

時系列データからの位相方程式推定

北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科

徳田功

要旨：多数のリミットサイクル振動子が弱結合した系に対して，計測時系列データから，位相方程式を推定する手法について紹介する．これによって，自然周波数や結合関数など，位相方程式を特徴つける重要な量を逆推定することが可能となる．従来までの推定法が，単一の振動子，あるいは二つの振動子が結合した場合のみを扱ってきたのに対して，三つ以上の多数の振動子が結合した系にも適用可能である点が本手法の特徴である．このような非侵襲的な方法は，視床下部視交叉上核 (SCN) のニューロンなど，生物系の複雑ネットワークへの応用が期待される．

I. はじめに

同期現象は結合振動子における普遍的な現象であり，理工学の様々の分野にみられる．理論および実験の双方向からの包括的な研究が進み，リミットサイクル振動子およびカオス振動子の結合系に対する理解が深まり，ますますの応用が期待されている [1]．このような同期研究の中でも最も重要な理論的発展は，リミットサイクル振動子の弱結合型系における位相縮約理論であろう [2]．各要素の力学変数を位相のみで記述するアイデアの単純さと不偏性により，これまでに様々の系の解析に応用され，標準的な方法になっている．応用例としては，電気化学反応系 [3] や脳神経系素子 [4]，脳の発火活動 [5] や，サーカディアンリズム [6, 7] などがある．

このように理論研究が進み，実験系に応用されているのに対して，実験系から計測されたデータを位相縮約理論に基づいて解析する問題に関しては，方法論がまだ確立していないのが現状である．特に，自然周波数や結合関数などの位相方程式を特徴つける重要な量を，計測データから逆推定することは，幅広い応用のためにも必要不可欠である．これまでの研究で，結合関数を推定するための方法は幾つか提案されてきている [2, 4, 8–10]．代表的な方法は摂動法で [2, 8, 9]，位相応答曲線 (Phase response curve) を平均化積分することによって結合関数を得る．ただし，位相応答曲線を得るためには，孤立した単一の非線形振動子に対して摂動を加え，応答を計測する必要がある．他の手法も，二振動子系に関するものであり [4, 10]，多数の振動子がネットワーク構造を持つ場合には，そこから単一，あるいは二つの振動子を分断する必要がある．この意味で侵襲的である．生物系のような多数の素子からなるネットワークに幅広く応用するためには，より強力で，なおかつ，ネットワーク構造を破

壊しないような非侵襲的な方法が望ましい。

本稿では、実験データに基づいて弱結合型のリズム振動子の位相方程式を推定する方法について筆者が開発した方法を紹介する [11]。この方法は実用面で以下の利点がある。(1) 多数のネットワークが結合した系に対して適用が可能である。(2) 非侵襲的でネットワークから少数の素子を抽出する必要がある。(3) 単純なコードで表現でき、収束性に優れている。

II. 問題設定と方法論

以下のような N 個のリミットサイクル振動子が弱結合した系を考える。

$$\dot{x}_i = F_i(x_i) + \frac{C}{N} \sum_{j \neq i}^N G(x_i, x_j). \quad (1)$$

ここで、 x_i は i 番目の素子の状態変数、 F_i はそのダイナミクスを表す ($i = 1, 2, \dots, N$)、 C は結合強度を表す定数、 G_i は結合関数とする。各素子 F_i は単独 ($C = 0$) では安定なリミットサイクルを生成し、それぞれは類似した自然周波数 ω_i を持つと仮定する。このとき、位相縮約理論 [2] によると、結合の十分に弱い領域においてネットワークのダイナミクスは以下のような位相のみで記述される方程式に近似することができる。

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \frac{C}{N} \sum_{j=1}^N H(\theta_j - \theta_i). \quad (2)$$

このような結合系に対する計測条件として、各振動子の時系列が同時計測できるものとする $\{x_i(n\Delta t) : n = 1, \dots, M\}_{i=1}^N$ (Δt : サンプリング間隔)。このような計測データから (2) 式の位相方程式を推定することが最終目標である。次のような条件を仮定する。(i) オリジナルの力学方程式 (1) は未知とする。(ii) データ計測の際には、結合定数 C を非同期領域に設定する [12]。(iii) 結合のタイプは大域的 (全結合で一様な強度) であると仮定する。

我々の推定方法は以下のようにまとめることができる。

1. 計測データ $x_i(t)$ から位相 $\theta_i(t)$ を抽出する。位相に関しては様々の定義の仕方があるが [1]、ここでは最も単純な方法を採用する。位相 θ は時系列 $x(t)$ が局所最大値をとる毎に 2π すすみ、局大値の間では、時間に比例して単調増加する。

2. 位相データ $\{\theta_i(t)\}$ を以下の位相方程式にあてはめる.

