

# トポロジー・計算・ダイナミクス

國府寛司（京都大学・理学研究科）

## 1 はじめに

物理学，工学，生物学，地球科学，化学などの理工学のあらゆる分野で興味深い非線型現象はいたるところに現れ，その現象を記述すると考えられる数理モデルから現象のメカニズムを理解し，その振舞いを予測したり制御の方法を考えるプロセスは，現在ではそれらの分野における基本的な研究のステップの1つとなっている．そこでは，非線型現象の数理モデルの解析が不可欠となるが，分野や現象の多様さのために，数理モデルとしての非線型系も様々なタイプの微分方程式や差分方程式，それらのハイブリッド系，離散モデルなど多岐にわたる．このように多種多様な非線型数理モデルの示す現象を紙と鉛筆だけを用いる数学的な解析だけで理解することはほとんどの場合困難であり，数学解析，線型系による近似，摂動論，漸近展開，定性的方法，などの多くの数学理論を援用しても十分な理解が得られないことも多い．

このようなときに従来は非線型系の数値シミュレーションが現象の数理的理解に大きな役割を果たしてきた．複雑な非線型方程式の解やその構造を本質を見失いことなく数値計算することは数学理論としても全く自明ではなく，誤差の評価や数値計算の安定性，さらには個々の非線型系の持つ特別な構造を保存した数値計算法などの多くの理論と方法が開発されている．しかしながら数値シミュレーションは基本的に近似計算であり，あくまで有限的な量と計算時間に基づく数値計算によって得られた結論が数学的に正しいかどうかについては別に吟味が必要である．近年，区間演算を用いた精度保証付き計算による非線型方程式の研究が進展しており，数学的に厳密な誤差評価を伴う数値計算を行うことで，特に様々な非線型微分方程式の解の数学的に厳密な存在証明などの成果が多く得られている（[33] およびその文献を参照）．また区間演算ソフトウェアの普及によって現在ではこのような精度保証付き計算はPCでも手軽に実行できる．

非線型系のダイナミクスの問題に対する計算機支援研究は1970年代から行われている．Sinai-Vul [37] による Lorenz 方程式の周期解の存在検証（[44] も参照）や，2次関数の反復合成における周期倍分岐の集積についての Feigenbaum の主張の数学的証明を与えた Lanford の結果 [26] などはその先駆的なものである．近くは Tucker による Lorenz 方程式のカオス的アトラクタの存在の計算機支援証明 [40] が著しい．しかしこれらの結果はそれぞれ対象とする力学系の個々の性質や扱う問題に強く依存したものであり，深い結果ではあるがそれが直ちに他の多くの非線型系に対して適用できるわけではない．

これに対して最近になって，より広汎な非線型系のダイナミクスの大域的構造やパラメータの変動に伴う分岐についての情報を得られるような，汎用性のある計算的方法が発展している．その特徴は，精度保証付き数値計算にホモロジー計算などの位相幾何的方法やグラフ・アルゴリズムなどを組み合わせることで，数学的厳密さを保持しつつ（メモリや計算時間などの制約はあるものの）広いクラスの非線型系に適用可能な一般性のあるアルゴリズムが構築されることであるといえよう．

本講演の目的は、このような精度保証付き計算の理論と技術の進展を背景に、この数年に急速に進展しているトポロジーと計算的方法の融合による非線型系のダイナミクスの理解のための新しい汎用的方法について紹介することである。企画特別講演の趣旨を考慮して技術的な細部についてはできるだけ引用文献に委ね、考え方の解説に重点を置いて易しく述べるように努める。取りあげるべき話題はいろいろあるが、筆者の能力および対象と方法の観点から主として次の4つの結果について述べる：

- (1) 力学系のカオス的振舞いの検証に対する位相的方法
- (2) 複雑な時空間パターンに対するトポロジー的アプローチ
- (3) 力学系の双曲性・構造安定性に対する計算的方法
- (4) 力学系のデータベースへの試み

これらの結果とそこで用いられているアイデアについて解説する過程で、それらを買く基本的な考え方とその可能性を探っていきたい。

## 2 力学系のカオス的振舞いの検証に対する位相的方法

非線型系に見られる複雑で予測困難な振舞いはカオス [35] と呼ばれ、1970年代から急速に研究が発展した。そのメカニズムには様々なものがあるが、具体的に与えられた非線型系に対してカオス的振舞いの存在を示すための典型的な方法は、(i) 何らかの homoclinic (heteroclinic) 構造を見出すか、あるいは (ii) 記号力学系と関係づけるかの2通りに大別できるであろう。(i) は与えられた系の中に homoclinic 軌道や heteroclinic cycle と呼ばれる特別な解軌道からなる不変集合の存在を示し、それが適当な条件をみたすときに数学的な議論によりその不変集合の近傍にカオス的不変集合が存在することを結論するものであり、(ii) はその系に含まれる何らかの明確に区別可能な振舞いが少なくとも有限個の記号  $\{1, 2, \dots, k\}$  の無限列全体  $\{1, 2, \dots, k\}^{\mathbb{N}}$  と同程度に多様であることを示すことでカオス的振舞いの存在を証明するものであると言える。

この2つの方法は数学的一般論としては相互に密接に関係しており、ある種の homoclinic 軌道の存在から記号力学系と同値な不変集合が含まれていることが示せるし、また逆に記号力学系の存在がわかればその系は多種多様の homoclinic (heteroclinic) 構造を含んでいることが数学的に従う。しかし具体的な非線型系を調べる際には、この2つの構造の検証の仕方は異なるアイデアによることが多い。すなわち、homoclinic (heteroclinic) 構造を検証する方法は、数値シミュレーションなどにより目指す解軌道を近似的に見出し、その近くに真の解軌道の存在を精度保証付き計算と不動点定理かそれに類する議論を用いて示すという意味で局所的なアプローチである。これに対して記号力学系の存在を示すには、対象とする非線型系の相空間のある程度大きな部分を有限個の互いに交わらない部分集合に分割し、それと記号力学系とを関係づけるという意味で大域的なアプローチである。以下、本節では主に記号力学系の存在を示すためにどのようにして位相的方法、精度保証付き数値計算、および有向グラフに基づく組合せ的方法が用いられるかの概略を説明し、最後に homoclinic (heteroclinic) 構造の検証に関する結果についても簡単に触れる。

