数理科学実践研究レター　2018–14 August 27, 2018

# 稀に起こる異常状態の固有値の分岐による定義

by

福岡尊

**UNIVERSITY OF TOKYO**

GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES

KOMABA, TOKYO, JAPAN

# 稀に起こる異常状態の固有値の分岐による定義

福岡尊[1]（東京大学数理科学研究科）
Takeru Fukuoka (Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo)

**概 要**

本稿では，稀に起こる異常状態を固有値集合の分岐として暫定的に定義し，その定義の下で得られる幾つかの性質についてまとめる．これは，FMSP 社会数理実践研究の検知班によって得られた結果をまとめたレターである．

## 1 はじめに

機械が材料を加工して製品を作成するという生産の過程において，機械に何らかの異常が生じ，期待している製品と一致しない物を作成する事がある．そのような状況を**稀に起こる異常状態**と呼ぶ事にする．稀に起こる異常状態を数学的にモデル化して調べるには，“異常” をどのように定義するかが非常に大きな問題となる．今回は，機械を線型変換と思い，線形変換が重複固有値を持つ場合に “稀に起こる異常状態” であると定義し，その定義の下で，稀に起こる異常状態に関する幾つかの考察を行った．

## 2 数学的設定

まず，材料は $N$ 個の実数の組によってパラメータ付けできるとする．材料 (material) を表すベクトルを縦ベクトル $\vec{m} \in \mathbb{R}^N$ とする．さらに，機械は材料を線型変換する事で製品を作成するものと考える．その機械を表す行列を $A$ とする．簡単のため，$A$ は $N \times N$-正方行列と仮定しよう．行列 $A$ と材料 $\vec{m}$ に対して，

$$\vec{p} = A\vec{m}$$

とすれば，製品 (product) を表す縦ベクトル $\vec{p}$ が得られる．我々は，機械 $A$ が一定の材料 $\vec{m}$ に対して，常に同じ製品 $\vec{p} = A\vec{m}$ を作成すると期待したい．しかし $A$ は気温 $s_1$，気圧 $s_2$，湿度 $s_3$ などの状況 (situation) $s = (s_1, s_2, \ldots, s_k)$ で変化するかもしれない．従って $A$ は

$$A = A(s_1, \ldots, s_k)$$

と，値 $(s_1, \ldots, s_k)$ をパラメータとして変動しうると考えられる．従って製品もまた

$$\vec{p}(s_1, \ldots, s_k) = A(s_1, \ldots, s_k) \cdot \vec{m}$$

として変動し得る．ただし材料 $\vec{m}$ は変化しないと仮定する．
通常，異常検知とは，膨大な離散的データの下で，製品 $\vec{p}(s_1, \ldots, s_k)$ の外れ値を検知する手法の事を指す．しかし本稿の主眼は，そのような離散的データから稀に起こる異常状態を見つける方法を模索するのではなく，“稀に起こる異常状態” を定義することで，数学的アプローチを可能にする事にある．本稿では，稀に起こる異常状態を以下のように定義する．

**定義 1.** 値 $(s_1, \ldots, s_k)$ が行列 $A(s_1, \ldots, s_k)$ にとって**稀に起こる異常状態**であるとは，行列 $A(s_1, \ldots, s_k)$ が重複固有値を持つ事とする．

以下では，この定義における “稀に起こる異常状態” について観察する．

[1] tfukuoka@ms.u-tokyo.ac.jp

## 3 上記設定における数学的アプローチ

値 $(s_1,\dots,s_k)$ をパラメーターに持つ $N\times N$-行列 $A(s_1,\dots,s_k)$ が重複固有値を持つのはどんなときか，という問題を考える．固有値が複素数を取り得る事を考えると，$(s_1,\dots,s_k)$ もまた複素数値を動くと仮定しておいて支障は無い．複素数全体を $\mathbb{C}$ で表す．$A(s_1,\dots,s_k)$ が重複固有値を持つとはすなわち，特性多項式

$$\det(\lambda E_N - A(s_1,\dots,s_k))$$

が $\lambda$ に関して重根を持つということである．この現象を統一的に捉えるため，以下の集合 $X$ を考える：

$$X = \{(\lambda,(s_1,\dots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \det(\lambda E_N - A(s_1,\dots,s_k)) = 0\}.$$

この集合 $X$ から $\mathbb{C}^k$ への写像 $\pi\colon X\to\mathbb{C}^k$ を以下で与える：

$$\pi\colon X \ni (\lambda,(s_1,\dots,s_k)) \mapsto (s_1,\dots,s_k) \in \mathbb{C}^k.$$

