

非線形力学系の作用素論的データ解析と動的モード分解

その基礎的事項と正定値カーネルを用いた定式化を中心として

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所／理化学研究所 革新知能統合研究センター 河原 吉伸*

YOSHINOBU KAWAHARA

INSTITUTE OF MATHEMATICS FOR INDUSTRY, KYUSHU UNIVERSITY,
AND RIKEN CENTER FOR ADVANCED INTELLIGENCE PROJECT

本稿は、非線形力学系の作用素論的データ解析の概要と、動的モード分解をはじめとした、それに関連する最近の主要な研究に関する解説である。動的モード分解の導入の内容に関しては自身による日本語の解説 [53] もあるが、本稿では、動的モード分解と作用素論的解析との関係や、正定値カーネルを用いた定式化を中心とした最近の話題、また現状での課題や展望などについても述べる。

1 はじめに

飛躍的な計測技術・情報インフラの発展を背景に、昨今では、観測/計測データを用いたデータ駆動による科学研究が様々な領域で不可欠なアプローチとなりつつある [54]。このような中で、複雑な挙動を伴う動的な現象から得られるデータの解析において、動的モード分解と呼ばれる手法がここ数年で大きく注目されている。動的モード分解は、当初は流体力学分野で提案されたデータ解析手法であるが、後に、クープマン作用素を用いた非線形力学系の解析をはじめとした作用素論的方法との関連が指摘され、最近では様々な分野における適用でその有用性が報告されている。

作用素論的方法のキーとなる考え方は、一般に非線形な系の時間発展を作用素を用いて (関数空間などの) 線形領域で表現することにより、数理的に直接扱うことが困難である非線形性を回避して系の普遍的な動力学的特性の解析を行う、というものである。ただしこの考え方自体は、特に新しいものという訳ではなく、多くの理論物理/化学分野などで用いられてきた数学的手法の一つである。例えば分子運動の記述においては、運動を大自由度力学系の集団運動として捉え、系をペロン-フロベニウス作用素により表現して解析するアプローチが古くから研究されている。しかしながら、先に述べたデータの利用性向上や動的モード分解などの推定法の発展を背景に、データから抽出される情報とこれらの数学的解析とを直接つなぐ枠組みとして、作用素論的方法はデータ科学の文脈でその重要性が近年さらに増している。

動的モード分解は、上述のようにクープマン作用素を用いた非線形力学系の解析と関連している。流体現象への適用では、その複雑な挙動の中から、時空間的な規則性を示す組織構造をデータから抽出できることで注目されている。一方で、クープマン作用素の随伴であるペロン-フロベニウス作用素は、動的な挙動を分布として捉える際に有用であることが知られており、大自由度力学系の集団運動や不確実性を伴う動的現象の解析へ利用できる。また最近では、データから推定されたこれら作用素のスペクトルを特徴量として用いることで、複雑な現象を予測する枠組みも提案されている。このように、力学系の作用素論的解析に基づく方法は、動的な現象の様々な特性をデータから抽出するアプローチとして利用でき、流体分野に限らず、様々な科学分野におけるデータ解析や工学的応用への議論が活発化している。

本稿では、このような背景から著者らが取り組む内容などを中心に、動的モード分解をはじめとした非線形力学系の作用素論的方法に関連したデータ解析について、その背景と最近の話題について概説する。ま

* E-mail: kawahara@imi.kyushu-u.ac.jp, URL: <http://jp.kawahara-lab.org/>

ず第2節では、クーブマン作用素やペロン-フロベニウス作用素を用いた力学系の表現とその応用について述べる。そして第3節において、それら作用素をデータから推定する方法について概観する。第4節では、動的モード分解の導入とそのいくつかの派生する手法について述べ、第5節では、正定値カーネルを用いた定式化について説明する。最後に、第6節において、今後の課題や、筆者らの取り組みについて言及する。

2 非線形力学系の作用素表現とその応用

まず本節では、非線形力学系のクーブマン作用素やペロン-フロベニウス作用素を用いた表現と、その応用例について概説する。クーブマン作用素を用いた非線形力学系の解析に関するより詳しい最近の解説としては、文献 [38, 37] などを参照されたい。

2.1 クーブマン作用素とスペクトル分解

ここではまず、状態空間 S (一般には実ベクトル空間の部分集合を考えることが多い) 内の (決定的な) 非線形力学系 $d\mathbf{x}/dt = f_c(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} \in S$) を考える。ただし $f_c: S \rightarrow S$ は、系の軌跡を定める写像である。今、この力学系のフロー $\mathcal{A}^\tau: S \rightarrow S$ (つまり $\mathbf{x}_{t+\tau} = \mathcal{A}^\tau(\mathbf{x}_t)$ ($\tau > 0$)) を考え、さらに、 S 上に定義されたなんらかの関数空間 $\mathcal{F}$ 内の関数 $g: S \rightarrow \mathbb{C}$ ($\in \mathcal{F}$) を考える (g は観測量と呼ばれる)。このとき、クーブマン作用素 (Koopman operator) (の半群) $\mathcal{K}^\tau: \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$ は次式により定義される [30, 38]。

$$\mathcal{K}^\tau g(\cdot) = g(\mathcal{A}^\tau(\cdot))$$

ただし、上式において $(\cdot)$ という表記は (S 上の) 関数であることを明示するために用いている。定義から $\mathcal{K}^\tau$ の線形性は容易に示される。もし f_c が連続的微分可能なら、 $\bar{\mathcal{K}}g = \lim_{\tau \rightarrow 0} (\mathcal{K}^\tau g - g)/\tau$ のように定義される $\mathcal{K}^\tau$ の無限小生成作用素を用いて、 $u(\tau, \mathbf{x}) = \mathcal{K}^\tau g(\mathbf{x})$ は一階偏微分方程式 $\partial u / \partial t = \bar{\mathcal{K}}u$ を与える [32, 28]。

