

実データに基づくセル・オートマトンモデルの構成

川原田, 茜
静岡県立大学経営情報学部

<https://doi.org/10.15017/1807488>

出版情報：応用力学研究所研究集会報告．26A0-S2 (3), pp.17-24, 2015-03. 九州大学応用力学研究所
バージョン：
権利関係：



応用力学研究所研究集会報告 No.26AO-S2
「非線形波動研究の現状 — 課題と展望を探る—」 (研究代表者 増田 哲)

Reports of RIAM Symposium No.26AO-S2

State of arts and perspectives of nonlinear wave science

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, October 30 - November 1, 2014

Article No. 03 (pp. 17 - 24)

実データに基づくセル・オートマトン モデルの構成

川原田 茜 (KAWAHARADA Akane)

(Received 15 January 2015; accepted 20 February 2015)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2015

実データに基づくセル・オートマトンモデルの構成

川原田 茜 (Akane KAWAHARADA) *

静岡県立大学経営情報学部

E-mail: a-kwhrd@u-shizuoka-ken.ac.jp

キーワード：セル・オートマトン、モデル構成法、実データ、拡散現象、衝撃波

概要

セル・オートマトンは全ての変数が離散値をとる離散力学系である。局所的な相互作用によって時間発展規則が定義され、単純な規則からも複雑で多様な挙動を示すために数理モデルとして重宝されている。しかし規則の単純さ故、実際の現象に対してそれを模倣するセル・オートマトンを構成することは一般に容易ではない。本講演では、現象理解を仮定せずに観測データから直接セル・オートマトンを構成する方法について紹介する。尚、本講演は飯間信氏 (広島大学) との共同研究に基づくものである。

1 はじめに

セル・オートマトンは 1940 年代にジョン・フォン・ノイマンとスタニスロー・ウラムによって与えられた数理モデルである。モデルの規則は局所的な相互作用で一様に定義され、単純な規則からも複雑で多様な表現が可能であることから様々な分野において数理モデルとして用いられてきた。流体 [1, 2, 3]、化学反応 [4, 5]、生物のパターン形成 [6, 7]、交通流 [8, 9] など、物理現象や社会現象を模倣する数理モデルとして幅広く利用されている。

また、セル・オートマトンは全ての変数が離散値をとるような離散力学系であるため、記号力学系理論に基づいた数学的な解析を行うことが可能である [10, 11, 12]。アトラクターの分類、位相的エントロピーなどの指標を用いた複雑さによる分類が盛んに研究されている。その他、軌道に着目し、セル・オートマトンによって生成される多彩な自己相似パターンやフラクタルパターンを解析する研究も進められている [13, 14, 15]。

このようにセル・オートマトンは様々なアプローチによって解析可能な優れた数理モデルであるが、一般に現象に対してそれをよく模倣するセル・オートマトンモデルを構成することは容易ではない。現象の観察によって即座に得られるのは大域的な情報であるが、セル・オートマトンの規則は局所的に定義されるものである。既存のセル・オートマトンモデルは現象の局所的メカニズムが解明された後で与えられることが多かった。そこで現象理解を仮定せず、現象の観測によって得られた実データのみを用いて局所情報を抜き出すことによりセル・オートマトンモデルを構成する方法について紹介する [16, 17]。この手法によって物理現象を模倣するセル・オートマトンモデルを実際に構成した結果についても紹介する。なお、実験で観測された実データを用いる際にはノイズの影響を加味する

* 飯間信氏 (広島大学) との共同研究

必要があるため、ここではまず簡単のために、物理現象を記述する偏微分方程式の解を実データと見做して用いることとした。

本文の構成は以下になっている。第2章ではセル・オートマトンの定義と実データを用いたセル・オートマトンモデル構成の手順について述べる。第3章では本手法を適用し、物理現象について実データからセル・オートマトンモデルを構成した結果について紹介する。第4章ではまとめと今後の展望について述べる。

2 準備

2.1 セル・オートマトン

一次元格子 $\mathbb{Z}$ における一次元セル・オートマトンのみを考える。各セルが取り得る状態の集合を $A = \{0, \dots, k-1\}$ ($k \geq 1$) とし、一次元の記号列空間 $A^{\mathbb{Z}}$ を考える。空間 $A^{\mathbb{Z}}$ 上でのシフト変換 σ は、各 $l \in \mathbb{Z}$ に対して $(\sigma x)_l = x_{l+1}$ で定義される。変換 T が $A^{\mathbb{Z}}$ における連続変換であり、シフト変換 σ と可換 (i.e., $T \circ \sigma = \sigma \circ T$) であるとする。空間 $A^{\mathbb{Z}}$ とその上での変換 T の組であらわされる離散力学系を $(A^{\mathbb{Z}}, T)$ とするとき、セル・オートマトンは、以下のように定義される。

