1L5-OS-24c-1

順列エントロピーと双対性

Permutation Entropies and Duality

春名太一[*1]
Taichi Haruna

[*1]神戸大学大学院理学研究科地球惑星科学専攻
Department of Earth and Planetary Sciences, Graduate School of Science, Kobe University

Permutation Entropies have been applied to various real-world time series as a simple and robust method to extract information from them since its first proposal by Bandt and Pompe in 2002. We have studied its theoretical aspect based on the duality between values and orderings. Recently, modified permutation entropies have been introduced for more accurate estimation of entropies. In this paper, we present theoretical results on the modified permutation entropies which utilize equalities in addition to permutations.

1. はじめに

Permutation Entropy とは、Bandt と Pompe[Bandt 02b] により提案された時系列の複雑さを定量する一つの方法のことである。この方法では、時系列の値そのものではなく、値の間の大小関係（順列）にのみ注目し、Entropy Rate や Transfer Entropy などの時系列の特徴量を計算する。順列を用いて計算した特徴量は 'Permutation' もしくは 'Symbolic' を冠して呼ばれることが多い（Permutation Entropy Rate, Symbolic Transfer Entropy Rate など)。データ解析の手法として神経科学をはじめとした様々な分野で用いられており、一般に、実装が簡易である、ノイズに対して頑健である、計算量が少なくて済むなどの利点があるとされている [Amigó 10]。一方で、その理論的側面に関しては、Entropy Rate に関する結果を除くと、知られている結果は少ない。また、Entropy Rate (ER) に関しても基本的な問題が未解決のままである。離散力学系の生み出す時系列に対しては、Permutation Entropy Rate (PER, KS entropy の順列版) の定義には二通りの流儀がある。第一の定義は、[Bandt 02a] に依る。この定義では、相空間の各点を初期値とする有限の軌道の持つ自然な順列が同一かどうかで相空間を分割して Shannon Entropy を求め、この (上) 極限により PER を定義する。区間上の区分的単調写像に対しては PER は KS Entropy に一致することが示されている。Keller らは Borel 写像で後者が前者以下であることを示し [Keller 10]、また一般に両者が一致するための必要十分条件を求めているが [Keller 12]、完全な解決へとは至っていない。一方で、Amigó ら [Amigó 05] による第二の定義では、相空間の有限分割に任意の順序を入れて通常の KS Entropy の定義と類似の手続きにより PER を定義する。この場合は、任意の保測力学系に対して PER と KS Entropy が一致することが示されている [Amigó 12]。

著者らは、値と順序の双対性 (Duality between Values and Orderings, DVO) 理論を提案し、これに基づき有限アルファベット定常確率過程 (SSP) に対する ER 以外の特徴量についての理論研究を行ってきた。[Haruna 11] では、[Amigó 05] により得られていた、任意の SSP に対して PER と ER が一致するという定理の簡潔な別証明を得た。また、DVO を利用することにより、Excess Entropy (EE)[Crutchfield 03] や、Transfer Entropy Rate (TER)[Schreiber 00] に対しても Markov 性の仮定のもとでこれらの順列版との等号が示せる:エルゴード的 Markov 過程に対しては、EE と Permutation Excess Entropy (PEE) は一致する [Haruna 11]。 また、TER と Symbolic Transfer Entropy Rate (STER) も一致する [Haruna 13b]。これらの一般化として、内部過程がエルゴード的な隠れ Markov モデルの出力過程に対して EE=PEE および TER=STER なども示されている [Haruna 12]。

近年では、順列だけでなく、値の間の等号も考慮する Modified Permutation Entropy (MPE) が応用の立場から提案されている [Bian 12, Ruiz 12, Sun 10]。MPE については、順列のみの場合とは異なって Markov 性の仮定なしに、任意のエルゴード的 SSP に対して、EE と Modified Permutation Excess Entropy が一致すること、及び TER と Modified Symbolic Transfer Entropy Rate が一致すること、が証明できる [Haruna 13a]。本稿では、紙数の都合上前者にのみ的を絞り、その概要を述べる。

