線形フィードバック系における情報熱力学

藤谷洋平 （慶應義塾大学理工学部）

制御される系 (プラント) が、温度 T の熱浴に触れているとする。以下で、β は Boltzmann 定数と T の積の逆数とする。離散時間で記述することにして、k 番目の時刻のプラントの状態変数を $\boldsymbol{x}_k$ とする。これが、線形 Langevin 方程式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = A_k\boldsymbol{x}_k + B_k\boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{w}_k \tag{1}$$

に従うとする。入力 $\boldsymbol{u}_k$ は、状態変数を時刻 k まで測定して決める。熱雑音 $\boldsymbol{w}_k$ は白色で、平均はゼロとする。通常、係数行列 A_k および B_k ならびに $\boldsymbol{w}_k$ は、k に依らない。

各時刻で入力を切り替えていく。時刻 k でのプラントのエネルギは、$E(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{u}_{k-1})$ から $E(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{u}_k)$ に変わる。これが、外部がプラントにした仕事と考えられる。式 (1) による（つまり順過程の）遷移確率を $P_{k+1|k}\left(\boldsymbol{x}_{k+1}|\boldsymbol{x}_k;\boldsymbol{u}_k\right)$ と書く。プラントの始状態は入力 $\boldsymbol{u}_0$ の下での平衡状態とする。終状態は入力 $\boldsymbol{u}_N$ の下での平衡状態とする。時間反転した変数を * で表わし、時間反転した Langevin 方程式に伴う（つまり逆過程の）遷移確率を $\overleftarrow{P}_{k|k+1}$ とする。各ステップでの詳細釣り合い

$$P_{k+1|k}\left(\boldsymbol{x}_{k+1}|\boldsymbol{x}_k;\boldsymbol{u}_k\right)e^{-\beta E(\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{u}_k)} = \overleftarrow{P}_{k|k+1}\left(\boldsymbol{x}^*_k|\boldsymbol{x}^*_{k+1};\boldsymbol{u}^*_k\right)e^{-\beta E(\boldsymbol{x}_{k+1},\boldsymbol{u}_k)} \ . \tag{2}$$

を仮定する。式 (1) が、このような性質を持っているとするわけである。プラントの発展が平衡に近いと仮定して、線形 Langevin 方程式を使ったが、入力が変わらない時この式は平衡のまわりのゆらぎも記述する。そのことの帰結が、上記の local detailed balance である。

式 (2) をかけあわせていくことで、

$$e^{\beta(\Delta F - W)}G = \overleftarrow{G} \tag{3}$$

を得る。ここで、ΔF は始状態から終状態までのプラントの Helmholtz 自由エネルギの変化分であり、G と $\overleftarrow{G}$ は次で定義する：

$$G \equiv P_0(\boldsymbol{x}_0)\left\{\prod_{k=0}^{N-1} P_{k+1|k}\left(\boldsymbol{x}_{k+1}|\boldsymbol{x}_k;\boldsymbol{u}_k\right)\right\} \ , \tag{4}$$

$$\overleftarrow{G} \equiv \overleftarrow{P}_N(\boldsymbol{x}^*_N)\left\{\prod_{k=0}^{N-1} \overleftarrow{P}_{k|k+1}\left(\boldsymbol{x}^*_k|\boldsymbol{x}^*_{k+1};\boldsymbol{u}^*_k\right)\right\} \ . \tag{5}$$

ここで P_0 は順過程における時刻 $k=0$ での状態変数の確率密度を表す。フィードバックがなければ、式 (4) は順過程における状態変数が $\boldsymbol{x}_{[0,N]} \equiv \boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N$ である確率密度を表し、式 (5) は逆過程における状態変数が $\boldsymbol{x}^*_{[0,N]}$ である確率密度を表すことになる。この場合、文献 [1] にあるようにして、

$$\langle e^{-\beta(W-\Delta F)}\rangle = 1 \tag{6}$$

という Jarzynski 等式 [2] が導かれる。ここで $\langle\cdots\rangle$ は統計平均をあらわすとする。

フィードバックがあると、順過程の Markov 性が失われ、式 (6) は導けない。代わりにどうなるかを、フィードバック系に条件をつけて議論しよう [3]。各時刻の測定量を

$$\boldsymbol{y}_k = C_k\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}_k \tag{7}$$