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \frac{C}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{H}(\theta_j - \theta_i), \quad (3)$$

$$\tilde{H}(\Delta\theta) = \sum_{j=1}^D a_j \sin j \Delta\theta + b_j (\cos j \Delta\theta - 1). \quad (4)$$

マルチプルシューティング法 [13] により, 未知の係数 $p = \{\omega_i, a_j, b_j\}$ を推定する. 結合関数 H は一般に非線形で 2π に関して周期的であるので, D 次のフーリエ級数で近似展開する. 但し, 差分型の結合を仮定し, 零位相に対する相互作用は零になるものとする ($\tilde{H}(0) = 0$).

マルチプルシューティング法では, 初期値 $\theta(0)$ に対する位相方程式 (3), (4) の時間発展を $\theta(t) = \phi^t(\theta(0), p)$ と書く. このとき, 各時間ステップ $t = i\Delta t$ において位相方程式は以下の境界条件を満たさなければならない.

$$\theta((n+1)\Delta t) = \phi^{\Delta t}(\theta(n\Delta t), p). \quad (5)$$

このような非線形方程式を満足するように, 未知の係数 p を一般化ニュートン法で解く. 実際のデータ解析では, 時間発展式 ϕ^t はルンゲクッタなどの数値積分によって解く. また, ニュートン法では一次勾配 $\partial\phi/\partial(p)$ の計算が必要になるが, これは位相方程式 (3), (4) に対する変分方程式を数値積分することによって求めることができる.

3. オーバーフィッティングを回避するために, クロスバリデーション法に基づいて最適なフーリエ級数の次数 D を決定する [14]. 時系列データを前半と後半の二つに分けて, 前半のデータを用いて係数 p の推定を行なう. 推定された係数 p を用いて, 後半のデータに対する近似誤差を計算し, その誤差が最小になるような次数 D を最適とする.

III. 応用例

リミットサイクル振動子の弱結合系への本手法の適用例を紹介する. 以下のような, レスラー振動子が拡散結合した系を考える. $\dot{x}_i = -\alpha_i y_i - z_i$, $\dot{y}_i = \alpha_i x_i + 0.15 y_i + \frac{C}{N} \sum_{j=1}^N (y_j - y_i)$, $\dot{z}_i = 0.2 + z_i(x_i - 2)$ ($i = 1, \dots, N$). 結合が無い場合 ($C = 0$), 各振動子はリミットサイクル軌道を生成する. 自然周波数の非一様性を考慮するため, (x, y) 平面における回転速度を決定する係数 α_i を不均一に設定する. 時系列データとして $\{y_i(t)\}_{i=1}^N$ を計測する.

振動子の数が $N = 16$ の場合を考える．非一様係数は $\alpha_i = 1 + 0.0002 \cdot (i - 8.5)$ ($i = 1, 2, \dots, 16$) と設定する．結合強度が $C = 0.002$ のとき，結合系は非同期状態にあるので，時系列 $\{y_i(t)\}_{i=1}^{16}$ を計測する．サンプリング間隔は $\Delta t = 0.08$ と設定して位相 $\{\theta_i(t)\}$ を抽出し，マルチプルシューティング法を適用する際には $\Delta t = 1000 \cdot 0.08$ とダウンサンプルし，200 個のデータ点に対して係数推定を行なった．シューティング法の初期値はすべて零とした ($\omega_i = 0, a_j = b_j = 0$)．シューティング法の収束性は良好で，ほぼ一回の反復で推定値を得た．

