数理解析研究所講究録
第675巻 1988年 47-57

KM_2O-ランジュヴァン方程式の理論

北大 理　岡部靖憲
(OKABE YASUNORI)

§1 目的

気象データ,工学データ、医学データ,経済データ等、時間の推移と共に変化する不規則な現象に関する有限個の観測データや実験データを統計的・数学的に分析することによって、その現象の構造を分析し、それに基づいてその将来を予測し、制御することは科学の重要な研究課題のひとつである。

私の研究の目的は、2つの不規則な現象に対して、どちらが原因で、どちらが結果であるかという、いわゆる「因果関係」を捜り出す方法を見つけ出すことである。

そのために、調べたい現象が局所定常性を持つかどうかのテストを求める。その際、確率モデルを天下り的に用いるのではなく、局所定常性のみをもつ確率時系列の数学的構造を調べあげる。ここの部分がKM_2O-ランジュヴァン方程式論の理論的側面である。実際のデータ解析に応用する際には、理論の限界を明確にする形で、データ解析に伴な

う近似はなるべく精密にし、そのためにも近似の段階は少くすることは大事と思われる。

応用数学において、大事なことは、応用に耐えうる数学的理論が構築されていると同時に、その研究の過程から数学的に新しい側面が見い出されるということと思われる。このことは、統計物理学における「揺動散逸定理」の哲学的理解である。私の研究では、非線型予測問題の復活であり、因果関係が線型、2次、3次 … と非線型性を高めることによってより正確に検証されることは、非線型予測問題が良いアルゴリズムをもって解かれることを意味する。これを可能にするのが、KM_2O-ランジュヴァン方程式の理論である。

§2. 局所定常性

確率空間 $(\Omega, \mathcal{B}, P)$ 上に $\mathbb{R}^d$ 値確率過程 $X=(X(n); |n|\le N)$ が与えられ、その平均ベクトル函数は恒等的に0、共分散函数は R とする;

$$E(X(n)) = 0 \tag{2.1}$$

$$R(n-m) = E(X(n)\,{}^tX(m)) . \tag{2.2}$$

各 $n \in \mathbb{N}$ に対して、block Toeplitz matrix $S_n \in M(nd;\mathbb{R})$ を

$$S_n = \begin{pmatrix} R(0) & R(1) & \cdots & R(n-1) \\ {}^tR(1) & R(0) & R(1) \cdots & R(n-2) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ & & & R(1) \\ {}^tR(n-1) & {}^tR(n-2) \cdots & {}^tR(1) & R(0) \end{pmatrix}$$

で定める。次の (C.1), (C.2) のいずれかが起こる

(C.1) $1 \le {}^{\forall} n \le N \qquad S_n \in GL(2d; \mathbb{R})$

(C.2) $1 \le {}^{\exists} n_0 \le N$ s.t. $\begin{cases} 1 \le {}^{\forall} n \le n_0 & S_n \in GL(nd; \mathbb{R}) \\ n_0+1 \le {}^{\forall} n \le N & S_n \in GL(nd; \mathbb{R}) \end{cases}$

この報告では、(C.1) が成り立つ場合を考える。そのとき、$\mathbb{X}$ の時間発展を記述する確率差分方程式が次の様に記述される：

<u>KM$_2$O-ランジュヴァン方程式</u>

${}^{\exists 1}$ KM$_2$O-ランジュヴァンデータ $(\gamma_{\pm}(n,k), \delta_{\pm}(n), V_{\pm}(n); 0 \le k < n \le N)$

${}^{\exists 1}$ KM$_2$O-ランジュヴァン力 $\nu_{\pm} = (\nu_{\pm}(n); 0 \le n \le N)$ s.t.

$$X(n) = -\sum_{k=1}^{n-1} \gamma_+(n,k) X(k) - \delta_+(n) X(0) + \nu_+(n) \tag{2.3}$$

$$X(-n) = -\sum_{k=1}^{n-1} \gamma_-(n,k) X(-k) - \delta_-(n) X(0) + \nu_-(n). \tag{2.4}$$

<u>基本的性質</u>

$$E(\nu_{\pm}(n)\, {}^t\nu_{\pm}(m)) = \delta_{nm} V_{\pm}(n) \tag{2.5}$$

$$\begin{cases} [X_j(m); 1 \le j \le d, 0 \le m \le n] = [\nu_{+j}(m); 1 \le j \le d, 0 \le m \le n] \\ [X_j(-m); 1 \le j \le d, 0 \le m \le n] = [\nu_{-j}(m); 1 \le j \le d, 0 \le m \le n] \end{cases} \tag{2.6}$$

