

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年5月31日現在

機関番号：17701

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2011

課題番号：22740258

研究課題名（和文）：カーネル多変量解析に基づく大自由度非線形力学系の縮約表現

研究課題名（英文）：Model Reduction for High-dimensional Nonlinear Chaotic Dynamical Systems Based on Kernel Multivariate Analysis

研究代表者：末谷 大道 (SUETANI HIROMICHI)

鹿児島大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：40507167

研究成果の概要（和文）：

本研究課題では RANSAC アルゴリズムを用いて測地線距離の誤推定を防ぐことによって ISOMAP を改良した多様体学習法を提案した。それを水滴落下の現象論的モデルであるバネ-質点系モデルの数値シミュレーションデータに適用し、従来の ISOMAP では解析が困難であった折り畳まれた紐状の多様体に対して適切な座標系を与え、その座標系を用いて新たにポアンカレ写像を得た。さらに、実際の水滴落下装置を作成し、水滴の落下間隔の実験データからポアンカレ写像の再構成に成功した。

研究成果の概要（英文）：

We improved ISOMAP, which is a representative manifold learning method, by preventing mistakes in estimating geodesics between points in a manifold using RANSAC. We applied the proposed approach to the numerical simulation data generated from a mass-spring model for dripping faucet in order to demonstrate the usefulness. Furthermore, we tried to analyze real data of the dripping faucet experiment and obtained promising results.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2011年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	2,200,000	660,000	2,860,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：非平衡・非線形物理学・時系列解析・カーネル法・多様体学習・カオス・データ同化・水滴落下

1. 研究開始当初の背景

リミットサイクルや少数自由度カオスなど、低次元力学系のダイナミクスは自然界の様々な現象を統一的に説明するための概念を数多く与えて来た。しかし、現実の化学反応や流体運動・神経発火・概日リズム・歩行などを定量的に記述する数理モデルの多くは状態変数の種類や自由度の面で高次元力

学系であり、周期運動の様な秩序解でも対応する状態点列は高次元空間に分布している。このような系を予測し、外部から制御することは、非線形科学を現実の問題に展開していく上でとても重要である。しかし、多くの自由度を持つ系の変数を同時に操作するには膨大な計算量が必要となる。

よって、与えられた高次元力学系に対して

何らかの低次元化を行う必要があり、データベースな方法として伝統的な主成分分析などの線形の変数解析手法が考えられる。しかし、しばしば高次元状態空間上のアトラクタは強い非線形構造を有しており、単純な線形の射影では系を解析するために適切な変数を得ることは容易ではない。

近年、カーネル法と呼ばれる非線形の変数解析手法が統計科学や機械学習の分野で発展し注目を集めている。カーネル法では、データを高次元空間に非線形関数 Φ で変換して主成分分析などの変数解析手法を適用するが、この際、高次元空間上での内積計算を直接行わず「カーネル関数」という元のデータ空間上の関数を通じて行うことによって、柔軟で計算効率の良い非線形データ解析を可能にしている。現在まで、カーネル法は主にバイオ情報学やパターン認識の分野で広く使われているが、より広く物理学や非線形科学への応用可能性を秘めている。

2. 研究の目的

ローレンツによるカオスの発見やグレボギらのカオス制御の研究に代表されるように、実験やシミュレーションで得られた変数の時系列データから適切なポアンカレ写像を構成することはとても重要である。しかし、例えばダイナミクスの本質的自由度が低くても適切な写像が得られないことがしばしば見られる。

そこで、本研究課題では、高次元力学系の時系列データから系の特徴を捉えた少数の変数を抽出するために、カーネル法に代表される非線形の変数解析手法を用いることを考える。特に、カオス力学系の時系列データから高次元の遅れ時間埋め込みによって得られる多様体に非線形の座標系を多様体学習（データそのものからカーネルを構成して主成分分析などを行う方法）によって与え、その変数に基づいて自由度を縮約したポアンカレ写像を推定する問題に取り組む。そのポアンカレ写像が元の力学系のどのような性質を保存するか検討すると共に予測や制御といった工学的応用も目指した研究を行う。

3. 研究の方法

テーマ1：ポアンカレ写像の推定

Shawらが水滴落下現象の本質を捉えるために導入した質点-バネモデルを用いる。このモデルの数値シミュレーションデータに対してISOMAPなどのカーネル主成分分析を適用し、ポアンカレ写像を推定する。そして、

得られた写像からの記号力学の再構成や不安定周期軌道の抽出を通じて手法の有効性を示す。また、使用するカーネル関数の依存性を通じて最適なカーネル関数の選択基準について検討する。更に、ダイナミクスが本質的に高次元になった場合の手法の問題点について考察する。

水滴実験では、基本的には水滴の落下間隔という部分的な情報しか得られないため、時系列データから遅れ時間埋め込みなどの方法で背後にあるアトラクタの幾何学構造を回復させる必要がある。そこで、質点-バネモデルの数値シミュレーションにおいても落下間隔系列の時系列データの埋め込みとカーネル法を組み合わせることで解析を行い、どの程度ポアンカレ写像が正しく構成されるのか調べる。また、実際の実験系から得られるデータには周りの空気や水温などが必ず影響を及ぼす。モデルにノイズを与えその影響を調べる。

テーマ2：水滴落下系を用いた実験的検証

また、勝山らの研究を参考にして、水滴落下系の実験装置を構築する。応募者の所属機関では、現在『インテンシブ理数教育特別プログラム』を実施しており、希望する学部学生に1年次から専門的な物理実験や数値シミュレーションを課外教育で行っている。水滴落下は我々にとっても身近な系で学部学生でも比較的簡単に実験を行うことが出来る。実験系の構築・データ採取に関して大学院生らと共に上記プログラムの参加学生からの補助を得ることによって応募者は理論研究に集中し研究効率の向上を図る。

