

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |                                                                                                                                                                             |
|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 題目(和文)            | 動力学系を特徴付ける多パラメータ感度                                                                                                                                                          |
| Title(English)    | Invariant Multiparameter Sensitivity to Characterize Dynamical Systems                                                                                                      |
| 著者(和文)            | 藤原謙三郎                                                                                                                                                                       |
| Author(English)   | Kenzaburo Fujiwara                                                                                                                                                          |
| 出典(和文)            | 学位:博士(理学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第9742号,<br>授与年月日:2015年3月26日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:中村 清彦,樺島 祥介,三宅 美博,青西 亨,豊泉 太郎                                                       |
| Citation(English) | Degree:.,<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第9742号,<br>Conferred date:2015/3/26,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文                                                                                                                                                                        |
| Type(English)     | Doctoral Thesis                                                                                                                                                             |

平成 26 年度 東京工業大学 大学院総合理工学研究科  
知能システム科学専攻博士論文

# 動力学系を特徴付ける 多パラメータ感度

藤原 謙三郎

## Invariant Multiparameter Sensitivity to Characterize Dynamical Systems

Kenzaburo Fujiwara

kenzaburo.fujiwara[at]gmail.com

提出年月日 平成 27 年 1 月



# Abstract

The behavior of systems is determined by the values of parameters. Several metrics, including multiparameter sensitivity (MPS), have been proposed to quantify the sensitivity of a system on the basis of its parameters; i.e., to determine how sensitive the output of a system is to the changes in its parameters. Because we seldom know the detailed structure of systems, metrics should be independent of how we model systems. However, the previously proposed metrics, such as MPS, give different results for equivalent models of the same system including equivalent electrical circuits. In this thesis, to address this problem, I formulate a new parameter sensitivity metric, which I refer to as “invariant multiparameter sensitivity” (IMPS) because it gives the same result for a class of equivalent models. In my analysis of a circuit with  $m$  resistors in series, MPS decreases as  $m$  increases, even if the sum of the resistance of the  $m$  resistors is fixed. In contrast, IMPS is the same for these equivalent circuits. An analysis of a linear system of  $N$  connected particles reveals that the IMPS for this model is independent of  $N$ , which is confirmed analytically and numerically. To investigate the dependence of IMPS on network structure, I apply IMPS to nonlinearly coupled phase oscillators on complex networks such as Barabási–Albert, regular random and Watts–Strogatz networks. I find that the IMPS of a nonlinear phase oscillator model is essentially independent of the number of oscillators. I also find that IMPS depends network structure of models for relatively weak connections. To clarify how IMPS depends on network structure, I examine a simplified solvable phase oscillator model. I conclude that IMPS characterizes a wide variety of systems in a manner that is independent of system size and the number of parameters.



# 目次

|       |                                               |    |
|-------|-----------------------------------------------|----|
| 第 1 章 | 序論                                            | 5  |
| 第 2 章 | パラメータ感度分析                                     | 11 |
| 2.1   | はじめに                                          | 11 |
| 2.2   | 誤差伝播則                                         | 11 |
| 2.3   | SPS と MPS                                     | 13 |
| 第 3 章 | 新指標 <b>IMPS</b>                               | 17 |
| 3.1   | はじめに                                          | 17 |
| 3.2   | IMPS の定義と Euler の同次関数定理                       | 17 |
| 3.3   | モデルによる検証                                      | 18 |
| 3.4   | 考察                                            | 23 |
| 第 4 章 | 複雑ネットワーク                                      | 25 |
| 4.1   | はじめに                                          | 25 |
| 4.2   | ネットワークを特徴づける指標                                | 25 |
| 4.3   | Watts–Strogatz ネットワークと Barabási–Albert ネットワーク | 27 |
| 第 5 章 | 複雑ネットワーク上の動力学系を <b>IMPS</b> で特徴づける            | 33 |
| 5.1   | 線形動力学モデル                                      | 33 |
| 5.2   | 解析と結果：線形動力学モデル                                | 34 |
| 5.3   | 非線形動力学モデル                                     | 42 |
| 5.4   | 解析と結果：非線形動力学モデル                               | 44 |
| 5.5   | 考察                                            | 55 |
| 第 6 章 | 終章                                            | 61 |



## 第1章 序論

システムとは、要素同士が相互作用し合い全体として1つのまとまりを成すもの、と定義できる。このように定義すると、気候も地殻も神経回路も電子回路もソフトウェアなどもシステムと見ることができる。システムは現代の科学技術では重要な研究対象となっている。システムに対するアプローチには2つある。1つは理学的（自然科学的）アプローチで、自然現象をシステムとして扱ってその実体を理解しようとする。これに対して、工学的（技術的）アプローチでは、電子回路やソフトウェアなどの、ある目標となるシステムを作製する。

自然科学において、システムの機構や中身はしばしば未知である。どのような要素がどのようなダイナミクスで絡み合って自然現象が生み出されるか、それを解き明かすことは自然科学の大きな目標である。その目標への理学的アプローチの1つがシステムのモデル化である。未知なシステムを説明もしくは再現する為に、非常に多くの数理モデルが提案されてきた。数理モデルは化学、物理、生物学、経済学など広い分野で研究に使われている。そのためモデルの対象も化学反応や大気変動、遺伝子発現機構、食物連鎖、神経細胞の発火現象、価格均衡など多岐にわたっている [1-4]。

数理モデルの性質を決めるのはパラメータである。数理モデルにはパラメータが存在し、パラメータの値によって挙動や出力は決定づけられる。自然科学のシステムでは、各パラメータは量子効果や熱雑音をはじめとする環境的な要因により確率的に変化する。観測される出力もこの環境的な要因に左右されて変化する。またシステムの観測により得られるモデルのパラメータは実験精度に限界があるため、モデルのパラメータは真の値からずれた値に設定されてしまうことになる。パラメータのこのような不可避な微小変化や測定誤差によって、モデルはシステムの出力を完全に再現することは困難になる。よってパラメータの確率的变化がシステムの出力にどのような影響を与えるかを知ることは重要である。

工学的アプローチにおいては、作製者が目的とする挙動を実現するシステムを設計するためにモデルは構築される。言い換えれば、モデルが設計図であり、それをもとに現実に組み上がったものがシステムである。工学的システムでも各素子の個体差や環境変化によってパラメータは変化してしまう。これらシステムのパラメータの不可避な微小変化は、モデルが目的とする挙動を実現することを妨げる。よってパラメータの微小変化を抑え、目的とする挙動を実現することは工学的システムの重要課題である [5]。

理学的モデルや工学的モデルにおいてパラメータ変化に対してどれだけ出力が変化するかを定量化する数値は「パラメータ感度」と言われ、その分析はパラメータ感度分析と呼ばれる。パラメータ感度分析は理工工学のいずれの方面からも重要な分析であり、感度分析は以下のような問題へのアプローチである [6]。

- どのパラメータが出力の不確実性を減らす上でより詳しい研究が必要なのか。

理学的モデルにおいてはどのパラメータをより精密に知ることができれば、より正確に出力を再現できるのかを示す。

- 出力を知るうえでどのパラメータがより重要で、どのパラメータがより重要ではないか。  
出力を左右しないパラメータは定数で置き換えることで、理学的モデルを簡略化することができる。
- どのパラメータがより出力に多様性を与えるか。  
多様な現象を再現する理学的モデルにおいて、その多様性をもたらすパラメータを同定することは重要である。
- どのパラメータがより出力に相関しているか。  
自然科学や経済学などのモデルにおいて、常にモデルの全てのパラメータが観測できる訳ではない。部分的にのみパラメータが観測ができる際、どのパラメータを重点的に観測すれば出力が予測できるかを知ることは重要である。
- どのような挙動の変化がパラメータによってもたらされるか。  
いくつかの特徴的な挙動を再現する理学的モデルにおいて、それらの挙動がそれぞれどのパラメータによってもたらされるのかを同定することは重要である。
- 目的の出力が与えられている際、その出力をモデルから得るために各パラメータに許される誤差範囲はどれほどか。  
理学的モデルにおいては、現象を再現できるパラメータの範囲を知ることにつながる。これにより、実験や観測に先んじてパラメータの値を予測することにも関連する。工学的モデルにおいては、素子の個体差は不可避である。それらの素子のうち、どの素子をより精密に作れば出力誤差を減らすことができるのか。また出力を正常に稼働できる範囲内にする為に、各素子に許される誤差範囲を知ることが重要である。
- パラメータ変化や環境変化にロバストなモデルをどう構築するか。  
工学的モデルによって作製されるシステムの素子は環境の変化や経年劣化によりパラメータを変化させる。環境変化が起きてもシステムが正常に動作するシステムを設計することは非常に重要である。

これらの問題は様々な分野で問われており、そのため広く研究され、様々な分析手法が開発されている [6–9]。

パラメータ感度を測る古典的な手法に単一パラメータ感度 (Single Parameter Sensitivity: SPS) がある [6]。SPS はある 1 つのパラメータの微小変化に対する出力の応答を定量化する指標である。対象となるパラメータの変化率で出力の変化率を割ったものが SPS である。この SPS は各パラメータのそれぞれについて求めることができる量である。またミリ、マイクロ、ナノのようにパラメータや出力の単位のスケールが変化しても不変な値で定量化することができるように定義されている。SPS により、対象となる出力の挙動がどのパラメータにより依存しているのか、あるいは依存していないのかを知ることができる。SPS はあるパラメータセットにおける各パラメータと出力との直接的な関係を明らかにすることができる指標として、特に電気回路の分野において研究がなされてきた [10, 11]。薄膜などの微細な技術を用いた電気回路においては、各素子には無視できない個体差が生じる。この各素子の個体差による出力への影響を最小化する目的で、同じ出力を実現する等価回路において各

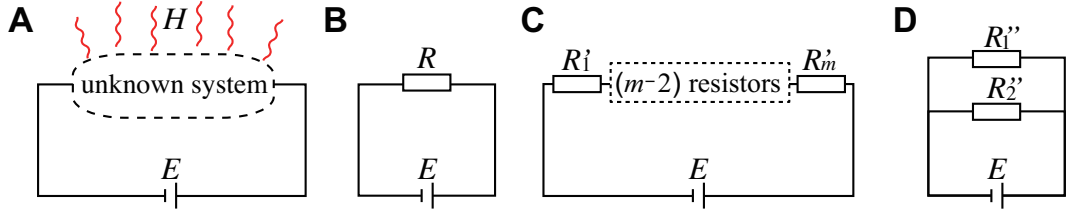


図 1.1: 等価回路 (A) 不明な部分を持つ回路システム. (B) 未知のシステム A を 1 つの抵抗で記述したモデル. (C) 未知のシステム A を  $m$  個の抵抗を直列に配置することで記述したモデル.  $R'_1 + R'_2 + \dots + R'_m = R$  のとき A や B と出力が一致し, C の回路は B の回路と等価である. (D) 未知のシステム A を 2 個の抵抗を並列に配置することで記述したモデル.  $R = R''_1 R''_2 / (R''_1 + R''_2)$  のとき A や B と出力が一致し, D の回路は B の回路と等価である.

パラメータについての感度を最小化するための指標として SPS は用いられてきた [12]. ただし, SPS では 1 つのパラメータに対する感度しか定量化することができない. つまり一般的に数理モデルには複数のパラメータが存在しているにもかかわらず, SPS ではモデル全体のパラメータに対する感度を測ることができない. そこで 1 つのパラメータに対する感度である SPS を複数パラメータに一般化することは自然な流れであると言える. その一般化の 1 つが多パラメータ感度 (Multiparameter Sensitivity: MPS) である [12]. 各パラメータに対して得られた SPS を 2 乗して平方根を取った値として MPS は定義される. MPS は RC (resistor-capacitor) 回路において使われてきた [5, 10, 11, 13, 14]. またショウジョウバエの概日リズムや大腸菌の熱ショック応答のように生体機構が, どのようにしてロバスト性を獲得しているのかを調べるためにも MPS は役立てられている [15, 16].

MPS は SPS の複数パラメータへの一般化の 1 つであるが, MPS には同じ出力を実現する等価回路を違う値で定量化してしまう特性がある. 例えば, ここに図 1.1A のように熱流  $H$  を発している回路システムがあるとする. この回路は電池  $E$  につながっており, 熱を発している部分に関しては中身が不明である. このような未知なシステムをモデル化する方法は多く存在するが, 直列抵抗回路に限ったとしても, 図 1.1B や C のように様々なモデル化が存在する. 同じシステムのモデル化なので B や C の回路は同じ出力  $H$  を実現するため  $R'_1 + R'_2 + \dots + R'_m = R$  を満たしている. そのような場合 B や C の回路を A の等価回路と言うが, MPS はこれら等価回路に対して異なる値を与えてしまう. 具体的には図 1.1B と C の回路において MPS は C の回路の方で小さい値を与える. つまり抵抗の数に依存して MPS は値を変化させる. これはあるシステムをモデル化する際, そのシステムを冗長にモデル化することで, モデル自体は等価であってもモデル全体のパラメータ感度が変化してしまうということを意味する. そのため MPS はモデルのパラメータ感度を定量化することができたとしても, そのモデルのもとになったシステムの情報を得ることはできないことがわかる.

本論文では新たにモデル全体のパラメータに対する出力の感度を定量化する手法と指標を提案する. この指標を不変多パラメータ感度 (Invariant Multiparameter Sensitivity: IMPS) と名付ける. この IMPS は各パラメータに対する SPS の絶対値を足し合わせた値で定義される. IMPS は一定条件下でパラメータの取り方, モデル化の仕方に関わらず同等なモデルについて同じ値で定量化することができる. この論文では IMPS の特性を様々な例から明ら

かにする。まず単純な抵抗モデルやばねモデルを IMPS を用いて解析する。次に線形動力学モデルを例にとって、より一般的な IMPS の特徴を検証する。さらに複雑ネットワーク上の非線形動力学モデルの IMPS について集中的に検討し解析する。

近年、複雑ネットワークは様々な分野で見つかり、社会科学や生物学、神経科学など広い分野で注目されている [17–22]。ネットワークとはなんらかのシステムにおける「つながり」の構造を指す。ここで、「つながり」とは具体的には人間関係や論文の被引用関係、経済取引関係、遺伝子制御関係、食物連鎖関係、伝染病の感染拡大網、道路網、インターネット、神経細胞間の結合関係などである [22]。これら「つながり」のことをネットワークと言う。ここに挙げたようなネットワークの多くは複雑な構造を持っているため、しばしば複雑ネットワークと呼ばれる。多くのシステムはネットワークとダイナミクスを組み合わせでモデル化される。食物連鎖のモデル化を例にとると、捕食関係がネットワークで、捕食確率や個体数を算出する計算式がダイナミクスである。また次によく研究されている哺乳類のサーカディアンリズムの遺伝子制御システムを例にとり、説明する [23–28]。サーカディアンリズムを構成する時計遺伝子間の依存関係やフィードバック関係をネットワークだと見ると複雑ネットワークの例になっている (図 1.2) [29–31]。図のように各 RNA や mRNA, タンパク質、複合体が複雑に作用し、サーカディアンリズムを発現する。例えば *Per1* は DBP や CLK/BMAL1 複合体から発現を促進する作用を受け、PER/CRY 複合体から発現を抑制する作用を受けている。このような作用の直接的な有無がネットワーク中の要素間の「つながり」であり、それが複雑なネットワークになっている。またサーカディアンリズムの遺伝子制御システムのダイナミクスは、それぞれの遺伝子の発現やたんぱく質の濃度を生化学的反応式で立式することでモデル化できる。これらの例のように、システムの一つ一つの「つながり」をネットワークでモデル化し、その「つながり」によって生じる各素子の変化や動きを数式でモデル化することで、システムはモデル化できる。またネットワークの特徴をより詳しく研究することで、システムのマクロな挙動や傾向を説明できる [22]。

本論文は以下のように構成される。IMPS を導入する背景としてまず第 2 章ではパラメータ感度分析の先行研究をまとめる。次に第 3 章では IMPS を定式化し、様々な例でその基本的な特性を示す [32]。また第 4 章では、第 5 章で用いるモデルで必要となる複雑ネットワークの先行研究を紹介する。第 5 章では複雑ネットワーク上のダイナミクスを持つ動力学モデルに IMPS を適用し、ネットワーク構造が IMPS にどのような形で表現されるのかを明らかにする [33]。そして第 6 章では本論文をまとめ、IMPS の今後の研究課題や応用可能性について述べる。

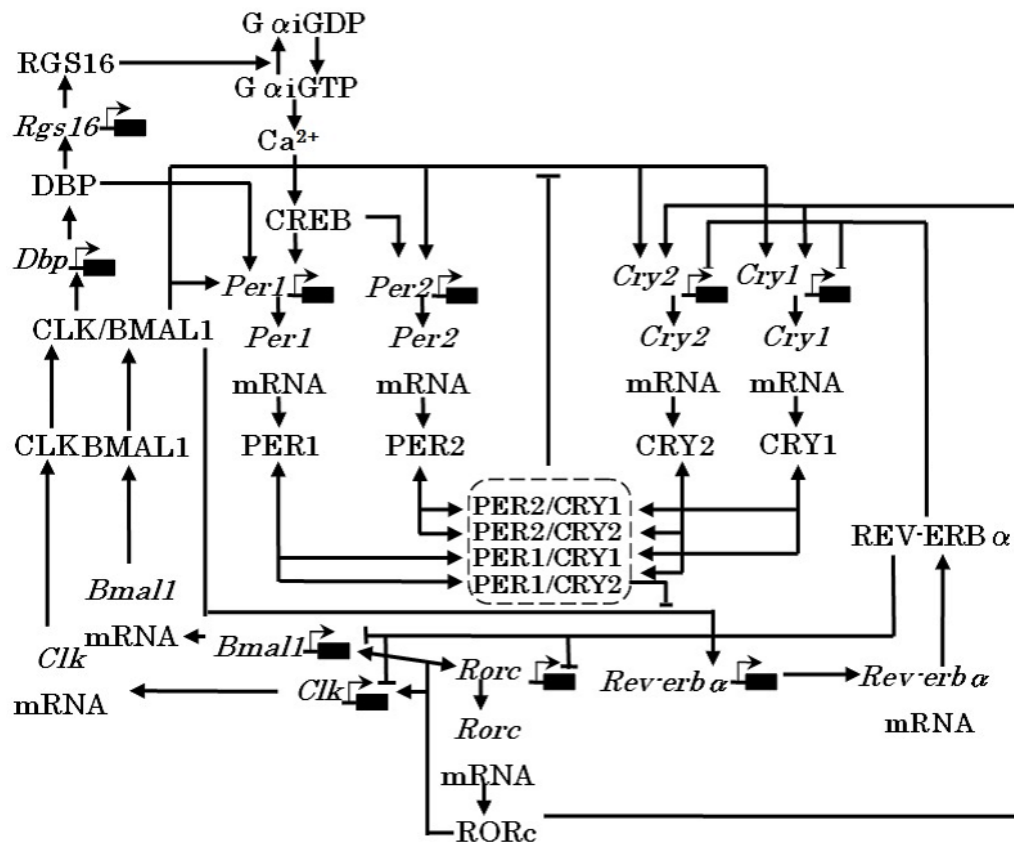


図 1.2: ヒトのサーカディアンリズムにおける遺伝子制御ネットワーク 主に時計遺伝子群とそのタンパク質のフィードバックによってサーカディアン遺伝子制御ネットワークは構成される。時計遺伝子群: *Per1* (*Period1*), *Per2* (*Period2*), *Clk* (*Clock*), *Cry1* (*Cryptochrome1*), *Cry2* (*Cryptochrome2*), *Rev-erbα*, *Rorc*. *Dbt* はショウジョウバエの時計遺伝子であり、ヒトの場合は CSNK1E(casein kinase 1, epsilon) に相当する。CREB, CRE-binding protein; RGS16, Regulator of G-protein Signaling 16; GTP, グアノシン三リン酸; GDP, グアノシン二リン酸; Gαi, G タンパク質の一種。



## 第2章 パラメータ感度分析

### 2.1 はじめに

第3章で新たなパラメータ感度の指標を定義する前に、その準備として本章ではパラメータ感度に関する先行研究を簡単にまとめる。パラメータ感度の基礎にあるのは感度分析(sensitivity analysis)である。感度分析とはシステムやモデルの入力の変化がどのように出力に現れるかということを分析する手法である。特にパラメータの変化に対する出力の変化に注目した手法がパラメータ感度(parameter sensitivity)である。パラメータ感度によってどのパラメータがより出力に影響を与えているかを知ることができる[6]。感度分析は実際にマーケティングなどでも用いられ、ある商品の原価率が増加すると利益がどれだけ変化するのか、を分析するときには利益感度分析と呼ばれることもある[34]。入力が高率的に変動し、非零の分散をもつとき、出力の分散はどうなるか、を分析することも感度分析の1つである。このような感度分析は工学的に応用されており[6]、電気回路などのように部品の個体差による出力への影響を知る必要がある分野において用いられる。

第2.2節ではパラメータ誤差と出力誤差の関係を示した誤差伝播則について触れる。第2.3節では先行研究の感度分析手法の代表例としてSPSとMPSを紹介する。

### 2.2 誤差伝播則

一般に動力システムは

$$\dot{\vec{x}} = F(t, \vec{x}, \vec{p}) \quad (2.1)$$

のような一階常微分方程式でモデル化され表現される。 $t$ は時刻であり、 $\vec{x} = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_n]$ は状態変数ベクトル、 $\vec{p} = [p_1, p_2, p_3, \dots, p_m]$ はパラメータベクトルである。ここで感度を測る対象となる出力を $q$ とする。この $q$ は時刻や状態ベクトル、パラメータベクトルなどシステムから算出される値であれば任意に定めてよい。出力はシステムによって異なり、発振周期や、細胞増殖速度、エネルギー消費量、経済指標などである。感度分析では、定めた出力のパラメータ感度が測られるので、必要に応じて出力を定める必要がある。

出力の分散がモデルのパラメータによってどのような形で表現されるのかを調べる。ここでは簡単のため、仮に $\vec{p} = [p_1, p_2]$ とする。 $p_1$ と $p_2$ はそれぞれ、 $dq_1$ と $dq_1$ だけ確率的変動をしているとする。簡単のため、 $dq_1$ と $dq_1$ はそれぞれ平均0とする。出力を $q = q(t, \vec{x}(t), \vec{p})$ と表すと、全微分と偏微分の関係より

$$dq = \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right) dp_1 + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right) dp_2 \quad (2.2)$$

となる．ここで両辺を2乗することで分散と対応付けられ、

$$\begin{aligned} dq^2 &= \left[ \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right) dp_1 + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right) dp_2 \right]^2 \\ &= \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right)^2 dp_1^2 + 2 \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right) \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right) dp_1 dp_2 + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right)^2 dp_2^2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

となる．これにより出力の微小誤差の2乗が得られた．つまりこの左辺の期待値を取ることにより2乗誤差の期待値を得ることができ

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[dq^2] &= \mathbb{E} \left[ \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right)^2 dp_1^2 \right] + \mathbb{E} \left[ 2 \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right) \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right) dp_1 dp_2 \right] + \mathbb{E} \left[ \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right)^2 dp_2^2 \right] \\ &= \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right)^2 \mathbb{E}[dp_1^2] + 2 \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right) \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right) \mathbb{E}[dp_1 dp_2] + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right)^2 \mathbb{E}[dp_2^2] \end{aligned} \quad (2.4)$$

