

Conley-Morseグラフの方法による時系列解析

京都大学大学院理学研究科 森田 英俊[†]

Hidetoshi Morita

Department of Mathematics, Kyoto University

1 序

任意の力学系の相空間は鎖回帰性という性質を持つ不変集合とそれらを結ぶ勾配的な部分とに分解できる, というのが Conley の力学系の基本定理の主張である [1]. この発想の下, 力学系を離散・有限なものとして近似し, その回帰的不変集合のダイナミクスの情報とそれらの勾配的關係とを, 計算機を援用して求める方法が, Conley-Morse グラフとよばれるものである. この方法は元来, 力学系モデルに対し, 精度保証付き数値計算を用いて数学的に厳密な結論を得るために開発された [2,3] が, 最近では時系列データ解析へとその適用範囲を広げつつある [4]. この時系列解析の観点からは, 背後の力学系モデルを仮定したパラメータ同定とは異なり, (背後の力学系モデルによらない) 相空間構造の同定であるという点で特徴的であると言えよう. 本稿はこの Conley-Morse グラフの方法による時系列解析, 特に確率的時系列の解析についての講演の報告である.

2 方法

Conley-Morse グラフ [2,3]

相空間をグリッド分割する. 考えている力学系の規定する写像によるあるグリッドの像は多くのグリッド上に広がるが, それらを包含するようなグリッドを求めることで, グリッド間の多価写像が得られる. この多価写像は, グリッドを頂点, 多価写像による対応関係を辺とした有向グラフとみなせる. この有向グラフは, いくつかの強連結部分と, それらを勾配的に繋ぐ部分とに分けられる. 前者の強連結部分を Morse 集合といい, 元の力学系の回帰的不変集合を, それを包含するグリッドで外から近似したものになっている. こうしてこの有向グラフは, Morse 集合を頂点, 勾配部分を辺とした小さな有向グラフに縮約できる. この縮約したグラフを Morse グラフという. この Morse グラフに,

[†]E-mail: hmorita@math.kyoto-u.ac.jp

Morse 集合内でのダイナミクスを表現するホモロジー Conley 指数の情報を付加したものを Conley-Morse グラフという。ただし本稿では Conley 指数は用いないので Morse グラフのみを考察する。

確率的な時系列から多価写像を与える方法

相空間として n 次元空間を考える。この相空間を幅 h でグリッド分割する。時系列データ $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$ が与えられると、ある時間のデータ $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$ が含まれるグリッドから、次の時間のもの $(x_1(t + \Delta t), x_2(t + \Delta t), \dots, x_n(t + \Delta t))$ が含まれるグリッドへの対応が得られる。これはグリッド間の多価写像になる。ただし、確率的なダイナミクスの場合、このように得られた多価写像を単に上記の方法に適用するだけでは、後に見るように、相空間全体を覆う単一の Morse 成分しか得られない。というのは、頻繁に起きる変化も稀にしか起きない変化も同様に一つの写像と見なされてしまうからである。そこで次のように確率的な処理をする。グリッド i に滞在する回数 n_i 、および時間 Δt の間にグリッド i から j へと遷移した回数 $m_{i \rightarrow j}$ に対し、遷移確率（条件付き確率） $T_{i \rightarrow j} = m_{i \rightarrow j} / n_i$ を導入する。 $T_{i \rightarrow j}$ が $T_{j \rightarrow i}$ よりも大きいときには写像 $i \rightarrow j$ を採用したいが、その違いがあまりないときには $i \rightarrow j$ および $i \leftarrow j$ の双方を採用したい。そこで、あるパラメーター ρ に対し、

$$\rho \leq T_{i \rightarrow j} / T_{j \rightarrow i} \quad \text{ならば} \quad i \rightarrow j, \quad (1a)$$

$$\rho^{-1} \leq T_{i \rightarrow j} / T_{j \rightarrow i} < \rho \quad \text{ならば} \quad i \leftrightarrow j, \quad (1b)$$

$$T_{i \rightarrow j} / T_{j \rightarrow i} < \rho^{-1} \quad \text{ならば} \quad i \leftarrow j \quad (1c)$$