そして、流量の調節など実験状況を様々に変えながら時系列データを採取して水滴落下実験を本格的に進める。そして、得られた時系列データに対し提案手法を用いて解析を行い、水滴落下という非線形現象の新たな側面を探る。特に、実際の実験で必ず存在するノイズが解析結果にどのような影響を及ぼすのか検討し、系のダイナミクスが高次元になったときの手法の限界とそれを克服するための新たなアプローチを模索する。

以上の結果を国際会議で発表する。そして、全体の成果を論文に纏める。

4. 研究成果

・2010年度

本年度では、まず水滴落下の実験系を構築した。水滴を落とすために蛇口の代わりにビュレットを用い、外部で大きな水槽を設置する

ことで水面の高さをコントロールできるようにした。そして、レーザーセンサーを用いて水滴の落下間隔を計測すると共に高速度ビデオカメラを用いて水滴の時空間パターンも詳細に観察した。ビュレットの水面の高さを調整することによって周期運動からカオスへ遷移する様子を見ることができたが分岐現象を確認することは出来なかった。これはビュレットの口径が小さすぎて水の粘性が大きすぎたことが原因であると思われる。

また、産総研の赤穂氏と共に RANSAC アルゴリズムを用いて測地線距離の誤推定を防ぐことによって ISOMAP を改良した多様体学習法を提案した。それを水滴落下の現象論的モデルであるバネ-質点系モデルの数値シミュレーションデータに適用した。従来の ISOMAP では解析が困難であった折り畳まれた紐状の多様体に対して適切な座標系を与え、その座標系を用いて新たにポアンカレ写像を得ることができた。そして、リアプノフ指数や位相エントロピーなどの力学系の不変量がこの新たな写像を用いて正しく計算されることを確認した。その結果を赤穂氏や鹿児島大学の秦氏らと共著で電子情報通信学会の非線形問題研究会（於東京）で発表した。

また、高速度ビデオカメラを用いた観察により、流量が大きくなると共に水滴が水平方向に揺れる現象が観察された。そこで、秦氏と水滴の水平方向への振動も考慮したバネ-質点系モデルの修正についても検討を行った。

・ 2011年度

本年度では、非線形性の強い紐状多様体に対しても適用できる様に ISOMAP を修正した学習手法 (RANSAC-ISOMAP) を提案し、水滴カオス系のシミュレーションデータに応用した結果を ICANN 2011 (ヘルシンキ) で発表した。

実際の非線形動力学の実験では、しばしば系の状態変数を直接には観測できない。例えば、水滴落下現象では落下直前の水滴の質量が適切な変数であるが、実験では計測できるのは水滴の落下時間間隔 τ のみであり、 τ の時系列からは系の動力学法則を適切に記述することができない。そこで、状態変数の代理となる変数を多様体学習による座標系から構成することを試みた。そして、水滴系の数理モデルによるシミュレーションデータ、さらに実際の水滴落下実験系の時系列データ双方に提案手法を適用し水滴の質量の代わりとなる適切な変数を適切に抽出することに成功した。さらに、Lyapunov 指数や位相エントロピ

一、時間相関関数など力学系を特徴付ける統計量をこの代理変数に関する力学系から正しく推定することに成功した。この結果を秦浩起氏、Ulrich Parlitz 氏らとの共著論文としてまとめ物理の国際専門誌に投稿した。

さらに、これらの結果を踏まえ水滴落下現象のデータ同化 (シミュレーションとデータ観測を融合したリアルタイム予測) に応用した。その結果をまとめたものを赤穂昭太郎氏、Parlitz 氏らとの共著論文としてまとめている段階である。

また、実験によって、明瞭な周期倍化分岐やホップ分岐及びそれらからカオスが発生する様子などを実際に観測することができた。これらについても秦氏らと結果を整理している段階である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 1 件)

① Hiromichi Suetani and Shotaro Akaho, A RANSAC-Based ISOMAP for Filiform Manifolds in Nonlinear Dynamical Systems -An Application to Chaos in a Dripping Faucet-, Lecture Notes in Computer Science, 査読有、6792 巻、2011、277-284
DOI:10.1007/978-3-642-21738-8_36

[学会発表] (計 7 件)

① Hiromichi Suetani, A Manifold Learning Approach for Assimilating Chaotic Dynamical Systems, Dynamics days 2012 (Sheraton Inner Harbor Hotel / Baltimore Maryland America)、2012.1.9

② 末谷大道, 黒岩宏紀, 秦浩起, 水滴落下に対するバネ-質点モデルの修正と多様体学習による解析、2011 年物理学会秋季大会 (富山大学)、2011.9.22

③ Hiromichi Suetani, Aiko Ideta, Shotaro Akaho, D. Engster, and U. Parlitz, Manifold Learning Approach for Reconstructing Internal States from Partially Observed Data: An Application to Assimilating Series of Events Generated from Nonlinear Dynamical Systems, 5th International Scientific Conference on Physics and Control, Physcon 2011 (University of León/Spain)、2011.9.8

④末谷大道, 黒岩宏紀, 秦浩起、カーネル法による水滴カオスの解析、日本物理学会 第66回年次大会 (新潟大学)、2011.3.28

6. 研究組織

(1) 研究代表者

末谷 大道 (SUETANI HIROMICHI)
鹿児島大学・大学院理工学研究科 (理学系) ・
准教授
研究者番号: 40507167