研　究　報　告　書

「数学と計算機科学の連携による数理モデルの大域的計算理論」

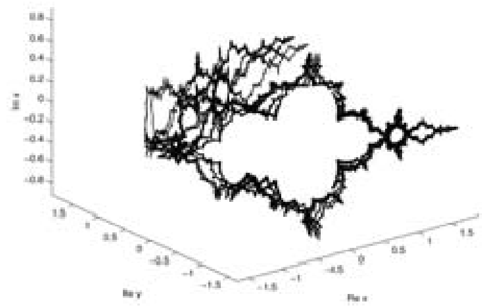
研究期間： 平成 19 年 4 月～平成 23 年 3 月
研 究 者： 荒井 迅

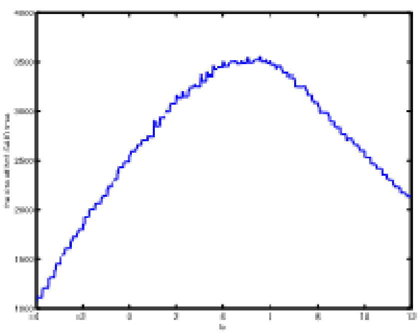
1．研究のねらい

微分方程式や写像などの力学系で表現される数理モデルを解析するための、新たなアルゴリズムを開発することが本研究のねらいである。周期軌道の分岐解析など、一般的に数理モデルの解析に使われてきた手法と異なり、力学系の大域的な構造をグラフを用いて組合せ的に表現し、そのグラフの構造をグラフ理論や計算ホモロジー理論などの道具を駆使して解析するという新たな手法を取ることにより、大域的な構造を自動的、かつ数学的に厳密にとらえる事が出来るアルゴリズムの開発を目指した。

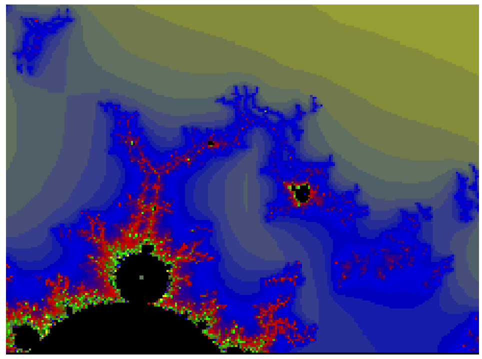
2．研究成果

研究の柱である、大域的な計算理論のアルゴリズムの開発という面では、計算機科学で近年盛んに研究されている Succinct Binary Tree などのメモリ圧縮技術に即した計算アルゴリズムを開発することで、大幅な計算の効率化をはかることが出来た。これにより、右図のような高次元複素力学系のジュリア集合など、従来は次元の高さが問題となって大域的計算が行なえていなかった力学系に対しても本研究の手法を用いることが出来るようになり、複素力学系理論の進展に貢献することができた。





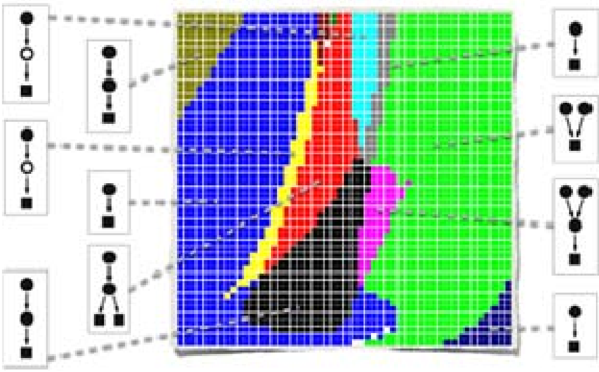
また、大域計算のメモリ圧縮を研究する過程において、メモリ消費量などの大域的計算の困難さを測る量と、その力学系の複雑さとの間に非自明な関係があることが見出された。例えば力学系の位相的エントロピーに対して、その力学系の大域的な構造を計算するために必要なデータの情報エントロピーが左図のように山形の関数をなす現象が観察された。これは圧縮技術を理論に導入して初めて明確になった問題である。この観察を元に、記号力学系の場合には系を定義するのに必要な情報エントロピーと位相エントロピーの間に明確な関係があることを証明することが出来た。異なる文脈ではあるが、複雑性とエントロピーの関係は従来から複雑系理論において考察されてきたテーマであり、本研究の結果はこの問題に新たな視点を与えるものである。