記号力学系の存在を示すための基本的なアイデアは次のようなものである。簡単のため写像  $f : X \rightarrow X$  の反復合成として与えられた力学系の相空間  $X$  内の対象とする部分

$N$  が有限個の互いに交わらないコンパクト集合  $N_1, \dots, N_k$  の合併からなっているとす。このとき  $f$  による  $N$  内の最大不変集合を

$$\text{Inv}_f(N) = \{x \in N = \bigcup_{i=1}^k N_i \mid \forall n \in \mathbb{N} \ f^n(x) \in N\}$$

と定めると、任意の  $x \in \text{Inv}_f(N)$  と任意の  $n \in \mathbb{N}$  に対し  $f^n(x)$  は  $N_1, \dots, N_k$  のいずれか1つに含まれるので、それを  $f^n(x) \in N_{\rho_n(x)}$  とすると、 $x \in \text{Inv}_f(N)$  に対して  $\rho(x) = \{\rho_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}}$  が、すなわち  $\rho: \text{Inv}_f(N) \rightarrow \Sigma_k = \{1, \dots, k\}^{\mathbb{N}}$  が定義される。  $\Sigma_k$  は  $k$  個の記号からなる記号列全体のなす空間であり、それに有限集合の直積位相を入れた空間は自然な距離を持つ。この  $\Sigma_k$  とその上のずらし写像  $\sigma: \Sigma_k \rightarrow \Sigma_k; \{\rho_n\} \mapsto \{\rho_{n+1}\}$  の組を  $k$  個の記号を持つ記号力学系 [35] という。明らかに  $f: \text{Inv}_f(N) \rightarrow \text{Inv}_f(N)$  と  $\sigma: \Sigma_k \rightarrow \Sigma_k$  は  $\rho$  により可換、すなわち  $\rho \circ f = \sigma \circ \rho$  が成り立つが、 $N$  や  $f$  が適当な良い条件を満たすときには  $\rho$  は連続で  $\Sigma_{f,N} = \rho(\text{Inv}_f(N))$  は  $k \times k$  整数行列を用いて簡単に記述されることがわかるので、それによって  $N$  上での  $f$  の振舞いが対応する記号列を介して理解されることになる。これが対象とする非線形系  $f$  の  $N$  上での記号力学系による表現である。特に  $\Sigma_{f,N}$  が有限集合でなければそれは Cantor 集合であり、そのときには  $f$  はカオス的と呼ぶにふさわしい多様な振舞いをするとすえ、さらに位相的エントロピー [35] と呼ばれる力学系の複雑さの指標となる位相不変量の下からの評価も得られる。

このような記号力学系による表現は力学系理論の最も基本的なアイデアの一つであり、その原型は Poincaré, Birkhoff まで遡るが、本稿で扱う計算的方法になじむような十分に弱い形での記号力学系表現は Szymczak[38] による。これにより、記号力学系表現が可能となる  $N$  や  $f$  の条件を Lefschetz 数を含む位相幾何的条件のみで記述できるので、次節で述べるホモロジー計算ソフトウェアなどを用いて計算機によって検証することが可能になった。実際にこの方法は、計算機を援用して Lorenz 方程式 ([29, 31])、Hénon 写像 ([11], [12]\* ) などに応用されている。その際にまず問題となるのはどのように  $N$  を構成

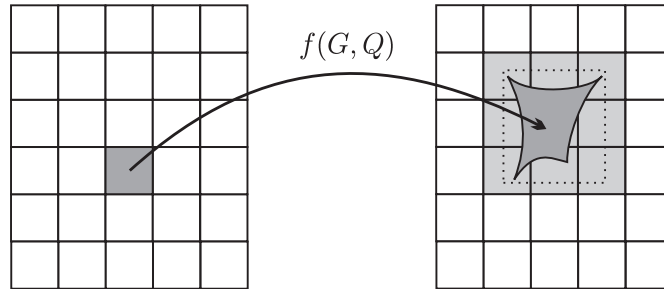


図 1: グリッド分割の1つの小直方体  $G$  の像の外からの近似。

する  $N_1, \dots, N_k$  を必要な条件を満たすように選ぶかということであるが、それは力学系の相空間のグリッド分割と組合せ多価写像による外近似によって次のようにして比較的容易に得られる。写像  $f$  の相空間  $X$  が  $m$  次元 Euclid 空間内の有界領域であるとして、 $X$

\*ここでは後述の [1] の結果に基づいて多くのパラメータに対する記号力学系表現と位相的エントロピーの評価をも与えている

の十分直径の小さい有限個の  $m$  次元矩形による一様なグリッド分割を考える．この分割の矩形の全体  $\mathcal{G} = \mathcal{G}(X)$  の 1 つの元  $G$  をとり，その像  $f(G)$  の精度保証付き計算による誤差評価も込めた外からの近似を求め，さらにそれと交わる  $\mathcal{G}$  の元全体の集合  $\mathcal{F}(G) \subset \mathcal{G}$  を考えると， $f$  から導かれる組合せ多価写像<sup>†</sup>  $\mathcal{F} : \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$  は，任意の  $x \in G \in \mathcal{G}$  に対し  $f(x) \in |\mathcal{F}(G)|$  をみたすという意味で  $f$  の外近似になっている．ただし  $A \subset \mathcal{G}$  に対しその幾何学的実現を  $|A| = \cup_{G \in A} G$  と表した．この組合せ多価写像  $\mathcal{F}$  は計算機で容易に求められ，さらに  $H \in \mathcal{F}(G)$  のとき  $G$  から  $H$  に向う辺を考えることで， $\mathcal{F}$  を  $\mathcal{G}$  を頂点の集合とする有向グラフとして表すことができる．そこでこの有向グラフの中の適当な長さ以下の閉ループの頂点全体の集合から出発して，それをあるアルゴリズムに従って更新して行くことで  $\mathcal{N} \subset \mathcal{G}$  を構成し，その幾何学的実現  $|\mathcal{N}|$  が  $X$  内の孤立化近傍となる，すなわち  $|\mathcal{N}| \subset \text{int}X$  かつ  $S = \text{Inv}_f(|\mathcal{N}|) \subset \text{int}|\mathcal{N}|$  が成り立つかどうかを判定できる．またそのような  $\mathcal{N}$  が得られた場合に， $N = |\mathcal{N}|$  の連結成分から  $N_1, \dots, N_k$  を選んで，上に述べたような記号力学系表現を得られるかどうかを判定できる．このようにして，与えられた力学系の相空間のグリッド分割とそれによって導かれる組合せ多価写像の有向グラフ表現を用いれば，元の力学系（の大きな部分の）記号力学系による表現が得られ，そのカオス性や周期点の存在，位相的エントロピーの下からの評価などのダイナミクスの情報も求められることになる．さらにこれを精度保証付き数値計算により計算機を用いて数学的厳密性を損なうことなく実行することが可能である．具体的には，相空間のグリッド分割の構成のための細分割アルゴリズムに加えて有向グラフの取り扱いのために Dijkstra アルゴリズムなどの様々なグラフ・アルゴリズムを実装した GAIO([16]) と呼ばれるソフトウェアが，精度保証付き数値計算には Matlab の拡張ツールボックスである区間演算パッケージ Intlab などが，さらに記号力学系表現可能性の判定の際に必要な Lefschetz 数の計算にはホモロジー計算ソフトウェア CHomP([8]) などがよく利用される．個々のステップで用いられる実際のアルゴリズムについては [12] を参照されたい．また，[28] にはこのような相空間のグリッド分割に基づいたダイナミクスへの計算的アプローチの基本的考え方が解説されている．

