様　式　Ｃ−１９、Ｆ−１９、Ｚ−１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２７ 年　 ６ 月 １５ 日現在

機関番号： １０１０１
研究種目： 若手研究(A)
研究期間： 2011～2014
課題番号： ２３６８４００２

研究課題名（和文） 遷移ダイナミクスへの新しいアプローチ：力学系の大域計算と計算トポロジーの融合

研究課題名（英文） Toward a new approach to transient dynamics

研究代表者

荒井　迅（Arai, Zin）

北海道大学・理学（系）研究科（研究院）・准教授

研究者番号：８０３６２４３２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　 14,400,000円

研究成果の概要（和文）：遷移カオスなどの不変とは限らない遷移的な力学系の振舞いをとらえるため，グラフクラスタリングアルゴリズムを用いた力学系の解析手法を構築した．またリアプノフ関数が構成できないような系に対して，コンレイ・モース分解を一般化するため，最適化の手法を用いて擬リアプノフ関数を構成する手法を開発した．応用として，これらのアルゴリズムを非線形レスリーモデルなどの力学系や，2次元流体の数値計算データに適用し，相空間の力学系の構造に即した分割を得ることができた．

研究成果の概要（英文）：For the study of transient behaviors of dynamical systems on non-invariant set such as transient chaos, we develop a numerical method based on graph clustering algorithms. We also develop an algorithm to construct pseudo-Lyapunov functions, an analog of Lyapunov function, based on optimization algorithms. This enables us to study a generalization of Conley-Morse decomposition to dynamical systems having no Lyapunov function. These algorithms are successfully applied to dynamical systems including non-linear Leslie model and also to numerical simulations of 2-dimensional fluid flows.

研究分野： 数学

キーワード： 応用数学　アルゴリズム　力学系　カオス

１．研究開始当初の背景

数理モデルの研究において，近年遷移ダイナミクスと呼ばれる対象が注目を集めている．これは，ある時間の範囲では観察されるが，時間を無限大に飛ばすと消えてしまうような現象を総称して述べた概念であり，漸近的ダイナミクス，すなわち時間を無限大に飛ばしたときの挙動と対比して用いられる．数理モデルの研究においては力学系理論が強力な道具であるが，力学系理論はそもそも解けない方程式に対して漸近挙動を論じようという問題意識を元に発展してきたため，漸近的ではない移ろいゆく遷移現象を捉えるための有効な手法はほとんどなかった．

力学系研究の中心的なテーマの１つであるカオス現象にしても，従来はアトラクターなど漸近的に安定な不変集合の上でのカオスが問題にされてきたが，近年では遷移カオスと呼ばれる，ある時間枠ではカオス的に見えるが，時間を十分大きくすると消えてしまうようなカオスに類似した現象が注目されるようになった．

その背景としては，いわゆる遷移カオスと呼ばれる現象など，高次元大自由度の系におけるアトラクターとは限らない構造の重要性が発見されるようになった事がある．このような系では，厳密な意味ではアトラクターではないが，軌道を十分に長時間引きつけるような構造が相空間に多数埋め込まれており，それらの間を軌道が移ろいゆくことによって単純なカオスモデルでは記述できない挙動が現れる．また実験的にも，流体の乱流遷移において，従来は乱流が安定に存在すると思われていたパラメータにおいても，十分に長い時間が経つと乱流から層流に遷移する現象が確認されるなど，従来のアトラクターによる理解を越えたモデルが求められるようになった．

アトラクター上のカオスなど通常の漸近挙動の解析に関しては，力学系の伝統的な手法とトポロジーの融合が進んでおり，申請者もこれらの分野の交差する領域で２つの新しい手法を研究してきた．１つはグラフ理論や精度保証付き数値計算を用いた大域的な計算理論であり，もう１つは計算トポロジー理論，特に計算ホモロジー理論を用いるものである．

これらの手法は漸近的な現象を研究するためには強力なツールであったが，元々がアトラクターなど漸近的に現れる不変集合の解析を目的に開発されたものであるため，遷移的な現象を取り扱うための枠組みがなかった．強引に用いようとすると，何らかのアドホックな手法で遷移的な現象を不変集合で近似するしか方法がなく，その場合は得られた結果が力学系に対してどのような意味を持つのかが数学的に明らかでなかった．