となる． $\mathbb{E}$ は平均を意味する．ここで $p_1$ と $p_2$ が無相関と仮定することで共分散項を消すことができる．このとき

$$\mathbb{E}[dq^2] = \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right)^2 \mathbb{E}[dp_1^2] + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right)^2 \mathbb{E}[dp_2^2] \quad (2.5)$$

となる．ここでそれぞれの分散を期待値で

$$\begin{cases} \mathbb{E}[dq^2] = \mathbb{V}[q] \\ \mathbb{E}[dp_1^2] = \mathbb{V}[p_1] \\ \mathbb{E}[dp_2^2] = \mathbb{V}[p_2] \end{cases} \quad (2.6)$$

と書くと、

$$\mathbb{V}[q] = \left( \frac{\partial q}{\partial p_1} \right)^2 \mathbb{V}[p_1] + \left( \frac{\partial q}{\partial p_2} \right)^2 \mathbb{V}[p_2] \quad (2.7)$$

が求まる．ここで $\mathbb{V}$ は分散を意味している．ここでの分散とはパラメータや出力の不確かさを意味する．これにより独立なパラメータが2つのときのパラメータの分散と出力の分散の関係を求めることができた．

パラメータの精度を上げて出力の分散を減らすために、パラメータ感度は使われてきた [8]．式(2.7)を一般化することで各パラメータがそれぞれ独立であるならば出力の分散とパラメータの分散には関係式

$$\mathbb{V}[q] = \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial q}{\partial p_i} \right)^2 \mathbb{V}[p_i] \quad (2.8)$$

があることが分かる [6]．このようなパラメータ誤差が出力誤差に伝播する法則を誤差伝播の法則と言う．ただしパラメータ同士になんらかの関係がある場合はこの式に共分散も考慮に入れる必要がある．

この式を使えば出力誤差を減らすためには、どのパラメータについてより詳しく知る必要があるのか、が分かる． $(\partial q / \partial p_i)^2$ が大きなパラメータ $p_i$ の分散 $\mathbb{V}[p_i]$ が小さくなれば出力

の分散は小さくなるからである。この誤差伝播の法則に基づくパラメータ感度分析は分散に注目し、パラメータの分散から出力の分散を算出できる手法である。その場合、各パラメータの  $(\partial q / \partial p_i)^2$  をパラメータ感度として見る。ただし各パラメータの  $(\partial q / \partial p_i)^2$  をパラメータ感度として見た場合、一つ一つのパラメータに対しパラメータ感度が与えられる。つまり誤差伝播則を用いた感度では、パラメータセット全体についてのパラメータ感度をスカラー量で与えることはできない。よってパラメータセット全体についての包括的な感度を定量化することはできない。

## 2.3 SPS と MPS

誤差伝播の法則を用いたパラメータ感度は各パラメータの分散と、出力の分散の関係を示している。ただしパラメータが複数ある場合、パラメータセット全体についての出力の感度を評価する手法ではない。

出力の分散とパラメータの分散の關係に注目するのではなく、出力の値自身とパラメータの關係を分析する手法も研究されてきた。その手法の1つが単一パラメータ感度 (Single Parameter Sensitivity: SPS) である [6]。動力学システムが式 (2.1) のようなモデルで表現されるとき、あるパラメータ  $p_i$  に対する出力  $q$  の単一パラメータ感度  $\text{SPS}_i$  は

$$\begin{aligned} \text{SPS}_i &= \frac{p_i}{q} \frac{\partial q}{\partial p_i} \\ &= \frac{\partial \ln q}{\partial \ln p_i} \end{aligned} \quad (2.9)$$

で定義される。式 (2.9) より SPS は、あるパラメータ  $p_i$  が変化するとき、パラメータ  $p_i$  の変化率で出力  $q$  の変化率を割った値になっている。変化率により算出されるので、ミリやナノ、キロなどに代表される単位のスケールが出力やパラメータに付いても同一の値を与えるという利点を SPS は持っている。これは単位のスケールが変化しても変化率は変化しないことに起因する特性である。例えば図 1.1B のような回路があり、電池  $E[\text{V}]$  を定数、抵抗  $R[\Omega]$  をパラメータ、流れる電流  $I[\text{A}]$  を出力とする。  $R$  の変化量を  $dR$  とし、そのときの  $I$  の変化量を  $dI$  とおく。ここで抵抗の単位を  $[\text{k}\Omega]$ 、電流の単位を  $[\text{nV}]$  などと変えても、  $\frac{dR[\Omega]}{R[\Omega]} = \frac{dR[\text{k}\Omega]}{R[\text{k}\Omega]}$  かつ  $\frac{dI[\text{A}]}{I[\text{A}]} = \frac{dI[\text{nA}]}{I[\text{nA}]}$  となる。これは  $\frac{dE}{E}$  も  $\frac{dI}{I}$  も単位が分子と分母で打ち消し合うからである。その結果、  $\text{SPS} = \frac{R}{I} \frac{dI}{dR}$  は常に無単位量となり、単位のスケールに独立な値を与える。実際に計算すると出力  $I$  は

$$I = \frac{E}{R} \quad (2.10)$$

となるので、SPS は

$$\begin{aligned} \text{SPS} &= \frac{R}{I} \frac{dI}{dR} \\ &= -\frac{R}{E} \frac{E}{R^2} \\ &= -\frac{R^2}{E} \frac{E}{R^2} \\ &= -1 \end{aligned} \quad (2.11)$$

となり、やはり無単位量となった。また  $|\text{SPS}_i|$  が大きければ、パラメータ  $i$  を出力の変化に大きな影響を与えるパラメータであると特定することができる。例えば図 1.1C のような回路があり、 $m = 2$  で  $R'_1 = 100[\text{m}\Omega]$  かつ  $R'_2 = 10[\Omega]$  であったとする。そのとき、出力  $I$  は

$$I = \frac{E}{R'_1 + R'_2} \quad (2.12)$$

となるので、 $\text{SPS}_i$  は

$$\begin{aligned} \text{SPS}_i &= \frac{R'_i}{I} \frac{dI}{dR'_i} \\ &= -\frac{R'_i}{\frac{E}{R'_1 + R'_2}} \frac{E}{(R'_1 + R'_2)^2} \\ &= -\frac{R'_i}{R'_1 + R'_2} \end{aligned} \quad (2.13)$$

となる。よって  $|\text{SPS}_1| < |\text{SPS}_2|$  となり、パラメータ  $R'_2$  の方がより出力  $I$  の変化に大きな影響を与えるパラメータであると特定できる。

パラメータは多数あるので一つ一つに感度を定義するのではなく、複数パラメータを束にして扱いたいときもある [5, 10, 11, 14–16]。パラメータが複数あるシステムにおいて、出力の変動がパラメータセット全体にどれほど依存しているかを測るには、パラメータセット全体についての感度をスカラー量で定義する必要がある。しかし SPS は単一パラメータについての指標なので、システムのパラメータ全体についての感度の指標として用いることはできない。よってこの SPS を拡張し多パラメータへの包括的なパラメータ感度を定量化することのできる指標へと拡張することは自然な流れであると言える。包括的な多パラメータ感度を定量化する手法の 1 つが Goldstein と Kuo が提案した多パラメータ感度 (Multiparameter Sensitivity: MPS) である [12]。これは

$$\text{MPS}^2 = \sum_{i=1}^m \text{SPS}_i^2 \quad (2.14)$$

で定義される。各パラメータに対してそれぞれ定義された SPS の組をベクトルとしたとき、MPS はそのベクトルの L2 ノルムに相当する。MPS はシステムの出力のパラメータセット全体に対する感度を定量化する指標として、特に電気回路の分野で用いられてきた [11–13]。

アナログ回路などでは各素子の値を変化させて出力を測ることによって、実験的に MPS を求めることはできる。ただし、理論モデルなどでは複雑にダイナミクスが絡み合い、解析的に MPS を求めることは難しいことも多い。複雑なモデルにおいて解析的に求める代わりに数値計算で MPS を求める手法が疑似マルチパラメータパラメータ感度 (Quasi-Multiparameter Sensitivity: QMPS) である [15, 16]。全パラメータの変動に対する感度を定量化する手法としてはモンテカルロ法などもあるが [35, 36]、QMPS は摂動が小さい場合のモンテカルロ法と同じ結果をモンテカルロ法よりも小さい計算コストで出すことができるとされる [15, 16]。

MPS はパラメータ変化に対する出力の頑健性、ロバストネスを測る目的でも用いられる [15, 16]。パラメータ変化に対する出力の感度が低いということは、パラメータの変化に対してロバストだとする考え方である。Kazuhiro Maeda らは QMPS を用いてショウジョ

ウバエの概日リズムや様々な形のフィードバックループの概日リズム、大腸菌の熱ショック応答がロバストなシステムとなる要因を明らかにした。

しかしながら本章で示すように MPS は 1 つのシステムの等価なモデルに対して異なる感度の値を与えてしまう特徴がある。序章でも触れた図 1.1A という 1 つのシステムを例に計算してみよう。図 1.1A のシステムは電池  $E$  と、それに接続され、熱流  $H$  を発する未知の部分とで構成される。未知の部分を持つ図 1.1A のシステムには無数のモデル化が存在する。その中でも直列抵抗回路だけでも図 1.1 の回路 B や C などモデルが複数存在する。ここでこの未知のシステムのパラメータ感度を知りたいとする。そこで図 1.1A の未知な回路システムのモデル化、図 1.1B と C の回路について MPS を計算する。

図 1.1B の回路の場合 (MPS) 熱流  $H$  は

$$H = \frac{E^2}{R} \quad (2.15)$$

である。よって

$$\begin{aligned} \text{MPS}^2 &= \text{SPS}^2 \\ &= \left( \frac{R}{H} \frac{\partial H}{\partial R} \right)^2 \\ &= 1 \end{aligned} \quad (2.16)$$

となり、MPS は 1 となる。次に同じシステムのモデル化である図 1.1C の回路の場合を考える。

図 1.1C の回路の場合 (MPS) 図 1.1A のモデル化なので、回路 C も B と同じく出力  $H$  を再現する。よって C の抵抗には  $R'_1 + R'_2 + \dots + R'_m = R$  の関係が成立すると仮定できる。このとき熱流  $H$  は

$$\begin{aligned} H &= \frac{E^2}{R} \\ &= \frac{E^2}{\sum_{i=1}^m R_i} \end{aligned} \quad (2.17)$$

である。その条件のもとで回路 B と C は等価であり、

$$\begin{aligned} \text{MPS}^2 &= \sum_{i=1}^m \text{SPS}_i^2 \\ &= \sum_{i=1}^m \left( \frac{R'_i}{H} \frac{\partial H}{\partial R'_i} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^m \frac{R_i'^2}{R^2} \end{aligned} \quad (2.18)$$

となる。このとき MPS は  $m$  が大きくなるにつれて小さくなることがわかる。よって図 1.1A のようなシステムを図 1.1C のように多数の抵抗でモデル化することで、MPS の値を操作することができることが示された。これは図 1.1A を図 1.1D のような並列抵抗回路でモデル化しても同様な結果となり、いくつ抵抗を並列に置くかで MPS は変化する。

図 1.1D の回路の場合 (MPS) 新たな並列抵抗をそれぞれ  $R_1''$  と  $R_2''$  とする. 抵抗は  $R = R_1'' R_2'' / (R_1'' + R_2'')$  の関係が存在するとき, 回路 A と同じく熱流  $H$

$$\begin{aligned} H &= \frac{E^2}{R} \\ &= \frac{E^2}{\frac{R_1'' R_2''}{R_1'' + R_2''}} \end{aligned} \quad (2.19)$$

を発している. その条件のもとで MPS は

$$\begin{aligned} \text{MPS}^2 &= \sum_{i=1}^n \text{SPS}_i^2 \\ &= \sum_{i=1}^2 \left( \frac{R_i''}{H} \frac{\partial H}{\partial R_i''} \right)^2 \\ &= \left( \frac{R_2''}{R_1'' + R_2''} \right)^2 + \left( \frac{R_1''}{R_1'' + R_2''} \right)^2 \\ &< 1 \end{aligned} \quad (2.20)$$

となる. よって 1 つの抵抗でモデル化した図 1.1B の回路で MPS は 1 だったので, 直列回路のみならず並列回路でも MPS は異なる値で定量化することが分かる.

未知のシステム 1 つに対し, MPS は回路 B と C と D で違う値を与えた. 未知のシステムのパラメータ感度を知りたいとき, どのモデルのパラメータ感度を採用すれば良いかは明確ではない. ただし回路 B と C と D を未知なシステム A のモデル化ではなく, それぞれが別の工学的システムのモデルであるとみるならば, MPS はそれぞれのモデルのパラメータ感度を定量化していると言える. つまりダイナミクスや構造が完全に既知である工学的モデルならば MPS によってパラメータ感度を測ることはできるかもしれない. 自然科学においてシステムの多くは未知な部分やダイナミクスを持つ. そのため, MPS を用いて自然科学のシステムのパラメータ感度を定量化することは一般的にはできない. よって MPS は仮に既知な工学的モデルのパラメータ感度の定量化はできたとしても, 理学的モデルの対象であるシステムのパラメータ感度の定量化はできないことが分かる. 次章以降このような問題を部分的に解決する指標を提案し, その指標の特性を明らかにしていく.

## 第3章 新指標 IMPS

前章では過去の感度分析手法の代表的な研究に触れ、誤差伝播則や SPS, また SPS の多パラメータ拡張としての MPS について触れた。本章では新たな指標を提案し、簡単なモデルにおいてその指標の基本的な特性を明らかにする。

### 3.1 はじめに

自然科学のシステムの細かなダイナミクスやネットワーク構造はモデル化に依存する。パラメータ数やネットワーク構造などは、どのようなスケールでモデル化するかによっても変化する。2つの星の2体間相互作用を考えても、それを2つの星と考えるか、それともそれぞれ無数の砂粒の集まりと考えるか、あるいはさらに無数の分子のあつまりと考えるか、によってはパラメータ数やネットワーク構造は根本的に変化する。このように自然科学ではある1つのシステムを考えた際、そのモデル化の手法は複数存在することが少なくない。そのようなシステムのパラメータ感度を定量化する際、MPS は用いることができない。なぜなら MPS はパラメータ数やモデル化の仕方に強く依存するのでシステムの感度の指標にはなりえないからである。

そこでパラメータ数やモデル化にできる限り依存しない形で SPS を拡張することを試みる。本章では新たに SPS を拡張し、不変多パラメータ感度 (invariant multiparameter sensitivity: IMPS) を定義する。

### 3.2 IMPS の定義と Euler の同次関数定理

一般的な動力学システムのモデルは式 (2.1) で表現される。ここで式 (2.1) の出力  $q$  はモデルから計算される量である。2.3 節において出力  $q$  のパラメータ感度の指標として SPS と MPS を紹介した。定義式 (2.14) から MPS はそれぞれのパラメータの SPS の L2 ノルムであることが分かる。これは SPS の集合をベクトルと考えた際、ベクトルの通常の高さに対応した値である。ただし先に述べたように MPS はパラメータ数やモデル化の仕方に依存することが分かっている。そこで最大限パラメータ数に依存しない形で SPS の拡張として、不変多パラメータ感度 (invariant multiparameter sensitivity: IMPS) を提案する。MPS は全 SPS の L2 ノルムであったが IMPS では L1 ノルムをパラメータ感度指標とする。数式で表現すると

$$\text{IMPS} = \sum_{i=1}^m |\text{SPS}_i| = \sum_{i=1}^m \left| \frac{p_i}{q} \frac{\partial q}{\partial p_i} \right| \quad (3.1)$$

となる。ここでパラメータは  $m$  個あるとした。この形で定義することで IMPS はある一定の条件を満たすモデルに対し、同一の値でパラメータ感度を定量化できる。その一定の条件とは

- (1) 出力  $q$  がパラメータの  $k$  次の同次関数として表現できること
- (2) 全てのパラメータについての SPS の符号が一致していること

の2つである [32]。条件 (2) が満たされるとき IMPS は、

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \sum_{i=1}^m \left| \frac{p_i}{q} \frac{\partial q}{\partial p_i} \right| \\ &= \left| \sum_{i=1}^m \frac{p_i}{q} \frac{\partial q}{\partial p_i} \right| \end{aligned} \quad (3.2)$$

と計算される。次に (1) を使うと、

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \left| \frac{1}{q} \sum_{i=1}^m p_i \frac{\partial q}{\partial p_i} \right| \\ &= \left| \frac{1}{q} kq \right| \\ &= |k| \end{aligned} \quad (3.3)$$

となる。ここの変形で以下の同次関数に関数する Euler の定理

$$\sum_{i=1}^m p_i \left( \frac{\partial q}{\partial p_i} \right) = kq(p_1, p_2, p_3, \dots, p_m) \quad (3.4)$$

を用いた。ここで  $q$  がパラメータに対し  $k$  次の同次関数であるとは、任意の  $p_1, p_2, p_3, \dots, p_m$  と任意の定数  $\lambda$  に対し、

$$q(\lambda p_1, \lambda p_2, \lambda p_3, \dots, \lambda p_m) = \lambda^k q(p_1, p_2, p_3, \dots, p_m) \quad (3.5)$$

を満たすことをさす。IMPS は L1 ノルムで定義され、MPS は同じベクトルの L2 ノルムで定義されるので、必然的に IMPS は MPS よりも大きな値となる。

以上により IMPS の定義と IMPS が一定になる条件が明らかになった。次節で先の MPS の回路の例を含め様々な例に IMPS を適用する。

### 3.3 モデルによる検証

この節では IMPS が一定となるモデルの例を示す。

図 1.1B の回路の場合 (**IMPS**) 出力は熱流  $H$

$$H = \frac{E^2}{R} \quad (3.6)$$

である。図 1.1A のシステムを図 1.1B の回路でモデル化する場合、IMPS は

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= |\text{SPS}| \\ &= \left| \frac{R}{H} \frac{\partial H}{\partial R} \right| \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.7)$$

となり、IMPS は MPS のときと同じく 1 となる。次に同じシステムから派生した図 1.1C の回路の場合を考える。

図 1.1C の回路の場合 (**IMPS**) 回路 C も B と同じく同じ出力  $H$

$$\begin{aligned} H &= \frac{E^2}{R} \\ &= \frac{E^2}{\sum_{i=1}^m R_i} \end{aligned} \quad (3.8)$$

を発している。よって C の抵抗には MPS を計算したときと同じく  $R'_1 + R'_2 + \dots + R'_m = R$  の関係が存在する。その条件のもとで

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \sum_{i=1}^m |\text{SPS}_i| \\ &= \sum_{i=1}^m \left| \frac{R'_i}{H} \frac{\partial H}{\partial R'_i} \right| \\ &= \sum_{i=1}^m \left| \frac{R'_i}{\frac{E^2}{R}} \frac{\partial \frac{E^2}{R}}{\partial R'_i} \right| \\ &= \sum_{i=1}^m \left| \frac{RR'_i}{E^2} \frac{\partial \frac{1}{R}}{\partial R'_i} \right| \\ &= \sum_{i=1}^m \left| RR'_i \frac{-1}{R^2} \right| \\ &= \sum_{i=1}^m \left| \frac{R'_i}{R} \right| \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.9)$$

となる。これらの計算により図 1.1A から派生した 2 つの等価回路である図 1.1B と C を IMPS は同じ値で定量化できることが示された。次に直列ではなく並列に 2 つの抵抗を並べた場合の IMPS も計算する。

図 1.1D の回路の場合 (IMPS) ここでも並列抵抗は回路 A と同じく熱流  $H$

$$\begin{aligned} H &= \frac{E^2}{R} \\ &= \frac{E^2}{\frac{R_1'' R_2''}{R_1'' + R_2''}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

を発生している。新たな並列抵抗をそれぞれ  $R_1''$  と  $R_2''$  とする。よって抵抗は  $R = R_1'' R_2'' / (R_1'' + R_2'')$  の関係が存在する。並列回路に対し IMPS は

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \sum_{i=1}^2 |\text{SPS}_i| \\ &= \sum_{i=1}^2 \left| \frac{R_i''}{H} \frac{\partial H}{\partial R_i''} \right| \\ &= \sum_{i=1}^2 \left| \frac{R_i''}{\frac{E^2}{R}} \frac{\partial \frac{E^2}{R}}{\partial R_i''} \right| \\ &= \sum_{i=1}^2 \left| R R_i'' \frac{\partial \frac{R_1'' + R_2''}{R_1'' R_2''}}{\partial R_i''} \right| \\ &= \left| R R_1'' \frac{-R_2''^2}{R_1''^2 R_2''^2} \right| + \left| R R_2'' \frac{-R_1''^2}{R_1''^2 R_2''^2} \right| \\ &= \left| R \frac{-R_2''}{R_1'' R_2''} \right| + \left| R \frac{-R_1''}{R_1'' R_2''} \right| \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.11)$$

のように計算される。よって直列回路モデルの際と同様に並列回路でモデル化した場合も IMPS は同一の値で定量化できることが分かった。線形抵抗回路ならどんな構造で何個の線形抵抗でモデル化されていたとしても、IMPS は不変な値になることが分かった。

次に図 3.1A のように周期  $T$  で振動している未知なシステムをばねで構成される単純な動力学系を用いてモデル化する場合を考える。

図 3.1B のばねモデルの場合 おもりの質量は既知であるとし、 $M$  と表記する。周期  $T$  を出力とみなし、ばね定数  $k$  をパラメータと考える。このとき周期は

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{M}{k}} \quad (3.12)$$

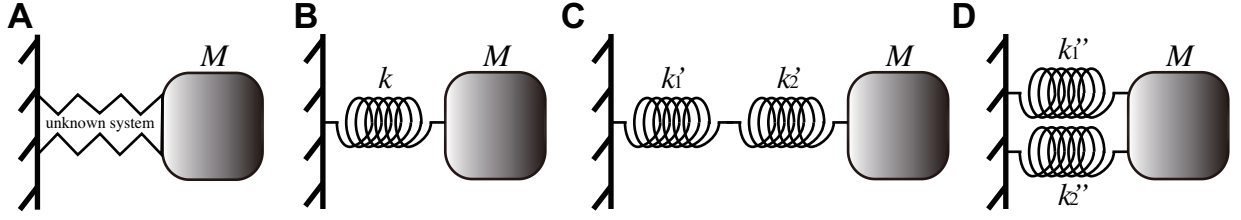


図 3.1: 直列ばねモデルと並列ばねモデル (A) 不明な部分を持つ動力学システム, (B) 未知のシステムを含む A を単一バネでモデル化したモデル, (C) 2つのばねを直列に配列しシステム A をモデル化したモデル,  $k = k_1' k_2' / (k_1' + k_2')$  のとき C のモデルの周期はシステム A やモデル B の周期と一致する, (D) 2つのばねを並列に配列しシステム A をモデル化したモデル,  $k = k_1'' + k_2''$  のとき D のモデルの周期はシステム A やモデル B の周期と一致する.