定義 1. 離散力学系 $(A^{\mathbb{Z}}, T)$ がセル・オートマトン (cellular automaton, 以下簡単のため CA と書く) であるとは、変換 T が任意の $x \in A^{\mathbb{Z}}$, $l \in \mathbb{Z}$ と $l_1, \dots, l_m \in \mathbb{Z}$ に対して

$$(Tx)_l = f(x_{l+l_1}, \dots, x_{l+l_m}), \quad (1)$$

と書けるときにいう。ただし、 f は A^m から A への写像である。また、写像 f は x_l に対して m 個の近傍セルの状態によって決定されているために局所規則 (local rule) とよばれている。

CA の規則が確率に応じて変化するように定義されるとき、確率的 CA という。確率行列を $P = \{p_{i,j} \mid 1 \leq i \leq k^m, 1 \leq j \leq k\}$ (各 i について $\sum_{j=1}^k p_{i,j} = 1$ をみたとす) 各セルの取り得る状態数を $|A| = k$ とする。

定義 2. 空間 $A^{\mathbb{Z}}$ において、変換 T_P が確率行列 P によって $(T_P x)_l = j$ (確率 $p_{i,j}$) と表されるとき、 $(A^{\mathbb{Z}}, T_P)$ を確率的セル・オートマトン (stochastic cellular automaton) という。ただし $j \in A$ であり、 i は近傍の状態組 $x_{l+l_1}, \dots, x_{l+l_m}$ を k 進数で表された m 桁の数と見做して 10 進数に直した数であるとする。

定義 1 で与えた CA は確率 1 で局所規則が決まるものと見做することができるが、確率的 CA と明確に区別するためにこれを決定論的 CA と呼ぶ。

2.2 実データからの CA 構成手順

以下の手順により、実データから決定論的 CA と確率的 CA を構成することができる [16, 17]。構成したい CA の各セルが取り得る状態数 $|A|$ 、局所規則の依存する m 個の近傍セル $(l+l_1, \dots, l+l_m)$ は予め決めておく。

- 1). 実データについて、観察したい空間と時刻のスケールに応じてデータを粗視化（離散化）し、時空間のセルを構成する。各セルにおける状態についても CA の状態数 $|A|$ に応じて粗視化（離散化）する。
- 2). 各近傍セルの状態組 $(x_{l+l_1}^n, \dots, x_{l+l_m}^n) \in A^m$ に対する次状態 $x_l^{n+1} \in A$ の出現個数を、全ての組み合わせについてそれぞれデータ中から数え上げる。
- 3). 決定論的 CA の局所規則は、各近傍セルの状態組 $(x_{l+l_1}^n, \dots, x_{l+l_m}^n)$ に対して最多出現個数の次状態 x_l^{n+1} へ遷移するものとして定義する。確率的 CA の局所規則は、各近傍セルの状態組 $(x_{l+l_1}^n, \dots, x_{l+l_m}^n)$ に対して次状態 x_l^{n+1} の出現頻度に応じた確率で規則を重み付けすることによって定義する。

3 物理現象を模倣する CA の構成

ここでは偏微分方程式の解のデータを使って拡散現象と衝撃波を模倣する CA を構成する。局所規則が依存する近傍セルは最近接の三つ $(l-1, l, l+1)$ 、各セルの取りうる状態数 $|A|$ は 2, 3, 4, 8 とし、決定論的 CA と確率的 CA を構成する。また、得られた CA がそれぞれの現象をどこまで模倣しているかについても述べる。

3.1 拡散現象を模倣する CA の構成

拡散方程式は物質の拡散による密度のゆらぎを記述する偏微分方程式である。拡散方程式の解を拡散現象の観測によって得られた実データと見做し、それを模倣する CA を構成する。

