

2種粒子 TASEP における有効データ長分布からの パラメータ推定について

金井政宏¹, 山崎啓介²

¹ 東京大学大学院数理科学研究科

² 東京工業大学大学院知能システム科学専攻

概要

本稿では周期格子上で同期更新される 2 種粒子 TASEP に対してパラメータ推定を行う。このモデルのパラメータは成分の混合比と各々の前進確率の 3 つで表される。時空図において前進可能な車両が実際に進んだか否かを表したものを有効データと呼ぶことにする。有効データは各車両の動きに依存するため 1 つの時空図から長さの分布が得られる。我々は定常状態における有効データ長分布をパラメータを用いて解析的に示し、これを利用してパラメータ推定を行う場合の精度を導出した。

On Parameter Estimation of Two-Species TASEP Based on the Density of Significant Data Lengths

Masahiro Kanai¹, Keisuke Yamazaki²

¹ Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo

² Department of Computational Intelligence and Systems Science, Tokyo Institute of Technology

Abstract

In the present paper, we study parameter estimation of the two-species totally asymmetric exclusion process (TASEP) with periodic boundary and parallel dynamics. The model has parameters consisting of the mixing ratio and hop rates of the species. Data showing if vehicles next to an empty cell go ahead or not are referred to as significant data. The length density of the significant data is obtained from spatiotemporal data. We reveal the analytic form of the static-state density with respect to the parameters, and derive the accuracy of estimation based on the density.

1 はじめに

1.1 目的

本研究の動機は、1 車線高速道路上における高速車と低速車の、それぞれの速度および混合比を時空図から推定することにある。高速車と低速車の 2 種類に限ったのは、高速道路の法定速度が 100km/h (乗用車) と 80km/h (トラック) の 2 種類となっていることによる。また、周期境界条件を仮定するのは出入口の影響を考えず問題を単純化するためである。

今回は、ある 1 台の車の走行データから、高速車と低速車の混合率および速度の比率を見積もることを想定している。

1.2 モデルとパラメータ推定

2 種類の車 A, B について、1 次元 L サイトの周期格子上で同期更新される TASEP を考える。ただし、系は定常状態にあるものとする。各車の前進確率を p_A, p_B 、車の数を N_A, N_B ($N = N_A + N_B$, $\lambda = N_A/N$) とし、 $\omega = (\lambda, p_A, p_B)$ をパラメータとする。車の密

度は $\rho = N/L$ である。

パラメータ $\omega^* = (\lambda^*, p_A^*, p_B^*)$ をもつ TASEP から生成された時空図を考える。この TASEP を真のモデル、 ω^* を真のパラメータと呼ぶ。まず、時空図から T 回分の時刻を無作為に選ぶ。もし $i (= 1, \dots, N)$ 番目の車が 1 以上の車間距離を持っていれば、この車がホップしたかどうかのデータの採取が可能なので、この時刻を小さい順に $t_j^i (j = 1, 2, \dots)$ と記録しておく。こうして、車間距離が 0 である時刻は（データが取れないので）除かれる。（また、ここで無作為抽出とする理由については §4 を参照。）

このように記録した時刻 t_j^i において、車が実際に前進すれば $x_j^i = 1$ 、そうでなければ $x_j^i = 0$ とする。各車における x_j^i を集めたものを x^i とし、その長さを l_i とする。つまり $x^i = \{x_1^i, \dots, x_{l_i}^i\}$ は長さ l_i のバイナリデータとなる。全ての車を集めたデータセット $X = \{x^1, \dots, x^N\}$ を有効データと呼び、これを基に ω を推定する。

一般に i 番の車が長さ l_i のバイナリデータ x^i を生成する確率は、この車のホップ確率を p_i とすれば、

$$P(x^i | \omega, l_i) = \prod_{j=1}^{l_i} p_i^{x_j^i} (1 - p_i)^{1-x_j^i},$$

と表される。有効データにおけるバイナリデータの長さの分布を $P_T(l|\omega)$ とすると、モデルの尤度は

$$L_X(\omega) = \prod_{i=1}^N P(x^i | \omega, l_i) P_T(l_i | \omega),$$

と定義される。

尤度はパラメータ ω を有するモデルのデータへの適合度を表しており、これを最大化するパラメータを求める手法は最尤推定法と呼ばれる。最尤推定量は

$$\hat{\omega}_X = \arg \max_{\omega} L_X(\omega) = \arg \max_{\omega} \ln L_X(\omega),$$

