34) から記憶項を計算できる．

### 3. 解析・モデリングへの応用例

この節では，射影演算子法の解析・モデリングへの適用例を示す．第 3.1 節では，第 1.2 節で挙げた問題 (2) に関して，射影演算子法と構造ベクトル自己回帰モデル (SVAR, Structural Vector Auto-Regressive model) との比較を行い，その類似点・相違点を明らかにする．続く第 3.2 節では，問題 (3) に関して，物理現象解析の例として長谷川-若谷プラズマ乱流への適用によって得られた成果を述べる．

#### 3.1 離散時間射影演算子法と構造ベクトル自己回帰モデルの比較

##### 3.1.1 構造ベクトル自己回帰モデルの数値シミュレーション

射影演算子法により得られる一般化 Langevin 形式 (2.19) または式 (2.24) は，目的変数が説明変数の履歴と無相関項により与えられるという観点から，外生変数型自己回帰モデル (ARX, Auto-Regressive model with Exogenous input) との類似性がある．自己回帰型のモデルにおいては赤池情報量規準 (AIC, Akaike Information Criterion) (Akaike, 1973) によるモデル選択や Granger 因果性検定 (Granger, 1969) などがこれまでによく研究されており，多変量自己回帰モデル (VAR, Vecrot Auto-Regressive model) を導入するとインパルス応答分析や周波数ドメインでのパワー寄与率などの解析を行うことが可能である．時系列データの計測において，計測対象のシステムの変動周期が時間的に緩慢であったり，計測条件の問題でシステムの変動周期に対して十分に高いサンプリング周波数を設定できない場合には変量間の瞬時的な作用も考慮する構造 VAR (SVAR) モデルが用いられ (Kilian and Lütkepohl, 2017; 沖本, 2010; 村尾, 2019)，経済学や脳科学など数多くの分野で応用されている．

本節では，類似性を持つ自己回帰型モデルとの比較を通じて，射影演算子法の理解を深めることを目的とした．そのために，良く研究されている VAR モデルの中でも，より適用範囲の広い SVAR モデルとの比較を行った．SVAR モデルは以下の式で与えられる．

$$(3.1) \quad \mathbf{Y}(n) = \sum_{m=0}^p B(m)\mathbf{Y}(n-m) + \boldsymbol{\mu}(n), \quad \boldsymbol{\mu}(n) \sim W.N.(\Sigma),$$

ここで，離散時間  $n$  は整数であり， $\boldsymbol{\mu}(n)$  は予測誤差で分散共分散行列  $\Sigma$  を持つ白色正規乱数である． $V = I - B(0)$  ( $I$  は恒等行列) と置き，式 (3.1) の両辺に  $V^{-1}$  を掛けると，

$$(3.2) \quad \begin{aligned} \mathbf{Y}(n) &= \sum_{m=1}^p V^{-1}B(m)\mathbf{Y}(n-m) + V^{-1}\boldsymbol{\mu}(n), \\ &= \sum_{m=1}^p A(m)\mathbf{Y}(n-m) + \boldsymbol{\xi}(n), \end{aligned}$$

となり，係数に各変量の同時時点間の相関を含まない誘導形が得られる． $\boldsymbol{\xi}(n)$  の分散共分散行列は  $\text{Cov} = V^{-1}\Sigma(V^{-1})^T$  (上付き  $T$  は転置行列) であり，一般に非対角行列となるため誤差項

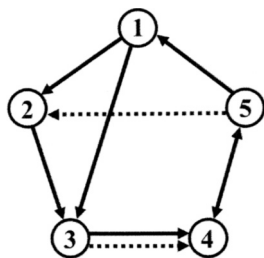


図 3. 設定した変量間の因果性(実線:過去からの影響, 破線:同時点における影響).

表 1. SVAR シミュレーションパラメータ.

$B(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.652 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.463 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$B(1) = \begin{pmatrix} 0.828 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.541 & 0.651 & 0 & 0 & 0 \\ 0.74 & 0 & 0.744 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.456 & 0.73 & 0.3 \\ 0 & 0 & 0 & -0.4 & 0.859 \end{pmatrix}$
	$B(2) = \begin{pmatrix} -0.172 & 0 & 0 & 0 & 0.17 \\ 0 & -0.107 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.238 & -0.139 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.134 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.185 \end{pmatrix}$
$Cov = \begin{pmatrix} 0.1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.143 & 0 & 0 & 0.065 \\ 0 & 0 & 0.1 & -0.046 & 0 \\ 0 & 0 & -0.463 & 0.121 & 0 \\ 0 & 0.065 & 0 & 0 & 0.1 \end{pmatrix}$	$A(1) = \begin{pmatrix} 0.828 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.541 & 0.651 & 0 & -0.261 & 0.56 \\ 0.74 & 0 & 0.744 & 0 & 0 \\ -0.343 & 0 & 0.111 & 0.73 & 0.3 \\ 0 & 0 & 0 & -0.4 & 0.859 \end{pmatrix}$
	$A(2) = \begin{pmatrix} -0.172 & 0 & 0 & 0 & 0.17 \\ 0 & -0.107 & 0 & 0 & -0.121 \\ 0 & 0.238 & -0.139 & 0 & 0 \\ 0 & -0.11 & 0.064 & -0.134 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.185 \end{pmatrix}$

$\xi(n)$  は相関を持つことになる.  $B(0)$  はデータから推定した誘導形の Cov にコレスキー分解を施すことにより求められるが, 識別性の問題により上あるいは下三角成分(対角成分を除く)しか推定することができないことが知られている. つまり変量間の瞬時的作用についてはその方向性が定まらないことになるので, 解析結果の解釈においては先験的な知見を導入する必要がある. シミュレーションでは 5 つの振動子  $\mathbf{Y}(n) = (Y_0(n), \dots, Y_4(n))$  を仮定した. 各々の振動子は異なる減衰率で 0.1Hz で振動し図 3 のような因果性での結合を設定した. シミュレーションデータの生成においてはサンプリング周波数を 1.0Hz とし, 表 1 で示すような係数行列  $B(0), B(1), B(2)$  を用いた.  $\boldsymbol{\mu}(n) = (\mu_0(n), \dots, \mu_4(n))$  は分散  $\mu_E^2 = 0.1$  の独立正規乱数とした. シミュレーションから得られた  $\mathbf{Y}(n)$  の定常確率分布に従う時系列データから連続 10 時間ステップのデータを 199,980 サンプル切り出すことにより, 時系列データセット  $\mathbf{Y}^{(l)}(n)$  ( $n = 0, 1, \dots, 9; l = 0, 1, \dots, 199979$ ) を作成した.

### 3.1.2 射影演算子法による時系列データ解析と一般化 Langevin モデリング

こうして生成されたシミュレーションデータセットに対し, 説明変数として  $\mathbf{g}(n) := \mathbf{Y}(n)$ , 目的変数として次ステップの値  $\mathbf{f}(n) := \mathbf{Y}(n+1)$  を選び, 離散時間射影演算子法を適用して,

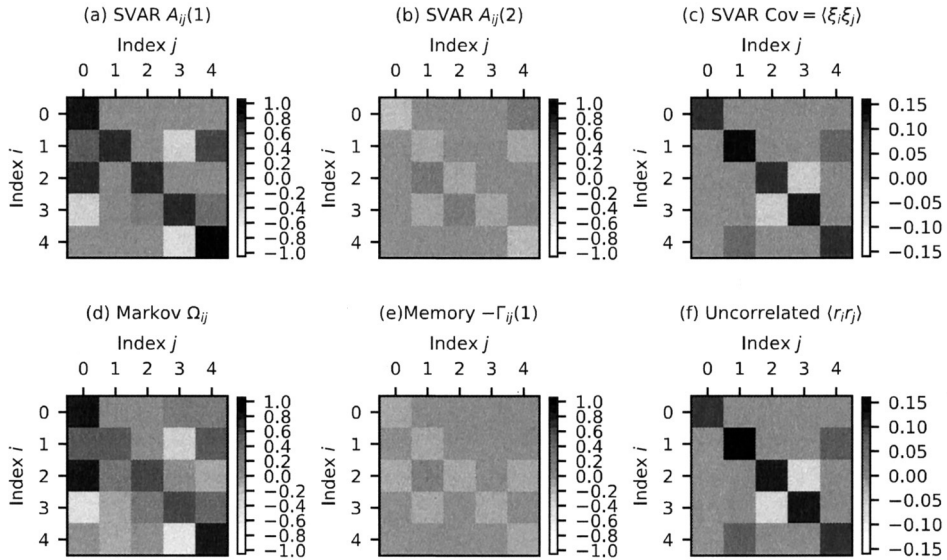


図 4. SVAR モデルと射影演算子法による解析結果の比較. (a) (b) (c) SVAR モデルシミュレーションにおいて表 1 で与えた係数行列  $A(n)$  および誤差項  $\xi(n)$  分散共分散行列, (d) (e) (f) データセットに離散時間射影演算子法を適用することで得られた Markov 係数  $\Omega$  と記憶関数  $\Gamma(n)$  および無相関項  $r(n)$  の分散共分散行列.

Markov 係数  $\Omega$  や記憶関数  $\Gamma(n)$  を評価した. SVAR モデルの誘導形(3.2)と離散時間射影演算子法の式(2.24)を見比べると,  $A(1) \leftrightarrow \Omega$ ,  $A(2) \leftrightarrow -\Gamma(1)$  の類似性が見て取れる. これらの係数の比較を図 4 に示す. 射影演算子法により評価された Markov 係数  $\Omega$  と記憶関数  $\Gamma(n)$  がシミュレーション上で与えた係数行列をおおよそ捉えていることが確認できる. 同様に,  $\xi(n) \leftrightarrow r(n)$  として, 誘導形のノイズ項と射影演算子法により評価される無相関項の間にも類似性が見て取れる. 図 4 から, 射影演算子法により抽出された無相関項が, シミュレーション上で与えたノイズ項の相互相関を捉えていることが確認できる. この例は, 射影演算子法を統計的時系列データセットに適用することで, SVAR モデルと同等の解析が可能であることを示している.

さらに, データセットから評価された Markov 係数  $\Omega$  と記憶関数  $\Gamma(n)$ , 無相関項の相互相関  $\langle rr \rangle$  の値を用いて, 目的変数を  $f(n) = y(n+1)$ , 説明変数を  $g(n) = y(n)$  とした一般化 Langevin モデル(式(2.19))に基づいて時間発展を計算し, 元データに対する再現性テストを行った. この際, 無相関項は相互相関を満たす正規乱数として与えた. 図 5 は元データと再現性テストにより得られた変数を比較したもので, 変数の確率密度分布および相互時間相関といった統計的性質をよく再現している. この例は, 射影演算子法が統計モデリングにも応用できることを示している.

### 3.1.3 射影演算子法と自己回帰分析の相違点

以上の解析では両者の類似性が際立つ結果となったが, 定式化やデータ解析の実装上は以下のような相違点があることを明記しておく.

- 定式化の違い. 自己回帰モデルに基づく時系列データ分析において, 自己回帰モデル式のパラメータは予測誤差平方和を最小にする最小二乗法や予測誤差分散の期待値を最小にする Yule-Walker 法などを用いて推定される. 一方, 射影演算子法は, 説明変数に対する射

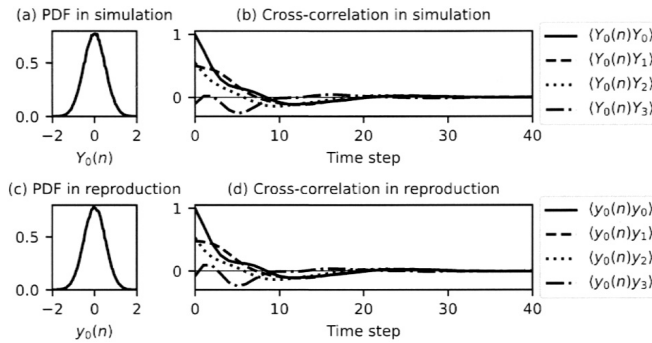


図 5. SVAR モデルと射影演算子法による再現性テストの比較. SVAR モデルシミュレーションの元データから得られた(a)変数  $Y_0(n)$  の確率密度分布(PDF, probability distribution function)と(b)変数間の相互時間相関  $\langle Y_0(n)Y_j \rangle$ . 射影演算子法により評価した係数を用いた一般化 Langevin モデルから得られた(a)変数  $y_0(n)$  の PDF と(b)変数間の相互時間相関  $\langle y_0(n)y_j \rangle$ .

影と補射影の分離に基づいた目的変数の関数展開であり、無相関項は必ずしも最小化されない。

- 適用範囲の違い. SVAR モデルは式(3.1)で与えられ、例えば予測誤差自身が有限の時間相関を持つ場合などは未知入力項を考慮したモデルへの拡張が必要となり、また、説明変数と目的変数が異なる場合なども適切なモデル選択が必要である。一方、射影演算子法はこれらのような場合でも広く適用できる。
- 記憶項の評価長さの選び方の違い. 自己回帰分析においては、モデル方程式の時間遅れの次数  $p$  は解析者が設定する量であり、次数によって評価されるモデル係数も変わりうる。適切な次数は、データの再現性とモデル自由度の最小化の観点から、AIC などの基準によって決定される。一方、射影演算子法における記憶関数は式(2.27)または式(2.30)に従って構成されるため、その上限時刻の取り方に依らず一意に定まる。記憶項の持つ特徴時間は、(選択した射影演算子  $\mathcal{P}$  で表現できる範囲で)データ間の相関が失われるまでの時間であり、背後の物理的ダイナミクスを反映したものであると考えられる。
- 第 2 種揺動散逸定理の有無. 自己回帰分析においては予測誤差  $\mu(t)$  はモデル係数  $B(m)$  と無関係であり、時間相関を持たない白色乱数になりえる。一方、射影演算子法では、第 2 種揺動散逸定理により無相関項は記憶関数と関連付けられるため、記憶時間が有限であれば無相関項も同等の時間相関を持つ。

こうした違いがありつつも、本節での比較結果から、射影演算子法の目的・説明変数を自己回帰形に選んで解析に適用した場合は、SVAR における推定パラメータと同等の Markov 係数・記憶関数といった相関が抽出可能であることが示された。

### 3.2 応用例 2. 二次元長谷川-若谷プラズマ乱流

#### 3.2.1 本節の物理的背景と射影演算子法を適用する動機

より現実的な物理現象解析の事例として、プラズマ乱流現象への適用について述べる。非平衡状態にあるプラズマ中では、密度・温度勾配といった熱力学的力を駆動源とする微視的不安定性により、複雑な流れを持つ乱流が生じる。プラズマ乱流では、流れが高周波・短波長で乱雑に振舞うように見えても、同時に、より時間・空間的に秩序だった構造を自発的に形成する

ことがある．例えば，磁化プラズマ中で乱流が作り出す帯状流（ゾナルフロー，Zonal flows）は，核融合プラズマの閉じ込め改善に寄与するとして広く研究されている（藤澤, 2005）．帯状流は閉じ込め磁場に沿って一様な構造によって特徴づけられる対称性の高い流れであり，大気準地衡流における Rossby 波が作り出すジェット気流とも共通する自己組織化現象の一例として知られる．

乱流による帯状流の形成機構に関する既存理論として，微視的不安定性により成長する波の振幅が一定以上になると，Kelvin-Helmholtz 不安定性などの 2 次的不安定性により崩壊し，その際に帯状流を励起するといった機構が準線形解析により示されている（Rogers et al., 2000）．しかし，このような解析はあくまで過渡的な振る舞いであり，準定常的な飽和した乱流状態を記述するものではない．別のよく用いられる方法はエネルギーバランス解析であり，帯状流は線形駆動項を持たないため，時間平均的には，乱流との非線形相互作用項が帯状流の粘性散逸項と釣り合うことになる．つまり，単純な時間平均での理解では，乱流は帯状流の駆動に働いていると言える．一方で，帯状流と乱流との非線形相互作用項の時々刻々の変化を観察してみると，時間的に正負に激しく変動し，瞬時的には駆動にも減衰にも働く．実験や数値シミュレーションで乱流と帯状流が共存した状態が観測されている通り，こうした一見乱雑にみえる時間変動も単にランダムな運動ではなく，帯状流を生成・維持する働きを持つはずである．その実効的な相互作用を抽出するには，過渡的な準線形解析や時間平均値での解析だけでは十分でないことが分かる．

射影演算子法は，確率的時系列データの間の相関を抽出する．そこで，上述のような一見乱雑にみえる乱流と帯状流の非線形相互作用の解析に利用することで，既存の時間平均解析では見えてこなかった動的相関が評価できるとの着想に至った．

### 3.2.2 長谷川-若谷方程式

プラズマ物理では，粒子速度分布関数を用いる運動論方程式から 1 流体に簡約化された電磁流体方程式まで，解析する物理現象の時間・空間スケールに応じて様々な基礎方程式が用いられる（石澤, 2014）．ここでは，微視的不安定性による乱流の駆動と非線形相互作用を介した帯状流の形成を表わす簡潔な方程式として，長谷川-若谷方程式（Wakatani and Hasegawa, 1984）に基づく解析を行う．一様背景磁場  $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$ ，2 次元  $(x, y)$  局所乱流近似の仮定の下で，無次元化された長谷川-若谷方程式は以下で与えられる．

$$(3.3) \quad \frac{\partial \omega}{\partial t} - \nabla \phi \times \hat{z} \cdot \nabla \omega = C(\phi - \omega) - \nu \nabla^4 \omega,$$

$$(3.4) \quad \frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \phi \times \hat{z} \cdot \nabla n + \kappa \frac{\partial \phi}{\partial y} = C(\phi - n) - \nu \nabla^4 n,$$

ここで， $t$  は連続時間であり， $\phi(x, y, t)$ ， $\omega(x, y, t) = \nabla^2 \phi$ ， $n(x, y, t)$  は静電ポテンシャル，渦度，プラズマの密度の揺らぎを表す． $\kappa$  は背景プラズマ密度勾配を表すパラメータ， $C \propto \nabla_{\parallel}^2$  は断熱パラメータと呼ばれる有限の電気抵抗による電子の Boltzmann 応答からのずれを表す量であり，本研究では  $\nabla_{\parallel} \propto \partial_y$  を仮定して， $C = -c_a \partial_y^2$  により与えた．式 (3.3)，(3.4) は，背景密度勾配を駆動源として不安定化する抵抗性ドリフト波乱流と，乱流から形成される  $y$  方向に一様な流れである帯状流の相互作用のダイナミクスを記述する．そこで，帯状流の生成・崩壊メカニズムを分析するために，Fourier 変換した渦度方程式 (3.3) の帯状流成分 ( $\mathbf{k} = k_x \hat{x}$ ,  $k_y = 0$ ) に関する式に着目した解析を行った．

$$(3.5) \quad \frac{d\omega_{\mathbf{k}}}{dt} = I_{\mathbf{k}} - \nu k_x^4 \omega_{\mathbf{k}},$$

$$(3.6) \quad I_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}'', \mathbf{k}} \mathbf{k}' \times \hat{z} \cdot \mathbf{k}'' \phi_{\mathbf{k}'} \omega_{\mathbf{k}''}.$$



非線形相互作用項  $I_k$  は、三波結合条件  $k' + k'' = k$  を満たす乱流揺動  $k', k''$  が帯状流  $k$  の時間発展に影響を与えることを示している。また、準定常乱流 ( $d_t \langle |\omega_k|^2 \rangle = 0$ ) を考えると、式(3.5)から導かれるエンストロフィーの保存則より、非線形項は粘性  $\nu$  による散逸と釣り合うように、 $\text{Re}[\omega_k^* I_k] = \nu k_x^4 |\omega_k|^2 > 0$  となることからわかる。つまり前述の通り、単純な時間平均の描像からは、乱流相互作用による非線形項は帯状流の駆動に働くという理解が得られる。

### 3.2.3 連続時間射影演算子法の適用による乱流・帯状流相互作用の抽出

一方で、実際に渦度の帯状流成分  $\omega_k$  やそれに対する非線形項  $I_k$  の時系列データをプロットしてみると、乱流の時間スケールで激しく振動するデータが得られる(図1は実際にこれらの実部を図示した例であった)。そこで、目的変数を非線形項  $f(t) := I_k(t)$ 、説明変数を帯状流の渦度  $g(t) := \omega_k(t)$  として連続時間射影演算子法を適用することで、非線形項の動的性質を抽出することを試みた。図6(a)に示すように、非線形項を、帯状流と相関してゆっくりと変動する相関部分(Markov項はこの場合小さく、主として記憶項)と、相関を持たずに振動する無相関項に分離できている。乱流成分  $k', k''$  のダイナミクスで決まる非線形項はほぼ帯状流と無相関に振動している  $f(t) \sim r(t)$  が、有限の記憶項を持つことが分かる。評価された記憶関数を図6(b)に示す。記憶関数はほぼ正の実部を持つ減衰関数であり、指数関数  $\Gamma(t) = \gamma/\tau \exp(-t/\tau)$  でよく近似される。この非線形項と帯状流の相関を失うまでの記憶の時定数  $\tau \sim 1$  は、帯状流の変動の時間スケール(おおよそ図6の記憶項  $M(t)$  と同程度の時間スケール  $\sim 10$ ) に比べて短いため、記憶関数を  $\Gamma(s) \sim 2\gamma\delta(s)$  としてデルタ関数で表す Markov 近似で解釈できる。このとき、非線形項は  $I_k(t) \sim -\gamma\omega_k(t) + r(t)$  として表され、 $\gamma > 0$  であることから、記憶項が負の係数項として寄与することが示された。物理的には、一見乱雑に変動する乱流との非線形相互作用項が帯状流と相関を持ち、その相関部分(記憶項)は帯状流の減衰に働いていることを意味する。加えて、無相関項を乱数モデルで置き換えた  $I_k$  の一般化 Langevin モデルと式(3.5)を解くことで再現性テストを行った結果、帯状流のエネルギースペクトルをおおよそ再現することが確認された。こうして、記憶項は帯状流を減衰させるように働く一方、無相関項は帯状流の確率的駆動として働くことが示された。

上記の解析結果は、乱流と帯状流間の非線形相互作用に対する以下の様な物理解釈を示唆すると考えられる。まず、帯状流に対する相関項(記憶項)は乱流-帯状流相互作用を表し、乱流存在下では帯状流が典型的に阻害される傾向にあることを表している。一方、帯状流に対する

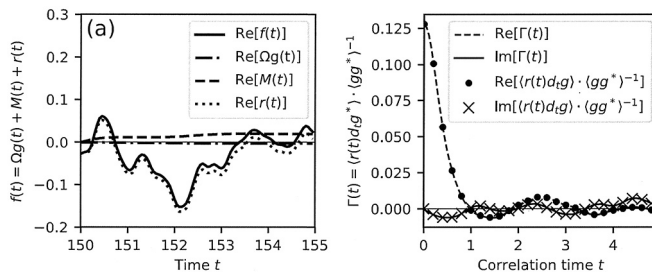


図6. 長谷川-若谷プラズマ乱流シミュレーションの時系列データセットから、帯状流に対する乱流非線形相互作用項  $f(t) = I_k(t)$  と帯状流渦度  $g(t) = \omega_k(t)$  に対して射影演算子法を適用した解析結果 ( $k_x = 0.3$ )。 (a) 射影演算子法による非線形項  $f(t)$  の Markov 項  $\Omega g(t)$ 、記憶項  $M(t) = -\int_0^t \Gamma(t-s)g(s)ds$ 、無相関項  $r(t)$  への分解を、ある1サンプルについて例示。 (b) 評価された記憶関数  $\Gamma(t)$  の実部・虚部。一般化第2種揺動散逸定理(式(2.18))が数値的に成立していることも併せて確認された。

無相関項は乱流-乱流相互作用を表し、乱流渦の位相が偶然そろった時に起こる帯状流の確率的な駆動または減衰を表している。単純な時間平均解析ではなく、射影演算子法により非線形相互作用の動的性質を抽出することで得られたこれらの結果は、乱流-帯状流共存系における相互作用を一般化 Langevin 描像として捉える新しい解釈を提供する。

#### 4. おわりに

本研究では、統計的時系列データ解析としての射影演算子法について焦点を当てた。その定式化、および、時系列データ解析・モデリングへの適用という観点から、本研究で取り組む3つの問題を第1.2節で定義した。

第2節では、定式化に関する問題(1)について、射影演算子として森の線形射影(有限ランク射影)を用いた場合に、目的変数を任意関数とする定式化の拡張を行い、連続時間および離散時間射影演算子法に対する拡張された一般化第2種揺動散逸定理を新たに導出した。

第3.1節では、自己回帰モデルとの類似点・相違点の問題(2)について、SVARモデルに基づく数値シミュレーションデータに射影演算子法を適用することで、両者の比較を行った。射影演算子法により得られた記憶関数が自己回帰モデル係数を上手く捉えていること、導出された一般化 Langevin 形式に基づいて元データの統計的性質の再現が可能であるという結果が得られた。射影演算子法は任意の目的・説明変数に対する定式化であるため SVAR モデルよりも広い適用範囲を持つこと、射影演算子法を自己回帰的に用いた場合は SVAR モデルと同等の相関を抽出可能であることを持つことが示された。

第3.2節では、物理現象への適用性の問題(3)に関連して、2次元長谷川-若谷プラズマ乱流シミュレーションから得られる時系列データセットに射影演算子法を適用した。帯状流の生成・維持過程の理解を目的として、乱流との非線形相互作用項と帯状流との相関を解析した。その結果、記憶項が帯状流の減衰に働き、無相関項が帯状流の確率的駆動に働く一般化 Langevin 描像として解釈できることを示した。以上の結果は、射影演算子法の実物理現象の応用例の拡大、一般化 Langevin 描像としての物理解釈を与えるデータ解析としての有効性、確率的時系列データ再現のためのモデリングへの応用性を示している。

本研究で説明した射影演算子法は、特定の物理現象に依らない、統計的時系列データセットに対する汎用的な解析手法である。本文中でも述べた通り、射影演算子法はモデルの当てはめではなく、射影と補射影の分離に基づく関数展開であり、時系列データの持つノイズの性質に依らない柔軟な解析が可能である。射影演算子法の解析プログラムはオープンソースとして提供されているため、興味を持った読者は、目的変数と説明変数の時系列データセットを用意すれば、直ちに Markov 係数や記憶関数の評価が行える。目的変数や説明変数をどのように選ぶか、得られた一般化 Langevin 形式からどのような物理を抽出するかは解析者の嗜好に依るところだが、第3節で示したいいくつかの事例が着想の起点になれば幸いである。

#### 謝 辞

本研究の一部は JSPS 科研費 JP20K03892, JP21H04874, JP19K12212 の研究助成の下で行われました。本共同研究は統計数理研究所統計思考院共同研究スタートアップ 2021-11「射影演算子法に基づく時系列データの統計」の枠組みの下で行われました。

#### ソースコードおよびデータの可用性

射影演算子法の汎用解析プログラムはオープンソースとして、<https://github.com/>

smaeyama/mzprojection/で公開されています。第3.1節に関するSVARモデルシミュレーションコードおよび解析プログラムは、[https://github.com/smaeyama/maeyama\\_toukeisuri\\_2023/](https://github.com/smaeyama/maeyama_toukeisuri_2023/)で公開されます。

注.