系が離散時間の場合、つまりなんらかの写像 $f_d: S \rightarrow S$ を用いて $\mathbf{x}_{t+1} = f_d(\mathbf{x}_t)$ のように系が与えられる場合には、(離散時間) クーブマン作用素 $\mathcal{K}$ は、 $\mathcal{K}g(\cdot) = g(f_d(\cdot))$ のように定義される。今、作用素 $\mathcal{K}$ が点スペクトルのみを持ち固有分解可能であるとし、さらに観測量 g は作用素 $\mathcal{K}$ の固有関数 $\varphi_i: S \rightarrow \mathbb{C}$ を用いて展開できる、つまり $g(\cdot) = \sum_{i=1}^{\infty} v_i \varphi_i(\cdot)$ のように表すことができると仮定する ($v_i \in \mathbb{C}$ は展開係数)。このとき、観測量 g の時間発展は次式のように展開することができる。

$$g \circ \underbrace{f_d \circ f_d \cdots \circ f_d}_{(t-1) \text{ 個}}(\cdot) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{t-1} v_i \varphi_i(\cdot) \quad (1)$$

ただし、 $\lambda_i (\in \mathbb{C})$ は固有関数 φ_i に対応する固有値、また $\circ$ は合成を表す。式 (1) 中の各コンポーネント中で時間発展に依存する部分は λ_i のみであるため、観測量の時間発展が λ_i で決まる固有の周期性 (λ_i の位相) と減衰率 (λ_i の絶対値) を持つダイナミクスに分解されていることが分かる。

クーブマン作用素のスペクトル分解を用いた非線形力学系の解析に関する応用として重要なものの一つに、縮約理論との関係があげられる。特に、リミットサイクル振動子などの周期的な運動に近い挙動を示す系で用いられる位相縮約は、クーブマン作用素の固有関数と直接的な関係を持つ [36]。位相縮約の基本的な考え方は、系の運動が $\dot{\theta}(\mathbf{x}(t)) = \omega$ ($\omega > 0$) のように表されるように、なんらかの写像 $\theta: S \rightarrow [0, 2\pi)$ を定めて系の運動を位相変化で記述するというものである [39]。系の運動が振動子 (またはその集合) をアトラクターとして持つ場合には、漸近的に縮退せずに残る固有値 (つまり離散時間系の場合は絶対値が 1 となる固有値) に対応するクーブマン作用素の固有関数がこの変換を与える。図 1 は、Van der Pol 振動子から生

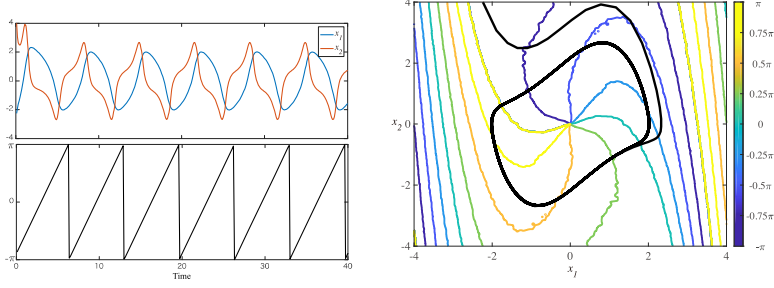


図 1: Van del Pol 振動子に対して, クープマン作用素の固有関数を介してデータから推定された位相縮約モデルの数値例. 左: 軌跡の例 (上) と対応する位相 (下). 右: 推定された各位置の位相の等位集合 (アイソクロン), 及び左図と同じ軌跡 (黒).

成したデータを用いて, 位相縮約モデルを推定した数値例である. 対応するクープマン作用素の固有関数は, Fourier 平均法 [35] を用いて推定している.¹⁾

またもう一つの重要な応用として, 力学系から得られる観測が空間的に広がりを持つ場合には, 分解 (1) は, 時空間的なコヒーレンス構造の抽出として有用であることが知られている. つまり, 式 (1) の各コンポーネント中の固有値以外の部分, つまり $v_i \varphi_i(\cdot)$ にあたる部分は, 各固有値で表される時間的変動に関する g への寄与として解釈できる. 各観測量が各空間上の点におけるなんらかの量 (例えば, 流体現象であれば流体速度や渦度など) に対応している場合には, この寄与の相対的な違いを見ることで, 各時間変動に対応する空間的な同調性を知ることができる. 流体現象の解析においては, このような空間的なコヒーレンス構造 (組織構造) を知ることは重要な課題として従来から盛んに研究されている. 第 4 節以降で詳細に述べる動的モード分解は, 分解 (1) をデータから近似的に推定する方法として注目されており, 当初はこの流体分野における組織構造を抽出するデータ解析手法として提案された経緯がある.

2.2 ペロン-フロベニウス作用素と不変集合同定

ここまで決定的な系について考えてきたが, 大自由度力学系の集団運動や不確実性のある系を扱う際など, 分布レベルでの系の記述が必要となる場面も多い. 分布レベルでの記述にも様々なアプローチがあり得るが, このような場合には, クープマン作用素の随伴であるペロン-フロベニウス作用素を用いた記述が有用である. これら作用素の存在に関する議論については, 文献 [32, 27] などを参照されたい.

ここでは, 状態空間 $\mathcal{S} (\subset \mathbb{R}^d)$ に対して測度空間 $(\mathcal{S}, \mathcal{M}, \mu)$ が与えられるとして, その上のなんらかの関数空間 $\mathcal{H}$ の点 $\rho (\in \mathcal{H})$ が定常な力学系 f_d (またはフロー A^τ) に従って時間発展をしている場合を考える. このとき, その時間発展を表すペロン-フロベニウス作用素 $\mathcal{P}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ は次のように定義することができる.

$$\int_A (\mathcal{P}\rho)(x) dx = \int_{f_d^{-1}(A)} \rho(x) dx \quad (A \in \mathcal{M})$$

例えば系が確率的な場合には, $\rho \in L^1(\mathcal{S})$ を確率密度として, また系の時間発展が遷移確率密度 $p_\tau(x_{t+1}|x_t)$ で表されるとすると, その時間発展を表すペロン-フロベニウス作用素 $\mathcal{P}: L^1(\mathcal{S}) \rightarrow L^1(\mathcal{S})$ は次式により与えられる.

$$(\mathcal{P}\rho)(\cdot) = \int p_\tau(\cdot|x) \rho(x) dx$$

¹⁾ データ生成や Fourier 平均法の近似方法については, 文献 [35] の V.A. 節の設定にしたがっている.