本研究で開発された構造安定性証明アルゴリズムを応用して、高次元複素力学系のモノドロミーの計算が行なえることも示された。線形常微分方程式のモノドロミー理論とは異なり、カオス的な力学系を扱う場合には解空間は線形構造のような構造は持たないフラクタル集合であり、またこの場合は特異点も一点ではなくマンデルブロ集合のようなフラクタル集合になる。例えば右図は複素エノン集合のパラメータ空間であるが、ここ

で特異点に対応するのはマンデルブロ集合のコピーのように見える黒い集合で、この中には無限個の軌道の特異点がフラクタル状に含まれている。このような場合、モノドロミーの計算は解析的な手法では困難である。そこで、本研究の大域計算アルゴリズムを用いて、パラメータを変化させながら解の挙動を厳密に評価し、モノドロミーを計算するアルゴリズムを開発した。例えば解空間がフラクタルな構造を持つため、個々の軌道の挙動を追いかけてもモノドロミーは求まらず、本研究のように不変集合全体の大域的な構造を追跡して初めてこのようなアルゴリズムが得られた。これにより、例えば複素エノン写像のパラメータ空間の位相的な構造が低次元複素力学系の場合と大きく異なることがわかり、高次元複素力学系理論の進展が得られた。

また、本研究の具体的な数理モデルへの応用を探る過程で、力学系理論で標準形に用いられている構造安定性の概念が応用には使いにくいことが次第に判明してきた。これは力学系が構造安定となるパラメータが系のパラメトリゼーションによってはほとんど存在しないことが様々な系での計算を通じてわかってきたことや、構造安定性の鍵となる一様双曲性の強さと証明に必要な計算量の関係の評価から得られた考察である。またそもそも、具体的な応用においてはそもそも得られるデータへのノイズ混入が避けられず、そのような状況では全ての軌道の無限小構造まで見る構造安定性の概念がそのままでは意味を持たないということも理由である。そこで、より大域計算に適した、計算しやすい安定性概念を追求するなかで、京都大学の國府寛司教授や Rutgers 大学の Konstantin Mischaikow 教授らと共同でコンレイ・モースグラフという概念を開発した。これは、力学系を離散化して得られる有向グラフから、強連結成分を一点に潰すことで不要な情報を削除し、力学系の勾配的な構造だけに着目した情報を引き出したものである。ただし、このままでは情報が落ちすぎなので、潰した各強連結成分において対応する不変集合のコンレイ指数を計算し、この情報は残す。このように力学系の構造をグラフで表現することにより、グラフ表現の安定性を議論することが出来るようになった。すなわち、コンレイ・モースグラフのグラフとしての構造と、各頂点の持つコンレイ指数が同型である場合には、今見ている離散化グリッドのレベルでは力学系の構造は安定であると見なすのである。ノイズのある系に対しても、最初に力学系を離散化してグラフを構成する段階で軌道像にノイズの大きさに対応するマージンを持たせることでノイズを吸収できる。ノイズの影響は最初の離散化の段階にしか入らないため、以降の解析は決定論的な力学系と完全に平行に出来るというメリットがある。このコンレイ・モースグラフを用いて非線形レスリー写像という人口予測モデルのパラメータ空間の構造を調べたものが右の図である。



3．今後の展開

まずは本研究で開発した力学系の大域計算アルゴリズムを、同様な方向性を模索している他の研究グループに提供し、そこからフィードバックを得てさらにアルゴリズムの改良を進めたい。たとえば本領域内でいえば、國府 CREST における計算とは重なる部分が多いので、本研究の成果を提供して研究の進展をはかりたい。同時にメモリ圧縮など、さきがけ期間に進めた研究についても、計算機科学の研究者と連携してさらなる改良を進める。

計算の効率化を研究する過程で遭遇した複雑性とエントロピーの関係の問題については、同様の問題を複数の切り口から検討することが肝要だと考える。関連する研究としては本領域アドバイザーの津田教授を初めとする複雑系理論の研究者の仕事もあり、また確率論的アプローチやアルゴリズム的複雑性の観点からのアプローチも考えられる。大域計算理論という具体的な計算アルゴリムを中心にこれらのアプローチの相互の関係を整理することで、新たな進展が得られると期待される。