で与えられる。

しかしながら 2 種粒子 TASEP において最大化に必要な $P_T(l|\omega)$ の解析的な表現（パラメータと長さの関数としての表現）が得られていない。一方で $P_T(l|\omega)$ 自身もパラメータの情報を有しており、これから推定を行うことが可能である。そこで本稿ではまず $P_T(l|\omega)$ の解析的表現を計算し、より基本的な推定法として次式の尤度

$$L_l(\omega) = \prod_{i=1}^N P_T(l_i = l | \omega),$$

を用いた最尤推定を考え、その推定精度を導出する。また、このときの最尤推定量を

$$\hat{\omega}_l = \arg \max_{\omega} L_l(\omega) = \arg \max_{\omega} \ln L_l(\omega),$$

とおく。

推定精度に用いる評価関数はパラメータの平均 2 乗誤差

$$D_T(L) = E_X \left[\|\hat{\omega}_l - \omega^*\|^2 \right],$$

とする。ここで $E_X[\cdot]$ は訓練に用いるデータでの平均を意味する。定義から系のサイズ L が大きくなるにつれ誤差関数は零へと収束する。

2 主結果

2.1 2 種粒子 TASEP の定常分布

系が定常状態にある場合、車間距離 $m = (m_i)$ の実現確率は次のように与えられる。簡単のため、A の粒子の番号を α 、B のものを β で表すことにすると、 $M = L - N$ として

$$P(m|\omega) = \frac{\prod_{\alpha=1}^{N_A} f(m_{\alpha}; p_A) \prod_{\beta=1}^{N_B} f(m_{\beta}; p_B)}{Z_{NM}(\omega)},$$

$$Z_{NM}(\omega) = \sum_m \prod_{\alpha=1}^{N_A} f(m_{\alpha}; p_A) \prod_{\beta=1}^{N_B} f(m_{\beta}; p_B).$$

ここで、 $f(m; p)$ は

$$f(0; p) = 1 - p, \quad f(m > 0; p) = \left(\frac{1-p}{p} \right)^m$$

により与えられる [1]。

いま、無作為に選んだ車の車間距離をやはり無作為に T 回計測し、1 以上になった回数を l_i 、その実現確率を $P_T(l_i|\omega)$ とする。定常状態にあるので、ここで選ばれた車の車間距離が 0 になる確率は $P(m_i = 0|\omega)$ である。

特に $T = 1$ のとき、すなわち 1 回の計測では

$$P_1(l_i = 0|\omega) = P(m_i = 0|\omega),$$

$$P_1(l_i = 1|\omega) = 1 - P(m_i = 0|\omega).$$

$T > 1$ の場合は、

$$P_T(l_i|\omega) = \binom{T}{l_i} (1 - P(m_i = 0|\omega))^{l_i} P(m_i = 0|\omega)^{T-l_i}$$

となる。ここで、 $i = \alpha$ と $i = \beta$ の場合があるので、尤度関数 $L_l(\omega)$ を求めることは $P(m_{\alpha} = 0|\omega)$ および $P(m_{\beta} = 0|\omega)$ を求めることに帰着される。

2.2 分配関数

$P(m_i = 0|\omega)$ を求めるために分配関数から計算する。
まず、定義により

$$Z_{NM}(\omega) = \sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A M_A}^o(p_A) Z_{N_B M_B}^o(p_B).$$

ただし、 $Z_{NM}^o(p)$ は 1 種粒子 TASEP の分配関数で、

$$Z_{N,0}^o(p) = (1-p)^N,$$

$$Z_{N,M \geq 1}^o(p) = \frac{(1-p)^{M+N-1}}{p^M} NF \left(\begin{matrix} 1-N, 1-M \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right),$$

と得られている [2]。ここで、 $F()$ は Gauss の超幾何関数で、その漸近展開により、 $N \rightarrow \infty$ の極限で

$$Z_{NM}^o(p) \sim \exp(N\phi(\rho; p)),$$

$$\phi(\rho; p) = \log \left(p \left(\frac{X+2\rho-1}{1-X} \right)^{1/\rho} \frac{X-2\rho+1}{X+2\rho-1} \right), \quad (1)$$

$$(\rho = N/(M+N), \quad X = \sqrt{1-4p\rho(1-\rho)}),$$

となることも知られている [2]。

2.3 $P(m_i = 0|\omega)$

定義より

$$P(m_{\alpha'} = 0|\omega)$$

$$= \frac{f(0; p_A)}{Z_{NM}(\omega)} \sum_{\{m_{\alpha'}=0\}} \prod_{\alpha \neq \alpha'} f(m_{\alpha}; p_A) \prod_{\beta=1}^{N_B} f(m_{\beta}; p_B)$$

$$= (1-p_A) \frac{\sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A-1, M_A}^o(p_A) Z_{N_B M_B}^o(p_B)}{\sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A M_A}^o(p_A) Z_{N_B M_B}^o(p_B)}.$$