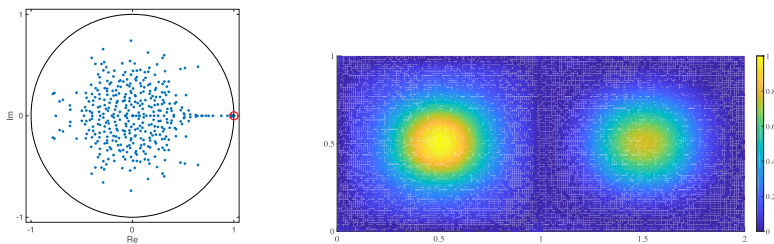


図 2: double gyre 力学系から生成したデータに対して、ペロン-フロベニウス作用素のモード分解を介して推定されたほとんど不変な集合 (AIS) の数値例。左: データから推定されたペロン-フロベニウス作用素の固有値 (赤丸は AIS に対応する固有値)。右: 推定された固有関数から得られた AIS の分布を可視化したもの。

なおこの場合、対応するクーブマン作用素は $L^\infty(S)$ 空間上の作用素 $\mathcal{K}^\tau: L^\infty(S) \rightarrow L^\infty(S)$ となる。²⁾

ペロン-フロベニウス作用素を用いた力学系解析の重要な応用の一つとしては、ほとんど不変な集合 (AIS; Almost Invariant Set), つまり一度軌跡がその集合に入ってしまうと抜け出ることが難しくなる遅い緩和を担う領域、の同定があげられる [2, 15]。このような領域は、ペロン-フロベニウス作用素の固有値のうち、絶対値が 1 に近いものを見ることで同定することができる。つまり、このような固有値に対応する固有ベクトルは、ペロン-フロベニウス作用素の作用による分布密度の減衰が他のものに比べて遅くなるためである。AIS の同定は、分子反応系や神経科学など多数の要素から構成される運動 (大自由度系) における定常状態を推定する場合などで重要となる。例えば図 2 は、double gyre 力学系から生成したデータに対して AIS を推定した数値例である。推定手順については、第 5.3 節の手順に従っている。³⁾

2.3 その他の応用

力学系の作用素表現を用いたデータ解析の応用は、上記であげたものには限らない。クーブマン作用素を用いた場合の解析については [38, 37] などを参照されたい。例えばクーブマン作用素の応用としては、縮約された位相 (振動子の角度) が等しい集合であるアイソクロンや、局所線形化に基づく安定性を一般化した等安定性との関係など、振動子などの安定多様体上の性質を議論することに用いられる [36]。またこれらを使った非線形システムの制御についても、いくつか報告が見られる [5]。

データ解析の観点からは、力学系の作用素表現のスペクトル解析を一種の特徴抽出として利用し、時系列データの予測 (教師あり学習) へ利用するための枠組みも議論されている [16]。また最近、これをさらに一般化して、力学系間の距離を定義する数理的枠組みも著者らにより提案されている [22, 23]。この枠組みの応用は様々想定されるが、例えば、時系列データが同じ生成メカニズムから得られているかを統計的に検定する場合などに利用できる [45]。

²⁾ 具体的には、対応するクーブマン作用素は、 $g \in L^\infty(S)$ を観測量として任意の $x_t \in S$ に対して次のように定義される。

$$\mathcal{K}g(x_t) = \int p_\tau(x_{t+\tau}|x_t)g(x_t)dx_{t+\tau} = E[g(X_{t+\tau})|X_t = x_t]$$

つまり、ある時刻 t における状態 x_t が与えられた際の時刻 $t+\tau$ における状態の期待値を与える。

³⁾ データは、ランダムな初期値 200 点について $T=10$ として double gyre の力学系 (cf.[15]) に従ったシミュレーションにより生成したものを用いている。なお推定においては、ここでは正定値カーネルとしてラプラス・カーネル (第 5.1 節を参照) を用いている。また分布の可視化においては、固有値 1 に対応する固有関数 $\hat{v}_j$ をグリッド上の各点で評価し絶対値をとり正規化することで行っている (ただし、厳密にはこの関数は密度関数ではない点に注意が必要である)。

3 クープマン作用素やペロン-フロベニウス作用素の推定

以降本稿では主に、有限のデータが与えられたときに、クーブマン作用素やペロン-フロベニウス作用素に関する情報を抽出する問題を考える。そのため、特定の τ に対するクーブマン作用素 K^τ 、または (離散時間) クーブマン作用素 K を特に区別せず K と用いる。対応する力学系は f として表記し、これを離散時間の場合は f_d 、連続時間の場合はフロー A^τ として解釈する。

上記でも述べたように、力学系の作用素表現を用いた場合の重要な解析の一つは、そのスペクトル分解を介したものである。このような問題に対しては、クーブマン作用素に対しては、以降で議論する動的モード分解⁴⁾をはじめ、Galerkin 法 [14] や調和平均法 [6, 36]、クリロフ部分空間法、遅延座標埋め込み、状態空間分割など、様々な原理に基づいたアプローチが提案されている。

また一方で、ペロン-フロベニウス作用素の推定に関してもこれまでいくつかの方法が提案されており、古くは GAIO (Global Analysis of Invariant Objects) のような有名な toolbox など存在する [11, 10]。その他の代表的なものとしては、Ulam 法 [15] や、マルコフ過程を用いた推定法 [2] などあり、Galerkin 法なども適用可能である [12, 27]。

本稿ではこれら異なる手法の特性などについての議論は行わないが、動的モード分解は、比較的単純な原理で安定した計算を行える特徴があり、近年その主要なアプローチとなっている。

4 動的モード分解とその周辺

冒頭でも述べたように、動的モード分解は当初、流体力学分野において数値解析手法の一つとして提案されたものである [42, 43]。しかしその後、応用数学分野などで議論される非線形力学系の作用素論的解析との関連も知られるようになり、流体力学に限らず広く科学・工学分野へ応用されるようになっていく。ここでは、動的モード分解、及びその作用素論的解析との関係の概要について述べ、動的モード分解の代表的な拡張に関して紹介する。

4.1 動的モード分解

ここではまず、一般によく用いられる動的モード分解 (厳密 DMD [50]) の手順について述べる。データとして、 $\mathbf{x}_2 = f(\mathbf{x}_1)$ 、 $\mathbf{y} = g(\mathbf{x})$ と考えられるペアの集合 $\{(\mathbf{y}_{1,i}, \mathbf{y}_{2,i})\}_{i=1}^n$ が与えられたとする。例えば、この系から生成したと想定される有限長 T の時系列データ $\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T$ が与えられる場合には、 $(\mathbf{y}_{t-1}, \mathbf{y}_t)$ ($t = 1, \dots, T$) のようにペアを構成して用いる。このとき、厳密 DMD の手順は次のように与えられる。