- 1) 注意深く区別すると、統計的定常性あるいは時間並進対称性(式(2.3))が成り立つ  $\mathbf{u}(t)$  の任意関数  $\mathbf{f}(t)$  や  $\mathbf{g}(t)$  とは異なり、無相関項はある時刻の  $\mathbf{u}(t)$  だけでは決定されず、初期時刻  $t = 0$  に補射影に入っていた部分  $\mathbf{r}(0) = \mathcal{Q}\mathbf{f}(0)$  を起点として、補射影に入り続ける部分として定義されているため、 $\mathbf{r}(t)$  については統計的時間並進対称性が成立しない。式(2.14)は、 $r_i(t)$  と初期値  $\mathbf{g}(0)$  に対する統計平均操作として定義される。
- 2) 記憶関数の表式から Koopman 演算子  $\mathcal{M}$  を除去する変形について補足する。離散時間システムにおける無相関項と記憶関数の定義(式(2.26)中辺)より、 $\mathbf{r}(n) = \mathcal{Q}\mathcal{M}\mathbf{r}(n-1) = \mathcal{M}\mathbf{r}(n-1) - \mathcal{P}\mathcal{M}\mathbf{r}(n-1) = \mathcal{M}\mathbf{r}(n-1) + \Gamma(n) \cdot \mathbf{g}(0)$  であり、 $\mathbf{g}(1)$  をかけて統計平均をとることで、 $\langle \mathbf{r}(n)\mathbf{g}(1) \rangle = \Gamma(n) \cdot \langle \mathbf{g}\mathbf{g}(1) \rangle$  という式(2.26)最右辺の関係式を得る。ここで、無相関項の性質(式(2.23))  $\langle \mathbf{r}(n-1)\mathbf{g}(0) \rangle = 0$  に  $\mathcal{M}$  を作用させて  $\mathcal{M}\langle \mathbf{r}(n-1)\mathbf{g}(0) \rangle = \langle \mathcal{M}\mathbf{r}(n-1)\mathbf{g}(1) \rangle = 0$  となることを用いた。連続時間システムにおける Liouville 演算子 (=時間微分演算子)  $\Lambda$  は、関数の積に作用した場合  $\Lambda(FG) = (\Lambda F)G + F(\Lambda G)$  という分配則が成り立つが、離散時間システムにおける Koopman 演算子  $\mathcal{M}$  は、関数の積もやはり関数  $F(\mathbf{u})G(\mathbf{u}) = (FG)(\mathbf{u})$  であることから、 $\mathcal{M}(FG) = (FG) \circ \mathbf{N}(\mathbf{u}(n)) = (FG)(\mathbf{u}(n+1)) = F(\mathbf{u}(n+1))G(\mathbf{u}(n+1)) = (\mathcal{M}F)(\mathcal{M}G)$  となることに注意。

## 参 考 文 献

- Akaike, H. (1973). Information theory and an extension of the maximum likelihood principle, *Proceedings of the 2nd International Symposium on Information Theory* (eds. B. N. Petrov and F. Csaki), Akademiai Kiado, Budapest.
- Arnold, V. I. and Avez, A. (1968). *Ergodic Problems of Classical Mechanics*, Benjamin Inc., New York and Amsterdam.
- アーノルド, ウラミジール, アベズ, アンドレ (1972). 『古典力学のエルゴード問題』(吉田 耕作 訳), 吉岡書店, 京都.
- Chorin, A. J. and Lu, F. (2015). Discrete approach to stochastic parametrization and dimension reduction in nonlinear dynamics, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **112**(32), 9804–9809.
- Chorin, A. J. and Stinis, P. (2006). Problem reduction, renormalization, and memory, *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, **1**(1), 1–27.
- Chorin, A. J., Hald, O. H. and Kupferman, R. (2000). Optimal prediction and the Mori-Zwanzig representation of irreversible processes, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **97**(7), 2968–2973.
- Chorin, A. J., Hald, O. H. and Kupferman, R. (2002). Optimal prediction with memory, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **166**(3), 239–257.
- Darve, E., Solomon, J. and Kia, A. (2009). Computing generalized Langevin equations and generalized Fokker-Planck equations, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **106**(27), 10884–10889.
- Español, P. (1995). Hydrodynamics from dissipative particle dynamics, *Physical Review E*, **52**(2), 1734–1742.
- 藤坂博一 (1998). 『非平衡系の統計力学』, 産業図書, 東京.

- 藤澤彰英 (2005). ゾーナルフロー研究の現状と展望, *プラズマ・核融合学会誌*, **81**(12), 971–1006.
- Gouasmi, A., Parish, E. J. and Duraisamy, K. (2017). A priori estimation of memory effects in reduced-order models of nonlinear systems using the Mori-Zwanzig formalism, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **473**(2205), 20170385.
- Granger, C. (1969). Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods, *Econometrica*, **37**(3), 424–438.
- Hald, O. H. and Stinis, P. (2007). Optimal prediction and the rate of decay for solutions of the Euler equations in two and three dimensions, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **104**(16), 6527–6532.
- 石澤明宏 (2014). 二流体およびジャイロ流体方程式系とその MHD 不安定性解析への応用, *プラズマ・核融合学会誌*, **90**(4), 213–227.
- 川崎恭治 (2009). 『非平衡と相転移—メソスケールの統計物理学—』, 朝倉書店, 東京.
- Kilian, L. and Lütkepohl, H. (2017). *Structural Vector Autoregressive Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Lin, K. K. and Lu, F. (2021). Data-driven model reduction, Wiener projections, and the Koopman-Mori-Zwanzig formalism, *Journal of Computational Physics*, **424**, 109864.
- Lin, Y. T., Tian, Y., Livescu, D. and Anghel, M. (2021). Data-driven learning for the Mori-Zwanzig formalism: A generalization of the Koopman learning framework, *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, **20**(4), 2558–2601.
- Lin, Y. T., Tian, Y., Perez, D. and Livescu, D. (2022). Regression-based projection for learning Mori-Zwanzig operators, <http://dx.doi.org/10.48550/ARXIV.2205.05135>.
- Maeyama, S. and Watanabe, T.-H. (2020). Extracting and modeling the effects of small-scale fluctuations on large-scale fluctuations by Mori-Zwanzig projection operator method, *Journal of the Physical Society of Japan*, **89**(2), 024401.
- Meyer, H., Pelagejcev, P. and Schilling, T. (2020). Non-Markovian out-of-equilibrium dynamics: A general numerical procedure to construct time-dependent memory kernels for coarse-grained observables, *EPL (Europhysics Letters)*, **128**(4), 40001.
- Mori, H. (1965). Transport, collective motion, and Brownian motion, *Progress of Theoretical Physics*, **33**(3), 423–455.
- Mori, H. and Okamura, M. (2007). Dynamic structures of the time correlation functions of chaotic nonequilibrium fluctuations, *Physical Review E*, **76**, 061104.
- Munakata, T. (1994). Nonequilibrium statistical-mechanical approach to discrete-time dynamics, *Physical Review E*, **50**, 2351–2354.
- 宗像豊哲 (1996). 『物理統計学』, 朝倉書店, 東京.
- 村尾 博 (2019). 『R で学ぶ VAR 実証分析時系列分析の基礎から予測まで』, オーム社, 東京.
- Okamura, M. (2006). Validity of the essential assumption in a projection operator method, *Physical Review E*, **74**, 046210.
- 岡村 誠 (2014). 射影演算子法の基礎とカオス・乱流への応用, *日本流体力学会誌 ながれ*, **33**(1), 11–22.
- 沖本竜義 (2010). 『経済・ファイナンスデータの計量時系列分析』, 朝倉書店, 東京.
- Parish, E. J. and Duraisamy, K. (2017). A dynamic subgrid scale model for large eddy simulations based on the Mori-Zwanzig formalism, *Journal of Computational Physics*, **349**, 154–175.
- Rogers, B. N., Dorland, W. and M., K. (2000). Generation and stability of zonal flows in ion-temperature-gradient mode turbulence, *Physical Review Letters*, **85**(25), 5336–5339.
- Stinis, P. (2004). Stochastic optimal prediction for the Kuramoto-Sivashinsky equation, *Multiscale Modeling & Simulation*, **2**(4), 580–612.
- Stinis, P. (2013). Renormalized reduced models for singular PDEs, *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, **8**(1), 39–66.
- Stinis, P. (2015). Renormalized Mori-Zwanzig-reduced models for systems without scale separation, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **471**(2176),

20140446.

鈴木増雄 (2000). 『統計力学(現代物理学叢書)』, 岩波書店, 東京.

Wakatani, M. and Hasegawa, A. (1984). A collisional drift wave description of plasma edge turbulence, *The Physics of Fluids*, **27**(3), 611–618.

山本義隆, 中村孔一 (1999). 『解析力学 I, II』, 朝倉書店, 東京.

Zwanzig, R. (1961). Memory effects in irreversible thermodynamics, *Physical Review*, **124**(4), 983–992.

Zwanzig, R. (1980). Problems in nonlinear transport theory, *Systems far from Equilibrium* (ed. L. Garrido), 198–225, Springer, Berlin, Heidelberg.

# Statistical Analysis of Time-series Data Using the Projection Operator Method and Its Application

Shinya Maeyama<sup>1</sup> and Fumikazu Miwakeichi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Nagoya University

<sup>2</sup>The Institute of Statistical Mathematics

The projection operator method is a mathematical method developed in nonequilibrium statistical physics, where the time evolution of the response variable is split into correlated and uncorrelated terms for the explanatory variables and are described as a generalized Langevin equation. The projection operator method is practically applicable for the statistical analysis of time-series data. In the present study, we revisited its formulation and extended it to arbitrary explanatory and response variables in continuous and discrete-time systems. We also compared the method with a structural vector auto-regressive (SVAR) model as a time-series analysis having similar structures. The projection operator method has a wider application range than the SVAR model and can extract equivalent correlations with the SVAR model when auto-regressive explanatory and response variables are employed. As an application example, we applied the projection operator method to plasma turbulence phenomena and explained zonal-flow generation/maintenance processes in a generalized Langevin description. These examples demonstrate the validity of the projection operator method in data analysis for physics interpretation and modeling for reproducing statistical time-series data. We provide the developed method in this study as an open-source Python code, allowing readers to use it by calling a simple function.

# 核融合プラズマ制御に向けたデータ同化 システムの開発

森下 侑哉<sup>1</sup>・村上 定義<sup>1</sup>・横山 雅之<sup>2,5</sup>・上野 玄太<sup>3,4,6</sup>

(受付 2022 年 6 月 30 日; 改訂 10 月 23 日; 採択 10 月 28 日)

## 要 旨

核融合プラズマの高精度な解析・制御を実現するため、核融合プラズマの統合シミュレーションコードをシステムモデルとするデータ同化システム ASTI の開発を進めている。ASTI の最終的な目的は核融合プラズマの制御にあるが、既存のデータ同化の枠組みは制御の要素を含んでいない。そのため本研究では、逐次ベイズフィルタを拡張し、観測データを用いたシステムモデルの最適化と目標状態を実現する制御入力推定とを統合したデータ同化フレームワークを新たに開発した。本稿では、ASTI の概要を紹介するとともに、開発した制御用データ同化フレームワークについて説明する。また、数値空間上の仮想プラズマを ASTI によって制御する数値実験の結果を紹介する。

キーワード：データ同化、モデル予測制御、核融合プラズマ。

## 1. はじめに

次世代の発電方法として、核融合による発電が注目されている。核融合発電の方式の一つである磁場閉じ込め核融合では、磁力線により編み込まれたカゴにプラズマを閉じ込め、1 億度を超える高温かつ高密度な状態に維持する。こうした極限状態にある核融合プラズマは、様々な時空間スケールの物理現象が混在する複雑系であり、その全体挙動のシミュレーションには、各物理現象を表現するモジュールを結合した統合コードが用いられる。核融合プラズマ全体の予測や解析、運転シナリオ策定、炉設計などに利用するために世界各地で様々な統合コードの開発が進められている。また、将来の核融合炉の運転には、プラズマを常に監視し、加熱等を制御するシステムが必要となる。この制御には、シミュレーションによる挙動予測に基づいて制御を決定するモデル予測制御(足立, 2014)が必要になると考えられ、その予測モデルとしても統合コードが重要となる。

統合コードは様々な面で活用が期待されるが、計算結果の不確実性や計算コストといった問題も抱えている。統合コードを構成する各モジュールは少なからず不確実な部分を持ってお

<sup>1</sup> 京都大学大学院 工学研究科：〒615-8540 京都府京都市西京区京大桂

<sup>2</sup> 核融合科学研究所 六ヶ所研究センター：〒039-3212 青森県上北郡六ヶ所村大字尾駱字表館 2-166

<sup>3</sup> 統計数理研究所：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

<sup>4</sup> データサイエンス共同利用基盤施設：〒190-0014 東京都立川市緑町 10-3

<sup>5</sup> 総合研究大学院大学 物理科学研究科核融合科学専攻：〒509-5292 岐阜県土岐市下石町 322-6

<sup>6</sup> 総合研究大学院大学 複合科学研究科統計科学専攻：〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

り、これらの結合による相互作用も加わって、シミュレーション結果が大きな不確実性を持つことがある。特に、乱流輸送はプラズマの挙動を大きく左右する重要な物理過程であるにも関わらず、精度の高いモデルは未だ開発できていない。また、多くのモジュールで計算コストの大きい複雑なモデルを解いていることや、考慮が不十分な要素(例えば、プラズマを囲う壁の状態など)がプラズマ性能に無視できない影響を与えることを考えると、現状の統合コードを用いて実時間でモデル予測制御を行うのは困難であると考えざるを得ない。

こうした問題を解決し、核融合プラズマの複雑な挙動を予測・制御するシステムを構築するため、著者らは統合コードを用いたデータ同化システム ASTI (Assimilation System for Toroidal plasma Integrated simulation) (Morishita et al., 2022)を開発している。データ同化(樋口 他, 2011; Gettelman et al., 2022)とは、観測データを用いてシミュレーションを最適化する統計的手法であり、気象予測や海洋解析をはじめとする多くの分野で活躍している。状態変数として定義した物理変数やモデルパラメータを観測情報に基づいて逐次的に最適化することで、システムモデルの挙動を実システムに近づけることができ、予測精度を高めることができる。また、解析的な用途として、観測データに対して時空間的に整合性の高いモデルパラメータや非観測量の推定を行うことができる。図1は、データ同化システム ASTI のイメージ図である。ASTIによって、統合コードによるシミュレーションと観測とが確率分布を介して繋がり、観測情報を用いた統合コードの最適化やモデル推定が可能となっている。ASTIの大きな特徴は、核融合プラズマの複雑な挙動の予測制御をデータ同化を応用して実現しようとしている点にある。そのため、データ同化システムから実システム(核融合炉)への働きかけを含んだ新たなデータ同化フレームワーク DACS(Data Assimilation and Control System)を開発している。また、ASTIは解析システムとしての側面も持っており、核融合分野に蓄積されてきた多種多様な計測データを用いて、より高性能なモデル開発を行うことができる。ASTIは、数値空間と実空間とをつなぐ総合的なシステムになることが期待される。

本稿では、核融合分野のデータ同化の取り組みについて、特に ASTI の制御システムとしての側面に重点を置いて紹介する。一般的なデータ同化は、限られた観測情報から状態変数を推定するオブザーバーの技術であり、制御推定といった実システムへの能動的な働きかけを含んでいない。そこで本研究では、ASTIの基盤となるデータ同化のフレームワーク(逐次バイズフィルタ)を、図2に示すように、制御を含む形へと拡張した。この DACS フレームワークにより、観測を用いてシステムモデルの不確実性を抑えつつ、目標状態を実現する制御入力を推定することができる。制御の分野では適応モデル予測制御に該当し、また、デジタルツイン(Liu et al., 2021; Kapteyn et al., 2021)を実現する一手法となる。これまで解析システムとし

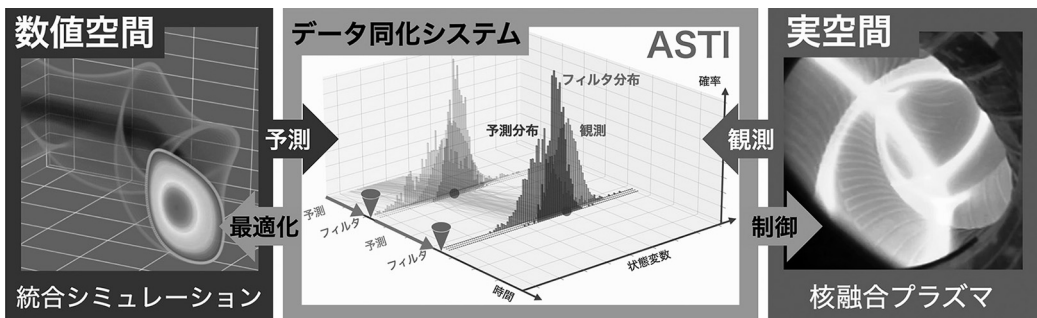


図1. 核融合分野におけるデータ同化システム ASTI.



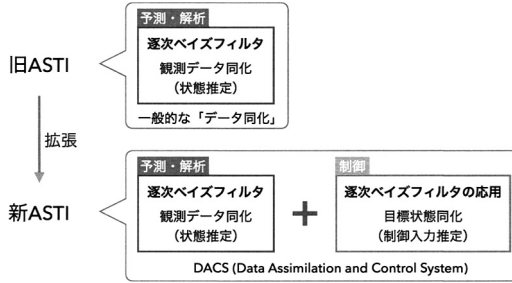


図 2. ASTI の拡張.

て開発してきた ASTI に、DACS フレームワークに基づいた制御システムとしての機能を追加し、数値空間上の仮想プラズマを制御する数値実験を通してその有効性を検証した。次節において逐次ベイズフィルタと ASTI の概要を説明した後、第 3 節において制御への取り組みを紹介する。

## 2. データ同化システム ASTI

ASTI では、データ同化手法の一つである逐次ベイズフィルタの枠組みに核融合プラズマの統合シミュレーションコード TASK3D (Murakami et al., 2015) を組み込んでいる。ここで、簡単に逐次ベイズフィルタについて説明する。まず以下のようなシステムモデル (2.1) と観測モデル (2.2) から成る状態空間モデルを考える。

$$(2.1) \quad \mathbf{x}_t = f_t(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{v}_t)$$

$$(2.2) \quad \mathbf{y}_t = h_t(\mathbf{x}_t, \mathbf{w}_t)$$

ここで、 $\mathbf{x}_t$  は時刻  $t$  における状態ベクトルであり、 $\mathbf{y}_t$  は観測ベクトルである。システムモデル (2.1) は状態ベクトルの時間発展を表現しており、時間発展に伴うノイズ (システムノイズ)  $\mathbf{v}_t$  が考慮される。式 (2.1) 中の時間発展演算子  $f_t$  が統合コード TASK3D に対応している。観測モデル (2.2) は、観測ベクトルと状態ベクトルの関係性を表現しており、観測ノイズ  $\mathbf{w}_t$  が考慮される。観測機器に起因する測定誤差に加え、シミュレーションモデルが考慮していない (表現し切れなかった) 成分による誤差もこの観測ノイズに含まれる。システムモデルが状態ベクトルを観測の時刻まで運び、観測モデルが状態ベクトルと観測の比較を可能にする。

逐次ベイズフィルタでは、状態ベクトルの確率分布 (状態分布) の時間発展を追う。今、時刻  $t_i$  の状態ベクトルの確率分布  $p(\mathbf{x}_i | \mathbf{y}_{0:i})$  が所与であるとする。ここで、時刻  $t_i$  までの観測情報  $\mathbf{y}_{0:i} \equiv \{\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_i\}$  はこの状態分布に反映されているものとする。システムモデルを用いることで次の観測時点  $t_{i+1}$  における予測分布  $p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i})$  を得ることができる。観測時点  $t_{i+1}$  において観測  $\mathbf{y}_{i+1}$  が得られると、 $p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i})$  を事前分布とし、観測モデルを用いて計算される尤度分布を用いることでベイズの定理が適用できる。こうして状態ベクトルの確率分布は、新たな観測情報  $\mathbf{y}_{i+1}$  を取り込んだ事後分布 (フィルタ分布)  $p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i+1})$  へと更新される。この最適化操作はフィルタと呼ばれ、この事後分布を用いてさらに次時点への予測を行う。逐次ベイズフィルタは、この予測とフィルタの繰り返しであり、各ステップで状態分布は以下のように変化する。

予測：

$$(2.3) \quad p(\mathbf{x}_i | \mathbf{y}_{0:i}) \rightarrow p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i}).$$

フィルタ：

$$(2.4) \quad p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i}) \rightarrow p(\mathbf{x}_{i+1} | \mathbf{y}_{0:i+1}).$$

ここでは、具体的な数式の計算に立ち入らずに逐次ベイズフィルタを説明した。詳細は、(樋口他, 2011)などを参照されたい。

一般にデータ同化を必要とするのは複雑で非線形なシステムであるため、逐次ベイズフィルタを実現するためには工夫が必要である。非線形なシステムでも実行できる強力なデータ同化手法として、アンサンブルカルマンフィルタ(EnKF) (Evensen, 2003)や粒子フィルタ(PF) (Kitagawa, 1996)などの状態分布を有限個のアンサンブルメンバーで近似する手法がある。個々のアンサンブルメンバーをシミュレーションモデルを用いて時間発展させることで予測分布を近似するアンサンブルを計算し、観測データに基づいてアンサンブルメンバーを再構成することでフィルタを実現する。EnKFは、状態分布をガウス分布だと仮定して(すなわち、アンサンブルの2次のモーメントまでを用いて)フィルタを行う手法であり、行列計算によりフィルタを実行できる。その反面、システム非線形性が強く、変数間の関係を線形の範囲で捉えきれない場合(分布がガウス分布から大きく離れる場合)や観測モデルが非線形な場合には、必ずしも推定がうまくいくとは限らない。PFは分布形状に一切の仮定を置かない反面、分布を有限個のアンサンブルメンバーで近似することの影響を受けやすいため、EnKFに比べ多くのアンサンブルメンバーを必要とする(上野, 2019)。ASTIにはEnKFとPFを実装しているが、多くの場合、EnKFで十分対応できることを確認している。

ASTIでは、システムモデルとして統合コードTASK3Dが用いられている。磁場閉じ込め核融合プラズマは、磁力線がトーラスを稠密に周回することで作られる面(磁気面と呼ばれる)を利用して閉じ込められる(図3)。磁気面は入れ子構造を作っており、荷電粒子が磁力線に巻き付く性質を利用してプラズマを閉じ込めている。荷電粒子は磁力線方向に素早く動くため、磁気面上で物理量が一定であるとする仮定を置くことができ、図3のような複雑なトーラス形状のプラズマでも磁気面についての一次元流体に近似して取り扱うことができる。これは核融合プラズマのマクロな取り扱いの一例であり、この一次元流体を特徴付けるパラメータとして、規格化小半径 $\rho$ を用いる。 $\rho$ は、0が中心の磁気面(磁気軸)、1がプラズマの最も外側の磁気面に対応する(図3)。TASK3Dもこの一次元流体近似を用いており、磁気面を横切る方向(径方

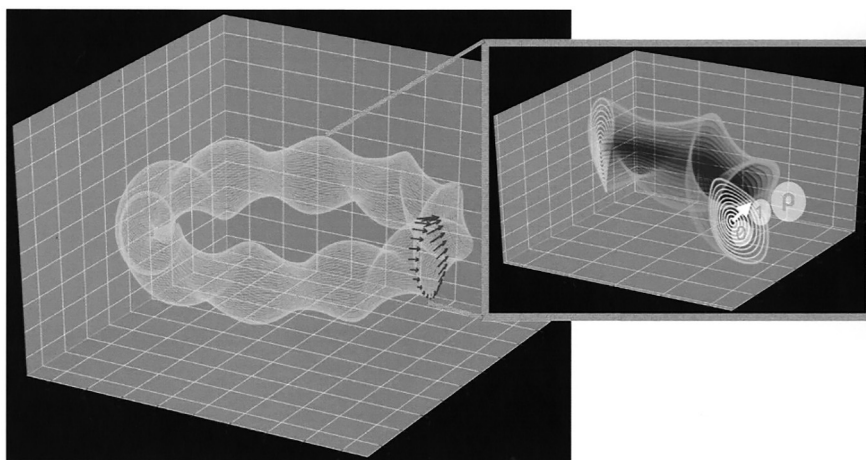


図 3. 磁力線によって作られる磁気面の例(左)とその入れ子構造(右)。

向)の粒子と熱の輸送現象に問題の焦点を絞っている。様々な物理過程から統合的に評価される拡散係数や対流速度，ソース項を用いて，粒子と熱の一次元輸送方程式を連立して解き，各粒子種の密度と温度の時間発展を計算することができる。

これまでに，ASTIを用いて大型ヘリカル装置(LHD) (Takeiri et al., 2017)における粒子・熱輸送のデータ同化を行ってきた(Morishita et al., 2022, 2020)。LHDは，岐阜県土岐市にある世界最大級の超伝導磁場閉じ込め核融合実験装置であり，多数の放電データが蓄積されている。密度と電子温度，イオン温度の径方向分布の時系列観測データを40–500 ms周期で同化することで，乱流モデルパラメータ等の推定を行っており，高い推定精度と妥当性が確認されている。ASTIは，状態ベクトルや観測ベクトルを調整することで様々な推定問題に柔軟に対応することができるため，核融合プラズマの強力な解析システムとなることが期待される。

### 3. データ同化を用いた核融合プラズマの制御

本節では，データ同化を用いた核融合プラズマ制御についての取り組みを紹介する。第1節でも述べた通り，一般的なデータ同化は観測データから状態ベクトルを推定する技術であり，制御の要素は含んでいない。しかしながら，核融合分野での最終的な目標は核融合プラズマの制御にあるため，データ同化システムによる核融合プラズマの制御を実現するには，データ同化の枠組みを予測制御を含んだ形に拡張する必要がある。そこで，著者らは観測情報によるシステムモデルの更新と目標状態を実現する制御入力 の推定とを統合した新たなデータ同化のフレームワーク(DACS)を開発した。

予測制御を含んだデータ同化は，特に以下の2点が通常のデータ同化(逐次ベイズフィルタ)と異なる。

- (1) 設定した目標状態に実システムの挙動が近づくように制御入力 の推定を行う。
- (2) システムの挙動を予測し，制御入力を推定し続けなければならないので，数値空間上の状態の時刻が常に実空間の時刻よりも先に進んでいる。

また，システムモデルは，状態の時間発展を実時間よりは速く計算できるものの，制御を推定するために何度も計算をやり直せるほど軽量ではないことを想定している。そのため，制御アルゴリズム全体で，できる限り予測計算の回数を少なくしなければならない。そこで，DACSフレームワークでは，後述する3つのフィルタ： $z$ フィルタ， $u$ フィルタ， $y$ フィルタを導入する。 $z$ フィルタによって上記(1)が実現され， $y$ フィルタによって上記(2)の状況における観測の同化が可能となる。また， $u$ フィルタおよび $y$ フィルタを用いることで，計算区間に重ならない(一回の予測計算のみの)制御アルゴリズムを構築することが可能となる。

#### 3.1 予測制御を含んだデータ同化フレームワーク

時間間隔  $\Delta t_y$  毎に観測データ  $\mathbf{y}$  が得られ，時間間隔  $\Delta t_z$  おきに目標状態  $\mathbf{z}$  を実現する制御入力  $\mathbf{u}^*$  を推定する状況を考える。簡単のため， $\Delta t_y = n\Delta t_z$  ( $n \in \mathbf{N}$ ) であるとする。まず初めに，時間の記載が煩雑になるのを防ぐため，以下のような時間の記法を導入する。

$$(3.1) \quad t_{i,j} = t_{0,0} + i\Delta t_y + j\Delta t_z$$

ここで， $t_{0,0}$  は初期時刻， $i, j$  は整数であるとする。 $\Delta t_y = n\Delta t_z$  を仮定しているため， $t_{i,n} = t_{i+1,0}$  である。また， $A_{(i,j)}$  と表記した場合，時刻  $t_{i,j}$  における変数  $A$  を表すものとする。特に， $\mathbf{y}_i$  のように  $j$  を省略して書いた場合は， $j = 0(t_{i,0})$  であると約束する。また，複数時刻をまとめて， $A_{(0,0):(i,j)} \equiv \{A_{(0,0)}, A_{(0,1)}, A_{(0,2)}, \dots, A_{(1,0)}, \dots, A_{(i,j)}\}$  のように表記する。

時刻  $t_{i,j}$  における状態ベクトルを以下の形で定義する.

$$(3.2) \quad \mathbf{x}_{(i,j)} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_{(i,j)} \\ \mathbf{u}_{(i,j)} \end{pmatrix}$$

ここで,  $\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j)}$  は系の状態やモデルパラメータなどが含まれる部分であり, 通常のデータ同化において状態ベクトルとして定義されるものである.  $\mathbf{u}_{(i,j)}$  は, 制御入力となる変数を成分とするベクトルであり, 時刻  $t_{i,j-1}$  から時刻  $t_{i,j} = t_{i,j-1} + \Delta t_z$  の間の系の時間発展を決める. また, 制御入力の推定時には目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j)}$  が与えられているものとする. 目標状態は, 予め時系列データとして設定しておいてもよいし, 制御の進行に合わせて決定してもよい. 目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j)}$  を実現するために推定された制御入力ベクトルを, 確率変数  $\mathbf{u}_{(i,j)}$  と区別して  $\mathbf{u}_{(i,j)}^*$  とする.