連絡先: tharuna@penguin.kobe-u.ac.jp

2. Entropy Rate と Excess Entropy

$\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \cdots\}$ を有限アルファベット A 上の定常確率過程 (Stationary Stochastic Process, SSP) とする。長さ $L \geq 1$ の文字列 $x_{1:L} := x_1 x_2 \cdots x_L \in A^L = \underbrace{A \times \cdots \times A}_{L}$ の出現確率を、

$$p(x_{1:L}) := \Pr\{X_1 = x_1, X_2 = x_2, \cdots, X_L = x_L\}$$

で表す。$\mathbf{X}$ の Entropy Rate (ER) とは、その単位時間当たりの値の平均的不確かさであり、

$$h(\mathbf{X}) = \lim_{L\to\infty} H(X_{1:L})/L \tag{1}$$

で定義される。ただし、

$$H(X_{1:L}) = -\sum_{x_{1:L}\in A^L} p(x_{1:L}) \log_2 p(x_{1:L})$$

であり、$h(\mathbf{X})$ は任意の SSP に対して存在することが知られている [Cover 91]。

$\mathbf{X}$ の Excess Entropy (EE) とは、その複雑さ、もしくは大

域的相関の尺度であり、

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \lim_{L\to\infty} \left(H(X_{1:L}) - h(\mathbf{X})L\right)$$
$$= \sum_{L=1}^{\infty} \left(H(X_L|X_{1:L-1}) - h(\mathbf{X})\right) \tag{2}$$

で定義される [Crutchfield 03]。$\mathbf{E}(\mathbf{X})$ は存在するか、発散するかのどちらかである。EE は過去と未来の半無限列間の相互情報量として書くこともできる [Crutchfield 03]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \lim_{L\to\infty} I(X_{1:L}; X_{L+1:2L}). \tag{3}$$

ただし、$I(\mathbf{Y};\mathbf{Z})$ は確率変数 $\mathbf{Y}$ と $\mathbf{Z}$ の間の相互情報量である。

PER と EE は SSP の最も基本的な特徴量であり、例えば [Feldman 08] では、両者を軸とする平面上のプロットを作ることで、様々なクラスの SSP に内在的な計算の様態を特徴づけることが試みられている。

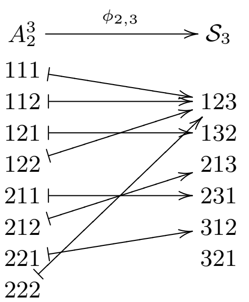
3. 値と順序の双対性と Permutation Entropy Rate

3.1 順列による文字列集合の分割

$A_n = \{1, 2, \cdots, n\}$ とし、通常の数の大小関係で A_n に全順序を入れる。$L \geq 1$ に対して、長さ L の順列とは、集合 $\{1, 2, \cdots, L\}$ 上の全単射写像のことである。長さ L の順列全体の集合を $\mathcal{S}_L$ で表す。以下では、しばしば長さ L の順列 π を、列 $\pi(1)\pi(2)\cdots\pi(L)$ で表す。順列 $\pi \in \mathcal{S}_L$ の ascent($\pi(i) < \pi(i+1)$ となる i) の個数を $\mathrm{Asc}(\pi)$ と書く。例えば、$\pi(1)\pi(2)\pi(3)\pi(4)\pi(5) = 24153$ で与えられる $\pi \in \mathcal{S}_5$ に対しては、$\mathrm{Asc}(\pi) = 2$ である。

文字列 $x_{1:L} \in A_n^L$ の順列型とは、以下の条件を満たす一意的な順列 $\pi \in \mathcal{S}_L$ のことである: $i = 1, 2, \cdots, L-1$ に対して、$x_{\pi(i)} \leq x_{\pi(i+1)}$ かつ、$x_{\pi(i)} = x_{\pi(i+1)}$ ならば $\pi(i) < \pi(i+1)$. つまり、$x_{1:L}$ の順列型とは、$x_1, x_2, \cdots, x_L$ を昇順に並べ替えた時の添え字の列である。例えば、$x_{1:5} = 23121 \in A_3^5$ の順列型は、$x_3x_5x_1x_4x_2 = 11223$ より $\pi(1)\pi(2)\pi(3)\pi(4)\pi(5) = 35142$ である。