となる. このときの IMPS は

$$\begin{aligned}
 \text{IMPS} &= \left| \frac{k}{T} \frac{\partial T}{\partial k} \right| \\
 &= \left| -\frac{k}{T} \pi \sqrt{M k^{-3}} \right| \\
 &= \frac{k}{T} \pi \frac{\sqrt{M}}{k^{\frac{3}{2}}} \\
 &= \frac{\pi}{T} \sqrt{\frac{M}{k}} \\
 &= \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

と算出される. 図 3.1B のばねモデルの場合 MPS は IMPS と一致する.

図 3.1C のばねモデルの場合 C のモデルではばねが直列につながれ, ばね定数  $k_1'$  及び  $k_2'$  をパラメータとみなす. このとき,  $k = k_1' k_2' / (k_1' + k_2')$  を満たすならばシステムと同じ周期を再現できる. 周期は

$$\begin{aligned}
 T &= 2\pi \sqrt{\frac{M}{k}} \\
 &= 2\pi \sqrt{\frac{M(k_1' + k_2')}{k_1' k_2'}}
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

となる．このときの IMPS は

$$\begin{aligned}
 \text{IMPS} &= \left| \frac{k'_1}{T} \frac{\partial T}{\partial k'_1} \right| + \left| \frac{k'_2}{T} \frac{\partial T}{\partial k'_2} \right| \\
 &= \left| \frac{k_1}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{Mk'_1k'_2 - M(k'_1 + k'_2)k'_2}{k_1'^2 k_2'^2} \right| + \left| \frac{k'_2}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{Mk'_1k'_2 - M(k'_1 + k'_2)k'_1}{k_1'^2 k_2'^2} \right| \\
 &= \left| \frac{1}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{-Mk'_2}{k'_1 k'_2} \right| + \left| \frac{1}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{-Mk'_1}{k'_1 k'_2} \right| \\
 &= \frac{\pi}{T} \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{M}{k} \\
 &= \frac{\pi}{T} \sqrt{\frac{M}{k}} \\
 &= \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

と算出され，図 3.1B のばねモデルの場合の IMPS と一致する．一方 MPS は

$$\begin{aligned}
 \text{MPS}^2 &= \left[ \frac{1}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{-Mk'_2}{k'_1 k'_2} \right]^2 + \left[ \frac{1}{T} \pi \left( \frac{M}{k} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{-Mk'_1}{k'_1 k'_2} \right]^2 \\
 &= \left[ \frac{1}{T} \pi \sqrt{Mk} \frac{k'_2}{k'_1 k'_2} \right]^2 + \left[ \frac{1}{T} \pi \sqrt{Mk} \frac{k'_1}{k'_1 k'_2} \right]^2 \\
 &= \left[ \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}} \pi \sqrt{Mk} \frac{k'_2}{k'_1 k'_2} \right]^2 + \left[ \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}} \pi \sqrt{Mk} \frac{k'_1}{k'_1 k'_2} \right]^2 \\
 &= \left[ \frac{k}{2} \frac{k'_2}{k'_1 k'_2} \right]^2 + \left[ \frac{k}{2} \frac{k'_1}{k'_1 k'_2} \right]^2 \\
 &= \left[ \frac{1}{2} \frac{k'_2}{k'_1 + k'_2} \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} \frac{k'_1}{k'_1 + k'_2} \right]^2 \\
 &= \frac{k_1'^2 + k_2'^2}{4(k'_1 + k'_2)^2}
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

となる．よって

$$\text{MPS} < \frac{1}{2} \tag{3.17}$$

となり，図 3.1B のばねモデルの場合の MPS とは一致しない．

**図 3.1D のばねモデルの場合** D のモデルではばねが並列につながれ，ばね定数  $k_1''$  及び  $k_2''$  をパラメータとする．このとき， $k = k_1'' + k_2''$  を満たすことでシステムと同じ周期を再現できる．周期は

$$\begin{aligned}
 T &= 2\pi \sqrt{\frac{M}{k}} \\
 &= 2\pi \sqrt{\frac{M}{k_1'' + k_2''}}
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

となる．このときの IMPS は以下の計算で算出され，

$$\begin{aligned}
 \text{IMPS} &= \left| \frac{k_1''}{T} \frac{\partial T}{\partial k_1''} \right| + \left| \frac{k_2''}{T} \frac{\partial T}{\partial k_2''} \right| \\
 &= \left| \frac{-k_1''}{T} \pi \sqrt{\frac{M}{k^3}} \right| + \left| \frac{-k_2''}{T} \pi \sqrt{\frac{M}{k^3}} \right| \\
 &= \frac{\pi}{T} \sqrt{\frac{M}{k}} \\
 &= \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

となる．図 3.1C の直列ばねでモデル化したときと同様に，図 3.1B の単一ばねでモデル化した際の IMPS と一致する．一方図 3.1D の場合の MPS は以下のように計算され，

$$\begin{aligned}
 \text{MPS}^2 &= \left( \frac{-k_1''}{T} \pi \sqrt{\frac{M}{k^3}} \right)^2 + \left( \frac{-k_2''}{T} \pi \sqrt{\frac{M}{k^3}} \right)^2 \\
 &= \frac{(k_1''^2 + k_2''^2) \pi^2 M}{T^2 k^3} \\
 &= \frac{(k_1''^2 + k_2''^2) \pi^2 M}{\frac{4\pi^2 M}{k} k^3} \\
 &= \frac{k_1''^2 + k_2''^2}{4(k_1'' + k_2'')^2}
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

となる．よって

$$\text{MPS} < \frac{1}{2} \tag{3.21}$$

となり，これも図 3.1B のばねモデルの場合の MPS とは一致しない．ここで図 3.1C のばねモデルの場合の MPS と式の形はたまたま一致するが， $k_1'$  や  $k_2'$  と  $k_1''$  や  $k_2''$  は無関係なので値は一致しないことに注意すべきである．

### 3.4 考察

前節では未知のシステムをモデル化してパラメータ感度を測った．図 1.1A の未知のシステムのモデル化の方法は多数ありうる．その中でも線形抵抗でモデル化する場合に限って前節では検証した．MPS はモデル化によって異なる値を与え，IMPS はモデル化によらず 1 つのシステムを 1 つの値で定量化した．この回路モデルにおいて IMPS が同一の値を与えたのは，パラメータである各抵抗によって出力である熱流  $H$  が  $-1$  次の同次関数で記述されるからである．回路の例と同様に図 3.1A の周期  $T$  で振動している未知のシステムのモデル化も多数ありうる．このシステムをばねでモデル化する場合に限った場合でも MPS は異なる値を与え，IMPS はモデル化によらず 1 つのシステムに 1 つの値を与えた．このばねモデルにおいてはパラメータである各ばね定数によって出力である  $T$  が  $-1/2$  次の同次関数で記述されるからである．

これらの例により MPS は、モデル化やパラメータの数に依存して値を変化させることが分かる。したがってある未知のシステムをモデル化する際そのモデル化によって値を変動させてしまう MPS は、システムのパラメータ感度を測る指標としてはふさわしくないことがわかる。一方パラメータ感度の新たな指標 IMPS は今回示した例のような場合にはモデル化の方法によらずシステムのパラメータ感度を定量化できることが分かった。これはそれぞれのモデルにおいて、パラメータと出力が同次関数で記述され、各パラメータの SPS の符号が一致したからである。

本章の例において、IMPS がモデル化やパラメータ数によらない形でシステムのパラメータ感度を定量化ができたのは、これらのモデルが 3.2 節に示した 2 つの条件を完全に満たしていたからである。しかし 3.2 節の 2 つの条件は必ずしも全てのシステムのモデルにおいて満たされるものではない。そこでこれらの 2 条件が必ずしも満たされないモデルにおける IMPS の挙動を第 5 章で見る。次章では第 5 章で必要となる複雑ネットワークに関する説明を行う。

## 第4章 複雑ネットワーク

### 4.1 はじめに

近年複雑ネットワークが広く注目されている [17–21]. 人や社会, 回路, コンピュータ, 道路, 遺伝子などのあらゆるつながりはネットワークとして見るができる. そのときそれぞれのつながりを線で表すことができ, 人や素子, コンピュータや遺伝子はそのつながりの出発点である. この点と線でネットワークは構成される. これらのネットワークはしばしば複雑ネットワークと呼ばれる. これらの複雑ネットワークは単に乱雑なのではなく, さまざまな興味深い特徴や構造を持っていることが知られ, 広く研究されるに至っている.

現実世界のネットワークの性質を研究する学問分野をネットワーク理論と言う. 数学の一分野として類似の対象を扱うグラフ理論がある. グラフ理論では抽象化された点や線で構成されるネットワークをグラフと呼び, その性質が探求されてきた. グラフ理論では点をノードや頂点と言ひ, 線をエッジやリンク, 辺, 枝と言う. グラフ理論は Leonhard Euler のケーニヒスベルクの橋の問題に端を発すると言われる. ケーニヒスベルクの橋の問題とはプロイセン王国の首都であったケーニヒスベルクを流れるプレーゲル川にかかる 7 つの橋に関する問題である. どこから出発してもよいとき, 7 つの橋を 2 度渡らずに全ての橋を渡り, 元の場所に戻って来ることができるか, という問題である. これは任意の図形が一筆書き可能かという問題にも拡張可能な問題であり Euler によって解決された.

ケーニヒスベルクの橋のように両側通行の橋や人の友人関係などのように常に双方向のつながりしかないネットワークは無向グラフと呼ばれる. また一方通行を含む道路網や遺伝子フィードバックなどのように一方方向のつながりを含むネットワークは有向グラフと呼ばれる. 無向グラフは有効グラフの部分集合である.

本章では複雑ネットワークの先行研究についてまとめる. まず第 4.1 節では複雑ネットワークを特徴づける代表的な指標に触れる. 第 4.2 節では複雑ネットワークの代表的なモデルとして Erdős–Rényi ネットワーク [37] と Watts–Strogatz ネットワーク [18], Barabási–Albert ネットワーク [17] に触れる.

### 4.2 ネットワークを特徴づける指標

日常の生活の中で思いがけない所で知人に会ったり, 初めて会った人と共通の知人がいると「世間は狭いですね」などと言う. それを英語では “It’s a small world!” という決まり文句で言う. このようなネットワーク上の 2 つのノードが予想以上に近い関係にある特徴を, この決まり文句からスモールワールド性と言う. ネットワーク理論で言えば人がノードであり, 知人とのつながりがエッジである. このようなスモールワールド性を示した最も代表的な実験の 1 つが社会心理学者 Stanley Milgram のスモールワールド実験である [38].

Milgram はアメリカはネブラスカ州のオマハの住人をランダムに選びボストンに住む株主仲買人まで知り合いを通じて手紙を転送してもらうという実験を行った。各被験者は目標人物を親しい知人へ手紙を転送し、転送された知人も次の知人へと転送する、ということを目指人物に届くまで繰り返す。出発点及び中継点となる人間は目標人物までの最短経路を知らないで、だいたい遠回りすることが予想されたが、実際には平均6人程度を介して届いた [38]。同様の実験は多く行われており、日本でも行われている [39]。

Milgram のスモールワールド実験によって、知人のネットワークにおいて任意の2点は意外と近いことが分かった。この実験では必ずしも最短経路にはならないが、最短経路が短いのは間違いない。よって最短経路でネットワークを特徴付ける試みが考えられる。そのネットワークを特徴付ける指標が、任意の2つのノードの最短経路の距離である。この最短距離のネットワーク全体での平均を、ネットワークの平均頂点間距離や固有パス長、直径とも言う。ノード数  $N$  のうちノード  $i$  からノード  $j$  へ最短でいくつのエッジを通して到達するかという最短距離を  $d_{ij}$  とする。平均頂点間距離  $L$  は

$$L = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{\{i,j\}} d_{ij} \quad (4.1)$$

で定式化される。ここで  $\sum_{\{i,j\}}$  はネットワーク上の任意のノード  $i$  と  $j$  に関する総和をさす ( $i \neq j$ )。Milgram のスモールワールド実験で最短距離が辿られたと仮定すると、合衆国の人間関係のネットワークの  $L$  が6程度であるということである。スモールワールド性とは  $N$  が大きくなっても  $L$  が小さいことを指し、典型的には  $L \propto \log N$  となっているネットワークが多いことが知られている。このように平均頂点間距離  $L$  はネットワークを特徴づける強力な指標の1つである。冗談めいてはいるが似たような指標として Erdős 数や Bacon 数がある。Erdős 数とは数学者の Paul Erdős にちなんでおり、数学者や科学者の共著関係を表す指標である。共著者の共著者、またその共著者と最短経路をたどった際、何人の共著者をたどれば Erdős にたどり着くかというのが Erdős 数である。また同様に Bacon 数は Kevin Bacon というアメリカの俳優にちなんでおり、役者の共演関係を表した指標である。共演者の共演者、またその共演者と最短経路をたどった際、何人の共著者をたどれば Bacon にたどり着くかというのが Bacon 数である。このような冗談めいた指標が存在するほど、最短経路及びその平均はネットワークを特徴づける重要な指標であると言える。

平均距離やスモールワールド性以外にも、ネットワーク理論でよく使われる用語として「次数」がある。次数とは各ノードが持っているエッジの数を表す。また、各次数ごとのノード数の分布をまとめたものを次数分布と呼ぶ。複雑ネットワークでしばしばハブ性が指摘される。ハブ (hub) とは自転車などの車輪の中心のことを本来指す言葉で、ネットワークにおいては特に次数が大きなノードのことをハブと呼ぶ。例えばインターネットの World-Wide Web などは次数分布がべき関数にしたがっておりハブがあると言える [19, 40]。このようにべき関数に従う法則をべき則と言う。べき関数はロングテール (long tail) と呼ばれるなどらかに長い裾野を持つ。次数分布がべき則に従うとき、裾野が長いので非常に大きな次数を持つノードが現れる。そのノードがハブであり、そのようなネットワークはスケールフリーであると言われる。つまり複雑ネットワークの特徴の1つ、スケールフリー性とは次数分布のべき則によって特徴づけられる。そのようなスケールフリーネットワークを人工に作るモデルで最も代表的なものが、Barabási-Albert ネットワーク [17] である。Barabási-Albert ネットワークの生成方法は次節で紹介する。

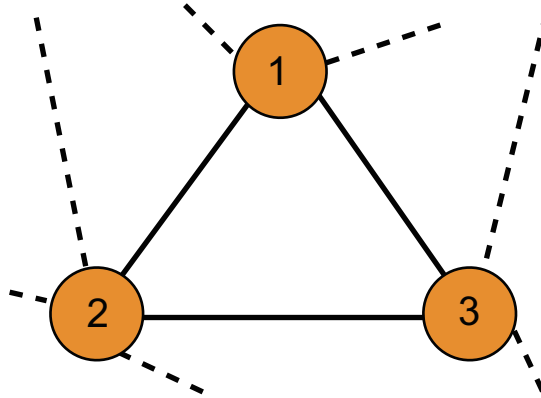


図 4.1: ネットワークにおけるクラスター 図のような三角形部分はクラスターと呼ばれる。

平均距離やスモールワールド性，次数分布，スケールフリー性だけが複雑ネットワークの特徴ではない．コミュニティ構造も重要な特徴である．人間関係においては共通の知人を持つ2人は，無作為に選んだ2人よりも，当人同士も知人である可能性が高いコミュニティ構造を持っている [41–43]．コミュニティ構造とは，複数個のノードが1つの集団に対応づけることができる構造を指し，モジュールなどともよばれる．またある人 (1) の知人 (2) と別の知人 (3) が直接の知人であるという状況をグラフで表すと図 4.1 のように三角形になる．このようにネットワーク上に出てくる三角形をクラスターと呼ぶ．クラスターとはもともとブドウなどの果実の房のことを指し，ブドウの粒のように個が連携した集合体を指す．そこから様々な分野で個が集まった一塊をクラスターと言うことが多い．ただしネットワーク理論でのクラスターとは三角形のつながりをさすことが多く，このような三角形のつながりの多少を定量化する代表的な指標にクラスター係数がある．クラスター係数とは図 4.1 のようなクラスターがどれほどの頻度で見られるか，を表した指標である．ここであるノード  $i$  の次数を  $k_i$  とする．ノード  $i$  に隣接するノード  $k_i$  個の中から2個のペアを選ぶ方法は  $k_i(k_i - 1)/2$  通り存在する．これらのペアの内，いくつのペアが直接のエッジでつながっているかを  $q_i$  で表すとする．このときノード  $i$  のクラスター係数  $C_i$  は

$$C_i = \frac{2q_i}{k_i(k_i - 1)} \quad (4.2)$$

で表される．これによりノード  $i$  に直接つながっているノード間で，どれほどの割合で直接のエッジが存在するかが分かる．これは人間関係のネットワークで言えば，ある人の友達2人が互いに直接の友達である可能性を示している．このクラスター係数をノード全体で平均をとった指標は平均クラスター係数と呼ばれる．

### 4.3 Watts–Strogatz ネットワークと Barabási–Albert ネットワーク

ネットワークの構造には種類がある．基本的なネットワークとしてはコンプリートグラフ (complete graph) や regular random ネットワーク，Erdős–Rényi ネットワークなどが挙げられる．コンプリートグラフとは，全てのノードが自分自身以外の全てのノードとエッ

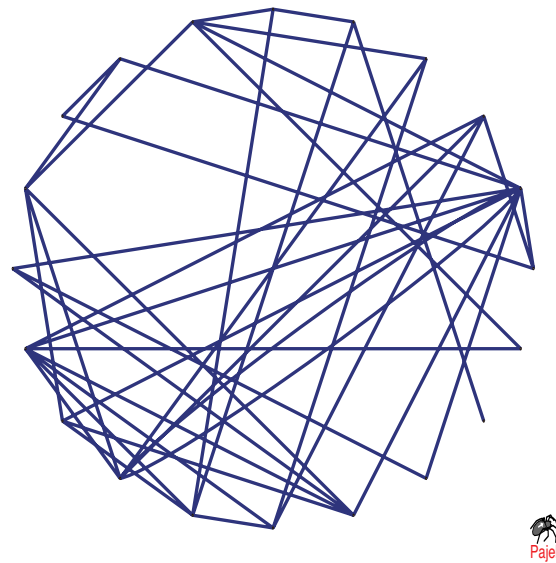


図 4.2: **Erdős–Rényi** ネットワーク ノード数 20 の Erdős–Rényi ネットワークである。描画には Pajek を用いた [<http://pajek.imfm.si/doku.php>].

ジをもっているネットワークである。また regular random ネットワークとは全てのノードが同じ次数を持ち、結合の仕方はランダムであるネットワークである。Erdős–Rényi ネットワークとはランダムグラフとも言われるネットワークで、以下で詳しく説明する。もちろん実ネットワークの特徴量や特性をコンプリートグラフや regular random ネットワーク、Erdős–Rényi ネットワークの性質のみでは説明できないため、他にも多数のネットワークが提案されてきている [17, 18, 37]。本節では複雑ネットワークの中でも最も代表的なネットワークの内、3つのネットワークについて紹介する。

**Erdős–Rényi ネットワーク** 1つ目のネットワークが Paul Erdős と Alfréd Rényi が提案した Erdős–Rényi ネットワーク [37] である。Erdős–Rényi ネットワークはランダムネットワーク、ランダムグラフとも呼ばれるネットワークである。代表的な作り方は以下の通りである。

1. まずノードを  $N$  個用意する。
2. 全ノードの中からランダムに異なる 2つのノード  $i$  と  $j$  を選ぶ。
3. 選ばれたノード  $i$  と  $j$  をエッジで結ぶ。
4. 同じ 2つのノード間に多重にエッジを配線しないようにランダムにノードを選びつつ 2-3 を繰り返す。

このようにして作られたネットワークが図 4.2 である。ネットワークの次数分布はポワソン分布になることが知られる [37]。

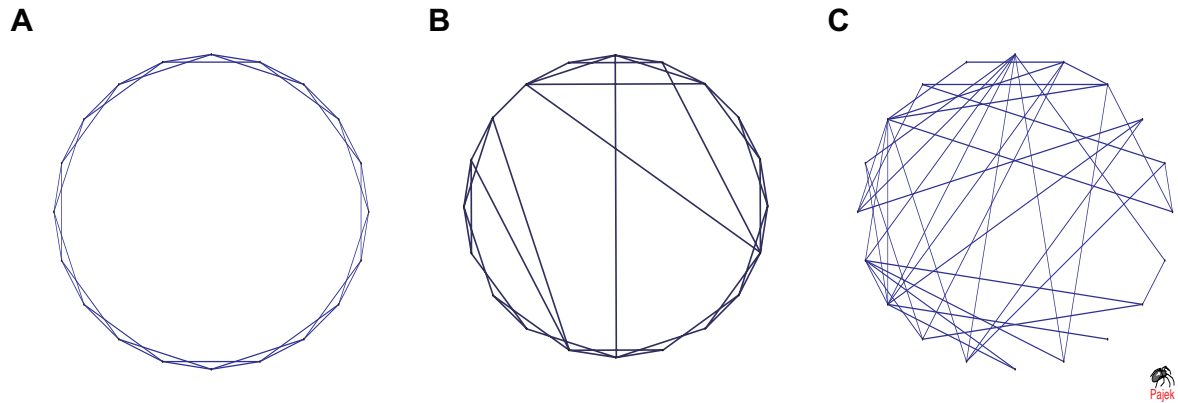


図 4.3: **Watts–Strogatz ネットワーク** (A) ノード数 20, 平均次数 4 の regular ring lattice. (B) ノード数 20, 平均次数 4, つなぎ替え確率  $p = 0.1$  の Watts–Strogatz ネットワーク. (C) ノード数 20, 平均次数 4, つなぎ替え確率  $p = 1$  のランダムネットワーク. 全てのネットワークは Pajek で描画した.