制御推定を取り入れるために, 以下の 4 つの式から構成される状態空間モデルを考える.

$$(3.3) \quad \mathbf{x}_{(i,j+1)} = f_{(i,j+1)}(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{v}_{(i,j+1)})$$

$$(3.4) \quad \mathbf{z}_{(i,j)} = h_{(i,j)}^z(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{w}_{(i,j)}^z)$$

$$(3.5) \quad \mathbf{u}_{(i,j)}^* = H^u \mathbf{x}_{(i,j)} + \mathbf{w}_{(i,j)}^u$$

$$(3.6) \quad \mathbf{y}_i = h_i^y(\mathbf{x}_{(i,0)}, \mathbf{w}_i^y)$$

式(3.3)は, システムモデルであり, システムノイズ  $\mathbf{v}_{(i,j+1)}$  を考慮した  $\mathbf{x}_{(i,j)} \rightarrow \mathbf{x}_{(i,j+1)}$  の時間発展を記述する. ここで, この時間発展の間,  $\mathbf{u}$  は時間変化しないものとする. すなわち, 式(3.3)を  $\tilde{\mathbf{x}}$  と  $\mathbf{u}$  について分けて書くと,

$$(3.7) \quad \tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)} = \tilde{f}_{(i,j+1)}(\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j)}, \mathbf{u}_{(i,j+1)}, \tilde{\mathbf{v}}_{(i,j+1)}),$$

$$(3.8) \quad \mathbf{u}_{(i,j+1)} = \mathbf{u}_{(i,j)} + \mathbf{v}_{(i,j+1)}^u$$

となる.  $\tilde{\mathbf{v}}, \mathbf{v}^u$  はそれぞれ,  $\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{u}$  に対するシステムノイズである. また,  $\mathbf{u}_{(i,j)}$  へのシステムノイズ  $\mathbf{v}_{(i,j+1)}^u$  は, 時間発展計算の前に付与するものとした. 式(3.4)は, 状態ベクトル  $\mathbf{x}$  と目標状態ベクトル  $\mathbf{z}$  との関係を表したモデルである. ここで, 目標状態ノイズ  $\mathbf{w}_{(i,j)}^z$  を考える. 式(3.5)は, 状態ベクトル  $\mathbf{x}$  と制御入力ベクトル  $\mathbf{u}^*$  との関係を表したモデルであり, 状態ベクトルの定義(3.2)から, 変換行列  $H^u$  を用いて書かれる. ここでも, 制御入力ノイズ  $\mathbf{w}_{(i,j)}^u$  を考える. 式(3.4)と(3.5)をそれぞれ, 目標状態モデル, 制御入力モデルと呼ぶことにする. 式(3.6)は, 式(2.2)と同様の観測モデルであり, 観測ノイズ  $\mathbf{w}_i^y$  を考慮する. この状態空間モデルは, 状態ベクトルを制御入力を含んだ形に拡張し, 第 2 節で紹介した逐次ベイズフィルタの状態空間モデル(2.1), (2.2)に目標状態モデル(3.4)と制御入力モデル(3.5)を加えたモデルである.

開発した DACS フレームワークは, 状態分布に対する 4 つの操作: 予測, z フィルタ, u フィルタ, y フィルタで構成される. 各操作における状態分布の変化を前もって以下に示しておく. 予測:

$$(3.9) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*).$$

z フィルタ:

$$(3.10) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow \mathbf{u}_{(i,j+1)}^* = E(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}).$$

u フィルタ:

$$(3.11) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j+1)}^*).$$

y フィルタ :

$$(3.12) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*).$$

ここで、式(3.12)では、後述する予測ホライズン  $h(\geq \Delta t_z)$  を用いて、 $t_{i,j} = t_{k+1} + h$  の時間関係が成立しているものとする。以下、各操作について詳しく説明する。

今、時刻  $t_{i,j}$  の分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  が所与であるとする。ここで、最新の観測時刻  $t_k (< t_{i,j})$  までの観測情報  $\mathbf{y}_{0:k}$  と時刻  $t_{i,j}$  に至るまでの制御入力  $\mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*$  の情報が、この分布に反映されているものとする。予測(3.9)は、 $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  から  $\Delta t_z$  先の分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  を計算する操作であり、予測ステップ(2.3)と同じである。予測分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  には、時刻  $t_{i,j}$  における系の状態とモデルパラメータ ( $\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j)}$ ) が持つ不確実性、時間発展計算に伴う不確実性、制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}$  による不確実性が含まれる。

z フィルタ(3.10)は、予測分布と目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  から最適制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  を推定する操作である。本稿では、目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  を実現する最適制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  を条件付き確率分布  $p(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)})$  による期待値で定義する。すなわち、

$$(3.13) \quad \mathbf{u}_{(i,j+1)}^* = \int \mathbf{u}_{(i,j+1)} p(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}) d\mathbf{u}_{(i,j+1)}$$

である。確率分布  $p(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)})$  は、式(3.2)より、

$$(3.14) \quad \begin{aligned} p(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}) \\ &= \int p(\mathbf{u}_{(i,j+1)}, \tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}) d\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)} \\ &= \int p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}) d\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)} \end{aligned}$$

であるため、状態分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)})$  の  $\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)}$  についての周辺化により求めることができる。この状態分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)})$  は、予測分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  に、目標状態モデル(3.4)を用いて目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  を同化した分布である。すなわち、z フィルタは、時刻  $t_{i,j+1}$  に目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  が実現したとして、その際に行われた制御を推定していると解釈できる。また、この制御推定は、時刻  $t_{i,j}$  における系の状態やモデルパラメータが持つ不確実性に対してロバストな制御推定であると言える。アンサンブル近似による手法を用いる場合には、予測分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  のアンサンブルに  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  を同化し、できた  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)})$  のアンサンブルの  $\mathbf{u}$  の平均を計算すれば  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  が求まる。そのため、計算コストはフィルタ計算のコストのみである。

u フィルタ(3.11)は、推定した制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  により制御を行った場合に予測される状態分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j+1)}^*)$  を求める操作である。u フィルタは、予測分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  に、制御入力モデル(3.5)を用いて  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  を同化することで実現できる。フィルタ後の分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j+1)}^*)$  を u フィルタ分布と呼ぶことにする。u フィルタ分布は予測分布に  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  の情報を付与した分布であり、予測分布に含まれる不確実性のうち、制御入力 ( $\mathbf{u}_{(i,j+1)}$ ) の不確実性が取り除かれた(低減された)分布である。すなわち、u フィルタ分布は、主に状態  $\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j+1)}$  の不確実性を表現した分布であり、 $\Delta t_z$  前の状態  $\tilde{\mathbf{x}}_{(i,j)}$  および時間発展計算が持つ不確実性が含まれている。この不確実性は、y フィルタ時に観測情報を未来に伝える働きをする。アンサンブル近似を用いる場合に、予測計算を行う前の分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  の各アンサンブルメンバーの  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}$  部に  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  を代入して予測計算をやり直しても、 $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j+1)}^*)$  を推定できる。こちらの方法の方が正確であるが、同じ時間区間の予測計算を2回行うことになる。u フィルタは、この2度目の予測計算を

省く操作であり、計算コストを無視できないモデルでモデル予測制御を実現するためには重要な操作である。予測  $\rightarrow z$  フィルタ  $\rightarrow u$  フィルタによって、目標状態  $z_{(i,j+1)}$  を実現する制御入力  $u_{(i,j+1)}^*$  を推定するとともにその制御を行った場合の状態分布を推定できる。この操作のセットによって、さらに先の制御推定に進むことができる。

y フィルタ (3.12) は、新たな観測  $y_{k+1}$  を u フィルタ分布に反映させるためのフィルタである。制御を考える場合、観測時点  $t_{k+1}$  からの制御  $u_{(k+1,1)}^*$  が時刻  $t_{k+1}$  になる前に決定できていなければならないため、数値空間の時刻は実空間の時刻よりも先に進んでいる。y フィルタの役割は、時間を隔てた最新の u フィルタ分布へ観測情報を反映させることである。ここで、この時間の隔たりを予測ホライズン  $h$  と定義する。すなわち、

$$(3.15) \quad h = t_{i,j} - t_{k+1}$$

である。ここで、 $t_{i,j}$  は最新の u フィルタ分布の時刻とする。制御の都合から  $h \geq \Delta t_z$  でなくてはならない。この時間を隔てた最適化操作は、観測時点と最新の u フィルタ分布の時点における状態ベクトルの同時確率分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  を考えることで実現できる。すなわち、この同時分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  に観測  $y_{k+1}$  を同化することで  $p(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  を得て、更に  $\mathbf{x}_{k+1}$  について周辺化することで y フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  を得る。アンサンブル近似を用いる場合には、 $p(\mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(k+1,0)}^*)$  のアンサンブルを保存しておき、最新の u フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  のアンサンブルと連結することで同時分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  のアンサンブルを構成することができる。ここに  $y_{k+1}$  を同化し、時刻  $t_{k+1}$  に対応する部分を切り離すことで周辺化すれば、y フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  のアンサンブルを手に入れることができる。y フィルタについても、y フィルタ後の観測時刻の分布  $p(\mathbf{x}_{(k+1,0)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(k+1,0)}^*)$  のアンサンブルから予測計算をやり直して  $p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:k+1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*)$  のアンサンブルを求めた方が正確である。y フィルタは、観測を状態分布に反映させると同時にこの予測計算をやり直すコストを省いている。u フィルタと y フィルタにより、予測計算区間の重なりを完全に排除することができ、各時間区間について一度のみの予測計算で制御アルゴリズムを構築できる。予測計算のコストが無視できないためにイタレーションを用いるモデル予測制御に使用できなかったシミュレーションモデルも、DACS フレームワークではシステムモデルとして用いることができる可能性がある。それに加えて、観測の同化による最適化を前提として、より簡約なモデルを採用することができるため、予測計算の更なる高速化が期待できる。

### 3.2 制御アルゴリズム

パラメータ  $n$  と予測ホライズン  $h$  を設定すると、具体的な制御アルゴリズムを構築することができる。もちろん、 $h = \Delta t_z$  とする場合が最も素早く観測を制御推定に反映できるが、計算コストの面で余裕がなくなる可能性がある。このため、 $n$  や  $h$  は予測計算やフィルタ計算、並列計算の通信速度や観測情報の処理速度などを考慮して、慎重に決定する必要がある。本稿では、 $n = 3$  とし、 $h = \Delta t_y = 3\Delta t_z$  の場合を検証する。この場合の時間関係を図 4 に示す。

$n = 3$ ,  $h = \Delta t_y$  を考えると、 $k = i - 1$  であり、式 (3.9)–(3.12) は以下のようなになる。

予測：

$$(3.16) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*).$$

z フィルタ：

$$(3.17) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*) \rightarrow \mathbf{u}_{(i,j+1)}^* = E(\mathbf{u}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j)}^*, \mathbf{z}_{(i,j+1)}).$$

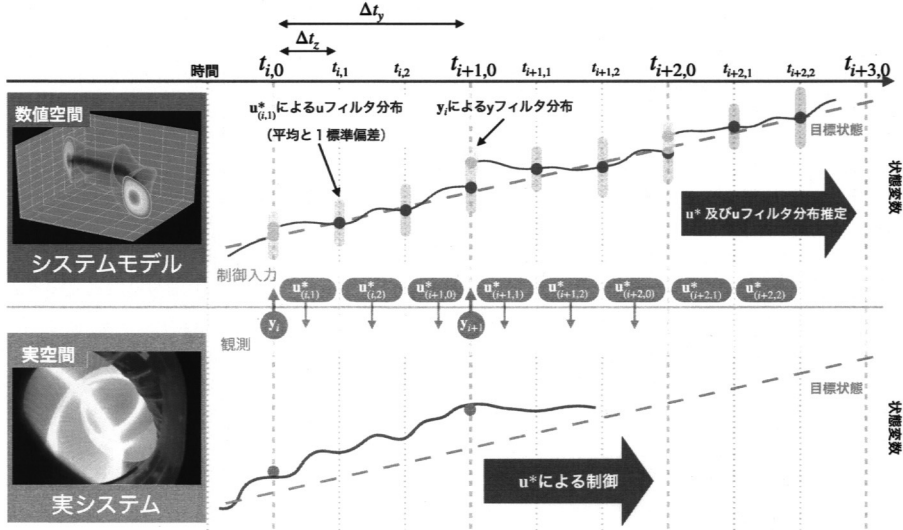


図 4. 制御アルゴリズムにおける時間関係 (\$\Delta t\_y = 3\Delta t\_z, h = \Delta t\_y\$ の場合).

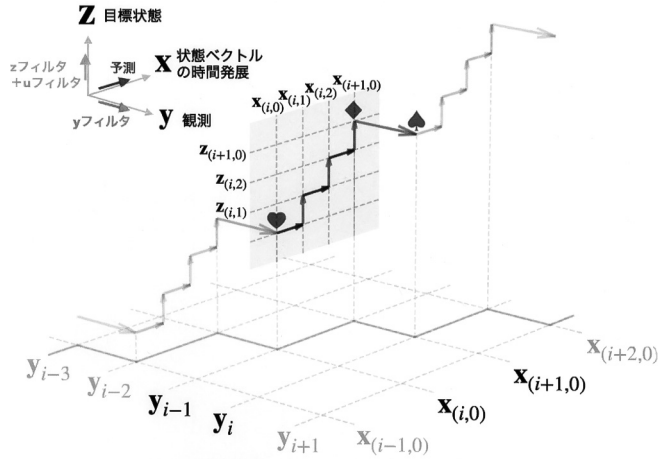


図 5. 状態分布が情報を取り込む流れ (\$\Delta t\_y = 3\Delta t\_z, h = \Delta t\_y\$ の場合).

u フィルタ :

$$(3.18) \quad p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} \mid \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i,j)}) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} \mid \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i,j+1)}).$$

y フィルタ :

$$(3.19) \quad p(\mathbf{x}_{(i+1,0)} \mid \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i+1,0)}) \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i+1,0)} \mid \mathbf{y}_{0:i}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i+1,0)}).$$

図 5 は、この制御アルゴリズムにおいて状態分布が目標状態と観測情報を取り込んでいく流れを表したものである。状態分布  $p(\mathbf{x}_{(i,0)} \mid \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i,0)})$  (図中ハート) が所与であるとする、予測  $\rightarrow z$  フィルタ  $\rightarrow u$  フィルタの繰り返しにより、制御入力  $\mathbf{u}^*_{(i,1):(i+1,0)}$  を推定しながら  $\Delta t_y$  先の u フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i+1,0)} \mid \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}^*_{(0,1):(i+1,0)})$  (図中ダイヤモンド) まで計算を行う。観測  $y_i$  が得

られると、最新の  $u$  フィルタ分布は  $y$  フィルタにより  $p(\mathbf{x}_{(i+1,0)}|\mathbf{y}_{0:i}, \mathbf{u}_{(0,1):(i+1,0)})$  (図中スベード)へと更新される。ここで、観測時刻  $t_i$  の  $y$  フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i,0)}|\mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)})$  (所与とした分布, 図中ハート)が観測情報を未来( $t_{i+1}$ )に伝えるために用いられる。 $y$  フィルタ分布  $p(\mathbf{x}_{(i+1,0)}|\mathbf{y}_{0:i}, \mathbf{u}_{(0,1):(i+1,0)})$  から更に  $t_{i+2,0}$  へと制御推定が進んでいく。図5の3次元的な流れを  $x$ - $y$  平面に射影すると、( $x$  と  $y$  で時刻がずれている点を考えなければ)通常の逐次ベイズフィルタのデータ同化の流れが現れる( $x$ - $y$  平面上実線)。このことから、DACS フレームワークは、通常の逐次ベイズフィルタの予測ステップを予測 +  $z$  フィルタ +  $u$  フィルタの一連の操作に拡張したものであると言える。この拡張によって、データ同化の枠組みに目標状態時系列を用いて実システムに働きかける仕組みが取り込まれる。

状態分布のアンサンブル近似により上記のアルゴリズムを実現する。時刻  $t_{0,0}$  から観測が取得できるとすると、制御の計算手続きは以下ようになる。

- 初期アンサンブルメンバーを生成し、時刻  $t_{0,0}$  の  $y$  フィルタ分布として保存しておく。
- For  $i = 0, \dots, i_{\max}$  (観測周期) :
  - (1) 制御入力  $\mathbf{u}_{(i,1):(i+1,0)}^*$  と時刻  $t_{(i+1,0)}$  までの  $u$  フィルタ分布の推定 :
    - For  $j = 0, 1, 2$  (制御推定周期) :
      - (a) 時刻  $t_{i,j}$  から  $t_{i,j+1}$  まで予測計算を行う ( $t_{i,3} = t_{i+1,0}$ )。
      - (b) 目標状態  $\mathbf{z}_{(i,j+1)}$  と 1-(a) で得た予測分布を用いて  $z$  フィルタを実行し、制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  を推定する。
      - (c) 制御入力  $\mathbf{u}_{(i,j+1)}^*$  と 1-(a) で得た予測分布を用いて  $u$  フィルタを実行する。
    - (2) 時刻  $t_{(i,0)}$  に観測を行い、観測ベクトル  $\mathbf{y}_i$  を取得する。
    - (3) 観測  $\mathbf{y}_i$  を用いた時刻  $t_{(i+1,0)}$  の  $u$  フィルタ分布の更新 :
      - (a) 時刻  $t_{i+1,0}$  の  $u$  フィルタ分布と保存しておいた時刻  $t_{i,0}$  の  $y$  フィルタ分布を連結する。
      - (b)  $y$  フィルタにより、3-(a) で生成した連結アンサンブルに観測  $\mathbf{y}_i$  を同化する。
      - (c) 連結アンサンブルから時刻  $t_{i+1,0}$  の部分を  $y$  フィルタ分布のアンサンブルとして取り出す。このアンサンブルは次の  $y$  フィルタに利用するために保存しておく。

全てのフィルタを EnKF により実装する場合、目標状態モデルおよび観測モデルが線形・ガウス分布となる以下のような状態空間モデルを考える。

$$(3.20) \quad \mathbf{x}_{(i,j+1)} = f_{(i,j+1)}(\mathbf{x}_{(i,j)}, \mathbf{v}_{(i,j+1)}), \mathbf{v}_{(i,j+1)} \sim N(\mathbf{0}, Q_{(i,j+1)})$$

$$(3.21) \quad \mathbf{z}_{(i,j)} = H^z \mathbf{x}_{(i,j)} + \mathbf{w}_{(i,j)}^z, \mathbf{w}_{(i,j)}^z \sim N(\mathbf{0}, R_{(i,j)}^z)$$

$$(3.22) \quad \mathbf{u}_{(i,j)}^* = H^u \mathbf{x}_{(i,j)} + \mathbf{w}_{(i,j)}^u, \mathbf{w}_{(i,j)}^u \sim N(\mathbf{0}, R_{(i,j)}^u)$$

$$(3.23) \quad \mathbf{y}_i = H^y \mathbf{x}_{(i,0)} + \mathbf{w}_i^y, \mathbf{w}_i^y \sim N(\mathbf{0}, R_i^y)$$

ここで、目標状態モデル(3.21)と観測モデル(3.23)を行列  $H^z$  と  $H^y$  を用いて書いた。また、ノイズは全て平均0のガウス分布に従うものとした。行列  $Q_{(i,j+1)}$ ,  $R_{(i,j)}^z$ ,  $R_{(i,j)}^u$ ,  $R_i^y$  は、それぞれのノイズの共分散行列である。これらの共分散行列は、制御性能を決める重要なハイパーパラメータである。本稿では簡単のため、これらの行列は全て対角行列であると仮定する。

システムノイズの共分散行列  $Q_{(i,j+1)}$  は、状態分布が持つ不確実性を制御する。特に制御入力  $\mathbf{u}$  に対するシステムノイズは、 $\mathbf{u}^*$  を重点的に探す領域の広さを決めるため重要である。目標状態の変化が緩やかな場合や車のハンドルのように有限の速度で制御入力に変化する場合には、比較的小さな分散が良い。一方で、制御入力に大きな変化(ジャンプ)が必要となるような制御には、大きな分散が必要となる。行列  $Q_{(i,j+1)}$  は、システムモデルの洗練度や目標状態時系列の変化の度合い、制御機器の制約などに応じて設定する必要がある。制御入力  $\mathbf{u}$  に対する



システムノイズは毎予測計算前に、 $\hat{x}$  に対するシステムノイズは毎  $y$  フィルタ計算後に付与するものとする。

目標状態ノイズは、一回の制御推定における目標状態の実現精度を表しており、共分散行列  $R_{(i,j)}^z$  により  $z$  フィルタの動作を調整することができる。 $R_{(i,j)}^z$  の分散成分が小さいと、 $z$  フィルタ時に予測分布が目標状態により強く引っ張られる。逆に分散成分が大きい場合には、予測分布を目標状態方向に引っ張る力が弱まり、目標状態時系列に対して、状態変数の変化が緩やかになることが期待される。システムモデルの不確実性が大きい場合には、目標状態ノイズを大きく取ることによって状態変化の速度を遅くし、システムモデルと実システムの差異から生じる制御推定のズレを緩和することができる。ここでは、 $R_{(i,j)}^z$  を予測分布の共分散行列に比例する形

$$(3.24) \quad (R_{(i,j)}^z)_l u = r_z^2 (H^z V_{(i,j)} (H^z)^T)_l u$$

で与える。 $r_z$  は比例係数であり、 $V_{(i,j)}$  は予測分布のアンサンプルの共分散行列である。また、 $(\ )_l$  は、行列の第  $l$  対角成分を表し、 $^T$  は行列の転置を表す。

制御入力ノイズは、制御入力時の誤差を表現しているが、多くの場合十分小さく取って問題ないと考えられる。制御に対する影響として、制御入力  $u$  の変化速度を  $z$  フィルタとは独立に調整できるが、結果的な影響としては目標状態ノイズが持つ影響とほとんど同じである。本稿では、制御入力ノイズは十分小さく取るものとする。EnKF の場合、 $u$  の次元がアンサンプルメンバー数に比べて十分に小さいならば、分散を 0 としても問題なく  $u$  フィルタ計算を行うことができる。PF の場合には、制御入力ノイズを小さく取りすぎると粒子の退化が顕著になるため、慎重に設定する必要がある。

観測ノイズの役割は、通常の逐次ベイズフィルタと同じである。ASTI では、観測ノイズを観測値と予測値の差に比例する形

$$(3.25) \quad (R_i^y)_l u = r_y^2 (y_i - H^y \hat{x}_{(i,0)})_l^2,$$

で与えると、安定的にデータ同化を行えることがわかっている (Morishita et al., 2022, 2020)。ここで、 $r_y$  は比例係数であり、 $\hat{x}_{(i,0)}$  は観測時点に対応する状態分布  $p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)}^*)$  のアンサンプル平均である。また、 $(\ )_l$  はベクトルの第  $l$  成分を表す。

### 3.3 仮想プラズマを用いた制御数値実験

3.2 節で構築した制御アルゴリズムを ASTI に実装し、TASK3D によって数値的に生成した仮想プラズマを制御する数値実験によりその有効性を検証した。全てのフィルタは EnKF により実装した。目標状態としてプラズマ中心 ( $\rho = 0$ ) における密度と電子温度を取り、密度、電子温度、イオン温度の径方向分布が  $\Delta t_y = 0.6$  秒おきに観測できると仮定する。本稿では、電子密度とイオン密度は等しいものとし、合わせて“密度”と表記する。仮想プラズマは軽水素プラズマを仮定し、LHD の磁場配位 (磁気軸大半径 3.6m, 磁場強度 2.85T) を使用する。表 1 に、本数値実験での状態ベクトル、目標状態ベクトル、観測ベクトルを構成する変数をまとめた。 $M_i$  は各変数がベクトル中で持つ次元であり、 $\sigma_{\text{init}}$  は初期分布の標準偏差、 $\sigma_Q$  はシステムノイズの標準偏差である。 $M_i$  が 11 である状態変数は、径方向分布 ( $\rho = 0.0, 0.1, 0.2, \dots, 1.0$ ) を持っている。標準偏差が % 単位で表記されているものは、標準偏差をその時の状態分布の平均値に比例する形で決定する。また、表中で日本語の説明に \* が付いているものは、その変数にかかる数因子を状態変数とすることを意味する。例えば、乱流粒子拡散係数 ( $D^{\text{TB}}$ ) であれば、TASK3D 内で  $D^{\text{TB}} = d_{\text{model}} \times d$  のように状態変数  $d$  による調整を受ける。ここで、 $d_{\text{model}}$  は通常のシミュレーションで用いられるモデルである。 $\hat{x}$  は主に乱流による拡散係数の不確実

表 1. 状態ベクトル  $(\tilde{x}, \mathbf{u})$ , 目標状態ベクトル  $\mathbf{z}$ , 観測ベクトル  $\mathbf{y}$  の構成.