長さ L の文字列をその順列型に対応させることで写像 $\phi_{n,L} : A_n^L \to \mathcal{S}_L$ が定義される。例えば、$\phi_{2,3} : A_2^3 \to \mathcal{S}_3$ は、



となる。$\phi_{n,L}$ はそのファイバーにより A_n^L の分割を引き起こす: 文字列 $x_{1:L}$ と $y_{1:L}$ が分割の同じ類に入る $\Leftrightarrow$ $\phi_{n,L}(x_{1:L}) = \phi_{n,L}(y_{1:L})$. 分割の類のサイズは以下の二項係数で与えられる [Haruna 12, Knop 73]:

$$|\phi_{n,L}^{-1}(\pi)| = \binom{n + \mathrm{Asc}(\pi)}{L}. \tag{4}$$

3.2 双対性

写像 $\mu_{n,L} : \phi_{n,L}\left(A_n^L\right) \subseteq \mathcal{S}_L \to A_n^L$ を以下の手続きで定義する: 与えられた順列 $\pi \in \phi_{n,L}\left(A_n^L\right) \subseteq \mathcal{S}_L$ に対して、列 $\pi(1)\cdots\pi(L)$ を極大上昇部分列 (列 $i_1 \cdots i_L$ の部分列 $i_j \cdots i_{j+k}$ が極大上昇部分列であるとは、その部分列が上昇列、つまり $i_j \leq i_{j+1} \leq \cdots \leq i_{j+k}$ であり、かつ $i_{j-1}i_j \cdots i_{j+k}$ と $i_ji_{j+1}\cdots i_{j+k+1}$ のどちらも上昇列でないときをいう) へと分解する。次に、$\pi(1)\cdots\pi(i_1)$, $\pi(i_1+1)\cdots\pi(i_2), \cdots, \pi(i_{h-1}+1)\cdots\pi(L)$ を極大上昇部分列への分解として、文字列 $x_{1:L} \in A_n^L$ を

$$x_{\pi(1)} = \cdots = x_{\pi(i_1)} = 1, x_{\pi(i_1+1)} = \cdots = x_{\pi(i_2)} = 2,$$
$$\cdots, x_{\pi(i_{h-1})+1} = \cdots = x_{\pi(L)} = h.$$

で定義する。ただし、$h = L - \mathrm{Asc}(\pi) - 1$ である。最後に、$\mu_{n,L}(\pi) = x_{1:L}$ と定義する。

例えば、$y_{1:5} = 21313 \in A_3^5$ の順列型は $\pi(1)\pi(2)\pi(3)\pi(4)\pi(5) = 24135$ であるが、その極大上昇部分列への分解は $24, 135$ となり、$x_2x_4x_1x_3x_5 = 11222$ とおいて $\mu_{n,L}(\pi) = x_1x_2x_3x_4x_5 = 21212$ となる。また、構成から、$\phi_{n,L} \circ \mu_{n,L}(\pi) = \pi$ がすべての $\pi \in \phi_{n,L}\left(A_n^L\right)$ に対して成り立つ。

文字列集合の部分集合

$$B_{n,L} := \{x_{1:L} \in A_n^L : \text{there exists } \pi \in \mathcal{S}_L$$
$$\text{such that } \phi_{n,L}^{-1}(\pi) = \{x_{1:L}\}\}$$

と順列集合の部分集合

$$C_{n,L} := \{\pi \in \mathcal{S}_L : |\phi_{n,L}^{-1}(\pi)| = 1\}.$$

に対して、以下の定理が成り立つ [Haruna 11, Haruna 12]:

定理 1 (値と順序の双対性) $\phi_{n,L}$ を $B_{n,L}$ 上に制限した写像は $C_{n,L}$ の中への写像となり、また $\mu_{n,L}$ を $C_{n,L}$ 上へと制限した写像は $B_{n,L}$ の中への写像となる。これらは互いの逆写像である。さらに、集合 $B_{n,L}$ と $C_{n,L}$ は以下のように特徴付けられる:

