

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
2019 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

河原 吉伸

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
教授／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

本課題では、非線形動力学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基づき、ダイナミクスに関連する科学的知識の抽出に対して順方向／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学的特性を介して直接結びつける方法論の構築とその応用研究を進めている。

本年度は、まず前年度から継続して、上記のような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など基礎となる数理的原理の構築を進めた。例えば、作用素論的データ解析で扱う動力学の拡大の基礎となる理論として、 C^* 代数上の Hilbert 加群の理論を用いたヒルベルト C^* 環と、これに基づくカーネル平均埋め込みの理論構築を行った (Hashimoto et al., arXiv:2101.11410)。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える力学系の拡大に関して、例えば、偏微分方程式で記述される系に対するクープマン解析の形式の初めての定式化を与えるなどした (Nakao & Mezić, *Chaos* 2020)。

また、データ駆動による抽出情報と数理モデルを統合的に用いた予測の枠組み構築に関連し、複雑現象における位相的動力学特性 (リミットサイクルなど) を保証した動力学モデルの学習原理と推定法を構築し、そのような特性を持つ複雑現象 (流体など) の長期予測において有効である事を実験的にも確認した (Takeishi & Kawahara, *AAAI'21*)。

さらに、複数ドメインにおいて開発した枠組みの応用的研究についても進め、例えば、位相縮約に基づく体内時計のモデリングと高精度予測について引き続き検討を進め、これに関連して、体内時計の周期の安定化の原因に関する発見などの成果が得た (Kon et al., *Science Advances* 2021)。

§ 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
 - ・ 作用素論的データ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

【代表的な原著論文情報】

1. Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, F. Komura, T. Katsura, and Y. Kawahara, “Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations,” arXiv:2101.11410, 2020.
2. H. Nakao, and I. Mezić, “Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, Vol.30, 113131, 2020.
3. N. Takeishi, and Y. Kawahara, “Learning Dynamics Models with Stable Invariant Sets,” in *Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence (AAAI-21)*, pp.9782–9790, 2021.
4. N. Kon, H. Wang, Y.S. Kato, K. Uemoto, N. Kawamoto, K. Kawasaki, R. Enoki, G. Kurosawa, T. Nakane, Y. Sugiyama, H. Tagashira, M. Endo, H. Iwasaki, T. Iwamoto, K. Kume, and Y. Fukada, “Na⁺/Ca²⁺ exchanger mediates cold Ca²⁺ signaling conserved for temperature-compensated circadian rhythms,” *Science Advances*, Vol.7, No.18, eabe8132, 2021.