変数		$M_i$	$\sigma_{\text{init}}$	$\sigma_Q$	
$n$	密度 [ $10^{19} \text{ m}^{-3}$ ]	11	3%	3%	
$T_e$	電子温度 [keV]	11	3%	3%	
$T_i$	イオン温度 [keV]	11	3%	3%	
$\tilde{x}$	$d$	乱流粒子拡散係数 *	11	0.2	0.1
	$c_e$	電子の乱流熱拡散係数 *	11	0.2	0.1
	$c_i$	イオンの乱流熱拡散係数 *	11	0.2	0.1
	$\xi_T$	プラズマの端での中性粒子温度 *	1	0.1	0.05
	$P_{\text{ECH}}$	ECH 入力パワー [MW]	1	0	0.7
$\mathbf{u}$	$\xi_n$	プラズマの端での中性粒子密度 *	1	0	0.4
	$n_{\rho=0}$	プラズマ中心での密度 [ $10^{19} \text{ m}^{-3}$ ]	1		
$\mathbf{z}$	$T_{e,\rho=0}$	プラズマ中心での電子温度 [keV]	1		
	$n$	密度 [ $10^{19} \text{ m}^{-3}$ ]	11		
$\mathbf{y}$	$T_e$	電子温度 [keV]	11		
	$T_i$	イオン温度 [keV]	11		

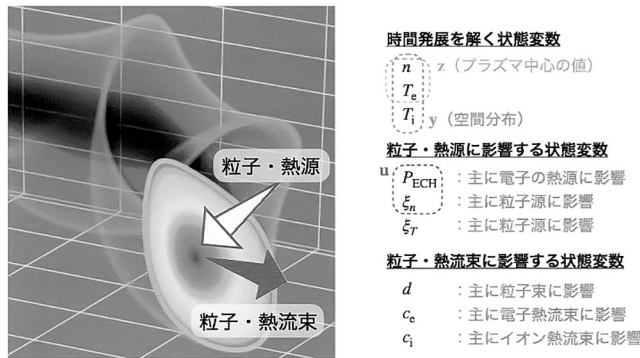


図 6. 各状態変数の役割.

性を考慮して構成した. 制御入力ベクトル  $\mathbf{u}$  は, 電磁波加熱の一つである電子サイクロトロン周波数加熱 (ECH) の入力パワー  $P_{\text{ECH}}$  とプラズマの端での中性粒子密度を調整する数因子  $\xi_n$  により定義する.  $P_{\text{ECH}}$  は電子の熱輸送における加熱項を決定し, 主に電子温度分布に影響する.  $\xi_n$  は粒子輸送のソース項を決定し, 主に密度分布に影響する. これらの各状態変数の役割を図 6 にまとめる.  $P_{\text{ECH}}$  は 0.5–5.0 MW の間を 0.5 MW 刻みで取る離散値であるとし,  $\xi_n$  は連続値であるとする.  $\mathbf{z}$  フィルタ時には全ての状態変数が連続変数として取り扱われるため,  $P_{\text{ECH}}$  については, 式 (3.13) の右辺で計算される期待値に最も近い離散値を  $P_{\text{ECH}}^*$  とする. 制御推定の周期は  $\Delta t_z = \frac{1}{3} \Delta t_y = 0.2$  秒である.

仮想プラズマの初期状態は, 初期制御入力  $\mathbf{u}_{(0,0)} = (0.5 \text{ MW}, 1.0)$  に対する定常状態であるとする. 初期状態分布の平均は, 密度, 温度については仮想プラズマの定常状態の値を用い, \* 付き変数については 1.0 (通常のシミュレーションの値) であるとする. 目標状態の変化として, 密度と電子温度を ( $1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ , 2 keV) から同時に上昇させていき, ( $2 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ , 5 keV) まで上昇したところで状態を維持する時系列を考える (図 7 (a) (b) の波線). ここで, eV (電子ボルト) はプラズマの温度を表す単位であり, 1eV は約 11300°C, keV はその  $10^3$  倍で約一千万°C である. 数値実験として, システムモデルに不正確な部分がある状況下で, 観測情報を用いてシステムモデルの挙動を実システムに近づけながら制御を行う問題を考える. そのためこの数

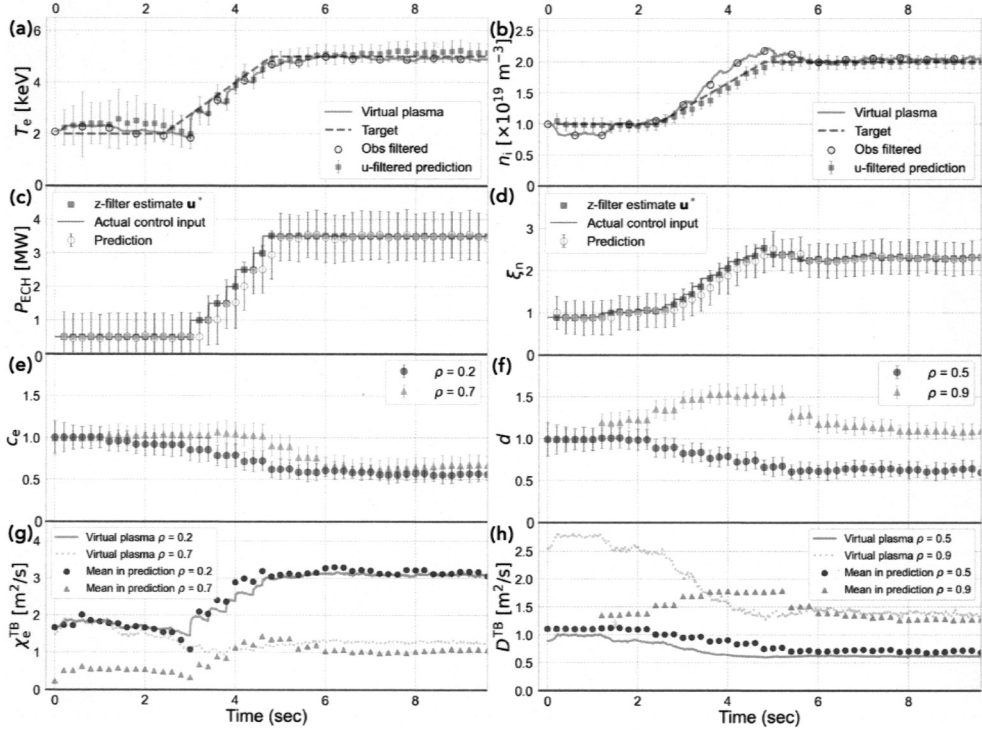


図 7. 仮想プラズマを制御する数値実験の結果。

値実験では、仮想プラズマの乱流粒子拡散係数  $D^{\text{TB}}$  と電子の乱流熱拡散係数  $\chi_e^{\text{TB}}$  に  $1/n$  に比例する項を追加する。  $D^{\text{TB}}$  と  $\chi_e^{\text{TB}}$  はそれぞれ、密度勾配と電子温度勾配にかかり、径方向外向きの乱流粒子束と電子乱流熱流束を生む。粒子拡散係数  $D^{\text{TB}}$  について、ASTI では、定数モデル

$$(3.26) \quad D^{\text{TB}} = d_{\text{const}} \times d$$

を仮定するが、仮想プラズマ内では、  $1/n$  の項を加えた形

$$(3.27) \quad D^{\text{TB}} = d_{\text{Alc}} \left( 1 + \frac{1}{n} \right)$$

を仮定する。ここで、  $d_{\text{const}} = 1.4$ 、  $d_{\text{Alc}} = 0.4$  とする。電子の乱流熱拡散係数  $\chi_e^{\text{TB}}$  については、ASTI では、gyro-Bohm モデルと呼ばれるモデル

$$(3.28) \quad \chi_e^{\text{TB}} = C_{\text{gB}} \frac{T_e}{eB} \frac{\rho_i}{a} \times c_e$$

を仮定するが、仮想プラズマ内では、  $1/n$  の項を加えた形

$$(3.29) \quad \chi_e^{\text{TB}} = \frac{1}{2} \left( C_{\text{gB}} \frac{T_e}{eB} \frac{\rho_i}{a} + C_{\text{Alc}} \frac{1}{n} \right)$$

を用いる。ここで、  $C_{\text{gB}} = 1.5$ 、  $C_{\text{Alc}} = 1.61$  である。  $B$ 、  $\rho_i$ 、  $a$  はそれぞれ、磁場強度、イオンラーモア半径、プラズマ小半径である。また、  $d_{\text{const}}$ 、  $d_{\text{Alc}}$ 、  $C_{\text{gB}}$ 、  $C_{\text{Alc}}$  の値は、複数の実験結果

に基づいて行われた先行研究 (Sakai et al., 2015; Wakasa et al., 2010) から妥当な値を設定した。

図 7 に、数値実験の結果を示す。この数値実験では、 $r_z = 0.6$ ,  $r_y = 0.8$  とした。また、アンサンブルメンバー数は 420 とした。この状況設定においては、アンサンブルメンバー数を 200 程度まで少なくとも制御精度は大きく低下しないことを確認している。図 7 の (a) と (b) はそれぞれ、プラズマ中心における電子温度  $T_e$  と密度  $n$  の時間変化を表しており、仮想プラズマ (実線) が目標状態 (破線) を追従できているのがわかる。また、(c) と (d) はその際に推定された制御入力の値を示している。ここで、(a), (b) における、“u-filtered prediction” は u フィルタ分布 ( $p(\mathbf{x}_{(i,j+1)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,j+1)}^*)$ ) の平均と 1 標準偏差であり、“Obs filtered” は対応する時刻の観測まで同化した分布  $p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)}^*)$  の平均である。(c) における、“Prediction” は予測ステップ後の制御入力分布であり、“z-filter estimate” は z フィルタにより推定された制御入力の値 ( $\mathbf{u}^*$ ) である。また、実線 “Actual control input” は、実際に模擬プラズマの制御に用いられた入力値である。(a), (b) どちらにおいても、変化区間 (2.4–4.8 秒) では、目標状態と仮想プラズマの差が広がっていることがわかる。これは、システムモデルと仮想プラズマのモデルの差異による影響であり、観測情報を用いてモデルの不足分を押さえ込みながら制御が進められる。(e) と (f) はモデルの不足分を補うために調整された乱流輸送のモデルパラメータ (径方向 2 点分) を示している。(g) と (h) は、仮想プラズマ内で式 (3.29), (3.27) を用いて計算される  $\chi_e^{\text{TB}}$  と  $D^{\text{TB}}$  の値 (点) と、ASTI 内で  $c_e$  および  $d$  によって調整を受けた  $\chi_e^{\text{TB}}$  と  $D^{\text{TB}}$  のアンサンブルにおける平均値 (実線および破線) を比較した図である。序盤では、仮想プラズマと ASTI で値が大きく異なっている場合でも、観測の同化による  $c_e$  および  $d$  の調整によって、両者の値が近づいているのがわかる。

図 8 は、時刻  $t_i = 4.2$  秒の状態分布を表すアンサンブルメンバーが各ステップでどのような変化を受けるかを示した図である。ここで用いたアルゴリズムでは、 $h = \Delta t_y$  としているため、観測の時刻におけるアンサンブルは、予測分布  $p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i-2}, \mathbf{u}_{(0,1):(i-1,2)}^*)$  から

$$(3.30) \quad \begin{aligned} & p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i-2}, \mathbf{u}_{(0,1):(i-1,2)}^*) \\ & \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i-2}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)}^*) \end{aligned}$$

$$(3.31) \quad \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i-1}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)}^*)$$

$$(3.32) \quad \rightarrow p(\mathbf{x}_{(i,0)} | \mathbf{y}_{0:i}, \mathbf{u}_{(0,1):(i,0)}^*)$$

の様に 3 回の変化を受ける。(a) と (b) は、変化 (3.30) の図であり、予測分布 (“Prediction”) から u フィルタ分布 (“u-filtered”) への変化を表している。(a) はプラズマ中心における電子温度と密度、(b) は制御入力変数についての散布図である。(a) の散布図における “Target” は目標状態であり、z フィルタ + u フィルタにより u フィルタ分布が目標状態に近づいているのが分かる。また、制御入力ノイズを小さく取ることで、(b) における u フィルタ分布のアンサンブルのばらつきを実用上問題ない程度まで小さくしている。 $\Delta t_y$  前 ( $t_{i-1} = 3.6$  秒) の観測が得られると、y フィルタ (3.31) で、u フィルタ分布 (“u-filtered”) は y フィルタ分布 (“y-filtered ( $\mathbf{y}_{i-1}$ )”) へと更新される。(c) と (d) はこの変化を表した図であり、(c) はプラズマ中心における電子温度と密度、(d) は乱流輸送のモデルパラメータ ( $c_e(\rho = 0.2)$ ,  $d(\rho = 0.5)$ ) に注目している。また、(e) はこの y フィルタ時に利用した時刻  $t_{i-1} = 3.6$  秒における状態分布のアンサンブル (電子温度と密度) である。時刻  $t_i = 4.2$  秒における観測が得られると、(c) (d) における y フィルタ分布は最新の u フィルタ分布 (4.8 秒) に観測情報を伝えるために用いられる。この時の状態分布の変化が (3.32) であり、図 8(f), (g) のように、y フィルタ分布 (“y-filtered ( $\mathbf{y}_{i-1}$ )”) は対応する時刻の観測を同化した分布 (“y-filtered ( $\mathbf{y}_i$ )”) へと更新される。また、観測  $\mathbf{y}_i$  で  $\mathbf{x}_i$  が更新されるのにもなって時刻 4.8 秒に観測情報が伝わる。(h) はこの y フィルタで更新された時

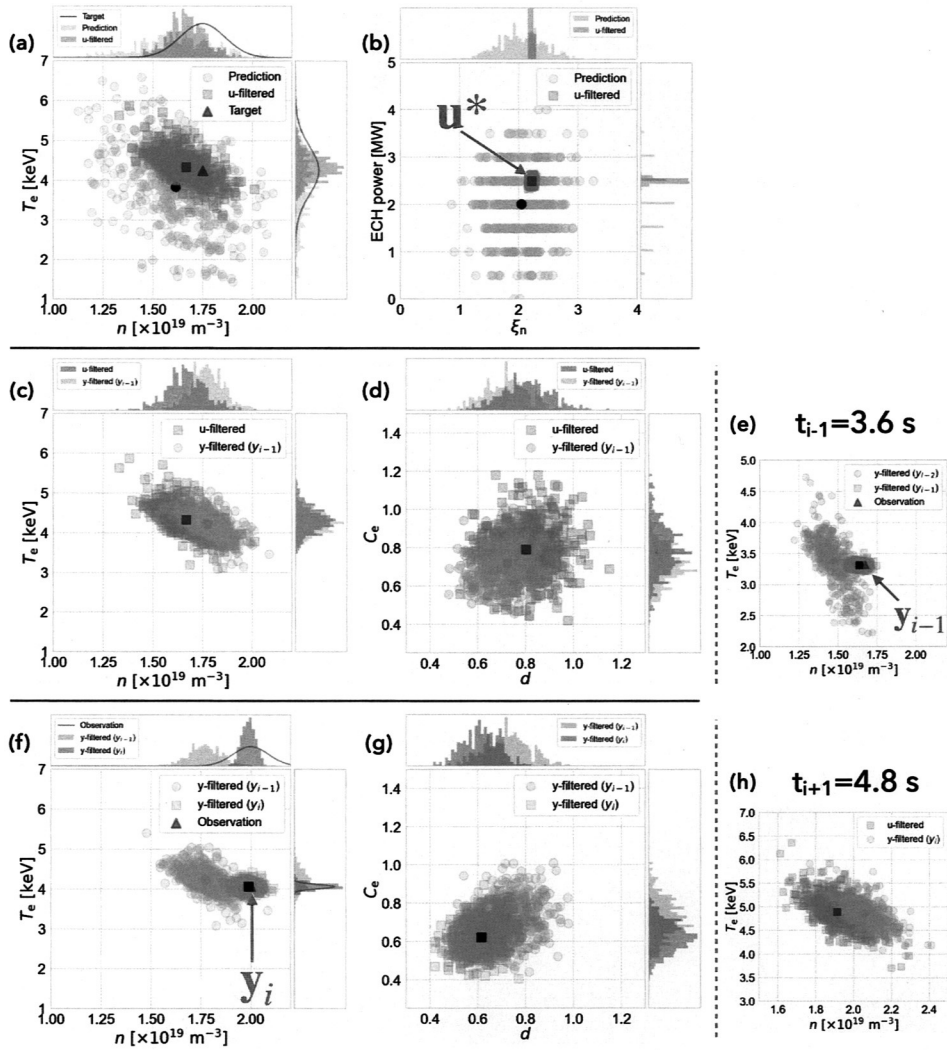


図 8. 図 7 の数値実験における時刻  $t_i = 4.2$  s の状態分布を表すアンサンブルメンバーの変化の様子。

刻  $t_{i+1} = 4.8$  秒における状態分布のアンサンブル (中心の電子温度と密度) である。

この例では、制御入力ノイズが  $u$  に対するシステムノイズよりも十分に小さいため、予測ステップ前 ( $u$  に対するシステムノイズを付与した後) の状態分布における  $u$  と  $\bar{x}$  の相関はほとんど 0 になっている。そのため、 $y$  フィルタにより未来の  $u$  フィルタ分布を修正する際に  $u$  への影響はほとんどない。しかし、何らかの理由で制御入力ノイズを大きく取る必要がある時には、 $y_i$  を同化する  $y$  フィルタ時に  $u$  の分布  $p(u_{(i+1,0)} | y_{0:i-1}, u_{(0,1):(i+1,0)}^*)$  も修正を受け、 $y$  フィルタ分布の平均が  $u_{(i+1,0)}^*$  からずれてしまう可能性がある。粒子フィルタによるアンサンブルの退化を防ぎたい時などがこの状況として考えられる。この時には、予測ステップ前にアンサンブルの  $u$  部分を毎回新たにガウシアンから生成し、 $u$  と  $\bar{x}$  の相関を断っておくなどの対策が考えられる。

最後にノイズを決めるパラメータ  $r_z$  と  $r_y$  について言及する．定常区間(4.8 秒-)では、 $0.3 \leq r_z, r_y \leq 1.0$  の幅広い範囲で高い精度(観測と目標状態の平均平方二乗誤差率(RMSPE)が5%以内)となることを確認している．一方で、変化区間(2.4–4.8 秒)での制御精度は  $r_z$  に影響されやすい．モデルの不確実性が大きい場合には制御推定の精度が落ちるため、 $r_z$  を大きく取り、状態の変化速度を遅くした方が安定した制御を行うことができる．また、 $r_y$  を小さく取りすぎると、計測誤差が大きいような観測値の情報も状態分布に強く反映されてしまい(過適合)、システムモデルの予測能力を低下させてしまうことが考えられる．そのため、システムモデルや観測値の不確実性が大きい場合や未知の場合には、 $r_z, r_y$  をある程度大きい値( $\geq 0.5$ )に選ぶのが安全である．システムモデルの適応能力は観測ノイズ( $r_y$ )の他にも  $\tilde{x}$  に対するシステムノイズによって、調整することができる．ただし、 $\tilde{x}$  に対する大きなシステムノイズ  $\tilde{v}$  は、 $\tilde{x}$  に含まれる状態変数間の相関を薄め、 $y$  フィルタ時の時間を隔てた最適化を弱める．また、取れるアンサンブルメンバーが限られる状況下では制御入力推定にも悪影響する．そのため、 $\tilde{v}$  に過度に大きな分散を設定しない方が安全である．

#### 4. まとめと今後の課題

本稿では、核融合分野でのデータ同化システムの構築に関して、制御に重きを置いて説明した．制御を含んだデータ同化のフレームワーク(DACS)を開発しており、核融合プラズマに限らず多くの制御問題に適用可能である．システムモデルが持つ不確実性を観測による逐次最適化により押さえ込むことができるため、不確実性の大きいシステムモデルを用いたモデル予測制御が実現できる．また、DACS フレームワークを用いると、予測区間に被りのない並列性に優れた制御アルゴリズムを構築することができるため、比較的重いシミュレーションコードでもシステムモデルとして用いることができる．

この手法の課題として、システムモデルの適応の限界が挙げられる．これは、観測の同化周期に対して実システムが速く変化する場合に、実システムの変化にモデルパラメータの最適化が追いつかなくなる状況である．システムモデルによる実システムの近似精度が大きく低下すると、誤った制御入力を推定することになり、制御精度が低下する．この問題は、表現能力の高いモデルを用いて柔軟に実システムの変化に適応できるようにするか、観測周期を上げて状態ベクトルの最適化頻度を上げることなどで解決することができる．ただし、どのような状況に陥るか想定できない場合も多いので、状況に合わせて観測周期やノイズのパラメータを調整できる仕組みを導入することが理想的である．

また、実際の制御の場面では、系の状態の安定性などを考慮に入れて制御を行わなければならない．特に核融合プラズマでは、多くの不安定状態が存在し、制御を誤ればプラズマが消えてしまう状況も起こり得る．このようなプラズマの持続性能に直結する課題に対するデータ駆動的な研究も進められており(Yokoyama et al., 2020)、実際の制御にはこうした研究との連携が重要である．現在、本稿で言及した制御アルゴリズムを利用して、実際の核融合プラズマを制御する実証実験を計画中である．

#### 謝 辞

本研究は統計数理研究所共同研究(2021-ISMCRP-2005, 2022-ISMCRP-2026)、核融合科学研究所共同研究(NIFS20KLPT007, NIFS22KAPT008)、科研費(JP21J14260)の助成を受けたものです．また、本研究で紹介した計算結果は国際核融合エネルギー研究センター(IFERC)のスーパーコンピュータシステム JFRS-1 により計算されたものです．

## 参 考 文 献

- 足立修一 (2014). モデル予測制御の基礎, 日本ロボット学会誌, **32**(6), 499–502.
- Evensen, G. (2003). The ensemble Kalman filter: Theoretical formulation and practical implementation, *Ocean Dynamics*, **53**(4), 343–367, <http://dx.doi.org/10.1007/s10236-003-0036-9>.
- Gettelman, A., Geer, A. J., Forbes, R. M., Carmichael, G. R., Feingold, G., Posselt, D. J., Stephens, G. L., van den Heever, S. C., Varble, A. C. and Zuidema, P. (2022). The future of Earth system prediction: Advances in model-data fusion, *Science Advances*, **8**(14), p.eabn3488, <http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.abn3488>.
- 樋口知之, 上野玄太, 中野慎也, 中村和幸, 吉田 亮 (2011). 『データ同化入門』, 朝倉書店, 東京.
- Kapteyn, M. G., Pretorius, J. V. and Willcox, K. E. (2021). A probabilistic graphical model foundation for enabling predictive digital twins at scale, *Nature Computational Science*, **1**(5), 337–347, <http://dx.doi.org/10.1038/s43588-021-00069-0>.
- Kitagawa, G. (1996). Monte Carlo filter and smoother for non-Gaussian nonlinear state space models, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **5**(1), 1–25, <http://dx.doi.org/10.1080/10618600.1996.10474692>.
- Liu, M., Fang, S., Dong, H. and Xu, C. (2021). Review of digital twin about concepts, technologies, and industrial applications, *Journal of Manufacturing Systems*, **58**, 346–361, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmsy.2020.06.017>.
- Morishita, Y., Murakami, S., Yokoyama, M. and Ueno, G. (2020). Data assimilation system based on integrated transport simulation of Large Helical Device plasma, *Nuclear Fusion*, **60**(5), 056001, <http://dx.doi.org/10.1088/1741-4326/ab7596>.
- Morishita, Y., Murakami, S., Yokoyama, M. and Ueno, G. (2022). ASTI: Data assimilation system for particle and heat transport in toroidal plasmas, *Computer Physics Communications*, **274**, 108287, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108287>.
- Murakami, S., Yamaguchi, H., Sakai, A., Wakasa, A., Fukuyama, A., Nagaoka, K., Takahashi, H., Nakano, H., Osakabe, M., Ida, K., et al. (2015). Integrated transport simulations of high ion temperature plasmas of LHD, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, **57**(5), 054009, <http://dx.doi.org/10.1088/0741-3335/57/5/054009>.
- Sakai, A., Murakami, S., Yamaguchi, H., Wakasa, A., Fukuyama, A., Nagaoka, K., Takahashi, H., Nakano, H., Osakabe, M., et al. (2015). Integrated particle transport simulation of NBI plasmas in LHD, *Plasma and Fusion Research*, **10**, 3403048–3403048, <http://dx.doi.org/10.1585/pfr.10.3403048>.
- Takeiri, Y., Morisaki, T., Osakabe, M., Yokoyama, M., Sakakibara, S., Takahashi, H., Nakamura, Y., Oishi, T., Motojima, G., Murakami, S., et al. (2017). Extension of the operational regime of the LHD towards a deuterium experiment, *Nuclear Fusion*, **57**(10), 102023, <http://dx.doi.org/10.1088/1741-4326/aa7fc2>.
- 上野玄太 (2019). 粒子フィルタとデータ同化, 統計数理, **67**, 241–253.
- Wakasa, A., Fukuyama, A., Murakami, S., Miki, M., Yokoyama, M., Sato, M., Toda, S., Funaba, H., Tanaka, K., Ida, K., Yamada, H., Honda, M. and Nakajima, N. (2010). Integrated transport simulation of LHD plasmas using TASK3D, *Proceedings of 23rd IAEA Fusion Energy Conference (Daejeon)*, P4.029.
- Yokoyama, T., Yamada, H., Masuzaki, S., Miyazawa, J., Mukai, K., Peterson, B. J., Tamura, N., Sakamoto, R., Motojima, G., Ida, K., et al. (2020). Prediction of radiative collapse in Large Helical Device using feature extraction by exhaustive search, *Journal of Fusion Energy*, **39**(6), 500–511.

## Development of Data Assimilation System for Fusion Plasma Control

Yuya Morishita<sup>1</sup>, Sadayoshi Murakami<sup>1</sup>, Masayuki Yokoyama<sup>2,5</sup> and Genta Ueno<sup>3,4,6</sup>

<sup>1</sup>Department of Nuclear Engineering, Kyoto University

<sup>2</sup>Rokkasho Research Center, National Institute for Fusion Science

<sup>3</sup>The Institute of Statistical Mathematics

<sup>4</sup>Joint Support-Center for Data Science Research

<sup>5</sup>Department of Fusion Science, School of Physical Sciences, The Graduate University for Advanced Studies, SOKENDAI

<sup>6</sup>Department of Statistical Science, School of Multidisciplinary Sciences, The Graduate University for Advanced Studies, SOKENDAI

We developed a data assimilation system, named ASTI, to analyze and control fusion plasma behavior. Although the goal of ASTI is to control fusion plasmas with high accuracy, existing data assimilation frameworks do not include control processes. We therefore developed a data assimilation framework that integrates system model updates and optimal control-input estimation. The proposed framework provides model predictive control even when the system model has large uncertainties. In this article, we provide an overview of ASTI and show the proposed data assimilation framework. We demonstrate the effectiveness of the framework through a numerical experiment to control virtual fusion plasma.