一方で，非線型系の持つ homoclinic (heteroclinic) 構造のような特別な不変集合を見出すためにも位相的方法と精度保証付き数値計算が有効である．特に h-set と被覆関係 (covering relation) という概念を用いて Zgliczyński とその共同研究者が多くの結果を得ている．例えば [42], [43], [25] やそこで引用されている文献を参照されたい．また，ここでは CAPD ライブラリ [7] と呼ばれる力学系の解析のために開発された統合的ソフトウェアパッケージが利用されている．

### 3 複雑な時空間パターンに対するトポロジック的アプローチ

非線型系に見られる興味深い現象の一つに，複雑で多様な空間的パターンとその時間変化が挙げられよう．図 2 は空間 2 次元の FitzHugh-南雲方程式

$$\begin{aligned} u_t &= \Delta u + \varepsilon^{-1} u(1-u) \left( u - \frac{v+\gamma}{\alpha} \right), & \alpha = 0.75, \gamma = 0.06 \\ v_t &= u^3 - v \end{aligned}$$

<sup>†</sup>  $\mathcal{F}$  は  $\mathcal{G}$  の各元にその部分集合を対応させる多価写像でなので通常の写像と区別して  $\rightarrow$  の記号を用いる．

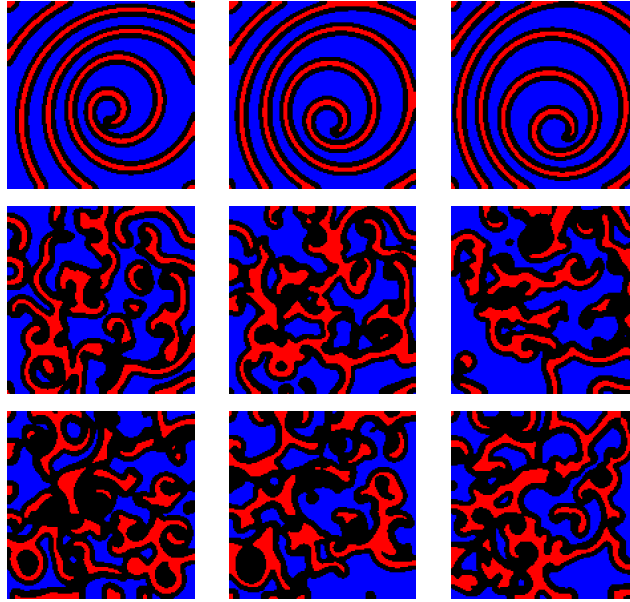


図 2: FitzHugh-南雲方程式に見られる空間パターンとその変化: 明るい灰色の領域は解の値が  $u \geq 0.9$  を満たす部分で, 暗い灰色領域は  $u \leq 0.1$  の部分, 黒い部分は  $0.1 < u < 0.9$  を示す. 上段は  $1/\varepsilon = 14.0$ , 中段は  $1/\varepsilon = 12.0$ , 下段は  $1/\varepsilon = 11.5$  に対応し, それぞれについて同一の解の 3 つの異なる時刻での空間パターンを表示した. ([18])

の解が示すある空間的パターンの時間による変化の様子を 3 通りの  $\varepsilon$  の値について表示したものである. 空間構造を持つ多くの非線型現象にはこのように比較的単純なものから非常に複雑なものまで多種多様の時空間パターンが見られ, 現象の解析において, その変化をどのように数理的に明確な形で捉えるかが大きな興味と課題である. Gameiro 他 [18] は空間パターンの複雑さを捉えるための新しい方法として位相幾何学の基本的概念の 1 つであるホモロジーを用いた定量化を提案した.

非常に大雑把に言えば, ホモロジーは与えられた図形 (位相空間) の幾何的情報を加群やベクトル空間などの形で代数的に取り出す操作である. 我々は特に空間パターンの複雑さを測るためにパターンが持つ図形的情報の中でも, その連結成分の数, 穴 (トンネル) の数, 空洞の数などを見るので, その目的のためには特にホモロジーから導かれる Betti 数を見るのが良い.  $k$  次元 Betti 数  $\beta_k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) は  $k$  次元ホモロジー群の階数 (ベクトル空間なら次元) として定義され,  $\beta_0, \beta_1, \beta_2$  がその図形の連結成分の数, 穴 (トンネル) の数, 空洞の数に対応している. そこで FitzHugh-南雲方程式の解が時間区間  $[\tau_1, \tau_2]$  にわたって定める 3 次元時空間パターンのうちの, 図 2 の明るい灰色領域に相当する部分, すなわち  $\mathbb{R}^3$  内の部分集合  $M(\tau_1, \tau_2) := \bigcup_{t \in [\tau_1, \tau_2]} \{x \in \Omega \mid u(x, t) \geq 0.9\}$  を対象の図形として,  $M(10n, 10n + 1000)$  の Betti 数  $\beta_i(n, \varepsilon)$  ( $i = 0, 1$ ) を  $n = 0, 1, \dots, 10000$  まで求めた平均を  $\varepsilon$  の値を変えてプロットすると図 3 が得られる. これによりパラメータ  $\varepsilon$  が大きくなるほど連結成分や穴の数が増加するという意味でパターンがより複雑になっていくことが定量的な情報として見て取れるので, 例えば空間パターンの Betti 数計算などからパラメータ値を推定することが可能になるなどの応用も考えられる. Gameiro-Pilarczyk[19] ではさらに Betti 数の時系列からそのエントロピーを計算してパターンの複雑性との関連

