拡散写像によるOV模型の巨視的動態の解析

三浦康也, 杉山雄規

名古屋大学 情報科学研究科 複雑系科学専攻

概要

多くの自由度からなる系の総体的振る舞いを少数の巨視的変数を用いて記述しようとするとき、そもそも巨視的変数としてどのような量を考えればよいのかという大きな問題が立ちはだかる。本稿では、この問題に対する一つの処方として拡散写像と呼ばれる手法を採用し、OV 模型が作る巨視的なパターン形成の分岐解析を行った。

Analysis of macroscopic dynamics of the OV model by diffusion maps

Yasunari Miura, Yuki Sugiyama

Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information Science, Nagoya University

Abstract

When we try to describe macroscopic features in a system of many degree of freedom, we encounter the basic problem that what quantities are appropriate as macroscopic variables for this purpose. In this paper, we employ a method of *diffusion map* as a one of the solutions to this problem, and perform a bifurcation analysis about macroscopic pattern formation of the OV model, for an example.

1 はじめに

多くの現象は、多数の自由度が互いに影響を及ぼし合いながら複雑な時間発展をしていく過程として見ることができる。その場合、個々の自由度が複雑な振る舞いをしているにも関わらず、系の総体的振る舞いを特徴付ける少数の巨視的な変数を用いて現象を簡潔に記述できることがある。熱力学および統計力学はそのような記述により成功を収めた代表的な理論である。しかし、熱的に非平衡な系や生命、社会現象のモデルなども含めた一般的な問題に対してこのようなアプローチをとるのは困難なことである。その困難さの要因の一つは、多自由度系を記述する適切な巨視的変数を定義するための一般的な指導原理が存在しないということである。

本稿では、このような課題に対する処方として拡散写像 [1][2] と呼ばれる手法を採用し、OV 模型 [3] が作る巨視的パターンの解析に適応して有用性を確かめた。さらに、そこで得られた巨視的変数のダイナミクスを特徴付ける分岐図を得た。

2 拡散写像

以下に、拡散写像の手法について説明する。

M 個のデータ点からなる集合 $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_M\}$ を考える。ひとつのデータ点 $\boldsymbol{x}_i$ は、系の状態を決定する変数を並べたベクトルである（例えば古典力学系ならば、ある測定時刻における全粒子の位置と速度を並べたベクトル）。

ここで、集合内のデータ点の上を遷移していくランダムウォークを定義する。データ点 $\boldsymbol{x}_i$ から $\boldsymbol{x}_j$ に遷移する確率を次式で与える;

$$p(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) := \frac{\exp(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{\varepsilon^2})}{\sum_{j'=1}^{M} \exp(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{j'}\|^2}{\varepsilon^2})} \qquad (1)$$

$\|\cdot\|$ は Euclid ノルムを表す。パラメータ ε の値は、データ点間の最近接距離程度の値にとる。そして点 $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_j$ の間の拡散距離 $D_t(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ を次式で定義する;

$$D_t^2(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) := \sum_{m=1}^{M} \frac{(p_t(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_m) - p_t(\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_m))^2}{\phi_0(\boldsymbol{x}_m)} \tag{2}$$

ここで、$p_t(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ は上述のランダムウォークにおいて t ステップで $\boldsymbol{x}_i$ から $\boldsymbol{x}_j$ へ遷移する確率であり、ϕ_0 はこのマルコフ過程の定常分布である。$\boldsymbol{x}_i$ を固定して $p_t(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_m)$ を $\boldsymbol{x}_m$ に関する 1 変数関数とみなせば、(2) 式の分子は 1 変数関数 $p_t(\boldsymbol{x}_i, \cdot)$ と $p_t(\boldsymbol{x}_j, \cdot)$ のオーバーラップの度合いが大きいほど小さい値をとる（つまりこの距離関数で見て近い）ことがわかる。ここで、遷移行列 $(P)_{ij} = p(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ のスペクトル分解を用いると、(2) 式は次のように書ける；

$$D_t^2(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \sum_{\alpha=1}^{M-1} (\lambda_\alpha^t \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_i) - \lambda_\alpha^t \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_j))^2 \tag{3}$$

ここで、$\{\lambda_1, \ldots, \lambda_{M-1}\}$ は遷移行列の固有値である (ただし、最大固有値 1 は含まない)。固有値の大きさは、添字について

$$1 \geq \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_{M-1} \geq 0 \tag{4}$$