3.1.1 拡散方程式とその解

定義 3. 拡散方程式は以下で与えられる偏微分方程式である。

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2)$$

$u(x, t)$ は空間 $x \in \mathbb{R}$ 、時刻 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ における拡散物質の密度を表す。パラメータ ν は拡散係数である。拡散方程式 (2) の解を数値実験によって調べるために差分化する。離散化された空間 $x = i\Delta x$ と時刻 $t = n\Delta t$ ($i, n \in \mathbb{Z}$) に対し、 $u_i^n := u(i\Delta x, n\Delta t)$ とおく。このとき差分拡散方程式は以下で与えられる。

$$u_i^{n+1} = u_i^n + K(u_{i-1}^n + u_{i+1}^n - 2u_i^n), \quad (3)$$

ただし $K := \nu\Delta t/\Delta x^2$ ($0 \leq K \leq 1/2$) である。図 2 は $K = 0.3$ のときの差分拡散方程式 (3) の時間発展パターンを描いたものである。初期に中心部分に固まっていた物質が時間が経つにつれて空間に一樣に拡がっていく様子が観察できる。また、 K は小さいほど拡散は遅く、大きいほど拡散のスピードははよくなる。

the number of	0-cells	1-cells	2-cells	3-cells	total sites
000	25318	0	0	0	25318
001	20269	7522	0	0	27791
002	1758	4576	0	0	6334
003	29	6056	0	0	6085
100	21991	7827	0	0	29818
101	3811	17193	0	0	21004
102	23	6302	0	0	6325
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

表 1: $K = 0.3$ の差分拡散方程式に対する $|A| = 4$ のときの解データの一部。近傍セル三つの状態組（最左列）に対し、次状態が $0, 1, 2, 3 \in A$ になっていた個数をそれぞれ表している。

3.1.2 方程式データからの拡散 CA の構成

拡散方程式の数値実験による解のデータを用いて決定論的 CA と確率的 CA を構成する。

拡散のスピードが異なる $K = 0, 1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ の五つの場合について差分拡散方程式 (3) からデータをとる。有界空間 $[0, \Delta x \times I] \subset \mathbb{R}$ ($I \in \mathbb{N}$) において、初期値 $\{u_i^0\}_{i=0}^{N+1}$ は各 u_i^0 が $[0, 1]$ 内でランダムに値を取るようしてに与え、時刻 $[0, \Delta t \times N]$ ($N \in \mathbb{N}$) における時間発展のデータをとる。ここでは特に $I = 40, N = 10$ とした。初期値を再びランダムに取り替えて 10^4 個のデータを同様に集める。

次に、集めた解のデータを用いて状態数 $|A| = 2, 3, 4, 8$ 、近傍数 $m = 3$ で $(l-1, l, l+1)$ の決定論的 CA と確率的 CA を構成していく。ここでは空間、時刻のスケールは差分拡散方程式から得たままのものを使用する。空間 i 、時刻 n の各セルにおける $u_i^n \in [0, 1]$ を、構成する CA の状態数 $|A|$ に応じて $a_i^n/|A| < u_i^n \leq (a_i^n + 1)/|A|$ を満たすように状態 $a_i^n \in A = \{0, 1, \dots, |A| - 1\}$ に変換する（図 1 参照）。ただし $u_i^n = 0$ の場合は $a_i^n = 0$ とする。例として表 1 に $K = 0.3, |A| = 4$ のときのデータの一部を示す。決定論的 CA を構成するためには、各近傍セルの状態組に対して、最も出現個数の多い次状態を局所規則として与える。表 1 に基づくと、 $000 \rightarrow 0, 001 \rightarrow 0, 002 \rightarrow 1, 003 \rightarrow 1$ となる。確率的 CA を構成するには、次状態の出現頻度によって局所規則の確率を与える。例えば局所規則 $001 \rightarrow 0, 001 \rightarrow 1, 001 \rightarrow 2, 001 \rightarrow 3$ はそれぞれ確率 $20269/27791, 7522/27791, 0, 0$ で選ばれるものとして定義される。

以上から $K = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ のそれぞれの場合について状態数 $|A| = 2, 3, 4, 8$ の決定論的拡散 CA と確率的拡散 CA を得た。