# トレンド除去演算に基づく フラクタル時系列解析の数理 —非定常時系列にみられる $1/f^\beta$ 型ゆらぎ—

清野 健†

(受付 2022 年 6 月 30 日；改訂 10 月 16 日；採択 11 月 7 日)

## 要 旨

非定常なトレンド成分を含む時系列にみられる長時間相関、 $1/f^\beta$  型ゆらぎ、あるいは、自己アフィンフラクタル性などの特性を評価するために、detrended fluctuation analysis (DFA) と呼ばれる解析法が、物理学や生体信号解析の分野で頻繁に用いられるようになってきている。DFA では、非整数ブラウン運動のような拡散的時系列の統計的自己アフィン性 (Hurst 指数) を定量化する手続きの中に、時系列のトレンド除去演算が含まれている。そのようなトレンド除去演算の導入には、非定常なトレンド成分に起因する誤った Hurst 指数の推定を避けたり、評価可能なスケーリング指数の範囲を拡張できたりする利点がある。最近では、R、Python のパッケージとして DFA が実装され、誰もが DFA を簡単に利用できるようになったため、パワースペクトルの推定に代わり DFA が用いられることが多くなっている。本稿では、DFA とその派生版である detrending moving average algorithm (DMA) を中心として、これらの解析法の数理的基礎を解説する。

キーワード：長時間相関、フラクタル、長期記憶、 $1/f$  ゆらぎ、時系列解析。

## 1. はじめに

心拍変動、呼吸変動、脳波など、多くの生体信号時系列は、周波数を  $f$  として  $1/f^\beta$  型パワースペクトルを示す (Stanley et al., 1994; Ward and Greenwood, 2010)。 $\beta = 1$  に近いもの、あるいは、 $0 < \beta < 2$  の範囲のものは、 $1/f$  ゆらぎと呼ばれることがある。ここでは、 $\beta$  の範囲を制限せず、 $1/f^\beta$  型パワースペクトルを示す時系列を、 $1/f^\beta$  型ゆらぎと呼ぶ。 $1/f^\beta$  型ゆらぎは、非整数ガウスノイズに見られる長時間相関、あるいは、非整数ブラウン運動に見られる自己アフィンフラクタル性と関連している (Mandelbrot and Van Ness, 1968)。弱定常性を仮定できる時系列の場合は、パワースペクトル密度の推定に基づき、長時間相関を評価できる。しかし、生体信号時系列をはじめとして、自然界に見られる時系列のほとんどは非定常であるため、 $1/f^\beta$  型ゆらぎのスケーリング指数  $\beta$  を推定するには、時系列に含まれる非定常トレンドの影響を除く必要がある。そのような非定常トレンドに対応するために、最近の 20 年で detrended fluctuation analysis (DFA) と呼ばれる解析法が、物理学や生体信号解析の分野で頻繁に用いられるようになってきている (Peng et al., 1995)。DFA では、非整数ブラウン運動のような拡散的時

† 大阪大学大学院 基礎工学研究科：〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1 番 3 号

系列の Hurst 指数  $H$  を推定する手続きの中に、時系列のトレンド除去演算が含まれている．そのため、トレンド成分に起因する誤った Hurst 指数の推定を避けることができる利点がある．最近では、R、Python のパッケージとして、DFA を簡単に利用できるため、古典的なパワースペクトルの推定に代わり DFA が用いられることが多くなっている．本稿では、まず、 $1/f^\beta$  型ゆらぎの特性について紹介し、その後、DFA とその派生版である detrending moving average algorithm (DMA) (Carbone and Kiyono, 2016) の数理的基礎について解説する．これまで、これらの解析法については、主に数値実験に基づきその特性が議論されてきた (Hu et al., 2001; Chen et al., 2002; Ma et al., 2010)．それに対し、本稿では解析的にこれらの解析法の特性を議論する．

## 2. $1/f^\beta$ 型ゆらぎの特性

本稿において注目する時系列の特性は、長期記憶、長時間相関、フラクタル性などと呼ばれるものである (図 1)．長期記憶、長時間相関、フラクタル性は、同じ意味のように使われることがあるが、異なる特徴を表す場合があることに注意してほしい．

長期記憶は、弱定常性の仮定の下で、離散時系列の自己共分散関数  $C[k]$  が、

$$(2.1) \quad \sum_{k=0}^{\infty} |C(k)| = \infty$$

を満たし、 $C(k) \sim k^{-\gamma}$  ( $0 < \gamma < 1$ ) の形をとる (Beran, 2017; Li, 2010)．ここで、 $\sim$  は比例を表す．式 (2.1) の性質により、自己共分散関数は特徴的時間スケールを持たないため、その特性はスケーリング指数  $\gamma$  で特徴付けられる．

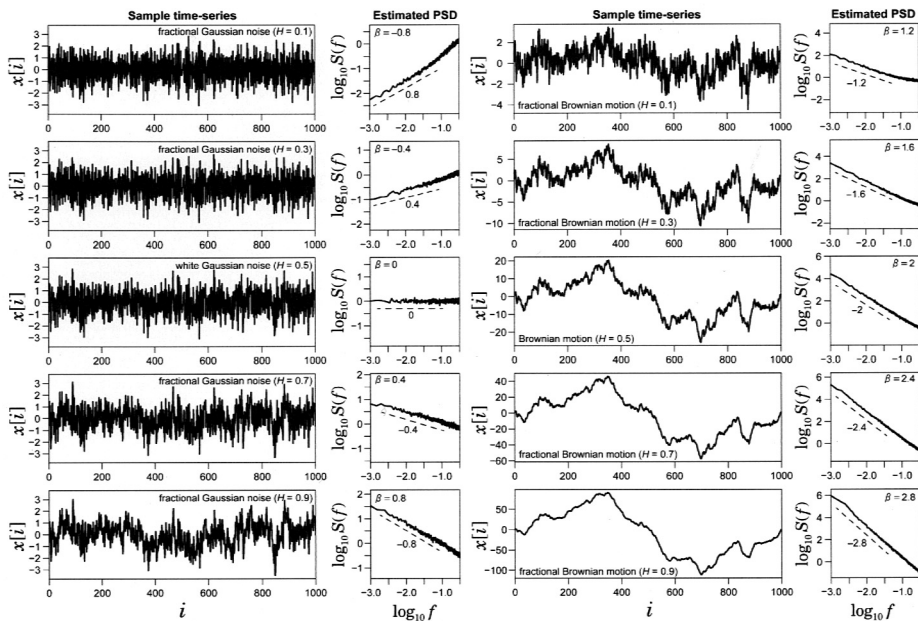


図 1. ガウス過程時系列とパワースペクトル密度  $S(f)$  の関係．サンプル時系列の右側にそのパワースペクトルの推定結果 (100 例の平均) を描いた．左側が非整数ガウスノイズの例であり、右側が非整数ブラウン運動の例．

長時間相関の概念は、長期記憶を含むが、それ以外に長時間反相関と呼ばれる性質も含んでいる (Rangarajan and Ding, 2000). 長時間反相関の場合、自己共分散関数は負の値をとり、自己共分散関数の絶対値はべき的減衰 ( $1 < \gamma < 2$ ) を示すが、式(2.1)を満たすほどゆっくりではない。長時間相関を示す例として、非整数ガウスノイズがある。非整数ガウスノイズは、その自己共分散関数が、 $0 < H < 1$  をパラメタとして、

$$(2.2) \quad C(k) = \frac{1}{2}(|k+1|^{2H} - 2|k|^{2H} + |k-1|^{2H})$$

で定義されるガウス過程である (Mandelbrot and Van Ness, 1968).  $|k|$  が大きくなると、漸近的に、

$$(2.3) \quad |C(k)| \sim |k|^{2(H-1)}$$

となる。  $0.5 < H < 1$  の場合が長時間相関 (= 長期記憶過程)、  $0 < H < 0.5$  の場合が長時間反相関の例となる。また、非整数ガウスノイズは、Hurst 指数  $H$  の非整数ブラウン運動の差分過程になっている。

また、時系列のフラクタル性は、非整数ブラウン運動のような統計的な自己アフィン性をもつ拡散の軌道を意味し、ハースト指数  $H$  とフラクタル次元  $D$  の間に  $D = 2 - H$  の関係が成り立つ (Moreira et al., 1994). 非整数ブラウン運動については、その増分が長時間相関を持つ過程になっている。長期記憶、長時間相関を持つ時系列自体にフラクタル性はないが、それらの時系列の積分(累積)は、フラクタル性を持つようになる。

以上の点を踏まえると、長期記憶、長時間相関、フラクタル性の名称は、統一的な広い枠組みを与えるには無理がある。そこで、ここでは、それらの特性を含む枠組の呼称として、 $1/f^\beta$  型ゆらぎを使うことにする。ここでは、 $1/f^\beta$  型ゆらぎを、時系列に含まれる確率的変動について、有限長時系列のパワースペクトル  $S(f)$  が、 $S(f) \sim f^{-\beta}$  を示すものとして定義する。ここで、確率的変動とは、その変動成分の  $n$  階差分が弱定常過程になる実数値  $n$  が存在することを意味する。 $n$  階差分の分散が有限であれば、確率的変動が従う確率分布についての制限はない。したがって、本稿の議論は、有限な分散をもつ非ガウス過程、および、 $n$  階差分が弱定常となる非ガウス過程に対して適用可能である。

弱定常過程の場合、長期記憶は  $0 < \beta < 1$  の領域に対応し、 $\gamma + \beta = 1$  が成り立つ。また、長時間相関は  $-1 < \beta < 0$  または  $0 < \beta < 1$  の領域に対応し、 $0 < \beta < 1$  の場合を長時間正相関、 $-1 < \beta < 0$  の場合を長時間反相関と呼ぶ。 $\beta = 0$  は、無相関な白色ノイズに対応する。自然界には  $\beta = 1$  に近いゆらぎがしばしば観測され、そのようなゆらぎは  $1/f$  ゆらぎと呼ばれる。 $1/f$  ゆらぎの起源については、不明なことが多い。フラクタル時系列は、 $1 < \beta < 3$  の領域に対応し、ハースト指数  $H$  の非整数ブラウン運動と  $(\beta - 1)/2 = H$  の関係が成り立つ。この場合、時系列は非定常な拡散過程となる。つまり、 $\beta \geq 1$  の場合、数学的には時系列の分散が発散するため、そのような過程のパワースペクトル密度が存在するとはいえない。そのような場合でも、Wigner-Ville スペクトルを代用して  $\beta$  を定義することができる (Flandrin, 1989)。非定常過程を含んで、スケーリング指数  $\beta$  は多くの場合、意味のあるパラメタである。

$\beta$  はパワースペクトル解析におけるスケーリング指数として推定されるものである。実用的なパワースペクトルの推定では、観測時系列を複数個の部分区間に分割してパワースペクトルの平均を求めたり、窓関数を適用したり、パワースペクトルの平滑化を行ったりと、様々なテクニックが必要となり、このことが非専門家に扱いづらい印象を与えるようである (日野, 1996)。そのような煩わしさを軽減しながら、非定常時系列の解析にも適用可能な方法として登場した解析法が、detrended fluctuation analysis (DFA) や detrending moving average algorithm (DMA) である (Shao et al., 2012)。次節ではまず、これらの解析法の基礎となるランダムウォーク解

析について紹介する (Peng et al., 1992).

### 3. ランダムウォーク解析

ここでは、 $\gamma$  と  $\beta$  に加えて、ランダムウォーク解析に基づく新たなスケーリング指数  $\alpha$  を導入する. ランダムウォーク解析では、まず、弱定常過程の観測時系列  $\{x[i]\}$  について、事前に標本平均を 0 にして積分時系列を求める：

$$(3.1) \quad y[i] = \sum_{j=1}^i x[j].$$

このように観測時系列をランダムウォーク軌道に変換することで、非整数ブラウン運動のような拡散的な時系列を生成する.

ランダムウォーク解析では、積分時系列の増分

$$(3.2) \quad \Delta_s y[i] = y[i+s] - y[i] = \sum_{j=1}^s x[i+j]$$

の 2 乗平均の期待値 (ゆらぎ関数: fluctuation function)

$$(3.3) \quad F^2(s) = \langle \Delta_s y^2[i] \rangle$$

を考える (図 2). ここで、 $\langle \cdot \rangle$  は期待値を表す (本稿では、確率変数も小文字で表す).  $1/f^\beta$  型ゆらぎでは、

$$(3.4) \quad F^2(s) \sim s^{2\alpha}$$

となり、スケーリング指数  $\alpha$  と  $\beta$  には

$$(3.5) \quad \alpha = \frac{\beta + 1}{2} \quad (0 < \alpha < 1)$$

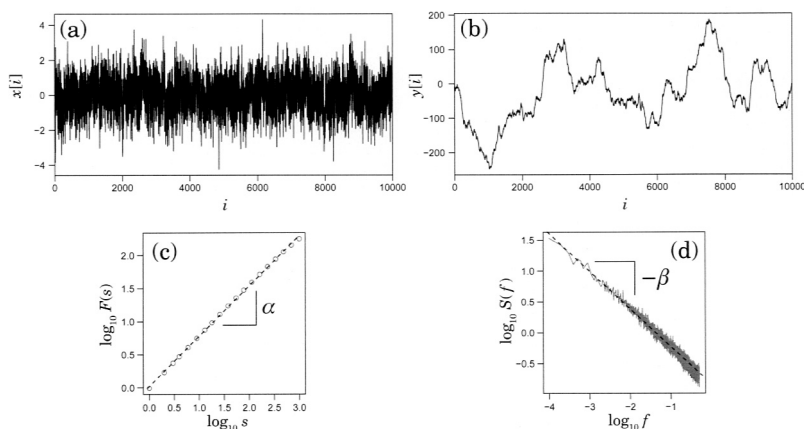


図 2. 非整数ガウスノイズのランダムウォーク解析. (a)  $H = 0.8$  のサンプル時系列. (b) (a) の積分時系列. (c) ランダムウォーク解析の結果 (100 例の平均). 両対数プロットの傾きからスケーリング指数  $\alpha$  が推定される. (d) パワースペクトルの推定結果 (100 例の平均). 両対数プロットの傾きからスケーリング指数  $\beta$  が推定される.  $\beta = 2\alpha - 1$  が成り立つ.

の関係が成り立つ。以下では、このようなスケーリング指数の関係式の導出について説明する。弱定常過程のランダムウォーク解析において、 $F^2(s)$  と  $C(k)$  の関係は

$$(3.6) \quad F^2(s) = \sum_{k=-(s-1)}^{s-1} (s - |k|)C(k)$$

で与えられる。したがって、 $C(k) \sim |k|^{-\gamma}$  を仮定することで、 $s \gg 1$  のとき、

$$(3.7) \quad F^2(s) \sim s^{2-\gamma}$$

となる。よって、 $\alpha = 1 - \gamma/2$  が成り立つ ( $1/2 < \alpha < 1$ )。

また、 $F^2(s)$  と  $S(f)$  の関係は、

$$(3.8) \quad F^2(s) = \int_{-1/2}^{1/2} S(f) \frac{\sin^2(\pi f s)}{\sin^2(\pi f)} df$$

となる。式(3.6)にある三角窓関数(テント関数、三角形関数)は、2つの矩形窓関数の畳み込みとして表すことができるので、式(3.8)には、矩形窓関数のフーリエ変換である sinc 関数の2乗が入る。

$\alpha = (\beta + 1)/2$  の関係式は、式(3.8)において、

$$(3.9) \quad \frac{\sin^2(\pi f s)}{\sin^2(\pi f)} \approx \begin{cases} s^2 & \text{for } 0 < |f| < \frac{1}{\pi s} \\ (\pi f)^{-2} & \text{for } \frac{1}{\pi s} < |f| \leq \frac{1}{2} \end{cases}$$

と近似することで、導くことができる。式(3.9)は、 $0 < |f| < \frac{1}{\pi s}$  の領域において、 $f$  のマクローリン展開の1次の項までを残した。また、 $\frac{1}{\pi s} < |f| \leq \frac{1}{2}$  の領域では、 $s \gg 1$  のとき、分子が分母に比べて非常に早く振動するので、分子にある振動の上側のエンベロープのみをとり(1と近似)、展開した。

時系列のパワースペクトルが、 $S(f) \sim f^{-\beta}$  に従うとき、式(3.8)は、

$$(3.10) \quad F^2(s) \sim \int_0^{1/(\pi s)} f^{-\beta} s^2 df + \int_{1/(\pi s)}^{1/2} f^{-\beta} (\pi f)^{-2} df$$

と、近似的に評価できる。ここで、 $-1 < \beta < 1$  のとき、

$$\int_0^{1/(\pi s)} f^{-\beta} s^2 df \sim s^{\beta+1}$$

$$\int_{1/(\pi s)}^{1/2} f^{-\beta} (\pi f)^{-2} df \sim s^{\beta+1}$$

であるので、 $F^2(s) \sim s^{2\alpha}$  と比較して、 $\alpha = (\beta + 1)/2$  となる。また、 $\beta < -1$  では、 $|s| \gg 1$  のとき、 $F^2(s)$  が一定値に漸近するため、 $\alpha = 0$  となる。 $\beta > 1$  では、式(3.10)の第一項の積分において、 $f = 0$  に近い領域の寄与が支配的になるため、 $F^2(s) \sim s^2$ 、すなわち、 $\alpha = 1$  となる。したがって、ランダムウォーク解析では、 $0 < \alpha < 1$  ( $-1 < \beta < 1$ ) の領域のみ、 $\beta$  との関係式が成り立つ。式(3.8)のように、 $F^2(s)$  と  $S(f)$  の関係式を導くことで、スケーリング指数の検出範囲など、解析手法の基本特性を明らかにすることができる (Kiyono, 2017)。

これまで、ランダムウォーク解析は、乱流統計の構造関数解析や、fluctuation analysis (FA) として使われてきた (Peng et al., 1992; Shao et al., 2012)。ここでは、ランダムウォーク解析の明確な欠点を2つ指摘する。一つは、評価可能なスケーリング指数  $\alpha$  の領域がスペクトル解

析に比べて狭いことである。つまり、ランダムウォーク解析では、 $-1 < \beta < 1$  に対応する領域しか分析できない。もう一つは、トレンド成分を含む非定常時系列では  $\alpha$  の推定精度が低下することである。これらの欠点を解消する方法が、トレンド除去演算の導入である。次節では、トレンド除去演算を含む DFA および DMA を導入する。

#### 4. トレンド除去演算を導入したランダムウォーク解析

ここではまず、時系列解析における DFA と DMA の手順を説明する(図 3)。その後、DFA と DMA の特性をまとめる (Kiyono, 2015; Kiyono and Tsujimoto, 2016b; Carbone and Kiyono, 2016; Höll et al., 2019)。DFA も、DMA も、ランダムウォーク解析にトレンド除去演算が含まれる点のみ異なる。

##### 4.1 DFA と DMA の手順

DFA の手順は以下である (Peng et al., 1995)。

- (1) 平均 0 の時系列  $\{x[i]\}$  の積分時系列  $y[i] = \sum_{j=1}^i x[j]$  を計算する。
- (2)  $\{y[i]\}$  を長さ(スケール)  $s$  の部分区間に分割し、各部分区間の変動に対して  $m$  次多項式の回帰曲線を最小 2 乗法であてはめる(図 3 左)。以下では、 $l$  番目の部分区間の回帰曲線を  $p^{(l)}[i]$  とする。スケール  $s$  は、 $m+1$  より大きく、 $N/10$  程度より小さい範囲に設定する。
- (3)  $y[i]$  と  $p^{(l)}[i]$  の差の 2 乗平均の平方根 (fluctuation function: ゆらぎ関数)

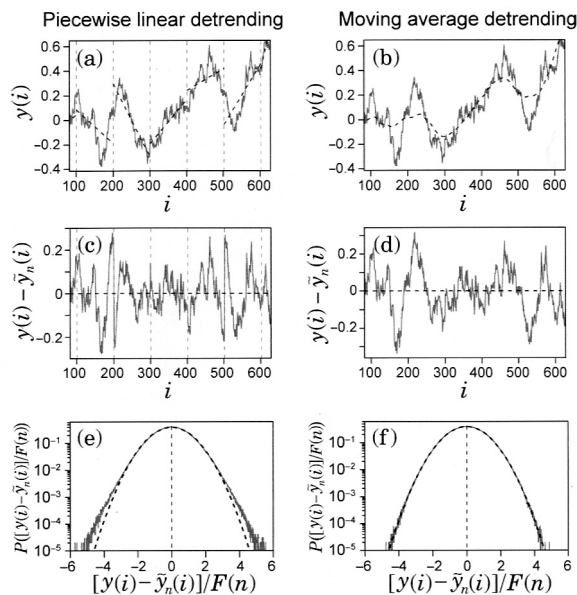


図 3. DFA (左列) と DMA (右列) における積分時系列に対するトレンド除去演算 ( $s = 101$  とした)。(a) DFA では、部分区間に回帰直線(あるいは曲線)をフィットする(破線)。(b) DMA では、 $m$  次 Savitzky-Golay フィルタを用いてトレンドを推定する(破線は 0 次の例)。(c, d) トレンド除去後の積分時系列。(e) DFA では非線形フィルタを用いるため、ガウス過程時系列を分析した場合も、トレンドまわりの分布は非ガウスになる(上に凸な破線がガウス分布)。(f) DMA では線形フィルタを用いるため、ガウス過程の分布特性は維持される(上に凸な破線がガウス分布)。

$$(4.1) \quad F(s) = \left[ \frac{1}{\lfloor N/s \rfloor} \sum_{l=1}^{\lfloor N/s \rfloor} \left\{ \frac{1}{s} \sum_{k=(l-1)s+1}^{ls} (y[k] - p^{(l)s}[k])^2 \right\} \right]^{1/2},$$

を計算する。ここで、 $\lfloor \cdot \rfloor$  は、床関数である。

(4)  $s$  の値を変化させ、 $F(s)$  を計算する。

(5)  $\log_{10} s$  に対して  $\log_{10} F(s)$  をプロットし、直線(スケーリング)領域の傾きをスケーリング指数  $\alpha$  として推定する。

$m$  次多項式をトレンド除去に用いる方法は、 $m$  次 DFA と呼ばれる。DFA では、検出可能なスケーリング指数  $\alpha$  の範囲が、 $0 < \alpha < m + 1$  となる。さらに、解析する時系列  $\{x[i]\}$  に含まれる  $m - 1$  次の多項式トレンドを完全に除くことができる (Hu et al., 2001)。

DMA では、DFA の区分的曲線フィットの代わりに、Savitzky-Golay フィルタを用いる (Tsujiimoto et al., 2016)。Savitzky-Golay フィルタは、移動平均の定数フィットを多項式に一般化したフィルタである。 $m$  次 Savitzky-Golay フィルタでは、スケール  $s$  (奇数) の部分区間に  $m$  次多項式を当てはめ、その中央の点をフィルタリングされた値として採用する。部分区間は、一点ずつスライドさせる。なお、 $m$  は偶数とする ( $m$  次と  $m + 1$  次のフィルタリング結果は一致するため)。初期に提案された DMA (central DMA) では、移動平均フィルタが用いられており、これは 0 次の Savitzky-Golay フィルタと一致する。DMA の手順は、DFA の (2) (3) の部分のみ異なるのでその箇所のみ説明を与える。

(2)  $\{y[i]\}$  に対し、スケール  $s$ 、次数  $m$  の Savitzky-Golay フィルタを適用する (図 3 右)。その結果を  $p_s[i]$  とする。スケール  $s$  は、 $m + 3$  より大きく、 $N/10$  程度より小さい範囲の奇数に設定する。

(3)  $y[i]$  と  $p_s[i]$  の差の 2 乗平均の平方根

$$(4.2) \quad F(s) = \left[ \frac{1}{N - s + 1} \sum_{k=(s+1)/2}^{N-(s-1)/2} (y[k] - p_s[k])^2 \right]^{1/2},$$

を計算する。

DMA の手順は、DFA と対比することで、説明としてはわかりやすいが、実用上は、DMA の高速アルゴリズムを使用することを薦める (Tsujiimoto et al., 2016)。上記の手順では、計算時間が時系列の長さ  $N^2$  に比例するが、高速アルゴリズムでは  $N$  に比例した計算速度が実現されている。

$m$  次 Savitzky-Golay フィルタをトレンド除去に用いる方法は、 $m$  次 DMA と呼ばれる。DMA では、検出可能なスケーリング指数  $\alpha$  の範囲が、 $0 < \alpha < m + 2$  となる。さらに、解析する時系列  $\{x[i]\}$  に含まれる  $m$  次の多項式トレンドを完全に除くことができる。これらの特性は解析的に示されている (Carbone and Kiyono, 2016)。

DFA も、DMA も、ランダムウォーク解析と類似の方法のように見える。DFA および DMA では、トレンド除去の方法がスケールに依存しているので、ランダムウォーク解析と同じスケーリング指数  $\alpha$  が推定できると予想できる。次節では、この点の明確にするために、DFA と DMA の数理的基礎をまとめる。

#### 4.2 自己共分散関数 $C(k)$ およびパワースペクトル $S(f)$ との関係

弱定常の仮定の下で、DFA と DMA の  $F^2(s)$  を、自己共分散関数  $C(k)$  およびパワースペクトル密度  $S(f)$  を用いて以下の形で表すことができる (Kiyono, 2017)。

$$(4.3) \quad F^2(s) = \sum_{k=-s}^s C(k) L(k, s)$$

$$(4.4) \quad F^2(s) = \int_{-1/2}^{1/2} S(f) |G_s(f)|^2 df$$

$$(4.5) \quad |G_s(f)|^2 = \sum_{k=-s}^s L(k, s) \cos(2\pi f k)$$

以下では、これらの式に含まれる  $L(k, s)$  と  $|G_s(f)|^2$  の求め方について説明する。

まずは、式表現が簡単な DMA を考える。ランダムウォーク解析における  $\Delta_s y[i] = \sum_{j=1}^s x[i+j]$  を、重み  $\{w_s(j)\}$  を導入して、

$$(4.6) \quad \Delta_s y[i] = \sum_{j=1}^s w_s(j) x[i+j]$$

と一般化し、

$$(4.7) \quad F^2(s) = \langle \Delta_s y^2[i] \rangle$$

とする。DMA では、積分演算も、Savitzky-Golay フィルタを用いたトレンド除去演算も、畳み込みとしてできるので、式(4.6)の  $\{w_s(j)\}$  を求めることができる。具体的には、DMA の  $\{w_s(j)\}$  は、

$$(4.8) \quad w_s(k) = \begin{cases} \Theta\left(\frac{s+1}{2} - k\right) - \sum_{j=0}^m b_{1,j+1} \sum_{r=k}^s (r - s' - 1)^j & \text{for } 1 \leq k \leq s \\ 0 & \text{for otherwise} \end{cases}$$

となる (Kiyono and Tsujimoto, 2016b)。ここで、 $\Theta(x)$  はユニットステップ関数

$$(4.9) \quad \Theta(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

であり、 $b_{i,j}(s)$  は、行列

$$(4.10) \quad B_m(s) = \sum_{j=-(s-1)/2}^{(s-1)/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & j^2 & \cdots & j^m \\ 0 & j^2 & 0 & \cdots & 0 \\ j^2 & 0 & j^4 & \cdots & j^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ j^m & 0 & j^{m+2} & \cdots & j^{2m} \end{bmatrix}$$

の逆行列の  $(i, j)$  成分である。図 4 は、0 次、2 次、4 次 DMA の  $\{w_s(k)\}$  を描いたものである。式(4.6)の表現を用いると、

$$(4.11) \quad L(k, s) = \sum_{j=1}^{s-|k|} w_s(j) w_s(j+|k|)$$

$$(4.12) \quad G_s(f) = \sum_{k=1}^s w_s(k) e^{-i2\pi f k}$$

となる。具体例として、0 次 DMA の場合は、



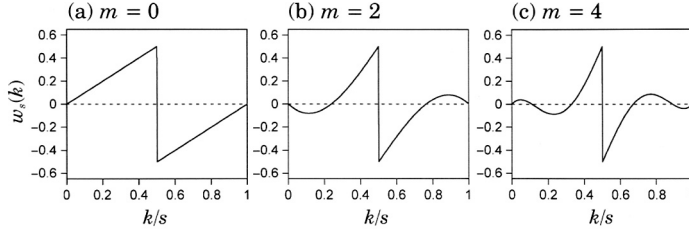


図 4. DMA の重み係数  $\{w_s(k)\}$ .  $m$  は、トレンド除去に用いる Savitzky-Golay フィルタの次数.

$$(4.13) \quad L(k, s) = \begin{cases} \frac{2k^3 + 6sk^2 - 2(3s^2 + 1)k + s^3 - s}{12s^2} & \text{for } |k| \leq \frac{s-1}{2} \\ \frac{(k-s)(k-s+1)(k-s-1)}{6s^2} & \text{for } |k| > \frac{s-1}{2} \end{cases}$$

$$(4.14) \quad |G_s(f)| = \frac{1}{2 \sin(\pi f)} \left\{ 1 - \frac{\sin(\pi s f)}{s \sin(\pi f)} \right\}$$

となる．これらの関数の漸近形を考えることで、スケーリング指数  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  の間の関係式を解析的に導くことができる．加えて、 $\alpha$  の推定上限を  $|G_s(f)|^2$  から求めることができる (Kiyono and Tsujimoto, 2016b).