のように順序付けされているものとする。また、$\psi_\alpha(\boldsymbol{x}_i)$ は、遷移行列の固有値 λ_α に対応する右固有ベクトルの第 i 成分を表す。(3) 式を見ると、状態間の拡散距離は次のような座標変換

$$\begin{gathered}\mathscr{D} : \mathbf{R}^N \to \mathbf{R}^{M-1}, \\ \boldsymbol{x}_i \mapsto \mathscr{D}(\boldsymbol{x}_i) = \Big(\lambda_1^t \psi_1(\boldsymbol{x}_i), \ldots, \lambda_{M-1}^t \psi_{M-1}(\boldsymbol{x}_i)\Big)\end{gathered} \tag{5}$$

により写像された $M-1$ 次元空間上での Euclid 距離に等しいことがわかる（N は元のデータ点の次元である)。この写像 $\mathscr{D}$ を拡散写像と呼ぶ。

ここで、遷移行列の固有値は（4）に示したように全て 0 以上 1 以下の値をとることから、与えられた t に対して、固有値の大きい項を適当に n 項までとれば、(3) 式は次のような近似式で表すことができる;

$$D_t^2(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \cong \sum_{\alpha=1}^{n} (\lambda_\alpha^t \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_i) - \lambda_\alpha^t \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_j))^2 \tag{6}$$

通常は縮減後の次元 n として 2 または 3 程度をとる。本稿では、この手続きで得られた $\lambda_1^t \psi_1(\boldsymbol{x}_i), \lambda_2^t \psi_2(\boldsymbol{x}_i)$ の 2 つを巨視的変数とみなして解析を行う [1]。また、t の値は常に 1 を用いるものとする。

一旦、(5) 式によって新しい座標系が得られれば、元のデータ点の集合には無かった新しいデータ点 $\boldsymbol{y}$ を、次の等式を用いてこの座標系に埋め込むことができる；

$$\tilde{y}_\alpha := \sum_{j=1}^{M} p_t(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}_j) \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_j), \quad (\alpha = 1, \ldots, M-1) \tag{7}$$

ここで、$\tilde{y}_\alpha$ は埋め込まれた座標系における第 α 座標である。$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}_i$ の場合、$\boldsymbol{\psi}_\alpha$ が遷移行列の右固有ベクトルであることから、(7) 式は $\tilde{x}_\alpha = \lambda_\alpha^t \psi_\alpha(\boldsymbol{x}_i)$ となり、(5) 式と整合していることが分かる。

3 モデル

本稿で解析の対象となる Optimal Velocity 模型（以下、OV 模型）について簡単に説明する。このモデルは、以下の常微分方程式系により与えられる；

$$\begin{gathered}\frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = a\Big(\mathrm{V}(\Delta x_i(t)) - \frac{dx_i(t)}{dt}\Big), \\ (\Delta x_i := x_{i+1}(t) - x_i(t)), \quad (i = 1, \ldots, N)\end{gathered} \tag{8}$$

$x_i(t)$ は i 番目の粒子の位置、a は感応度を表す。ここで、OV 関数と呼ばれる関数 V は、$0 \to \mathrm{vmax}$ と単調増加するシグモイド型の関数であればどのようなものでもよいが、本稿では次のような関数を用いる；

$$\mathrm{V}(\Delta x_i(t)) = \mathrm{vmax}\{\tanh(\Delta x_i(t) - h) + h\} \tag{9}$$

ここで、vmax は最大速度、h は OV 関数の変曲点を表す。また本稿では、周期境界条件を課すこととし、周長は L とする。

全ての粒子が等間隔 L/N で同じ速度 $\mathrm{V}(L/N)$ をもって運動する状態（一様流）は明らかに（8）式の解となっている。しかし、あるパラメータ領域においては一様流解が不安定化しクラスタが形成され、個々の粒子の進行方向とは逆方向に伝搬していく。また、一様流解とクラスタ流解が共に安定な解として存在する双安定領域が存在することも分かっている。本稿では、そのような双安定領域とその近傍での振る舞いに焦点を絞って解析を行う。また、クラスタ流解においてはクラスタが複数形成されることもあるが、今回はクラスタが 1 つだけ形成される場合に限ることにする。なお、パラメータとして a と

[1] 後に示すグラフにおいては、変数 $\lambda_1^t \psi_1(\boldsymbol{x}_i), \lambda_2^t \psi_2(\boldsymbol{x}_i)$ に対応する軸のラベルを、それぞれ ψ_1, ψ_2 と表記している。