1. 2つの行列 $Y_1 := [\mathbf{y}_{1,1}, \mathbf{y}_{1,2}, \dots, \mathbf{y}_{1,n}]$ と $Y_2 := [\mathbf{y}_{2,1}, \mathbf{y}_{2,2}, \dots, \mathbf{y}_{2,n}]$ を構成する。
2. Y_1 の (打ち切り) 特異値分解 $Y_1 \approx USV^H$ を計算する ($\bullet^H$ はエルミート転置、採用ランクを r とする)。
3. 行列 $\tilde{A} := U^H Y_2 V S^{-1}$ の固有値 $\hat{\lambda}_j$ と固有ベクトル $\hat{\mathbf{v}}_j$ を計算する ($j = 1, 2, \dots, r$)。
4. $\hat{\mathbf{v}}_j = Y_2 V S^{-1} \hat{\mathbf{v}}_j$ (動的モード) と対応する固有値 $\hat{\lambda}_j$ を得る ($\hat{V} := [\hat{\mathbf{v}}_1, \hat{\mathbf{v}}_2, \dots, \hat{\mathbf{v}}_r]$ とおく)。

この手順から分かるように、動的モード分解は比較的容易に実装が可能である。なおこの手順は、 $\|Y_2 - AY_1\|_F$ の最小二乗解 $\hat{A}$ の固有値と固有ベクトルを計算していることに相当するが、主要な固有値のみが得られれば十分であるので、直接 $\hat{A}$ の固有値分解を計算する代わりに、これを U を用いて射影した行列 $\tilde{A} := U^H A U$

⁴⁾ 「動的モード分解」と呼ばれる手法の定義はあまり明確ではないが、ここでは、データからクーブマン作用素のスペクトル分解を近似するための一連の手法として話を進める。

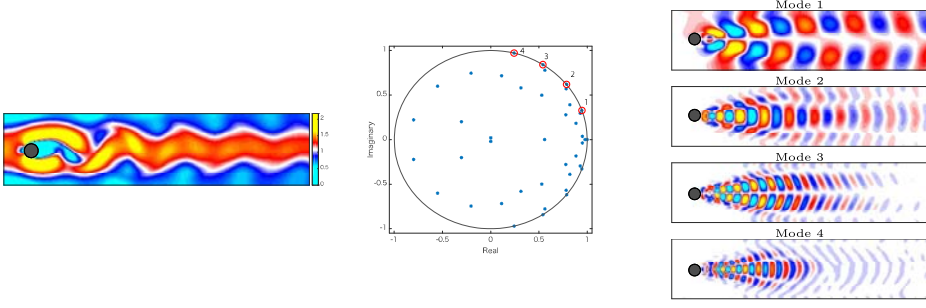


図 3: 円柱周りの 2 次元流体のシミュレーションデータに対する動的モード分解の数値例. (左) スナップショットの例, (中) 推定された固有値, (右) 代表的な推定された動的モード (丸印の固有値に各々対応).

の固有値分解を計算している. なお, U は直交行列であるので, これらの固有値分解で得られる最初の r 個の固有値は同等である. 一般に, DMD は高次元なデータに対して適用されることが多いため, 行列 $\hat{A}$ も高次元になり固有値計算などが困難になるため, 上記のような計算がよく用いられる訳である.

そして計算された動的モードとその固有値を用いて, 各時刻のサンプルは次のように分解される.

$$\mathbf{y}_t = \sum_{j=1}^r \hat{\lambda}_j^{t-1} z_j \hat{\mathbf{v}}_j \quad (2)$$

ただし, $\mathbf{z} := [z_1, z_2, \dots, z_r]^T$ は $\mathbf{y}_{1,1} = \hat{V}\mathbf{z}$ を満たす定数である. 今, m 個の関数 g_i ($i = 1, \dots, m$) が⁵⁾ 第 2.1 節で述べた関数空間 $\mathcal{F}$ 内の要素であるとし, $\mathbf{g} := [g_1, g_2, \dots, g_m]^T$ とおく. そして, 動的モード分解で用いた各サンプル $\mathbf{y}$ は, このベクトル値関数 $\mathbf{g}$ の実現値, つまり $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ であるとみなすとする. このとき, 分解 (2) は, 分解 (1) の有限データによる近似を与えていることが分かる. 実際, 一定の数学的仮定の下で, 上記の動的モード分解により推定される固有値が, 内在する真のクープマン作用素のスペクトルの情報を捉えることができることも知られている [31].

なお, 推定した固有値 $\hat{\lambda}_j$ が固有の周期性と減衰率を持つ要素に分解されていることは式 (1) と同様であるが, 動的モード $\hat{\mathbf{v}}_j$ は, これらのダイナミクスがどのように各観測量 g_i へ相対的な重みで寄与するか, つまりある種の空間的なコヒーレンス (協調性) 構造の情報を与えていることが分かる. 例えば流体現象においては, データから空間的な組織構造を抽出する目的などに利用できる [7, 38, 47]. 図 3 は, レイノルズ数を 100 とした場合の 2 次元円柱まわりの流れのシミュレーション・データを用いた数値例である.⁵⁾ データのみから, カルマン渦に現れる特徴的な空間パターンが抽出できていることが確認できる.

この動的モードに関するコヒーレンスという視点は応用的に重要であり, 流体のみではなく, 脳科学や感染病伝播, 経済学など, 多くの分野でこの特徴量を用いた解析が研究されている [4, 41, 34, 19]. また, このコヒーレンスをデータの特徴として予測 (教師あり/なし学習) に用いるための枠組みも著者らにより提案されており [16, 3], いくつかの応用場面においても有用であることが確認されている [18, 44].

4.2 動的モード分解のタイプや拡張

上記の動的モード分解の手順は, より正確には厳密動的モード分解 (exact DMD) と呼ばれるものである. 上述のように, 動的モード分解では特異値分解を利用した計算がよく用いられるが (Schmid 型や SVD-based DMD などとも呼ばれる), 大規模な適用などではいわゆるクリロフ部分空間法を用いた方法も有用である [42, 21]. またその他, 動的モード分解を数理最適化問題として定式化してより正確に計算を行う最適化

⁵⁾ データは, ソフトウェア COMSOL を用いたシミュレーションにより生成したものをを用いている.