とする。係数行列 C_k は、必ずしも正方行列とは限らない。センサ雑音 $\boldsymbol{v}_k$ は白色とする。また、時刻 k における状態変数の推定量 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$ を、その時刻までの測定量 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ に線形として、最小分散

推定で求める。$k=1,2,\ldots,N-1$ の入力を、各時刻での状態変数の推定量 $\hat{\boldsymbol{x}}_k$ に比例するとする：

$$\boldsymbol{u}_k = -K_k \hat{\boldsymbol{x}}_k \ . \tag{8}$$

ここで K_k はゲインと呼ばれる。この仕組みを線形レギュレータという。ゲインをどのように決めるかは、あとで議論する。

状態変数を $\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_k^{(1)} + \boldsymbol{x}_k^{(2)}$ と分けて、それぞれが

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{k+1}^{(1)} &= A_k \boldsymbol{x}_k^{(1)} + B_k \boldsymbol{u}_k \ , && (9) \\ \boldsymbol{x}_{k+1}^{(2)} &= A_k \boldsymbol{x}_k^{(2)} + \boldsymbol{w}_k && (10) \end{aligned}$$

を、$k=0,1\ldots,N-1$ で満たすようにする [4]。あわせると式 (1) が満たされることがわかる。はじめの $\boldsymbol{x}_0^{(1)}$ は決めてしまう。入力 $\boldsymbol{u}_0$ も決めておく。すると、$\boldsymbol{x}_1^{(1)}$ も決まる。式 (10) からわかるように、$\boldsymbol{x}_{[0,k]}^{(2)}$ は入力によらず、マルコフ過程となる。さらに、$2 \le k \le N$ の場合、$\boldsymbol{y}_{[1,k-1]}$ が決まれば、$\boldsymbol{u}_{k-1}$ が決まり、$\boldsymbol{x}_k^{(1)}$ が決まる。したがって、$k=1,\ldots,N-1$ に対して、測定値 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ が得られれば、

$$\boldsymbol{y}_k^{(2)} \equiv \boldsymbol{y}_k - C_k \boldsymbol{x}_k^{(1)} = C_k \boldsymbol{x}_k^{(2)} + \boldsymbol{v}_k \tag{11}$$

を計算することができる。

このようにして、測定値 $\boldsymbol{y}_{[1,k]}$ を得た時点で、確定した $\boldsymbol{y}_{[1,k]}^{(2)}$ の値を使って、$\boldsymbol{x}_k^{(2)}$ と $\boldsymbol{x}_{k+1}^{(2)}$ の推定量を計算することができる。時刻 $k=0$ での $\boldsymbol{x}_1^{(2)}$ の推定量は、$\langle \boldsymbol{x}_1^{(2)} \rangle$ とする。なお、$\boldsymbol{x}_{[0,k+1]}^{(1)}$ は、推定するまでもなく、確定値が得られる。このようにして、次々と状態変数の推定量を求めていく方法を Kalman フィルタという。詳細のわかりやすい解説は文献 [5] にある。

ある量の統計平均をとることは、そもそもは $\boldsymbol{x}_0$ と $\boldsymbol{w}_{[0,N-1]}$ および $\boldsymbol{v}_{[1,N-1]}$ に関して平均をとることだったが、これを $\boldsymbol{x}_{[0,N]}^{(2)}$ と $\boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ に関しての平均をとることと考えることもできる。しかも上述のように、$\boldsymbol{x}_{[0,k]}^{(2)}$ はマルコフ過程である。これらのことに注意して、式 (4) と式 (5) を使って計算していくと、式 (6) の代わりに

$$e^{\beta \Delta F} \langle e^{-\beta W - \mathcal{I}_2} \rangle = 1 \tag{12}$$

を得る。ここで、$\mathcal{I}_2$ は

$$\mathcal{I}_2\left(\boldsymbol{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) \equiv \ln\left\{P\left(\boldsymbol{x}_{[1,N-1]}^{(2)} | \boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}\right) / P\left(\boldsymbol{x}_{[1,N-1]}^{(2)}\right)\right\} \tag{13}$$

