

最適輸送距離による大域結合写像のクラスター解析

北海道大学 大学院理学院 数学専攻
和田康司 (Koji WADA) *

概要

複雑系の数理モデルとして大域結合写像 (GCM) が提案されている。ロジスティック写像が大域的に結合した GCM は要素間の同期によってクラスターが発生するという特徴を持ち、パラメータに依存してクラスターの安定性が変化する。特に、あるパラメータ領域において同期する要素の組み合わせの変化に伴ってクラスターが変動することが知られている。本発表では、クラスターの変化に着目して軌道の振る舞いを最適輸送距離によって定量的に評価した結果を紹介する。

1 導入

1.1 はじめに

カオスの遍歴とは疑似アトラクター (quasi attractor) と呼ばれる秩序的な状態の間をカオス的に遷移する現象である。疑似アトラクターは一般的なアトラクターと異なり、ほとんどの近傍の軌道を吸引するがある期間において一時的に軌道が離れる場合も含む構造を指す。カオスの遍歴は、非平衡ニューラルネットワーク [1] や光乱流 [2] などにおいても類似の現象が観測されており、複数の要素が相互作用する大自由度力学系において普遍的に現れる現象として考えられ、1990 年代あたりから注目されている。また、1990 年に Kaneko によって提案された大域結合写像と呼ばれる力学系において、部分秩序相と呼ばれるパラメータの範囲においてカオスの遍歴が観測されることが知られている [3]。

大域結合写像に対するカオスの遍歴は、各クラスターが持つ要素数の組によって表現されるクラスタリングパターンの揺らぎとして捉えられ [4]、クラスター数などによりパラメータ領域の特徴づけがされた [5]。しかし、系全体のクラスター数のみならず各クラスター内の要素数 N_i も含めた情報から軌道の特徴を捉える解析はなされていない。そこで本稿では、最適輸送距離を用いることでクラスタリングパターンの変化を定量的に評価する手法を提案する。さらに、カオスの遍歴が現れるパラメータ領域である部分秩序相において軌道が接近する部分空間の情報を用いることで疑似アトラクターを評価した結果を紹介する。

* E-mail:wada.koji.n4@elms.hokudai.ac.jp

1.2 大域結合写像

大域結合写像 (Globally coupled map, GCM) とは N 次元の離散力学系であり, ここではロジスティック写像が大域的に結合した以下のモデルを考える [3]:

$$x_{n+1}(i) = (1 - \varepsilon)f(x_n(i)) + \frac{\varepsilon}{N} \sum_{j=1}^N f(x_n(j)), \quad 0.0 \leq \varepsilon \leq 1.0, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$x_n(i) \in [0, 1], \quad f(x) = \alpha x(1 - x). \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad 0.0 \leq \alpha \leq 4.0,$$

非線形性の強さを表す α は分岐パラメータと呼ばれ, 相互作用の強さを表す ε は結合係数と呼ばれる. 系のダイナミクスはパラメータの組 (α, ε) に依存し, 特に各要素の同期 ($x_n(i) = x_n(j)$, $i \neq j$) によって形成するクラスターがパラメータに依存する. パラメータ領域はクラスタリングの観点から大きく以下の 4 つに分類できる [3]:

完全同期相: 過渡期間が終了後に, すべての要素 $x_n(i)$ が同期し全体が一つのクラスターとして振る舞う.

秩序相: 過渡期間が終了後に, 小数のクラスターを形成し小数自由度の系として振る舞う.

部分秩序相: 時間発展の中でクラスターが変動を続けるカオスの遍歴と呼ばれる現象が発生する.

非同期相: ほとんどの要素が同期せずにばらばらに振る舞う.

