

Kathrin PADBERG-GEHLE, Lüneburg

## Meeresströmungen, Google-Matrix und Netzwerke: Analyse von Transportprozessen

### Einleitung

Strömungen in Gewässern können Wirbel erzeugen, die Wassermasse oder Partikel einfangen und über lange Zeit nicht wieder freigeben. Solche kohärenten Wirbelstrukturen sind bedeutend für Wärme- und Salztransport in den Ozeanen und somit für das globale Klima. In den letzten zwei Jahrzehnten wurden verschiedene mathematische Ansätze vorgeschlagen, um kohärente Strukturen zu detektieren und die korrespondierenden Transportprozesse zu untersuchen. Diese Methoden haben ihren Ursprung in der Theorie dynamischer Systeme sowie der Ergodentheorie. Für aktuelle Übersichtsarbeiten sei auf Allshouse & Peacock (2015) und Hadjighasem et al. (2017) verwiesen.

Kohärente Strukturen können beispielsweise mit Hilfe von Transferoperatoren, die bis vor wenigen Jahren nur in der reinen Mathematik eine Rolle spielten, charakterisiert und identifiziert werden. Diese probabilistische Methode soll im Rahmen dieses Beitrags kurz anschaulich diskutiert werden.

Nach einer kurzen Einführung in die Theorie dynamischer Systeme werden der probabilistische Ansatz zur Analyse von Transport vorgestellt und sowie seine numerische Umsetzung skizziert. Mit der erhaltenen stochastischen Matrix lassen sich Analogien zu stochastischen Irrfahrten auf Netzwerken und Internet-Suchalgorithmen ziehen. Neben einfachen, illustrativen Beispielen werden wir auch realistische Transportphänomene im Ozean betrachten.

### Grundlagen

Dynamische Systeme – der Begriff geht auf Birkhoff zurück – sind mathematische Modelle physikalischer Systeme und beschreiben das zeitabhängige Verhalten von Zuständen. Zur Definition eines dynamischen Systems benötigt man somit drei Zutaten: einen Zustandsraum, Zeit sowie ein zeitliches Evolutionsgesetz.

Hier betrachten wir eine spezielle Klasse von dynamischen Systemen, sogenannte zeitdiskrete dynamische Systeme:

$$x_{k+1} = T(x_k), x_k \in M, k \in \mathbb{Z}.$$

Dabei beschreibt  $T: M \rightarrow M$  das zeitliche Evolutionsgesetz von Zuständen  $x_k$  aus einer Teilmenge  $M \subset \mathbb{R}^d$  zu diskreten Zeitpunkten  $k \in \mathbb{Z}$ . Im Folgenden nehmen wir an, dass  $M$  kompakt und  $T$  ein Diffeomorphismus ist. Die  $k$ -te Iterierte von  $T$ ,  $k \geq 0$  zum Startwert  $x_0$  ist durch  $x_k = T^k(x_0) = T(T(\dots T(x_0))) = T \circ T \circ \dots \circ T(x_0)$  gegeben, für  $k < 0$  erhalten wir dies über die inverse Abbildung. Eine so erzeugte Folge  $(x_k)_{k \in \mathbb{Z}}$  nennen wir (Lösungs-) Bahn oder Trajektorie. Die

Betrachtung zeitdiskreter dynamischer Systeme ist übrigens keine große Einschränkung, da die Lösung von Differentialgleichungen zu diskreten Zeitpunkten (wie dies bei der numerischen Approximation immer der Fall ist) auch zu dieser Klasse führt.

Die klassische Theorie dynamischer Systeme ist interessiert am Langzeitverhalten des Systems, d.h. sie betrachtet die Evolution von Zuständen für  $k \rightarrow \infty$ . Typische Grenzzustände sind die invarianten Mengen: Eine Menge  $A \subseteq M$  heißt invariant unter  $T$ , falls  $T(A) = A$ . Ein einfaches Beispiel einer invarianten Menge ist ein Fixpunkt  $T(\bar{x}) = \bar{x}$ . Die Analyse der Dynamik von  $T$  in einer Umgebung eines Fixpunktes  $\bar{x}$  ist unkompliziert, wenn  $\bar{x}$  hyperbolisch ist, d.h.  $DT(\bar{x})$  (die totale Ableitung von  $T$  in  $\bar{x}$ ) besitzt keinen Eigenwert auf dem Einheitskreis. Der Satz von Hartman-Grobman besagt dann, dass in einer Umgebung um den Fixpunkt  $\bar{x}$  die Dynamik gut durch die Linearisierung beschrieben wird. Insbesondere existieren in diesem Fall sogenannte stabile bzw. instabile Mannigfaltigkeiten, die das asymptotische Verhalten gegen  $\bar{x}$  für  $k \rightarrow \pm\infty$  beschreiben.

