

研究終了報告書

「データ解析を見据えた Koopman 作用素の包括的な理論研究」

研究期間：2020年11月～2023年3月

研究者：石川 勲

1. 研究のねらい

本研究はデータ解析への応用を見据えた Koopman 作用素の体系を現代解析学の諸分野の視点を取り込むことで深化させ、非線形力学系におけるデータ解析に柔軟かつ強力な方法論を提示し、データ駆動的な非線形力学の解析に新たな方法論を提示することを目指す。

Koopman 作用素とは力学系を関数空間に引き戻すことことで定義される関数空間上における線形作用素である。力学系は様々な科学的現象を表現できる数理モデルであり、その統一的な解析は非常に重要な問題である。ところが、ここで現れる力学系は一般に非線形であり、直接的に取り扱うのは非常に難しい。Koopman 作用素はそのような非線形な対象を線形な対象として焼き直すことができ、その複雑な挙動の裏に潜む規則性を捉える有効なアプローチとすることができる。Koopman 作用素は関数空間を1つ選択することで初めて定義できるため、Koopman 作用素の理論的な性質は関数空間の数学的な構造や性質に本質的に依存している。ところが、国内外における Koopman 作用素の理論には応用物理や工学からの要請から発展した経緯があり、数値実験とその物理的な解釈が主流であった。そのため、現状の Koopman 作用素の理論では、関数空間論による数学的に厳密な取り扱いが不十分であった側面があり、数学的な側面からのより深い考察と研究を行う必要があった。

本研究における第一のねらいは、Koopman 作用素の線形作用素としての基本的な性質（有界性やコンパクト性）が元の力学系の性質にどのように反映されるのかを最新の関数空間論を導入して考察することである。考察する関数空間としては、再生核 Hilbert 空間 (RKHS) と Morrey 空間を採用する。RKHS は統計などの分野でも応用されており、数値計算と相性が良いことが知られている。そこで、Koopman 作用素の理論を RKHS 上で展開することが有用なのかどうかを数学的に評価する。Morrey 空間は基礎数学における実解析の分野でも重要であり、この関数空間そのものに関する数学的な研究も多くある。そこで、この関数空間で Koopman 作用素の理論が展開できるかを考察する。

本研究の第2のねらいは、Koopman 作用素から定まる数学的な不変量として重要なスペクトルを解析するために一般化スペクトル理論を導入し、一般化スペクトルの理論的に解析と計算アルゴリズムを研究する。Koopman 作用素のスペクトルは力学系の大域的な情報を持っていると考えられており、この性質を理論的に解明し、具体的な計算手法を考案する必要がある。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究において提案していた研究は大別して次の2つ「A:関数空間論的視点からの考察」と「B:一般化スペクトルの計算手法の確立」である。Aについては、Koopman作用素の性質と力学系の関係性の解明を次の3つの関数空間で行う予定であった: (A-1) ユークリッド空間における非解析的シフト不変カーネルに付随する RKHS、(A-2) コンパクトリー群上の RKHS、そして、(A-3) Morrey 空間。Bについては、(B-1)シフト写像の一般化スペクトルの計算手法の確立、および、(B-2)より広い関数空間のクラスにおける一般化スペクトルの計算手法の確立、そして、(B-3)一般化スペクトルのデータ駆動的な計算アルゴリズムの確立、の3段階的な研究計画を立てていた。