そして, 各相の軌道は以下のような振る舞いとなる:

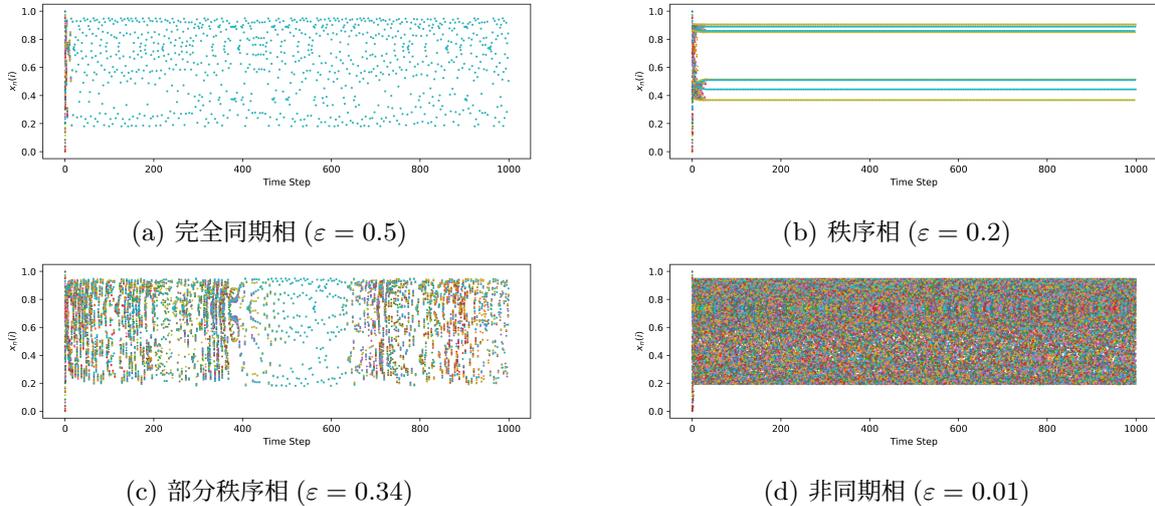


図 1: 各パラメータ (α, ε) に対する軌道の時間発展の例. ただし, $\alpha = 3.8, N = 100$ としており, 初期値 x_0 もすべてのパラメータにおいて固定している. また, $i = 1, 2, \dots, N$ に対する $x_n(i)$ の時系列を重ねて表示している.

1.2.1 平均有効次元によるパラメータの特徴づけ

要素間の同期によって形成されるクラスターは, クラスター数を k として各クラスターが持つ要素数を N_i とおくと (N_1, N_2, \dots, N_k) と表現できる. また, いくつかの要素 $x(i)$ が同期している状態

は点 $\mathbf{x} = (x(1), x(2), \dots, x(N))$ が以下の部分空間 H_σ に属する状態として捉えることができる。

定義 1 ([5]). N 次対称群 S_N の元 σ に対して, 写像 $P_\sigma: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ を

$$P_\sigma(x_1, x_2, \dots, x_N) := (x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \dots, x_{\sigma(N)})$$

と定義する. このとき \mathbb{R}^N の部分空間 H_σ を

$$H_\sigma := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid x_i = x_{\sigma(i)}, i = 1, 2, \dots, N\}$$

と定義する.

さらに, δ を小さな正の実数として精度 δ でのクラスター数を表す指標である有効次元と平均有効次元を以下のように定義する:

定義 2 ([5]). 任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, $\delta > 0$ に対して

$$\text{ED}(\mathbf{x}, \delta) := \inf_{\sigma} \{\dim H_\sigma \mid H_\sigma \cap B_\delta(\mathbf{x}) \neq \emptyset\}$$

を精度 δ の有効次元 (Effective dimension) と呼ぶ. ここで $B_\delta(x)$ は点 x の δ 近傍である. さらに, 任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, $\delta > 0$, $T \in \mathbb{N}$ に対して

$$\text{MED}(\mathbf{x}, \delta, T) := \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \text{ED}(F^i(\mathbf{x}), \delta) \quad (\text{ただし } F^i(\mathbf{x}) := \underbrace{(F \circ F \circ \dots \circ F)}_i(\mathbf{x}))$$

を精度 δ , 時間 T における平均有効次元 (Mean of effective dimension) と呼ぶ.

図 2 は, ランダムにサンプリングした初期値 \mathbf{x}_0 各パラメータ ε に対する平均有効次元である. クラスター数が収束する完全同期相, 秩序相, 非同期相においては整数値となり, クラスタリングパターンが変動する部分秩序相においては非整数値になる傾向がある. 特に, 時間発展の中で各要素が同期せずクラスター数が多い場合には平均有効次元が高く, 多くの要素が同期しておりクラスター数が小さい場合には平均有効次元が低い.

