

河原 吉伸

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 教授／
理化学研究所革新知能統合研究センター チームリーダー

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

§ 1. 研究成果の概要

データ駆動による科学的知識の抽出は、近年様々な分野において重要な課題として認識されているが、主要な解析対象である動的な現象に内在する物理的な法則(ダイナミクス)やそれに付随する情報のデータからの抽出に関する研究は今後の発展が期待される領域である。一方で多くの応用数理分野では、時間発展の作用素表現を介して対象を解析することで、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動力的特性の抽出を行う作用素論的解析が注目されている。本研究課題では、非線形力学系の作用素論的解析と統計的機械学習の高度な推論方法との融合により、上記の問題へ順方向／逆方向的解析の両観点から同時にアプローチすることで、ドメインで培われてきた数理モデルとデータ駆動による抽出情報をその動力的特性を介して直接結びつける方法論の構築を進めている。これにより、データからの現象の理解に基づく科学的知見の抽出、しいては複雑現象のより精緻な予測・シミュレーションの実現を可能とする新たな枠組み創出までを目的とするものである。

初年度である2019年度は、まず、上記アプローチにおけるデータ解析において不可欠となる確率的定式化や、それに付随する統計的性質の保証の基礎となる数理的原理の構築を進めた(論文投稿中)。例えば、 C^* 代数上の Hilbert 加群の理論を用いた再生核 Hilbert 加群の理論展開に基づく相互作用を持つ力学系の解析手法の導出(arXiv:2003.00738)や、再生核 Hilbert 空間上の Koopman 作用素の有界性の特徴づけに関する研究(arXiv:1911.11992)、またランダム力学系から生成される時系列データ間の距離の定式化とその計算法の構築(arXiv:1906.06957)などを行なった。これらの成果は、本研究課題で目的とする方法論構築やその応用など、今後の課題推進に重要な原理的基礎となるものである。一方、作用素論的解析の物理分野への主要な応用である縮約理論において扱うことができる対象の非線形量子力学系への原理的拡張[1]や、生物の集団

運動や体内時計の動的特性に関する解析への適用的研究と関連する理論整備を進めた[2,3]. これらにより, 現状での枠組みでの有用性を確認すると共に, 本研究課題で扱う技術的課題の必要性の再確認と整理を進めた.

【代表的な原著論文】

1. Yuzuru Kato, Naoki Yamamoto, and Hiroya Nakao, “Semiclassical phase reduction theory for quantum synchronization,” *Physical Review Research*, Vol.1, 033012, 2019.
2. Keisuke Fujii, Naoya Takeishi, Motokazu Hojo, Yuki Inaba, and Yoshinobu Kawahara, “Physically-interpretable classification of network dynamics in complex collective motions,” *Scientific Reports*, Vol.10, 3005, 2020.
3. Shingo Gibo, and Gen Kurosawa, “Theoretical study on the regulation of circadian rhythms by RNA methylation,” *Journal of Theoretical Biology*, Vol.490, 110140, 2020.

§ 2. 研究実施体制

(1) 機械学習・数理統計グループ

① 研究代表者：河原 吉伸（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 教授／
理化学研究所革新知能統合研究センター チームリーダー）

② 研究項目

- ・ 作用素論的解析のための統計的推測の枠組みの構築
- ・ データ駆動抽出情報と数理モデルを統合的に用いた予測・学習の枠組みの構築
- ・ 複数分野におけるデータ解析への横断的適用による展開

(2) 数学グループ

① 主たる共同研究者：坂内 健一（慶應義塾大学理工学部 教授／理化学研究所革新知能統合研究センター チームリーダー）

② 研究項目

- ・ 作用素論環論的データに対する数学的不変量の定義
- ・ 実データに現れるノイズを考慮した確率モデルの理論構築
- ・ 作用素の有界性の判定など、数学的基礎理論の整備

(3) 非線形物理グループ

① 主たる共同研究者：中尾 裕也（東京工業大学工学院 教授）

② 研究項目

- ・ 量子散逸系の非線形振動子に対する半古典位相縮約理論の定式化
- ・ 大自由度非線形力学系に対する Koopman 作用素論に基づく位相振幅縮約理論の定式化
- ・ 位相縮約理論による非線形振動子の同期の最適化
- ・ その他、ネットワーク結合力学系の自己組織化の研究等

(4) 生物モデリング・グループ

① 主たる共同研究者：黒澤 元（理化学研究所数理創造プログラム 専任研究員）

② 研究項目

- ・ くりこみ群による体内時計の周期の定式化
- ・ データ解析と波形についての数理を組み合わせた体内時計のブラックボックス予測
- ・ インフルエンザ A 感染を理解するためのヒト体内ウィルス拡散ダイナミクスモデル構築
- ・ 冬眠中のハムスター体温時系列のデータ解析