(2.7) $1 \le {}^{\forall} k < n \le N$

$$\begin{cases} \text{(i)} & \gamma_{\pm}(n,k) = \gamma_{\pm}(n-1,k-1) + \delta_{\pm}(n) \gamma_{\mp}(n-1, n-k-1) \\ \text{(ii)} & V_{\pm}(n) = (I - \delta_{\pm}(n) \delta_{\mp}(n)) V_{\pm}(n-1) \\ \text{(iii)} & \delta_-(n) V_+(n-1) = V_-(n-1)\, {}^t\delta_+(n) \\ \text{(iv)} & V_{\pm}(n) \in GL(d; \mathbb{R}) \end{cases}$$

但し、 $\gamma_{\pm}(n, 0) = \delta_{\pm}(n)$ とする

$$(2.8) \quad \begin{cases} \delta_+(n) = -\left(R(n) + \sum_{0}^{n-2} \gamma_+(n-1, k)\, R(k+1)\right) V_-(n-1)^{-1} \\ \delta_-(n) = -\left({}^tR(n) + \sum_{0}^{n-2} \gamma_-(n-1, k)\, R(k+1)\right) V_+(n-1)^{-1} \end{cases}$$

注意 2.1　(2.7) (ii) より、

$$(2.9) \qquad V_{\pm}(n) = \left(I - \delta_{\pm}(n)\,\delta_{\mp}(n)\right)\left(I - \delta_{\pm}(n-1)\,\delta_{\mp}(n-1)\right)\cdots\left(I - \delta_{\pm}(1)\,\delta_{\mp}(1)\right)R(0)$$

これは、ランジュヴァン方程式 (2.3) と (2.4) に基づいてみるとき、揺動力 $\nu_{\pm}$ の大きさが散逸部分（を決定する所）の $\delta_{\pm}(\cdot)$ と結びつくという意味で、揺動散逸定理のひとつの表現である。

注意 2.2.　逆に、(2.5), (2.7) を満足させるデータ $(\gamma_{\pm}(\cdot,*),\ \delta_{\pm}(\cdot),\ V_{\pm}(\cdot))$ と ν_+ を与えるとき、(2.3) で定まる確率過程 $\mathbb{X}_+ = (X(n)\,;\, 0 \le n \le N)$ は局所定常性をもつ（構成定理）

注意 2.3　1次元強定常過程 $\mathbb{Y} = (Y(n)\,;\,|n| \le N)$ に対して、

$$X(n) = {}^t\left(Y(n),\ Y(n)^2,\ \cdots,\ Y(n)^d\right)$$

として、$\mathbb{R}^d$ 値局所定常過程 $\mathbb{X} = (X(n)\,;\,|n| \le N)$ が得られ、これに対する KM$_2$O-ランジュヴァン方程式 (2.3), (2.4) の第1成分をとることにおいて、$\mathbb{Y}$ に対する非線型ランジュヴァン方程式が導かれる。係数間のアルゴリズムは、$\mathbb{X}$ のそれを通して求められる。ここを徹底することが非線型予測問題を解くことになる。

注意 2.4　1次元のとき、条件 (C.2) が成り立つ場合は、$n_0 + 1$ 以後のランダム力がなくなる。

§3. 大域的定常性

今度は、§2 での $N=\infty$ とする場合、即ち、$\mathbb{R}^d$値弱定常過程 $\mathbb{X}=(X(n);\ n\in\mathbb{Z})$ が与えられている、を考える。
Rのスペクトル測度は、スペクトル密度行列 $\Delta(\theta)$ をもち、

$$\text{(C.3)} \qquad \log(\det\Delta(\theta)) \in L^1(-\pi,\pi)$$

が成り立っているとする。

このとき、

$$\text{(3.1)} \qquad {}^{\exists}\lim_{n\to\infty} V_{+(-)}(n) \equiv V_{+(-)}(\infty) \qquad \in GL(d;\mathbb{R})$$

$$\text{(3.2)} \qquad \lim_{n\to\infty} \delta_{+(-)}(n) = 0$$

$$\text{(3.3)} \qquad \lim_{n\to\infty} \gamma_{+(-)}(n,k) = 0 \qquad (\forall k\in\mathbb{N})$$

$$\text{(3.4)} \qquad \lim_{n\to\infty} \gamma_{+(-)}(n,n-k) \equiv \gamma_{+(-)}(k) \qquad (\forall k\in\mathbb{N})$$

が成り立ち、$\mathbb{M}=[X_j(n);\ 1\leq j\leq d,\ n\in\mathbb{Z}]$ 上の unitary group $U=(U(n);\ n\in\mathbb{Z})$: $U(n)(X_j(m)) = X_j(m+n)$
を用いて、

$$\text{(3.5)} \qquad \xi_N^{+(-)}(n) \equiv U(n\underset{(+)}{-}N)\,\nu_{+(-)}(N)$$