DMD[8] や、動的モード分解に対応する確率モデルに基づいた定式化 [48] など提案されている。これらの方法の利点としては、動的モード分解へ制約や事前情報を柔軟に取り込みを可能とすることがあげられる。

一方で、動的モード分解の適用においては、近接した無数の固有値を持つ動的モードが推定され、どのモードが重要なのか判断が困難になる問題点がある。このような場合には、 ℓ_1 -正則化を用いたスパース推定による定式化 (sparsity-promoting DMD) [24] が提案されている。上述の確率的定式化においても、スパース事前分布を導入するなどして同様の推定を行うことが可能である。

また動的モード分解は、利用可能な (有限の) 観測量 g_i を用いて、その背後にある力学系に対応するクーブマン作用素のスペクトルを (近似的に) 計算する手法である。従って、その観測量で張られる関数空間が十分に大きくない場合には、その近似も十分なものであることが期待できない。実用的には、流体現象の解析のように超高次元データを用いる場合には、各観測 (流体のように空間的広がりを持つ際には各グリッド格子における観測) が g_i に対応すると考えると m が大きくなるため、実用的にはこの点はあまり問題にならないようである。しかし低次元の観測データの場合のように、これが期待できない場合には、基底を慎重に選択したり、なんらかの数理的操作でクーブマン作用素の主要なスペクトルを捉える方策を考える必要がある。例えば、Williams らは代数的に特徴関数を準備して観測量を人工的に増やし DMD を適用する拡張 DMD を提案している [51]。また一般的には、遅延座標により、同様に観測量を増やし DMD を適用するハンケル DMD もよく用いられる [1]。後述の再生カーネルを用いた定式化も、このように観測量の空間を数理的操作で拡張する方法の一つとして捉えられる。また最近、特徴関数を不変部分集合の学習としてニューラルネットを用いて推定する方法も提案されている [49, 33, 52]。

その他、様々な観点から多くの拡張が提案されている。例えば、計算のロバスト化を目的として評価関数として総最小二乗誤差を利用した TLS-DMD [9] や、再帰的計算や乱択計算を用いて大規模実装のための計算効率化を行う手法も提案されている [40, 13]。また、データに教師信号がある際に、これを利用して各ラベルの特徴を持つ解析を行うための教師あり DMD [17] や、データが高階な場合へ適用可能なテンソル DMD [26] など提案されている。

5 正定値カーネルを用いた定式化

ここでは、作用素論的解析や動的モード分解の正定値カーネルを用いた定式化について述べる。正定値カーネルを用いたデータ解析自体は、機械学習分野では 2000 年代頃から盛んに研究されてきた枠組みであるが、作用素論的解析における適用を考えることで数理的、応用的な様々な拡張性や利得が得られる。ここでは、これらについて概観するとともに、ごく最近の著者らの研究についてもふれたい。

5.1 正定値カーネルを用いたデータ解析の概要

本節では、本稿で必要な範囲で再生核ヒルベルト空間 (RKHS) を用いたデータ解析について述べる。⁶⁾

まず、 $\mathcal{X}$ ($\mathbb{R}^d$ の場合が多い) をなんらかの集合とすると、次の 2 つの条件を満たす 2 引数の関数 $k: \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ を正定値カーネルという。⁷⁾

- 任意の $x, y \in \mathcal{X}$ に対して $k(x, y) = k(y, x)$ (対称性)
- 任意の $n \in \mathbb{N}$, $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathcal{X}$, $c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{R}$ に対して $\sum_{i,j=1}^n c_i c_j k(x_i, x_j) \geq 0$ (正定性)

⁶⁾ RKHS を用いたデータ解析の詳細については、日本語の書籍 [55] をはじめ多数出版されているので適宜参考にされたい。

⁷⁾ 必ずしも実数値関数でなくてもよいが、ここでは簡単のため実数値関数に限定して話を進める。

対称性の下では、正定性の条件は、 $k(x_i, x_j)$ を (i, j) 成分に持つ $(n \times n)$ 行列 (グラム行列と呼ばれる) が半正定値行列となることと同意である。代表的な例としては、ガウス RBF カーネル $k(x, y) = \exp(-\|x - y\|^2 / (2\sigma^2))$ ($\sigma > 0$) やラプラスカーネル $k(x, y) = \exp(-\alpha|x - y|)$ ($\alpha > 0$)、多項式カーネル $k(x, y) = (x^T y + c)^d$ ($c \geq 0, d \in \mathbb{N}$) などがあげられる。

正定値カーネルが与えられると、それに付随して RKHS と呼ばれるヒルベルト空間が唯一定まる (Moore-Aronszajn の定理)。より具体的には、正定値カーネル k により定まる RKHS を $\mathcal{H}_k$ とすると、 $\phi_k(x) := k(x, \cdot)$ で定められる特徴写像により、(1) $\mathcal{H}_k = \overline{\text{span}(\phi_k(\mathcal{X}))}$ 、(2) $\langle \phi_k(x), \phi_k(y) \rangle_{\mathcal{H}_k} = k(x, y)$ という 2 つの条件で特徴付けられる。ただし、 $\overline{(\cdot)}$ は閉包を表し、 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_k}$ は $\mathcal{H}_k$ における内積を表す。RKHS の 1 つの重要な性質としては、再生性があげられる。つまり、RKHS 上の関数 $g \in \mathcal{H}_k$ は、その関数値を $g(x) = \langle g, \phi_k(x) \rangle_{\mathcal{H}_k}$ のように評価することができる。

今、有限のデータ $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ ($\in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$) が与えられたとき、ある RKHS 内の任意の関数 $g \in \mathcal{H}_k$ に対して $g(y)$ を $g(x)$ で回帰する下記の問題を考える。

$$\min_{A \in \mathcal{D}(\mathcal{A})} \sum_{i=1}^n |\tilde{g}(y_i) - A\tilde{g}(x_i)|^2$$

ただし $\tilde{g}(y_i) = g(y_i) - \sum_{i=1}^n g(y_i)$ 、 $\tilde{g}(x_i) = g(x_i) - \sum_{i=1}^n g(x_i)$ である。また $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ は $\mathcal{A}$ のドメインで、ここでは H を $\{\phi(x_i)\}_{i=1}^n$ の張る $\mathcal{H}_k$ の部分空間として $\mathcal{A}: \mathcal{H}_k \rightarrow H$ であるとする。このとき、一定の仮定の下で上記問題の最適解は以下のように与えられる。

$$\hat{\mathcal{A}} = \Phi(Y)(\Phi(X)^T \Phi(X) + n\epsilon I_n)^{-1} \Phi(X)^T$$