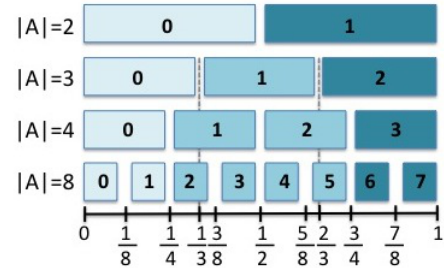


図 1: 実数値 $u_i^n \in [0, 1]$ を離散値 $a_i^n \in A$ へ変換

3.1.3 拡散 CA の挙動と元の方程式の解との比較

得られた CA の時間発展パターンと元の拡散方程式の拡散現象を比較する。

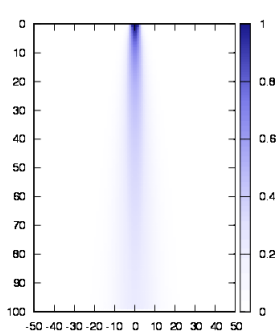


図 2: $K = 0.3$ の差分拡散方程式 (3) の時間発展パターン

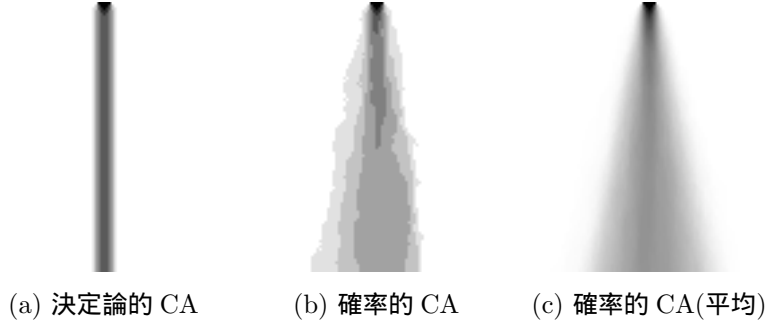


図 3: $K = 0.3$ の拡散現象を模倣する $|A| = 8$ の CA の時間発展パターン。初期値は中心 5 セルのみ $|A| = 1$ 、その他のセルは 0 で与えている。(a) は決定論的 CA、(b) は確率的 CA、(c) は確率的 CA で描いた 1000 個の時間発展パターンの平均である。(空間サイズ: 100, 時刻ステップ: 100)

図 3 は $K = 0.3$, $|A| = 8$ の拡散 CA の時間発展パターンを描いたものである。初期値は中心の 5 個のセルのみ $|A| = 1$ 、その他のセルは 0 として与えている。境界条件は端点を 0 として与えた。図 3(a) は決定論的拡散 CA の時間発展パターンである。最初の数ステップのみはわずかに拡散している様子が観察できるが、一定時間経過後は有界の範囲で拡散が止まってしまい、不動点になっている。一方図 3(b) の確率的拡散 CA の時間発展パターンでは、長時間にわたって空間全体に拡散し続けていることが分かる。図 3(c) は確率的拡散 CA の 1000 個の時間発展パターンの平均を図示したものである。元の差分方程式の時間発展パターン (図 2) と比べると確率的拡散 CA の方が拡散している幅がひろいが、時間を進めるごとに空間全体に一樣に拡散していく様子は観察できている。さらに差分方程式において K は拡散の度合いを表していたが、確率的拡散 CA の時間発展パターンにおいても K が小さいときは拡散の幅が狭く、 K が大きくなるにつれ拡散の幅がひろがる事が確認できた。

よって決定論的拡散 CA は充分によいモデルとはいえないが、確率的拡散 CA は定性的に拡散現象をよく模倣するモデルとなっていることが分かった。

3.2 衝撃波を模倣する CA の構成

Burgers 方程式は一次元非線形波動を記述することで知られる偏微分方程式である。Burgers 方程式の解を衝撃波の観測によって得られた実データと見做し、それを模倣する CA を構成する。

3.2.1 Burgers 方程式とその解

定義 4. Burgers 方程式は以下で与えられる偏微分方程式である。

$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2}. \quad (4)$$

$v(x, t)$ は空間 $x \in \mathbb{R}$ 、時刻 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ における流速を表す。 $\mu > 0$ は動粘性係数である。 $v(x, t) \partial v(x, t) / \partial x$ は移流項、 $\partial^2 v(x, t) / \partial x^2$ は散逸項と呼ばれている。離散化された空間

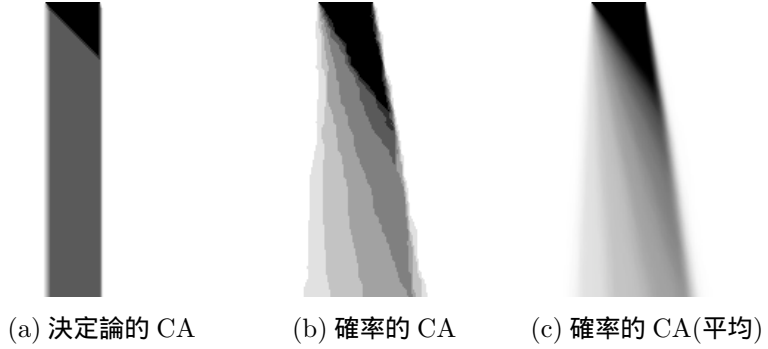
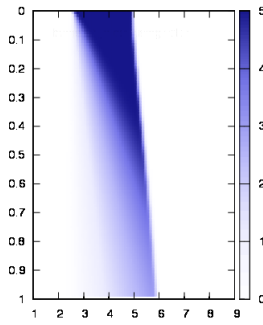