**Watts–Strogatz ネットワーク** 2つ目のネットワークが Watts–Strogatz ネットワークである。Watts–Strogatz ネットワークは Duncan Watts と Steven Strogatz によって提案されたネットワークである [18]。4.2 節の「ネットワークを特徴づける指標」でも触れたように人間関係などの実ネットワークにはスモールワールド性が見られる [38, 39]。このような特徴を持つ代表的なネットワークが Watts–Strogatz ネットワークである [18]。

ここでは例として平均次数  $k$  でノード数  $N$  個の Watts–Strogatz ネットワークを作る場合を考える。まず前段階として全てのノードを円形に配置したとき、どのノードも両側  $k/2$  個隣りまで結合しているネットワークを考える。ネットワーク全体で  $kN/2$  本のエッジが存在する。これらのあるつなぎ替え確率  $p$  でつなぎ替える。つまり  $kN/2$  本のエッジの中からランダムに  $pkN/2$  本のエッジを選び、ランダムなノードと結合させることで Watts–Strogatz ネットワークは作られる。このようにつなぎ替えられて新たに作られたエッジを shortcut と呼ぶ。例えば平均次数 4 の Watts–Strogatz ネットワークを作るとき、まず前段階として平均次数 4 の regular ring lattice を作る。平均次数 4 の regular ring lattice とは図 4.3A のように、各ノードがその両隣とさらに隣までと結合しているネットワークである。 $N$  個のノードが円環状に配置され、 $2N$  本のエッジで隣と又隣まで結合されている。この  $2N$  本のうち  $2pN$  本をつなぎ替えることで図 4.3B のような Watts–Strogatz ネットワークができる。エッジをつなぎ替えているだけなので、最初に設定された平均次数  $k$  はでき上がった Watts–Strogatz ネットワークでも保存されている。つなぎ替え確率  $p = 0$  のときは元の regular ring lattice が保存され、 $p = 1$  の場合は全てのエッジがつなぎ替えられ、図 4.3C のようなランダムネットワークとなる。実際に Watts–Strogatz ネットワークを生成する際は、各エッジを逐次的に確率  $p$  でつなぎ替えるかつなぎ替えないかを決定する。つなぎ替える際はエッジの両端のうち片方の端点をランダムに選択し、他のノードへとその端点を結合させる。そのとき多重にエッジを配線しないように気を付ける。これらを繰り返し Watts–Strogatz ネットワークの生成が行われる。

**Barabási–Albert ネットワーク** 3つ目のネットワークは Barabási–Albert ネットワークである。Barabási–Albert ネットワークとは Albert-László Barabási と Réka Albert によって提案された典型的な成長型スケールフリーネットワークである [17]。Barabási–Albert ネットワークでは次数分布はべき則となる。ノード数  $N$  個で平均次数  $k$  の Barabási–Albert ネットワークは以下の手順で生成される。

1. まずノードを  $m$  個用意する。ここで  $m$  は  $N$  より十分小さい整数を仮定している。これらをコンプリートグラフでつなぐ。
2. ここに  $k$  本のエッジを持つノードを 1 つ加える。その際のエッジの既存のノード  $i$  への結合確率  $p_i$  は

$$p_i = \frac{k_i}{\sum_{j=1}^n k_j} \quad (4.3)$$

とする。ここで新たにノードを加える時点での既存のノード数を  $n$  個、ノード  $i$  の次数を  $k_i$  とした。

3. 必要な個数  $N$  個になるまで 2 を繰り返す。

この手順における結合確率は、現存する全エッジ数で各ノードの次数を割った確率である。大きな次数を持つノードは次のノードを加えるときに新たにエッジを持つ可能性が高い。このような特性から「金持ちはより金持ちになる」という意味で rich-get-richer モデルなどと呼ばれる。このような特性を優先的接続、優先的選択 (preferential attachment) とも言われる。この特性からスケールフリーネットワークに特徴的なハブ構造が Barabási–Albert ネットワークにも見られる (図 4.4)。また Barabási–Albert ネットワークの平均頂点間距離はスモールワールド性も満たす [44]。

次章では本章で触れたコンプリートグラフ, regular random ネットワーク, Watts–Strogatz ネットワーク, Barabási–Albert ネットワーク, Erdős–Rényi ネットワークを用いて数値シミュレーションを行う。regular random ネットワークの生成には MATLAB の Random-Regular-Generator を用いた [<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/29786-random-regular-generator>]。Watts–Strogatz ネットワークは MATLAB を用いて生成した。そして Barabási–Albert ネットワークは Gephi complex generators を用いて生成された [<https://github.com/cbartosiak/gephi-plugins/tree/complex-generators>]。

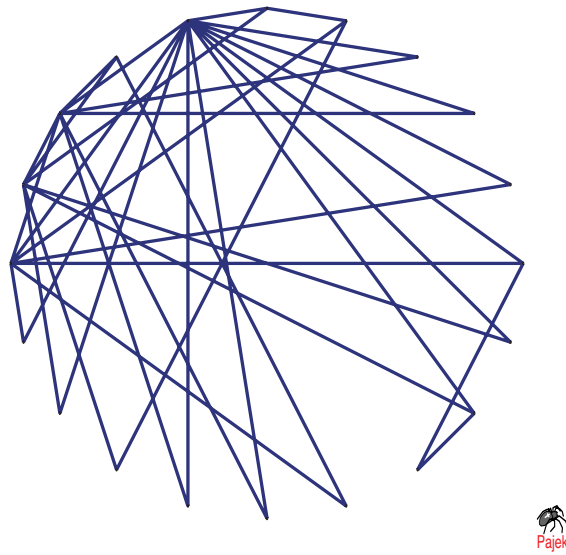


図 4.4: **Barabási–Albert** ネットワーク ノード数 20 の Barabási–Albert ネットワークの一例. ノードが 1 つ増えるたびにエッジが 2 本増えるようにして生成した. Pajek で描画した.



## 第5章 複雑ネットワーク上の動力学系を IMPSで特徴づける

第3章でIMPSを定義し、それを用いる例を示した。あるシステムをモデル化する際、IMPSを用いれば、パラメータの取り方やモデル化の仕方によらず、システムのパラメータ感度を一意に定量化できる場合があることが分かった。またモデルが第3章で示した2条件を満たせば、IMPSは1つのシステムに対して1つの値で定量化できることが明らかにされた。2条件とは

- (1) 出力  $q$  がパラメータの  $k$  次の同次関数として表現できること
- (2) 全てのパラメータについてのSPSの符号が一致していること

であった。本章では必ずしもこの2条件が満たされない場合について検討する。まずは線形な動力学モデルを用いて(2)の条件が必ずしも満たされない場合について検討する。その後(1)の条件も必ずしも満たされない非線形な動力学モデルをIMPSで特徴づける場合を検討する。線形及び非線形な動力学モデルとしては、前章で紹介した複雑ネットワーク上で相互作用する動力学系を使用する。

### 5.1 線形動力学モデル

先の2条件のうち2つ目の条件が満たされず、全てのパラメータについてのSPSの符号が必ずしも一致しない線形動力学モデルの感度を、IMPSがどのように定量化をするかを本節で示す。複数の素子が相互作用した系でモデル化することのできるシステムは多数存在する[45–49]。このようなシステムの線形モデルとして一次元上の  $N$  個の粒子が相互に引きあっている動力学系を考える。粒子  $i$  の位置を  $x_i$  とし、速度を  $\dot{x}_i$  と記述する。これらの粒子は結合行列  $\mathbf{W} = (W_{ij})$  を介して引きあっている。この結合行列  $\mathbf{W}$  は対称行列で、負の要素を持たず、連結グラフ (connected graph) であると仮定する。連結グラフとはネットワークのいかなるノードからもエッジを辿っていくことで全てのノードに辿り着くことができるグラフのことを指す。ダイナミクスは

$$\begin{aligned}\dot{x}_i &= \frac{dx_i}{dt} \\ &= b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} (x_j - x_i)\end{aligned}\tag{5.1}$$

で定義される。ここで  $b_i$  は相互作用のない場合の粒子  $i$  の速度である。また移動座標系で考えることで、一般性を失うことなく以下のように速度  $b_i$  の平均を 0 であると仮定すると

$$\sum_{i=1}^N b_i = 0 \quad (5.2)$$

となる。また同様に一般性を失うことなく、位置の平均も 0 であると仮定でき

$$\sum_{i=1}^N x_i = 0 \quad (5.3)$$

となる。先のダイナミクスを行列表現にすると

$$\dot{\vec{x}} = \vec{b} + \mathbf{W}\vec{x} - \mathbf{W}^d\vec{x} \quad (5.4)$$

となる。ここで  $\mathbf{W}^d$  を

$$\mathbf{W}^d = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^N W_{1j} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sum_{j=1}^N W_{2j} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{j=1}^N W_{3j} & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sum_{j=1}^N W_{Nj} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

と定義した。

## 5.2 解析と結果：線形動力学モデル

結合行列の Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  は

$$\mathbf{L} = \mathbf{W}^d - \mathbf{W} \quad (5.6)$$

で定義される [50, 51]。今扱っているモデルでは、Laplacian 行列は非負定値 (nonnegative-definite) であるため、粒子の位置は固定点に収束する。収束後の定常状態にあるとき

$$\dot{\vec{x}} = \vec{b} - \mathbf{L}\vec{x} = 0 \quad (5.7)$$

の関係式を満たす。このモデルの出力としては、定常状態における粒子の位置の分散  $V$  をとる。またパラメータ感度を測る際のパラメータとしては各結合荷重  $W_{ij}$  をとる。つまりパラメータを結合荷重  $W_{ij}$  とし、出力を分散  $V$  としたうえで、パラメータ感度を測る。結合行列として連結グラフを想定しているので、粒子らがばらばらに離れて行くことはない。よって定常状態での粒子の位置の分散が定義できなくなることはない。また連結グラフを想定しているため Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  の rank は  $N - 1$  となる [51]。ここで Laplacian 行列は定義より

$$\mathbf{L}\vec{1} = \vec{0} \quad (5.8)$$

を満たすことに注意する．上記の式では  $\vec{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$ ,  $\vec{0} = [0, 0, \dots, 0]^T$  と表記した．Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  は実対称行列である．よって Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  は

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i \vec{u}_i \vec{u}_i^T \quad (5.9)$$

と展開することができる．ここで  $\vec{u}_i$  は Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  の固有ベクトルであり， $\vec{u}_i$  に対応する固有値を  $\lambda_i$  と表記した．またこのとき  $\vec{1} \perp \vec{u}_i$  が成り立つ．ここで Laplacian 行列  $\mathbf{L}$  が正則行列でないため，式 (5.1) を解くために  $\mathbf{L}$  の逆行列を使うことはできない．よってここで新たに 0 でない定数  $\beta$  を用いて正則な実対称行列  $\tilde{\mathbf{L}}$  を

$$\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{L} + \beta \mathbf{1} \quad (5.10)$$

で定義する．この式での  $\mathbf{1}$  は

$$\mathbf{1} = \vec{1} \vec{1}^T \quad (5.11)$$

で定義した．この  $\tilde{\mathbf{L}}$  を用いて，式 (5.7) の解

$$\vec{x} = \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \quad (5.12)$$

を得ることができる．式 (5.4) に左から  $\vec{1}$  をかけることで，この解が  $\sum_{i=1}^N x_i = 0$  を満たすことが分かる．出力である分散  $V$  は  $\tilde{\mathbf{L}}^{-1}$  も対称行列であるので

$$\begin{aligned} V = \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}}{N} &= \frac{1}{N} \vec{b}^T (\tilde{\mathbf{L}}^{-1})^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \\ &= \frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \end{aligned} \quad (5.13)$$

と計算される．この後の計算ではパラメータは  $W_{ij}$  である．よって全ての  $W_{ij}$  の変化に対する出力の感度を測る．しかしながら正則行列にするために便宜上  $\beta$  という新たなパラメータを導入したので，この新たなパラメータ  $\beta$  に関する出力のパラメータ感度も測る必要がある．しかし

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial \beta} &= -\frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial \beta} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial \beta} \right) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \\ &= -\frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \left( \mathbf{1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{1} \right) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \\ &= -\frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \left( \frac{2N}{\beta} \mathbf{1} \right) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \\ &= -\frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \frac{2N^2}{\beta^2} \mathbf{1} \vec{b} \\ &= -\frac{1}{N} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \frac{2N^2}{\beta^2} \vec{0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

と計算されるので、出力  $V$  は  $\beta$  に依存せず、 $\beta$  に関する感度は考慮に入れなくてもよいことが分かる。ここでの式変形では以下の関係式

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}^{-1}}{\partial \beta} = -\tilde{\mathbf{L}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial \beta} \tilde{\mathbf{L}}^{-1}, \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial \beta} = \mathbf{1}, \quad (5.16)$$

$$\tilde{\mathbf{L}}^{-1} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\lambda_i} \vec{u}_i \vec{u}_i^T + \frac{1}{\beta} \mathbf{1}, \quad (5.17)$$

$$\mathbf{1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} = \frac{N}{\beta} \mathbf{1} \quad (5.18)$$

を用いた。これらを使ってIMPSを算出すると

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \sum_{\langle ij \rangle} \left| \frac{W_{ij}}{V} \frac{\partial V}{\partial W_{ij}} \right| + \left| \frac{\beta}{V} \frac{\partial V}{\partial \beta} \right| \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} \left| \frac{W_{ij}}{V} \frac{\partial \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b}}{\partial W_{ij}} \right| + \frac{1}{N} \left| -\frac{\beta}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} (\mathbf{1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{1}) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} \left| -\frac{W_{ij}}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial W_{ij}} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial W_{ij}} \right) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &\quad + \frac{1}{N} \left| -\frac{\beta}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} (\mathbf{1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{1}) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \end{aligned} \quad (5.19)$$

となる。ここで  $\langle \rangle$  は  $W_{ij} \neq 0$  の結合  $(i, j)$  に関する総和を意味する。IMPSを数値的に計算する際はこの式5.19を用いて計算することができる。ここで

$$\sum_{\langle ij \rangle} W_{ij} \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}}{\partial W_{ij}} = \mathbf{L} \quad (5.20)$$

を用いて、全てのSPSの符号が一致していると仮定するとIMPSは

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \frac{1}{N} \left| -\frac{1}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} [\mathbf{L} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{L}] \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} - \frac{\beta}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} (\mathbf{1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{1}) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &= \frac{1}{N} \left| -\frac{1}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} [(\mathbf{L} + \beta \mathbf{1}) \tilde{\mathbf{L}}^{-1} - \tilde{\mathbf{L}}^{-1} (\mathbf{L} + \beta \mathbf{1})] \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &= \frac{1}{N} \left| -\frac{1}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} [\tilde{\mathbf{L}} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \tilde{\mathbf{L}}] \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &= \frac{1}{N} \left| -\frac{2}{V} \vec{b}^T \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \tilde{\mathbf{L}}^{-1} \vec{b} \right| \\ &= \left| -\frac{2V}{V} \right| \\ &= 2 \end{aligned} \quad (5.21)$$

と計算することができる。よって全てのSPSが同符号であると仮定すると、ネットワークの粒子数や構造に関わらずIMPSは2になる。これは分散  $V$  が各パラメータ  $W_{ij}$  の-2次の同次関数として表されることに起因する。

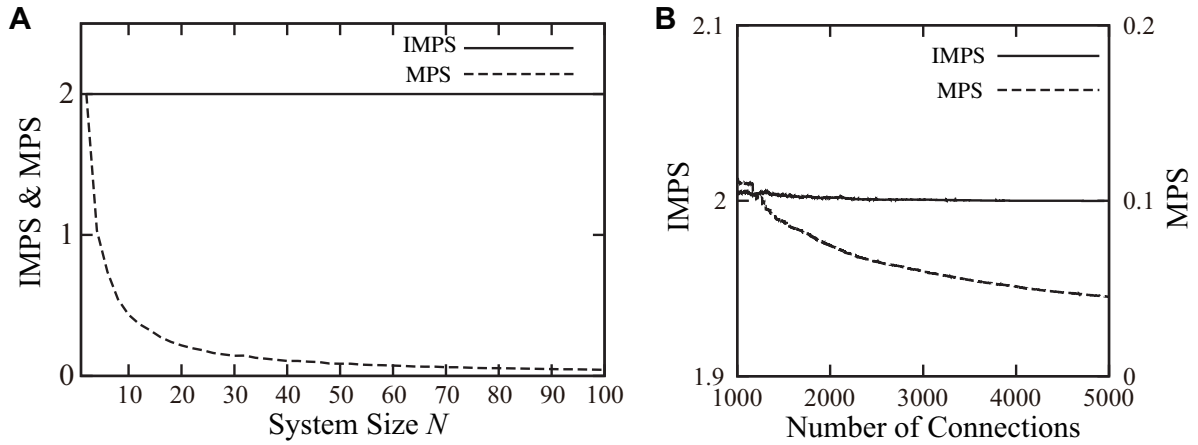


図 5.1: 線形動力学モデルにおける **IMPS** (実線) と **MPS** (破線) パネル A は  $N$  の関数としての **IMPS** と **MPS** を表している. パネル B は  $N = 100$  での結合数の関数としての **IMPS** と **MPS** を表している.

次に、この仮定が成り立っているのかどうかを数値シミュレーションで確かめる. 図 5.1A のシミュレーションでは粒子数  $N$  の違うコンプリートグラフを考える. 結合荷重は  $i = j$  の自己結合ならば  $W_{ij} = 0$ , それ以外なら  $W_{ij} = 1$  とした. また個々の粒子の速度  $b_i$  は平均 0 分散 1 の正規分布に従うものとした. この線形動力学モデルにおいて, 粒子数  $N$  を 2 から 100 の範囲で変化させて, **IMPS** と **MPS** を比較した. 図 5.1A から分かるように, **IMPS** は粒子数が変化しても常に 2 となる. これは先の仮定の通り, 全ての SPS が同符号であるということを示している. 一方 **MPS** は粒子数  $N$  が大きくなるにつれて減少している. これは **MPS** がパラメータ数に強く依存していることを意味する. コンプリートグラフを考えているので粒子数が  $M$  倍になるとパラメータ数は  $M^2$  のオーダーで増える. パラメータ数が  $M^2$  倍になるならば, **MPS** は大まかに  $1/M$  になる. この概算に沿った変化を図 5.1A でも見ることができる.

次に粒子数が一定で結合数が変化する場合を考える. 図 5.1B の数値シミュレーションでは, 全結合した  $N = 100$  の粒子から 1 本ずつ結合を切っていく, その都度 **IMPS** と **MPS** の変化を見た. 結合を切っていくのでその都度,  $\mathbf{W}$  が連結グラフであることを確かめている. 粒子の結合は各時刻では Erdős-Rényi ネットワークになっている [37]. 結合数の関数として **IMPS** と **MPS** の変化を表したのが図 5.1B である. 結合数が減っても, **IMPS** はほぼ 2 の値をとっている. **IMPS** よりも **MPS** の方がより強く結合数に依存することが分かる. 図 5.1 の結果から, これらの線形動力学モデルでは全ての SPS が同符号であるという仮定はほぼ満たされており, 粒子数  $N$  や結合数に依存しない形で **IMPS** はモデルを特徴づけることが分かった.

先の式 (5.21) の計算において絶対値の中身は  $-2$  になる. これは各パラメータについての SPS が同符号であるとき, その出力は各パラメータの  $-2$  次の同次関数で表現されるということである. つまり **IMPS** がちょうど 2 となっているコンプリートグラフにおいて, 各結合と出力の関係が  $-2$  次の同次関数となっており, どの結合が正に微小変化しても分散は小さくなる. ただし図 5.1B において **IMPS** は 2 よりわずかではあるが大きな値をとっている. これは一部の SPS の符号が揃わなくなっていることを表す. それではどのような時に SPS

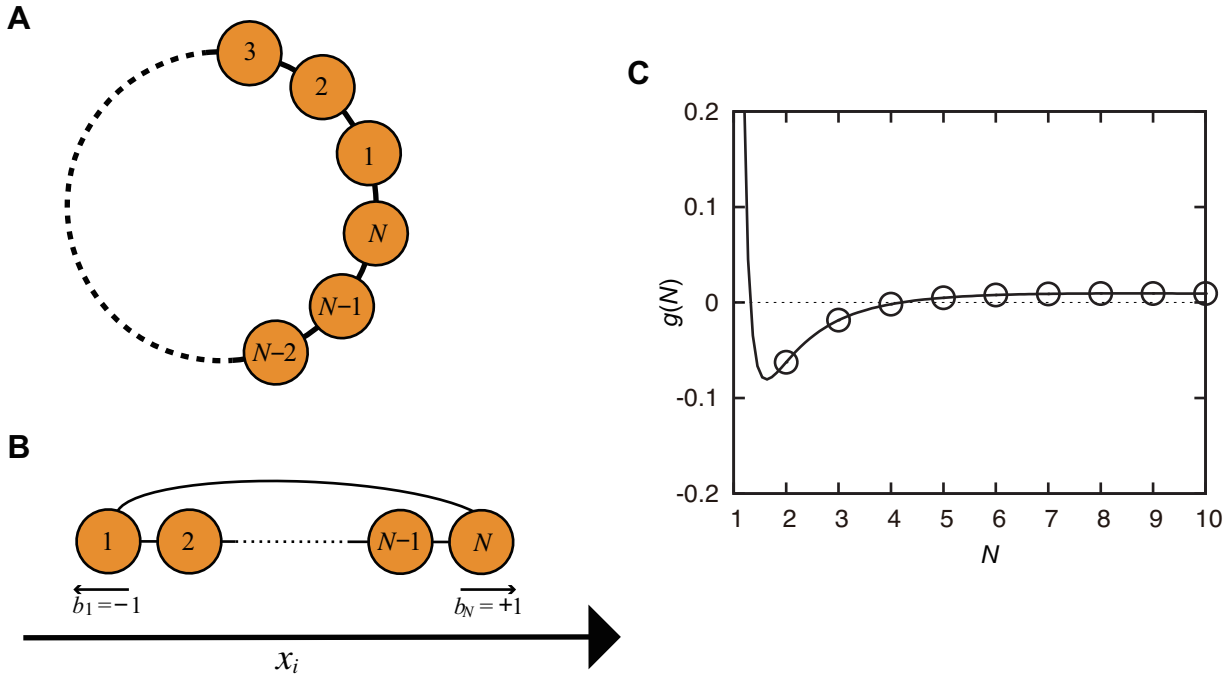


図 5.2: Ring graph, ring graph 上の粒子, 異なる長さの ring graph における IMPS

(A)  $N$  個のノードをもつ ring graph の模式図. (B)  $N$  個のノードを持つ ring graph 上の粒子の一次元軸上の運動. (C) 異なる長さを持つ ring graph 上の粒子の一方の端の結合を無限大にしたときの IMPS の変化. 粒子数  $N$  の関数として表現されている.  $N \geq 2$  が整数のときの値を丸印で示した.

の符号が揃わなくなるのだろうか.