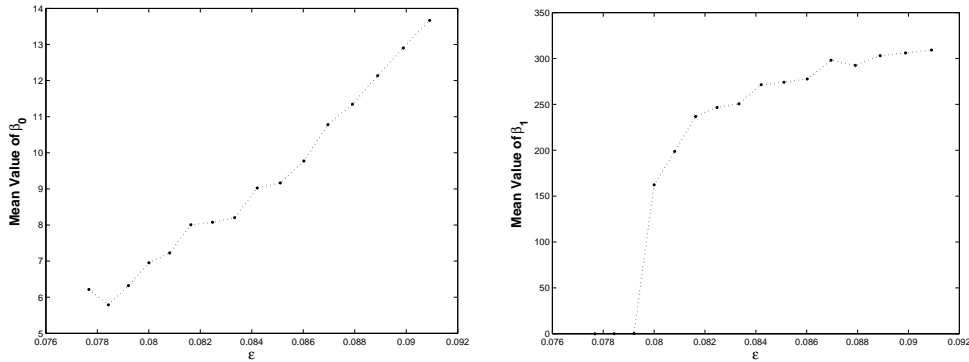


図 3: パラメータ  $\varepsilon \in [0.076, 0.092]$  に対する Betti 数  $\beta_0, \beta_1$  の時系列の平均値の変化. ([18])

も考察している .

以上の研究において , Betti 数の計算はホモロジー計算ソフト CHomP[8] を用いて行われた . これは [23] に述べられている方体集合のホモロジー論 (cubical homology) を基にして , 非線型系のダイナミクスの諸問題に対するホモロジー的方法の応用のためのツールとして M.Mrozek と K.Mischaikow の研究グループを中心にして開発されたソフトウェア・パッケージである . 2007 年には応用数学会サマーセミナー「計算ホモロジーとその応用」が開催され , そこでこのソフトの使い方の解説もされた<sup>‡</sup>ので , 興味を持たれた方は CHomP の website と共にその講義録も参照されたい .

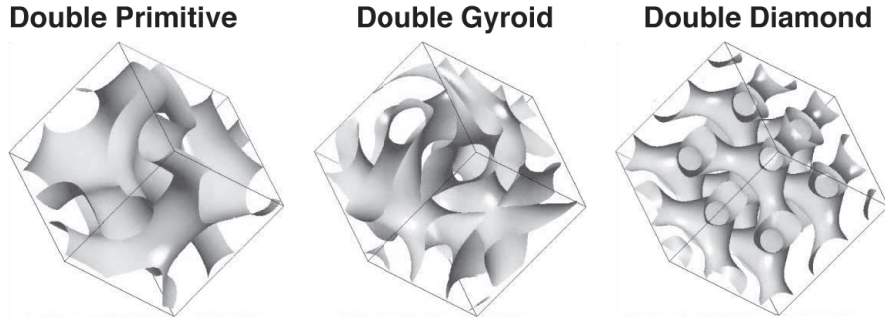
対象とする空間的構造がより明確な幾何的特徴を持つ場合には , ホモロジー計算によって更に詳しいパターンの特徴付けや変化の解析ができる . 寺本-西浦 [39] は , ソフトマターに見られる界面の空間 3 次元ネットワーク構造に注目し , それに Betti 数を用いることでパターンの時間的変化を調べた . より具体的には , Cahn-Hilliard 方程式

$$u_t = \Delta\{-\varepsilon^2 \Delta u - u + u^3\} - \sigma(u - \bar{u}), \quad \bar{u} = |\Omega|^{-1} \int_{\Omega} u(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

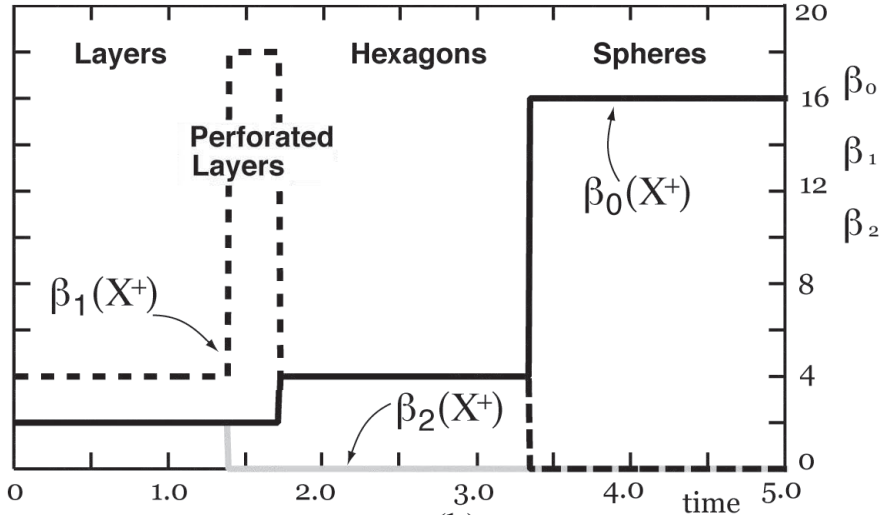
の解から定まる 2 つの 3 次元領域  $X^{\pm} = \{\mathbf{r} \in \Omega \mid \pm(u(\mathbf{r}) - \bar{u}) > 0\}$  は初期値やパラメータなどに依存して , 図 3(a) に見られるような形状を含む様々なタイプの界面によって区切られた領域を定めるが , それらは Betti 数  $\beta_i(X^{\pm})$  ( $i = 0, 1, 2$ ) を調べることで良く区別できるので , 1 つの解から領域  $X^{\pm}$  を求め , その Betti 数  $\beta_i(X^{\pm})$  を計算することで , 解の空間パターンの時間的変化を追うことができ , それによって例えば図 3(b) に示すようにその空間構造が急激に変化する時刻とその変化の様子を特定することも可能になる .