と対応を与える。さらに、稀な遷移イベントの影響を除くため、 $m_{i \rightarrow j}$ あるいは $m_{j \rightarrow i}$ がある閾値 m_{th} 以上のもののみを採用する。こうしてグリッド間の多価写像が得られる。

埋め込み

実験や観測で得られる時系列の場合、相空間の次元の分だけのベクトル時系列データが与えられているとは限らず、特に一次元（スカラー）時系列データであることが多い。このようなデータにも上述の方法を適用できるようにしたい。そこで通常の時系列解析における埋め込みの方法 [5-8] を援用する。すなわち、一次元の時系列 $z(t)$ があつたときに、時間遅れ τ を導入し、ベクトルデータ $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) = (z(t), z(t + \tau), \dots, z(t + (n-1)\tau))$ を構成し、これについて上記の方法を用いる。

以上の方法を、次の二つのノイズの加わった簡単な力学系モデルに適用する。これらはノイズが無いときの不変集合およびそれらの勾配関係が分かっているため、この方法が使えるかどうかの検証になる。

モデル1

一次元のモデルとして、ポテンシャル上の Langevin 方程式を考える：

$$\gamma \dot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \xi(t) \quad (2)$$

ここでポテンシャル $V(x)$ は次の区分二次の double-well 型のものである：

$$V(x) = \frac{\omega_0^2}{2} \begin{cases} (x+1)^2 & x < -1/2 \\ -x^2 + 1/2 & -1/2 \leq x < 1/2 \\ (x-1)^2 & x \geq 1/2 \end{cases} \quad (3)$$

また $\xi(t)$ は白色ガウスのノイズ $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2D\delta(t-s)$ である ($\delta(\cdot)$ はデルタ関数)。スケーリングにより $\omega_0 = 1$ とできる。ノイズが無いときの不変集合は不安定平衡点 $x = 0$ と安定平衡点 $x = \pm 1$ であり、勾配関係は $x = 0$ から $x = +1$ へ、および $x = 0$ から $x = -1$ へ、である。

モデル2

Hopf 分岐の標準型にノイズが加わったものを考える：

$$\dot{x} = -((x^2 + y^2) - 1)x + (c_2(x^2 + y^2) - c_0)y + \xi(t) \quad (4a)$$

$$\dot{y} = -((x^2 + y^2) - 1)y - (c_2(x^2 + y^2) - c_0)x + \eta(t) \quad (4b)$$

ここで $\xi(t), \eta(t)$ は独立な白色ガウスのノイズ $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \langle \eta(t)\eta(s) \rangle = \delta(t-s)$, $\langle \xi(t)\eta(s) \rangle = 0$ である。本稿では $c_0 = -1$, $c_2 = 0$ を用いる。ノイズが無いときの不変集合は原点の不安定平衡点と、原点を中心とし半径1のリミットサイクルであり、勾配関係は不安定平衡点からリミットサイクルへである。

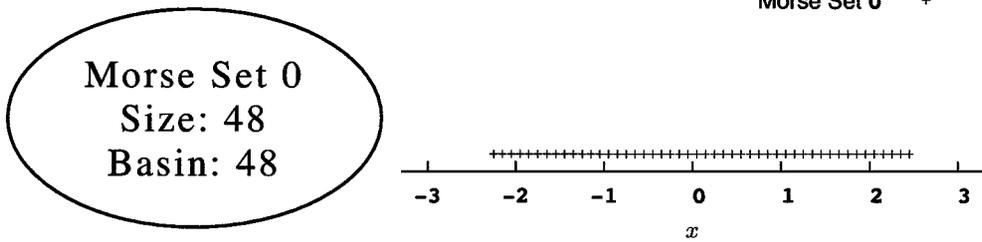


図 1: モデル 1 の時系列に対する Morse グラフ (左) と Morse 集合 (右). $\gamma = 1, D = 0.1, h = 0.1, m_{th} = 1$.