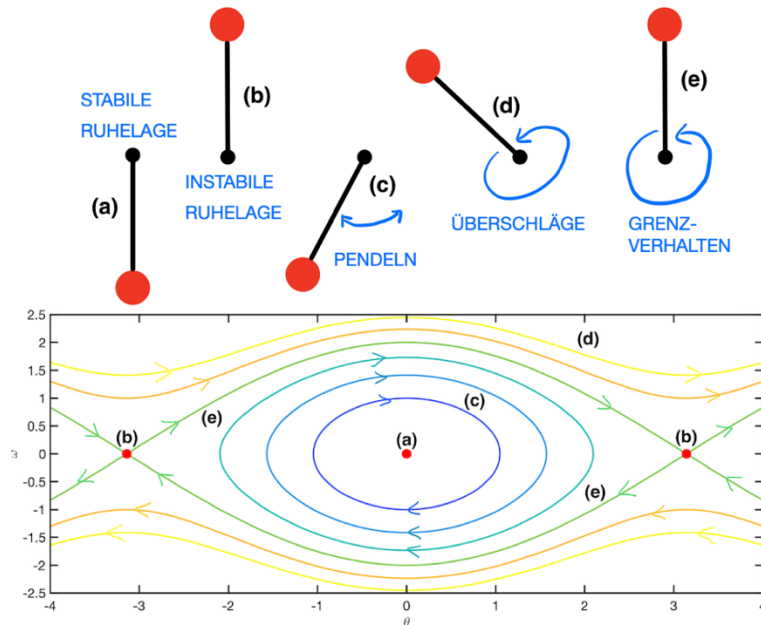
Zur Veranschaulichung betrachten wir zunächst ein klassisches dynamisches System, das ideale Pendel. Die Bewegung eines mathematischen Pendels wird durch das folgende System von Differentialgleichungen beschrieben:

$$\dot{\theta} = \omega, \quad \dot{\omega} = -\sin \theta$$

Hierbei beschreibt  $\theta$  den (Ausschlags-)Winkel und  $\omega$  die Winkelgeschwindigkeit. Ein zeitdiskretes dynamisches System kann auf Grundlage des Lösungsoperators dieses Differentialgleichungssystems definiert werden. Durch reine Anschauung (siehe Abb. 1, oben) kann man auch ohne eine tiefe mathematische Betrachtung die nichtlineare Dynamik untersuchen. Die entsprechenden Lösungsbahnen sind im Phasenporträt eingezeichnet (Abb. 1, unten).

Offensichtlich gibt es bei einem Pendel zwei Ruhelagen, eine stabile (Pendel hängt nach unten (a)) sowie eine instabile (Pendel steht auf dem Kopf (b)). Weiterhin kann man die typische Pendelbewegung beobachten (c), die den geschlossenen Bahnen um den stabilen Fixpunkt entspricht, sowie Überschläge (d) mit den entsprechenden unbeschränkten Bahnen. Zwischen Pendeln und Überschlag gibt es eine Grenzbewegung: Das Pendel fällt aus der instabilen Ruhelage und schwingt sich wieder in diesen Zustand hinauf ((e) bzw. grüne Bahn im Phasenportrait). Bei dieser sogenannten Verbindungsbahn fällt die stabile mit der instabilen Mannigfaltigkeit des instabilen Fixpunktes zusammen. Sie spielt die Rolle einer Transportbarriere, denn sie trennt die dynamisch verschiedenen invarianten Bereiche, d.h. den Pendel- vom Überschlagsbereich.

Die Identifikation von Transportbarrieren steht im Zentrum der geometrischen Ansätze zur Transportanalyse, die wir aber im Rahmen dieses Beitrags nicht weiter betrachten werden.



**Abb. 1:** Mögliche Verhaltensweisen eines Pendels (oben) und entsprechende Bahnen des dynamischen Systems im Phasenportrait (unten).