２．研究の目的

そこで，本研究では上記の計算トポロジー理論と計算ホモロジー理論の融合を通して，動的な構造を扱えるような計算手法を構築するための枠組みを作ることを目的とする．

その枠組みは，グラフ理論や精度保証付き数値計算を用いた大域的な計算理論と計算トポロジー理論の力学系への応用のどちらにも有効なものであり，従来の漸近挙動の研究で得られた手法を遷移ダイナミクスの研究に応用するための基礎となることを目的とする．

３．研究の方法

本研究の基礎をなすのは，力学系や流体などを有向グラフで表現し，そのグラフに対してトポロジーの知見に基づいた組合せ的な操作を施すことで，もとの力学系や流体に対する情報を引き出そうという手法である．有向グラフの頂点は相空間のうち我々が着目している領域のグリッド分解に対応するものであり，辺はそれぞれのグリッド要素が系の時間発展によってどのように写像されるかにより定義されるものである．

力学系の不変集合に対しては，グラフの強連結成分が対応し，その抽出はグラフ理論で開発されたアルゴリズムにより高速に行なえる．いっぽうで，我々が問題にしているのは不変とは限らない現象であるため，強連結成分への分解という簡単な方針を取ることができない．

そこで我々が採用するのは，グラフのクラスタリングアルゴリズムを用いて力学系の構造を分解しようというものである．グラフクラスタリングアルゴリズムには，クラスタリングによってどのような分解を得たいか，また適応するグラフのサイズはどれくらいか，などによって無数の種類があり，そのなかから我々の目的に合ったものを見出して改良を加えることがまず必要である．

また別のアプローチとして，リアプノフ関数の一般化を通した解析手法の開発も進める．通常の漸近的な力学系の挙動に対しては，コンレイ・モース分解と呼ばれる相空間の分解が知られており，これはリアプノフ関数というスカラー関数により簡単に記述することができる．具体的にはリアプノフ関数とは相空間上定義されたスカラー関数であって，系の時間発展にそってその値が非増加（もしくは非減少）となるもののことであり，その性質からコンレイ・モース分解の各成分上で

は定数値をとる．系全体が再帰的になってしまうエルゴード的な状況や，我々が考えている遷移的な状況ではリアプノフ関数を用いる手法は機能しないが，リアプノフ関数に適当な意味で「近い」性質を持つ関数を構築することによって，有限時間の範囲で有効なコンレイ・モース分解の類似理論を展開する．

４．研究成果

広く用いられているグラフクラスタリングアルゴリズムのうち，我々の目的に最も合致するのはマルコフクラスタリングアルゴリズムである．このアルゴリズムは，そもそもグラフ上のマルコフ過程の分布を基本にしたアルゴリズムなので，力学系の解析に向いているのは当然ともいえる．

ただし，残念ながらマルコフクラスタリングは我々の目的には遅すぎる．これは，アルゴリズムの計算速度が基本的にグラフの頂点数の 3 乗（と収束するまでのイテレーション回数の積）に依存することに由来する．我々の扱うグラフは力学系の相空間の分解に対応したものであるため，一般に解像度を上げると指数的に頂点数が増加する．扱う問題にもよるが，典型的には数百万以上の数の頂点を持つグラフを扱う．このような状況では，頂点数の 3 乗のオーダーのアルゴリズムは実用的とは言い難い．

そこで我々が採用するのは，Peer Pressure Clustering (PPC)アルゴリズムというアルゴリズムである．このアルゴリズムは，元々はインターネット上での噂や意見の拡散といった社会的な現象を解析するために開発されたアルゴリズムである．

マルコフクラスタリングに比べて，PPC はアルゴリズムの安定性については劣り，また得られた分解の力学系的な意味もそのままでは解釈が難しいが，速度面では大幅なアドバンテージがある．実際，PPC の計算時間は頂点数の 2 乗（と収束するまでのイテレーション回数の積）に依存するものであり，マルコフクラスタリングに比べると計算のオーダーが異なる．

PPC は定常分布に収束せず，周期的な分布を巡る状態に陥ることがあるが，これについても力学系に即した判定アルゴリズムを導入することで，実用的な時間で停止するアルゴリズムが構成できた．結果として得らえたアルゴリズムはマルコフクラスタリングに比べて，我々の問題とするサイズのグラフで 100 倍以上高速なものとなった．