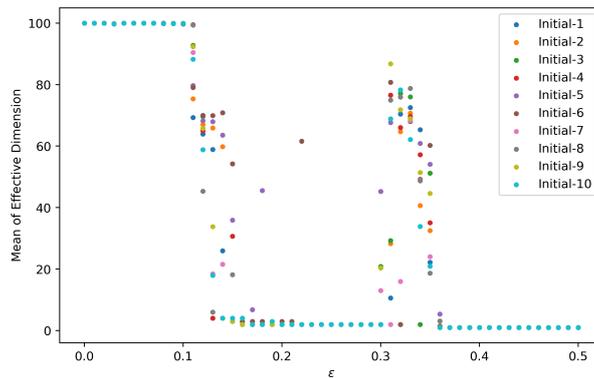


図 2: $\alpha = 3.8$, $N = 100$, $\delta = 10^{-6}$ とした時の各 ε に対する平均有効次元. ε は 0.0 から 0.5 まで 0.01 ごとに設定している. また, ランダムにサンプリングした 10 個の初期値に対する結果を重ねて表示している. 時間平均は, 計算した軌道の長さ 10000 ステップに対して初期状態から 5000 ステップまでを遷移期間と仮定し, その後の 5000 ステップから得ている.

1.2.2 GCM におけるカオスの遍歴

部分秩序相においては有効次元が時間発展の中で収束せず変動し、特に、時間発展の中で有効次元が小さい値で安定する期間と大きい値を取りながら変動する期間が存在する (図 3c). このように軌道が高次元空間を遷移する期間と低次元空間の近傍を滞在する期間が断続的に観測される現象をカオスの遍歴と呼ぶ [6]. さらに、軌道を一時的にでも引き付ける部分集合を疑似アトラクターと呼ぶ.

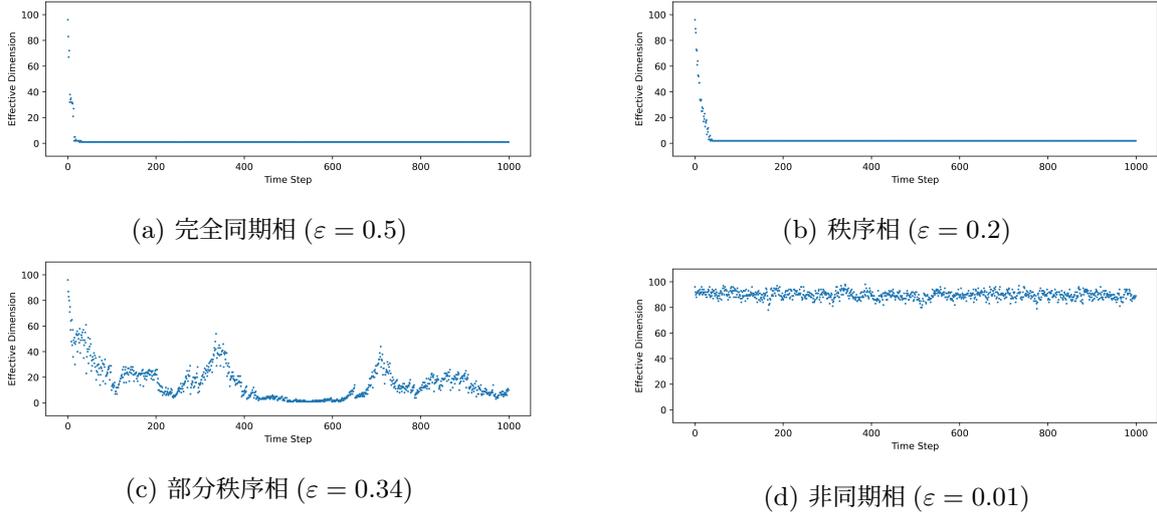


図 3: 各パラメータ (α, ε) に対する有効次元の時間発展の例. ただし, $\alpha = 3.8, N = 100$ としており, 初期値 x_0 もすべてのパラメータにおいて固定している.