同様に、

$$P(m_{\beta'} = 0|\omega)$$

$$= (1-p_B) \frac{\sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A, M_A}^o(p_A) Z_{N_B-1, M_B}^o(p_B)}{\sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A M_A}^o(p_A) Z_{N_B M_B}^o(p_B)}.$$

式 (1) を用いて $P(m_{\alpha'} = 0|\omega)$ および $P(m_{\beta'} = 0|\omega)$ の $N \rightarrow \infty$ 極限を計算する。極限で $Z_{NM}^o(p)$ は指数関数的に発散するから、各総和において最大の項のみを残せばよい。

まず分母について考える。 $N_A + N_B = N$, $N_A = \lambda N$ より、 $h = M/N$ とすれば、

$$\frac{N_A}{N_A + M} = \frac{\lambda}{\lambda + h}, \quad \frac{N_B}{N_B + M} = \frac{1-\lambda}{1-\lambda+h},$$

であるから、 $N \rightarrow \infty$ で

$$Z_{N_A M_A}^o(p_A) \sim \exp \left[N_A \phi \left(\frac{\lambda}{\lambda + hx}; p_A \right) \right],$$

$$Z_{N_B M_B}^o(p_B) \sim \exp \left[N_B \phi \left(\frac{1-\lambda}{1-\lambda+h(1-x)}; p_B \right) \right],$$

$$(M_A + M_B = M, \quad x = M_A/M),$$

である。従って、

$$\lambda \phi \left(\frac{\lambda}{\lambda + hx}; p_A \right) + (1-\lambda) \phi \left(\frac{1-\lambda}{1-\lambda+h(1-x)}; p_B \right), \quad (2)$$

を最大にする x を求める。

求める x を $x^* = x^*(\rho; \omega)$ とすると、 $x = x^*$ のとき (2) の x による微分が 0 となる。実際、 $0 < x < 1$ のとき

$$\frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \log Z_{N_A, xM}^o(p_A) Z_{N_B, (1-x)M}^o(p_B) < 0,$$

となるから、(2) は確かに $x = x^*$ で最大となる。そして、

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\rho; p) = -\frac{1}{\rho^2} \log \frac{X+2\rho-1}{1-X},$$

より、 x^* は

$$\frac{2\rho_A}{1-X_A} = \frac{2\rho_B}{1-X_B}, \quad (3)$$

の解である。ただし、

$$\rho_A = \frac{\lambda}{\lambda + hx}, \quad X_A = \sqrt{1-4p_A\rho_A(1-\rho_A)},$$

$$\rho_B = \frac{1-\lambda}{1-\lambda+h(1-x)}, \quad X_B = \sqrt{1-4p_B\rho_B(1-\rho_B)}.$$

と置いた。

こうして、

$$\sum_{M_A+M_B=M} Z_{N_A M_A}^o(p_A) Z_{N_B M_B}^o(p_B) \sim \exp(N_A \phi_A^* + N_B \phi_B^*),$$

$$\phi_A^* = \phi \left(\frac{\lambda}{\lambda + hx^*}; p_A \right),$$

$$\phi_B^* = \phi \left(\frac{1-\lambda}{1-\lambda+h(1-x^*); p_B} \right),$$

を得る。

次に分子について考える。このとき、分子における $N_A - 1$ の差異が大きく寄与する。すなわち、

$$\frac{N_A - 1}{N_A - 1 + M_A} \sim \frac{\lambda}{\lambda + hx} - \frac{hx}{(\lambda + hx)^2 N},$$

であるから、

$$Z_{N_A-1, M_A}^o(p_A) \sim \exp[(N_A - 1)(\phi_A^* + \delta\phi_A^*)],$$

となる。ここで、ズレ $\delta\phi_A^*$ は $\phi(\rho; p_A)$ の $\rho_A^* = \frac{\lambda}{\lambda + hx^*}$ におけるテーラー展開

$$\phi(\rho; p_A) = \phi(\rho_A^*; p_A) - \frac{\rho - \rho_A^*}{(\rho_A^*)^2} \log \frac{X_A^* + 2\rho_A^* - 1}{1 - X_A^*}$$

$$+ o(\rho - \rho_A^*),$$

$$(X_A^* = \sqrt{1-4p_A\rho_A^*(1-\rho_A^*)}),$$

より

$$\delta\phi_A^* = \frac{1}{N_A} \frac{1 - \rho_A^*}{\rho_A^*} \log \frac{X_A^* + 2\rho_A^* - 1}{1 - X_A^*},$$

と求められる.