リアプノフ関数の一般化を考えるという方向では，離散ホッジ理論とペンローズ・ムーア逆行列を用いた擬リアプノフ関数の構築アルゴリズムを開発した．

これはあるスカラー関数がリアプノフ関数からどのくらい離れているかという観点から最適化を行なうことに対応している．またトポロジー的な観点からは，グラフ上に適当に定義した「微分形式」の空間において，力学系から自然に定義されたグラフ上の１形式に対して適当な０形式であって微分するとその１形式になるものを見つけよという問題に対応している．

これらのアルゴリズムを用いる考え方は Jiang-Lim-Yao-Ye らにより開発された “statistical ranking” から応用したものである．Statistical ranking においては，多様な好みの個人によって生成された様々なランキングから矛盾の少ない総合的なランキングを導き出すという社会的な問題を扱っていたが，それを力学系から生成されるグラフに適用し，また矛盾が少ないという条件をリアプノフ関数になるべく近いという条件に読み変えることにより，我々のアルゴリムの基礎が得られる．

これらのアルゴリズムを実際に実行する上では，ペンローズ・ムーア擬逆行列の計算が重要なステップであり，また計算時間的にもボトルネックとなる．我々のアルゴリズムでは，有向グラフを無向化するなど，見たい力学系の構造に即した前処理を行なうことで，ペンローズ・ムーア擬逆行列の計算の高速化を図る研究も進めた．

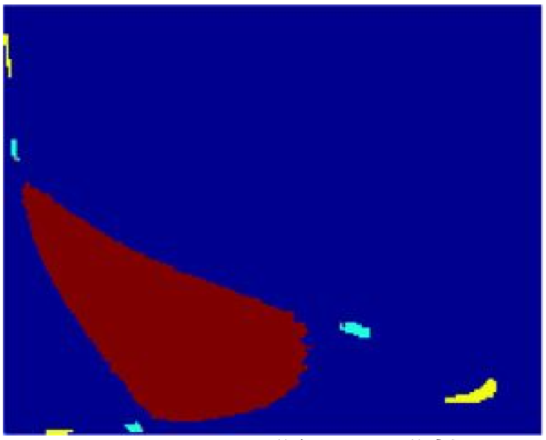
これらのアルゴリズムの開発に加え，具体的な系への応用として，非線形レスリーモデルという人口予測に用いられる写像や，2 次元流体力学の数値シミュレーションへの応用も研究した．

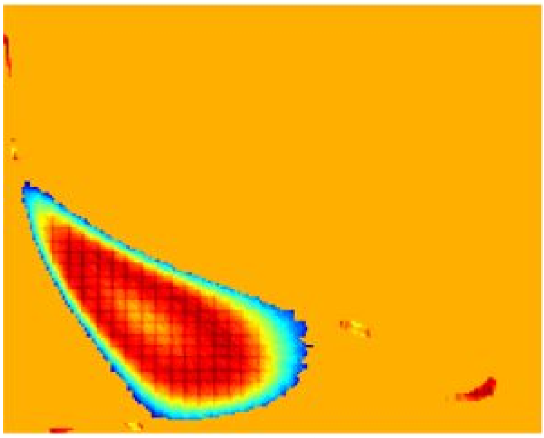
非線形レスリーモデルとは，それまで一般的に用いられていた線形レスリーモデルを拡張したものである．線形レスリーモデルにおいては，全人口は幾つかの世代に分割され，各世代ごとに次の時間ステップまで生き残る生存確率と新しい世代を生み出す生産確率が与えられる．これらの確率に基づいて線形に人口が発展するとしたモデルが線形レスリーモデルであり，伝統的に人口の予測で広く用いられていた．

しかし線形モデルにはやはり限界があり，例えば 1990 年の人口に基づいたアメリカの人口予測が 6 百万人も実際の値とずれてしまうなどの問題が明かになった．そこで導入された改良版のひとつが非線形レスリーモデルであり，総人口が増加して環境が悪化すると新しい世代の生まれる確率が落ちるという効果を取り入れた，自然な拡張である．

非線形レスリーモデルはその構成は自然なものだが，数値シミュレーションにおいて複数のカオス的アトラクターが存在するパラメータ領域が観察されるなど，その数学的な構造には未解明な部分が多かった．このため，コンレイ・モース理論を用いた相空間の研究などが行なわれていた．

コンレイ・モース理論を用いた研究により系の勾配的な構造は明かになったものの，そこで得られる分解は再帰的な不変集合をグラフの１つの頂点とする大きな分解であるため，各成分の内部の構造はわからなかった．そこで，本研究の手法を用いて分解することにより，以下のようにより詳細な分解を得ることができた．