1.3 研究の目的

1.2.1 節で見たように, パラメータ領域はクラスター数に着目した有効次元や平均有効次元によって特徴づけることができる. しかし, これらの指標は各クラスターが持つ要素数 N_i の情報を持たないため, 疑似アトラクターによって解釈しようとする部分空間 H_σ の近傍に滞在しているのかを判断することができない. そこで, 本稿ではクラスタリングパターン (N_1, N_2, \dots, N_k) に着目し, その変動を最適輸送距離を用いて定量的に評価する手法を提案する. また, 疑似アトラクターの複雑性を有効次元と最適輸送距離を用いて定量的に評価する手法を提案する.

2 準備

第 2 節では, 最適輸送距離とクラスタリングパターンに対応するクラスター分布の定義について述べる. さらに, 軌道を生成する際に問題となる「見かけの引き込み」と同期判定の具体的な方法である有限精度クラスターについて述べる.

2.1 最適輸送距離

最適輸送距離とは以下の最適化問題の解である：

定義 3. $\mathbf{p} = (p_i)_{i=1}^N$ と $\mathbf{q} = (q_j)_{j=1}^N$ を離散確率分布とする．コスト行列 $C := (C_{ij})$ と輸送行列 $P := (P_{ij})$ ($P_{ij} \geq 0, i, j = 1, 2, \dots, N$) に対して

$$\text{OT}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, C) := \min_{P \in \mathbb{R}^{N \times N}} \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{ij} P_{ij} \mid \sum_{j=1}^N P_{ij} = p_i, \sum_{i=1}^N P_{ij} = q_j \right\}$$

を最適輸送距離と呼ぶ．

2.2 クラスタリングパターンとクラスター分布

クラスタリングパターン $[(N_1, N_2, \dots, N_k)]$ の変化を最適輸送距離を用いて評価するために、離散確率分布に対応させる必要がある．そのために、以下の写像 T を用いて離散分布 (p_1, p_2, \dots, p_N) へ変換する：

定義 4. 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して、 Ω_k をクラスタリングパターン (N_1, N_2, \dots, N_k) 全体の集合とし、 $\Sigma_N := \{(p_1, p_2, \dots, p_N) \in [0, 1]^N \mid \sum_{i=1}^N p_i = 1\}$ とおく．このとき写像 $T : \Omega_k \rightarrow \Sigma_N$ を

$$T(N_1, N_2, \dots, N_k) = (p_1, p_2, \dots, p_N), \quad p_i = \sum_{j=1, \dots, k; N_j=i} \frac{N_j}{N}. \quad i = 1, 2, \dots, N$$

と定義する．ここで、離散分布 (p_1, p_2, \dots, p_N) をクラスター分布と呼ぶ．

例 1. 図 4 は、各クラスタリングパターンに対するクラスター分布の例である．写像 T は、完全同期の場合（図 4a）と非同期の場合（図 4b）との差異が最適輸送距離によって最大となるように定義している．