## Transport und fast-invariante Mengen

Wie aus dem Pendel-Beispiel ersichtlich ist, ermöglicht die Kenntnis von invarianten Mengen eine Zerlegung des Zustandsraums in dynamisch unterschiedliche Bereiche, zwischen denen allerdings keine Übergänge stattfinden. In realen Systemen beeinflussen jedoch kleine Störungen (z.B. externer Antrieb, Diffusion) die Dynamik und ermöglichen so Transport. Ein entsprechendes mathematisches Konzept ist das der fast-invarianten Mengen: Eine Menge  $A \subset M$  heißt fast-invariant unter der Dynamik von  $T$ , falls  $T(A) \approx A$ . Um diese sehr unpräzise Definition mathematisch greifbar zu machen, definieren wir die Invarianzratio (Dellnitz & Junge, 1999)

$$\rho(A) = \frac{\mu(A \cap T^{-1}(A))}{\mu(A)},$$

die den Anteil von  $A$ , der unter der Wirkung von  $T$  wieder nach  $A$  abgebildet wird, misst.  $\mu$  ist ein invariantes Wahrscheinlichkeitsmaß, d.h.  $\mu(A) = \mu(T^{-1}(A))$  für alle  $A \subset M$ . In den hier betrachteten Anwendungen ist  $\mu(A) = \frac{m(A)}{m(M)}$ , wobei  $m$  das Lebesgue-Maß (Volumenmaß) bezeichne. Eine Menge  $A \subset M$  ist somit fast-invariant, wenn  $\rho(A) \approx 1$ . Falls  $\rho(A) = 1$ , so ist  $A$  invariant.

Ziel ist es nun, eine optimale Zerlegung des Zustandsraums in fast-invariante Mengen zu erhalten. Dazu finde man zu gegebenem  $p \in \mathbb{N}$  eine Kollektion paarweise disjunkter Mengen  $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_p\}$  mit  $\bigcup_{1 \leq k \leq p} A_k = M$  und  $\mu(A_k) > 0$ ,  $1 \leq k \leq p$ , so dass

$$\rho(\mathcal{A}) = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p \rho(A_k).$$

maximiert wird.

Dieses mengenwertige Optimierungsproblem ist sehr schwer zu lösen. Über einen probabilistischen Zugang kann man aber näherungsweise Lösungen der Optimierungsaufgabe gewinnen. Dazu betrachten wir den Transfer- (oder Perron-Frobenius) Operator  $\mathcal{P}: L^1(M, m) \rightarrow L^1(M, m)$ , der die zeitliche Evolution von Dichten unter der zugrundeliegenden Dynamik von  $T$  beschreibt.  $\mathcal{P}$  ist ein Markov-Operator. Im Gegensatz zu  $T$  ist  $\mathcal{P}$  linear, aber unendlich-dimensional. Fixpunkte von  $\mathcal{P}$ , d.h. Eigenfunktionen zum Eigenwert 1 entsprechen den invarianten Wahrscheinlichkeitsdichten. Eine besondere Rolle kommt isolierten, reellen Eigenwerten nahe der 1 zu. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Träger der negativen bzw. positiven Anteile der entsprechenden Dichten fast-invariante Mengen definiert werden (Dellnitz & Junge, 1999). Dazu später mehr.

### Numerische Approximation des Transferoperators

Wir skizzieren zunächst ein numerisches Verfahren zur Approximation des Transferoperators, dessen theoretische Grundlage auf Ulam (1960) zurückgeht. Dazu wird  $M \subset \mathbb{R}^d$  mittels einer endlichen Kollektion  $\mathcal{B} = \{B_1, \dots, B_n\}$  kompakter Mengen (z.B. Gitterzellen) diskretisiert. Über eine Galerkin-Approximation wird dann ein endlich-dimensionaler Transferoperator erhalten. Dieser kann durch eine stochastische Matrix  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  beschrieben werden mit