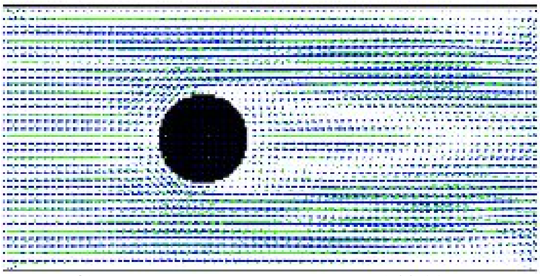

コンレイ・モース分解による分割

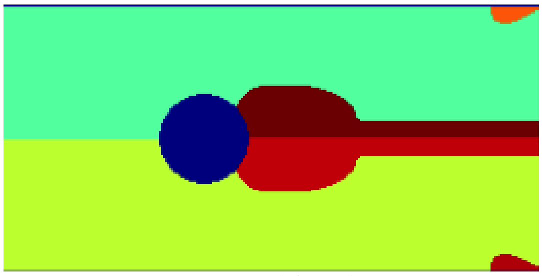

PPC によるより詳細な分割

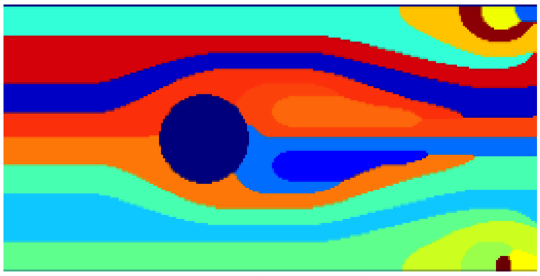
流体への応用としては，円筒回りの２次元流体という基本的な流体現象に対してその解析を試みた．

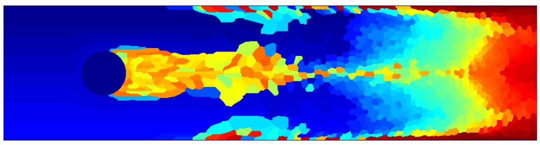
数値計算の手法としては格子ボルツマン法を用いている．この手法を選定した理由としては，コンピュータの並列化が進行することで現在再び注目を集めている手法であるという事と，数値計算の手法が格子グリッドに基づいた高度に離散化されたものであり，有向グラフを用いる我々の手法と親和性が高いという点がある．

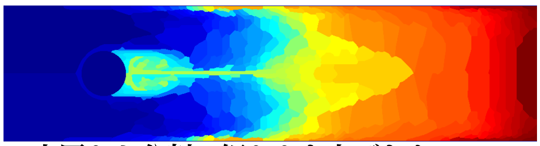
また，我々が PPC アルゴリズムを採用した理由の１つとして，アルゴリズム内に得られる分割の細かさを調節するパラメータを埋め込むことが容易であるという点がある．これにより以下の例のように目的に応じて細かい分割からおおまかな分解まで様々なスケールの分解を得ることができる．