コンプリートグラフではどの結合を正に微小変化させても, 分散は小さくなる. しかし大きくなる場合もあるので一例を示す. ここで粒子間の結合ネットワークとして図 5.2A のような  $N$  個の粒子の ring graph を考える. ここで  $-b_1 = b_N = 1$  であり,  $1 < i < N$  に対しては  $b_i = 0$  である場合を考える. また一定の結合強度  $\alpha$  で各粒子が相互作用しあっている. このときの粒子の位置の模式図が図 5.2B である. このときこの粒子相互作用系のダイナミクスは

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1 &= -1 + \alpha(x_2 - x_1) + \alpha(x_N - x_1), \\
 \dot{x}_2 &= \alpha(x_3 - x_2) + \alpha(x_1 - x_2), \\
 &\vdots \\
 \dot{x}_{N-1} &= \alpha(x_N - x_{N-1}) + \alpha(x_{N-2} - x_{N-1}), \\
 \dot{x}_N &= 1 + \alpha(x_{N-1} - x_N) + \alpha(x_1 - x_N)
 \end{aligned} \tag{5.22}$$

と書ける. ここで  $x_{N-1}$  と  $x_N$  の間の結合が  $\alpha$  から無限大になったときの分散の変化を算出する. まず  $x_{N-1}$  と  $x_N$  の間の結合が  $\alpha$  のときの結合強度の分散を算出する. 定常状態での

ダイナミクスは

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1 &= -1 + \alpha\Delta x + \alpha(N-1)\Delta x = 0, \\
 \dot{x}_2 &= \alpha\Delta x - \alpha\Delta x = 0, \\
 &\vdots \\
 \dot{x}_{N-1} &= \alpha\Delta x - \alpha\Delta x = 0, \\
 \dot{x}_N &= 1 - \alpha\Delta x - \alpha(N-1)\Delta x = 0
 \end{aligned} \tag{5.23}$$

と書ける．ここで  $\Delta x$  は

$$\begin{aligned}
 \Delta x &= x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \cdots = x_{N-1} - x_{N-2} = x_N - x_{N-1} \\
 &= \frac{1}{\alpha N}
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

と置いた．ここで移動座標系に乗ることで  $x_1 = 0$  と一般性を失う事なく仮定することができる．このとき各粒子の位置は

$$x_n = (n-1)\Delta x \tag{5.25}$$

となる．よって  $x_i$  の平均と二乗平均から分散が算出される．平均は

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[x_n] &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (n-1)\Delta x \\
 &= \frac{\Delta x}{N} \sum_{n=1}^N (n-1) \\
 &= \frac{(N-1)\Delta x}{2}
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

となる．二乗平均は

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[x_n^2] &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [(n-1)\Delta x]^2 \\
 &= \frac{\Delta x^2}{N} \sum_{n=1}^N (n-1)^2 \\
 &= \frac{(N-1)(2N-1)\Delta x^2}{6}
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

となる．よって分散は

$$\begin{aligned}
 \mathbb{V}[x_n] &= \mathbb{E}[x_n^2] - (\mathbb{E}[x_n])^2 \\
 &= \frac{(N-1)(2N-1)\Delta x^2}{6} - \left( \frac{(N-1)\Delta x}{2} \right)^2 \\
 &= \frac{(N-1)(2N-1)\Delta x^2}{6} - \frac{(N-1)^2\Delta x^2}{4} \\
 &= \frac{(N-1)(N+1)\Delta x^2}{12} \\
 &= \frac{(N-1)(N+1)}{12\alpha^2 N^2}
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

と算出される。これにより結合荷重を変化させる前の定常状態での粒子の位置の分散が得られた。次に  $W_{N-1 N} \rightarrow \infty$  としたときの、定常状態における粒子の位置の分散を求める。結合行列は対称であると仮定しているので、 $W_{N-1 N} = W_{N N-1}$  である。ここで結合荷重を変化させる前の  $x_i$  と区別する為に、粒子の位置を  $x'_i$  とする。結合荷重を変化させたとき、 $x_{N-1} = x_N$  となる。よって定常状態でのダイナミクスは

$$\begin{aligned}
 \dot{x}'_1 &= -1 + \alpha(x'_2 - x'_1) + \alpha(x'_N - x'_1) = 0, \\
 \dot{x}'_2 &= \alpha(x'_3 - x'_2) + \alpha(x'_1 - x'_2) = 0, \\
 &\vdots \\
 \dot{x}'_{N-1} &= W_{N-1 N}(x'_N - x'_{N-1}) + \alpha(x'_{N-2} - x'_{N-1}) = 0, \\
 \dot{x}'_N &= 1 + W_{N-1 N}(x'_{N-1} - x'_N) + \alpha(x'_1 - x'_N) = 0
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

となる。よって

$$\begin{aligned}
 \dot{x}'_1 &= -1 + \alpha\Delta x' + \alpha(N-2)\Delta x' = 0, \\
 \dot{x}'_2 &= \alpha\Delta x' - \alpha\Delta x' = 0, \\
 &\vdots \\
 \dot{x}'_{N-1} &= W_{N-1 N}(x'_N - x'_{N-1}) - \alpha\Delta x' = 0, \\
 \dot{x}'_N &= 1 + W_{N-1 N}(x'_{N-1} - x'_N) - \alpha(N-2)\Delta x' = 0
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
 \Delta x' &= x'_2 - x'_1 = x'_3 - x'_2 = \cdots = x'_{N-1} - x'_{N-2} \\
 &= \frac{1}{\alpha(N-1)}
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

とした。ここで前と同様に一般性を失う事なく  $x'_1 = 0$  と仮定する。このとき各粒子の位置は

$$x'_n = \begin{cases} (n-1)\Delta x' & 1 \leq n \leq N-1 \\ (N-2)\Delta x' & n = N \text{ or } N-1 \end{cases} \tag{5.32}$$

となる。これにより平均と二乗平均と分散が算出される。平均は

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[x'_n] &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x'_n \\
 &= \frac{1}{N} \left( (N-2)\Delta x' + \sum_{n=1}^{N-1} (n-1)\Delta x' \right) \\
 &= \frac{\Delta x'}{N} \left( N-2 + \sum_{n=1}^{N-1} (n-1) \right) \\
 &= \frac{\Delta x'}{N} \left( N-2 + \frac{1}{2}(N-1)(N-2) \right) \\
 &= \frac{\Delta x'}{2N} (N^2 - N - 2) \\
 &= \frac{(N-2)(N+1)\Delta x'}{2N}
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

と求まる．次に二乗平均は

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[x_n'^2] &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n'^2 \\
&= \frac{1}{N} \left( (N-2)^2 \Delta x'^2 + \sum_{n=1}^{N-1} (n-1)^2 \Delta x'^2 \right) \\
&= \frac{\Delta x'^2}{N} \left( (N-2)^2 + \sum_{n=1}^{N-1} (n-1)^2 \right) \\
&= \frac{\Delta x'^2}{N} \left( (N-2)^2 + \frac{1}{6} (N-1)(N-2)(2N-3) \right) \\
&= \frac{(N-2)(2N^2 + N - 9) \Delta x'^2}{6N}
\end{aligned} \tag{5.34}$$

と求まる．よって分散は

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}[x_n'] &= \mathbb{E}[x_n'^2] - (\mathbb{E}[x_n'])^2 \\
&= \frac{(N-2)(2N^2 + N - 9) \Delta x'^2}{6N} - \left( \frac{(N-2)(N+1) \Delta x'}{2N} \right)^2 \\
&= \frac{(N-2)(2N^2 + N - 9) \Delta x'^2}{6N} - \frac{(N-2)^2 (N+1)^2 \Delta x'^2}{4N^2} \\
&= \frac{(N-2) \Delta x'^2}{12N^2} [4N^3 + 2N^2 - 18N - 3(N-2)(N+1)^2] \\
&= \frac{(N-2)(N-1)(N^2 + 3N - 6)}{12N^2} \Delta x'^2 \\
&= \frac{(N-2)(N-1)(N^2 + 3N - 6)}{12N^2} \left( \frac{1}{\alpha(N-1)} \right)^2 \\
&= \frac{(N-2)(N-1)(N^2 + 3N - 6)}{12\alpha^2 N^2 (N-1)^2} \\
&= \frac{(N-2)(N^2 + 3N - 6)}{12\alpha^2 N^2 (N-1)}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

と算出される．この  $\mathbb{V}[x_n']$  が  $\mathbb{V}[x_n]$  と比べて大きくなるならば、 $W_{N-1}N$  を大きくすることによって分散が大きくなったといえる．これはコンプリートグラフにおいて、どの結合が正の方向に微小変化しても分散は小さくなるということとは逆に、分散が大きくなっており、

$W_{N-1,N}$  についてのSPSを逆符号にする．そこで  $\mathbb{V}[x'_n]$  と  $\mathbb{V}[x_n]$  を比較すると

$$\begin{aligned}
 \mathbb{V}[x'_n] - \mathbb{V}[x_n] &= \frac{(N-2)(N^2+3N-6)}{12\alpha^2 N^2(N-1)} - \frac{(N-1)(N+1)}{12\alpha^2 N^2} \\
 &= \frac{1}{12\alpha^2 N^2} \left( \frac{(N-2)(N^2+3N-6)}{N-1} - (N-1)(N+1) \right) \\
 &= \frac{1}{12\alpha^2 N^2(N-1)} [(N-2)(N^2+3N-6) - (N-1)^2(N+1)] \\
 &= \frac{2N^2 - 11N + 11}{12\alpha^2 N^2(N-1)} \\
 &= \frac{1}{\alpha^2} g(N)
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

が得られる．ここで  $g(N)$  は

$$g(N) = \frac{2N^2 - 11N + 11}{12N^2(N-1)} \tag{5.37}$$

と置いた．よって  $g(N)$  は  $2 \leq N \leq 4$  のとき負となる．また  $5 \leq N$  のとき  $g(N)$  は正の値をとる．この  $g(N)$  を  $N$  の関数として表示したのが図 5.2C である．よって  $2 \leq N \leq 4$  の短い ring graph 上の粒子では各パラメータについてのSPSの符号は一致し、 $5 \leq N$  の長い ring graph のとき符号は一致しなくなる．5.1B の Erdős-Rényi ネットワーク上の粒子のモデルにおいては、符号が一致しないSPSは非常に少ない、もしくは一致しないSPSがあっても値が小さいため、2に近い値となっている．

次に3.2節の2条件のうち「(1) 出力がパラメータの同次関数として表現され得ること」が満たされない系として次節で非線形動力学モデルでのIMPSを検討する．

### 5.3 非線形動力学モデル

本節では周期的な振る舞いを持つ素子がネットワーク上で相互作用しあっているシステムを考える．周期的な振る舞いを持つ素子のモデルとしては位相振動子を用いる．位相振動子とは神経細胞などの挙動の位相をモデル化する際に用いられる [45, 48, 52–54]．未知なシステムのモデルとして位相振動子のネットワークを考えるが、前節での線形動力学モデルを非線形にした形で定義する．ネットワークの詳細な構造はしばしば未知であるので、IMPSがネットワークの種類にどのように依存するのかを検証するために、Barabási-Albert ネットワークと regular random ネットワークと Watts-Strogatz ネットワークの3種類を用いた．

$N$  個の位相振動子が隣接行列  $\mathbf{A} = (A_{ij})$  を介して互いにつながっているとす． $i$  と  $j$  がつながっているならば  $A_{ij} = 1$ 、さもなくば  $A_{ij} = 0$  とした．前章で定義した複雑ネットワークはこの  $\mathbf{A}$  に反映される．位相振動子  $i$  のダイナミクスは

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \sum_{j=1}^N K_{ij} \sin(\theta_j - \theta_i) \tag{5.38}$$

で記述される． $\omega_i$  は位相振動子  $i$  の自然振動数である．位相振動子は図 5.3 のように周期的な振る舞いを、円周上の位相という形で表現する．また  $\mathbf{K}$  は対称な結合荷重行列であり、任

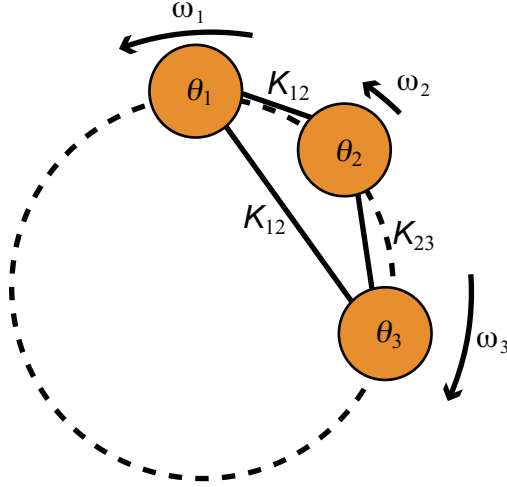


図 5.3: 位相振動子の模式図 それぞれ破線は位相振動子の軌跡を, 実線は位相振動子間の結合を表している. また  $\omega_i$  は各位相振動子の自然振動数,  $\theta_i$  は各位相振動子の位相,  $K_{ij}$  は位相振動子  $i$  と  $j$  の間の結合強度を表している.

意の  $i$  と  $j$  のペアで  $K_{ij} \geq 0$  を満たす [45, 55]. 数値シミュレーションでは結合強度  $\alpha > 0$  を用いて  $\mathbf{K} = \alpha \mathbf{A}$  とした. 自然振動数  $\omega_i$  は平均 0, 分散 1 の正規分布に従うものとした. また線形動力学モデルと同様に, 回転座標系に乗ることで一般性を損ねることなく  $\sum_{i=1}^N \omega_i = 0$  とすることができる. 全ての位相振動子の位相が位相ロックするように  $\alpha$  には十分大きい値を用いた.

線形動力学モデルでは定常状態での粒子の位置の分散を出力とした. しかしこの位相振動子系において位相ロック状態での位相振動子の位相の通常定義による分散を出力とすることはできない. なぜなら  $+1^\circ$  と  $+3^\circ$  のペアと  $+1^\circ$  と  $+359^\circ$  のペアとでは, 普通に分散を計算すると一致しない. しかし, 後者を  $2^\circ$  回転すると前者に一致するので「分散」も一致するべきである. このような考察にもとづいて角度統計の分野で使われている分散が

$$\begin{aligned} V_c &= 1 - r \\ &= 1 - \frac{1}{N} \sqrt{C^2 + S^2} \end{aligned} \quad (5.39)$$

で定義される円周分散 (circular variance) である [56].  $C$  と  $S$  は  $C = \sum_{i=1}^N \cos \theta_i$ ,  $S = \sum_{i=1}^N \sin \theta_i$  と定義した. また  $r$  はオーダーパラメータ (order parameter) であり, 原点から振動子の重心までの距離を表す [45, 55]. 位相振動子の位相と結合強度, オーダーパラメータ, 円周分散の関係は図 5.4 のようになっている. 図 5.4A のように結合強度が小さく位相振動子の位相が散らばっている場合, オーダーパラメータは小さくなり, 円周分散は大きくなる. 逆に図 5.4B のように結合強度が大きく位相振動子の位相が一箇所に集中している場合, オーダーパラメータは大きくなり, 円周分散は小さくなる. 位相振動子がより強く引き合い密集しているとき重心は中心からの距離が 1 に近くなり, 円周分散はより小さく 0 に近くなる. 本節では位相ロック状態での円周分散を出力として用いる. 全ての存在する結合  $K_{ij}$  をパラメータとして用いた. Barabási-Albert ネットワークと regular random ネットワークを用いたシミュレーションでは時刻  $t = 100$  での  $V_c$  を出力として用い, Watts-Strogatz

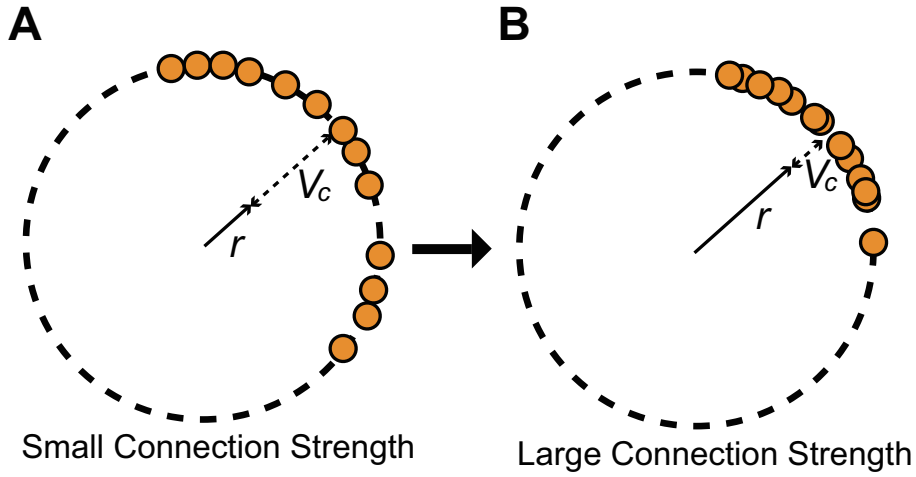


図 5.4: 位相振動子の位相と結合強度, オーダーパラメータ, 円周分散の関係の模式図 (A) 弱い結合強度  $\alpha$  の場合のオーダーパラメータと円周分散. (B) 強い結合強度  $\alpha$  の場合のオーダーパラメータ  $r$  と円周分散  $V_c$ .

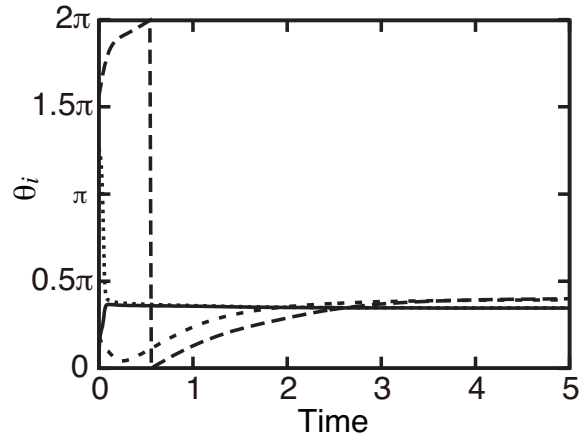


図 5.5: 平均次数 4 の Barabási–Albert ネットワーク上の 1000 個の位相振動子の同期. 1000 個の位相振動子から 4 つの振動子の位相を抜き出して表示している. 結合強度  $\alpha$  は 2 とした.

ネットワークを用いたシミュレーションでは時刻  $t = 200$  での  $V_c$  を出力とする.

## 5.4 解析と結果：非線形動力学モデル

十分強い結合  $\alpha$  のもとで位相振動子は図 5.5 のように時間が経過するにつれて位相ロックする. 位相ロック状態では式 (5.38) の右辺  $y'_i$  は 0 であり

$$\vec{y}' = \vec{0} \quad (5.40)$$

と書くことができる．次に式 (5.40) が満たされるとき結合と位相の関係を導く． $\vec{\theta}$  を  $\Delta\vec{\theta}$  だけ微小変化した際の， $\mathbf{K}$  の微小変化を  $\Delta\mathbf{K}$  で記述する．そのとき

$$\begin{aligned}
 y'_i + \Delta y'_i &= \omega_i + \sum_{j=1}^N (K_{ij} + \Delta K_{ij}) \sin(\theta_j + \Delta\theta_j - \theta_i - \Delta\theta_i) \\
 &= \omega_i + \sum_{j=1}^N (K_{ij} + \Delta K_{ij}) [\sin(\theta_j - \theta_i) \cos(\Delta\theta_j - \Delta\theta_i) \\
 &\quad + \cos(\theta_j - \theta_i) \sin(\Delta\theta_j - \Delta\theta_i)] \\
 &\approx \omega_i + \sum_{j=1}^N (K_{ij} + \Delta K_{ij}) [\sin(\theta_j - \theta_i) + \cos(\theta_j - \theta_i)(\Delta\theta_j - \Delta\theta_i)] \quad (5.41)
 \end{aligned}$$

の関係式が満たされる．式 (5.41) の両辺から  $y'_i$  を引くと，

$$\begin{aligned}
 \Delta y'_i &\approx \sum_{j=1}^N K_{ij} \cos(\theta_j - \theta_i)(\Delta\theta_j - \Delta\theta_i) \\
 &\quad + \sum_{j=1}^N \Delta K_{ij} [\sin(\theta_j - \theta_i) + \cos(\theta_j - \theta_i)(\Delta\theta_j - \Delta\theta_i)] \quad (5.42)
 \end{aligned}$$

となる．よって関係式

$$\frac{\partial y'_i}{\partial \theta_j} = J_{ij}, \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial y'_i}{\partial K_{lm}} = \begin{cases} \sin(\theta_m - \theta_l) & i = l \\ 0 & i \neq l \end{cases} \quad (5.44)$$

を得ることができる．ここで

$$J_{ij} = \begin{cases} -\sum_{s=1}^N K_{is} \cos(\theta_s - \theta_i) & i = j \\ K_{ij} \cos(\theta_j - \theta_i) & i \neq j \end{cases} \quad (5.45)$$

とした．位相ロック解の  $\theta_i$  を全部おなじだけシフトしても，位相ロック解である．ただし円周分散  $V_c$  だけを見ても，同じ値を加える前後の位相ロック解を区別することはできない．つまりこの非線形動力学モデルを用いて位相ロック解を一意に定めることができない．しかし一般性を失うことなく位相の平均を 0 と仮定することができる．よって  $\sum_{i=1}^N \theta_i = 0$  の条件をつけ加えると，式 (5.40) は

$$y_i \equiv \omega_i + \sum_{j=1}^N K_{ij} \sin(\theta_j - \theta_i) - \sum_{j=1}^N \theta_j = 0 \quad (5.46)$$

で代替することができる． $\partial y_i / \partial \theta_j$  は

$$\frac{\partial y_i}{\partial \theta_j} = J_{ij} - 1 \equiv \tilde{J}_{ij} \quad (5.47)$$

となる．ここで  $\tilde{\mathbf{J}} = (\tilde{J}_{ij})$  は正則な行列である．これにより関係式

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta_i}{\partial K_{lm}} &= -\sum_{j=1}^N (\tilde{\mathbf{J}}^{-1})_{ij} \delta_{jl} \sin(\theta_m - \theta_l) \\ &= -(\tilde{\mathbf{J}}^{-1})_{il} \sin(\theta_m - \theta_l)\end{aligned}\quad (5.48)$$

が得られる．よって  $V_c$  の  $K_{lm}$  による微分が

$$\begin{aligned}\frac{\partial V_c}{\partial K_{lm}} &= -\frac{1}{2N} (C^2 + S^2)^{-1/2} \frac{\partial \left[ \left( \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 + \left( \sum_{i=1}^N \sin \theta_i \right)^2 \right]}{\partial K_{lm}} \\ &= \frac{-1}{N^2 r} \left( -C \sum_{i=1}^N \sin \theta_i \frac{\partial \theta_i}{\partial K_{lm}} + S \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \frac{\partial \theta_i}{\partial K_{lm}} \right) \\ &= \frac{1}{N^2 r} \left( S \sum_{i=1}^N \cos \theta_i (\tilde{\mathbf{J}}^{-1})_{il} - C \sum_{i=1}^N \sin \theta_i (\tilde{\mathbf{J}}^{-1})_{il} \right) \sin(\theta_m - \theta_l)\end{aligned}\quad (5.49)$$

と計算される．この式 (5.49) を

$$\begin{aligned}\text{IMPS} &= \sum_{\langle lm \rangle} |\text{SPS}_{lm}| \\ &= \sum_{\langle lm \rangle} \left| \frac{K_{lm}}{V_c} \frac{\partial V_c}{\partial K_{lm}} \right|\end{aligned}\quad (5.50)$$

に代入することで IMPS が得られ，効率的に数値計算を行うことができる．ここで  $\langle \rangle$  は  $K_{lm} \neq 0$  を満たす結合ペア  $(l, m)$  に関する和を意味する．

式 (5.49) と式 (5.50) を用いて数値シミュレーションを行う．平均次数 4 の複雑ネットワーク上の位相振動子の IMPS を，これらの式を用いて数値シミュレーションした結果が図 5.6 である．