$$P_{ij} = \frac{m(B_i \cap T^{-1}(B_j))}{m(B_i)}.$$

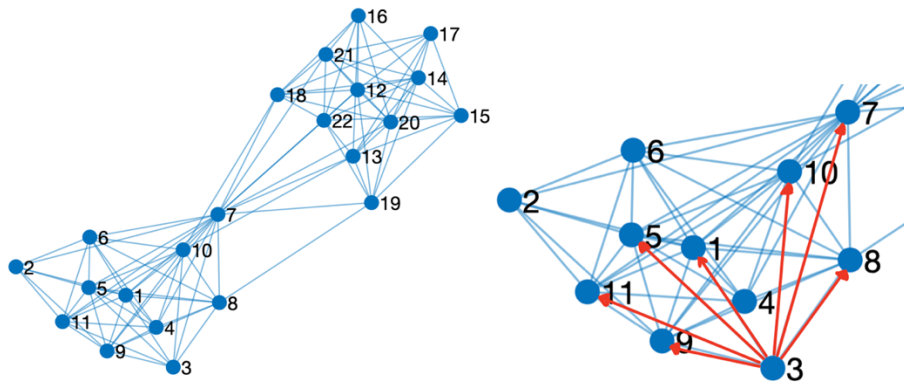
Der Eintrag  $P_{ij}$  gibt die bedingte Wahrscheinlichkeit an, dass ein zufällig gewählter Punkt  $x \in B_i$  sein Bild  $T(x)$  in  $B_j$  hat. Die Matrixeinträge können durch einen Testpunktansatz genähert werden. Hierbei muss nur gezählt werden, wie viele der Startpunkte  $x_{i,k}, k = 1, \dots, K$ , die in  $B_i$  initialisiert wurden, nach  $B_j$  abgebildet werden. Die gewünschte spektrale Information aus  $\mathcal{P}$  wird approximativ durch Eigenvektoren/-werte von  $P$  erhalten.  $P$  ist eine dünnbesetzte, zeilenstochastische Matrix, die die Anwendung von Arnoldi-Iterationsverfahren zur näherungsweisen Lösung der Eigenwertaufgabe erlaubt.

### Exkurs: Netzwerke, Google-Matrix und stochastische Irrfahrten

Um ein intuitives Verständnis der eben erwähnten Eigenwertprobleme im Zusammenhang mit der Identifikation von fast-invarianten Mengen zu erlangen, ist es hilfreich, sich einer Analogie zu bedienen. Wir fassen die Partitionselemente  $B_1, \dots, B_n$  als Knoten in einem Netzwerk auf, mit gerichteten Kanten, die mit  $P_{ij}$  gewichtet sind.

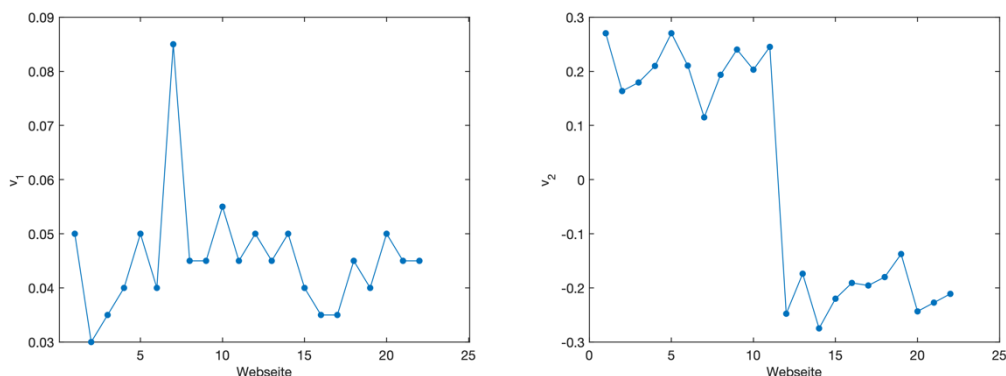
Dazu betrachten wir folgendes Beispiel: Angenommen, wir haben ein kleines Netzwerk als Modell des Internets gegeben, bestehend aus 22 Webseiten, die die Knoten des Netzwerks bilden und mit Kanten, wie in Abbildung 2 (links) skizziert. Eine Kante bedeutet vereinfacht, dass zwei Webseiten miteinander verlinkt sind. Wir nehmen jetzt folgendes Modell an: Surfer\*innen auf einer Webseite wechseln im nächsten Zeitschritt zufällig und mit gleicher

Wahrscheinlichkeit zu je einer der verlinkten Webseiten – sie führen also eine stochastische Irrfahrt durch. Beispielsweise würde von der Webseite 3 (Abb. 2, rechts) jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{7}$  zu einer der sieben verlinkten Webseiten gesprungen. Diese bedingten Wahrscheinlichkeiten werden in einer stochastischen Matrix  $P \in \mathbb{R}^{22 \times 22}$  repräsentiert (z.B. ist  $P_{38} = \frac{1}{7}$ ).