格子ボルツマン法による計算結果


PPC による分解の例

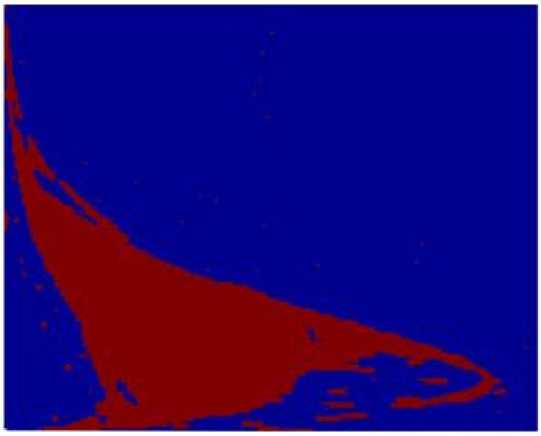

PPC によるより細かい分解の例


より細かい格子による計算例

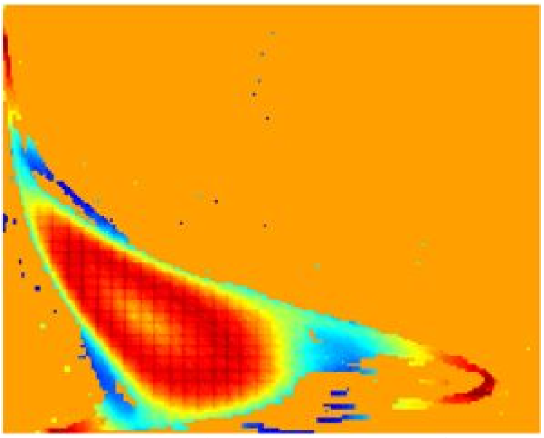

上図から分割の細かさを上げたもの

また，このように力学系や流れから直接生成されたグラフだけでなく，ノイズなどの不確定要素によりグラフの構造が摂動を受けている場合や，そもそも観察や計算の精度が低く，グリッドが十分細かくない場合にも本研究の手法は有効であることがわかった．すなわち，通常の強連結成分によるコンレイ・モース分解が自明な分解になってしまう場

合にも，本研究の手法を用いると以下のように力学系の細かい構造を取り出すことが出来る．



ノイズにより潰れたコンレイ・モース分解



同じデータに対する PPC による分解

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計３件）
① Zin Arai, Decomposition and clustering for the visualization of dynamical systems, Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis I, 2014, 13-20, 査読有.
② Zin Arai, A rigorous numerical algorithm for computing the linking number of links, Nonlinear Theory and its Applications, 4-1, 2013, 104-110, 査読有.
③ Zin Arai, M. Gameiro, T. Gedeon, H. Kokubu, K. Mischaikow and H. Oka, Graph-based topological approximation of saddle-node bifurcation in maps, RIMS Kokyuroku Bessatsu, B31 (2012) 225-241, 査読有.

〔学会発表〕（計 12 件）
① Zin Arai and Yutaka Ishii, On parameter loci of the Henon map, ACCA-UK/JP Workshop, 2015 年 3 月 13 日, Imperial Collage London, ロンドン（イギリス）
② Zin Arai, On the monodromy and bifurcation of the Henon map, DynamIC Seminar, 2015年3月12日, Imperial Collage London, ロンドン（イギリス）
③ Zin Arai, Rigorous verification of the first bifurcation problem of the Henon map, The 10th AIMS conference on dynamical systems, 2014 年 7 月 10 日, Instituto de Ciencias Mathematicas, マドリッド（スペイン）
④ Zin Arai, Monodromy and bifurcation of the Henon map, 力学系：理論と応用の相互作用, 2014 年 6 月 13 日, 京都大学数理解析研究所（京都府京都市）
⑤ Zin Arai, Graph theoretical algorithms for dynamical systems, Lagrangian coherent structures and dynamical systems, 2014 年 3 月 5 日, 北海道大学（北海道札幌市）
⑥ Zin Arai, On some practical computational problems in dynamical systems, Dynamics and Computation, 2014 年 1 月 14 日, 京都大学数理解析研究所（京都府京都市）
⑦ Zin Arai, Decomposition and clustering for the visualization of dynamical systems, Mathematical Progress in Expressive Synthesis 2013, 2013 年 10 月 23 日, 九州大学（福岡県福岡市）
⑧ Zin Arai, Computational and dynamical complexities of the graph representation of dynamical systems, 2013 International symposium on nonlinear theory and its applications, 2013 年 9 月 9 日, Santa Fe community convention center, サンタフェ（アメリカ）
⑨ Zin Arai, On the monodromy and bifurcations of the Henon map, 6th Pacific RIM conference on mathematics, 2013 年 7 月 2 日, 札幌コンベンションセンター（北海道札幌市）
⑩ 荒井迅, Wieferich primes and the monodromy of the Henon map, 2012 年度冬の力学系研究集会, 2013 年 1 月 12 日, 日本大学軽井沢研修所（長野県軽井沢市）
⑪ 荒井迅, 力学系・流体力学における計算トポロジー的手法について, 力学系の作る集団ダイナミクス, 2012 年 9 月 26 日, 京都大学数理解析研究所（京都府京都市）
⑫ 荒井迅, 計算トポロジーとその応用について, 日本応用数理学会 2012 年度年会特別講演, 2012 年 8 月 30 日, 稚内全日空ホテル（北海道稚内市）

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕
○出願状況（計 0 件）
○取得状況（計 0 件）

〔その他〕
ホームページ等
http://www.math.sci.hokudai.ac.jp/~zin/

６．研究組織

(1)研究代表者

荒井 迅（Zin Arai）
北海道大学・大学院理学研究院・准教授
研究者番号：80362432

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

なし