図 4: 差分 Burgers 方程式 (5) の時間発展パターン ($\Delta x = 0.1, \Delta t = 0.01, \mu = 0.01$)

図 5: 衝撃波を模倣する状態数 $|A| = 8$ の CA の時間発展パターン。初期値は $38 \leq i < 75$ において $|A| - 1$ 、その他の i では 0 で与えている。(a) は決定論的 CA、(b) は確率的 CA、(c) は確率的 CA で描いた 1000 個の時間発展パターンの平均である。(空間サイズ: 150, 時刻ステップ: 200)

$x = i\Delta x$ 、時刻 $t = n\Delta t$ について $v_i^n := v(i\Delta x, n\Delta t)$ とおく。前進差分により以下の差分 Burgers 方程式を得る。

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_i^n (v_i^n - v_{i-1}^n) + \mu \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n). \quad (5)$$

図 4 は $\Delta x = 0.1, \Delta t = 0.01, \mu = 0.01$ のときの差分 Burgers 方程式 (5) の時間発展パターンである。空間の範囲は $0.0 \leq x < 10.0$ 、時刻の範囲は $0.0 \leq t < 1.0$ であり、初期値は $2.5 < x < 5.0$ において 5.0、その他の x で 0.0 として与えている。境界条件は端点を 0 として与えた。この軌道は衝撃波と呼ばれるものである。解が切り立った右側に移流し、左側は散逸している。

3.2.2 方程式データからの Burgers CA の構成

Burgers 方程式の数値実験による解のデータを用いて決定論的 Burgers CA と確率的 Burgers CA を構成する。

差分 Burgers 方程式 (5) において $\Delta x = 0.01, \Delta t = 0.001$ とし、動粘性係数は $\mu = 0.01$ で固定する。空間 $[0, \Delta x \times I] \subset \mathbb{R}$ 、時刻 $[0, \Delta t \times N]$ ($I = 1000, N = 10$) とし、初期値は各セルが $[0, 5]$ 内でランダムな値を取るようを与える。さらに初期値を取り替えて 10^3 個の解のデータを集める。

拡散 CA を構成したときと同様の手順で状態数 $|A| = 2, 3, 4, 8$ の決定論的 Burgers CA と確率的 Burgers CA を得る。

3.2.3 Burgers CA の挙動と元の方程式の解との比較

得られた CA の時間発展パターンと元の Burgers 方程式の衝撃波を比較する。

図 5 は $|A| = 8$ の Burgers CA の時間発展パターンを描いたものである。初期値は $38 \leq i < 75$ において $|A| - 1$ 、その他の i で 0 として与えている。図 5(a) は決定論的 Burgers CA の時間発展パターンである。最初の数ステップのみわずかに移流と散逸は見られるが、CA の状態数 $|A|$ が 8 以下では、衝撃波の特徴がほとんど模倣できていない。図 5(b) は確

率的 Burgers CA の時間発展パターン、図 5(c) は確率的 Burgers CA の 1000 個の時間発展パターンの平均を図示したものである。元の図 4 と比較してみると、左側の散逸が若干鈍く見えるが、基本的な衝撃波の特徴である切り立った右側の移流と左側の散逸の両方を再現できていることが分かる。さらに確率的 Burgers CA は多段衝撃波の融合のような現象も模倣することができることを確認した。

よって決定論的 Burgers CA は充分によいモデルとはいえないが、確率的 Burgers CA は定性的に衝撃波をよく模倣するモデルとなっていることが分かった。

4 まとめと今後の展望

実データから CA モデルを構成する方法を紹介し、本手法を用いて拡散現象と衝撃波を模倣する CA を構成した。両方の現象について決定論的 CA ではあまりよい結果とはならなかったものの、確率的 CA では現象の特徴をよく反映したモデルとなっていることが分かった。

ここでは簡単のために物理現象を記述する偏微分方程式の解を実データとして用いていたが、今後は実験によって得られた観測データを用いて CA モデルの構成を進める予定である。筆者らは現在、ミドリムシが生成する生物対流パターンを模倣する CA モデルの構成、自由界面回転流体を模倣する CA モデルの構成などを進めている。本手法は支配方程式が分かっているような複雑な現象に対しても適用可能であるため、応用の可能性は多分にあると思われる。