平均密度 N/L を用いる場合と、h と vmax を用いる場合があるが、本稿では後者のペアを考え、h を固定し、vmax を変化させて定常解の分岐を調べる。

4　数値計算

OV 模型の数値計算により得られた、各時刻における粒子の位置と速度のデータに対して拡散写像を計算し、縮減された空間上でのダイナミクスの解析を行った。

4.1　変数・定数の設定

数値計算において用いた定数や変数の設定等について説明する。

まず、粒子数は $N = 60$, 周長は $L = 60$ で周期境界条件を用いた。感応度は $a = 1.7$,OV 関数の変曲点は $h = 1.2$, 最大速度は vmax $= 0.835$ とした。OV 模型の数値計算では、時間刻み幅 $dt = 0.1$ でオイラー法を用いた。この条件で数値計算を行うと、一様流解とクラスタ流解が両方安定なパラメータ領域にあることが分かった。また、クラスタがレーンを 1 周するのに要する時間は 230 程度であった。

拡散写像の計算に用いるデータ点としては、上記の設定で行った OV 模型の数値計算で得られた時系列データのうち、定常な運動に緩和したクラスタ流解において時間幅 1.0 刻みで得られる 232 個の時刻における全粒子の位置と速度、および一様流解のひとつの時刻における全粒子の位置と速度を用いる。以上より、全データ点の数は 233 個である。

拡散写像の計算に先立って、OV 模型の計算から得られた変数（位置と速度）に対して、以下のような処理を行った。まず、位置座標 x_i を 2 つの変数

$$x_i^{(1)}(t) = \sin(2\pi x_i(t)/L),$$
$$x_i^{(2)}(t) = \cos(2\pi x_i(t)/L) \qquad (10)$$

に変換する。これは、クラスタが境界 $(L = 60 \leftrightarrow 0)$ をまたいでいるときに、拡散写像で移された空間上での軌道が歪むことを防ぐための処理である。1 次元の運動に、2 つの位置座標を用いることで冗長な記述となるが、拡散写像を計算する上で障害とはならない。また、上述の処理により 2 つの位置変数が 0 から 1 の間の値をとることから、速度変数の最小値を 0、最大値を 1 以下にするために次のような変換を行う；

$$x_i^{(3)}(t) = \frac{v_i(t) - \min_i\{v_i(t)\}}{\max_i\{v_i(t)\}} \qquad (11)$$

また、本稿では巨視的なパターンに注目しているので、クラスタが同じ位置にあれば、クラスタに含まれる粒子の番号にかかわらず同じ状態として扱えるようにする必要がある。そのため、次のような変換を行い、状態が粒子の番号の入れ替えに対象となるようにする；

$$\bar{x}_i^{(k)}(t) = m_i(x_1^{(k)}(t), \ldots, x_N^{(k)}(t)),$$
$$(k = 1, 2, 3, \quad i = 1, \ldots, N) \qquad (12)$$

右辺は集合 $\{x_1^{(k)}(t), \ldots, x_N^{(k)}(t)\}$ に対する i 次の中心モーメント m_i を表す。$i = 1$ の場合は平均値である。

4.2　計算結果

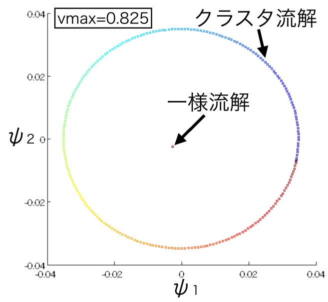

図 1: 縮約された空間上での軌道

上述のような準備を行った上で、拡散写像の計算により得られた縮減された空間上での軌道を図 1 に示す。なお、(1) 式中の ε の値は 0.5 として計算を行った。クラスタ流解のプロット点の色は時刻を表し、青から赤にかけて時間発展している。クラスタがレーン上を一周する運動は、この空間上では、ある半径の円周上を一周することに対応しており、一様流解はその円の中心の点として表されていることが分かる。

4.3　新たなデータ点の埋め込み

図 1 のクラスタ流解の軌道上のある一点に対応する微視的状態（図 2 内で最も左に位置する黒枠で囲まれた状態）を基準として、一様流解の状態に近づけていった状態（図 2 の赤枠で囲まれた図はそのひとつ）を (7) 式により $\psi_1\psi_2$ 平面に埋め込んだものが、図 2 の赤い×印の点である。そして、図 2 の ① と ② に対応する微視的状態を初期条件として OV 模型の数値計算を行い、得られた時系列データを再び $\psi_1\psi_2$ 平面に埋め込んだものが図 3 の 2 つの軌道で