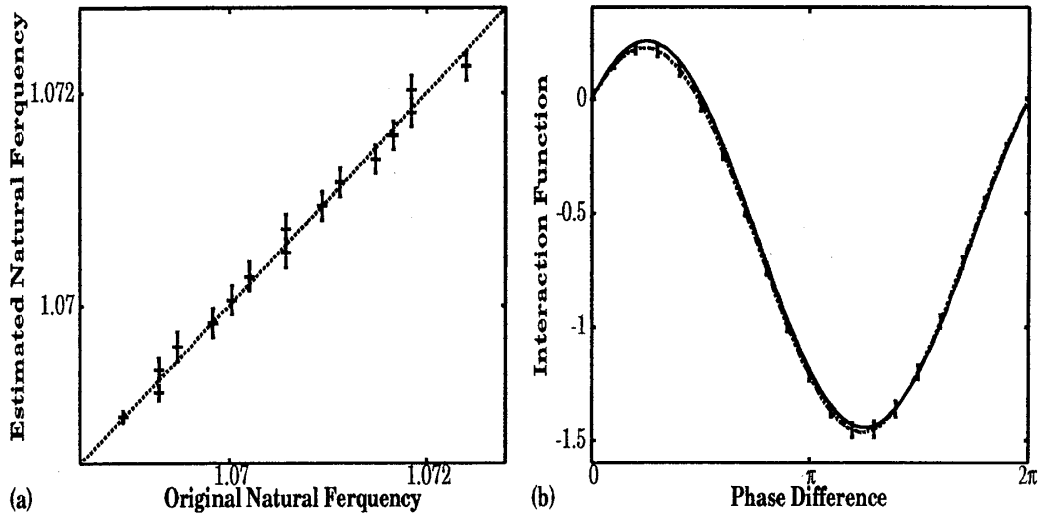


FIG. 1: (a) 本手法により推定された自然周波数 $\{\omega_i\}_{i=1}^{16}$ (縦軸) と孤立状態で計算したレズラー振動子の自然周波数 (横軸). (b) 本手法により推定された結合関数 $\tilde{H}(\Delta\theta)$ (点線) と摂動法によって推定された曲線 (実線) の比較.

図 1 に自然周波数および結合関数の推定結果を示す．フーリエ級数の次数はクロスバリデーションにより $D = 2$ と決定した．自然周波数の推定値は，各レズラー振動子を孤立状態 ($C = 0$) でシミュレーションした結果から得られた自然周波数とよく一致しており，対角線上に分布している．さらに，結合関数 $\tilde{H}(\Delta\theta)$ は摂動法を単一のレズラー振動子に適用して得られた推定値とよく一致している [2, 8]．

推定結果の結合係数値 C への依存性について指摘しておこう．図 2 (a) に時系列を生成する際に用いた結合係数値 C とその推定誤差を示す．推定誤差 e は摂動法により得られた結合関数 $\tilde{H}_p(\Delta\theta)$ と本推定結果 $\tilde{H}_s(\Delta\theta)$ の隔たりで， $e = 100 \int_0^{2\pi} |\tilde{H}_s(\Delta\theta) - \tilde{H}_p(\Delta\theta)| d\Delta\theta / \int_0^{2\pi} |\tilde{H}_p(\Delta\theta)| d\Delta\theta$ [%] と定義する．結合係数が非常に小さい場合は結合の影響が小さく，時系列からの逆推定は困難となる．このため，結合係数の小さい領域で推定誤差は比較的大き

くなっている。他方、結合係数が同期のオンセット領域に近ずくと、推定誤差は増大する。これは次の理由による。ネットワークが同期している状況では、振動子同士の位相差はほぼ一定値をとる $\Delta\theta = \text{const.}$ 。このような時系列データは、結合関数に関する情報をまったく含まないことになる。カオス振動子の結合系に対するモデリングについても同様の結果が報告されている [12]。したがって、結合関数を精確に推定するのにもっとも有効なのは、この二つの中間領域ということができる。

データが同期してしまう問題を回避する方法の1つとしては、外部から摂動を加えて同期を破壊し、ふたたび同期が起こるまでの緩和時間のデータを利用することが考えられる。

もう1つ重要な性質はネットワークのサイズへの依存性である。図 2 (b) に示すように、推定誤差はサイズ N が大きくなるにともなって、ほぼ線形に増大していることが分る。これは、式 (3) の結合項 $\sum_{j=1}^N H(\theta_j - \theta_i)$ において、多数の振動子からの結合が可算されると、各振動子からの影響に分解し、それぞれの結合関数に分けて推定することが困難になるためと思われる。ただし、ここでの問題はネットワークの全結合を仮定した場合についてであり、部分結合の系においてはそれほど困難な問題とはならない。近年の複雑ネットワーク研究、特にスモールワールド性 [15] では、局所結合の数が小さい場合が、生物系を含めて重要であることが分っており、本手法もそのような局所結合系については、サイズの大きな場合でも適用可能であることが期待できる。