Aについて、まず(A-1)、(A-2)については非解析的な RKHS やリー群上の RKHS の解析は数学的に非常に難しく、ACT-X 期間中に計画目標まで十分に進展をさせることが出来なかった。一方、この研究をする過程で再び解析的な RKHS を考察したところ、今までがウスカーネルなど少数の具体的なカーネルの例でしか知られていなかった「Koopman作用素の有界性と力学系の線形性の同値性」という結果が、かなり広いクラスに解析的なカーネルで成り立つことを証明できた。これは、Koopman作用素の有界性が必要となる DMD などのアルゴリズムを用いる上で関数空間の選択について重要な指針を与え、さらに、Koopman作用素ノルムを適切に近似できれば、それが力学系の線形具合を図る指標になる示唆も得られた。また、この結果を証明する過程で得られた数学的手法をさらに深めることで、RKHS に限らず、より一般に、関数空間が quasi-Banach 空間であり、力学系の作用する低空間がなめらかな多様体、かつ、関数空間が滑らかな関数から成る場合に Koopman作用素が有界ならば力学系は周期点周りでの挙動が安定的になることを証明した。この事実から、複素平面における力学系が整関数からなる quasi-Banach 空間に有界な Koopman作用素を誘導するならば、力学系は1次写像であることを示した。これは数学的な理論結果としても非自明であり特筆すべきものである。

Bについては、(B-1)については、提案した研究目標通りの結果が得られた。すなわち、有限文字のシフト写像(特に、 $\{0,1\}$ の無限列のシフト)に着目し、記号列の集合上の2乗可積分空間を考え、その上の Koopman作用素に関する一般化スペクトルの計算手法を発見した。(B-2)、(B-3)については、上記Aの研究が想定よりうまく進まず、Bの研究に多くのエフォートを割けなかったため、大きく進展させることは出来なかったが、RKHSについて一般化スペクトルを計算する一般的な枠組みのためのアイデアを得た。

また、提案研究以外にも ACT-X 期間中に始まった研究成果として、カーネルが力学系不変な場合にカーネル DMD というスペクトル推定アルゴリズムが厳密に収束することを示した。また、可逆ニューラルネットの Sobolev 空間における表現力を解析するための理論的枠組みを考案した。

(2) 詳細

A: 関数空間論的視点からの考察

(A-1)、及び、(A-2)の研究について

まず、提案研究として挙げた(A-1) ユークリッド空間における非解析的シフト不変カーネルに付随する RKHS、及び、(A-2)コンパクトリー群上の RKHS における Koopman 作用素の性質の研究、そして、提案研究には挙げていないが、ACT-X 研究の過程で得られた quasi-Banach となる関数空間における Koopman 作用素の研究の成果について詳述する。

(A-1)、及び、(A-2)に取り組む中で最終的に得られた結果は理論的にも十分意義があるものであり、かつ、データ解析などへの波及も期待される満足のいくものであった。ただ、研究提案にあげた(A-1)、及び、(A-2)にそのものについては数学的な難所を一部克服できず、十分な成果をあげられなかった。以下では最終的に得られた成果のうち顕著なものを2つに詳述する。

1 つ目の成果はユークリッド空間における解析的シフト不変カーネルに付随する RKHS を再考し、その結果として既存の結果を大幅に改良することができた。ACT-X 以前の研究としては、並行移動不変なカーネル、すなわち、ユークリッド空間上の正定値関数から定まるカーネルを考察し、ある技術的な仮定の元では、力学系がアフィン(一次関数)であることと Koopman 作用素が有界であることが同値であることを証明していた。ところが、ガウスカーネルなど限られた具体例でしか上の「技術的な仮定」が確かめられていなかった。今回得た結果はかなり広いクラスで上の「技術的な仮定」を証明したというものであり、詳しくは以下の通りである(力学系 f に対応する Koopman 作用素を C_f と置く)。

定理1 (5. 主な研究成果リスト (1)-2)

w を $L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d)$ に属する至る所非負なゼロでない可測関数とし、 w は球対称であると仮定する、すなわち、ある関数 $Q: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ が存在して、 $w(\xi) = e^{-Q(|\xi|)}$ と書けると仮定する。正定値カーネルを $k(x, y) = \hat{w}(x - y)$ と定義する。ここで \hat{w} は w の Fourier 変換である。 H_k で k に対応する RKHS を表す。この時、ある非負定数 $c, R \geq 0$ が存在して十分大きな $t > 0$ で $Q(t) - ct$ が非減少であり、かつ、 $Q(t + R) - Q(t) \rightarrow \infty$ ならば、力学系 f について Koopman 作用素 C_f が有界ならば f はアフィン写像である。