と定め、$\mathbb{R}^d$値弱定常過程 $\Xi_N^{+(-)} = (\xi_N^{+(-)}(n);\ n\in\mathbb{Z})$ を考えると、

$$\text{(3.6)} \qquad \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m}}\ \xi_N^{+(-)}(n) \equiv V^{+(-)}(\infty)^{\frac{1}{2}}\,\xi^{+(-)}(n)$$

$$\text{(3.7)} \qquad \Xi^{+(-)} \equiv (\xi^{+(-)}(n);\ n\in\mathbb{Z}) \text{ は白色雑音 i.e.}$$

$$\begin{cases} E(\xi^{\pm}(n)) = 0 \\ E(\xi^{+(-)}(n)\,\xi^{+(-)}(m)^{*}) = \delta_{nm} I \end{cases}$$

$$
(3.8)\quad
\begin{cases}
[X_j(n);\ 1\le j\le d,\ n\le N] = [\xi_j^+(n);\ 1\le j\le d,\ n\le N] & (\forall N)\\
[X_j(n);\ 1\le j\le d,\ N\le n] = [\xi_j^-(n);\ 1\le j\le d,\ n\ge N] & (\forall N)
\end{cases}
$$

が成り立つ。よって、$\mathbb{X}$の時間発展を記述する確率差分方程式は次で与えられる：

KMO－ランジュヴァン方程式

$$(3.9)\quad X(n) = -\underset{N\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}} \sum_{k=1}^{N-1} \gamma_+(N,N-k)X(n-k) + V_+(\infty)^{\frac{1}{2}}\xi^+(n)$$

$$(3.10)\quad X(-n) = -\underset{N\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}} \sum_{k=1}^{N-1} \gamma_-(N,N-k)X(n+k) + V_-(\infty)^{\frac{1}{2}}\xi^-(n)$$

§4. 因果性

2次元弱定常過程 $\mathbb{X} = ({}^t(X_1(n), X_2(n));\ n\in\mathbb{Z})$ が与えられているとする。

定義4.1

(i) 線型かつ大域的な意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果である

$$\Longleftrightarrow\quad [X_2(n);\ n\le 0] \subset [X_1(n);\ n\le 0]$$

(ii) d次かつ大域的な意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果である

$$\Longleftrightarrow\quad [X_2(n);\ n\le 0] \subset [X_1(n_1)X_1(n_2)X_1(n_3)\cdots X_1(n_k);\ n_1,\cdots,n_k\le 0,\ 1\le k\le d]$$

(iii) 非線型かつ大域的な意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果である

$$\Longleftrightarrow\quad [X_2(n);\ n\le 0] \subset [X_1(n_1)X_1(n_2)\cdots X_d(n_d);\ n_1,\cdots,n_d\le 0,\ d\in\mathbb{N}]$$

実際のデータ解析にあたっては、データ数は有限個しかないため、次の局所的因果性の定義を与える。

定義4.2

(i) 線型、局所的意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果

$$\Longleftrightarrow \quad [X_2(m); n_0 \le m \le n] \subset [X_1(m); n_0 \le m \le n] \quad (\exists n_0 \le \forall n)$$

(ii) d次、局所的意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果

$$\Longleftrightarrow \quad [X_2(n); n_0 \le n \le n] \subset [X_1(n_1)\cdots X_1(n_k); \ n_0 \le n_1, \cdots n_k \le n, \ 1 \le k \le d]$$

(iii) 非線型、局所的意味において、$\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果

$$\Longleftrightarrow \quad [X_2(n); n_0 \le n \le n] \subset [X_1(n_1)\cdots X_1(n_d); \ n_0 \le n_1, \cdots n_d \le n, \ d \in \mathbb{N}]$$

$\mathbb{X}_1$, $\mathbb{X}_2$ に対する KM$_2$O-ランジュヴァンカを夫々 $\mathbb{V}_1 = (V_1(n); n \in \mathbb{N}^*)$, $\mathbb{V} = ({}^t(V_{11}(n), V_{22}(n)); n \in \mathbb{N}^*)$ とする。

$$(4.1) \qquad \| X_2(0) - P^{X_2(0)}_{[X_1(\cdot); \cdot \le 0]} \|^2 = \lim_{N \to \infty} \| X_2(N) - P^{X_2(N)}_{[X_1(\cdot); 0 \le \cdot \le N]} \|^2$$

に注意して、

$$(4.2) \qquad \mathbb{X}_1 \xrightarrow[global]{(c)} \mathbb{X}_2 \qquad (\text{定義4.1(i)の意味})$$

$$\Longleftrightarrow \quad \lim_{N \to \infty} \| X_2(N) - P^{X_2(N)}_{[X_1(\cdot); 0 \le \cdot \le N]} \|^2 = 0$$