各 $(s_1,\dots,s_k)\in\mathbb{C}^k$ に対して，逆像 $\pi^{-1}(s_1,\dots,s_k)$，すなわち $\pi$ の像が $(s_1,\dots,s_k)$ になる $X$ の点が為す部分集合の事を，$(s_1,\dots,s_k)$ の $\pi$ によるファイバーという．この $\pi\colon X\to\mathbb{C}^k$ に対する $(s_1,\dots,s_k)\in\mathbb{C}^k$ の $\pi$ によるファイバーは，自然に $\det(\lambda E_N - A(s_1,\dots,s_k))$ の根全体，すなわち固有値全体であり，特に有限な集合となっている．さらに $X$ の部分集合 $R$ を以下で定義する：

$$R = \left\{(\lambda,(s_1,\dots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \det(\lambda E_N - A(s_1,\dots,s_k)) = 0, \frac{\partial}{\partial\lambda}\det(\lambda E_N - A(s_1,\dots,s_k)) = 0\right\}.$$

特性多項式の $\lambda$ による偏微分が $0$ という条件を $X$ に付け加えた集合である．これは **ramification** と呼ばれる．$R$ の $\pi$ に依る像を $B=\pi(R)$ と定義する．これは **branch** と呼ばれる．ramification と branch は，どちらも日本語で**分岐**と呼ばれており，区別されていない為，英語表記を用いている．$\pi$ の branch $B$ は

$$B = \{(s_1,\dots,s_k) \mid \#\pi^{-1}(s_1,\dots,s_k) < N\}$$

となっており，$B$ はまさに異常点全体である．

**例 2.** 非常に簡単な場合で $B$ を観察する．$N=2$，すなわち材料に関するパラメータが 2 つしか無い場合を考える．行列 $A$ は 1 つの状況パラメータ $s$ にのみ依存し，

$$A(s) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ s^d & 0 \end{pmatrix}$$

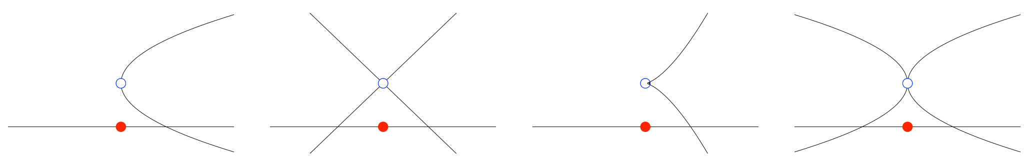
となっていたとしよう．ここで $d$ は 1 以上の整数である．このとき，

$$\det(\lambda E - A) = \det\begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ s^d & \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - s^d$$

となる．さらに，上記で定義された $X,R,B$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} X &= \{(\lambda,s) \mid \lambda^2 - s^d = 0\}, \\ R &= \{(\lambda,s) \mid \lambda^2 - s^d = 2\lambda = 0\} = \{(0,s) \mid s^d = 0\}, \\ B &= \{s \mid s^d = 0\} \end{aligned}$$

となり，$d=1,2,3,4$ 毎に，$X\to\mathbb{C}$ は次のようになっている．



左から順に，$d = 1, 2, 3, 4$ の場合である．横線は状態 $s$ をパラメータとした複素数全体 $\mathbb{C}$ を表し，上の曲線が $X$ を表す．上の丸で囲われた点が ramification であり，下の塗り潰してある点が branch，すなわち稀に起こる異常状態である．行列 $A(s)$ は，$s \neq 0$ なら固有値を二つ持っている．上記のグラフによって，確かに branch 以外の点では，ファイバーが 2 点になっている事が視覚的に見て取れる．

**例 3.** 引き続き $N = 2$ とし，状況パラメーター $\vec{s} = (s_1, \dots, s_k)$ には特に条件を課さないとする．このとき

$$A(\vec{s}) = \begin{pmatrix} a(\vec{s}) & b(\vec{s}) \\ c(\vec{s}) & d(\vec{s}) \end{pmatrix}$$

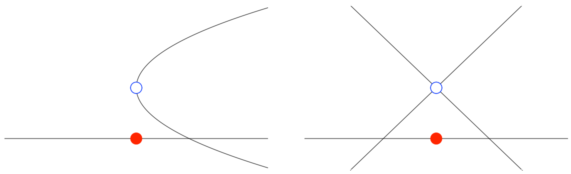
とすれば，

$$\det(\lambda E - A) = \det \begin{pmatrix} \lambda - a(\vec{s}) & b(\vec{s}) \\ c(\vec{s}) & \lambda - d(\vec{s}) \end{pmatrix} = \lambda^2 - (a(\vec{s}) + d(\vec{s}))\lambda + (a(\vec{s})d(\vec{s}) - b(\vec{s})c(\vec{s}))$$

となる．このとき，$X, R, B$ は以下のようになる．

$$\begin{aligned} X &= \{(\lambda, \vec{s}) \mid \lambda^2 - (a(\vec{s}) + d(\vec{s}))\lambda + (a(\vec{s})d(\vec{s}) - b(\vec{s})c(\vec{s})) = 0\}, \\ R &= \{(\lambda, \vec{s}) \mid \lambda^2 - (a(\vec{s}) + d(\vec{s}))\lambda + (a(\vec{s})d(\vec{s}) - b(\vec{s})c(\vec{s})) = 0, \quad 2\lambda - (a(\vec{s}) + d(\vec{s})) = 0\} \\ &= \left\{ \left( \frac{a(\vec{s}) + d(\vec{s})}{2}, \vec{s} \right) \middle| (a(\vec{s}) - d(\vec{s}))^2 + 4b(\vec{s})c(\vec{s}) = 0 \right\}, \\ B &= \left\{ \vec{s} \mid (a(\vec{s}) - d(\vec{s}))^2 + 4b(\vec{s})c(\vec{s}) = 0 \right\}. \end{aligned}$$