位相的方法と計算的方法を融合した新しいアプローチで偏微分方程式の定常解の存在を示したのは [45] に始まる . その後 , その方法を用いて [21] では Swift-Hohenberg 方程式の定常解の枝を (分岐点近傍を除いて) 数学的に厳密な形で追跡することに成功した . さらに [13] では定常解の間の結合軌道に対する Conley 指数理論を援用することで , 大域アトラクタの (半共役の意味での) 位相的な記述をも与えた . 一方で , [11, 14] では第 2 節の方法と [45] の方法を組み合わせることで Kott-Schaeffer モデルと呼ばれる無限次元写像のカオス的ダイナミクスの存在を記号力学系の意味で検証した . このような無限次元の非線型系に対する位相的方法と計算的方法の融合による研究は , 現在もさらに発展している .

<sup>‡</sup>この講演者の 1 人の Pilarczyk 氏は今年 10 月にも京都を再訪し CHomP の入門講義も行う予定である .



(a)



(b)

図 4: (a) ソフトマターにおける様々な共連続界面構造．これらは Betti 数によって良く区別できる．(b) ミクロ相分離モデルの数値シミュレーションによるモルフォロジー間転移での Betti 数の変化．（図は寺本敬氏のご好意による．）

#### 4 力学系の双曲性・安定性に対する計算的方法

力学系が構造安定 [35] であるとは、その力学系をわずかに摂動してもその定性的構造が変化しないことをいう．力学系の構造安定性を特徴付ける問題は 1960 年代に始まる Smale 学派の中心的課題であり、1980 年代に Mañé[27] と林修平 [20] によって ( $C^1$  の場合に) 完全に解決されるまで力学系理論の発展の大きな原動力であり続けた．特にそれと密接に関係する力学系の重要な性質として双曲性 [35]、すなわち相空間の各点での接空間が力学系によって引き伸ばされる方向と縮められる方向に一樣に分解されるという条件が早い段階から認識され、それを基礎として現在の力学系理論の主要部分が形作られた．構造安定性の特徴付け問題が一応の解決をみた今日でも、双曲性は力学系の性質を調べる上で欠くことのできない基本的な概念であり、具体的な非線型系のダイナミクスについても、相空間のどの部分がどのようなパラメータで双曲性を持つかを調べることは、ダイナミクスやその分岐を理解するための非常に重要な情報を与える．

力学系の双曲性の判定は不動点や周期軌道などについては比較的容易であるが、特に力



力学系がカオス的な振舞いを持つときにはその不変集合は複雑な構造を持ち、そのような大きな不変集合の双曲性の判定は多くの場合非常に困難である．一般に力学系の回帰的 (recurrent) な振舞いを捉える最大の不変部分集合は鎖回帰集合 [35] と呼ばれ、それが双曲的であることは力学系が構造安定であり、かつそのダイナミクスが少なくとも原理的には記号力学系によって完全に記述されることを意味する．荒井は [1] において、Hénon 写像と呼ばれる 2 次元の多項式自己同型写像の 2 パラメータ族

$$H_{a,b} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 : (x, y) \mapsto (a - x^2 + by, x), \quad a, b \in \mathbb{R}$$

に対して、独自のアイデアにより位相的方法と第 2 節で述べたような計算的方法を組み合わせ、Hénon 写像の鎖回帰集合が双曲的であるようなパラメータ集合を求めるアルゴリズムを与え、それを実際に実行することより図 4 に示したようなパラメータ集合を得た．

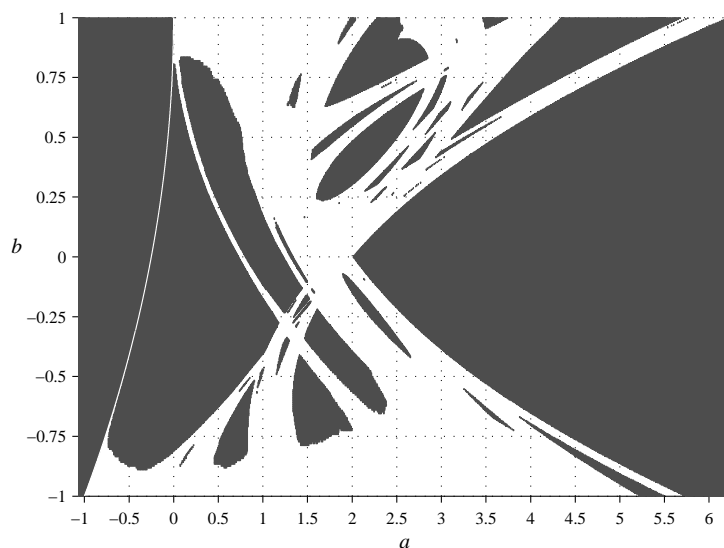


図 5: Hénon 写像の鎖回帰的集合が双曲的になるパラメータ集合． ([1])

荒井の方法の中心的アイデアは、接空間の分解を伴う双曲性の概念を、鎖回帰集合上ではそれと同値である擬双曲性 (quasi-hyperbolicity, [9, 36]) に置き換えることで、Hénon 写像の相空間の接バンドル上の純粋に位相的条件として双曲性を捉え直したことにある．すなわち Hénon 写像が接バンドル上に誘導する写像について零切断を含む孤立化近傍の存在を判定することで Hénon 写像の鎖回帰集合の双曲性が示されることになり、従って第 2 節で紹介したような精度保証付き数値計算と組合せ多価写像のグラフ表現に対するグラフ・アルゴリズムなどの計算的方法が使える．これにより双曲性という本来的に微分の情報を含んだ概念が、接バンドル上に誘導される写像に対する位相的条件を計算的方法によって確認できるのである．微分条件を接バンドル上の位相的条件として計算的に扱うというアイデアは [4] でも用いられている．

荒井 [2] はさらにこの双曲性検証の方法を複素化した Hénon 写像に適用することで、複素力学系としての性質を調べ、複素 Hénon 写像の複素パラメータ空間の構造についての



Hubbard の予想の計算機支援による肯定的解決とそれに関連する著しい結果も得ているが、本稿の目的からはやや外れるのでここではこれ以上は触れない。なお、力学系の組合せ多価写像によるグラフ表現を用いた力学系の双曲性に関する別のタイプの計算的方法として、2 次関数族に関する結果 ([15]) もある。