補題 $\mathbb{X}_1 \xrightarrow[local]{(c)} \mathbb{X}_2$

$$\Rightarrow \quad \left\{ \begin{pmatrix} \nu_1(n) \\ \nu_{11}(n) \\ \nu_{22}(n) \end{pmatrix} ; \ n_0 \leq n < \infty \right\} \quad \text{直交}$$

が基本的で、これを用いて、 $\mathbb{X}_1 \xrightarrow{(c)} \mathbb{X}_2$ ならば、

$$(4.3) \qquad \left\| X_2(N) - P_{[X_1(\cdot);\ 0 \leq \cdot \leq N]}^{X_2(N)} \right\|^2$$

$$= \sum_{k=0}^{N} \frac{Q_{22}(N, N-k)^2}{V_{11}(N-k)} \det V_+(N-k)$$

ここで、

$$(4.4) \qquad Q(N,k) = \begin{cases} R(N)R(0)^{-1} & k=0 \\ P_+(N,k)V_+(k)^{-\frac{1}{2}} & 1 \leq k \leq N \end{cases}$$

$$(4.5) \qquad \begin{cases} P_+(n,n) = V_+(n)^{\frac{1}{2}} \\ P_+(m,n) = -\sum_{k=n}^{m-1} \gamma_+(m,k) P_+(k,n) \qquad (m > n) \end{cases}$$

注意4.1 注意2.3に述べた考えを用いて、d次、大域的な意味において $\mathbb{X}_1$が原因、$\mathbb{X}_2$が結果である場合を扱うことができる。

注意4.2 実際のデータ解析において、大域的因果性の検定を局所的因果性に基づいて検定することは、理論の限界であるけれども、有限個のデータしか扱えない現状からすれば、局所的因果性は大事な概念と思われる。

実際のデータ解析にあたって、定常性、因果性の検定は、頁数の関係で述べられないが、注意2.2でのべた構成定理に基づいての定常性の検定、(4.3)に基づいての因果性の検定を、中心極限定理に訴えることにより提案することができる。詳しくは、文献[17],[18],[19]を見ていただきたい。

文献

[1] 赤池弘次, 中川東一郎; ダイナミックシステムの統計的解析と制御, サイエンス社 (1973).

[2] Okabe, Y., On a stationary Gaussian process with T-positivity and its associated Langevin equation and S-matrix, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, 26 (1979), 115–165

[3] Okabe, Y., On a stochastic differential equation for a stationary Gaussian process with T-positivity and the fluctuation-dissipation theorem, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, 28 (1981), 169–213

[4] Okabe, Y., On a stochastic differential equation for a stationary Gaussian process with finite multiple Markovian property and the fluctuation-dissipation theorem, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, 28 (1982), 793–804

[5] 岡部靖憲, ランジュヴァン方程式について, 数学 33 (1981), 306–324

[6] Okabe, Y., On a wave equation associated with prediction errors for a stationary Gaussian process, Lecture Notes in Control and Information Sciences, 49 (1983), 215–226.

[7] Okabe, Y., A generalized fluctuation-dissipation theorem for one-dimensional diffusion process, Commun. Math. Phys., 98 (1985), 449–468.

[8] Okabe, Y., On KMO-Langevin equations for stationary Gaussian process with T-positivity, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, 33 (1986), 1–56.

[9] Okabe, Y., On the theory of Brownian motion with the Alder-Wainwright effect, J. Stat. Phys., 45 (1986), 953–981.

[10] Okabe, Y., KMO-Langevin equation and fluctuation-dissipation theorem (I), Hokkaido Math. J., 15 (1986), 163–216.

[11] Okabe, Y., KMO-Langevin equation and fluctuation-dissipation theorem (II), Hokkaido Math. J., 15 (1986), 317–355.

[12] Okabe, Y., Stokes-Boussinesq-Langevin equation and fluctuation-dissipation theorem, Prob. Theory and Math. Stat., Vol. 2, 431–436, Prohorov et al. (eds.), 1986 VNU Science Press.

[13] Okabe, Y., On long time tails of correlation functions for KMO-Langevin equations, Lecture Notes in Math., Springer, 1299 (1986), 391–397

[14] Okabe, Y., On the theory of discrete KMO-Langevin equations with reflection positivity (I), Hokkaido Math. J., 16(1987), 315–341.

[15] Okabe, Y., On the theory of discrete KMO-Langevin equations with reflection positivity (II). Hokkaido Math. J., 17(1987), 1–44.

[16] Okabe, Y., On the theory of discrete KMO-Langevin equations with reflection positivity (III), to appear in Hokkaido Math. J.

[17] Okabe, Y., On stochastic difference equations for the multi-dimensional stationary time series, to appear in Prospect of Algebraic Analysis, Academic Press, 1988.

[18] Okabe, Y., On stochastic difference equations for the multi-dimensional stationary time series, in preparation.

[19] Okabe, Y. and Y. Nakano, On the theory of KM_2O-Langevin equations with application to time series, in preparation