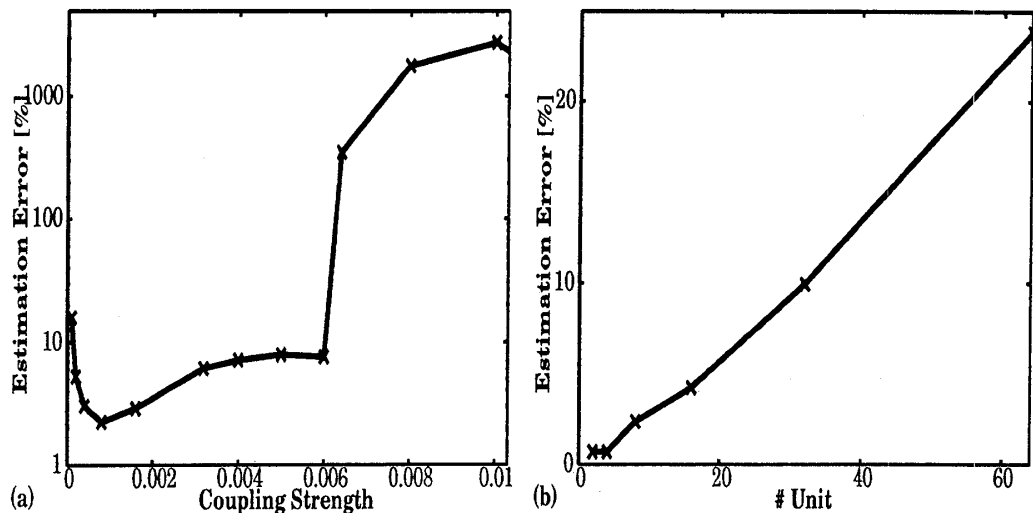


FIG. 2: (a) 時系列データを生成する際に用いた結合強度 C の推定誤差 e へおよぼす影響. (b) 推定誤差 e のネットワークサイズ N への依存性.

IV. おわりに

時系列データから位相方程式を推定する方法について紹介した。この方法は、電気化学システムにおける結合振動子 [3] にも適用され、実験データへの有効性も確認されている。詳しくは文献 [11] を参照されたい。各振動子の状態変化が同時計測できるというこの問題設定は、生物系を始めとする様々の実ネットワークにあてはまる。例えば、体内時計の存在する視床下部視交叉上核 (SCN) のニューロンに関しても同時計測技術が報告されている [6]。このような生物ネットワーク対して、今後応用してゆく予定である。

本手法の枠組みは、結合行列 $C_{i,j}$ が非一様の場合にも拡張可能であり、ネットワークの結合構造の推定にも応用可能である。また、結合要素がリミットサイクル振動子ではない、カオス振動子の場合にみられる位相同期に対しても、位相方程式によるモデル化が可能であると考えられる。このような拡張に関しても今後報告してゆく予定である。

-
- [1] A. Pikovsky, M. Rosenblum, and J. Kurths, *Synchronization - A Universal Concept in Non-linear Sciences*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
 - [2] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves and Turbulence* (Springer, Berlin, 1984).
 - [3] I. Z. Kiss, Y. M. Zhai, and J. L. Hudson, *Science* **296**, 1676 (2002).
 - [4] R. F. Galan, G. B. Ermentrout, and N. N. Urban, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 158101 (2005).
 - [5] P. Tass *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3291 (1998).
 - [6] S. Yamaguchi *et al.*, *Science* **302**, 1408 (2003).
 - [7] H. Kori and A. S. Mikhailov, *Phys. Rev. Lett* **93**, 254101 (2004).
 - [8] H. Sakaguchi, S. Shinomoto and Y. Kuramoto, *Prog. Theor. Phys.* **77** 1005 (1987).
 - [9] I. Z. Kiss, Y. M. Zhai, and J. L. Hudson, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 248301 (2005).
 - [10] J. Miyazaki and S. Kinoshita, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 194101 (2006).
 - [11] I. T. Tokuda, S. Jain, I. Z. Kiss, and J. L. Hudson, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 064101 (2007).
 - [12] I. Tokuda, J. Kurths, and E. Rosa Jr., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 014101 (2001).
 - [13] E. Baake, M. Baake, H. G. Bock, and K. M. Briggs, *Phys. Rev. A* **45**, 5524 (1992).
 - [14] M. Stone, *J. Royal Stat. Soc. B* **36**, 111 (1974).
 - [15] D. Watts and S. Strogatz, *Nature* **393**, 440 (1998).