## 5 力学系のデータベースの試み

これまで述べて来たように、力学系の相空間をグリッド分割し精度保証付き数値計算に基づき数学的な厳密さを失わずに求められる組合せ多価写像の有限的情報からダイナミクスについて何らかの結論を得るという方法は、広汎な非線型系に応用できる可能性を持っている。そこでこのような方法をできるだけ一般的な形で整備し、調べたい非線型力学系のパラメータ族の方程式を入力すれば、どのようなパラメータ値でどのようなダイナミクスが見られるかの大まかな情報をデータとして格納し、必要に応じて様々な問合せに答えてくれる「データベース」のようなものを構築できるのではないかと考えられる。そのような発想での最初の試みが [3] である。ここでは、相空間だけでなくパラメータ空間もグリッド分割し、各パラメータ・グリッドのそれぞれの微小矩形  $Q$  ごとに、 $Q$  内のパラメータの変動も込めて組合せ多価写像を構成することで、パラメータの変動が  $Q$  内に留まっている限り数学的な厳密性を保証された力学系の組合せ的表現が有向グラフの形で得られる。

パラメータ領域  $Q$  上の力学系のダイナミクスの情報として、この有向グラフから Morse 分解と Conley 指数 [10, 30] をグラフ・アルゴリズムとホモロジー計算によって求めることができる。力学系の Morse 分解とは、その力学系の相空間を Morse 成分と呼ばれる有限個の孤立不変部分集合とそれらの間の勾配的結合関係に分解することであり、Conley 指数は孤立不変集合に対して定義されるダイナミクスの情報を含むホモロジー的位相不変量である。これらは第 2 で述べたグリッド分割による力学系の組合せ多価写像と第 3 節のホモロジー計算ソフトを用いて計算機によって計算できる。Morse 分解のアルゴリズムは [24] に基づいて [5] によって与えられ、その結果得られる Morse 分解は Morse グラフと呼ぶ有向グラフの形で表現できる。一方、Conley 指数を計算するアルゴリズムは指数対という位相空間対を求めれば、後は  $\text{CHomP}$  などを用いてその相対ホモロジーと誘導準同型写像を求めれば良いが、指数対を求めるためには [38], [23], [32], [34] らによっていくつかのアルゴリズムが与えられている。Morse グラフの各 Morse 成分にその Conley 指数の情報を付加したものを Conley-Morse グラフと呼び、[3] ではこれを個々の力学系のダイナミクスの情報として格納する。例えば図 5 には Ugarcovici-Weiss[41] によって数値的に詳しく分岐が調べられた Leslie モデルと呼ばれる非線型写像の 2 パラメータ族

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} (\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2) e^{-0.1(x_1+x_2)} \\ p x_1 \end{pmatrix}, \quad p = 0.7$$

をテストケースとして取りあげ、そのパラメータ  $(\theta_1, \theta_2)$  のある微小矩形領域に対して求めた Conley-Morse グラフの例を示した。ここで各 Morse 成分は  $p\ell$  ( $\ell = 0, 1, 2, 3$ ) と番号付けられ、それに付随する  $k \rightarrow \{*\}$  という記号は Conley 指数の情報として指数対の  $k$  次相対ホモロジー群上に誘導されるホモロジー準同型写像の表現行列の非零固有値を示し

ている<sup>§</sup>。これから例えばこの系にアトラクタが少なくとも2つ存在することがわかる。

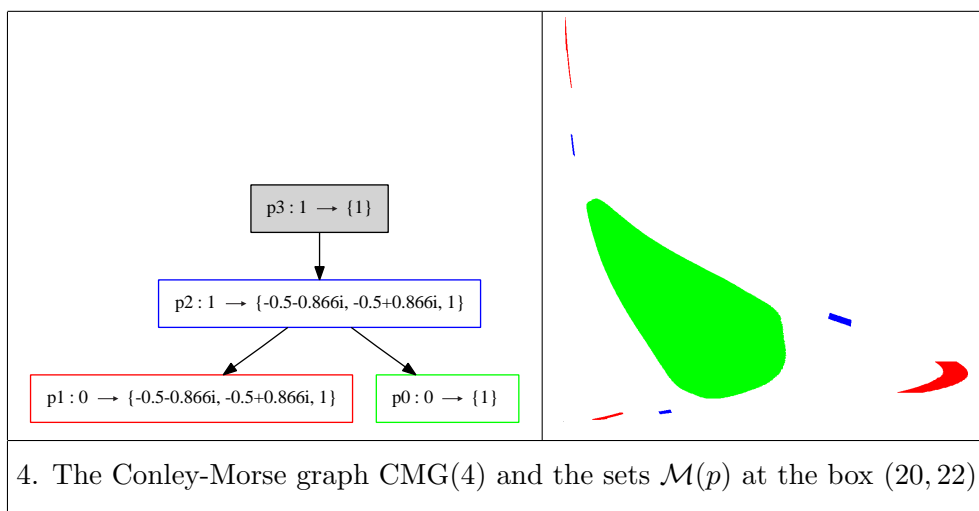


図 6: Conley-Morse グラフの例 (左図) と各 Morse 成分の相空間での形状 (右図)。( [3] )

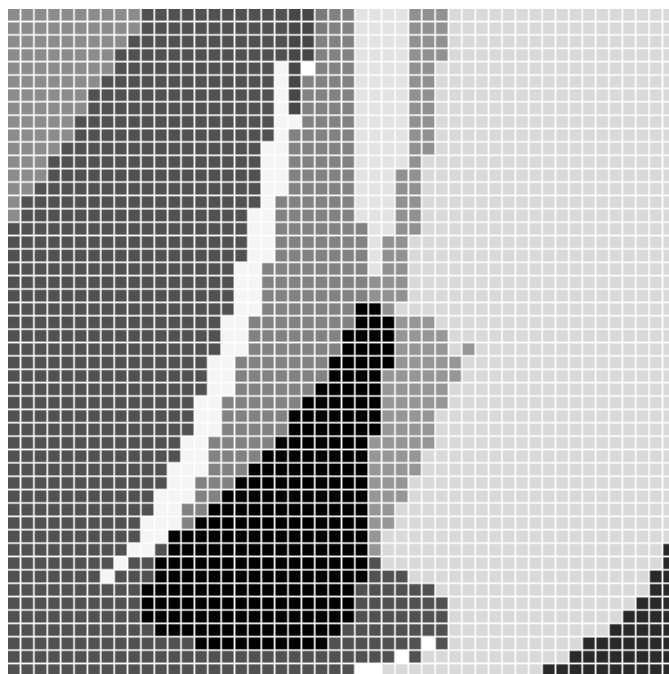


図 7: Conley-Morse グラフの同値性によって色分けしたパラメータ空間の「分岐図」。( [3] )