DFA の場合、トレンド除去演算を行う長さ  $s$  の部分区間全体の期待値を考える必要があるため、重み  $\{w_s(i, k)\}$  を導入して

$$(4.15) \quad \Delta_s y[i] = \sum_{k=1}^s w_s(i, k) x[i+k]$$

を定義すれば、

$$(4.16) \quad F^2(s) = \left\langle \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s \Delta_s y^2[i+j] \right\rangle$$

となる．DMA の場合、式(4.7)のように、 $F^2(s)$  の期待値は各点  $i$  で評価されている．それに対し、DFA の場合、式(4.16)のように、長さ  $s$  の部分区間  $[i+1, i+s]$  の期待値が評価されている．DFA では、この部分区間内で、各点が  $F^2(s)$  に与える寄与が非一様になっているため、部分区間全体で平均値をとる必要がある (Kiyono and Tsujimoto, 2016a)．また、DMA では、 $\Delta_s y[i]$  が、式(4.6)のように、畳み込みで表現されているため、ガウス過程時系列の  $\Delta_s y[i]$  は、ガウス分布に従う．それに対し、DFA では、部分区間内で、 $\Delta_s y[i]$  の重みが非一様であるため、ガウス過程時系列の  $\Delta_s y[i]$  は、非ガウス分布になる (図 3)．DMA と比べた場合に、これらの特性は DFA の推定量としての欠点である．

DFA の場合、

$$(4.17) \quad L(k, s) = \frac{1}{s} \sum_{j=1}^{s-|k|} \sum_{i=1}^s w_s(i, j) w_s(i, j+|k|)$$

となる． $|G_s(f)|^2$  は、式(4.5)を用いて計算できる．しかし、DFA では、式(4.11)および式(4.12)を、使用することができず、計算の手間は DMA とくらべて非常に大きい．

### 4.3 白色ノイズの解析結果

前節で、定義した  $L(k, s)$  を用いると、白色ノイズを DMA あるいは DFA で分析した結果を解析的に求めることができる。白色ノイズの自己共分散関数  $C(k)$  は、時系列の分散を  $\sigma^2$  として、

$$(4.18) \quad C(k) = \begin{cases} \sigma^2 & \text{for } k = 0 \\ 0 & \text{for } k \neq 0 \end{cases}$$

である。式(4.3)より、

$$(4.19) \quad F^2(s) = \sum_{k=-s}^s C(k) L(k, s) = \sigma^2 L(0, s)$$

となる。ランダムウォーク解析 (FA), 1 次 DFA (DFA1), 0 次 DMA (DMA0) では、それぞれ、以下のようなになる。

$$(4.20) \quad F_{\text{FA}}^2(s) = \sigma^2 s$$

$$(4.21) \quad F_{\text{DMA0}}^2(s) = \sigma^2 \frac{s^2 - 1}{12s}$$

$$(4.22) \quad F_{\text{DFA1}}^2(s) = \sigma^2 \frac{s^2 - 4}{15s}$$

ランダムウォーク解析では、 $s$  の全領域において、 $F_{\text{FA}}(s)$  が  $s^{1/2}$  に比例するが、DMA および DFA では、短いスケールでずれが生じることが分かる (図5参照)。このような解析的結果は、実際の時系列解析の結果を解釈する際に役に立つ。

### 4.4 スケーリング指数 $\alpha$ と $\beta$ の関係

式(4.3)および式(4.5)を用いることで、スケーリング指数  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  の間の関係を解析的に議論することができる。例えば  $m$  次 DMA の場合、図6に示したように、 $|G_s(f)|^2$  の低周波数側は  $s^{2m+4} f^{2m+2}$  に比例し、高周波数側は  $f^{-2}$  に比例する。0 次 DMA の場合、

$$(4.23) \quad |G_s(f)|^2 = \begin{cases} \left( \frac{\pi(s^2 - 1)}{12} \right)^2 f^2 & \text{for } 0 < f < f_c = \frac{\sqrt{6}}{\pi s} \\ \frac{1}{4\pi^2 f^2} & \text{for } f_c < f < \frac{1}{2} \end{cases}$$

と近似することができる。したがって、時系列が  $S(f) \sim f^{-\beta}$  に従うとき、

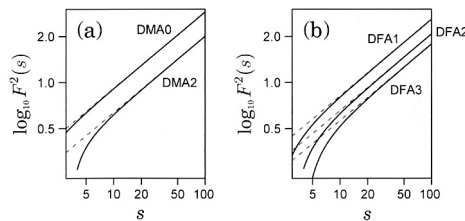


図5. DMA および DFA を用いて、白色ノイズを解析した場合の  $F^2(s)$  の解析的結果。破線は傾き 1 となる理想的な直線。

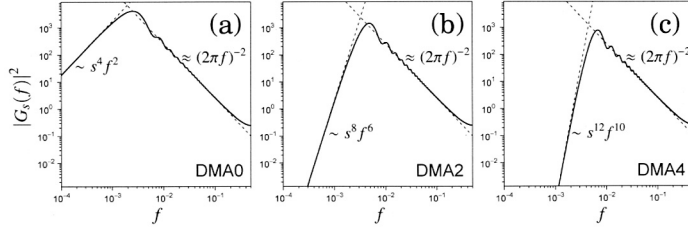


図 6. DMA の  $|G_s(f)|^2$ . (a)0 次 DMA. (b)2 次 DMA. (c)4 次 DMA.

$$F^2(s) = \int_{-1/2}^{1/2} S(f) |G_s(f)|^2 df$$

$$\sim \int_0^{f_c} f^{-\beta} \left( \frac{\pi(s^2 - 1)}{12} \right)^2 f^2 df + \int_{f_c}^{1/2} f^{-\beta} \frac{1}{4\pi^2 f^2} df$$

となる.  $f_c = \sqrt{6}/(\pi s)$  であるので,  $s \gg 1$ ,  $-1 < \beta < 3$  のとき, 各積分は, それぞれ,

$$\int_0^{\sqrt{6}/(\pi s)} f^{-\beta} \left( \frac{\pi(s^2 - 1)}{12} \right)^2 f^2 df \sim \frac{s^{\beta+1}}{3 - \beta}$$

$$\int_{\sqrt{6}/(\pi s)}^{1/2} f^{-\beta} \frac{1}{4\pi^2 f^2} df \sim \frac{s^{\beta+1}}{\beta + 1}$$

となる. したがって,  $-1 < \beta < 3$  のとき,

$$F^2(s) \sim s^{\beta+1}$$

となる.  $F^2(s) \sim s^{2\alpha}$  と比較して,

$$(4.24) \quad \alpha = \frac{\beta + 1}{2}$$

が成り立つ.

また,  $\beta > 3$  の場合, 上の第 1 項の積分は発散する. 有限長時系列を考える場合, 積分において第 1 項の  $f = 0$  に近い領域の面積が支配的になり,  $s$  に依存するカットオフ周波数  $f_c$  の影響が無視できるため(非積分関数にある  $s$  以外に  $s$  に依存する部分がなくなるため),

$$(4.25) \quad F^2(s) \sim s^4$$

となる. したがって,  $\beta > 3$  の領域では,  $\alpha = 2$  となる. この値が, 0 次 DMA における,  $\alpha$  の検出上限である. 一般に  $m$  次 DMA では, 検出上限は  $m + 2$  になる. ランダムウォーク解析の検出上限が 1 であったことから, トレンド除去演算の導入により, 検出上限が拡張できることがわかる. 詳細については, 論文 (Kiyono, 2015; Kiyono and Tsujimoto, 2016b) を参照していただきたい.

#### 4.5 スケーリング解析の例

数値的に生成した時系列に対して, DFA および DMA を適用した例を紹介する. 解析するサンプル時系列  $\{x[i]\}$  は, 図 7(a) (e) のように, パワースペクトル密度が  $S(f) \sim f^{-0.5}$  (図 7(b)) に比例し, 正規分布に従う過程(ガウス過程), および, パワースペクトル密度が  $S(f) \sim f^{-1.0}$  (図 7(f)) に比例し, 対数正規分布に従う過程(非対称な非ガウス過程)の 2 例である. これらの

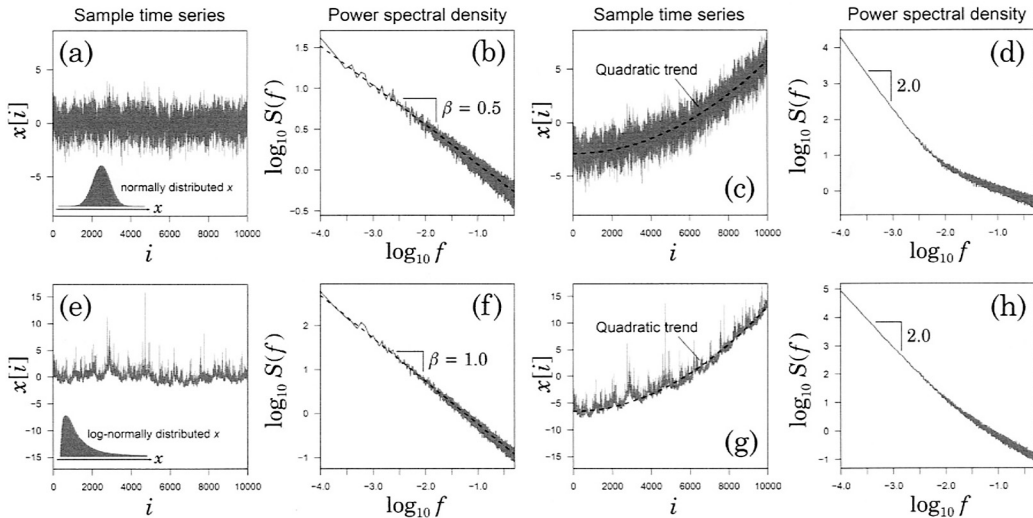


図7.  $1/f^\beta$  型ゆらぎのサンプル時系列((a) (e))とそのパワースペクトル密度((b) (f)). (上段)パワースペクトル密度が  $S(f) \sim f^{-0.5}$  に比例し、正規分布に従う過程. (下段)パワースペクトル密度が  $S(f) \sim f^{-1.0}$  に比例し、対数正規分布に従う過程. 右側は、破線で示した2次関数トレンドを加えたサンプル時系列((c) (g))とそのパワースペクトル密度((d) (h)).

時系列は、まず、独立同分布過程のサンプル時系列を生成し、そのパワースペクトル密度を  $S(f) \sim f^{-\beta}$  型に変換した後に、逆フーリエ変換することで生成した。

ここでは、図7(c) (g)のように、これらの時系列に、2次関数で記述されるトレンド成分(図中の破線)を加えたものを解析した。2次関数トレンドを含む時系列では、図7(d) (h)のように、トレンド成分に起因する  $S(f) \sim f^{-2.0}$  型のパワースペクトル密度が低周波数側で観測される。そのため、トレンド除去などの前処理なしのサンプル時系列のフーリエ変換を用いたパワースペクトル推定では、確率的変動成分のスケーリング指数を正しく推定することはできない。

2次関数トレンドを含むサンプル時系列 ( $N = 10^4$ ) を DFA および DMA を用いて分析した結果が図8である。図8は、 $\log_{10} s$  に対する  $\log_{10} F(s)$  のプロットである。両対数プロットの傾きから、スケーリング指数  $\alpha$  を推定できる。パワースペクトル密度  $S(f) \sim f^{-\beta}$  のスケーリング指数  $\beta$  は、 $\beta = 2\alpha - 1$  の関係を使って推定できる。この関係式の導出において、分布のガウス性(正規性)は仮定していないので、図7(e)のような、非対称な非ガウス過程であってもスケーリング指数を推定できる。

トレンド除去の次数が低い1次 DFA および0次 DMA では、図8(a) (c) (e) (g)のようにスケール  $s$  が大きい領域で、2次関数トレンドの影響(破線で示した直線からのずれ)が見られた。しかし、トレンド除去の次数を上げた、2次 DFA および2次 DMA では、図8(b) (d) (f) (h)のように、トレンド成分の影響を完全に除去したスケーリング指数の推定ができています。DFA と DMA では、トレンド除去の次数を変化させて、 $\log_{10} s$  に対する  $\log_{10} F(s)$  のプロットを描くことで、時系列に含まれるトレンド成分の影響を評価することができる。

##### 5. 長時間相互相関解析への拡張

前節までは単変量時系列  $\{x[i]\}$  の  $1/f^\beta$  型ゆらぎを考えた。ここでは、2変量時系列

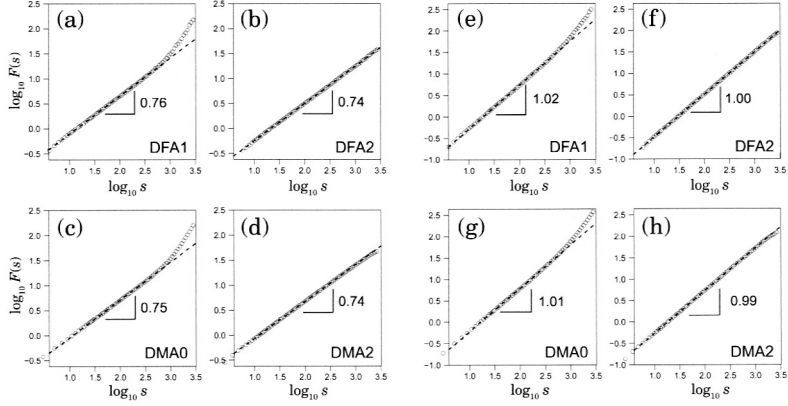


図 8. 図 7(c) (g) に示した過程のサンプル時系列 ( $N = 10^4$ ) を DFA および DMA で解析した結果. (a)–(d) 2 次関数トレンドを含む  $f^{-0.5}$  型ゆらぎ (図 7(c)) の解析結果. (e)–(h) 2 次関数トレンドを含む  $f^{-1.0}$  型ゆらぎ (図 7(g)) の解析結果. (上段) 1 次 DFA (DFA1) と 2 次 DFA (DFA2) の結果. (下段) 0 次 DMA (DMA0) と 2 次 DMA (DMA2) の結果. 両対数プロットの直線領域の傾きがスケーリング指数  $\alpha$  の推定値. スケーリング指数  $\beta$  は,  $\beta = 2\alpha - 1$  の関係を使って推定可能. スケーリング指数の理論的値は, 左側 2 列では,  $\alpha = 0.75$ ,  $\beta = 0.5$  であり, 右側 2 列では,  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 1$ .

$\{(x^{(1)}[i], x^{(2)}[i])\}$  のクロススペクトルに見られる  $1/f^\beta$  型特性を分析する方法を紹介する (Nakata et al., 2019). この現象は長時間相互相関として知られるものである (Podobnik and Stanley, 2008). 前提として,  $\{x^{(1)}[i]\}$  と  $\{x^{(2)}[i]\}$  は, それぞれが,  $1/f^\beta$  型ゆらぎを示す. 長時間相互相関ではさらに,  $\{x^{(1)}[i]\}$  と  $\{x^{(2)}[i]\}$  のクロススペクトル  $|S_{12}(f)|$  が,  $|f| \ll 1/2$  の領域で,

$$(5.1) \quad |S_{12}(f)| \sim \frac{1}{|f|^\beta}$$

となる.  $\{x^{(1)}[i]\}$  と  $\{x^{(2)}[i]\}$  が互いに無相関であれば, 式 (5.1) の関係は見られない. しかし, 両者が同じ成分に駆動されている場合は, 式 (5.1) の関係が見られる.

式 (5.1) の特性を評価する方法として, ここでは, detrending moving-average cross-correlation analysis (DMCA) を紹介する (Nakata et al., 2019). 出発点は, 式 (4.7) の代わりに,

$$(5.2) \quad F_{12}^2(s) = \langle \Delta_s y^{(1)}[i] \Delta_s y^{(2)}[i] \rangle$$

を考えることである. ここで,

$$(5.3) \quad \Delta_s y^{(\ell)}[i] = \sum_{j=1}^s w_s(j) x^{(\ell)}[i+j], \quad (\ell = 1, 2)$$

である.  $\{x^{(1)}[i]\}$  と  $\{x^{(2)}[i]\}$  の相互共分散関数  $C_{12}(k)$ , クロスパワースペクトルを  $S_{12}(f)$  とすれば,

$$(5.4) \quad F_{12}^2(s) = \sum_{k=-s}^s C_{12}(k) L(k, s)$$

$$(5.5) \quad F_{12}^2(s) = \int_{-1/2}^{1/2} |S_{12}(f)| |G_s(f)|^2 df$$

が成り立つ．ここで、 $L(k, s)$ 、 $G_s(f)$  は、単変量の場合と同じく、それぞれ、式(4.11)、(4.12)で与えられる．したがって、前節と同様に、 $|S_{12}(f)| \sim |f|^{-\beta}$  が成り立つ場合は、 $F_{12}(s) \sim s^\alpha$  となり、 $\alpha = (\beta + 1)/2$  が成り立つ．

一般には、2変量時系列の関係については、時間差(ラグ) $\kappa$ が存在する場合がありますので、式(5.2)の代わりに、

$$(5.6) \quad F_{12}^2(s, \kappa) = \langle \Delta_s y^{(1)}[i] \Delta_s y^{(2)}[i + \kappa] \rangle$$

とする必要がある．この場合、式(5.4)は、

$$(5.7) \quad F_{12}^2(s, \kappa) = \sum_{k=-s}^s C_{12}(k + \kappa) L(k, s)$$

となる．しかし、式(5.5)は同じままである．基本的な形は、前節で議論した単変量時系列と同じであるので、前節の結果は、2変量時系列の場合も成り立つ．実際の時系列解析における指針は論文 (Nakata et al., 2019) を参照していただきたい．

## 6. おわりに

本稿では、DFA や DMA などのトレンド除去演算を含むスケーリング解析法の特徴を、解析的に考察した．スケーリング解析手法の中では、DFA が最も知名度が高く、論文からの引用は、現時点で3000を超えている．それに比べれば、DMA は少数派である．しかし、数理的な記述としては、式(4.6)および(4.7)の枠組みが素直であるので、DFA と比べて、DMA の方が数理的にきれいな印象がある．加えて、DFA では、区分的曲線フィットによるトレンド除去が非線形フィルタであるため、元の時系列の分布構造を歪めたり、各点の重みが不均一な統計量になっていたりという、明らかな欠点がある (Kiyono and Tsujimoto, 2016a)．これらの欠点は、DMA にはない．とはいえ、DFA でも、DMA でも、パワースペクトル解析でも、正しく使えば、同様の結果が得られる．時系列解析を行う際には、各解析法の特徴を理解し、正しく使い、正しく解釈することが重要である．

## 参 考 文 献

- Beran, J. (2017). *Statistics for Long-memory Processes*, Chapman & Hall/CRC Press, New York.
- Carbone, A. and Kiyono, K. (2016). Detrending moving average algorithm: Frequency response and scaling performances, *Physical Review E*, **93**(6), 063309.
- Chen, Z., Ivanov, P. C., Hu, K. and Stanley, H. E. (2002). Effect of nonstationarities on detrended fluctuation analysis, *Physical Review E*, **65**(4), 041107.
- Flandrin, P. (1989). On the spectrum of fractional Brownian motions, *IEEE Transactions on Information Theory*, **35**(1), 197–199.
- 日野幹雄 (1996). 『スペクトル解析』, 朝倉書店, 東京.
- Höll, M., Kiyono, K. and Kantz, H. (2019). Theoretical foundation of detrending methods for fluctuation analysis such as detrended fluctuation analysis and detrending moving average, *Physical Review E*, **99**(3), 033305.
- Hu, K., Ivanov, P. C., Chen, Z., Carpena, P. and Stanley, H. E. (2001). Effect of trends on detrended fluctuation analysis, *Physical Review E*, **64**(1), 011114.
- Kiyono, K. (2015). Establishing a direct connection between detrended fluctuation analysis and Fourier analysis, *Physical Review E*, **92**(4), 042925.
- Kiyono, K. (2017). Theory and applications of detrending-operation-based fractal-scaling analysis, *2017 International Conference on Noise and Fluctuations (ICNF)*, 1–4.

- Kiyono, K. and Tsujimoto, Y. (2016a). Nonlinear filtering properties of detrended fluctuation analysis, *Physica A*, **462**, 807–815.
- Kiyono, K. and Tsujimoto, Y. (2016b). Time and frequency domain characteristics of detrending-operation-based scaling analysis: Exact DFA and DMA frequency responses, *Physical Review E*, **94**(1), 012111.
- Li, M. (2010). Fractal time series — A tutorial review, *Mathematical Problems in Engineering*, **2010**, 157264.
- Ma, Q. D., Bartsch, R. P., Bernaola-Galván, P., Yoneyama, M. and Ivanov, P. C. (2010). Effect of extreme data loss on long-range correlated and anticorrelated signals quantified by detrended fluctuation analysis, *Physical Review E*, **81**(3), 031101.
- Mandelbrot, B. B. and Van Ness, J. W. (1968). Fractional Brownian motions, fractional noises and applications, *SIAM Review*, **10**(4), 422–437.
- Moreira, J., da Silva, J. K. L. and Kamphorst, S. O. (1994). On the fractal dimension of self-affine profiles, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **27**(24), 8079–8089.
- Nakata, A., Kaneko, M., Shigematsu, T., Nakae, S., Evans, N., Taki, C., Kimura, T. and Kiyono, K. (2019). Generalized theory for detrending moving-average cross-correlation analysis: A practical guide, *Chaos, Solitons & Fractals: X*, **3**, 100022.
- Peng, C.-K., Buldyrev, S. V., Goldberger, A. L., Havlin, S., Sciortino, F., Simons, M. and Stanley, H. E. (1992). Long-range correlations in nucleotide sequences, *Nature*, **356**(6365), 168–170.
- Peng, C.-K., Havlin, S., Stanley, H. E. and Goldberger, A. L. (1995). Quantification of scaling exponents and crossover phenomena in nonstationary heartbeat time series, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, **5**(1), 82–87.
- Podobnik, B. and Stanley, H. E. (2008). Detrended cross-correlation analysis: A new method for analyzing two nonstationary time series, *Physical Review Letters*, **100**(8), 084102.
- Rangarajan, G. and Ding, M. (2000). Integrated approach to the assessment of long range correlation in time series data, *Physical Review E*, **61**(5), 4991.
- Shao, Y.-H., Gu, G.-F., Jiang, Z.-Q., Zhou, W.-X. and Sornette, D. (2012). Comparing the performance of FA, DFA and DMA using different synthetic long-range correlated time series, *Scientific Reports*, **2**, 835.
- Stanley, H., Buldyrev, S., Goldberger, A., Goldberger, Z., Havlin, S., Mantegna, R. N., Ossadnik, S., Peng, C.-K. and Simons, M. (1994). Statistical mechanics in biology: How ubiquitous are long-range correlations?, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, **205**(1-3), 214–253.
- Tsujimoto, Y., Miki, Y., Shimatani, S. and Kiyono, K. (2016). Fast algorithm for scaling analysis with higher-order detrending moving average method, *Physical Review E*, **93**(5), 053304.
- Ward, L. M. and Greenwood, P. E. (2010). The mathematical genesis of the phenomenon called “1/f noise”, Banff International Research Station, <https://www.birs.ca/workshops/2010/10frg132/report10frg132.pdf>.

## Mathematical Foundation of Detrending-operation-based Fractal Scaling Analysis

Ken Kiyono

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

To characterize long-range correlation,  $1/f^\beta$  fluctuation, and self-affine fractal properties embedded in nonstationary time series, detrended fluctuation analysis (DFA) has become widely used in the fields of physics and biomedical time series analysis. In DFA, a detrending operation with piecewise regression is included in the scaling analysis procedure. Such detrending operations have the advantages of avoiding a false estimate of the scaling exponent induced by nonstationary trend components and expanding the range of the detectable scaling exponent. DFA has recently been implemented as a package in R and Python and is often used instead of conventional power spectral analysis. In this paper, we provide the mathematical basis for the detrending-operation-based scaling analysis methods, focusing on DFA and its variant, the detrending moving average (DMA) algorithm.



# 公開データベースを利用した ヒト安静時脳活動研究

松井 鉄平<sup>1</sup>・地村 弘二<sup>2</sup>・李 鋭祥<sup>3</sup>

(受付 2022 年 10 月 7 日；改訂 2023 年 1 月 18 日；採択 1 月 20 日)

## 要 旨

ヒトの脳は運動や感覚入力を伴わず何もしていない安静時でも安静時脳活動と呼ばれる自発的な脳活動を示すことが分かっている。近年の神経科学では大規模な脳活動データベースの構築が進んでおり、安静時脳活動についても千人以上のデータが公開されている。公開データベースは神経科学の専門家だけでなく数理統計の専門家にも利用され始めており、安静時脳活動の新しい一面が明らかになってきている。本論文では、その一例として安静時脳活動の時空間ダイナミクスについての最近の研究を紹介する。従来の心理学や神経科学では、安静時脳活動は複数の安定状態の遷移として表現されていたが、公開データベースを基にした最近の統計的な検証により、この描像は正しくない可能性が明らかになった。このような事例は、公開データベースを共通の基盤とした神経科学と数理統計の専門家の連携が、今後の脳の理解に重要な役割を果たすことを示唆している。

キーワード：神経科学，fMRI(機能的磁気共鳴画像法)，自発的脳活動，公開データ，時系列モデリング，非正常性。

## 1. 神経科学で進むデータ駆動型科学への転換

最近 10 年くらいの神経科学のトレンドの一つとして大規模データベースの構築とその活発な利用が挙げられる。脳活動についての大規模データベースの構築は、機能的磁気共鳴画像法(fMRI)による脳活動計測で特に盛んに行われている。fMRI が捉える信号は神経活動によって引き起こされた脳血流などの代謝活動であり、発火のような神経活動そのものではない。しかしながら、ヒトの全脳を 1 mm 程度の空間解像度と 1 秒程度の時間解像度で 4 次元(=空間 3 次元+時間 1 次元)に計測できることは非常に魅力的であり、原理が提唱された 1990 年初頭から今に至るまで最も広く用いられている脳活動計測法の一つである。大規模データベースの代表例である Human Connectome Project (HCP) では、米国ワシントン大学やミネソタ大学が中心となり約 1000 人のヒトの fMRI や行動のデータベースを構築している。最近では更に大規模なデータベースも作られており、有力なものとしては UK Biobank が 1 万人規模のヒトの fMRI データを現在進行形で集めている。UK Biobank は脳活動以外にも、行動、遺伝データを収集・公開しており、医療分野で広く活用されている。fMRI 以外の計測手法を用いたデータ

<sup>1</sup> 岡山大学 学術研究院自然科学学域：〒700-8530 岡山県岡山市北区津島中 1 丁目 1-1

<sup>2</sup> 群馬大学 情報学部：〒371-8510 群馬県前橋市荒牧町 4 丁目 2

<sup>3</sup> 東京大学大学院 医学系研究科：〒113-8654 東京都文京区本郷 7 丁目 3-1

表 1. 脳活動データベースの例.