3 結果

モデル 1

モデル 1 の十分長い時系列データに対し、確率的な処理をしなかったときに得られた Morse 集合と Morse グラフが図 1 である。この場合、相空間全体を覆う単一の Morse 成分しか得られない。これは、頻繁に起きる変化も稀にしか起きない変化も同様に一つの写像と見なされてしまうからである。

モデル 1 の同じ時系列に対し、確率的な処理をしたときに得られた Morse 集合と Morse グラフが図 2 である。 $x = 0$ の近くに Morse 集合 0 が、 $x = \pm 1$ の近くに Morse 集合 1 と 2 が得られる。Morse グラフは、Morse 集合 0 から 1 および 2 へと辺が伸びている。この結果は、モデル 1 でノイズがないとき、不変集合が不安定平衡点 $x = 0$ と安定平衡点 $x = \pm 1$ であり、 $x = 0$ から $x = +1$ へ、および $x = 0$ から $x = -1$ へと勾配関係があることに対応している。

なお、この時系列は、モデル 1 に対応する Focker-Plank 方程式の定常確率密度関数を満たすような時系列である必要はない。定常確率密度関数を満たさないような時系列を作ったとき、それからも同様な Morse 集合や Morse グラフが得られる。

モデル 2

モデル 2 の十分長い時系列データに対し、 $(x(t), y(t))$ と二次元のデータを用いて得られた Morse 集合と Morse グラフが図 3 である。原点の近くに Morse 集合 1 が、また原点を中心とし半径 1 の円の周辺に Morse 集合 2 が得られる。Morse グラフは Morse 集合 1 か

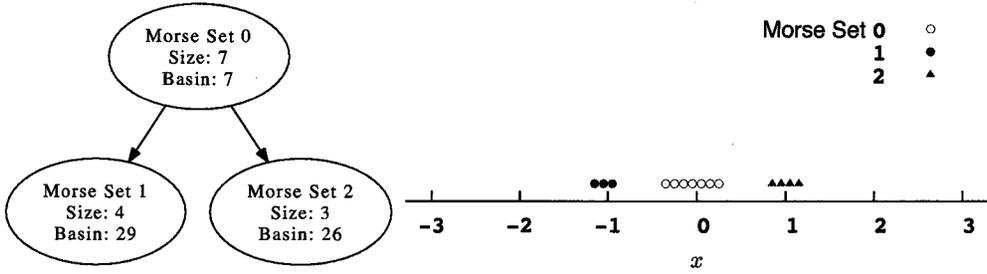


図 2: モデル 1 の時系列に対する Morse グラフ (左) と Morse 集合 (右). $\gamma = 1, D = 0.1, h = 0.1, \rho = 1.1, m_{th} = 1$.

ら 2 へと辺が伸びている. この結果は, モデル 2 でノイズがないとき, 不変集合が原点の不安定平衡点と原点を中心とし半径 1 のリミットサイクルであり, 前者から後者へと勾配関係があることに対応している. なお, $(-1, 1)$ 付近に Morse 集合 0 が見られる. グリッド間遷移が比較的少ないところにこのような Morse 集合が現れてしまうことがある. このようなものを除く方法も調べているが本稿では割愛する.

モデル 2 の同じデータに対し, $x(t)$ のみを知っているとして, 埋め込み $(x_1(t), x_2(t)) = (x(t), x(t+\tau))$ で構成した時系列データから得られた Morse 集合と Morse グラフが図 4 である. 原点を中心とし半径約 1 の円盤状の大きな Morse 集合が現れており, 期待される不安定固定点やリミットサイクルに対応するものは得られなかった.

これを克服するために, 確率的な時系列から多価写像を与える方法の最後に説明した, 遷移イベントをカウントする閾値 m_{th} を変化させる. m_{th} を大きくすると, 稀な遷移がカウントされなくなるため, それにつれて Morse 集合は分裂してゆく. その分裂の様子を図示したのが図 5 である. 図 4 は $m_{th} = 1$ のときに当たるが, $m_{th} = 3$ で大きな円盤状の Morse 集合のみが残る. これはそのまま残り続け, $m_{th} = 21$ のときに二つに分裂し, またしばらくそのままこの二つが残り続ける.

この二つの Morse 集合とその Morse グラフを図示したのが図 6 である. 原点の近くに Morse 集合 0 が, また原点を中心とし半径 1 の円の周辺に Morse 集合 1 が得られ, Morse グラフでは前者から後者へと辺が伸びている. すなわち, 二次元の時系列データからのものと同様の結果が得られた.