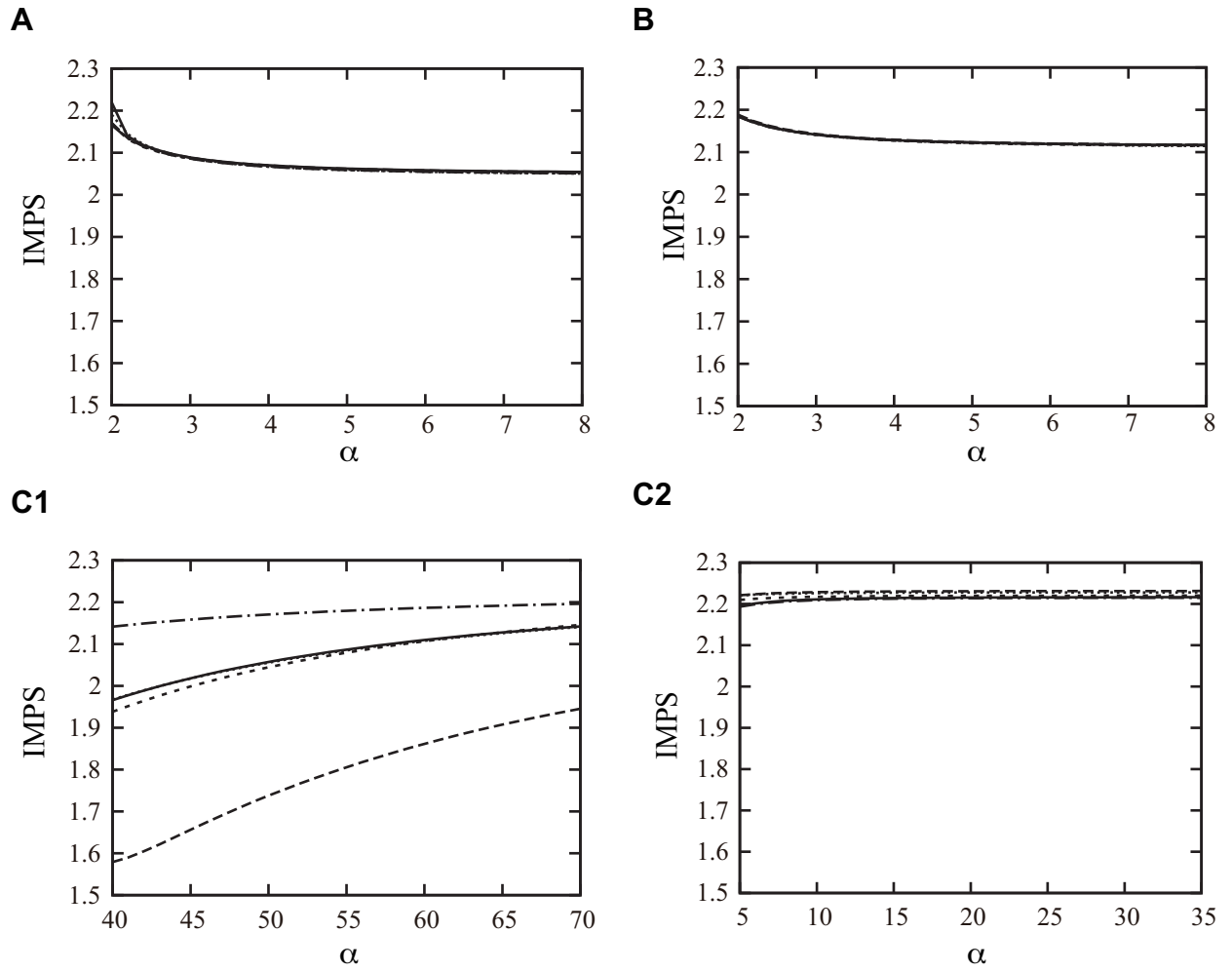


図 5.6: 複雑ネットワーク上の 10 000 個の位相振動子の IMPS 各パネルはそれぞれ結合荷重が変化した場合の, Barabási-Albert ネットワーク (A), regular random ネットワーク (B), つなぎ替え確率  $p = 3/200$  の Watts-Strogatz ネットワーク (C1), つなぎ替え確率  $p = 3/20$  の Watts-Strogatz ネットワーク (C2) の上の位相振動子系の IMPS を表している. (A) と (B) では, 結合荷重  $\alpha$  を 2 から 8 まで 0.2 刻みで変化させた. (C1) では, 結合荷重  $\alpha$  を 40 から 70 まで 1 刻みに変化させた. (C2) では結合荷重  $\alpha$  を 5 から 35 まで 1 刻みで変化させた.

等価回路のモデルや線形動力学モデルの場合と異なり, この sine カップリングした位相振動子のネットワークの IMPS は一定の値にはならない. この結果は出力である  $V_c$  が, パラメータである各結合の同次関数で表現できないことに起因している. 図 5.6A は 10 000 個の位相振動子を, 異なる乱数シードから生成した 5 つの Barabási-Albert ネットワークに乗せた際の IMPS である. 図 5.6B は 10 000 個の位相振動子を, 異なる乱数シードから生成した 5 つの regular random ネットワークに乗せた際の IMPS である. これらのシミュレーションで  $t = 0$  の各位相振動子の初期位相は一様分布で与えた. 図 5.6A と B において IMPS は 2 に収束している. これは結合荷重  $\alpha$  が大きくなるにつれて, これらのモデルは線形近似することができるからである. このモデルにはダイナミクスと出力という 2 種類の非線形性をもつ.  $\alpha$  の正の無限大の極限では, sine カップリングが線形近似できるようになり, その結

果、非線形ダイナミクスである式 (5.38) が線形ダイナミクスである式 (5.1) に近似できる。またダイナミクスと同様なことが出力に関しても言うことができる。  $\alpha$  の正の無限大の極限では円周分散の式 (5.39) は分散と正比例するようになる。これは簡単に証明することができる。平均が0で位相  $\theta_i$  が非常に密集し、  $|\theta_i| \ll 1$  であるとき、円周分散は

$$\begin{aligned}
 V_c &= 1 - r \\
 &= 1 - \frac{1}{N} \sqrt{C^2 + S^2} \\
 &= 1 - \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i\right)^2} \\
 &= 1 - \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N e^{i\theta_i} \right| \\
 &\approx 1 - \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \left(1 + i\theta_i - \frac{1}{2}\theta_i^2\right) \right| \\
 &= 1 - \left| 1 + \frac{1}{N}i \sum_{i=1}^N \theta_i - \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \theta_i^2 \right| \\
 &= 1 - \left(1 - \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \theta_i^2\right) \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \theta_i^2
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

となる。ここで  $\sum_{i=1}^N \theta_i = 0$  を使った。よって結合荷重  $\alpha$  が正の無限大の極限で、通常の分散の半分に漸近する。ただし分散が半分になっても、定義式 (3.1) から分かるようにIMPSは同じ値になる。よってこの非線形動力学モデルのIMPSの収束値2は線形動力学モデルのIMPSと一致する。

ここでこのモデルが位相振動子の数にどのように依存するのかをシミュレーションした。その結果が図5.7である。図5.7ではそれぞれ位相振動子数  $N = 100, 1000, 10\,000$  の Barabási-Albert ネットワークにおいて、IMPSとMPSが結合荷重  $\alpha$  に対してどう変化するかを表している。図5.7Aから分かるように位相振動子の数  $N$  を変化させてもIMPSは極めてよく似た曲線となっている。対照的にMPSは図5.7Bから分かるように、位相振動子の数  $N$  を変化させると大きく異なる曲線となっている。これは Barabási-Albert ネットワークが10倍になると、パラメータ数である結合数が10倍になり、その結果MPSの値が  $1/\sqrt{10}$  になることに起因している。

ここでIMPSがどのようにネットワークの種類に応じて変化するのかを確かめる。隣接行列を平均次数4のWatts-Strogatz ネットワークで与えた [18]。図5.6C1とC2は10000個の位相振動子を、異なる乱数シードから生成した5つのWatts-Strogatz ネットワークに乗せた際のIMPSである。 $t = 0$ での各振動子の初期位相は平均0、標準偏差0.1の正規分布に従うものとした。図5.6C1では300本の結合をつなぎ替え、図5.6C2では3000本の結合をつなぎ替えた。その結果、図5.6C1では図5.6Aや図5.6BよりもIMPSの曲線は広く分布した。これはWatts-Strogatz ネットワーク上の位相振動子のIMPSは、Barabási-Albert ネット

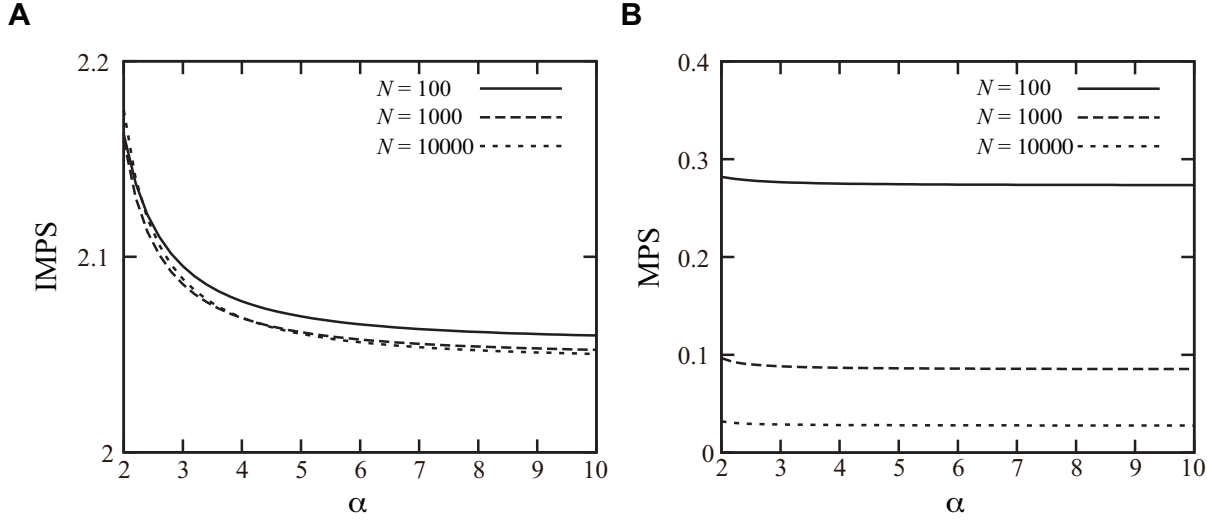


図 5.7: Barabási–Albert ネットワークの振動子数 100, 1000, 10 000 の IMPS (A) IMPS と (B) MPS は結合荷重  $\alpha$  に応じて IMPS がどう変化するかを表している. どちらのパネルでも結合荷重  $\alpha$  は 2 から 10 まで 0.2 刻みで変化させた.

ワーク上の位相振動子数の IMPS よりも強くネットワークの形状に強く依存していることを示唆している. Barabási–Albert ネットワークや regular random ネットワーク上の位相振動子においては, IMPS は図 5.7A や B のように上から 2 に収束した. しかし Watts–Strogatz ネットワーク上の位相振動子に対して, IMPS は図 5.7C1 や C2 のように下から 2 に収束した. この結果は IMPS がこれらモデルのネットワークの何らかの違いを反映していることを意味する.

以下, IMPS の曲線が単調増加か単調減少かを決定する要因をより詳しく検討する. 実際にシミュレーションに用いたネットワーク間で平均パス長を比較すると, Barabási–Albert ネットワークや regular random ネットワークよりも Watts–Strogatz ネットワークはより長い平均パス長をもつ (表 5.1). また表 5.1 にあるように, Barabási–Albert ネットワークや regular random ネットワークに比べ, Watts–Strogatz ネットワークの平均パス長の分散は大きい. この違いは図 5.7C1 の曲線が広く分布した原因と関連があると考えられる. それでは Watts–Strogatz ネットワークと他の 2 つのネットワークの大きな違いとはなんだろうか. その 1 つが長い 1-D lattice-like structure (一次元格子状構造) の存在である (図 5.8A).

Watts–Strogatz ネットワークを生成する際は, regular ring lattice から始める. そして 1 本ずつつながり替えを行うのだが, つながり替え確率が小さいうちは依然として regular ring lattice の構造を引き継ぎ, 長い 1-D lattice-like structure が存在する. この長い 1-D lattice-like structure の効果が IMPS の収束の振る舞いをどのように決定づけるのかを解析的に解けるモデルで検討した. 解析的に解けるモデルとするため, 1-D lattice-like structure を 1 本のパスグラフに簡略化して考える. パスグラフとは図 5.8B のように, 全てのノードと結合が 1 本の直線上に配置されたグラフである.  $N$  個の位相振動子がパスグラフ上で互いに結合しているモデルを考える. また自然振動数は  $-\omega_1 = \omega_N = 1$  とし,  $1 < i < N$  の位相振動子の自然振動数は  $\omega_i = 0$  とする. このように仮定することで解析的に解ける系となり, 解析的に IMPS が求まる.

表 5.1: 位相振動子ネットワークの平均パス長とその標準偏差 ( $N = 10\,000$ ) 図 5.6 のシミュレーションで用いたそれぞれ5つずつのネットワークの平均と標準偏差.

|                                      | 平均   | 標準偏差                  |
|--------------------------------------|------|-----------------------|
| Barabási–Albert                      | 5.03 | $2.20 \times 10^{-2}$ |
| Regular Random                       | 7.73 | $1.53 \times 10^{-3}$ |
| つながぎ替え確率 $p = 3/20$ の Watts–Strogatz | 36.1 | 0.343                 |
| つながぎ替え確率 $p = 3/20$ の Watts–Strogatz | 10.9 | $2.88 \times 10^{-2}$ |

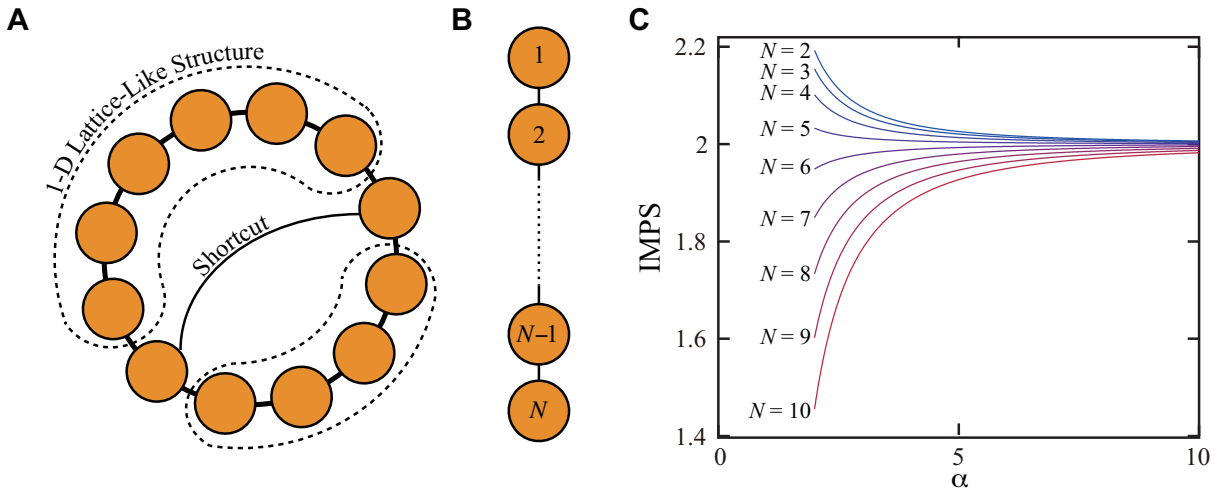


図 5.8: **1-D lattice-like structure**, パスグラフ, 異なる長さのパスグラフの IMPS  
(A) 1-D lattice-like structure の模式図である. (B)  $N$  個のノードを持つパスグラフの図である. パネル C は異なる長さを持つパスグラフ上の位相振動子の IMPS を図にしたものである. 結合強度  $\alpha$  の関数として表現され,  $N$  個の振動子の位相は等間隔に離れている.

この位相振動子モデルのダイナミクスは

$$\begin{aligned}
 \dot{\theta}_1 &= -1 + \alpha \sin(\theta_2 - \theta_1), \\
 \dot{\theta}_2 &= \alpha \sin(\theta_3 - \theta_2) + \alpha \sin(\theta_1 - \theta_2), \\
 &\vdots \\
 \dot{\theta}_{N-1} &= \alpha \sin(\theta_N - \theta_{N-1}) + \alpha \sin(\theta_{N-2} - \theta_{N-1}), \\
 \dot{\theta}_N &= 1 + \alpha \sin(\theta_{N-1} - \theta_N)
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

で記述できる.  $\alpha$  は結合強度である. よって位相ロック状態でこれら  $N$  個の位相振動子は, 円周上に等間隔に並ぶ. その一定の間隔は  $\Delta\theta = \sin^{-1}(1/\alpha) > 0$  となる. ここで一般性を失うことなく  $\theta_1$  を 0 であると仮定できる. このとき定常状態にある位相振動子の位相は

$\theta_i = (i-1)\Delta\theta$  となる。出力である円周分散は

$$\begin{aligned} V_c &= 1 - r \\ &= 1 - \frac{1}{N} \left| \sum_{s=1}^N e^{i(s-1)\Delta\theta} \right| \end{aligned} \quad (5.53)$$

で与えられる。定義式 (5.45) で定義される  $\mathbf{J}$  は

$$\mathbf{J} = \alpha \cos(\Delta\theta) \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 \end{pmatrix} \quad (5.54)$$

となる。この無向ネットワーク上の位相振動子系の IMPS は

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \frac{\alpha}{V_c} \sum_{\langle lm \rangle} \left| \frac{\partial V_c}{\partial K_{lm}} + \frac{\partial V_c}{\partial K_{ml}} \right| \\ &= \frac{\alpha \sin(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \sum_{n=1}^{N-1} |S\kappa_n^c - C\kappa_n^s - S\kappa_{n+1}^c + C\kappa_{n+1}^s| \end{aligned} \quad (5.55)$$

を用いて求められる。ここで  $\kappa_n^c$  と  $\kappa_n^s$  は

$$\sum_{n=1}^N (\mathbf{J})_{in} \kappa_n^c = \cos \theta_i, \quad (5.56)$$

$$\sum_{n=1}^N (\mathbf{J})_{in} \kappa_n^s = \sin \theta_i \quad (5.57)$$

と定義した。 $\mathbf{J}$  はランク  $N-1$  の行列であるので [51],  $\kappa_i^s$  と  $\kappa_i^c$  は不定性を持っている。そこで  $\kappa_1^s = \kappa_1^c = 0$  と仮定することで、再帰的に  $\kappa_i^s$  ( $i < n$ ) を用いて、 $\kappa_n^s$  と  $\kappa_n^c$  を求めることができ、

$$\begin{aligned} \kappa_n^c &= \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \sum_{s=1}^{n-1} (n-s) \cos[(s-1)\Delta\theta] \\ &= \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \text{Re} \left[ n \frac{z^{n-1} - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z}{z - 1} \right)' \right] \\ \kappa_n^s &= \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \sum_{s=1}^{n-1} (n-s) \sin[(s-1)\Delta\theta] \\ &= \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \text{Im} \left[ n \frac{z^{n-1} - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z}{z - 1} \right)' \right] \end{aligned} \quad (5.58)$$

が得られる。ここで  $z$  は

$$z = \cos(\Delta\theta) + i \sin(\Delta\theta) \quad (5.59)$$

と定義した. また  $f_n(z)$  を

$$f_n(z) = n \frac{z^{n-1} - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z}{z - 1} \right) \quad (5.60)$$

と定義すると

$$\kappa_n^c = \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \operatorname{Re}[f_n(z)] \quad (5.61)$$

$$\kappa_n^s = \frac{1}{\alpha \cos(\Delta\theta)} \operatorname{Im}[f_n(z)] \quad (5.62)$$

となる. IMPS を解析的に求めると,

$$\begin{aligned} \text{IMPS} &= \frac{\alpha \sin(\Delta\theta)}{V_c N^2 r \alpha \cos(\Delta\theta)} \sum_{n=1}^{N-1} |S\operatorname{Re}[f_n(z)] - C\operatorname{Im}[f_n(z)] - S\operatorname{Re}[f_{n+1}(z)] + C\operatorname{Im}[f_{n+1}(z)]| \\ &= \frac{\tan(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \sum_{n=1}^{N-1} |S\operatorname{Re}[f_n(z) - f_{n+1}(z)] - C\operatorname{Im}[f_n(z) - f_{n+1}(z)]| \\ &= \frac{\tan(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \left| \sum_{n=1}^{N-1} S\operatorname{Re}[f_n(z) - f_{n+1}(z)] - C\operatorname{Im}[f_n(z) - f_{n+1}(z)] \right| \\ &= \frac{\tan(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \sum_{n=1}^{N-1} \left| \operatorname{Im} \left( \frac{z^N - 1}{z - 1} [f_n(z) - f_{n+1}(z)] \right) \right| \\ &= \frac{\tan(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \sum_{n=1}^{N-1} \left| \operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \left( \frac{-z^n + 1}{z - 1} \right) \right] \right| \end{aligned} \quad (5.63)$$

となる. この式変形では

$$\begin{aligned} f_n(z) - f_{n+1}(z) &= n \frac{z^{n-1} - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z}{z - 1} \right)' - (n+1) \frac{z^n - 1}{z - 1} + \left( \frac{z^{n+1} - z}{z - 1} \right)' \\ &= n \frac{z^{n-1} - z^n}{z - 1} - \frac{z^n - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z}{z - 1} - \frac{z^{n+1} - z}{z - 1} \right)' \\ &= n z^{n-1} \frac{1 - z}{z - 1} - \frac{z^n - 1}{z - 1} - \left( \frac{z^n - z^{n+1}}{z - 1} \right)' \\ &= n z^{n-1} \frac{1 - z}{z - 1} - \frac{z^n - 1}{z - 1} - \left( z^n \frac{1 - z}{z - 1} \right)' \\ &= -n z^{n-1} - \frac{z^n - 1}{z - 1} + (z^n)' \\ &= -n z^{n-1} - \frac{z^n - 1}{z - 1} + n z^{n-1} \\ &= -\frac{z^n - 1}{z - 1} \end{aligned} \quad (5.64)$$

を用いた。ここで虚部は

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \overline{\left( \frac{-z^n + 1}{z - 1} \right)} \right] &= -\operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \overline{\left( \frac{z^n - 1}{z - 1} \right)} \right] \\
&= -\operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \left( \frac{\overline{z^n - 1}}{\overline{z - 1}} \right) \right] \\
&= -\operatorname{Im} \left( \frac{(z^N - 1)(\overline{z^n - 1})}{|z - 1|^2} \right) \\
&= -\operatorname{Im} \left( \frac{(e^{iN\Delta\theta} - 1)(e^{-in\Delta\theta} - 1)}{|z - 1|^2} \right) \\
&= -\operatorname{Im} \left( \frac{-e^{iN\Delta\theta} - e^{-in\Delta\theta} + e^{i(N-n)\Delta\theta} + 1}{|z - 1|^2} \right) \\
&= -\operatorname{Im} \left( \frac{-e^{iN\Delta\theta} - e^{-in\Delta\theta} + e^{i(N-n)\Delta\theta}}{|z - 1|^2} \right) \\
&= -\frac{\sin(N\Delta\theta) + \sin(n\Delta\theta) + \sin[(N-n)\Delta\theta]}{|z - 1|^2} \quad (5.65)
\end{aligned}$$