このような Conley-Morse グラフはパラメータ空間のグリッド分割の各矩形領域ごとに求められるので、上の Leslie モデルのパラメータ領域  $\{(\theta_1, \theta_2) \in [8, 37] \times [3, 50]\}$  を  $50 \times 50$

<sup>§</sup>Conley 指数自体の定義 [30] はこれよりも複雑であるが、少なくとも非零固有値が異なれば対応する Conley 指数は異なることがわかるので、ここではより簡便な不変量として非零固有値を採用している。

等分したグリッド分割のそれぞれのパラメータ矩形領域について計算を行い、それらを隣接するパラメータ矩形ごとにある基準に従って比較して、Conley-Morse グラフとして同値と判定されるパラメータ矩形に同一の色を割り当ててパラメータ空間を色分けしたものが図 7 である。どのように Conley-Morse グラフの同値性を判定するかをここで述べる余裕はないが、この図と各パラメータ矩形領域に対応する Conley-Morse グラフを比較することにより、色の異なるパラメータ領域に移るときに、ダイナミクスにどのような変化が生じるかが Conley-Morse グラフの変化として捉えられ、それから実際の力学系の分岐についての情報も得られる。興味を持たれた方はこの結果をインタラクティブに参照できるようにまとめた website <http://chomp.rutgers.edu/database/> も見られたい。

以上の方法は、力学系の相空間の指定した有界領域内のすべての初期条件と指定された有界なパラメータ領域のすべてのパラメータを扱えるので、力学系のダイナミクスとその変化の全体を捉えられるという点で従来の数値計算と異なる特徴を持つ。この利点を生かして、与えられた非線型系についてパラメータ空間のグリッド分割と対応する Conley-Morse グラフのデータを計算機に格納しておき、そこから必要に応じてその系の持つダイナミクスや分岐の様々な情報を取り出せるようにしようというのが「力学系のデータベース」のアイデアである。例えば、図 5 の場合のように Conley-Morse グラフから 2 つのアトラクタの共存がわかるようなパラメータ領域を取り出すことは、このようなデータベースで簡単に行える。個々のアトラクタについて、その吸引領域がどれくらい大きいかを相空間のグリッド分割の矩形の数として示すことも可能である。また、Conley 指数の情報から Lefschetz の不動点定理に基づいて、指定した周期の周期点が存在するようなパラメータ領域を選び出すことなど、周期的ダイナミクスの情報も扱える。将来的には、より多様なダイナミクスの情報を取り出す理論的枠組みを整備するとともに、Conley-Morse グラフの構造が異なるパラメータ領域間でのダイナミクスの変化の情報をこのような組合せの情報から取り出せるような数学的理論の構築が重要な課題であろう。

## 6 おわりに

これまで述べて来たように、相空間のグリッド分割による力学系の組合せ多価写像や有向グラフによる外近似、グラフ・アルゴリズムを用いた孤立化近傍の構成、ホモロジー計算によるダイナミクスのや時空間パターンの特徴付け、などの新しいアイデアを用いた非線型系のダイナミクスへの計算機支援による研究方法がこの数年の間に急速に蓄積されてきている。これらの方法は標準的な非線型方程式の解析に比べて、より有限的、離散的、組合せ的な性格を持っており、個々の方程式の個別の初期値・パラメータ値を扱う従来の数値計算に比べて精密さで及ばない部分はあるが、それゆえにダイナミクスの全貌を捉えられ、また広汎な対象への応用の可能性にもつながると言えよう。また、それによって得られるダイナミクスの情報がただちに既存の理論に直結しないときもあるが、逆にこのような有限的、離散的な情報から、従来の力学系理論のものとは違った非線型系のダイナミクスに関する新しい数学的観点も生まれてくるのではないかと期待される。

謝辞 本稿の図は北海道大学の荒井迅氏、千歳科学技術大学の寺本敬氏、京都大学の Marcio Gameiro 氏、Minho 大学 (ポルトガル) の Paweł Pilarczyk 氏が作成したものである。図の利用を快諾し提供して下さった以上の方々に感謝する。

## 参考文献

- [1] Z. Arai, On hyperbolic plateaus of the Hénon map, *Experim Math.* **16** (2007), 181–188.
- [2] Z. Arai, On loops in the hyperbolic locus of the complex Hénon map and their monodromies, preprint, revised 2008 July.
- [3] Z. Arai, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, H. Oka, and P. Pilarczyk, Databases for the global dynamics of multiparameter systems, preprint, 2008 August.
- [4] Z. Arai and K. Mischaikow, Rigorous computations of homoclinic tangencies, *SIAM J. Appl. Dynam. Sys.* **5** (2006), 280–292.
- [5] H. Ban and W. Kalies, A computational approach to Conley’s decomposition theorem, *J. Comp. Nonlinear Dynam.* **1** (2006), 312–319.
- [6] E. Boczek, W. Kalies, and K. Mischaikow, Polygonal approximation of flows, *Topology Appl.* **154** (2007), 2501–2520.
- [7] CAPD: *Computer Assisted Proofs in Dynamics*, <http://capd.wsb-nlu.edu.pl/>.
- [8] CHomP: *Computational Homology Project*, <http://chomp.rutgers.edu/>; 応用数理学会サマーセミナー 2007 「計算ホモロジーとその応用」, 北海道大学数学講究録 Series #124, September 2007.
- [9] R. C. Churchill, J. Franke, and J. Selgrade, A geometric criterion for hyperbolicity of flows, *Proc. Amer. Math. Soc.* **62** (1977), 137–143.
- [10] C. Conley, *Isolated Invariant Sets and the Morse Index*, CBMS Regional Conference Series in Mathematics Vol. 38, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1978.
- [11] S. Day, A rigorous numerical methods in infinite dimensions, Ph.D. thesis, Georgia Institute of Technology, 2003.
- [12] S. Day, R. Frongillo, and R. Treviño, Algorithms for rigorous entropy bounds and symbolic dynamics, to appear in *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*
- [13] S. Day, Y. Hiraoka, K. Mischaikow, and T. Ogawa, Rigorous numerics for dynamics: a study of the Swift-Hohenberg equation, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **4** (2005), 1–31.
- [14] S. Day, O. Junge, and K. Mischaikow, A rigorous numerical method for the global analysis of infinite dimensional discrete dynamical systems, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **3** (2004), 117–160.
- [15] S. Day, H. Kokubu, S. Luzzatto, K. Mischaikow, H. Oka, and P. Pilarczyk, Quantitative hyperbolicity estimates in one-dimensional dynamics, *Nonlinearity* **21** (2008), 1967–1987.
- [16] M. Dellnitz, G. Froyland, and O. Junge, The algorithms behind GAIO – Set oriented numerical methods for dynamical systems, B. Fiedler (ed.), *Ergodic Theory, Analysis, and Efficient Simulation of Dynamical Systems*, pp. 145–174, Springer-Verlag, 2001.
- [17] M. Gameiro, T. Gedeon, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, and H. Oka, Topological horseshoes of traveling waves for a fast-slow predator-prey system, *J. Dynamics Diff. Eq.* **19** (2007), 623–654.
- [18] M. Gameiro, K. Mischaikow, and W. Kalies, Topological characterization of spatial-temporal chaos, *Physical Review E* **70** (2004), 035203.
- [19] M. Gameiro and P. Pilarczyk, Automatic homology computation with application to pattern classification, *RIMS Kôkyûroku Bessatsu* **B3** (2007), 1–10.
- [20] S. Hayashi, Connecting invariant manifolds and the solution of the  $C^1$  stability and  $\Omega$ -stability conjectures for flows, *Ann. of Math.* **145** (1997), 81–137.

