

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

On topological methods for dynamical systems and fluid mechanics

荒井 迅 (Zin ARAI)

北海道大学大学院理学研究科 / JST CREST

zin@math.sci.hokudai.ac.jp

1 はじめに

近年、グラフを用いた力学系の解析手法が発達している。何らかの方法で力学系の情報をグラフの形で離散化し、得られたグラフをグラフ理論などの強力なアルゴリズムで解析することで、もとの力学系の情報を得ようというのが基本的な方針である。

とくにコンレイ・モースグラフという手法は、力学系の鎖回帰集合への分解というダイナミカルな分解をグラフのレベルで再現することで、力学系の分岐構造などを解析する強力な手法となっている。鎖回帰集合への力学系の分解にグラフ上で対応するのは、グラフの強連結成分への分解である。しかし、保存系のように力学系の相空間全体が鎖回帰的になってしまう場合には、この方法では自明な情報しか抜き出せず、まったく役に立たない。

本稿では、まずグラフを用いた力学系の研究手法について概説したうえで、上記の問題をグラフクラスタリングを導入することで解決しようという試みを紹介する。

2 グラフによる表現

この節では n 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^n の上で定義された写像 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ を考える。

相空間を離散化するために、 \mathbb{R}^n を等しい大きさの n 次元長方形たちにより分割し、次に分割の各要素である長方形 ω に対して、その f による像 $f(\omega)$ を計算する。数値計算に共なる誤差のため、正確に像を求めることは一般に不可能であるが、「区間演算」を用いて真の像 $f(\omega)$ を包み込む長方形 $F(\omega)$ を求める。この $F(\omega)$ を、最初に定めた \mathbb{R}^k の分割を用いて表現するため、 $F(\omega)$ と交わる分割の要素を全て集めて、これを $\mathcal{F}(\omega)$ とおく。以上により、長方形 ω の力学系による像 $f(\omega)$ を外側から近似する長方形の集合 $\mathcal{F}(\omega)$ を求めることが出来た。構成から $f(\omega) \subset \mathcal{F}(\omega)$ が数学的に厳密に成立する。

以上の構成を元に力学系 f の情報を表現する有向グラフ $G = G(f, N)$ を構成しよう。まず G の頂点としては、力学系を考えている領域に含まれる長方形 ω たちをとる。すな

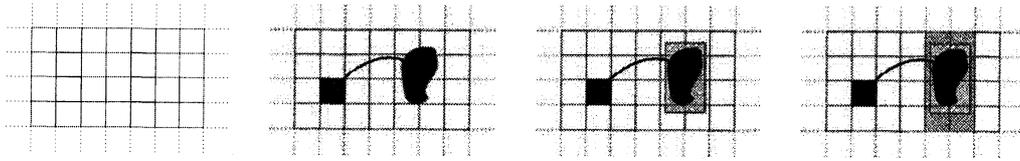


図1 左より: \mathbb{R}^2 の分割, 長方形 ω と f による像 $f(\omega)$, $f(\omega)$ を被覆する $F(\omega)$, $F(\omega)$ と交わる長方形の集合 $\mathcal{F}(\omega)$

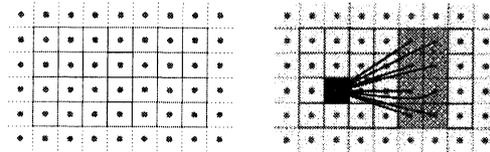


図2 左: G の頂点, 右: G の頂点 ω から出る辺

わち, 相空間の長方形ひとつひとつがグラフ G の頂点に対応する. ある頂点 ω から出る辺をどう定義するかというと, ω からは $\mathcal{F}(\omega)$ に含まれる各長方形に対応する G の頂点に辺が出ているとする. こうして得られた有向グラフ G は, f の計算機による近似表現と考えることができる.

近似とは言っても, $f(\omega) \subset \mathcal{F}(\omega)$ が厳密に成立しているので, f の全ての軌道に対して, それに対応する G の道が存在するという良い性質を持つ. すなわち, ある点 $x \in \omega$ が存在して, その像 $f(x)$ が長方形 ω' に入っているとすれば, グラフ G にはその事実を表現する ω から ω' への辺が必ず存在する. 残念ながらこの主張の逆は成立しない. 長方形 ω のグラフ表現における「像」である $\mathcal{F}(\omega)$ には, 真実の像 $f(\omega)$ とは交わらない長方形が含まれている可能性がある. それにもかかわらず, このグラフ表現が有用なのは「グラフで起きていない事は実際のダイナミクスでも起きていない」という事を厳密に証明できるからである.

グラフ G に対しその不変集合と強連結成分を

$$\begin{aligned} \text{Inv } G &:= \{v \in G \mid v \text{ を通る無限に長い道が存在} \}, \\ \text{Sc} G &:= \{v \in G \mid v \text{ から自分自身への道が存在} \} \end{aligned}$$

と定義する. また G の部分グラフ G' に対し, それに含まれる頂点に対応する直方体を集めた \mathbb{R}^n の部分集を $|G'|$ と書くと次の性質が成立する. すると, 力学系 f に対して考えている領域 N 内にずっと留まる点たちの集合 $\text{Inv}(N, f)$ や領域 N に含まれる f の全ての周期点の集合 $\text{Per}(N, f)$ をグラフで表現することができる.