また、ここで紹介した物理現象を模倣する CA の構成結果は別の解釈が可能である。実データを取るために用いていた拡散方程式、Burgers 方程式はそもそも拡散現象と衝撃波を模倣する数値モデルである。つまり連続モデルの偏微分方程式からそれに（何らかの意味で）対応する超離散モデルの CA を構成したと解釈できる。偏微分方程式と超離散方程式をつなぐ手法としては既に超離散化法（またその逆）[18, 19] がよく知られているが、それとは異なったアプローチで連続モデルと超離散モデルのつながりを議論することができる可能性がある。これらの話題についてはまた別の機会に報告したい。

参考文献

- [1] J. Hardy, Y. Pomeau, and O. de Pazzis. Time evolution of a two - dimensional model system. i. invariant states and time correlation functions. *Journal of Mathematical Physics*, 14(12):1746–1759, 1973.
- [2] J. Hardy, O. de Pazzis, and Y. Pomeau. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. *Physical Review A*, 13:1949–1961, 1976.
- [3] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Physical Review Letters*, 56:1505–1508, 1986.
- [4] Martin Gerhardt, Heike Schuster, and John J. Tyson. A cellular automaton model of excitable media: II. curvature, dispersion, rotating waves and meandering waves. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 46(3):392 – 415, 1990.

- [5] Martin Gerhardt, Heike Schuster, and John J. Tyson. A cellular automaton model of excitable media: Iii. fitting the belousov-zhabotinskii reaction. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 46(3):416 – 426, 1990.
- [6] Ingo Kusch and Mario Markus. Mollusc shell pigmentation: Cellular automaton simulations and evidence for undecidability. *Journal of Theoretical Biology*, 178(3):333 – 340, 1996.
- [7] David A. Young. A local activator-inhibitor model of vertebrate skin patterns. *Mathematical Biosciences*, 72(1):51 – 58, 1984.
- [8] Michael Schreckenberg Kai Nagel. A cellular automaton model for freeway traffic. *J. Phys. I France*, 2(12):2221–2229, 1992.
- [9] Yoshihiro Ishibashi Minoru Fukui. Traffic flow in 1d cellular automaton model including cars moving with high speed. *J. Phys. Soc. Japan*, 65(6):1868–1870, 1996.
- [10] G. A. Hedlund. Endomorphisms and automorphisms of the shift dynamical system. *Math. Systems Theory*, 3:320–375, 1969.
- [11] Petr Kůrka. Topological dynamics of cellular automata. In *Codes, systems, and graphical models (Minneapolis, MN, 1999)*, volume 123 of *IMA Vol. Math. Appl.*, pages 447–485. Springer, New York, 2001.
- [12] Akane Kawaharada. Ulam’s cellular automaton and rule 150. *Hokkaido Mathematical Journal*, 43(3):361–383, 2014.
- [13] Satoshi Takahashi. Cellular automata, fractals and multifractals: space-time patterns and dimension spectra of linear cellular automata. In *Chaos in Australia (Sydney, 1990)*, pages 173–195. World Sci. Publ., River Edge, NJ, 1993.
- [14] Akane Kawaharada and Takao Namiki. Cumulative distribution of rule 90 and lebesgue’s singular function. *Proceedings of AUTOMATA 2014, 20th international workshop on cellular automata and discrete complex systems*, pages 165–169, 2014.
- [15] Akane Kawaharada. Fractal patterns created by ulam’s cellular automaton. *2014 Second International Symposium on Computing and Networking*, pages 484–486, 2014.
- [16] Akane Kawaharada and Makoto Iima. Constructing cellular automaton models from observation data. In *2013 First International Symposium on Computing and Networking*, pages 559–562, Dec 2013.
- [17] Akane Kawaharada and Makoto Iima. An application of data-based construction method of cellular automata to physical phenomena. *Journal of Cellular Automata Special Issue*, accepted.
- [18] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira, and J. Satsuma. From soliton equations to integrable cellular automata through a limiting procedure. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3247–3250, Apr 1996.
- [19] Wataru Kunishima, Akinobu Nishiyama, Hiroshi Tanaka, and Tetsuji Tokihiro. Differential equations for creating complex cellular automaton patterns. *J. Phys. Soc. Japan*, 73(8):2033–2036, 2004.