この定理の条件は判定が容易であり、実際これを満たす関数は多くある。証明には Freud などが証明した直交多項式の零点に関する理論が応用される。 w が \mathbb{R} 上の関数の d 個のテンソル積として書ける場合にも同様の定理が成立する。本研究は中央大学の澤野氏、そして、理化学研究所の池田氏との共同研究である。

2 つ目の成果は以下の通りである。上の結果は RKHS に特化したものであるが、ここからさらに考察を広げ、より一般に、関数空間が quasi-Banach 空間(有界な 0 近傍をもつ Hausdorff 位相線型空間)で力学系の作用する空間がなめらかな多様体である場合を考え、Koopman 作用素の一般化である重み付き Koopman 作用素について、その有界性と力学系の挙動の関係性を証明することができた。重み付き Koopman 作用素とは $u: X \rightarrow \mathbb{C}$ を複素数値関数とする時、重み付き Koopman 作用素とは $uC_f: h \mapsto u \cdot (h \circ f)$ と定義される線形作用素である。より詳しく、次の定理を証明した。

定理 2 (arXiv: 2105.04280)

V を quasi-Banach 空間とし、 $u \in \mathcal{E}(X)$ とする。さらに V は $\mathcal{E}(X)$ の部分空間で包含写像は連続であると仮定する ($\mathcal{E}(X)$ は X 上の滑らかな関数全体で weak-Whitney 位相を入れたもの)。この時、 V と u がある技術的な仮定を満たすとすると (技術的な仮定の詳細は省略)、重み Koopman 作用素 uC_f が V 上有界ならば任意の f の固定点 $p \in X (f(p) = p)$ について、 p におけるヤコビアン df_p の固有値の絶対値は 1 以下である。

この定理は Koopman 作用素が有界ならば、力学系が非常に安定した挙動であることを示しており、Koopman 作用素の性質が力学系の性質にどのように反映されるかを明確に示したという点で興味深い。また、この定理の系として次の定理が示される。

定理 3 (arXiv: 2105.04280)

V を quasi-Banach 空間とし X を複素平面とする。さらに V は整関数全体からなる空間の部分空間で包含写像は連続であると仮定する。この時、 f が複素解析的な写像であり、かつ、Koopman 作用素 C_f が有界ならば、 $f(z) = az + b (|a| \leq 1)$ という形である。

複素平面上の正則関数から成る空間の Koopman 作用素の有界性と力学系の線形性は複数知られていたが、本結果ほど一般的な状況で証明されたものは今まで知られておらず、数学的な結果としても特筆すべきものである。力学系とデータ解析への応用という文脈から始まって純粋数学的に非自明な結果につながったという意味でも重要な示唆があると考えられる。

(A-3)について

Morrey 空間はユークリッド空間上で定義される関数空間で L^p 空間の一般化である。Morrey 空間上においては、力学系が微分同相という仮定のもと Koopman 作用素が同型写像であることと力学系が bi-Lipschitz であることの同値性を示した (5. 主な研究成果リスト (1)-1)。この研究は中央大学の澤野氏、波多野氏、そして、理化学研究所の池田氏との共同研究である。

これについては想定よりかなり早く結果が得られたため、Besov 空間についての研究も行った。Besov 空間は L^p 空間などから派生した実解析において重要な空間である。ここでは、次の定理を証明した ($B_{p,q}^s(R)$ を実直線上の Besov 空間とする)。

定理 4 (in preparation)

$1 < p < \infty, 1 \leq a \leq \infty$ 、そして、 $s > 1 + 1/p$ を仮定する。この時、次の 2 つが同値:

- 1) C_f が $B_{p,q}^s(R)$ 上有界
- 2) C_f が $B_{p,q}^{s-1}(R)$ 上有界かつ f' が $B_{p,q}^{s-1}(R)$ 上の multiplier

ここで、ある関数が multiplier であるとはその関数自身を乗算することで定まる線形作用素が有界であることを言う。

既存研究として、 $s \in [0, 1] \setminus \{1/p\}$ の場合に同様の結果が証明されており、この定理 4 は s が十分大きい場合に解決したことになる。本研究は東北大学の谷口氏、そして、理化学研究所の池田氏との共同研究である。

B: 一般化スペクトルの計算手法の確立

(B-1)について

具体的には以下の状況を考える。 $\Sigma = \{0, 1, 2, \dots, \beta - 1\}^N$ において、シフト写像 $S: \Sigma \rightarrow \Sigma; (\omega_n)_{n \in \mathbb{N}} \mapsto (\omega_{n+1})_{n \in \mathbb{N}}$ が定義できる。さらに、有限離散集合 $\{0, 1, 2, \dots, \beta - 1\}$ 上の確率測度 μ_0 の直積測度 $\mu := \mu_0^{\otimes N}$ を考えることで、 Σ 上の確率測度 μ が定義できる。 $L^2(\mu)$ における Koopman 作用素 C_S の一般化スペクトルを考察した。 Σ 上の実数値連続関数 h で h_* が $[0, 1]$ 上のルベグ測度に一致するものが構成できる。この関数 h から生成される C 代数が求めるテスト空間である。これにより一般化スペクトルが計算でき、それは $\left\{ \sum_{s=0}^{\beta} \mu_0(\{s\})^{n+1} \right\}_{n=0}^{\infty}$ となる。また、テスト空間に制限することで、Koopman 作用素のスペクトル分解やその漸近的な振舞いの評価を行った (arXiv: 2106.12087)。本研究は東北大学の千葉氏、そして、理化学研究所の池田氏との共同研究である。

(B-2)、(B-3)について

(B-2)においては、Aにおいて用いた解析手法を応用すると、RKHS が解析的な関数から成る場合は各点における微分作用素全体を RKHS の稠密な部分空間とみなすことができる。これを用いると一般化スペクトルを計算できるかもしれないというアイデアを得た。しかし、一般化スペクトルは元の Koopman 作用素のスペクトルの分布が分かっていると解析ができないため、まず元のスペクトルの分布を調べる必要がある。これについては未着手のため今後の課題である。(B-3)についても(B-2)を解決した上で考察する必要があるため、今後より深く研究をする必要がある。

その他の派生研究

ACT-X 期間の中で様々な研究者と議論していく中でデータ解析と Koopman 作用素というキーワードで提案研究以外の研究も行なった。

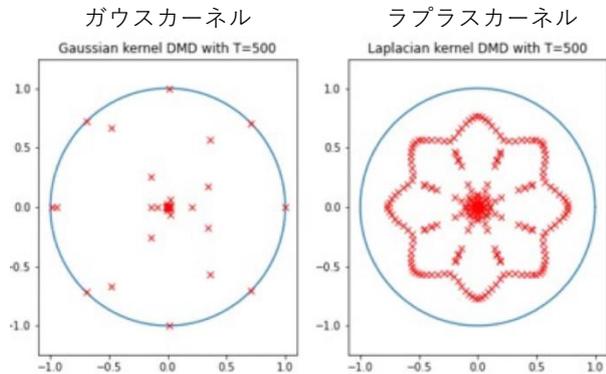
1 つはカーネルが力学系について作用に関して不変性を持つ時、カーネル DMD アルゴリズムで得られる推定量が真の推定量に収束することを厳密に証明した。この研究成果は理化学研究所の池田氏と LAAS-CNRS の Schlosser 氏との共同研究であり、現在論文を執筆中である。