と計算される。ここで  $N\Delta\theta \leq 2\pi$  と仮定し、三角関数の倍角公式や和積合成を用いることで、虚部がさらに計算することができ

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \overline{\left( \frac{-z^n + 1}{z - 1} \right)} \right] &= -\frac{-\sin(2\frac{N}{2}\Delta\theta) + 2\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)\cos(\frac{N-2n}{2}\Delta\theta)}{|z - 1|^2} \\
&= -\frac{-2\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)\cos(\frac{N}{2}\Delta\theta) + 2\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)\cos(\frac{N-2n}{2}\Delta\theta)}{|z - 1|^2} \\
&= -\frac{2\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)(-\cos(\frac{N}{2}\Delta\theta) + \cos(\frac{N-2n}{2}\Delta\theta))}{|z - 1|^2} \\
&= \frac{4\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)\sin(\frac{2N-2n}{4}\Delta\theta)\sin(\frac{-2n}{4}\Delta\theta)}{|z - 1|^2} \\
&= -\frac{4\sin(\frac{N}{2}\Delta\theta)\sin(\frac{N-n}{2}\Delta\theta)\sin(\frac{n}{2}\Delta\theta)}{|z - 1|^2} \\
&\leq 0 \quad (5.66)
\end{aligned}$$

となり、全て同符号となることが示される。 $N\Delta\theta \leq 2\pi$  という仮定は  $N$  個目の位相までにパスグラフが一周しないための仮定とみることができる。これにより

$$\begin{aligned}
\text{IMPS} &= \frac{\tan(\Delta\theta)}{V_c N^2 r} \left| \operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \overline{\left( \sum_{n=1}^{N-1} \frac{-z^n + 1}{z - 1} \right)} \right] \right| \\
&= \frac{\tan(\Delta\theta)}{N^2 r (1 - r)} \left| \operatorname{Im} \left[ \frac{z^N - 1}{z - 1} \overline{\left( \frac{-z^N + N(z - 1) + 1}{(z - 1)^2} \right)} \right] \right| \quad (5.67)
\end{aligned}$$

と計算され、解析的に IMPS が求まった。各  $N$  における IMPS を  $\alpha$  の関数として表したのが図 5.8C である。パスグラフの長さが長くなるにつれて上から収束していた IMPS が

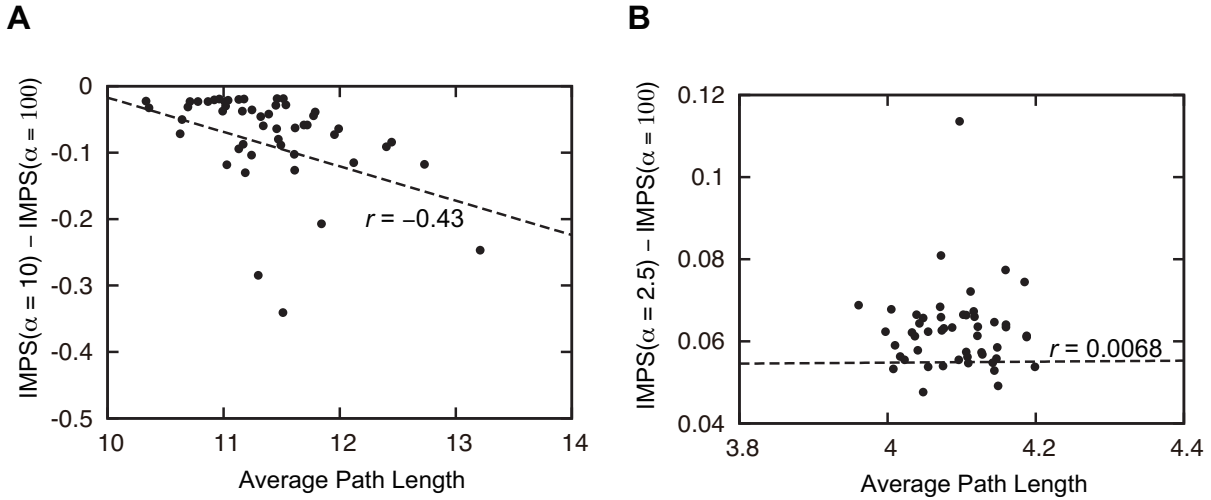


図 5.9: **Watts–Strogatz** ネットワークと **Barabási–Albert** ネットワークの散布図 (A) 50 個の **Watts–Strogatz** ネットワーク ( $N = 1000$ , つなぎ替え確率 = 0.05) を用いて, 平均パス長と  $\text{IMPS}(\alpha = 10) - \text{IMPS}(\alpha = 100)$  を散布図にしたもの. 相関係数  $r$  は  $-0.43$  ( $p < 0.01$ ) であった. (B) 50 個の **Barabási–Albert** ネットワーク ( $N = 1000$ ) を用いて, 平均パス長と  $\text{IMPS}(\alpha = 2.5) - \text{IMPS}(\alpha = 100)$  を散布図にしたもの. 相関係数  $r$  は  $0.0068$  で有意な差は見られなかった.

徐々に下から収束するようになる様子が見て取れる. これらパスグラフの解析により, 長い 1-D lattice-like structure の存在が, **Barabási–Albert** ネットワークと **Watts–Strogatz** ネットワークでの IMPS の収束の仕方の違いを生む一因になったと考えられる.

IMPS が平均パス長からどのように影響をうけつつ結合強度  $\alpha$  に依存しているかをより詳細に調べるために散布図を作る (図 5.9). 図 5.9 では位相振動子数を  $N = 1000$  とし, 結合強度  $\alpha$  が小さいときと大きいときの IMPS の差を測った. そのときのネットワークの平均パス長を横軸, IMPS の差を縦軸にとり相関係数を算出した. 図 5.9A では 50 個の異なる乱数シードからつなぎ替え確率 = 0.05 で生成された **Watts–Strogatz** ネットワーク上の位相振動子を用いて,  $\text{IMPS}(\alpha = 10) - \text{IMPS}(\alpha = 100)$  を縦軸に表示した. このとき相関係数は  $r = -0.43$  ( $p < 0.01$ ) であった. つまりパスグラフ上の位相振動子の解析と同様に, IMPS の差は平均パス長と有意に相関しているといえる. この **Watts–Strogatz** ネットワークでは他のネットワーク指標, 例えば半径や直径も IMPS の差と有意に相関したが平均パス長が一番相関係数の絶対値が大きかった. 一方図 5.9B では 50 個の異なる乱数シードから生成された **Barabási–Albert** ネットワーク上の位相振動子を用いて,  $\text{IMPS}(\alpha = 2.5) - \text{IMPS}(\alpha = 100)$  を縦軸に表示した. このとき相関係数は  $r = -0.0068$  だった. これは有意な差ではないが, それは **Barabási–Albert** ネットワークの平均パス長や IMPS 差が非常に小さい範囲に分布していることに起因していると考えられる. ちなみにこの **Barabási–Albert** ネットワークにおいては他のネットワーク指標にも有意な差は見られなかった.

## 5.5 考察

本章では線形動力学モデルを定義し、その解析により IMPS は本モデルに対して粒子数やパラメータ数にほぼ依存しないということを明らかにした。また非線形動力学モデルの IMPS についても、Barabási–Albert ネットワーク, regular random ネットワーク, Watts–Strogatz ネットワークと位相振動子を用いて検討した。

第2章で見たように同じ出力を実現する等価回路モデルに対して IMPS は同一の値を与えた。RC 回路における SPS の L1 ノルムの不変性は以前にも報告されている [5, 10, 11, 14]。いくつかの素子を1つの素子にまとめて1つのパラメータとしたり、1つの素子を複数の素子に分割して複数のパラメータにしたりしても、IMPS は変化することがないということが分かる。これは線形動力学モデルにおいても同様である。以上のことから、モデル化に依存せず値が決まる場合があることがわかる。したがって、システムの内部構造は未知であることが多いので、IMPS は MPS よりも（モデルではなく）システムのパラメータ感度を定量化する指標としてふさわしいことが示唆される。IMPS が完全に等価で定量化できるのは先に示した2条件 (1) 出力  $q$  がパラメータの  $k$  次の同次関数として表現できること (2) 全てのパラメータについての SPS の符号が一致していること、が満たされた場合に限る。しかしながら (2) を完全には満たしていない系として線形動力学モデルを検討したが、IMPS はパラメータ数や粒子数にほとんど依存しない値になった。これと同様な事が非線形動力学モデルについても言えた。非線形動力学モデルは (1) も満たされないモデルであった。 $\alpha$  の正の無限大の極限ではどのネットワーク上の位相振動子系に対しても IMPS は約2に収束した。これは  $\alpha$  の正の無限大の極限では、非線形動力学モデルのダイナミクスの式 (5.38) は線形動力学モデルのダイナミクスの式 (5.1) に、円周分散の式 (5.39) は分散の定数倍になるからである。

非線形動力学モデルで  $\alpha$  が小さいとき、IMPS は2からすこしずれた値を与えた。これはダイナミクスの非線形性と出力の非線形性を反映した結果である。ダイナミクスの非線形性とは sine カップリングであり、出力の非線形性とは円周分散である。それぞれの非線形性が IMPS に対しどのような影響を与えているのか、自明ではないので、分離して以下の2つのモデルを考える。1つ目は線形動力学モデルのダイナミクスの式 (5.1) の結合を、位相振動子のように sine 関数で置き換えたモデルである。そのときダイナミクスは

$$\dot{x}_i = b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} \sin(x_j - x_i), \quad (5.68)$$

と記述される。この式 (5.68) に基づいてシミュレーションを行い、出力である分散は線形動力学モデルと同様に通常の分散でとるとする。 $b_i$  は平均0、分散1の正規分布に従うとした。また  $x_i$  の初期値は平均0、標準偏差0.1の正規分布に従うとし、IMPS を求めた。そのときの結合強度と IMPS の関係が図 5.10A である。相互作用が sine 関数になることで IMPS は上から2に収束する事が分かる。次にもう1つの非線形性、円周分散の非線形性を検討する。ダイナミクスは線形動力学モデルの式 (5.1) に従ったまま、出力を円周分散

$$V_c = 1 - \frac{1}{N} \sqrt{C^2 + S^2} \quad (5.69)$$

でとる場合を考える。 $C$  と  $S$  は  $C = \sum_{i=1}^N \cos x_i$ ,  $S = \sum_{i=1}^N \sin x_i$  と定義した。 $b_i$  と  $x_i$  は図 5.10A と同様に定めた。そのときの IMPS の結果が図 5.10B である。モデルの相互作用

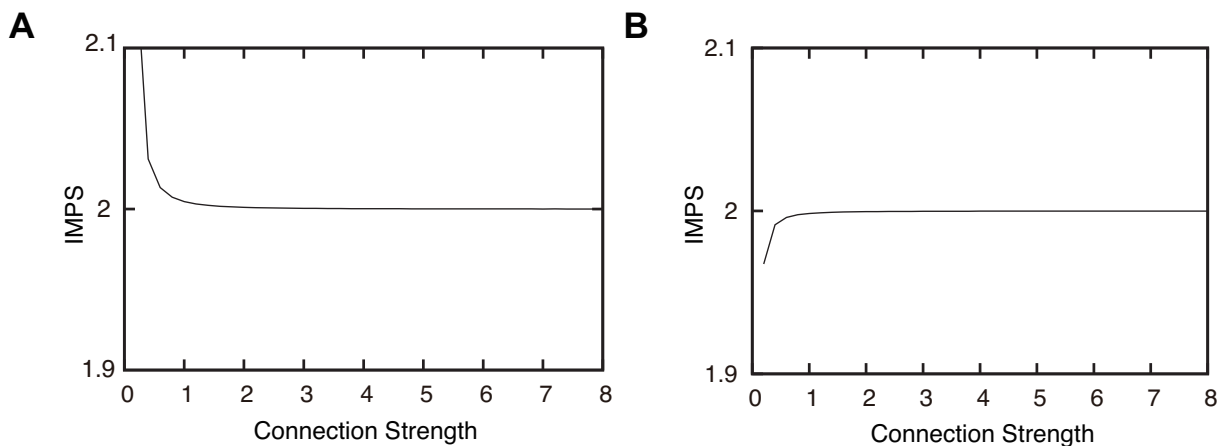


図 5.10: 用いた線形動力学系と非線形動力学系の中間のモデルにおける **IMPS** (A)  $N = 20$  のコンプリートグラフ上のモデル, 線形動力学系の相互作用を sine 関数に変えたモデル (B)  $N = 20$  のコンプリートグラフ上のモデル, 線形動力学系で, 出力を円周分散にしたモデル. どちらのパネルにおいても結合強度  $\alpha$  は 0.2 から 8 まで 0.2 刻みで変化させた.

は線形でも円周分散を出力ととる事で非線形性が現れ, IMPS は下から 2 に収束する事がわかる. これら 2 種類のモデルは今回用いた線形動力学モデルと非線形動力学モデルの間にあるモデルであり, 双方の非線形性がどう IMPS の収束に影響を与えているかを表している. Barabási-Albert ネットワーク上の位相振動子と Watts-Strogatz ネットワーク上の位相振動子の IMPS の収束の仕方の違いは, これら 2 種類の非線形性との兼ね合いで生まれている. これら 2 種類の非線形性は図 5.10A でも図 5.10B でも結合強度が強くなるにつれて失われていくので, 実際に用いた非線形動力学モデルの収束値が線形動力学モデルの値に一致する理由が明確に分かる.  $\alpha$  の正の無限大の極限ではネットワークの種類, すなわち Barabási-Albert ネットワーク, regular random ネットワーク, Watts-Strogatz ネットワーク, パスグラフに依らずに IMPS は約 2 に収束した. これは周期的な振り舞いをする素子がなす未知のネットワークというシステムに対し,  $\alpha$  の正の無限大では, IMPS はモデルの種類に独立な定量化をしているということを示唆する.

しかしながら非線形モデルでは  $\alpha$  が小さい領域では IMPS の曲線の形は位相振動子のネットワークの平均パス長に負の相関を持っていた. この結果より, ネットワーク上の位相振動子で定義されるシステムはより短い平均パス長である方がよりパラメータの変化に対して敏感であるといえる. また今回の非線形動力学モデルでモデル化される未知のシステムを実際に IMPS を用いて定量化する場合, もしそのシステムの IMPS が実験的に得られたならば, IMPS は Barabási-Albert ネットワークと Watts-Strogatz ネットワークのどちらのネットワーク上の位相振動子としてシステムをモデル化するのが適切かを示唆する指標にもなり得る.

パスグラフの解析により, Watts-Strogatz ネットワーク上の位相振動子系の IMPS が下から収束するのは, パスグラフに近似できる 1-D lattice-like structure が原因であることが示唆された. そこでパスグラフに近似できる構造を持たないネットワークとして新たに Kleinberg のスモールワールドネットワークを用い, その上の位相振動子系の IMPS を検討する [57, 58]. Milgram らの実験結果から任意の人と人之间には 6 次の隔たりがあることが

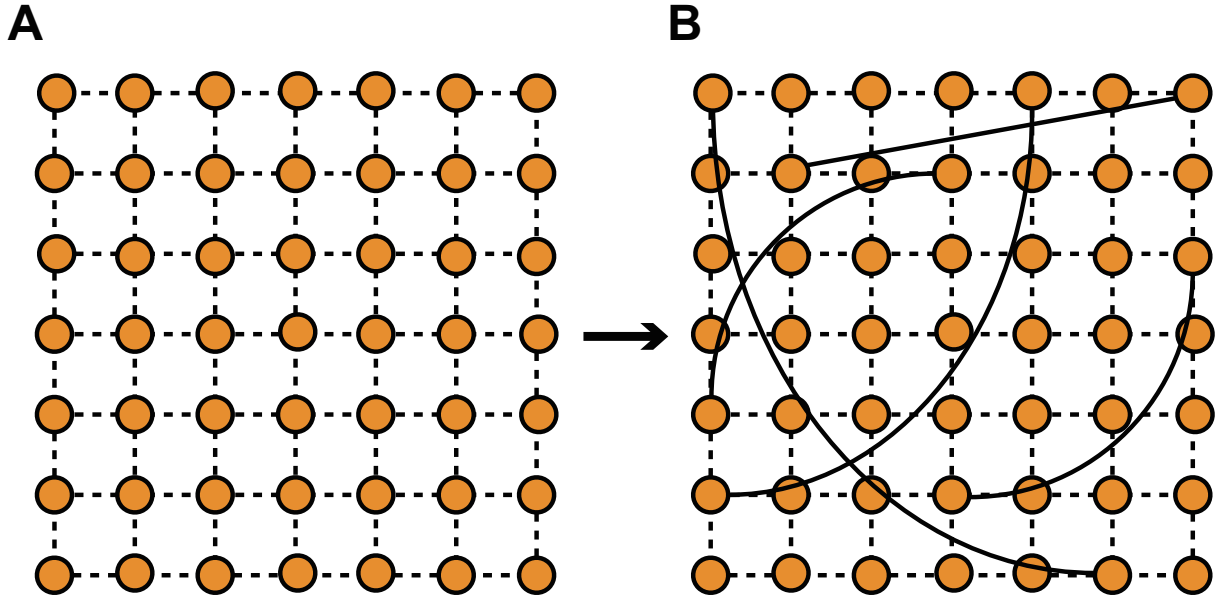


図 5.11: Kleinberg のスモールワールドネットワーク (A) Kleinberg のスモールワールドネットワークの基盤となる二次元格子ネットワーク. (B) パス上の距離の遠いノードほどリンクが張られやすいという確率分布に従った Kleinberg のスモールワールドネットワーク.

示唆された. Milgram らの実験ではノード数はアメリカ合衆国の人口ほどもある. それに比べ Watts–Strogatz ネットワークではノード数を同じくらいにすると, ノード間の距離が Milgram らの実験結果に比べて長くなってしまいう問題点がある. この問題点は距離の概念を取り入れて遠いノードへのリンクを優先的に行うという手法で解決できる. このような考えに基づいて Watts–Strogatz ネットワークを改善したネットワークに Kleinberg のスモールワールドネットワークがある [57,58]. Kleinberg のスモールワールドネットワークでは図 5.11A のような格子ネットワークから始まる. 格子の上のあるノード  $(i, j)$  から  $(k, l)$  への格子上的距離  $d$  は

$$d((i, j), (k, l)) = |k - i| + |l - j| \quad (5.70)$$

で定義される. この距離を用いて遠いノードへのリンクが張られる確率  $p(u, v)$  を

$$p(u, v) \propto d((i, j), (k, l))^{-c} \quad (5.71)$$

の形で定める.  $c$  を clustering exponent と言う. このようにつなぎ替えることで, 図 5.11A のような近傍との結合と図 5.11B にあるような遠くへの結合で構成されるのが Kleinberg のスモールワールドネットワークの特徴である. この変形形として regular ring lattice やトーラス状の格子からスタートした Kleinberg のスモールワールドネットワークを作る事もできる.  $c = 0$  の時, つなぎ替えはランダムになる. 二次元格子ではなく regular ring lattice から生成した場合は一種の Watts–Strogatz ネットワークになる. 本研究では  $N = 900$  で  $c = 2$  を用いて Kleinberg のスモールワールドネットワークを生成した. この Kleinberg のスモールワールドネットワーク上での位相振動子の非線形動力学系における IMPS を図にしたのが図 5.12 である. Barabási–Albert ネットワーク, regular random ネットワーク,

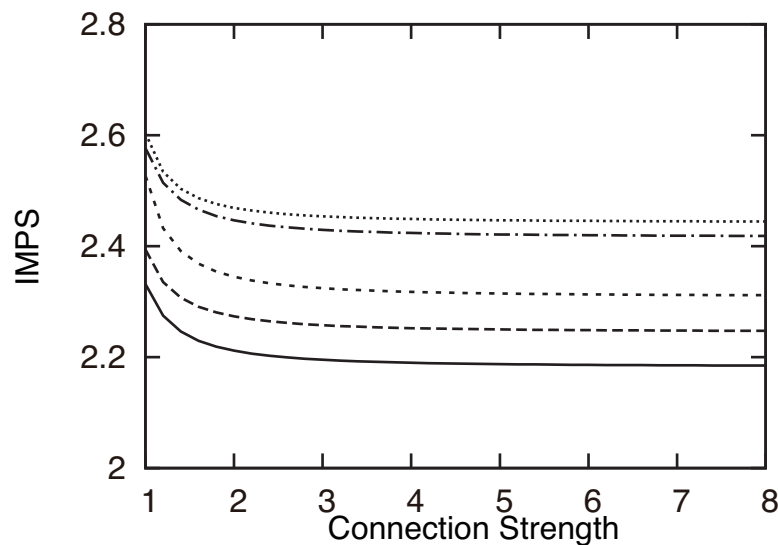


図 5.12: 振動子数 900 の Kleinberg のスモールワールドネットワークの IMPS  $30 \times 30$  の二次元格子ネットワークを生成し、各ノードに 1 本ずつの長距離結合を増やした。5 つの異なる乱数で発生させた Kleinberg のスモールワールドネットワークにおいて、IMPS が結合荷重  $\alpha$  に応じて IMPS がどう変化するかを表している。位相は  $t = 0$  では標準偏差 0.1, 平均 0 の正規分布に位相に従っているとした。自然振動数  $\omega_i$  は平均 0, 分散 1 の正規分布に従うものとした。結合荷重  $\alpha$  は 1 から 8 まで 0.2 刻みで変化させた。

Watts–Strogatz ネットワーク、パスグラフと同様に 2 付近に収束している。このようなグラフでも IMPS は 2 付近に収束するということは、今回の位相振動子ネットワークにおいて、IMPS が  $\alpha$  の正の無限大においてネットワークの構造に独立なパラメータ感度であることをさらに補強する結果である。また前節のパスグラフ上の位相振動子系の解析で、IMPS の収束の仕方の上下の違いはネットワークの長いパスグラフに近似できる構造によるものであることが示唆された。この Kleinberg のスモールワールドネットワークは格子状のネットワークを完全に保持しているため、パスグラフのような分岐のない一本のグラフに近似できる部分は稀であると考えられる。パスグラフに近似することのできない Kleinberg ネットワーク上の位相振動子系で IMPS が上から収束するという結果は、IMPS の収束の仕方の上下の違いはパスグラフに近似できる構造によるものであるという主張を補強する結果である。

Barabási–Albert ネットワークや regular random ネットワーク、パスグラフ上の位相振動子の IMPS はより 2 の近くに収束し、Watts–Strogatz ネットワークは 2 よりも大きい値を収束値とする傾向がある (図 5.6)。Watts–Strogatz ネットワークは regular ring lattice から生成するため、ring 状と近似できる部分ネットワークを他のネットワークよりも持っていることが予測される。結合強度が無限大の極限では、この ring 状のネットワークにおける位相振動子の SPS の符号は、線形動力学モデルにおける ring graph の符号に関する解析と同様になる。つまり長い ring graph 上の SPS は符号が一致せず、IMPS は大きくなる。このような ring 構造も Watts–Strogatz ネットワークにおいて他のネットワークに比べて、IMPS が大きな値になる原因であると考えられる。