名称	目的	組織	被験者	計測モダリティ	データの規模	URL
Human Connectome Project	構造と機能の対応によるヒト脳の理解	ワシントン大学, ミネソタ大学	健康成人	構造 MRI, fMRI, 拡散 MRI, MEG	~1000 人 (S1200 データ)	<a href="https://www.humanconnectome.org/">https://www.humanconnectome.org/</a>
UK Biobank	疾患の診断や治療法の開発	オックスフォード大学など	健康成人, 様々な疾患の患者	構造 MRI, fMRI, 拡散 MRI	>5000 人	<a href="https://biobank.ndph.ox.ac.uk/showcase/label.cgi?id=100">https://biobank.ndph.ox.ac.uk/showcase/label.cgi?id=100</a>
Brain Observatory	神経細胞集団による感覚情報表現の理解	アレン神経科学研究所	マウス	2P imaging / neuropixel	~100,000 / ~300,000 細胞	<a href="https://portal.brain-map.org/explore/circuits">https://portal.brain-map.org/explore/circuits</a>
Healthy Brain Network	成長期の脳における病態の発見と理解	子供精神センター	幼児~思春期のヒト (5-21 歳)	構造 MRI, fMRI, 拡散 MRI, 脳波	>3500 人	<a href="http://fcon_1000.projects.nitrc.org/indi/cmi_healthy_brain_network/">http://fcon_1000.projects.nitrc.org/indi/cmi_healthy_brain_network/</a>
ADNI	アルツハイマー病の早期診断に繋がるバイオマーカーの開発	Alzheimer's Disease Neuroimaging Initiative	軽度認知障害, アルツハイマー患者, 及び老年の健康成人	構造 MRI, fMRI, PET	~2000 人	<a href="https://adni.loni.usc.edu/">https://adni.loni.usc.edu/</a>

ベースも様々あり, 個々の神経細胞を捉えたマイクロやメゾスケールの脳活動データベースも作られている. 有名なものとしては, マイクロソフト社の共同創業者である故ポール・アレン氏の資産を基に設立されたアレン神経科学研究所によるデータベースがあり, 光学顕微鏡や多点電極で計測したマウス大脳皮質の神経活動に加え, 解剖学的情報, 遺伝情報などが網羅されている. こうした脳活動のデータベースについて fMRI データを中心に代表的なものの概要とリンクを表 1 にまとめた.

これらの大規模データベースは単独の研究室では難しい規模のデータ (1000 人分の脳活動など) を取得し, 国内外の研究者に広く無償公開しているのが特徴である. 大規模なデータは機械学習や統計的な分析と相性が良いため, これらのデータベースは筆者達を含めた神経科学者だけでなく, 機械学習や統計学の専門家にも広く利用され始めている. 本記事ではこのような公開データベースの活用事例として, HCP の fMRI データを用いて行われた自発的脳活動の最近の研究について紹介し, データ駆動型の神経科学が目指す方向性について議論する.

## 2. HCP が公開するデータの概要

まず, HCP が公開する大規模 fMRI データの概要について簡単に説明する (詳細は HCP のウェブサイト (表 1) や解説論文 Van Essen et al., 2013 を参照). HCP の S1200 データベースでは約 1200 人の若年健康者に対して, 統一化された実験プロトコルを適用し, fMRI により計測した脳活動データ, 構造 MRI と拡散強調 MRI による脳構造画像データ, 更には知能テストや飲酒歴の有無などの個体データを取得し, 匿名化した上で公開している. 脳活動については, 後述する安静時脳活動に加え, 言語課題や運動課題などを遂行中の脳活動が提供されており, 様々な角度からヒト脳の機能と構造を検討することが出来るようになっている. 上述の通り, こうしたデータが, 複数の研究グループが取得したデータの寄せ集めではなく, 一つのグループが統一化されたプロトコルで取得したデータとして公開されている点が HCP の特徴である. このため HCP のデータは高い均質性を持っており, 計測を行った施設に由来するデータのバラつきなどを気にすることなく, ユーザーとして安心して使える利点がある.

HCP のデータは登録すれば研究者なら世界中の誰でも自由に入手して用いることが可能で

ある。HCP では取得した MRI の画像データに対して統一化された前処理を加えて、専門外の研究者が扱いやすい形でデータを提供している。このような前処理には様々なステップが含まれる。代表的なものには、連続撮像中(～15 分程度)に起きる MRI スキャナーの中での頭の動きの補正、高速 fMRI 撮像に由来する画像の歪み(distortion)の補正、独立成分分析を用いた生理学的ノイズ(呼吸や心拍に由来)の除去、解剖学的に定義された標準座標空間への MRI 画像のレジストレーション(複数の被験者の MRI 画像を同じ座標系で比較するのに必要)といった項目がある。こうした前処理の項目はヒト fMRI 研究者のコミュニティで長年に渡って開発されてきた技術の積み重ねであり、必須だと考えられている前処理である。例えば頭の動きの補正を正しく行うことは後述の機能結合解析に必須となる (Power et al., 2012)。いずれの前処理についても HCP がコードを公開しており、これを利用することで誰でも同じ処理を再現することができる。しかしながら、こうした前処理を自分の手で全て正しく行うことは fMRI の非専門家にはハードルが高い。その点、HCP では全ての前処理を事前に行った上でデータを提供してくれており、非専門家が HCP のデータを利用する上でのハードルを大いに下げている。

HCP が公開する前処理後のデータは、利便性を考慮していくつかの形式で配られている。いずれのデータ形式についてもインターネット経由でダウンロードすることが可能である(もちろん無料)。生のデータに近い形式としては、MRI 画像としてデータを取得することが可能である。データの規模は、前処理無しの MRI 画像の場合には約 1200 人の合計で 22TB 程度の容量となる。近年では大容量のストレージが普及してきたとはいえ、これだけのデータ量を扱うには利用者側にもそれなりの準備が必要となる。このため解析に余り使われない画像の部分を削除して簡素化した形式も用意されている。脳活動解析の場合、MRI 画像の中で多くの部分を占める白質、脳室や脳外の画像情報は解析に使われない。HCP では、上述の前処理を施した後で、脳活動解析に不要な部位を除き、簡素化した形式での脳活動データも提供されている。この形式(CIFTI 形式)では、前処理をした MRI 画像の脳の中で、脳活動解析に使う部分(大脳皮質の灰白質、視床、小脳など)だけを取り出している。この簡素化により、もともと 1 つの 3 次元画像あたり約 100 万次元だったデータが約 10 万次元のベクトルデータに簡略化され、大幅にデータ容量が圧縮される(10 倍程度の圧縮。全部で 2TB 程度)。CIFTI は DICOM のような汎用的な画像データフォーマットではなく fMRI 研究に特有のデータ形式であるが、Python や Matlab などで CIFTI データを読み込むツールが多数公開されており (PALM, CIFTI I/O, NiBabel, Ciftify など)、簡単に利用可能である。

圧縮されたとは言え CIFTI でも 1 時点(time point)あたり約 10 万次元のサイズがあるため、HCP を利用した研究の多くでは脳の部位(例えば視覚野や運動野といった領域)ごとにデータを区分け(Parcellation)し、100～1000 次元程度に圧縮することが広く行われている。Parcellation を指定する解剖学的アトラスは標準的なものが公開されており誰でも利用することが出来る (Power et al., 2012; Glasser et al., 2016)。ただ、個々の画像データに対して脳部位ごとにデータを区分けする処理については、残念ながら HCP からは公開されていないので、自分で処理を行うかサードパーティーが公開したコードを利用する必要がある。

### 3. ソフトウェアサイトに後押しされた fMRI 研究の普及とその現在の位置づけ

ここで多少本論とはそれるが、fMRI の普及に重要な役割を果たしたソフトウェアの概略と、その現在の神経科学における位置づけについて簡単に述べておきたい。fMRI データは 4 次元の構造をもち、時間と空間それぞれで信号の処理と抽出がある。標準的な解析では、1) 画像の前処理、2) 一標本(被験者)での一般線形モデルによる活動信号の抽出、3) 集団サンプルで

の統計検定, に分かれる. 一連の標準的な解析では, ソフトウェアパッケージ(スイート)が提供されており, 代表的なスイートにはSPM(Statistical Parametric Mapping), FSL(FMRIB Software Library), AFNI(Analysis of Functional NeuroImages), などがある. これらのスイートが実装している標準的解析では, 背後にある計算の枠組みはおおよそ同じである. グラフィカルインターフェースにより初心者でも親しみやすく実装されている一方で, 同一の解析をラージサンプルに適用できるよう, バッチ処理も可能にしてある. この敷居の低さと拡張性により, 心理学, 神経科学, 情報学, 臨床医学の多くの研究者がソフトウェアスイートを使用し, fMRI による脳機能研究が関連分野に広がった.

上述のように fMRI データは高次元の画像データであり, 解析の手続きと背後にある統計の理論に, 緻密さと厳密さを必要とする. しかし, ソフトウェアスイートが提供する簡便さと, そこから得られる解析結果の情報の豊富さから, 不適切な統計処理が見過ごされることになった. たとえば, もっとも注意を要する解析手続きの一つは, 集団サンプルの統計検定(上記3)における多重比較の補正である. SPM と FSL では, ガウス確率場モデルに基づき補正を行っているが, ユーザは補正の実行に必要な解析パラメーターを恣意的に決めことができ, 実際にそうされてきた. しかし近年の研究では, こうした慣行の問題点が明らかになっている. 例えば, 脳活動画像の空間的自己相関が原因で, 解析パラメーターに依存して偽陽性(第一種過誤)が適切にコントロールされないことがあり, パラメーターの組み合わせによっては, 有意水準5%で検定を行ったときに, 偽陽性率が80%になることが示された(Eklund et al., 2016). 他にも, 一連の解析手続きに指定するパラメーターの自由度が大きいせいで, パラメーターの設定に依存して最終的な脳活動についての結論が大きく異なる結果になり得ることも示された(Botvinik-Nezer et al., 2020). こうした問題を解決するため, 現在進行形で様々な試みがなされており, 前処理に関しては, 各ソフトウェアスイートが実装する, 理論的に優れていて安定的な解析手続きを選択(いわゆるいいとこ取り)する「メタ」スイート (fMRIPrep; Esteban et al., 2019)が開発されている. しかし, 解析環境を整え, 実装するには技術的な敷居が高いという問題が残っている.

このように, SPM などの使いやすいソフトウェアスイートは fMRI の普及に貢献した一方で, fMRI データの解析における統計的信頼性や研究の再現性の面で問題の原因となった部分がある. 一般に, 信頼性の高い研究をするための方法は, 1)再現性の高い現象を対象にする, 2)高性能のMRIで時空間解像度を上げて撮像する, 2)サンプルサイズを大きくする, 3)同じ環境と手続でデータを収集する, などがある. これらの点について, 後述するように HCP の安静時脳活動は条件を全て満たしている優れたデータセットであり活発に利用されている (Marek et al., 2022).

以上, この節では SPM などのソフトウェアスイートを用いた従来の fMRI 研究の問題点について取り上げたが, “適切”に遂行されたものであれば, 心理・行動課題を遂行しているヒトの脳活動を fMRI 撮像し, スモールサンプル( $N \sim 30$ )を用いて脳領域を同定する古典的アプローチも, 依然として有意義であることは強調しておきたい. 実際に, このアプローチを用いて, 再現性があり, 統計的な信頼性が十分で, 効果量の大きい現象は今でも発表され続けている. 今後は, HCP の安静時 fMRI のような効果量が小さくても再現性のあるラージサンプルを用いたデータ駆動型解析と, 古典的なアプローチで効果量が大きい現象を扱う仮説駆動型解析を統合するような枠組みが必要かもしれない. この問題を解決するためには, 統計数理と神経科学の両方に対する理解と洞察が重要であり, データ駆動型の統計数理の専門家と, 仮説駆動型の神経科学・心理学の専門家のコラボレーションが重要になるとと思われる.

#### 4. 安静時脳活動の概要

ここからは本論に戻り、HCPの脳活動データの中でも特に安静時脳活動と呼ばれる自発的な脳活動に着目した研究を紹介する。以下で取り上げる一連の研究では、心理学者や神経科学者が直感に基づいて行ってきた安静時脳活動の研究に対し、実際のデータと統計的モデリングに基づいた立場から定量的かつ批判的に検証を行っている。筆者達自身の研究も含むため手前味噌ではあるが、脳についての直感的な理解が(研究者が広く受け入れていたにも関わらず)必ずしもデータに支持されていないことを端的に示した事例であり、その意味でデータ駆動型の神経科学が目指していくべき一つの方向性を示しているのではないかと考えている。

まず、安静時活動とはどのようなものか、何故それが重要な研究対象になるのか、という事を説明する。安静時脳活動(resting-state brain activity)とは、その名の通り、何もしていない安静時に計測される“自発的な”脳活動のことである。自発的という言葉が示すように感覚刺激がなく、運動もしていない安静時状態においても、脳は活発に活動している(図1a)。安静時脳活動を計測するのは簡単で、(ちょうど病院で検査用の画像を撮る時と同じように)スキャナーの中で被験者に15分ほど安静にして貰いながらfMRIで脳活動を計測するだけで可能である(安静時fMRI, resting-state fMRI, rs-fMRIなどと呼称される)。

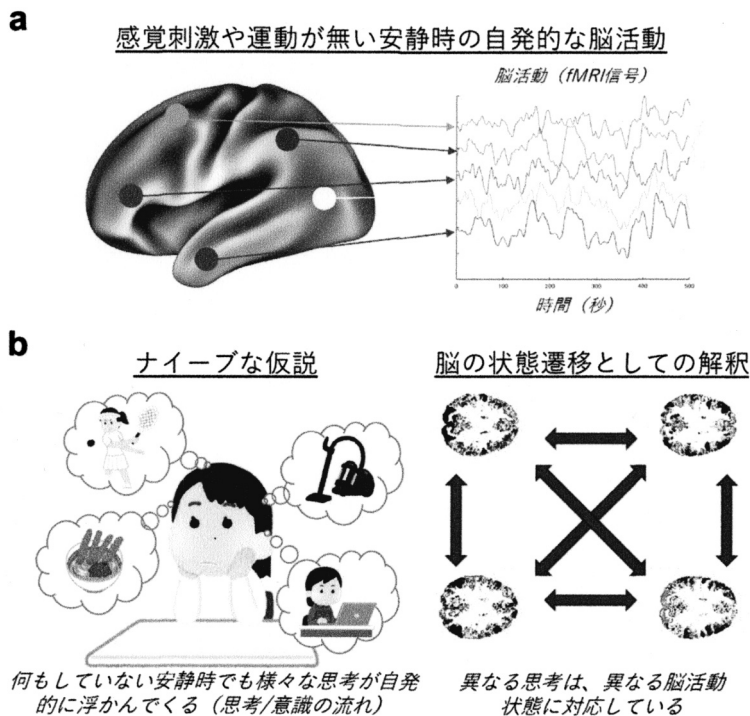


図1. 安静時の脳活動。(a)安静時脳活動の例。右のグラフは安静時の脳活動を5つの脳部位について表示したもの。感覚刺激や運動が無い安静時においても、脳の各部分は、このように活発に活動している。(b)安静時脳活動についてのナイーブな解釈。右図が示すように安静時においても様々な思考が自発的に移り変わっていると思われる。左図は、ナイーブな仮説を脳状態の間の遷移として解釈したもの。この仮説では、(a)のような自発活動は状態遷移によって作られていると考える。

このように計測が手軽な安静時脳活動だが、その解析からは生きた脳のネットワーク構造について様々な情報を得ることが出来る。用いるデータ解析は簡単で、異なる脳部位間での安静時活動の時間相関を計算し、脳部位間の“繋がり”の強さの指標とする「安静時機能結合 (Resting-State Functional Connectivity, 以下 FC)」が広く用いられている。FC は単なる時間相関だが、その強さは領野間を繋ぐ解剖学的結合の強さ (= 白質の太さ) と概ね対応しており (Honey et al., 2009; Matsui et al., 2011), 被験者内や被験者間での再現性も高いため、信頼性の高い指標として広く利用されている。FC の応用は基礎研究で盛んであったが、最近では臨床研究にも広がりつつある。米国では既に正式に認可された医療手法の中でも、個人の脳ネットワークを検査する手段として FC が利用されている (Cole et al., 2022)。

FC は単純な時間相関であるが、安静時脳活動の時空間ダイナミクスを活用することで、個々の脳について更に詳細な情報を得ることが出来ると期待されている。近年の技術発展で fMRI の撮像スピードが飛躍的に高まったこともあり (Feinberg et al., 2010), 安静時脳活動の時空間構造に対する注目は 10 年程度前から飛躍的に高まってきた (Hutchison et al., 2013)。しかしながら、多くの先行研究が行われてきたにも関わらず、まだ未解明な部分が多い。特に近年では、先行研究が(暗黙的に)前提としていた安静時脳活動についてのナイーブなモデルが、公開データを利用した検証から崩されつつある。以下では、こうした研究の流れについて、まず安静時脳活動の時空間構造についてのナイーブな仮説と、その仮説に基づいて行われてきた先行研究を取り上げ、続いてその検証にどのような事が行われたかを解説する。

## 5. 脳状態の遷移という安静時脳活動のナイーブな仮説

まず、安静時脳活動についての直感的な描像を説明する。上述のように安静時脳活動は、安静にしているヒトや動物で見られる(感覚刺激や運動を伴わない)自発的な脳活動である。そのような安静時における心(或いは意識)の状態とはどのようなものか想像してみると、多くの人にとっての安静時の状態と心が無(空)の状態とは異なるものではないか。むしろ、何もしていない時でも色々な考えが自然に頭の中に浮かんで消えていくというような状態が、多くの人にとって実感できる安静時状態だろう(図 1b)。このような、「安静時でも絶えず動き続ける心の状態」は、古くは心理学者の William James により「思考の流れ」と表現されてきた (James et al., 1890)。James によると安静時の心の状態は、鳥が木の枝から別の木の枝に気まぐれに飛び移るように移り変わるものである、と表現されており、意識に浮かぶ考えや心の状態が移り変わることが「鳥が別の枝に飛び移ること」として喩えられている。こういった安静時の心の状態についての想定は内省に基づくものだが、それだけに自分が日々体験する感覚と合致しており、多くの人にとって受け入れやすいものである。実際、このナイーブな描像は多くの神経科学者に現在でも受け継がれており Mind Wondering (Christoff et al., 2016) と表現されている。

fMRI で計測した安静時脳活動の解析に際しても Mind Wondering 説を脳のダイナミクスの描写として数理モデルが使用されている。具体的には、安静時の脳活動が複数の(準)安定状態を有しており、自発的な脳活動はそのような安定状態の間を脳が遷移することと対応するとされている(図 1b)。先ほどの鳥と木の枝の例で言えば、木の枝が安定状態に相当し、その間を飛び回る鳥が(自発的に活動する安静時の)脳を表すということになる。この安静時脳活動についてのナイーブな仮説(安定状態間の遷移を想定する数理モデル)は明快であり、かつ Mind Wondering 説との相性が良いこともあって、神経科学者コミュニティで広く受け入れられている。

## 6. 安静時脳活動の“安定状態”を抽出する解析手法

こうした安静時脳活動のナイーブなモデルを背景に、実際の安静時脳活動データから脳活動の安定状態を抽出するための解析手法が(現在進行形で)多数開発されている。最も多く用いられている手法としては、FCを拡張した移動窓相関法(Sliding-window Correlation Analysis)が挙げられる(Hutchison et al., 2013)。移動窓相関法はシンプルな発想の解析手法で「短い時間幅の中での機能結合を見てやれば、個々の安定状態の特徴がハッキリと捉えられるだろう」という考えに基づくものである(図2)。このため従来のFCが時系列全体を使って脳領域間の安静時機能結合を計算するのに対して、移動窓相関法では40~60秒程度の短い時間窓の中でFCを計算し、時間窓をずらしていくことで各時点でのFCを計算する。これを15分程度の安静時脳活動計測について最初から最後まで行くと、個々の移動窓について対応する機能結合行列が得られる。短時間のデータで計算するため個々の機能結合行列にはノイズが多く含まれることが予想されるので、k平均法などを用いたクラスタリングを行い、同じクラスターに含まれる沢山の機能結合行列を平均することで個々のクラスター(安定状態)を代表する機能結合行列を求める。移動窓相関法を実際の安静時脳活動データに当てはめてみると、個々のクラスター

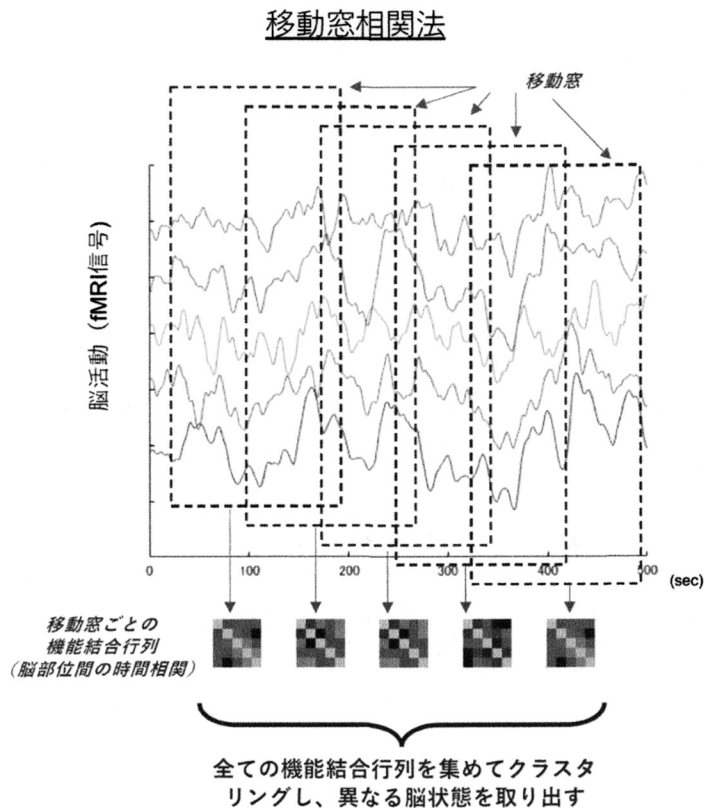


図2. 移動窓相関法。移動窓相関法では、自発的脳活動を短い時間幅(40~60秒)で区切り、その窓をずらしていく(移動窓)。各移動窓ごとに脳部位間の自発活動の相関をとり機能結合行列を得る。全データ(15分程度)で得られた全ての機能結合行列をk平均法などによりクラスタリングし脳状態を抽出する。

### 共活動パターン解析法 (CAP法)

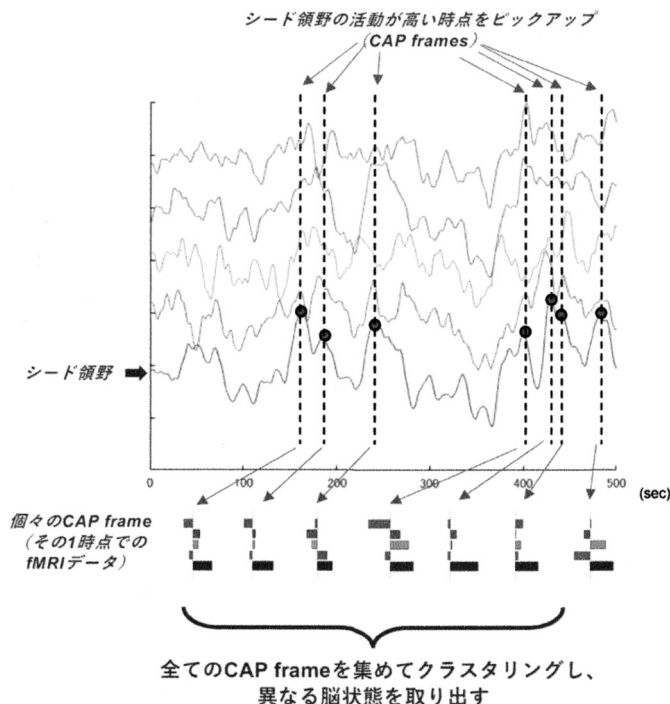


図3. 共活動パターン解析法(CAP法). CAP法では, 任意に選んだ脳領域(脳部位)の1つに着目してシード領域とし, シード領域が高い活動を示した時点をピックアップする(CAP frame). 個々のCAP frameは, その時点でのシード領域と他の脳領域の共活動パターンを表している. これらのCAP frameを全て集めてk平均法などによりクラスタリングし脳状態を抽出する.

ごとに大きく異なる機能結合行列が得られており, それぞれのクラスターが異なる脳の安定状態であるという想定と合致する.

安静時脳の安定状態を抽出する手法としては, 安静時脳活動を点過程として捉えた共活動パターン解析(Co-Activation Pattern Analysis; CAP法)も非常に良く用いられている(Liu and Duyn, 2013)(図3). 脳全体の機能結合パターンを扱う移動窓相関法に対して, CAP法では解析者が選んだ一つの脳部位(Seed)の活動に着目する. ここでの想定は, Seedとそれ以外の脳部位との活動の連動には, 脳状態によって様々なパターンがあるというものである. このような共活動パターン(CAP)を取り出すため, CAP法ではまず, 与えられた脳活動データの中でSeedの活動が特定の閾値を超えた時点(CAP frame)をピックアップする(閾値は解析者が設定するパラメーターで, 平均値と標準偏差を基にした閾値やパーセンタイルによる閾値が良く用いられる). 次に, 集めたCAP frame全体をk平均法などによりクラスタリングする. 移動窓相関法と同様に, この場合も異なるクラスターは安静時の異なる脳状態を表しているものと解釈される. このような解析を実データに対して行った結果を見ると, 異なるクラスターではSeedと一緒に活動する脳部位が大きく異なっており, CAP法及びその解釈の妥当性を示すものと考えられている(Liu and Duyn, 2013).