ただし、 $\Phi(X) := [\phi_k(x_1), \dots, \phi_k(x_n)]$ 、 $\Phi(Y) := [\phi_k(y_1), \dots, \phi_k(y_n)]$ であり、 ϵ は十分に小さな正実数である。なお、ここでは有限のデータを用いた場合について考えたが、上式 $\hat{\mathcal{A}}$ は、 g の入力を確率変数として考えた場合には、条件付き平均埋め込みの経験推定と同様のものである [46, 55]。

5.2 再生核ヒルベルト空間上のペロン-フロベニウス作用素

今、集合 $\mathcal{X}$ 上の正定値カーネル k を固定し、その対応する特徴写像を ϕ_k 、再生核ヒルベルト空間を $\mathcal{H}_k$ と各々表す。また、 $\mathcal{X}$ の任意の部分集合 $\mathcal{N} \subset \mathcal{X}$ に対して、 $\mathcal{H}_k$ の閉部分集合 $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ を $\mathcal{H}_{\mathcal{N}} := \overline{\text{span}(\phi_k(\mathcal{N}))}$ のように定義する。このとき、離散時間力学系 (またはフロー) $f: \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{N}$ に対して、線形作用素 $\mathcal{P}: \mathcal{H}_{\mathcal{N}} \rightarrow \mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ が RKHS 上のペロン-フロベニウス作用素であるとは、任意の $x \in \mathcal{N}$ について $\phi_k(x) \in \mathcal{D}(\mathcal{P})$ であり、

$$\mathcal{P}\phi_k(x) = \phi_k(f_d(x)) \quad (3)$$

が成り立つこととして定義される [25]。ただし $\mathcal{D}(\mathcal{P})$ は $\mathcal{P}$ の定義域である。この定義域は $\text{span}(\phi_k(\mathcal{N}))$ を含み、特に $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ で稠密である。従って、 $\mathcal{P}$ は随伴作用素 $\mathcal{P}^*: \mathcal{H}_{\mathcal{N}} \rightarrow \mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ を持つ。なお、RKHS 上のペロン-フロベニウス作用素は、クープマン作用素の共役と同等なものになっている [22]。より具体的には、 $\tilde{\mathcal{H}}$ をカーネル関数を $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ へ制限した場合の RKHS とすると、線形写像 $r: \mathcal{H}_k \rightarrow \tilde{\mathcal{H}}$ は同型で次式が成り立つことが示せる。

$$\mathcal{P}^* = r\mathcal{K}r^{-1}$$

ただし、 $\mathcal{K}$ の定義域は $\mathcal{D}(\mathcal{K}) := \{h \in \tilde{\mathcal{H}} | h \circ f \in \tilde{\mathcal{H}}\}$ のようになる。

5.3 再生核ヒルベルト空間上でのモード分解

以上の準備のもと、 $\mathbf{x}_2 = f(\mathbf{x}_1)$ と想定されるペアの集合 $\{(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{x}_{2,i})\}_{i=1}^n$ が与えられたとして、正定値カーネルを用いたペロン-フロベニウス作用素のモード分解の手順は次のようになる。⁸⁾ 第 4.1 節の場合と同様、有限長の時系列データ $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T$ が与えられる場合には、 $(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t)$ ($t = 1, \dots, T$) のようにペアを構成して用いる。以下では $\Phi_1 := [\phi_k(\mathbf{x}_{1,1}), \dots, \phi_k(\mathbf{x}_{1,n})]$ 、 $\Phi_2 := [\phi_k(\mathbf{x}_{2,1}), \dots, \phi_k(\mathbf{x}_{2,n})]$ としている。

1. グラム行列 $G_1 := \Phi_1^T \Phi_1$ 、 $G_{12} := \Phi_1^T \Phi_2$ を計算する。
2. 中心化グラム行列 $\bar{G} = H G_1 H$ (H は中心化行列) の (打ち切り) 固有値分解 $\bar{G} \approx \bar{B} \bar{S} \bar{B}$ を計算する (採用ランクを r とする)。
3. 行列 $\bar{A} := \bar{S}^{-1/2} \bar{B}^H H G_{12} (G_1 + \epsilon n I)^{-1} G_1 H \bar{B} \bar{S}^{-1/2}$ の固有値 $\hat{\lambda}_j$ と固有ベクトル $\hat{\mathbf{v}}_j$ を計算する ($j = 1, 2, \dots, r$)。
4. 固有値 $\hat{\lambda}_j$ に対応する固有関数 $\hat{v}_j = \Phi_1 H \bar{B} \bar{S}^{-1/2} \hat{\mathbf{v}}_j$ を得る。

上記の手順において、ステップ 1~2 はカーネル主成分分析の計算であり、ステップ 3 で計算される行列 $\bar{A}$ は、第 5.1 節で述べたような回帰問題の解を求めた主成分方向に射影して得られるものであることに注意する。なお、第 2.2 節で示した数値例は、上記の手順により得られた固有値 $\hat{\lambda}_j = 1$ に対応する固有関数 $\hat{v}_j$ を用いて AIS を可視化したものである。

5.4 拡張的な定式化やその他の方法

系が確率的であると限定した場合に、カーネル平均埋め込みを用いてクープマン作用素やペロン-フロベニウス作用素を扱う枠組みについては、S. Klus らにより近年まとまった論文 [29] が報告されている。より一般の場合に、同じくカーネル平均埋め込みを用いた理論的枠組みや、クリロフ部分空間法を用いた推定法についても著者らにより提案されている [21]。

一方で、複数の力学系間の関係に関する動力学的特性の解析は、多くの科学分野で重要な研究課題の一つである。C*代数の一つである行列環と RKHS 理論の拡張を用いて、このような対象の相互作用に関して、その作用素表現とそのスペクトル解析を行う数理的枠組みが著者らにより最近提案されている [20]。また上述のように、RKHS 上のペロン-フロベニウス作用素を用いた表現を介して、力学系の動力学的特性に基づく距離をデータから計算する枠組みも提案されている [22, 23]。