ここまでである一定の条件下で IMPS はモデルではなくシステムのパラメータ感度を定量

化できることを示してきた。しかしシステム間で IMPS を比較する際、注意点が2つある。その2点とはシステムとパラメータが

- (i) IMPS はパラメータのゼロ点に依存していること
- (ii) IMPS はパラメータの単位の次元に依存していること

を満たしていなければならないという点である。この2点を明確にする為に、簡単な例を挙げて計算してみる。未知の気体がある直方体に閉じ込められているシステムを考える。このシステムの出力として圧力  $P[\text{Pa}]$  をとるとする。これを理想気体の式でモデル化すると

$$P = \frac{nRT}{V} \quad (5.72)$$

となる。ここで  $V[\text{m}^3]$  は理想気体の体積であり、 $n[\text{mol}]$  は直方体中の気体分子のモル数、 $R[\text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}]$  は理想気体の気体定数、そして  $T[\text{K}]$  は理想気体の絶対温度とした。さらに  $R$  は定数とし、 $n$  と  $T$  と  $V$  をパラメータとした。このモデルの IMPS は3となる。先の注意点 (i) を検証するため、このモデルを絶対温度ではなく摂氏  $C[^\circ\text{C}]$  で記述してみる。 $C$  は定義より  $T = C + 273.15$  である。この摂氏で記述されたモデルの IMPS は  $2 + \left| \frac{C}{C+273.15} \right|$  となる。よって絶対温度で記述されたモデルと摂氏で記述されたモデルとで IMPS は異なる定量化を行ってしまう。これは注意点 (i) に挙げたように IMPS がパラメータのゼロ点に依存しているからである。さらに次の注意点 (ii) の検証のため、システムの体積を直方体の幅  $w[\text{m}]$ 、高さ  $h[\text{m}]$ 、奥行き  $d[\text{m}]$  でモデル化した場合を考える。このとき  $V = wdh$  である。このとき出力  $P$  は

$$P = \frac{nRT}{wdh} \quad (5.73)$$

と書ける。このときパラメータは  $n$ ,  $T$ ,  $w$ ,  $h$ ,  $d$  であり、IMPS は5となる。つまり IMPS はパラメータの単位の次元にも依存する。よってシステム間で IMPS を用いてパラメータ感度を比較するならば、パラメータのゼロ点と単位の次元を一貫させる必要がある。これらの2条件 (i) と (ii) に依存し値が変化する特徴は SPS や MPS にも見られる特徴である。



## 第6章 終章

第1章「序章」では、パラメータ感度とその意義について説明し、問題提起をした。システムの挙動はそのパラメータの値によって決められる。パラメータが変化した場合に出力がどれほど敏感に反応するかということは、システムの1つの重要な特徴である。本論文では一貫して、自然科学におけるシステムの取り扱いを念頭に置いて、詳細なダイナミクスや構造は必ずしも既知ではない、という立場に立っている。そのため、1つのシステムにモデルは複数存在する。その複数存在するモデルからシステムのパラメータ感度を推定する必要がある。ただし既存の手法ではシステムのパラメータ全体への包括的な感度を定量化することはできなかった。

第2章「パラメータ感度分析」ではパラメータ感度の先行研究を紹介し、代表的なパラメータ感度分析手法を紹介した。代表例として誤差伝播則やSPS, MPSを紹介した。SPSは無単位量であるため、単位の接頭辞がミリやナノ、メガなどのように変化しても一定の値で定量化できた。SPSの複数パラメータへの拡張がMPSであった[12]。また一般にシステムをモデル化する際、どのようなモデル化が最適であるのか、どのモデルを用いてシステムのパラメータ感度を測るのが妥当であるのかを知ることは難しい。このようにシステムのパラメータ感度をそのモデルを通して測り知ろうとする際、パラメータ感度の指標はそのモデル化に依存しない形で定義されていれば、モデル化によらずどのモデルからもシステムの情報を得ることができる。しかし先行研究で提案されてきた指標はパラメータ数などのモデル化に依存してしまう特徴があった。

第3章「新指標IMPS」では新たに不変多パラメータ感度(IMPS)を定義し、一定条件化でモデル化に依存しないことを示し、IMPSが有効な例を紹介した。パラメータ数はあるシステムをモデル化する際、冗長にモデル化することで増やすことが可能である。よってパラメータ数には依存しない形でシステムのパラメータ感度を定義できないかと考えた。そこで本論文では、新たにパラメータ感度を測る指標を提案した。新たなパラメータ感度、不変多パラメータ感度(invariant multiparameter sensitivity: IMPS)をSPSのL1ノルムとして定義し、IMPSが一定の値で定量化できる2条件を明らかにした。その2条件とは(1)出力がパラメータの同次関数として表現できること、(2)全てのパラメータについてのSPSの符号が一致していること、である。IMPSとMPSの未知なシステムへの適用した結果、IMPSは未知のシステムを一定の値で定量化し、MPSはモデル化に依存して値を変化させた。

第4章「複雑ネットワーク」では第5章の動力学モデルにおいて必要となる複雑ネットワークの先行研究を説明した。人や社会、道路、コンピュータ、遺伝子などのあらゆるつながりがネットワークとしてみられ、近年ネットワーク研究が盛んになっている。ネットワークの研究はそれぞれのネットワークが共通の特徴を持っていることを明らかにしてきた[17–22]。代表的なネットワークとして、Erdős–Rényi ネットワーク[37]やregular random ネットワーク、Watts–Strogatz ネットワーク[18]、Barabási–Albert ネットワーク[17]を紹介した。

第5章「複雑ネットワーク上の動力学系をIMPSで特徴づける」では第4章で紹介した複雑ネットワーク上に相互作用する動力学系を乗せて、そのIMPSを検討した。第3章で明確にしたIMPSが不変となる2条件が必ずしも満たされないモデルにおけるIMPSを検討した。相互作用する未知なシステムの線形モデル及び非線形モデルにおいてIMPSの定量化を検討した。線形動力学モデルとしては一次元軸上で多数の粒子が相互作用しあう系を用いる。この線形動力学モデルでは(2)の条件が必ずしも満たされなかった。線形動力学モデルのシミュレーションと解析を通して、IMPSがパラメータ数や粒子数などのモデルの取り方に依存しにくく、ほぼ一定の値で定量化できる場合があることが分かった。次に先の2条件のうち(1)も満たされない非線形動力学モデルにおけるIMPSの定量化を検討した。位相振動子が相互作用する未知なシステムの非線形モデルとして、多数の位相振動子がsine関数で結合している系を用いた。また各振動子間を結合するネットワークとしては、第4章で紹介した代表的なネットワークを用いた。また解析的に解けるモデルの解析結果から、IMPSはネットワークの平均パス長に依存した値になることが示唆された。

複数あるモデルからシステムのパラメータ感度を推定する際、一定の条件が満たされれば、システムの感度を定量化できるIMPSはMPSよりも優れているといえる。しかし一方でパラメータ数を増やした冗長なモデル同士を区別して感度を比較するという目的においては、MPSを用いるのが適切な場合もあると考えられる。また単一なモデル化しか存在しないシステムのパラメータ感度を定量化する目的においては、MPSも使うことができるかもしれない。ただし解析的にMPSを求めることはしばしば容易ではない。また1つ1つのパラメータに微小変化を与えつつ、実験的にMPSを求めることも必ずしも容易ではない。近年、複雑ネットワークなどが注目されモデルが大規模化するほど、1つ1つのパラメータを操作することは難しくなる。そこで疑似的に数値実験でMPSを求める手法として疑似多パラメータ感度(Quasi-multiparameter sensitivity: QMPS)も提案されている[15,16]。QMPSは計算コストも考慮に入れられた手法である。またMPSと同様に、IMPSも解析的に求めることはしばしば困難である。さらにIMPSもモデルが大規模化すると計測が困難になるので、近似的に求める方法、もしくは統計的に推定する方法が開発されれば、より便利な手法となることが予想される。よってこの点は今後の研究課題であると考えられる。

本論文では非線形モデルとして位相振動子系を用いた。位相振動子モデルは、結合強度の無限大の極限において線形近似できた。そのようなモデルにおけるIMPSを検討したが、線形近似ができないような非線形性のあるモデルにおいてIMPSがどのような特性を持つのかを調べるのは1つの今後の課題である。またリアプノフ指数とIMPSの関連も検討してみるべきであろう。また実ネットワーク上のダイナミクスとしてパケット通信ネットワーク[59]や経済ネットワーク[60]、食物連鎖ネットワーク[61]、伝染病の感染ネットワーク[62]などにIMPSを適用することも考えられる。

本研究は特に自然科学においてシステムはしばしば未知であるという立場から、それらのモデルを使って目的のシステムの情報を推し量ろうという試みを行った。生物学などではホメオスタシスという言葉にも代表されるように、システムのロバスト性が関心を集めている[16,63,64]。環境要因などに対して、出力の変化が小さいことや、内部状態を一定に保とうとする特性のことをロバスト性と定義することがある[16,63,64]。ロバスト性という言葉は、感度という言葉の裏返しである。一般的に感度が高ければ、ロバスト性は低く、感度が低ければロバスト性が高いと言われる。パラメータの外乱と出力の関係を表現したのが誤差伝播則であった。しかし包括的なパラメータセットに対しての感度を定義するもので

はなかった。また MPS は、システムの定量化はできなかった。そこで不変多パラメータ感度、IMPS を提案するに至った。IMPS は一定の条件下でモデル化によらずにシステムのパラメータ感度を測ることができる指標となることが分かった。本論文の議論より、自然科学におけるシステムのロバスト性を定量化する際も IMPS は有効であると考えられる。一定の条件に縛られてはいるものの、本論文の提案した IMPS がそのような自然科学研究の一助となれば幸いである。



## 謝辞

本研究は、著者が東京工業大学総合理工学研究科知能システム科学専攻修士課程及び博士課程在学中に同専攻中村清彦教授のもとで行ったものである。この度、博士論文をまとめるにあたり中村清彦教授及び田中琢真助教には多大なご尽力を頂きました。具体的な助言や密なご指導を頂き心より感謝しております。また学位論文審査の過程では同専攻、樺島祥介教授、三宅美博教授、青西亨准教授、豊泉太郎連携准教授から貴重なご意見を頂き、心より感謝を申し上げます。

中村教授には修士課程から引き続きお世話になり、神経科学分野の専門知識だけでなく科学者としての心得、数理モデルの在り方、研究の進め方、論文の書き方など、熱心にご教授頂き感謝してもしきれません。また自分の伝えるべきことを正確に伝え、かつそのオリジナリティや面白みを伝えていくことなども中村清彦教授のもとで学ばせて頂き、非常に実りある研究生活を過ごすことができました。修士課程博士課程と5年に渡り、自己の興味の赴くまま、自由に考え、研究し、悩み、討論し、それを表現する場を与えていただき、感謝しております。ここで学び経験したことをこの先の人生で活かしていきたいと思えます。

また私がいつ相談に行っても快く時間を割いて頂いた田中琢真先生には研究の序盤から論文執筆に至るまで親身に指導して頂き非常に感謝しております。ありがとうございました。

最後に私の修士課程からあわせて5年間を支えて下さった全ての方々に深く感謝の意を表したいと思えます。ありがとうございました。

2014年 12月



## 参考文献

1. AL Hodgkin and AF Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *The Journal of Physiology*, Vol. 117, No. 4, pp. 500–544, 1952.
2. LA Pipes. An operational analysis of traffic dynamics. *Journal of Applied Physics*, Vol. 24, No. 3, pp. 274–281, 1953.
3. EN Lorenz. Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the Atmospheric Sciences*, Vol. 20, No. 2, pp. 130–141, 1963.
4. T Aoyagi, Y Kang, N Terada, T Kaneko, and T Fukai. The role of  $\text{Ca}^{2+}$ -dependent cationic current in generating gamma frequency rhythmic bursts: modeling study. *Neuroscience*, Vol. 115, No. 4, pp. 1127–1138, 2002.
5. JV Leeds and G Ugron. Simplified multiple parameter sensitivity calculation and continuously equivalent networks. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, Vol. 14, No. 2, pp. 188–191, 1967.
6. DM Hamby. A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models. *Environmental Monitoring and Assessment*, Vol. 32, No. 2, pp. 135–154, 1994.
7. PJ Vermeulen and DCJ de Jongh. Parameter sensitivity of the ‘limits to growth’ world model. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 1, No. 1, pp. 29–32, 1976.
8. JC Helton, RL Iman, and JB Brown. Sensitivity analysis of the asymptotic behavior of a model for the environmental movement of radionuclides. *Ecological Modelling*, Vol. 28, No. 4, pp. 243–278, 1985.
9. K-E Lindenschmidt. The effect of complexity on parameter sensitivity and model uncertainty in river water quality modelling. *Ecological Modelling*, Vol. 190, No. 1, pp. 72–86, 2006.
10. PJ Goddard and R Spence. Efficient method for the calculation of first- and second-order network sensitivities. *Electronics Letters*, Vol. 5, No. 16, pp. 351–352, 1969.
11. A Rosenblum and M Ghausi. Multiparameter sensitivity in active RC networks. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, Vol. 18, No. 6, pp. 592–599, 1971.

12. AJ Goldstein and F Kuo. Multiparameter sensitivity. *IRE Transactions on Circuit Theory*, Vol. 8, No. 2, pp. 177–178, 1961.
13. JD Schoeffler. The synthesis of minimum sensitivity networks. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, Vol. 11, No. 2, pp. 271–276, 1964.
14. T Roska. Summed-sensitivity invariants and their generation. *Electronics Letters*, Vol. 4, No. 14, pp. 281–282, 1968.
15. K Maeda and H Kurata. Quasi-multiparameter sensitivity measure for robustness analysis of complex biochemical networks. *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 272, No. 1, pp. 174–186, 2011.
16. 前田和勲, 倉田博之. 概日リズムのフィードバックシステムのロバストネス解析. 情報処理学会研究報告, Vol. 2011, No. 7, pp. 1–6, 2011.
17. A-L Barabási and R Albert. Emergence of scaling in random networks. *Science*, Vol. 286, No. 5439, pp. 509–512, 1999.
18. DJ Watts and SH Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *Nature*, Vol. 393, No. 6684, pp. 440–442, 1998.
19. A-L Barabási, R Albert, and H Jeong. Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world-wide web. *Physica A*, Vol. 281, No. 1, pp. 69–77, 2000.
20. H Jeong, B Tombor, R Albert, ZN Oltvai, and A-L Barabási. The large-scale organization of metabolic networks. *Nature*, Vol. 407, No. 6804, pp. 651–654, 2000.
21. VM Eguiluz, DR Chialvo, GA Cecchi, M Baliki, and AV Apkarian. Scale-free brain functional networks. *Physical Review Letters*, Vol. 94, No. 1, 018102, 2005.
22. 増田直紀, 今野紀雄. 複雑ネットワーク. 近代科学社, 2010.
23. DS Minors, JM Waterhouse, and A Wirz-Justice. A human phase-response curve to light. *Neuroscience Letters*, Vol. 133, No. 1, pp. 36–40, 1991.
24. GTJ Van Der Horst, M Muijtjens, K Kobayashi, R Takano, S Kanno, M Takao, J de Wit, A Verkerk, APM Eker, D van Leenen, R Buijs, D Bootsma, JSJ Hoeijmakers, and A Yasui. Mammalian Cry1 and Cry2 are essential for maintenance of circadian rhythms. *Nature*, Vol. 398, No. 6728, pp. 627–630, 1999.
25. MK Bunger, LD Wilsbacher, SM Moran, C Clendenin, LA Radcliffe, JB Hogenesch, MC Simon, JS Takahashi, and CA Bradfield. *Mop3* is an essential component of the master circadian pacemaker in mammals. *Cell*, Vol. 103, No. 7, pp. 1009–1017, 2000.

26. H Ukai, T Kobayashi, M Nagano, K Masumoto, M Sujino, T Kondo, K Yagita, Y Shigeyoshi, and HR Ueda. Melanopsin-dependent photo-perturbation reveals desynchronization underlying the singularity of mammalian circadian clocks. *Nature Cell Biology*, Vol. 9, No. 11, pp. 1327–1334, 2007.
27. J DeBruyne, D Weaver, and S Reppert. CLOCK and NPAS2 have overlapping roles in the suprachiasmatic circadian clock. *Nature Neuroscience*, Vol. 10, No. 5, pp. 543–545, 2007.
28. M Doi, A Ishida, A Miyake, M Sato, R Komatsu, F Yamazaki, I Kimura, S Tsuchiya, H Kori, K Seo, Y Yamaguchi, M Matsuno, JM Fustin, R Tanaka, Y Santo, H Yamada, Y Takahashi, M Araki, K Nakao, S Aizawa, M Kadabayashi, K Obrietan, G Tsujimoto, and H Okamura. Circadian regulation of intracellular G-protein signalling mediates intercellular synchrony and rhythmicity in the suprachiasmatic nucleus. *Nature Communications*, Vol. 2, pp. 1–9, 2011.
29. J-C Leloup and A Goldbeter. Toward a detailed computational model for the mammalian circadian clock. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 100, No. 12, pp. 7051–7056, 2003.
30. HP Mirsky, AC Liu, DK Welsh, SA Kay, and FJ Doyle. A model of the cell-autonomous mammalian circadian clock. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 106, No. 27, pp. 11107–11112, 2009.
31. K Fujiwara and K Nakamura. Detailed model of mammalian circadian rhythm with cytosolic  $\text{Ca}^{2+}$  dynamics, 2012. Poster presented at Neuroscience 2012.
32. K Fujiwara, T Tanaka, and K Nakamura. Invariant multiparameter sensitivity of oscillator networks. In *Neural Information Processing*, Vol. 8834, pp. 183–190. Springer, 2014.
33. K Fujiwara, T Tanaka, and K Nakamura. Invariant multiparameter sensitivity to characterize dynamical systems on complex networks. *Journal of the Physical Society of Japan*, in press, 2014.
34. H Kono and T Mizumachi. Profit sensitivity analysis under uncertainties for cases of production capacity surplus and shortage. *日本経営工学会論文誌*, Vol. 59, No. 6, pp. 464–476, 2009.
35. H Kurata, T Tanaka, and F Ohnishi. Mathematical identification of critical reactions in the interlocked feedback model. *PLoS ONE*, Vol. 2, No. 10, e1103, 2007.
36. J Yoon and TS Deisboeck. Investigating differential dynamics of the mapk signaling cascade using a multi-parametric global sensitivity analysis. *PLoS ONE*, Vol. 4, No. 2, e4560, 2009.

37. P Erdős and A Rényi. On random graphs I. *Publicationes Mathematicae Debrecen*, Vol. 6, pp. 290–297, 1959.
38. S Milgram. The small world problem. *Psychology Today*, Vol. 2, No. 1, pp. 60–67, 1967.
39. 三隅讓二, 木下富雄. 「世間は狭い」 か?: 日本社会の目に見えない人間関係ネットワークを推定する. *社会心理学研究*, Vol. 7, No. 1, pp. 8–18, 1992.
40. R Albert, H Jeong, and A-L Barabási. Diameter of the world-wide web. *Nature*, Vol. 401, No. 6749, pp. 130–131, 1999.
41. WW Zachary. An information flow model for conflict and fission in small groups. *Journal of Anthropological Research*, pp. 452–473, 1977.
42. M Girvan and ME Newman. Community structure in social and biological networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 99, No. 12, pp. 7821–7826, 2002.
43. S Fortunato. Community detection in graphs. *Physics Reports*, Vol. 486, No. 3, pp. 75–174, 2010.
44. R Albert and A-L Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 74, No. 1, pp. 47–97, 2002.
45. Y Kuramoto. *Chemical oscillations, waves and turbulence*. Springer, Berlin, 1984.
46. S Nakata, Y Doi, and H Kitahata. Synchronized sailing of two camphor boats in polygonal chambers. *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 109, No. 5, pp. 1798–1802, 2005.
47. H Kitahata, J Taguchi, M Nagayama, T Sakurai, Y Ikura, A Osa, Y Sumino, M Tanaka, E Yokoyama, and H Miike. Oscillation and synchronization in the combustion of candles. *The Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 113, No. 29, pp. 8164–8168, 2009.
48. I Aihara. Modeling synchronized calling behavior of japanese tree frogs. *Physical Review E*, Vol. 80, No. 1, 011918, 2009.
49. M Yomosa, T Mizuguchi, and Y Hayakawa. Spatio-temporal structure of hooded gull flocks. *PLoS ONE*, Vol. 8, No. 12, e81754, 2013.
50. R Merris. Laplacian matrices of graphs: a survey. *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 197, pp. 143–176, 1994.
51. R Olfati-Saber and RM Murray. Consensus problems in networks of agents with switching topology and time-delays. *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. 49, No. 9, pp. 1520–1533, 2004.

52. A Takamatsu, T Fujii, and I Endo. Time delay effect in a living coupled oscillator system with the *plasmodium* of *Physarum polycephalum*. *Physical Review Letters*, Vol. 85, No. 9, pp. 2026–2029, 2000.
53. I Aihara, H Kitahata, K Yoshikawa, and K Aihara. Mathematical modeling of frogs' calling behavior and its possible application to artificial life and robotics. *Artificial Life and Robotics*, Vol. 12, No. 1–2, pp. 29–32, 2008.
54. R Miyata, K Ota, and T Aonishi. Optimal design for hetero-associative memory: hippocampal CA1 phase response curve and spike-timing-dependent plasticity. *PLoS ONE*, Vol. 8, No. 10, e77395, 2013.
55. T Ichinomiya. Frequency synchronization in a random oscillator network. *Physical Review E*, Vol. 70, No. 2, 026116, 2004.
56. NI Fisher. *Statistical analysis of circular data*. Cambridge University Press, 1995.
57. J Kleinberg. The small-world phenomenon: An algorithmic perspective. In *Proceedings of the thirty-second annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 163–170. ACM, 2000.
58. J Kleinberg. Navigation in a small world. *Nature*, Vol. 406, No. 6798, pp. 845–845, 2000.
59. L Zhao, Y-C Lai, K Park, and N Ye. Onset of traffic congestion in complex networks. *Physical Review E*, Vol. 71, No. 2, 026125, 2005.
60. W Souma, Y Fujiwara, and H Aoyama. Complex networks and economics. *Physica A*, Vol. 324, No. 1, pp. 396–401, 2003.
61. PH Warren. Making connections in food webs. *Trends in Ecology & Evolution*, Vol. 9, No. 4, pp. 136–141, 1994.
62. Y Moreno, R Pastor-Satorras, and A Vespignani. Epidemic outbreaks in complex heterogeneous networks. *The European Physical Journal B*, Vol. 26, No. 4, pp. 521–529, 2002.
63. MK Halushka, J-B Fan, K Bentley, L Hsie, N Shen, A Weder, R Cooper, R Lipshutz, and A Chakravarti. Patterns of single-nucleotide polymorphisms in candidate genes for blood-pressure homeostasis. *Nature Genetics*, Vol. 22, No. 3, pp. 239–247, 1999.
64. ME Csete and JC Doyle. Reverse engineering of biological complexity. *Science*, Vol. 295, No. 5560, pp. 1664–1669, 2002.