**Abb. 2:** Netzwerk als Modell eines Mini-Internets.

Hat man nun eine Anfangsverteilung von Surfer\*innen  $p_0 \in \mathbb{R}^{22}$  auf dem Mini-Internet, so ergibt sich die neue Verteilung nach einem Zeitschritt durch  $p_1 = p_0 P$  und nach  $k$  Schritten rekursiv durch  $p_k = p_0 P^k$ . Ist  $P$  irreduzibel und aperiodisch, so existiert  $\bar{p} = \lim_{k \rightarrow \infty} p_k$  und insbesondere  $\bar{p} = \bar{p} P$ , d.h. die stationäre Verteilung ist gegeben über den linken Eigenvektor  $v_1$  von  $P$  zum Eigenwert  $\lambda_1 = 1$  (bzw. über den rechten Eigenvektor von  $P^T$ ). Der Eintrag  $\bar{p}_i$  lässt sich interpretieren als der Anteil der Surfer\*innen, den man auf Webseite  $i$  erwarten würde. In der stationären Verteilung (Abb. 3, links) sticht der Wert für die siebte Webseite hervor und sie kann somit als die „wichtigste“ Webseite angesehen werden. Dies ist – hier natürlich nur sehr vereinfacht dargestellt – die grundlegende Idee der Google-Matrix und des PageRanks (Page et al., 1999) für die Internetsuche.



**Abb. 3:** Führende Eigenvektoren der stochastischen Matrix  $P$ , die das Surfen auf dem Mini-Internet (Abb. 2) beschreibt.

Unser Beispiel hat aber noch eine zweite Ebene. In Abbildung 2 (links) sieht man, dass das Netzwerk aus zwei, nur lose miteinander verbundenen Teilen besteht.

Man kann davon ausgehen, dass Surfer\*innen, die in einem Teil des Mini-Internets starten, mit hoher Wahrscheinlichkeit für lange Zeit in diesem Bereich verbleiben. Das ist aber auch die anschauliche Charakterisierung von fast-invarianten Mengen. In unserem Beispiel hat  $P$  einen weiteren großen reellen Eigenwert  $\lambda_2 \approx 0.86$ . Über das Vorzeichen der Einträge des zugehörigen Eigenvektors  $v_2$  (Abb. 3, rechts) können die beiden Teilnetzwerke identifiziert werden.

### Algorithmus und Erweiterungen

Wir haben beispielhaft gesehen, dass Eigenvektoren der Übergangsmatrix zu reellen Eigenwerten nahe 1 Informationen zu dynamisch isolierten Bereichen enthalten. Dies lässt sich mathematisch auf die Identifikation fast-invarianter Mengen aus  $\mathcal{P}$  bzw.  $P$  übertragen (Dellnitz & Junge, 1999). Für die fundierte Herleitung von Optimalitätskriterien zur Maximierung der Invarianzratios und von oberen und unteren Schranken für  $\rho(\mathcal{A})$  zieht man formal die Theorie kompakter, selbstadjungierter Operatoren oder, nach der Diskretisierung, endlicher reversibler Markov-Ketten heran (z.B. Froyland & Padberg-Gehle, 2014). Diese haben theoretisch angenehme Eigenschaften wie ein reelles Spektrum. In volumenerhaltenden Systemen erhält man die entsprechende Übergangsmatrix über die Konstruktion  $R = (P + P^\top)/2$ .

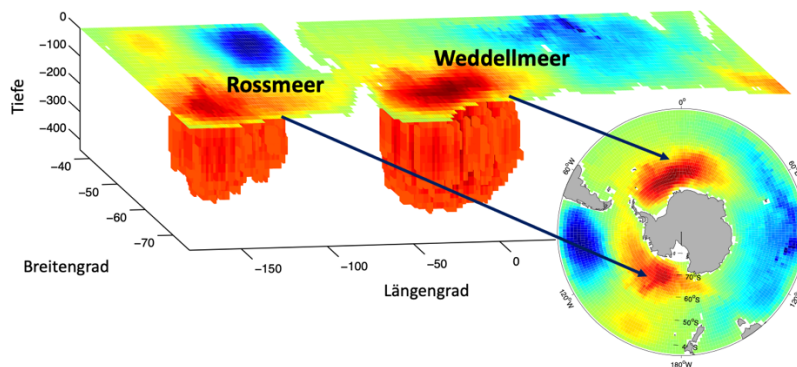
Um fast-invariante Mengen eines dynamischen Systems zu identifizieren und zu approximieren, geht man, vereinfacht beschrieben, wie folgt vor:

- Partitioniere  $M$  in eine genügend feine Kollektion zusammenhängender Mengen  $\mathcal{B} = \{B_1, \dots, B_n\}$ .
- Bestimme die Übergangsmatrizen  $P$  und  $R = (P + P^\top)/2$ .
- Berechne den zweitgrößten Eigenwert  $\lambda_2 < 1$  von  $R$  und den zugehörigen Eigenvektor  $v_2$ .
- Bilde  $A = \bigcup_{i:v_{2,i} \geq 0} B_i$  und  $A^c = \bigcup_{i:v_{2,i} < 0} B_i$  als Approximationen einer fast-invarianten Menge und ihres Komplements.

Transport kann über eine Näherung von  $\rho(A)$  mit Hilfe von  $P$  leicht quantifiziert werden. Der vorgestellte Ansatz wurde auf explizit zeitabhängige Dynamik erweitert, wo statt örtlich stationärer fast-invarianter Mengen, mobile kohärente Mengen identifiziert werden (Froyland et al., 2010). Eine Übersicht der verschiedenen Konstruktionen findet man in Froyland & Padberg-Gehle (2014). Aktuelle Ansätze arbeiten datenbasiert und ohne eine Diskretisierung des Zustandsraums. Sie betrachten, vereinfacht dargestellt, eine stochastische Irrfahrt zwischen gegebenen Bahnen (z.B. Hadjighasem et al., 2016; Banisch & Koltai, 2017; Padberg-Gehle & Schneide, 2017).

## Transport im Ozean

Als erstes Beispiel betrachten wir adjektiven Transport von passiven Partikeln im südlichen Ozean. Das zeitliche Evolutionsgesetz für die Partikelbewegung ist hierbei auf Grundlage numerisch gewonnener Trajektorien aus einem globalen dreidimensionalen Ozeanmodell gegeben (Barnier et al., 2006). Speziell untersuchen wir die Dynamik in den Monaten Januar und Februar 2004. Mit Hilfe der Eigenvektoren der Matrix  $R$  zu Eigenwerten nahe 1 können bekannte makroskopische Strukturen in den Weddell- und Rossmeeren detektiert werden (Abb. 4). Es zeigte sich, dass die approximierten Regionen optimaler - d.h. stärker fast-invariant - sind, als solche, die mittels klassischer ozeanographischer Diagnosewerkzeuge definiert wurden (Froyland et al., 2007). Interessant ist auch die dreidimensionale Struktur der Strudel, die, wie wir zeigen konnten, jahreszeitlich variiert (Dellnitz et al., 2009).



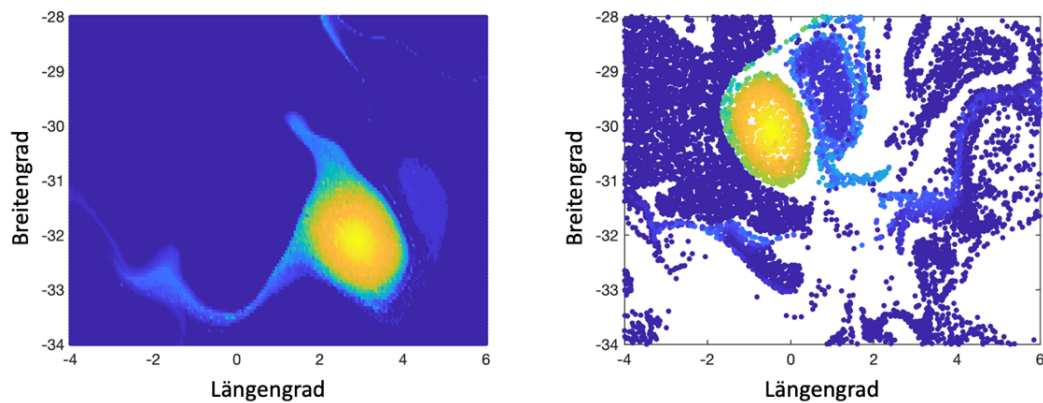
**Abb. 4:** Fast-invariante Mengen (rot) im Weddell- und Rossmeer, basierend auf einer Simulation von Teilchenbahnen über 2 Monate (1. Januar – 29. Februar 2004).