もう 1 つ重要なものとして可逆ニューラルネットの表現力解析を行なった。ニューラルネットは写像の合成であり、これを Koopman 作用素の枠組みで研究することは非常に興味深いテーマである。可逆ニューラルネットはニューラルネットの 1 モデルであり、力学系の理論とも関係している。ここでは、Sobolev 空間において可逆ニューラルネットが十分な表現力を持つか否かを調べる理論的な枠組みを提案し、カップリングフローやニューラル ODE が十分な表現力を持つことを証明した。この研究は東京大学の手嶋氏、大野氏、杉山氏、そして、理化学研究所の池田氏、東條氏との共同研究であり、現在論文を執筆中である。

3. 今後の展開

まず、A:関数空間論的視点からの考察、については今後 5 年ほどかけて様々な関数空間を用いて取り組む方向である。Koopman 作用素から情報を取り出すには関数空間の数学的な構造が本質的である。そのため、できる限り多様な関数空間の取り扱えるような理論的な枠組みを構築することは、今後、

Koopman 作用素のデータ解析への応用を行う上で重要である。例えば、右図のように DMD と呼ばれるスペクトル近似アルゴリズムを用いて、推定されたスペクトルを描画するとガウスカーネルを用いた場合とラプラスカーネルを用いた場合とで全く異なるパターンが現れることが分かる。ガウスカーネルとラプラスカーネルは似た形のカーネル



であるが Koopman 作用素から取り出される情報が異なることが観察される。今後の研究として、今回大きく進展させることのできなかつた(A-1)非解析的 RKHS と(A-2)コンパクトリー群上の RKHS は喫緊のテーマである。(A-1)についてはまずはラプラスカーネルを 1 つ具体例として取り上げ、(A-2)については $SL_2(\mathbb{C})$ の極大コンパクト群 $SU(2)$ を注目して研究を行う。これについては 1 年ほどのスパンを考えており、そこからより一般の場合への拡張を行なっていく。また、今回は解析的な RKHS を用いると Koopman 作用素の有界性と取り扱う力学系の非線形性は両立し得ないことが理論的に分かった。これは別の見方をすると、もし作用素の非有界さの度合いのようなものが数学的に定式化できれば、力学系の非線形の度合いのようなものを図ることが可能である。このアイデアは ACT-X のサイトビジットでアドバイザーを通して得たものであるが、非常に興味深く、かつ、重要な視点であると考えられる。Koopman 作用素の線形度合いの定式化は、微分作用素の空間がフィルターの構造を持っているため、それを援用することで定義が可能であると考えられる。これについては来年度から 1 年ほど時間をかけて取り組んでいき、最終的には力学系の制御などに応用することを考えている。(A-3)については、Morrey 空間については Koopman 作用素が同型である場合の必要十分条件が得られたが、有界であるための必要十分条件は得られていないので、これは取り組むべき課題である。また、今回追加で研究した Besov 空間については、実直線上の Besov 空間しか取り扱えなかつたが、応用上、一般次元を考えることは重要である。これについても研究を行う。来年度から 1 年ほどのスパンで研究を行う。

B: 一般化スペクトルの計算手法の確立、については、まず、(B-1)の適切な一般化として有限型シフト写像への一般化が考えられる。有限型シフト写像は様々な力学系と位相的に同型であることが知られており、ここまで一般化すれば様々な力学系解析への応用が期待できる。これはアイデアとしては、今までの単純なシフト写像の場合と同様にできると考えられるので来年度以降半年から 1 年のスパンに完成させたいと考えている。今回、大きく進展させられなかつた(B-2)、及び、(B-3)については 3 年から 5 年のスパンで研究していく予定である。