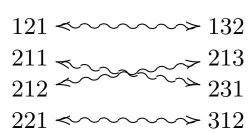
$$B_{n,L} = \{x_{1:L} \in A_n^L : \textit{for any } 1 \leq i \leq n-1$$
$$\textit{there exist } 1 \leq j < k \leq L \textit{ such that } x_j = i+1, x_k = i\}, \tag{5}$$

$$C_{n,L} = \{\pi \in \mathcal{S}_L : \mathrm{Asc}(\pi) = L - n\}.$$

例えば、$n = 2$ かつ $L = 3$ のときの双対性

$$B_{2,3} \underset{\mu_{2,3}}{\overset{\phi_{2,3}}{\rightleftarrows}} C_{2,3}$$

は、



である。

$\mathbf{X}$ を A_n 上の SSP とし、p を対応する文字列の出現確率とする。順列 $\pi \in \mathcal{S}_L$ の出現確率は

$$p_*(\pi) = \sum_{x_{1:L} \in \phi_{n,L}^{-1}(\pi)} p(x_{1:L})$$

である。このとき、

$$\alpha_{\mathbf{X},L} := \sum_{\pi \notin C_{n,L}} p_*(\pi)$$

と

$$\beta_{x,\mathbf{X},L} := \sum_{\substack{x_j \neq x, \\ 1 \leq j \leq \lfloor L/2 \rfloor}} p(x_{1:\lfloor L/2 \rfloor})$$

に対して、(5) を用いることで以下の補題が示される [Haruna 11]。ただし、$L \geq 1$, $x \in A_n$ かつ $\lfloor a \rfloor$ は a を超えない最大の整数である。

補題 1 *$\boldsymbol{X}$ を A_n 上の SSP とし、ϵ を正の実数とする。このとき、任意の $x \in A_n$ に対して $\beta_{x,\boldsymbol{X},L} < \epsilon$ が成立するならば、$\alpha_{\boldsymbol{X},L} < 2n\epsilon$ である。*

3.3 基本不等式

定理 1 により以下の不等式を得る [Haruna 11]:

補題 2 *$\mathbf{X}$ を A_n 上の SSP とし、p を対応する文字列の出現確率とする。このとき、*

$$0 \leq H(X_{1:L}) - H^*(X_{1:L}) \leq \alpha_{\boldsymbol{X},L} n \log_2(L+n) \tag{6}$$

が成り立つ。ただし、

$$H^*(X_{1:L}) = -\sum_{\pi \in \mathcal{S}_L} p_*(\pi) \log_2 p_*(\pi)$$

である。

3.4 Permutation Entropy Rate

A_n 上の SSP $\mathbf{X}$ の Permutation Entropy Rate (PER) は

$$h^*(\mathbf{X}) = \lim_{L \to \infty} H^*(X_{1:L})/L \tag{7}$$

で定義される。$h^*(\mathbf{X})$ は、単位時間当たりの順序の平均的不確かさである。Amigó ら [Amigó 05, Amigó 12] は等式

$$h(\mathbf{X}) = h^*(\mathbf{X}) \tag{8}$$

が任意の A_n 上の SSP $\mathbf{X}$ に対して成り立つことを ER のエルゴード分解定理を用いて示した。一方、(6) を使えば (8) はただちに従う [Haruna 11]。

4. Modified Permutation Entropies

本節では、[Bian 12] によって導入された順列と等号による文字列集合の分割に基づく Modified Permutation Entropy に関して我々が最近得た理論的結果について述べる [Haruna 13a]。

4.1 順列と等号による文字列集合の分割

写像

$$\eta_{n,L} : A_n^L \to \mathcal{T}_L := \mathcal{S}_L \times \{0,1\}^{L-1} \tag{9}$$

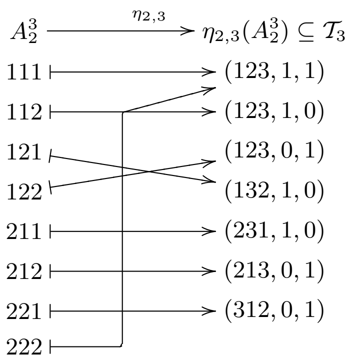
を $\eta_{n,L}(x_1^L) = (\pi, e_1, \cdots, e_{L-1})$ で定義する。ただし、π は $x_{1:L}$ の順列型であり、$i = 1, 2, \cdots, L-1$ に対して

$$e_i = \begin{cases} 1 & \text{if } x_{\pi(i)} = x_{\pi(i+1)}, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