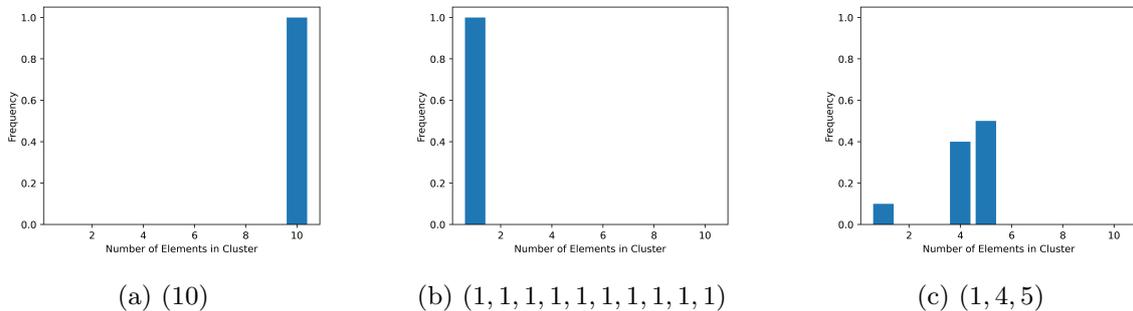


図 4: 各クラスタリングパターンに対するクラスター分布の例，ただし簡単のため $N = 10$ としている．

2.3 見かけの引き込みと有限精度クラスター

計算機で軌道を生成する際には、有限桁までしか扱うことができないという点に注意しなければならない。つまり、一度でもある要素の組が完全に同期してしまうと、本来は微小な差を持っており同期が破れる可能性があるにも関わらずその後も同一の値となってしまう。特に今回の場合は部分秩序相において顕著であり、軌道が本来持つ特徴を捉えられるとは言い難い。そのため [3] に従い、軌道を計算する際に各ステップにおいて微小なノイズを加える。具体的には、 η を十分小さな正の実数とし一様分布 $U(-\eta, \eta)$ からランダムにサンプリングした値を各時刻 n において \mathbf{x}_n 加えることにする。今回は $\eta = 10^{-12}$ として計算している。

時刻 n における同期の判定は \mathbf{x}_n に対して最も近い部分空間 H_σ によって特徴づけられた。しかし、系の次元 N に対して部分空間 H_σ の数は組み合わせ論的に爆発するため計算機での探索は困難である。そこで、クラスタリングパターンの決定には [4] において定義された有限精度クラスターを採用する。具体的には、十分小さい正の実数 δ に対して

$$\bar{x}_n^\delta(i) := [x_n(i)/\delta] \times \delta \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

とおき、 $\bar{x}_n^\delta(i)$ に対して同期・非同期を判定することで得られる精度 δ におけるクラスターを求める。この方法によって求めるクラスターを有限精度クラスターと呼ぶ。以降では有効次元をこの意味で求める有限精度クラスター数とする。今回は $\delta = 10^{-6}$ として計算している。

3 主結果

以下において $N = 100$ としていることに注意する。

3.1 クラスタリングパターン変化の定量的評価

まずは、部分秩序相において観測されるクラスタリングパターンの変化を定量的に評価した結果を紹介する。

3.1.1 提案手法

写像 T によってクラスタリングパターン (N_1, N_2, \dots, N_k) は離散確率分布であるクラスター分布 \mathbf{p} に変換することができる。さらに、時刻 n におけるクラスター分布 $\mathbf{p}^{(n)}$ と時刻 $n+1$ におけるクラスター分布 $\mathbf{p}^{(n+1)}$ に対してコスト行列 C を固定した最適輸送距離 $\text{OT}(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n+1)}, C)$ によって時刻 n におけるクラスタリングパターンと時刻 $n+1$ におけるクラスタリングパターンの差異を評価することができる。具体的には以下の手順でクラスタリングパターン変化の評価を行った：

Step 1: パラメータ (α, ε) を設定する.

Step 2: ある初期値 $\mathbf{x}_0 \in [0, 1]^N$ を与えたときの軌道 \mathbf{x}_n を 10000 ステップ分計算する.

Step 3: 各時刻 n におけるクラスタリングパターン $(N_1^{(n)}, N_2^{(n)}, \dots, N_{k(n)}^{(n)})$ をクラスター分布 $\mathbf{p}^{(n)}$ に変換する.

Step 4: コスト行列 C を $C_{ij} = |i - j|$ として最適輸送距離 $\text{OT}(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n+1)}, C)$ を計算する.

Step 5: 最適輸送距離の時系列に対して前半 (5000 ステップ) を切り捨て, 後半 (5000 ステップ) に対して時間平均 $(1/(T - T_0)) \sum_{n=T_0}^T \text{OT}(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n+1)}, C)$ ($T_0 = 5001, T = 10000$) を計算する.

Step 6: パラメータ (α, ε) を変化させ Step 2 から Step 5 まで繰り返す.

3.1.2 結果

図 5 は各パラメータ ε に対する最適輸送距離の時間平均である. クラスタリングパターンが収束する完全同期相, 秩序相, 非同期相においては最適輸送距離が 0 となり初期値依存性もないことが確認できる. しかし, 部分秩序相においてはクラスタリングパターンが時間発展の中で変化するため最適輸送距離も正の値を取ることが確認できる. 特に, 部分秩序相 I ($0.9 \leq \varepsilon \leq 0.22$) において最適輸送距離は, ほとんどの初期値に対して小さい値となり, 部分秩序相 II ($0.3 \leq \varepsilon \leq 0.36$) においては最適輸送距離も大きい値となる傾向があることが確認できる. つまり, 部分秩序相 I はクラスタリングパターンの変化が小さく, 部分秩序相 II はクラスタリングパターンの変化が大きいと解釈することができると思われる.