具体的な数理モデルへの応用としては、北大電子研の小松崎教授らと共同で、化学反応論における反応障壁のダイナミクスの解析に本研究の手法を応用する試みが初まっており、まずはこの方面の応用を追求したい。それ以外にも、グループリーダーとして参加する坂上CREST においては、流体力学への本研究の応用も進める。ここでは、セルオートマトンや離散モース理論など、さきがけ研究では扱わなかったより広い枠組みへの応用も進める。

また、さきがけ研究の期間では十分に達成できなかった、プログラムへの使いやすいインターフェースの開発や、ドキュメントの整備も今後の課題として取り組んでいきたい。

4. 自己評価

理論的な側面においては、さきがけ研究開始時の方向とは少し異なるものの、一定の成果を得られたといえる。さきがけ当初は研究の中心に据えていた構造安定性理論が一般の数理モデルへの応用においては使い勝手が悪いことが次第に判明し、新たな方向性を模索することとなったが、その結果コンレイ・モースグラフ理論などの、新しい安定性概念を見出すことが出来、応用の可能性を広げることができた。応用を指向した研究から力学系理論自体へのフィードバックも得られたのも成果だといえる。また、メモリ圧縮の研究過程において遭遇した複雑さとエントロピーの関係の問題や、モノドロミー研究が代数多様体や群論の問題と繋がるといった、隣接分野とのエキサイティングな関係が生まれた事も予想以上の成果であった。諸分野の連携というよりは、力学系内部の問題意識になってしまうが、複素力学系の長年の課題であるハバード予想についての進展が得られたことも大きい。

いっぽう、具体的な諸分野の数理モデルへの応用や、またより広い応用を促進するためのインターフェース開発などは達成度が当初の予定よりも低い。原因としては、具体例の解析においてより強力なツールを開発するために、安定性の概念に立ち戻って理論を再構築し直すといった基礎的な作業に集中的に取り組んだため、応用が立ち後れたといえる。ただし、諸分野の研究者と応用の可能性を議論する中で、今後の発展に必要な問題点はだいぶ洗い出せたので、この意味で応用に向けた進展は得られた。

5. 研究総括の見解

微分方程式や写像などの力学系で表現される数理モデルを解析するための、メモリ圧縮技術に即した計算理論の新たなアルゴリズムを開発し、大幅な計算の効率化をはかることが出来た。また、このアルゴリズムにより高次元複素力学系のモノドロミー計算が可能となり、さらに大域計算のメモリ圧縮を研究する過程において、メモリ消費量などの大域的計算の困難さを測る量と、その力学系の複雑さとの間に非自明な関係があることも発見され、この分野に大きく貢献した。

6. 主要な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

	1. Zin Arai, Kazunori Hayashi and Yasuaki Hiraoka, “Mayer-Vietoris Sequences and Coverage Problems in Sensor Networks”, to appear in Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics.
	2. Zin Arai, William Kalies, Hiroshi Kokubu, Konstantin Mischaikow, Hiroe Oka and Pawel Pilarczak, “A Database Schema for the Global Dynamics of Multi-parameter Systems”, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 8 (2009), 757-789.
	3. Zin Arai, Hiroshi Kokubu and Pawel Pilarczak, “Recent Development in Rigorous Computational Methids in Dynamical Systems”, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26 (2009), 393-417.
	4. On Loops in the Hyperbolic Locus of the Complex Henon Map and Their Monodromies, preprint.

（2）特許出願
研究期間累積件数：0件

（3）その他（主要な学会発表、受賞、著作物等）

	解説論文：荒井迅,「カオスと構造安定性：計算機からのアプローチ」, システム制御情報学会学会誌「システム/制御/情報」に掲載予定.
	解説記事：荒井迅,「精度保証付き数値計算の応用：カオス/渾沌を殺さず七竅を鑿つために」, 数学セミナー2008年11月号, 日本評論社.
	招待講演：Zin Arai, “Hyperbolicity, Monodromy and Pruning Fronts”, ICM2010 Satellite Conference on Various Aspects of Dynamical Systems, Vadodara, India, 2010年8月29日.
	招待講演：Zin Arai, “A Database Schema for the Analysis of Global Dynamics”, 7th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics “ICNAAM2009”, Crete, Greece, 2009年9月21日.
	招待講演：Zin Arai, “Rigorous Verification of the Hyperbolicity of Dynamics Systems and its Applicatoins”, Foundations of Computational Mathematics “FoCM08”, City University of Hong Kong, 2008年6月17日.