よって $\pi|_R \colon R \to B$ は全単射である事がわかる．これは先程の例で既に見て取れる現象であった事に注意する．特に，$a, b, c, d$ が全て**線型関数**，すなわち $a = \sum_{i=1}^k a_i s_i + a_0$ という形で $a, b, c, d$ が書けていれば，$B$ に含まれない直線 $l$ について，$\pi^{-1}(l)$ は次のいずれかである：



特に，その分岐の振る舞いは簡単である．

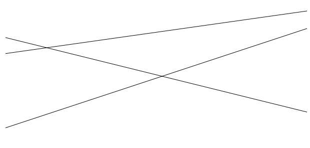
## 4 行列が線型な場合

上記のように，分岐の振る舞いが非常に簡単になる条件とは何かを考える．例えば，機械 $A = A(s_1, \dots, s_k)$ が外的状況に関して線形に振る舞う場合を考えよう．この場合ですら，一般的な答えを与えるのは難しい．しかしながら，以下の命題にあるように，ある種の強い条件を課せば，その振る舞いは簡単になる．

**補題 4.** ある $N$ 次正則行列 $A_1, \dots, A_k, C$ で

$$A = \sum_{j=1}^k A_j s_j + C$$

と表示できたとせよ．仮に $A_1, \dots, A_k, C$ が互いに可換であれば，ある $X_1, \dots, X_N \subset X$ が存在して，$\pi|_{X_j} \colon X_j \to \mathbb{C}^k$ が（代数多様体として）同型かつ $X = \bigcup_{j=1}^N X_j$ が満たされる．



**証明** $A_1,\ldots,A_k,C$ は可換である．従って，ある正則行列 $P$ で，同時上三角化する事ができる．$A_i$ を $P^{-1}A_iP$ に，$C$ を $P^{-1}CP$ に取り替えても，$X$ は不変である．よって，$A_1,\ldots,A_k,C$ は全て可換な上三角行列であると仮定して良い．$A_i$ の第 $(j,j)$-成分を $a_{ij}$，$C$ の第 $(k,k)$-成分を $c_k$ と置けば，

$$\begin{aligned}
X &= \{(\lambda,(s_1,\ldots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \det(\lambda E_N - A(s_1,\ldots,s_k)) = 0\} \\
&= \left\{(\lambda,(s_1,\ldots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \det\left(\lambda E_N - \left(\sum_{i=1}^k A_i s_i + C\right)\right) = 0\right\} \\
&= \left\{(\lambda,(s_1,\ldots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \prod_{j=1}^N \left(\lambda - \left(\sum_{i=1}^k a_{ij} s_i + c_j\right)\right) = 0\right\} \\
&= \bigcup_{j=1}^N \left\{(\lambda,(s_1,\ldots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \lambda - \left(\sum_{i=1}^k a_{ij} s_i + c_j\right) = 0\right\}
\end{aligned}$$

となる．従って $X_j := \left\{(\lambda,(s_1,\ldots,s_k)) \in \mathbb{C}\times\mathbb{C}^k \mid \lambda - \left(\sum_{i=1}^k a_{ij}s_i + c_j\right) = 0\right\}$ とすれば，$X = \bigcup_{j=1}^N X_j$ かつ $\pi|_{X_j}\colon X_j \to \mathbb{C}^k$ は同型である． □

## 5 おわりに

今後の課題として，以下の事柄が挙げられる．
今回は，行列 $A$ が正方である場合を主に取り扱った．行列 $A$ が正方でない場合は，$A$ の特異値，すなわち行列 $AA^*$ の固有値の平方根の重複をもって，稀に起こる異常状態を定義・考察することが可能だと考えられる．
また今回は，行列 $A(\vec{s})$ で一回線形変換する場合の観察を行った．しかし実際には，異なる行列により複数回線形変換する場合に，異常を定義し，その上で数学的に何が得られるかを考察する事も重要であろうと考えられる．
また，現実問題や実際の数値データと比較することで，今回した稀に起こる異常状態の定義がどれだけ妥当かを確認する事も，重要な課題である．

**謝辞** 検知班でのミーティングに参加して頂き，さらに本稿の執筆に際しまして多くの意見と励ましを下さりました，株式会社ニコンの皆様に深く感謝致します．また，ミーティング中に様々なアイデアを出し，今回の設定やその妥当性に関して多くの意見を下さりました，検知班の担当の土岡俊介先生，元担当の上坂正晃先生，山本昌宏先生に感謝致します．また本稿を書くにあたって，アイデアを出して頂き，また議論に付き合って頂いた金光秋博様，長町一平様に感謝致します．また，コメントをしていただいた，査読者の方に感謝致します．