で定義する。式 (12) が、ここで考えた線形フィードバック系で書き換えられた Jarzynski 等式である。これから、

$$\langle W \rangle \ge \Delta F - k_B T \langle \mathcal{I}_2 \rangle \tag{14}$$

を導ける。ここで、$\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ は $\boldsymbol{x}_{[1,N-1]}^{(2)}$ と $\boldsymbol{y}_{[1,N-1]}^{(2)}$ の間の相互情報量である。式 (14) の等号成立条件は、すべてが決定論的であることである。

式 (12) は、任意のゲインについてなりたつ。通常の制御では、ゲインを評価関数が最小になるように決めることが多い。評価関数が

$$\sum_{k=1}^{N-1} \langle \boldsymbol{x}_{k+1}^T Q_{k+1} \boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{u}_k^T R_k \boldsymbol{u}_k \rangle \tag{15}$$

のように二次形式で与えられるとする。ここで $Q_{[2,N]}$ と $R_{[1,N-1]}$ は実対称行列である。このとき、各時刻の最適ゲインを求める手続きは、推定量を求めるとは独立に行うことができる。このことを分離定理という [4, 6]。

さらに、関わっている確率変数がすべて Gaussian とする。この場合を、LQG 問題 (linear, quadratic, Gaussian) という。このとき、広いクラスの制御系のなかで、最適な制御が線形レギュレータであたえられることが示せる。またこのとき、Kalman フィルタの計算途中で求められる行列 P_k と M_k を使って、相互情報量が簡便に

$$\langle \mathcal{I}_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \ln \det \left(P_k^{-1} M_k \right) \tag{16}$$

と計算できる [5, 7]。

通常の熱力学第二法則は $\langle W \rangle \geq \Delta F$ と書ける。左辺は過程途中の詳細に依らないので、最小仕事は、等号成立条件である準静過程のときに得られることがわかる。一方、この式をフィードバック系で書き換えた形になっている式 (14) では、過程の設定条件に依る量が $\langle W \rangle$ と $\langle \mathcal{I}_2 \rangle$ のふたつがあるので、どのような条件で仕事が最小になるのか、わかりにくい。当日の発表では、この点について、具体的な例における数値計算結果を示すことにする。

以上の結果は、鈴木博之氏との共同研究による。沙川貴大氏および山本直樹氏との議論に感謝する。最後に、関連する研究成果について付記する。文献 [3] より以前に、量子系の一回測定フィードバック系で、熱力学第二法則を拡張した式を導いたのは文献 [8] であり、また古典系の一回測定フィードバック系で Jarzynski 等式を拡張したのは文献 [9] である。古典系の多数回測定線形フィードバック系で数値計算した例は文献 [10] にある。また、文献 [3] より後に、古典系の多数回測定の一般のフィードバック系で、Jarzynski 等式を拡張した研究は文献 [11] および [12] にある。

References

[1] G. E. Crooks: J. Stat. Phys. **90** (1998) 1481.

[2] C. Jarzynski: Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 2690.

[3] Y. Fujitani and H. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010) 104003.

[4] W. M. Wonham: SIAM J. Control **6** (1968) 312.

[5] S. Arimoto: *Kalman Filter* (Sangyo-Tosho, Tokyo, 1977) [in Japanese] Chapters 3 and 6.

[6] Y. Sawaragi, T. Soeda, and T. Nakamizo: *Kakuritsu Sistemu Seigyo no Kiso (Fundamentals in Stochastic Control)* (Nisshin, Tokyo, 1975) [in Japanese] Chapters 4-6.

[7] S. Omatu, Y. Tomita, and T. Soeda: IEEE Trans. Information Theory **22** (1976) 593.

[8] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 080403.

[9] T. Sagawa and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 090602.

[10] H. Suzuki and Y. Fujitani: J. Phys. Soc. Jpn **78** (2009) 074007.

[11] J. M. Horowitz and S. Vaikuntanathan: Phys. Rev. E **82** (2010) 061120.

[12] T. Sagawa, Ph. D thesis, (Faculty of Science, University of Tokyo, 2011), Chapters 8 and 9.