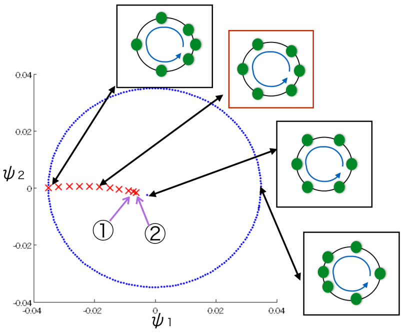

図 2: データ点の埋め込み

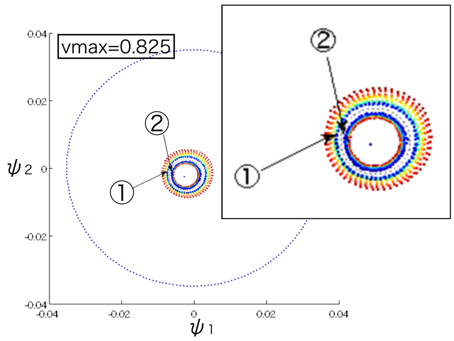

図 3: ① と ② を初期状態とする軌道

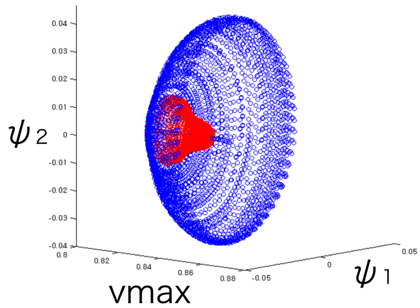

図 4: vmax の変化に対する $\psi_1\psi_2$ の定常解の分岐

ある。プロット点の色は、青から赤にかけて時間発展していることを示している。この図を見ると、① を初期状態とする軌道は、内が青、外が赤となっており、時間の経過とともに外側に広がり、安定なリミットサイクルに渦を巻きながら近づいて行くことが分かる。それに対して、② を初期状態とする軌道は、外が青、内が赤となっており、中心の一様流解に近づいて行く様子が見てとれる。このことから、① と ② の間に不安定リミットサイクル（図 3 に描かれた灰色の点線）が存在することが分かる。

4.4　分岐図

vmax の値を 0.800 から 0.840 まで 0.001 ずつ変化させて、前節で行った方法を用いて安定リミットサイクルおよび不安定リミットサイクルを計算した結果を図 4 に示す。青い点の集合が安定リミットサイクルからなる曲面、赤い点の集合が不安定リミットサイクルからなる曲面を表す。この結果から、OV 模型がクラスタ流解と一様流解がともに安定な定常解として存在するような領域をもつことは、縮減された空間においてサブクリティカル Hopf 分岐の構造をもつことに対応することが確かめられた。

5　まとめと展望

多自由度系の巨視的変数を定義する指導原理として拡散写像を採用し、OV 模型の解析を行ったところ、多数の粒子の微視的運動により生じるクラスタ流という現象を 2 つの巨視的変数で表せることが分かった。さらにその変数のダイナミクスが、（この変数の時間発展を支配する微分方程式が不明であるにもかかわらず）サブクリティカル Hopf 分岐の構造をもつことを突き止めることができた。

しかし、巨視的変数として考えているこの変数は、遷移行列の固有値問題を解いて得られるものであり、物理的にどのような意味をもつかは今のところ不明である。この点は今後の課題である。

一方で、本稿の解析において OV 模型の方程式（つまり微視的変数を支配する微分方程式）は、データ点を生成するために使われているに過ぎないということは注目に値する。つまり、適当な初期条件に設定して得られた実験データに対して、本稿に述べたような解析を行うことも原理的には可能だということである。微視的なモデルを立てずとも、実験データから直接システムに内在する数理構造を特定することができるならば、モデルを立てて現象を理解するというアプローチとは別の道を開くことになる。今後はこのような研究の方向性も探っていきたい。

参考文献

[1] R. R. Coifman, S. Lafon, Appl. Comput. Harmon. Anal. **21** (2006) 5.

[2] R. R. Coifman, Y. Keller S. Lafon, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. **28** (2006) 1784

[3] M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama, A Shibata, Y. Sugiyama, Phys. Rev. E **51** (1995) 1035.