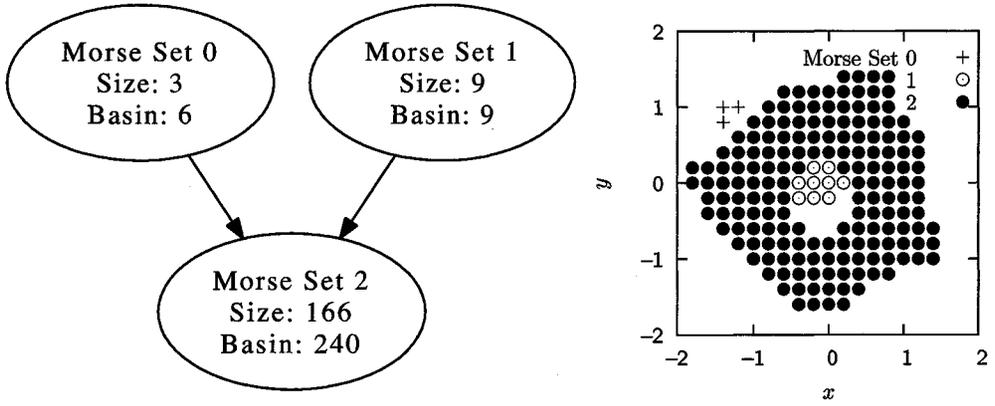


図 3: モデル 2 の時系列 $(x(t), y(t))$ に対する Morse グラフ (左) と Morse 集合 (右). $D = 0.1, h = 0.2, \rho = 1, m_{th} = 0$.

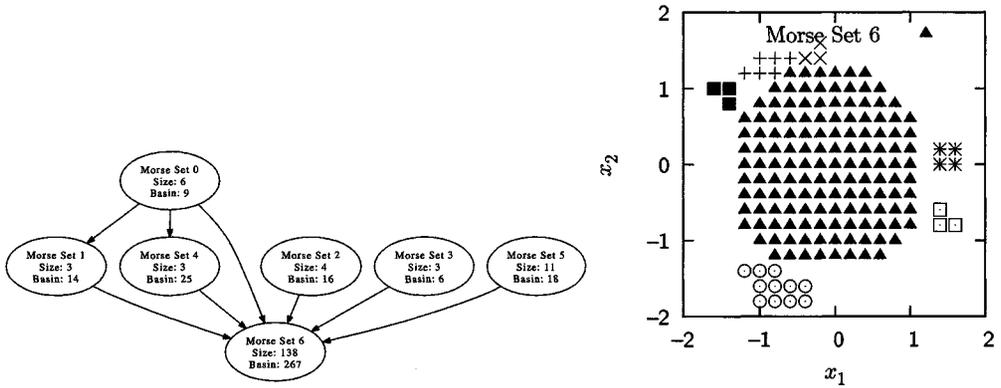


図 4: モデル 2 の時系列に対する Morse グラフ (左) と Morse 集合 (右). スペースの関係で主要な Morse 集合のみに凡例を付けている. $D = 0.1, h = 0.2, \rho = 1, \tau = 1.5, m_{th} = 1$.