Als zweites Beispiel betrachten wir die Oberflächenströmung im südlichen Atlantik, wo die sogenannten Agulhas-Ringe gebildet werden. Dies sind mächtige Wirbel, die warmes, salziges Wasser aus dem Indischen Ozean nordwärts transportieren und einen großen Einfluss auf unser Klima haben. Die Strömungsdaten wurden auf Grundlage von Satelliten-Altimetrie-Messungen erhalten (AVISO). Mit Hilfe eines zeitabhängigen, datenbasierten Ansatzes (Padberg-Gehle & Schneide, 2017) können wir einen langlebigen Wirbel als kohärente Menge detektieren (Abb. 5).

## Zusammenfassung und Ausblick

Reale Systeme können durch mathematische dynamische Systeme modelliert werden. Deren Verhalten kann numerisch simuliert und analysiert werden. Insbesondere können Transportprozesse, die beispielsweise durch Wirbel in Meeresströmungen bestimmt werden, mit Hilfe probabilistischer Ansätze untersucht werden. Der abstrakte Transferoperator wird dabei greifbar als stochastische Matrix ähnlich der Google-Matrix, die stochastische Irrfahrten auf einem Netzwerk beschreibt. Exemplarische Anwendungen aus der Ozeandynamik machen den Beitrag der Angewandten Mathematik bei der Lösung aktueller und relevanter Probleme beispielsweise in der Klimaforschung deutlich.





**Abb. 5:** Zeitliche Evolution einer kohärenten Menge (gelb) im südlichen Atlantik über einem Zeitraum von 3 Monaten (11. November 2006–9. Februar 2007).

## Literatur

- Allshouse, M.R. & Peacock, T. (2015). Lagrangian based methods for coherent structure detection. *Chaos*, 25, 097617.
- Banisch, R. & Koltai, P. (2017). Understanding the geometry of transport: Diffusion maps for Lagrangian trajectory data unravel coherent sets. *Chaos*, 27, 035804.
- Barnier, B., et al. (2006). Impact of partial steps and momentum advection schemes in a global ocean circulation model at eddy permitting resolution. *Ocean Dynamics*, 56, 543–567, 2006.
- Dellnitz, M., Froyland, G., Horenkamp, C., Padberg-Gehle, K. & Sen Gupta, A. (2009). Seasonal variability of the subpolar gyres in the Southern Ocean: a numerical investigation based on transfer operators. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 16, 655–663.
- Dellnitz, M. & Junge, O. (1999). On the approximation of complicated dynamical behavior. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 36, 491–515.
- Froyland, G., Padberg, K., England, M. H. & Treguier, A. M. (2007). Detection of coherent oceanic structures via transfer operators. *Physical Review Letters*, 98, 224503.
- Froyland G. & Padberg-Gehle, K. (2014). Almost-invariant and finite-time coherent sets: directionality, duration, and diffusion. In W. Bahsoun et al. (Hrsg.), *Ergodic Theory, Open Dynamics, and Coherent Structures* (S. 171–216). New York: Springer.
- Froyland, G., Santitissadeekorn, N. & Monahan, A. (2010). Transport in time-dependent dynamical systems: Finite-time coherent sets. *Chaos*, 20, 043116.
- Hadjighasem, A., Farazmand, M., Blazevski, M., Froyland, G. & Haller, G. (2017). A critical comparison of Lagrangian methods for coherent structure detection. *Chaos*, 27, 053104.
- Hadjighasem, A., Karrasch, D., Teramoto, H. & Haller, G. (2016). Spectral-clustering approach to Lagrangian vortex detection, *Physical Review E*, 93, 063107.
- Padberg-Gehle, K. & Schneide, C. (2017). Network-based study of Lagrangian transport and mixing. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 24, 661–671.
- Page, L., Brin, S., Motwani, R., & Winograd, T. (1999). The PageRank Citation Ranking: Bringing Order to the Web. Technical Report. Stanford InfoLab. <http://ilpubs.stanford.edu:8090/422/1/1999-66.pdf> (29.3.2021)
- Ulam, S. M. (1960). *A collection of mathematical problems*. New York, London: Interscience Publisher.