命題 1. $\text{Per}(N, f) \subset |\text{Sc } G|$, $\text{Inv}(N, f) \subset |\text{Inv } G|$.

この性質により、 $\text{Inv}(N, f)$ などの力学系として大事な集合を外側から近似することができるのである。

3 コンレイ・モースグラフ

前節で構成した有向グラフ G は力学系の情報を含んでいるので、その構造を調べることでもとの力学系の情報を引き出したい。

第一に、グラフ G は空間を離散化するとき用いた分割に由来する、本質的でない情報を含んでしまっている。分割の大きさが同じでも、少し起点をずらすと異なるグラフが生成されてしまうことがあるなど、異なる分割で生成したグラフたちの関係が簡単に書けない。もう一つの問題は、グラフ G は相空間の分割に対応する数の頂点を持つため、一般に頂点数が巨大なグラフになってしまい、そのままでは計算時間やメモリ消費の観点から扱いにくいという点である。

現実的な問題に応用するためにはある程度のサイズ以下の分岐は全て無視するような「粗視化」を行なって、力学系から有為な情報を抜き出す必要がある。そのために、第3図のように、グラフ G において各強連結成分（互いに行き来できる頂点たち）を一点に潰した新たなグラフを構成する。 G が表現する力学系全体の情報をそのまま扱うのは難し

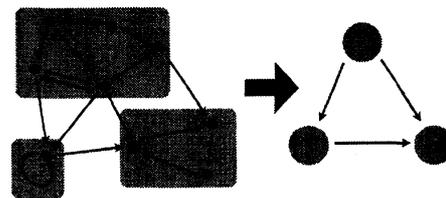


図3 G とそれを潰して得られるグラフ

いので、系を自分自身に戻って来るようなダイナミクスを持つ再帰的な成分に分解し、その成分たちの繋りかたの情報だけを残したグラフを構成するのである。ただし、このままだと各強連結成分上の力学系の情報が完全に失なわれてしまうので、潰して得られたグラフの各頂点には、対応する強連結成分の「コンレイ指数」の情報を持たせる。紙面の都合で定義は与えられないが、コンレイ指数とは力学系の孤立不変集合に対して与えられる位相的な不変量であり、その情報からその不変集合に含まれる周期点の存在を証明したり、位相的エントロピーを評価したりできる強力な不変量である [5]。有向グラフ G の強連結成分に対して力学系の孤立不変集合が対応し、そのコンレイ指数はグラフをその強連結成分に制限したものから計算することが出来る [1]。こうして構成されたグラフをコンレイ・モースグラフという。

4 グラフクラスタリングアルゴリズムの応用

コンレイ・モースグラフは力学系の事前知識なしに計算することが可能なデータ構造であり、その情報から力学系の分岐やエントロピーなどの性質を引き出すことが出来る [2]. しかし、コンレイ・モースグラフの応用は散逸的な力学系に対するものが主であり、保存系や流体から生成される流れなどの解析に応用することは今のところできない。

コンレイ・モースグラフによる相空間の分解は、不変集合をアトラクターとリペラーに分解するという操作に基づいており、アトラクターを持たない保存系に対してはこの操作が出来ない。グラフのレベルでいうと、グラフ G 自身が強連結的になってしまい、それ以上の分解を得ることが出来ないという事に対応する。グラフを用いた力学系の表現を用いて保存系やアトラクターの内部構造を研究するためには、強連結的なグラフを何らかの基準に従ってさらに分解するアルゴリズムが必要となるのである。

そこで我々は、ソーシャルネットワークのコミュニティ構造の研究 [3] などのために開発されたグラフクラスタリングアルゴリズムを用いることで、強連結成分の内部構造を見ることを試みる。一般的に最も広く用いられているクラスタリングアルゴリズムとしては、マルコフクラスタリングと呼ばれる手法 [6] がある。これはグラフ上のマルコフ過程に “inflation” という操作を加えたものであり、力学系における不変測度の計算などと発想的に近いため、理論的にはわかりやすいのだが、行列の積を取る操作が必須のため、分割の要素数に対して $O(n^3)$ の計算量が各ステップに必要となってしまう、このままでは実用性は低い。そこで、peer pressure クラスタリング [4] という、より簡易だが高速に収束するアルゴリズムを用ると、standard map などの力学系の構造を高速に分解することが可能となった。

ここではまず、保存系の典型である標準写像

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x + K \sin y \\ x + y + K \sin y \end{pmatrix}$$