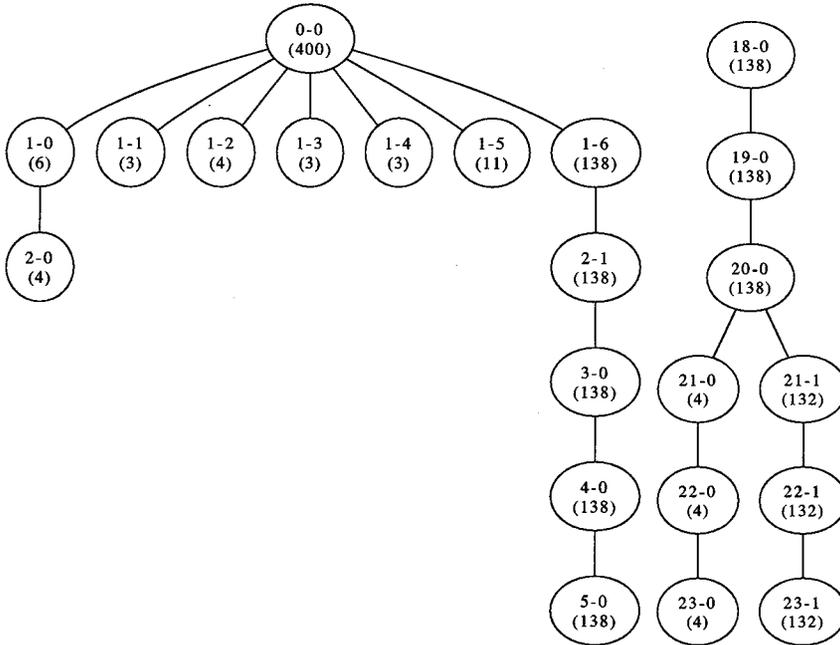


図5: m_{th} を大きくしたときの Morse 集合の分裂. ここで $m_{th}-i$ は m_{th} のときの Morse 集合 i を, 括弧の中の数字はその Morse 集合の大きさを表す. $D = 0.1, h = 0.2, \rho = 1, \tau = 1.5$.

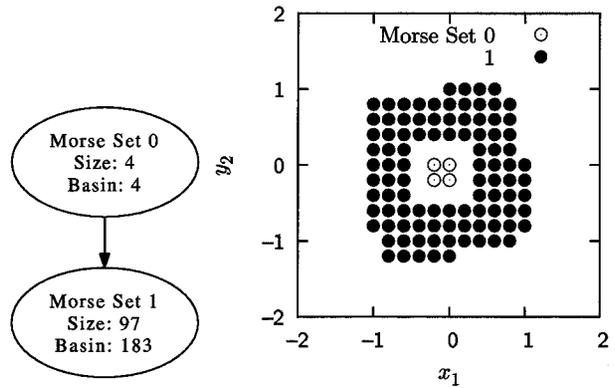


図6: モデル2の時系列に対する Morse グラフ (左) と Morse 集合 (右). $D = 0.1, h = 0.2, \rho = 1, \tau = 1.5, m_{th} = 100$.

4 まとめ

確率的な時系列データ解析に Conley-Morse グラフの方法を応用すべく、相空間のグリッド間の多価写像を与える方法を考案した。これを、ノイズの加わった簡単な力学系が生み出す時系列に適用した。相空間の次元分のデータからは、ノイズがないときの不変集合とそれらの勾配関係に対応する Morse 集合と Morse グラフが得られた。一次元のデータしかない場合にも、埋め込みにより二次元データを構成し、さらに遷移イベントをカウントする閾値 m_{th} を考慮に入れることで、同じく対応する Morse 集合と Morse グラフが再現できた。

この方法はノイズの背後に不変集合やそれらの間の遷移があると期待される様々な現象に対し有効であると考えられ、具体的な観測・実験データへの適用に興味を持たれる。

本稿は國府寛司氏との共同研究に基づく。本研究は JST-CREST 「ダイナミクス全構造計算法の発展による脳神経—身体リズム機構の解明と制御」と、科研費 No.25287029 の支援を受けた。本研究集会にご招待頂いた研究代表者の中野直人氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] C. Conley, CBMS Regional Conf. Ser. in Math. **38**, Amer. Math. Soc., Providence, R.I. (1978).
- [2] Z. Arai, et al., SIAM J. Appl. Dyn. Sys. **8**, 757–789 (2009).
- [3] 國府寛司, 数理科学, 8月号, 14–19 (2011)
- [4] H. Kokubu, H. Morita, M. Nomura, and I. Obayashi, in preparation.
- [5] N. H. Packard, et al., Phys. Rev. Lett. **45**, 712–716 (1980).
- [6] D. Aeyels, SIAM J. Cont. Opt. **19**, 595–603 (1981).
- [7] F. Takens, in *Dynamical systems and turbulence*, Lecture Notes in Mathematics **898**, 366–381 (1981).
- [8] T. Sauer, J. A. Yorke, and M. Casdagli, J. Stat. Phys. **65**, 579–616 (1991).