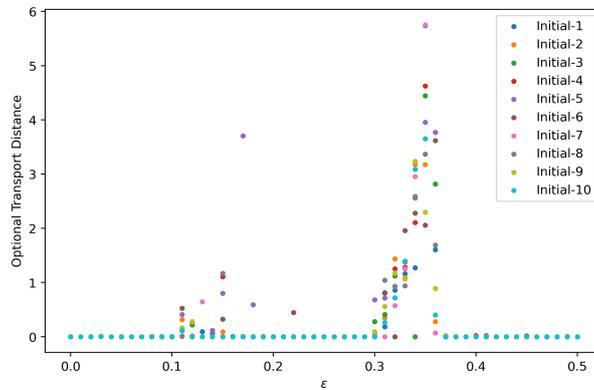


図 5: 最適輸送距離の時間平均. $\alpha = 3.8$ と固定した時の各 ε に対する平均有効次元. ε は 0.0 から 0.5 まで 0.01 ごとに設定している. また, ランダムにサンプリングした 10 個の初期値に対する結果を重ねて表示している.

3.2 疑似アトラクターの複雑性

次に, クラスタリングパターンの変化を定量的に評価した最適輸送距離と部分空間 H_σ を特徴づける有効次元によって疑似アトラクターの複雑性を評価した結果を紹介する.

3.2.1 提案手法

時間発展の中でクラスタリングパターンが変化しない期間においては、軌道がある部分空間 H_σ の近傍に滞在していると捉えることができる。そして、そのような期間が軌道が一時的にある部分集合に引き付けられている期間であると考え、それらの期間の情報をを用いることで疑似アトラクターを定量的に捉えることができると考えられる。具体的には以下の手順で疑似アトラクターの複雑性の評価を行った：

Step 1 : パラメータ (α, ε) を設定する。

Step 2 : ある初期値 $\mathbf{x}_0 \in [0, 1]^N$ を与えたときの軌道 \mathbf{x}_n を 10000 ステップ分計算する。

Step 3 : 各時刻 n におけるクラスタリングパターン $(N_1^{(n)}, N_2^{(n)}, \dots, N_{k^{(n)}}^{(n)})$ をクラスタ分布 $\mathbf{p}^{(n)}$ に変換する。

Step 4 : コスト行列 C を $C_{ij} = |i - j|$ として最適輸送距離 $\text{OT}(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n+1)}, C)$ を計算する。

Step 5 : 最適輸送距離の時系列に対して前半 (5000 ステップ) を切り捨て、後半 (5000 ステップ) の有効次元と最適輸送距離の時系列を抽出する。

Step 6 : $\text{OT}(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{p}^{(n+1)}, C) = 0$ となる時刻 n における有効次元 $k^{(n)}$ に対する離散分布 $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ を構成する。

Step 7 : Step 6 で構成した離散分布 \mathbf{p} からシャノンエントロピー $(1/N) \sum_{k=1}^N p_k \log p_k$ を計算する。

Step 8 : パラメータ (α, ε) を変化させ Step2 から Step7 まで繰り返す。

ここで求めた (シャノン) エントロピーを、疑似アトラクターに対する複雑性を表す指標であるという意味でアトラクターエントロピーと呼ぶことにする。

3.2.2 結果

図 6 は各パラメータ (α, ε) に対するアトラクターエントロピーである。完全同期相、秩序相、非同期相に対応するパラメータにおいては軌道が滞在する部分空間の次元が時間発展の中で変化しないためアトラクターエントロピーが 0 となる。対して、部分秩序相においては (α, ε) に依存してアトラクターエントロピーが変化することが確認できる。特に、アトラクターエントロピーが高いパラメータ領域においては、初期値に依存せず軌道が付近に滞在する部分空間 H_σ が多様であること示している。つまり、軌道が時間発展の中で接近する疑似アトラクターがあらゆる次元の部分空間 H_σ を持つと解釈することができる。