6 最後に

本稿では、非線形力学系の作用素論的データ解析の概要と、動的モード分解を中心としたそれに関連する最近の主要な研究について解説してきた。これらの方法は、多くの科学分野で成功裏に用いられるようになってきた一方で、数理的・技術的な課題も多く存在する。例えば、動的モード分解では、クープマン作用素の点スペクトルの情報のみが抽出される。しかしながら、自然界では、徐々に周期性が変わる系や、異なるスケールのダイナミクスが互いに影響し合い相互作用する系など、このような仮定が成り立たないものが多い。点スペクトル以外、つまり連続なスペクトルを扱うための数学的に厳密な枠組みの構築は、データ駆動によるダイナミクス解析にとって今後より重要となることは想像に難くない。一方で、述べてき

⁸⁾ 文献 [25] に書かれた手順を少し改変したものとなっている。

ような作用素論的解析は、シミュレーションや(学習の文脈での)予測のための利用や、ニューラルネットワークをはじめとした機械学習モデルにおける学習機構の解析などにも今後利用されていくことも予想される。

これらを含むデータ駆動による作用素論的解析の理論的・技術的課題の解決や、さらなる発展的内容や応用を議論するプロジェクトとして、JST CREST「数学・数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会課題解決に向けた展開」領域において、2019年10月から、本著者を代表として「作用素論的データ解析に基づく複雑ダイナミクス計算基盤の創出」(課題名)が開始されている。本課題における研究経過にも是非注目してほしい。⁹⁾

最後に、本稿で紹介した自身らによる研究の一部は、日本学術振興会による科学研究費補助金(課題番号JP18H03287)、及び科学技術振興機構CREST「数学・数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会課題解決に向けた展開」領域(課題番号JPMJCR1913)の助成により行われたものである。

参 考 文 献

- [1] Hassan Arbabi and Igor Mezić. Ergodic theory, dynamic mode decomposition, and computation of spectral properties of the Koopman operator. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 16(4):2096–2126, 2017.
- [2] L. Billings and I.B. Schwartz. Identifying almost invariant sets in stochastic dynamical systems. *Chaos*, 18(2), 2008.
- [3] T. Bito, M. Hiraoka, and Y. Kawahara. Learning with coherence patterns in multivariate time-series data via dynamic mode decomposition. In *Proc. of the 2019 Int'l Joint Conf. on Neural Networks (IJCNN'19)*, number 19278, 2019.
- [4] B.W. Brunton, J.A. Johnson, J.G. Ojemann, and J.N. Kutz. Extracting spatial-temporal coherent patterns in large-scale neural recordings using dynamic mode decomposition. *J. of Neuroscience Methods*, 258:1–15, 2016.
- [5] S.L. Brunton, B.W. Brunton, J.L. Proctor, and J.N. Kutz. Koopman invariant subspaces and finite linear representations of nonlinear dynamical systems for control. *PLoS ONE*, 11(2):e0150171, 2016.
- [6] M. Budisić, R. Mohr, and I. Mezić. Applied koopmanism. *Chaos*, 22:047510, 2012.
- [7] B.J. Cantwell. Organized motion in turbulent flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 13:457–515, 1981.
- [8] K.K. Chen, J.H. Tu, and C.W. Rowley. Variants of dynamic mode decomposition: Boundary condition, koopman, and fourier analyses. *Journal of Nonlinear Science*, 22:887–915, 2012.
- [9] S.T. Dawson, M.S. Hemati, M.O. Williams, and C.W. Rowley. Characterizing and correcting for the effect of sensor noise in the dynamic mode decomposition. *Experiments in Fluids*, 57(3):42, 2016.
- [10] M. Dellnitz, G. Froyland, and O. Junge. *The algorithms behind GAIO – Set oriented numerical methods for dynamical systems*, pages 145–174. Springer, 2000.
- [11] M. Dellnitz, A. Hohmann, O. Junge, and M. Rumpf. Exploring invariant sets and invariant measures. *Chaos*, 7:221, 1997.
- [12] J. Ding, Q. Du, and T. Li. High order approximation of the Frobenius-Perron operator. *Applied Mathematics and Computation*, 53:151–171, 1993.
- [13] N.B. Erichson and C. Donovan. Randomized low-rank dynamic mode decomposition for motion detection. *Computer Vision and Image Understanding*, 146:40–50, 2016.
- [14] G. Froyland, G. A. Gottwald, and A. Hammerlindl. A computational method to extract macroscopic variables and their dynamics in multiscale systems. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 13(4):1816–1846, 2014.
- [15] G. Froyland and K. Padberg. Almost-invariant sets and invariant manifolds connecting probabilistic and geometric descriptions of coherent structures in flows. *Physica D*, 238:1507, 2009.
- [16] K. Fujii, Y. Inaba, and Y. Kawahara. Koopman spectral kernels for comparing complex dynamics: Application to multiagent sport plays. In *Proc. of the 2017 European Conf. on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML-PKDD'17)*, pages 127–139, 2017.
- [17] K. Fujii and Y. Kawahara. Supervised dynamic mode decomposition via multitask learning. *Pattern Recognition Letters*, 122:7–13, 2019.
- [18] K. Fujii, N. Takeishi, M. Hojo, Y. Inaba, and Y. Kawahara. Physically-interpretable classification of biological network dynamics for complex collective motions. *Scientific Reports*, 10:3005, 2020.
- [19] K. Fujii, N. Takeishi, B. Kibushi, M. Kouzaki, and Y. Kawahara. Data-driven spectral analysis for coordinative structures in periodic human locomotion. *Scientific Reports*, 9:16755, 2019.
- [20] Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, F. Komura, T. Katsura, and Y. Kawahara. Analysis via orthonormal systems in reproducing kernel hilbert C^* -modules and applications. arXiv:2003.00738, 2020.
- [21] Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, Y. Matsuo, and Y. Kawahara. Krylov subspace method for nonlinear dynamical systems with random noise. arXiv:1909.03634, 2019.