以上から,

$$\xi = \frac{2\rho_A^*}{1 - X_A^*} = \frac{2\rho_B^*}{1 - X_B^*},$$

とおけば,

$$\begin{aligned} P(m_\alpha = 0|\omega) &\sim (1 - p_A) \frac{e^{(N_A - 1)(\phi_A^* + \delta\phi_A^*) + N_B \phi_B^*}}{e^{N_A \phi_A^* + N_B \phi_B^*}} \\ &= (1 - p_A) e^{-\phi_A^* + (N_A - 1)\delta\phi_A^*} \\ &\sim 1 - \frac{1}{p_A \xi}, \end{aligned}$$

同様にして

$$P(m_\beta = 0|\omega) \sim 1 - \frac{1}{p_B \xi},$$

を得る. (このとき, $\xi \geq 1/\max\{p_A, p_B\}$ である.)

2.4 尤度関数

以上の結果をまとめると,

$$\begin{aligned} P_T(l_\alpha|\omega) &= \binom{T}{l_\alpha} \frac{(p_A \xi - 1)^{T - l_\alpha}}{(p_A \xi)^T}, \\ P_T(l_\beta|\omega) &= \binom{T}{l_\beta} \frac{(p_B \xi - 1)^{T - l_\beta}}{(p_B \xi)^T}, \end{aligned}$$

と求められ, 尤度関数が

$$L_l(\omega) = \prod_{\alpha=1}^{N_A} P_T(l_\alpha = l|\omega) \prod_{\beta=1}^{N_B} P_T(l_\beta = l|\omega),$$

となる.

図1にここで得た結果とシミュレーションにより得られたサンプルを合わせて表示する. ここで得られたサンプルには車の種類が A または B の場合が混合されているので, 二つのピークが現れる. すなわち, 無作為に選んだ車のデータ長が l である頻度

$$F(l|\omega) = \lambda P_T(l_\alpha = l|\omega) + (1 - \lambda) P_T(l_\beta = l|\omega),$$

をシミュレーションにより再現していることになる. 実際, 両者はよい一致を見た.

3 Fisher 情報行列と推定精度

Fisher 情報行列 $I(\omega)$ は

$$I(\omega)_{ij} = \sum_{l=0}^T L_l(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega_i} \log L_l(\omega) \frac{\partial}{\partial \omega_j} \log L_l(\omega),$$

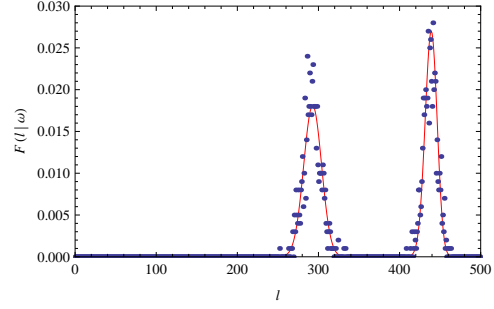


図1: 無作為に選んだ車のデータ長が l である頻度 $F(l|\omega)$. $\rho = 1/3$, $p_A = 0.6$, $p_B = 0.9$, $\lambda = 0.5$, $T = 500$ とここで得た理論的結果を曲線, 対応するシミュレーション結果 ($N = 1000$) を点で表す.

と定義される. この行列を用いて誤差関数 $D_T(L)$ の漸近形は

$$D_T(L) = \frac{1}{N} \text{tr} I(\omega^*)^{-1} + o\left(\frac{1}{N}\right) \quad (N = \rho L),$$

で与えられる. 上で得られている尤度関数 $P_T(l|\omega)$ から情報行列を具体的に計算することはいつでも可能である.

4 今後の展望

今回の結果は, 無作為の抽出によるデータ長からパラメータを見積もっているが, この方が時系列データを扱うより理論計算が楽になるために比較的単純な式により表された. しかし, ここで用いられた TASEP はマルコフ過程であるから, 連続する時系列データを下にパラメータを推定するほうが理論的にも現実的にも的を得ている. 今後はこちらについても研究を進めて行きたい.

最後に, これを拡張して3種類以上の粒子についての TASEP を考えることも可能であるが, 実際にはここで与えたような理論計算を完遂することは難しいであろう. (実際, ここで得られた x^* に対する式 (3) は4次式であるが, n 種類になるとこれに対応する方程式が $n - 1$ 変数連立4次式となる.)

参考文献

- [1] M. R. Evans and T. Hanney, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005) R195.
- [2] M. Kanai, K. Nishinari, and T. Tokihiro, J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006) 9071.