4. 自己評価

研究目的の達成状況

研究全体としては概ね順調に進行したと考えられる。提案研究である(A-1)と(A-2)については提案そのものの成果は十分に得られなかったが、それを解決する過程で数学的にも非自明でかつデータ解析などへ Koopman 作用素を応用する上で関数空間の選択の指針となる成果が得ることができた。また、(A-3)については Morrey 空間については今回の目標の達成度としては十分な水準である。また、追加で考察した Besov 空間についても実直線の場合に限るが、満足な成果を得ることが出来た。(B-1)については目標を達成したと言って良い。(B-2)、そして、(B-3)については今後の研究に繋がる形で考察を行うことができたため、目標をいくらかは達成できたと言える。

研究の進め方

研究については様々な分野の研究者と共同研究を行い、その中でも今回得られた成果においては研究代表者が主導となって研究が進められた。またサイトビジットなどで重要な研究のアイデアを得ることができ、領域会議などでも研究者との議論を通じて知見を深めることが出来たため、ACT-X を十二分に活用できたと言える。研究費の執行については、新型コロナや円安など、予想外のことが多く発生したため、予算の運用には苦勞した面もあったが、全体としては適切に執行出来たと考えられる。

研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果

近年はデータ駆動的な手法が非常に重要視されており、特に、様々な実データは力学系によって記述される。Koopman 作用素によるデータ駆動的な力学系解析のアプローチは非常に有用であると考えられており、Koopman 作用素の理論がより強固なものになれば、将来的には力学系由来のデータ解析において今まで抽出できなかったような情報を発見することが可能になり、複雑なダイナミクスの制御や、より高度な時系列解析へ繋がっていくことが期待できる。また、Koopman 作用素の理論は数学的にも高度であり数学の種々の専門家の知識が必要である。現在では数学の分野でも応用と基礎の間ではまだ隔たりがあるように感じられるが、今回の得られた成果は応用から端を発した問題で純粋数学として意義深いものでもあるため、より分野間の相互的な知識のやり取りを促進する一助になると期待できる。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数:2件

1. Naoya Hatano, Masahiro Ikeda, Isao Ishikawa, Yoshihiro Sawano, Boundedness of composition operators on Morrey spaces and weak Morrey spaces. Journal of Inequalities and Applications. 2021, Vol. 1

ユークリッド空間上の微分同相な力学系を考える時、Morrey 空間において Koopman 作用素

が同型(全単射有界)であることと力学系が bi-Lipschitz であることが同値であることを証明した。また、弱 Morrey 空間についても有界であるための必要十分条件を証明している。

2. Masahiro Ikeda, Isao Ishikawa, Yoshihiro Sawano, Composition operators on reproducing kernel Hilbert spaces with analytic positive definite function, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 2021, vol. 511, No. 1

ユークリッド空間における解析的シフト不変カーネルに付随する RKHS について、ある技術的な仮定のもと、力学系がアフィン写像であることと Koopman 作用素が有界であることの同値性を証明した。さらに、その技術的な仮定がそれなりに広いクラスの解析的カーネルに付随する RKHS に対して成立することも証明した。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0件(特許公開前のもも含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

学会発表: 2022 年 10 月 28 日、Bounded weighted composition operators on functional quasi-Banach spaces and stability of dynamical systems、再生核ヒルベルト空間を中心とした実解析・複素解析・函数解析の総合的研究、京都大学数理解析研究所

学会発表: 2022 年 9 月 22 日、Bounded weighted Koopman operators on functional quasi-Banach spaces and stability of dynamical systems、Dartmouth Functional Analysis Seminar、Dartmouth College, the US

学会発表: 2022 年 9 月 15 日、可逆ニューラルネットの Sobolev 空間における普遍性について、Deep learning and Physics、オンライン発表

学会発表: 2021 年 8 月 4 日、Bounded composition operators on functional quasi-Banach spaces and stability of dynamical systems、13th ISAAC Congress、オンライン発表

学会発表: 2021 年 3 月 14 日、球対称な解析的正定値関数に付随する RKHS 上の Koopman 作用素の有界性について、若手数学者交流会、オンライン発表