これら2つの方法以外にも、隠れマルコフモデル (Hidden Markov Model) を利用した方法 (Vidaurre et al., 2017)、安静時脳活動に最大エントロピー法を適用するエネルギーランドスケープ解析 (Energy Landscape Analysis) (Ezaki et al., 2017) など様々な解析手法が提唱されている。いずれの手法についても、安静時の脳が複数の安定状態を持っているという仮定に基づいており、安静時脳活動データから互いに見かけの異なる脳活動状態を取り出し、それを安定状態と解釈する点で共通している。移動窓相関法やCAP法などの共通の問題点としては、このように取り出された脳活動状態が(複数の)安定状態であるとする解釈が妥当なものであるか、根拠が弱い点にある。実はいずれの手法においても、取り出された脳活動が安定状態であると判断している根拠は、複数の脳活動状態の見かけが互いに異なる(或いは空間的な相関が低い)、という以上のものではない。この弱い根拠にも関わらず多数の神経科学者にこれらの解析手法が受け入れられてきた背景には、Mind Wondering 説のような安静時脳活動についてのナイーブな描像とこれらの解析手法が直感的に適合していたからだと言えるだろう。このような意味で移動窓相関法やCAP法は「安静時脳活動についての直感な理解/仮説に基づく解析手法」だと言える。

## 7. ナイーブな仮説に立脚した解析手法の検証

安静時脳が複数の安定状態の間を遷移しているという Mind Wondering 的な描像は直感的に受け入れやすいものだった。また、移動窓相関法やCAP法などの解析手法は、このナイーブな仮説と整合的であり、実際の安静時脳活動データから複数の異なる機能結合行列や脳活動パターンと考えられるものを抽出することを可能にした。これらの解析手法は基礎研究だけでなく、臨床研究における疾患脳の診断にも利用されつつある(こうした研究の具体例については Matsui and Yamashita, 2022 を参照)。しかしながら、移動窓相関法やCAP法で抽出された機能結合行列や脳活動パターンは、本当に「安静時脳の持つ複数の安定状態」に相当するものと解釈できるのだろうか? 見かけの異なる空間パターンが抽出される、という以上の根拠はあるのか? 実は、この肝心の点について、筆者らの研究も含む最近のデータの統計性に基づいた検証により、疑問が提示されている。

安静時脳活動についてのナイーブな仮説(脳は複数の安定状態を自発的に遷移している)を統計的な言葉で言い表すと、安静時脳活動は非定常的な過程であると考えることができる。さらに言えば、移動窓相関法やCAP法は安静時脳活動の非定常的な特徴を複数の安定状態という形で抽出しているということになるだろう。しかし、果たして本当にそうになっているのだろうか? この点について最近の研究では、安静時脳活動の実際のデータ(実データ)と、それを基にして作成したサロゲートを利用することで安静時脳活動データの持つ統計的な性質に基づいた検証が行われた(背景を含めた詳細については Liégeois et al., 2017 に良くまとめられている)(図4a)。サロゲートデータは定常的であることが保証されているので、移動窓相関法やCAP法を適用した時に、実データから得られる解析結果とサロゲートデータから得られる解析結果(例えば安定状態の様子や、その間の遷移確率)が同じであれば、実データが非定常的であるという仮定、もしくは、移動窓相関法やCAP法が非定常性の特徴を抽出できているという前提を疑う必要が生じる。この場合、いずれにせよ、移動窓相関法やCAP法の結果を安静時脳活動の安定状態として解釈することには問題があることになる。一方、実データとサロゲートデータで解析結果に異なる部分があれば、その違いは実データの非定常性に関係している可能性が高いと予想される。細かい注意点として、サロゲートデータがガウス分布を仮定している場合、実データの非ガウス性が解析結果に影響する可能性がある。しかしながら、幸運なことにfMRIで計測した安静時脳活動はガウス分布で近似できるという扱いやすい性質を持ってお

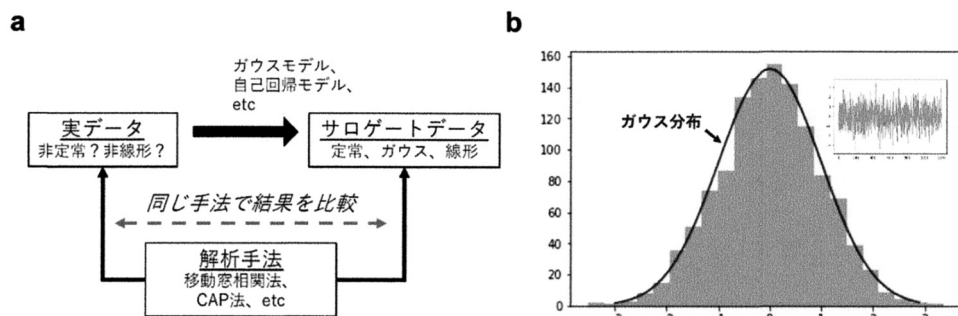


図 4. サロゲートデータによる解析手法の検討。(a) 安静時脳活動の fMRI (実データ) をもとに、その統計量を取り込んだサロゲートデータを生成する。どの統計量を取り込むか (共分散, 自己相関) は, 使用するモデルにより選択する。サロゲートデータは定常的, ガウスの, 線形であることを注意。検討したい解析手法を, 実データとサロゲートデータの両方に適用し, 得られた結果を比較する。得られた結果が実データとサロゲートデータで同じであれば, 解析手法は実データの非定常性や非線形性を捉えることが出来ていないと考えられる。(b) ある脳部位の fMRI 信号 (安静時脳活動) の分布。ガウス分布で良く近似できている。インセットは分布の元になった時系列 (15 分)。このような性質のため fMRI 信号は自己回帰モデルや位相ランダム化による解析を当てはめやすい利点がある。

り (図 4b), この点については心配する必要がない。

サロゲートデータを利用した検討を行ってみると, 実際の安静時脳活動データに移動窓相関法や CAP 法を適用した結果の多くが, サロゲートデータでも再現されることが分かった。Laumann らの研究 (Laumann et al., 2017) では, 実データの共分散構造を持つ多次元ガウス分布から生成したサロゲートデータ (static null) に移動窓相関法を適用し, クラスタ構造を評価する指標 (Cluster Validity Index) を計算している。その結果, 実データで計算した Cluster Validity Index の値はサロゲートデータで得られる Cluster Validity Index の分布に含まれていることが分かった。サロゲートデータは定常時系列であり単一のクラスタしか持たないはずであるから, この結果は実データが複数のクラスタ (安定状態) を持っているとする解釈に疑問を投げかけるものである。

クラスタ間 (安定状態間) の遷移についても, 実データの自己相関を取り込んだ定常的なモデルで再現できることが分かっている。Liégeois らは static null に加えて, 1 次の自己回帰モデルを実データに当てはめたサロゲートデータ (null data based on autoregressive model; AR null) と, 実データに位相ランダム化 (Prichard and Theiler, 1994) を適用して生成したサロゲートデータ (null data based on phase randomization; PR null) を検討した (PR null は高次の自己回帰モデルを使用した AR null と数学的に同等である (詳細は Liégeois et al., 2017 を参照))。Liégeois らは更に隠れマルコフモデルとの比較も行い, AR null や PR null の方が実データに見られる機能結合行列の時間的変動に対して当てはまりが良いことを明らかにした (Kormogorov-Smirnov 統計量により評価; 詳細は Liégeois et al., 2017 を参照)。この結果は, 安静時脳活動のダイナミクスをモデル化する上でも, 複数の安定状態を仮定することには実はメリットが無いという可能性を示している。以上のサロゲートデータによる結果は, 筆者らの最近の解析でも確認されている (Noro et al., 2023)。

筆者らの研究では, CAP 法について Liégeois らと同様のアプローチを適用した (Matsui et al., 2022)。まず, static null で得られる CAP の空間パターンが実データから得られる空間パ

ターンと極めて高い相関を示すことが分かった。また CAP 間の遷移確率についても AR null と PR null により再現された。これらのことから、CAP 法の結果も(移動窓相関法の場合と同様に)定常的なサロゲートデータで再現できるものであり、CAP 法の結果を安静時脳活動の非定常性に結びつけて解釈することは正しくない可能性が指摘された。以上のように、最近の研究では、解析手法の直感的な分かりやすさに反し、移動窓相関法や CAP 法から得られる結果の解釈には統計的な妥当性に問題があることが明らかになっている。

## 8. データそのものに駆動された脳活動解析の重要性

移動窓相関法や CAP 法も、安静時脳活動についての直感(Mind Wondering)から出たナイーブな仮説(図 1b)に基づく分析手法だと言える。こうした個々の研究者の直感に立脚した脳活動の分析は、神経科学で広く用いられてきており、脳の理解に大きく貢献したものも多い(視覚野神経細胞の方位選択性の発見はその一例だろう)。しかしながら安静時脳活動のケースでは、サロゲートデータを利用した検討から、直感に基づく分析が正しくないことが明らかになった。移動窓相関法や CAP 法から得られる安静時脳活動の性質は、(Mind Wondering 説とは必ずしも合致しない)シンプルな自己相関モデルで十分に説明できることが分かった。実用性という点では、こうしたシンプルなモデルで安静時脳活動を表現できることには利点もある。例えば、安静時脳活動を精神疾患の診断に利用しようとする場合、安静時脳活動を複雑なモデル(例えば複数の状態を持つモデル)で表現しようとする、個人の安静時脳活動を表現するのに必要なパラメーターの数は膨大になり、それをもとに診断を行うことには実際上の困難が伴う。一方、ガウシアンモデルや自己回帰モデルで個人の安静時脳活動を十分に表現できるのであれば、必要なパラメーターの数は大幅に削減される。これにより診断に必要な解析も容易になり、診断の頑健性も向上するだろう。既に、安静時脳活動に自己回帰モデルを適用した際のパラメーターから性別などの個人の特徴を読み取る試みは行われており(Liégeois et al., 2019)、今後は同様な手法を疾患の診断に繋げていくことが期待されている。

こうした実用上の利点がある一方、シンプルで定常的な安静時脳活動のモデルと、我々が日々体験する安静時の思考の流れ(Mind Wondering)との間に感覚的なズレがあることも事実である。冒頭に紹介した William James の説明にあったような意識の移り変わりは、神経科学者のみでなく誰しも経験することである。実際に、そういった経験に根差した思い込みが、移動窓相関法や CAP 法が安静時脳活動の研究に現在も多用されている背景にあると考えられる。逆に、安静時脳活動の定常性や自己回帰モデルの利点が報告されたにも関わらず、多くの神経科学者が今もって移動窓相関法や CAP 法を選択し続ける背景には、定常的なモデルと私たちの日常的な実感とのギャップに原因があるように思われる。理想的には、こうした感覚的なギャップを埋めつつ、データに立脚した形で安静時脳活動についての理解をアップデートすることが望ましい。また、安静時脳活動に限らず、脳という複雑な対象にアプローチする上では、人間の直感がむしろミスリーディングになる危険性があることを示している。こうした危険を回避するためには、従来の「研究者の直感」に頼ったアプローチだけでなく、統計学を積極的に活用したデータ駆動型のアプローチが今後重要になってくると予想される。

## 9. 統計数理分野と神経科学分野の連携に期待すること

データ駆動型のアプローチを神経科学で推進していく上では、統計数理分野と神経科学分野の研究者の相互の連携が当然重要になるだろう。特に、新しい統計的手法を脳活動データベースに応用することで有用な知見が多く生まれることが期待される。実際、ごく最近開発された位相的データ解析を応用した新しい安静時脳活動の研究では、サロゲートデータには見られな

いハブ構造(複数の安定状態に相当すると思われる構造)が実データに存在することが報告されている(Saggar et al., 2022). こうした構造が実データのどのような性質(非定常性, 非線形性, 小さな非ガウス性)に由来するのかは明らかになっておらず, 統計数理の専門家と連携した分析が待たれる. こうした先端的な解析手法を神経科学者が独力で利用することは困難だろう. 一方で, 分析の結果を神経科学のドメインに落とし込んで理解するためには, 統計数理の専門家だけでは恐らく十分ではないので, 双方が連携した研究が必要になると予想される.

本記事ではfMRIのデータを用いた研究を紹介したが, fMRI以外の神経科学分野においても, 統計数理分野と神経科学の連携は重要性を増していくだろう. 例えば, 筆者達が専門としている遺伝子改変マウスを用いた蛍光顕微鏡による神経活動計測もその一つである. カルシウムなどの蛍光信号による神経活動計測では, fMRIよりも遥かに高い感度で安静時脳活動を計測することが可能であり, 筆者らは, この計測法を使って安静時脳活動の時空間構造の解析を行った(Matsui et al., 2018b). しかしながら, 蛍光顕微鏡で計測した神経活動データは非ガウス性が強く, (ガウス性の高い)fMRI信号と同じような単純な方法でサロゲートデータを作ることが難しい問題があった(Matsui et al., 2018a). こういった困難は筆者達以外にも多くの神経科学者が経験しているはずであり, 統計数理を専門とする研究者と神経科学者の連携によって, 問題を乗り越えていくことが必要だろう.

以上, 安静時脳活動について公開データベースを利用した最近の研究を紹介した. 統計数理を専門とする読者は, 神経科学がこのような初歩的な議論を未だにやっていることに驚かれたかもしれない. 神経科学がこのような状況にある理由の一つは, 脳活動のデータを取得する実験が困難だということにあるだろう. fMRIでも, それ以外の計測手法でも, 脳活動の記録実験を行うには専門的な生理学の実験技術, 適切なデータの前処理の知識, 更にはそもそもの実験を行うための厳格な倫理審査など様々なコストがかかる. そのせいか, 従来の神経科学ではデータを取る実験家が貴重なデータを独占し, 出来る限りの分析を自分で行うということが一般的であった. したがって10年程度前は, 実験家とデータ分析の専門家との間でデータがシェアされることは現在よりも遥かに稀であった. しかしながら, 近年では脳活動の大規模公開データが次々と発表されており, こうした状況は急速に変化している. 筆者達自身は実験を専門としているのでデータの公開を強要する流れには多少の抵抗も感じるが, 長い目で見ればこうした流れは神経科学の発展にとって良いものだと捉えている. 本記事で取り上げた安静時脳活動の(非)定常性についての議論も, HCPという誰もがアクセスできる共有データがあり, 共通の土台となることで, はじめて建設的な議論が出来るようになったと言えるだろう.

神経科学では, データの共有が急速に進むことにより, 今までは気がつかなかった新しい問題点も明らかになってきている. 特にfMRIを使った研究では, 安静時脳活動から個人の情報を解読する際に高い信頼性を担保するにはどの程度のデータが必要とされるのか(Marek et al., 2022)といった問題や, これまでは問題にされてこなかった「研究者間でのfMRIデータの解析手法のバラつき」が最終的な結果の大きなバラつきを生んでいる(Botvinnik-Nezer et al., 2020)といった問題が新しく認識されている. このように, 大規模なデータからいかにして適切に有益な情報を取り出すことが出来るのかという問題に対処するにも, データの取り扱いに関する専門知識を持つ統計数理の専門家と, ドメイン知識を持つ神経科学者との連携が不可欠だ.

## 謝 辞

本記事の執筆は学術変革領域研究B(JP21H0516513), JST さきがけの支援を受けた.

## 参 考 文 献

- Botvinik-Nezer, R., et al. (2020). Variability in the analysis of a single neuroimaging dataset by many teams, *Nature*, **582**, 84–88.
- Christoff, K., Irving, Z.C., Fox, K.C., Spreng, R.N. and Andrews-Hanna, J.R. (2016). Mind-wandering as spontaneous thought: A dynamic framework, *Nature Reviews Neuroscience*, **17**, 718–731.
- Cole, E.J., et al. (2022). Stanford Neuromodulation Therapy (SNT): A double-blind randomized controlled trial, *The American Journal of Psychiatry*, **179**, 132–141.
- Eklund, A., et al. (2016). Cluster failure: Why fMRI inferences for spatial extent have inflated false-positive rates, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **113**(28), 7900–7905.
- Esteban, O., et al. (2019). fMRIPrep: A robust preprocessing pipeline for functional MRI, *Nature Methods*, **16**(1), 111–116.
- Ezaki, T., Watanabe, T., Ohzeki, M. and Masuda, N. (2017). Energy landscape analysis of neuroimaging data, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **375**(2096), p. 20160287.
- Feinberg, D.A., et al. (2010). Multiplexed echo planar imaging for sub-second whole brain FMRI and fast diffusion imaging, *PLOS One*, **5**, e15710.
- Glasser, M.F., et al. (2016). A multi-modal parcellation of human cerebral cortex, *Nature*, **536**(7615), 171–178.
- Honey, C.J., et al. (2009). Predicting human resting-state functional connectivity from structural connectivity, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **106**, 2035–2040.
- Hutchison, R.M., et al. (2013). Dynamic functional connectivity: Promise, issues and interpretations, *Neuroimage*, **80**, 360–378.
- James, W., Burkhardt, F., Bowers, F. and Skrupskelis, I.K. (1890). *The Principles of Psychology*, Macmillan, London.
- Laumann, T.O., et al. (2017). On the stability of BOLD fMRI correlations, *Cerebral Cortex*, **27**(10), 4719–4732.
- Liégeois, R., Laumann, T.O., Snyder, A.Z., Zhou, J. and Yeo, B.T.T. (2017). Interpreting temporal fluctuations in resting-state functional connectivity MRI, *Neuroimage*, **163**, 437–455.
- Liégeois, R., et al. (2019). Resting brain dynamics at different timescales capture distinct aspects of human behavior, *Nature Communications*, **10**, p. 2317.
- Liu, X. and Duyn, J.H. (2013). Time-varying functional network information extracted from brief instances of spontaneous brain activity, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **110**, 4392–4397.
- Marek, S., et al. (2022). Reproducible brain-wide association studies require thousands of individuals, *Nature*, **603**, 654–660.
- Matsui, T. and Yamashita, K.I. (2022). Static and dynamic functional connectivity alterations in alzheimer’s disease and neuropsychiatric diseases, *Brain Connectivity*, <http://doi.org/10.1089/brain.2022.0044>.
- Matsui, T., et al. (2011). Direct comparison of spontaneous functional connectivity and effective connectivity measured by intracortical microstimulation: An fMRI study in macaque monkeys, *Cerebral Cortex*, **21**, 2348–2356.
- Matsui, T., Murakami, T. and Ohki, K. (2018a). Neuronal origin of the temporal dynamics of spontaneous BOLD activity correlation, *Cerebral Cortex*, **29**(4), 1496–1508.
- Matsui, T., Murakami, T. and Ohki, K. (2018b). Mouse optical imaging for understanding resting-state functional connectivity in human fMRI, *Communicative & Integrative Biology*, **11**, e1528821.

- Matsui, T., Pham, T.Q., Jimura, K. and Chikazoe, J. (2022). On co-activation pattern analysis and non-stationarity of resting brain activity, *Neuroimage*, **249**, p. 118904.
- Noro, Y., Li, R., Matsui, T. and Jimura, K. (2023). A method for reconstruction of interpretable brain networks from transient synchronization in resting-state BOLD fluctuations, *Frontiers in Neuroinformatics*, 10.3389/fninf.2022.960607.
- Power, J.D., Barnes, K.A., Snyder, A.Z., Schlaggar, B.L. and Petersen, S.E., et al. (2012). Spurious but systematic correlations in functional connectivity MRI networks arise from subject motion, *Neuroimage*, **59**, 2142–2154.
- Prichard, D. and Theiler, J. (1994). Generating surrogate data for time series with several simultaneously measured variables, *Physical Review Letters*, **73**, 951–954.
- Saggar, M., Shine, J.M., Liégeois, R., Dosenbach, N.U.F. and Fair, D. (2022). Precision dynamical mapping using topological data analysis reveals a hub-like transition state at rest, *Nature Communications*, **13**, p. 4791.
- Van Essen, D.C., et al. (2013). The WU-Minn Human Connectome Project: An overview, *Neuroimage*, **80**, 62–79.
- Vidaurre, D., Smith, S.M. and Woolrich, M.W. (2017). Brain network dynamics are hierarchically organized in time, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **114**, 12827–12832.

## Recent Studies of Human Resting-state Brain Activity Using a Public Open Database

Teppei Matsui<sup>1</sup>, Koji Jimura<sup>2</sup> and Ruixiang Li<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University

<sup>2</sup>Department of Informatics, Gunma University

<sup>3</sup>Graduate School of Medicine, The University of Tokyo

The human brain exhibits resting brain activity, defined as spontaneous activity in the absence of volitional movements or external sensory inputs. In recent years, the neuroscience community has been constructing large-scale brain activity databases, such as a database of the resting brain activity of more than 1,000 participants. These public databases are beginning to be used not only by neuroscientists but also by experts in mathematical statistics. Such collaborations are revealing new aspects of resting brain activity. In this paper, we introduce recent studies focusing on the spatiotemporal dynamics of resting brain activity. Traditionally, in psychology and neuroscience, resting brain activity has been regarded as a transition between multiple states. However, detailed statistical investigations using public databases have revealed that this assumption may be incorrect. Public databases will promote this type of collaboration between neuroscientists and statisticians and are therefore likely to play an important role across the field of neuroscience.

## 「統計数理」投稿規程

1. 「統計数理」は、統計科学の深化と発展、そして統計科学を通じた社会への貢献を目指すものである。投稿原稿は、統計科学に関連した内容を持つもので、和文の原稿に限る。
2. 投稿原稿は次の6種とする。
  - a. 原著論文 (Paper)  
統計科学の発展に貢献すると考えられる研究結果。
  - b. 総合報告 (Review Article)  
特定の主題に関する一連の研究およびその周辺領域の発展を著者の見解に従って総括的、かつ体系的に報告したもの。
  - c. 研究ノート (Letter)  
研究速報、新しい発想、提言、問題提起、事例報告など研究上、記録にとどめておく価値があると認められるものや、既発表の論文等に対するコメントで、研究上、記録にとどめておく価値があると認められるもの。
  - d. 研究詳解 (Research Review)  
特定の研究領域における理論的あるいは応用的成果を、最近の結果や知見を加えてわかりやすく説明したもの。
  - e. 統計ソフトウェア (Statistical Software)  
有用な計算法や解析法に関する短いプログラムおよびサブルーチンのリスト、利用手引き、実行例など。
  - f. 研究資料 (Research Archives)  
歴史的なデータ、入手困難なデータや統計的手法の比較検討のために有用なデータ、あるいは、歴史的文献の翻訳や解説など。  
いずれも原則として、未発表のものに限る。
3. 投稿された原稿は、編集委員会が選定・依頼した査読者の審査を経て、掲載の可否を決定する。
4. 投稿原稿は電子投稿査読システム <https://www.editorialmanager.com/toukei/> より投稿するものとする。原稿は pdf ファイルとし、必要なフォントはすべて埋め込み、原稿全体を一つのファイルにまとめることとする。論文が採択になった場合、著者は最終稿のソースファイルとハードコピーを提出するものとする。
5. 著作権
  - (1) 掲載される論文等の著作権はその採択をもって統計数理研究所に帰属するものとする。統計数理研究所は、紙媒体の「統計数理」のほか電子媒体などを通じて論文等を公表することができる。特別な事情がある場合は、著者と本編集委員会との間で協議の上措置する。
  - (2) 投稿原稿の中で引用する文章や図表の著作権に関する問題は、著者の責任において処理する。
  - (3) 著者が自分の論文等を複製、転載、翻訳、翻案等の形で利用するのは自由である。この場合、著者は掲載先に出典を明記する。
6. 原稿は次の執筆要項に従って作成する。

## 「統計数理」執筆要項

1. 原稿は A4 用紙に 1 行 36 字から 40 字で 1 行おき、1 頁あたり 22 行程度とする。原稿の長さは原則として表・図を含めて 30 頁相当以内とし、各ページにページ番号を付す。図表は別紙にまとめ、本文中には挿入箇所のみを指定する。L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X で原稿を作成する場合は、「統計数理」スタイルファイルの使用を推奨する。  
<https://www.ism.ac.jp/editsec/toukei/>
2. 原稿は以下の順に書くものとする。
 

[第 1 頁] 標題, 著者名, 所属名, 和文要旨 (500 字程度, 文献の引用および数式は原則として避ける), 和文キーワード (6 語以内)。

[第 2 頁] 英語による標題, 著者名, 所属名, Abstract (450 ワード程度), Key words (6 words and phrases 以内)。Abstract は、問題の所在と得られた結果等がそれだけで理解できるようなものとする。



[第3頁以降]

- ① 本文：章、節の番号は、第1章にあたるものは、“1.”、第1章第1節にあたるものは、“1.1”というようにつける。また、式の番号は、章ごとに(2.1), (2.2)のようにし、式の左側に配置する。
  - ② 数式：数式は簡明さを心がけ、添字にさらに添字をつけるのはなるべく避ける。
  - ③ 参考文献：書き方は本要項第4項を参照。
  - ④ 表：一枚の用紙に一つの表を書く。表の番号は論文中に現れる順に従って、表1, 表2,... または、Table 1, Table 2,... のようにする。
  - ⑤ 図：一枚の用紙に一つの図を描く。図はそのまま写真製版できる鮮明なものを用意する。大きさは印刷出来上がりの1~2倍とし、トレースが必要な場合は原則として著者が行うものとする。図の番号は論文中に現れる順に従って、図1, 図2,... または、Fig. 1, Fig. 2,... のようにする。図は原則としてモノクロ印刷とするが、カラー印刷を必要とする場合は編集委員会に相談すること。
  - ⑥ 注：本文中の注釈は極力避ける。やむを得ず注釈をつける場合は脚注とせず、論文末尾に後注とする。後注は、順番に“1, 2,...”の番号を付け、本文中では上付きで示す。
3. 本文中での参考文献の引用は、著者名(出版年)とする。たとえば、Efron (1982), 清水・湯浅 (1984), Cox and Snell (1981), 坂元 他 (2004), Nakano et al. (2000).
4. 参考文献の書き方
- ① 雑誌の場合：
 

著者名(出版年). 標題, 雑誌名, 巻, ページ [始-終]. (雑誌名は省略しないものとする.)

【例】 Chernoff, H. (1973). The use of faces to represent points in  $k$ -dimensional space graphically, *Journal of the American Statistical Association*, **68**, 361-368.
  - ② 叢書の中の一巻の場合：
 

著者名(出版年). 書名 (編集者名), 叢書名, 発行所名, 発行地名.

【例】 Sakamoto, Y., Ishiguro, M. and Kitagawa, G. (1983). *Akaike Information Criterion Statistics, Mathematics and Its Applications*, Reidel, Dordrecht.
  - ③ 単行本等の場合：
 

著者名(出版年). 書名, 発行所名, 発行地名.

【例】 Cressie, Noel (1993). *Statistics for Spatial Data*, Wiley, New York.
  - ④ 編集書の中の一部の場合：
 

著者名(出版年). 標題, 編集書名 (編集者名), 巻, ページ, 発行所名, 発行地名.

【例】 Akaike, H. (1980). Likelihood and the Bayes procedure, *Bayesian Statistics* (eds. J. M. Bernardo, M. H. DeGroot, D. V. Lindley and A. F. M. Smith), 143-166, University Press, Valencia, Spain.
- なお、同じ著者によるものが同一年に複数個現れる場合には、(1980a), (1980b) などとして区別する。文献は、日本人も含め、著者名のアルファベット順に並べる。
5. 著者校正は原則として一回とする。その際、印刷上の誤り以外の字句や図版の訂正、挿入、削除等は原則として認めない。