である。Proj : $\mathcal{T}_L \to \mathcal{S}_L$ を $\mathcal{S}_L$ 上への射影とすれば、

$$\phi_{n,L} = \text{Proj} \circ \eta_{n,L} \tag{10}$$

が成り立つ。つまり、$\eta_{n,L}$ は $\phi_{n,L}$ に依るものよりもより細かい A_n^L の分割を定義する。例えば、$n = 2$ かつ $L = 3$ のときは $\eta_{2,3} : A_2^3 \to \mathcal{T}_3$ は



で与えられる。

任意の $\sigma = (\pi, e_1, \cdots, e_{L-1}) \in \eta_{n,L}(A_n^L)$ に対して、$\sum_{i=1}^{L-1} e_i = L - k$ であれば

$$|\eta_{n,L}^{-1}(\sigma)| = \binom{n}{k} \tag{11}$$

が成り立つ。実際、$\sum_{i=1}^{L-1} e_i = L - k$ であるとする。$x_{\pi(i)}$ の値が同じかどうかで A_n^L 内の文字列を分類するとすると、k 個の類ができなければならない。各類に割り当てられる値は A_n からとられるので、$\eta_{n,L}$ で σ へと対応付けられる文字列の個数は A_n から k 個の元を取り出す組合せの数となる。

4.2 Modified Permutation Entropy Rate

$\mathbf{X}$ を A_n 上の SSP とし、p を対応する文字列の出現確率とする。Modified Permutation Entropy Rate (MPER) は

$$h^m(\mathbf{X}) = \lim_{L \to \infty} H^m(X_{1:L})/L \tag{12}$$

で定義される。ただし、

$$H^m(X_{1:L}) = -\sum_{\sigma \in \mathcal{T}_L} p_m(\sigma) \log_2 p_m(\sigma)$$

かつ、$\sigma \in \mathcal{T}_L$ に対して

$$p_m(\sigma) = \sum_{x_{1:L} \in \eta_{n,L}^{-1}(\sigma)} p(x_{1:L})$$

である。$H^*(X_{1:L}) = H(\phi_{n,L}(X_{1:L}))$ かつ $H^m(X_{1:L}) = H(\eta_{n,L}(X_{1:L}))$ であるから、(10) により、

$$H^*(X_{1:L}) \leq H^m(X_{1:L}) \leq H(X_{1:L})$$

を得る。(8) により、

$$h^*(\mathbf{X}) = h^m(\mathbf{X}) = h(\mathbf{X}). \tag{13}$$

となる。

4.3 基本不等式

補題 3 $\mathbf{X}$ を A_n 上の *SSP* とし、p を対応する文字列の出現確率とする。このとき、

$$0 \leq H(X_{1:L}) - H^m(X_{1:L}) \leq \alpha_{\mathbf{X},L} n \log_2 n \tag{14}$$

である。

4.4 Modified Permutation Excess Entropy

$\mathbf{X}$ を A_n 上の SSP とする。Modified Permutation Excess Entropy (MPEE) は、

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^m(\mathbf{X}) &= \limsup_{L\to\infty} \left(H^m(X_{1:L}) - h^m(\mathbf{X})L\right) \\ &= \limsup_{K\to\infty} \left(\sum_{L=1}^{K} \left(H^m(X_L|X_{1:L-1}) - h^m(\mathbf{X})\right)\right)\end{aligned} \tag{15}$$

で定義される。ただし、$H^m(X_L|X_{1:L-1}) = H^m(X_{1:L}) - H^m(X_{1:L-1})$ である。(14) により、以下の補題を得る。

補題 4 $\mathbf{X}$ を A_n 上のエルゴード的 *SSP* とし、p を対応する文字列の出現確率とする。このとき、$p(x) > 0$ であるような任意の $x \in A_n$ に対して、$L \to \infty$ のとき $\beta_{x,\mathbf{X},L} \to 0$ である。

補題 1 と補題 3、及び補題 4 を組み合わせることでエルゴード的 SSP に対する EE と MPEE の等式を得る:

定理 2 $\mathbf{X}$ を A_n 上のエルゴード的 *SSP* とする。このとき、

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{E}^m(\mathbf{X}) = \lim_{L\to\infty} I^m(X_{1:L}; X_{L+1:2L}) \tag{16}$$

が成り立つ。ただし、$I^m(X_{1:L}; X_{L+1:2L}) = H^m(X_{1:L}) + H^m(X_{L+1:2L}) - H^m(X_{1:L}, X_{L+1:2L})$ である。

参考文献

[Amigó 05] Amigó, J. M., Kennel, M. B., and Kocarev, L.: The permutation entropy rate equals the metric entropy rate for ergodic information sources and ergodic dynamical systems, *Physica D*, Vol. 210, pp. 77–95 (2005)

[Amigó 10] Amigó, J. M.: *Permutation Complexity in Dynamical Systems*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010)

[Amigó 12] Amigó, J. M.: The equality of Kolmogorov-Sinai entropy and metric permutation entropy generalized, *Physica D*, Vol. 241, pp. 789–793 (2012)

[Bandt 02a] Bandt, C., Keller, G., and Pompe, B.: Entropy of interval maps via permutations, *Nonlinearity*, Vol. 15, pp. 1595–1602 (2002)

[Bandt 02b] Bandt, C. and Pompe, B.: Permutation entropy: a natural complexity measure for time series, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 88, p. 174102 (2002)

[Bian 12] Bian, C., Qin, C., Ma, Q. D. Y., and Shen, Q.: Modified permutation-entropy analysis of heartbeat dynamics, *Phys. Rev. E*, Vol. 85, p. 021906 (2012)

[Cover 91] Cover, T. M. and Thomas, J. A.: *Elements of Information Theory*, John Wiley & Sons, Inc. (1991)

[Crutchfield 03] Crutchfield, J. P. and Feldman, D. P.: Regularities unseen, randomness observed: Levels of entropy convergence, *Chaos*, Vol. 15, pp. 25–54 (2003)

[Feldman 08] Feldman, D. P., McTague, C. S., and Crutchfield, J. P.: The organization of intrinsic computation: complexity-entropy diagrams and the diversity of natural information processing, *Chaos*, Vol. 18, p. 043106 (2008)

[Haruna 11] Haruna, T. and Nakajima, K.: Permutation Complexity via Duality between Values and Orderings, *Physica D*, Vol. 240, pp. 1370–1377 (2011)

[Haruna 12] Haruna, T. and Nakajima, K.: Permutation complexity and coupling measures in hidden Markov models, arXiv:1204.1821 (2012)

[Haruna 13a] Haruna, T. and Nakajima, K.: Permutation approach to finite-alphabet stationary stochastic processes based on the duality between values and orderings, *Eur. Phys. J. Special Topics* (2013), in press

[Haruna 13b] Haruna, T. and Nakajima, K.: Symbolic transfer entropy rate is equal to transfer entropy rate for bivariate finite-alphabet stationary ergodic Markov processes, *Eur. Phys. J. B* (2013), in press

[Keller 10] Keller, K. and Sinn, M.: Kolmogorov-Sinai entropy from the ordinal viewpoint, *Physica D*, Vol. 239, pp. 997–1000 (2010)

[Keller 12] Keller, K., Unakafov, A. M., and Unakafova, V. A.: On the relation of KS entropy and permutation entropy, *Physica D*, Vol. 241, pp. 1477–1481 (2012)

[Knop 73] Knop, R. E.: A note on hypercube partitions, *J. Combi. Theor. A*, Vol. 15, pp. 338–342 (1973)

[Ruiz 12] Ruiz, M. C., Guillamón, A., and Gabaldón, A.: A new approach to measure volatility in energy markets, *Entropy*, Vol. 14, pp. 74–91 (2012)

[Schreiber 00] Schreiber, T.: Measuring information transfer, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 85, pp. 461–464 (2000)

[Sun 10] Sun, X., Zou, Y., Nikiforova, V., Kurths, V., and Walther, D.: The complexity of gene expression dynamics revealed by permutation entropy, *BMC Biofinformatics*, Vol. 11, p. 607 (2010)