に適用した例を紹介する。以下ではパラメータは $K = 0.971635$ とする。図 4 の左側に描かれているのは、標準写像の相空間である。KAM トーラスによる擬周期的な運動を起こしている領域と、ホモクリニックタングルによって生じる双曲的カオスの海が共存していることがわかる。この力学系を第 1 節の方法によりグラフで表現し、得られたグラフに対して peer pressure クラスタリングを実行した結果がその右側に描かれている。



図4 標準写像の相図（左）と、クラスタリングの結果（右）

クラスタごとに色分けされた画像をモノクロに変換しているため少し見辛いですが、KAM トーラスやその内部の層構造と、カオスの海が分離できている事がわかる。

次の例は、2次元の非圧縮流れに適用したものである。考えるのは図5に示されるように、上下を壁に挟まれた領域における円柱周りの流れである。計算には格子ボルツマン法 [7] を用いた。流れの方向は右から左であり、円柱の後流に双子渦や、さらに下流においては壁との相互作用で生じる渦も観察される。格子ボルツマン法の計算では、相空間は単純なグリッドに分割され、流れもグリッド間の遷移として与えられるので、即座に流れをグラフに変換できる。そうして得られたグラフに対して peer pressure クラスタリングを実行した結果が図6である。

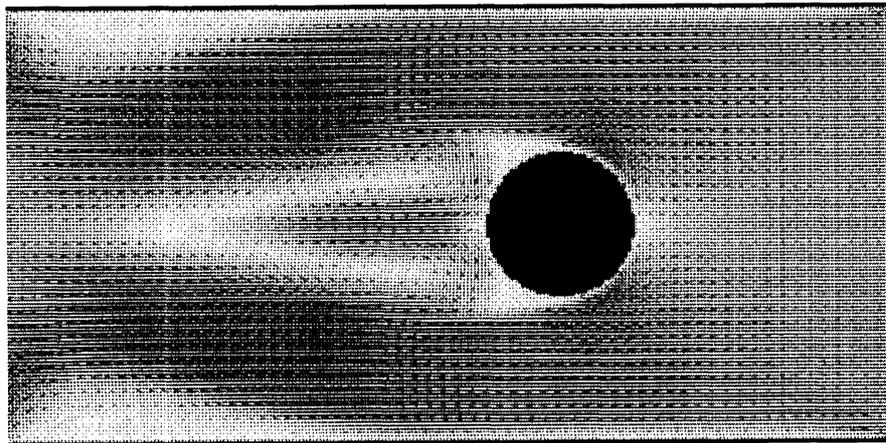


図5 格子ボルツマン法による円柱周りの流れ

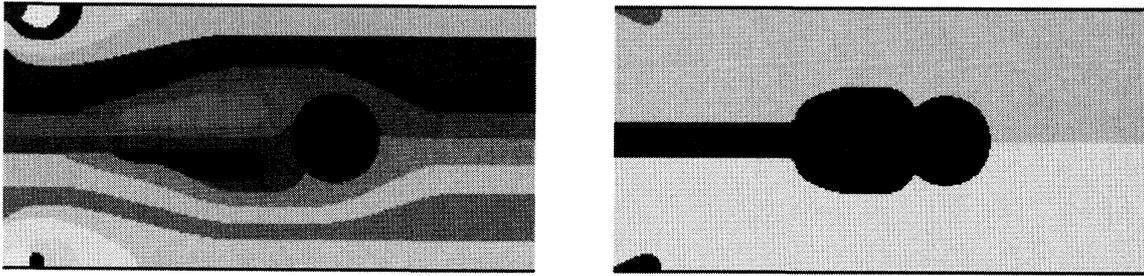


図 6 円柱周りの流れに対して得られたクラスタ分解

この peer pressure クラスタリングアルゴリズムには、得られるクラスタの細かさを制御するパラメータが含まれており、より細かい分割を得るように設定したものが左図、粗い分割に設定したものが右図である。どちらも流れの特徴的な構造を捉えているが、右図のほうがより大胆に情報が簡略化されている。このように、目的に応じて粗視化のレベルを調整できるのもこの手法の利点である。

参考文献

- [1] 荒井 迅: 計算ホモロジー理論の力学系への応用; 応用数理, Vol. 18, pp. 34–40 (2008)
- [2] Z. Arai, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, H. Oka and P. Pilarczyk, A databases schema for the global dynamics of multi-parameter systems, *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.*, Vol. 8, pp. 757–789, (2009)
- [3] Santo Fortunato, Community detection in graphs, *Physics Reports* **486** (2010) 75–174.
- [4] Jeremy Kepner and John Gilbert (eds), *Graph Algorithms in the Language of Linear Algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics (2011), ISBN: 978-0898719901.
- [5] K. Mischaikow and M. Mrozek, Conley index, *Handbook of dynamical systems*, Vol. 2, North-Holland, pp. 393–460 (2002)
- [6] Stijn Marinus van Dongen, Graph clustering by flow simulation, Ph. D Thesis, Centre fore Mathematics and Computer Science in Amsterdam.
- [7] Dieter A. Wolf-Gladrow, *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, Springer (2005), ISBN: 978-3540669739.