- [21] 平岡裕章, 小川知之, K. Mischaikow, Swift-Hohenberg 方程式の定常解大域分岐の Conley 指数を用いた検証, *日本応用数理学会論文誌* **13** (2003), 191–211.
- [22] S. Hruska, A numerical method for proving hyperbolicity of complex Hénon mappings, *Found. Comput. Math.* **6** (2006), 427–455.
- [23] T. Kaczynski, K. Mischaikow, and M. Mrozek, *Computational homology, Applied Mathematical Sciences*, Vol. 157, Springer-Verlag, New York, 2004.
- [24] W. D. Kalies, K. Mischaikow, and R. C. A. M. VanderVorst, An algorithmic approach to chain recurrence, *Found. Comput. Math.* **5** (2005), 409–449.
- [25] H. Kokubu, D. Wilczak, and P. Zgliczyński, Rigorous verification of cocoon bifurcations in the Michelson system, *Nonlinearity* **20** (2007), 2147–2174.
- [26] O. Lanford III, A computer-assisted proof of the Feigenbaum conjectures, *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **6** (1982), 427–434.
- [27] R. Mañé, A proof of the  $C^1$  stability conjecture, *Publ. Math. IHES* **66** (1988), 161–210.
- [28] K. Mischaikow, Topological techniques for efficient rigorous computations in dynamics, *Acta Numerica* **11** (2002), 435–477.
- [29] K. Mischaikow and M. Mrozek, Chaos in the Lorenz equations: a computer-assisted proof, *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **32** (1995), 66–72; *ibid*, Part II: Details, *Math. Comput.* **67** (1998), 1023–1046.
- [30] K. Mischaikow and M. Mrozek, Conley index, in *Handbook of Dynamical Systems*, Vol. 2, pp. 393–460, North-Holland, Amsterdam, 2002.
- [31] K. Mischaikow, M. Mrozek, and A. Szymczak, Chaos in the Lorenz equations: a computer assisted proof III: Classical parameter values, *J. Diff. Eq.* **169** (2001), 17–56.
- [32] M. Mrozek, Index pairs algorithms, *Found. Comput. Math.* **6** (2006), 457–493.
- [33] 「精度保証付き数値計算法」, 数学辞典, 第4版, 岩波書店, 2007.
- [34] P. Pilarczyk, A concurrent algorithm for the construction of Conley index pairs, in preparation.
- [35] C. Robinson, *Dynamical Systems – Stability, Symbolic Dynamics, and Chaos*, Second Edition, CRC Press, 1999.
- [36] R. J. Sacker and G. R. Sell, Existence of dichotomies and invariant splitting for linear differential systems I, *J. Diff. Eq.* **27** (1974), 429–458.
- [37] Ya. G. Sinai and E. B. Vul, Discovery of closed orbits of dynamical systems with the use of computers, *J. Statist. Phys.* **23** (1980), 27–47.
- [38] A. Szymczak, A combinatorial procedure for finding isolating neighborhoods and index pairs, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* **127** (1997), 1075–1088.
- [39] T. Teramoto and Y. Nishiura, Double gyroid morphology in a gradient system with nonlocal effects, *J. Phys. Soc. Japan* **71** (2002), 1611–1614; T. Teramoto, M. Gameiro, and Y. Nishiura, Applications of computational homology to 3D morphology transitions, to appear in *RIMS Kôkyûroku*.
- [40] W. Tucker, The Lorenz attractor exists, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **328** (1999), 1197–1202; A rigorous ODE solver and Smale’s 14th problem, *Found. Comput. Math.* **2** (2002), 53–117.
- [41] I. Ugarcovici and H. Weiss, Chaotic dynamics of a nonlinear density dependent population model, *Nonlinearity* **17** (2004), 1689–1711.

- [42] D. Wilczak and P. Zgliczyński, Heteroclinic connections between periodic orbits in planar restricted circular three body problem – A computer assisted proof, *Comm. Math. Phys.* **234** (2003) 37–75; *ibid* – Part II, *Comm. Math. Phys.* **259** (2005), 561–576.
- [43] D. Wilczak and P. Zgliczyński, Topological method for symmetric periodic orbits for maps with a reversing symmetry, *Discrete Cont. Dyn. Sys. A* **17** (2007), 629–652.
- [44] M. Yamaguti, H. Yoshihara, and T. Nishida, Remarks on a paper of Ya. G. Sinai and E. B. Vul in 1980: "Discovery of closed orbits of dynamical systems with the use of computers", *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.* **2** (1993), 449–471.
- [45] P. Zgliczyński and K. Mischaikow, Rigorous numerics for partial differential equations: The Kuramoto-Sivashinsky equations, *Found. Comp. Math.* **1** (2001), 255–288.