⁹⁾本 CREST 課題の情報は <http://jp.comput-dynamics.org/> をご参照ください。

- [22] I. Ishikawa, K. Fujii, M. Ikeda, Y. Hashimoto, and Y. Kawahara. Metric on nonlinear dynamical systems with Perron-Frobenius operators. In *Advances in Neural Information Processing Systems 31*, pages 2856–2866. 2018.
- [23] I. Ishikawa, A. Tanaka, M. Ikeda, and Y. Kawahara. Metric on random dynamical systems with vector-valued reproducing kernel hilbert spaces. arXiv:1906.06957, 2019.
- [24] M.R. Jovanović, P.J. Schmid, and J.W. Nichols. Sparsity-promoting dynamic mode decomposition. *Physics of Fluids*, 26:024103, 2014.
- [25] Y. Kawahara. Dynamic mode decomposition with reproducing kernels for Koopman spectral analysis. In *Advances in Neural Information Processing Systems 29*, pages 911–919. 2016.
- [26] S. Klus, P. Gelß, S. Peitz, and C. Schütte. Tensor-based dynamic mode decomposition. *Nonlinearity*, 31:3359, 2018.
- [27] S. Klus, P.e.t. Koltai, and C. Schütte. On the numerical approximation of the Perron-Frobenius and Koopman operator. *Journal of Computational Dynamics*, 3(1):51–79, 2016.
- [28] S. Klus, F. Nüske, S. Peitz, J.-H. Niemann, C. Clementi, and C. Schütte. Data-driven approximation of the Koopman generator: Model reduction, system identification, and control. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 406:132416, 2020.
- [29] S. Klus, I. Schuster, and K. Muandet. Eigendecompositions of transfer operators in reproducing kernel Hilbert spaces. *Journal of Nonlinear Science*, 30:283–315, 2020.
- [30] B. Koopman. Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 17(5):315–318, 1931.
- [31] M. Korda and I. Mezić. On convergence of extended dynamic mode decomposition to the koopman operator. *J. of Nonlinear Science*, 28(2):687–710, 2018.
- [32] A. Lasota and M.C. Mackey. *Chaos, fractals, and noise: Stochastic aspects of dynamics*, volume 97 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, 2nd edition, 1994.
- [33] B. Lusch, J.N. Kutz, and S.L. Brunton. Deep learning for universal linear embeddings of nonlinear dynamics. *Nature Communications*, 9:4950, 2018.
- [34] J. Mann and J.N. Kutz. Dynamic mode decomposition for financial trading strategies. *Quantitative Finance*, 16(11):1643–1655, 2016.
- [35] A. Mauroy and I. Mezić. Global computation of phase-amplitude reduction for limit-cycle dynamics. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 28:073108, 2018.
- [36] A. Mauroy, I. Mezić, and J. Moehlis. Isostables, isochrons, and koopman spectrum for the action-angle representation of stable fixed point dynamics. *Physica D*, 261:19–30, 2013.
- [37] A. Mauroy, I. Mezić, and Y. Susuki. *The Koopman Operator in Systems and Control: Concepts, Methodologies, and Applications*. Springer, 2020.
- [38] I. Mezić. Analysis of fluid flows via spectral properties of the koopman operator. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 45:357–378, 2013.
- [39] H. Nakao. Phase reduction approach to synchronisation of nonlinear oscillators. *Contemp. Phys.*, 57(2):188–214, 2016.
- [40] B.R. Noack, W. Stankiewicz, M. Morzyński, and P.J. Schmid. Recursive dynamic mode decomposition of transient and post-transient wake flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 809:843–872, 2016.
- [41] J.L. Proctor and P.A. Eckhoff. Discovering dynamic patterns from infectious disease data using dynamic mode decomposition. *International Health*, 7(2):139–145, 2015.
- [42] C.W. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, and D.S. Henningson. Spectral analysis of nonlinear flows. *J. of Fluid Mechanics*, 641:115–127, 2009.
- [43] P.J. Schmid. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data. *J. Fluid Mechanics*, 656:5–28, 2010.
- [44] H. Shiraishi, Y. Kawahara, R. Fukuma, O. Yamashita, S. Yamamoto, Y. Saitoh, H. Kishima, and T. Yanagisawa. Neural decoding of ECoG signals using dynamic mode decomposition. *Journal of Neural Engineering*, in press.
- [45] F. Solowjow, D. Baumann, C. Fiedler, A. Jocham, T. Seel, and S. Trimpe. A kernel two-sample test for dynamical systems. arXiv:2004.11098, 2020.
- [46] L. Song, J. Huang, A. Smola, and K. Fukumizu. Hilbert space embeddings of conditional distributions with applications to dynamical systems. In *Proc. of the 26th Int’l Conf. on Machine Learning (ICML’09)*, pages 961–968.
- [47] K. Taira, S.L. Brunton, S.T.M. Dawson, C.W. Rowley, T. Colonius, B.J. McKeon, O.T. Schmidt, S. Gordyeyev, V. Theofilis, and L.S. Ukeiley. Modal analysis of fluid flows: An overview. *AIAA Journal*, 55(12):4013–4041, 2017.
- [48] N. Takeishi, Y. Kawahara, Y. Tabei, and T. Yairi. Bayesian dynamic mode decomposition. In *Proc. of the 26th Int’l Joint Conf. on Artificial Intelligence (IJCAI’17)*, pages 2814–2821, 2017.
- [49] N. Takeishi, Y. Kawahara, and T. Yairi. Learning koopman invariant subspaces for dynamic mode decomposition. In *Advances in Neural Information Processing Systems 30*, pages 1130–1140. 2017.
- [50] J.H. Tu, C.W. Rowley, D.M. Luchtenburg, S.T. Brunton, and J.N. Kutz. On dynamic mode decomposition: Theory and applications. *J. of Computational Dynamics*, 1(2):391–421, 2014.
- [51] M.O. Williams, I.G. Kevrekidis, and C.W. Rowley. A data-driven approximation of the koopman operator: Extending dynamic mode decomposition. *J. of Nonlinear Science*, 25:1307–1346, 2015.
- [52] E. Yeung, S. Kundu, and N. Hodas. Learning deep neural network representations for Koopman operators of nonlinear dynamical systems. In *Proc. of the 2019 American Control Conference (ACC’19)*, pages 4832–4839.
- [53] 河原吉伸. 非線形力学系のデータ駆動モデリング (特集 ディープラーニングから物理へ). *パリティ*, 33(8):18–20, 2018.
- [54] 河原吉伸. データ科学と AI (特集: AI 時代の数理). *数理科学* 2020 年 7 月号, 2020.
- [55] 福水健次. *カーネル法入門：正定値カーネルによるデータ解析*. 朝倉書店, 2010.