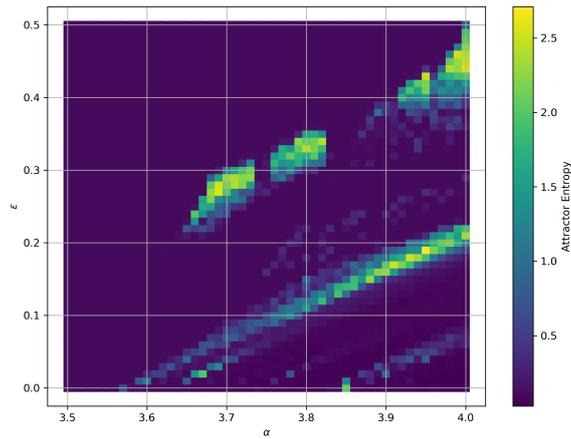


図 6: アトラクターエントロピー. 縦軸 ε は 0.0 から 0.5 まで 0.01 ごとに設定し, 横軸 α は 3.5 から 4.0 まで 0.01 ごとに設定している. また, ランダムにサンプリングした 10 個の初期値に対するエントロピーの平均値を表示している.

4 結論

本稿で対象とした大域結合写像 (GCM) はパラメータ (α, ε) と初期値 \mathbf{x}_0 に依存して軌道の振る舞いが大きく変化する. 特に, クラスタリングの観点において部分秩序相と呼ばれるパラメータ領域においてクラスタリングパターンが時間発展の中で変化することが知られていた. しかし, 各クラスター内の要素数に関する情報を持ったクラスタリングパターンの変化に対する定量的な評価は行われていなかった. そこで本論文では, 最適輸送距離を用いることでクラスタリングパターンの変化量を評価する手法を提案した. さらに, 軌道がカオスの遍歴の中で接近する部分空間の多様性, つまり疑似アトラクターが含む部分空間の多様性をシャノンエントロピーによって評価した. 今回は, カオスが観測される基本的なモデルであるロジスティック写像の大域結合系を対象とした. 特に, 結合係数 ε を各要素に対して一定にし結合の強さを一様にしたモデルについて解析を行った. そこで今後の課題としては, $f(x)$ を circle map などのカオスを引き起こす別の力学系に置き換えたモデルにおいての解析を行い提案手法の一般性を確認する必要がある. また, 結合係数 ε を各要素に対して変化させ非一様としたモデルにおいても提案手法の有効性を確認する必要があると考えられる. さらに, [6] においてカオスの遍歴とミルナーアトラクター [7] の関連が示唆されているため, 今回の提案手法により推定した疑似アトラクターとベイシンに関する解析も進める必要があると考えられる. 加えて, 今回は「見かけの引き込み」の問題を解消させるために軌道を生成する際に十分小さなノイズを加えていたが, 力学系の構造が崩れるほど十分大きなノイズを加えたモデルについても解析を行い, ランダム力学系のダイナミクスと最適輸送距離やアトラクターエントロピーとの関係についても考察を進める必要があると考えられる.

参考文献

- [1] I.Tsuda, “Dynamic link of memory-Chaotic memory map in nonequilibrium neural network”, *Neural Networks*, Vol.5, 313–326, 1992.
- [2] K.Ikeda, I.Otsuka and K.Matsumoto, “Maxwell Bloch turbulence”, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 99, 295–324, 1989.
- [3] K.Kaneko, “Clustering, coding, switching, hierarchical ordering, and control in a network of chaotic elements”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 41, 2, 137-172, 1990.
- [4] 金子邦彦, 津田一郎 『複雑系双書1 複雑系のカオスのシナリオ』(朝倉書店, 1996)
- [5] 小室元政, “大域結合写像におけるカオスの遍歴の発生機構 (力学系の特異現象とその数理)”, *数理解析研究所講究録*, 1118, 96-114, 1999.
- [6] K.Kaneko, “On the strength of attractors in a high-dimensional system: Milnor attractor network, robust global attraction, and noiseinduced selection”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 41, 322–344, 1998.
- [7] J.Milnor, “On the Concept of Attractor”, *Commun.Math.Phys*, 99, 177-195, 1985.