

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

2021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
教授

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、非線形力学系の作用素論的解析と、統計的機械学習の高度な学習・推論方法との融合により、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とその動力的特性を介して直接結びつける方法論を構築する。これにより、ダイナミクスに関連する科学的知識に対して順方向／逆方向的解析の両観点から同時にアプローチすることを実現し、データからの現象の理解に基づく新たな科学的知見の抽出や、複雑現象のより精緻な予測を可能とする新たな枠組み創出を目的としたものである。

2021年度ではまず、データ解析で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継続して進めた。例えば、これまで進めてきた再生核ヒルベルト空間におけるクーブマン作用素に関する研究を発展させ、その有界性に関する数学的性質について明らかにした[1]。そしてより一般的な空間への拡張として、 C^* 代数上の Hilbert 加群や、再生核バナッハ空間上における作用素論的解析へと発展させた[2,3]。また、作用素論的解析による動力的な情報抽出を利用した機械学習に関連して、例えば、ダイナミクスの対称性に基づくデータ拡張を用いたオフライン強化学習モデルを導出し、既存手法に比べ高い性能実現が可能であることを確認した[4]。一方で、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連して、基本セルオートマトンや量子散逸系に対するクーブマン作用素による解析の定式化を与えた[5,6]。さらに、開発した枠組みを複数の科学領域におけるデータ解析において適用して、それら分野における科学的知見の抽出に資する研究についても進めた。例えば、脳波データ(安静時 fMRI 信号)に対して関連する手法により抽出された時空間的特徴が、ヒトの行動指標の予測に対して有効であることを実験的に確認するなどした[7]。

§ 2. 研究実施体制

(1) 機械学習・数理統計グループ（九州大学）

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）

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（慶應義塾大学）

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）

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（東京工業大学）

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

- ・ 基本セルオートマトンに対する Koopman 作用素論の定式化
- ・ Koopman 作用素論に基づく非線形振動子の位相・振幅縮約と同期の最適化
- ・ Koopman 作用素論に基づく量子散逸系の非線形振動子に対する漸近位相の定義
- ・ 確率振動現象やネットワーク結合力学系の自己組織化に関する関連研究

(4) 生物モデリング・グループ（理化学研究所）

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

- ・ 薬剤を用いた体内時計実験を再現する詳細モデルのシミュレーション
- ・ 体内時計やファンデアポール振動子に対する縮約モデルの構築
- ・ 冬眠中ハムスターの体温時系列に対する時系列解析
- ・ ウィルス感染の確率論モデルの解析

【代表的な原著論文情報】

1. M. Ikeda, I. Ishikawa, and Y. Sawano, “Composition operators on reproducing kernel Hilbert spaces with analytic positive-definite functions,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **511**: 126048, 2022.
2. Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, F. Komura, T. Katsura, and Y. Kawahara, “Reproducing kernel Hilbert C^* -modules and kernel mean embeddings,” *Journal of Machine Learning*

- Research*, **22**(267): 1–56, 2021.
3. M. Ikeda, I. Ishikawa, and C. Schlosser, “Koopman and Perron–Frobenius operators on RKHS and RKBS,” arXiv:2203.12231, 2022.
 4. M. Weissenbacher, S. Sinha, A. Garg, and Y. Kawahara, “Koopman Q–learning: Offline reinforcement learning via symmetries of dynamics,” in *Proc. of the 39th Int’l Conf. on Machine Learning (ICML ’22)* (accepted)
 5. K. Taga, Y. Kato, Y. Kawahara, Y. Yamazaki, and H. Nakao, “Koopman spectral analysis of elementary cellular automata,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, **31**: 103121, 2021.
 6. Y. Kato and H. Nakao, “Quatum asymptotic phase reveals signatures of quantum synchronization,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* (accepted).
 7. S. Ikeda, K. Kawano, S. Watanabe, O. Yamashita, and Y. Kawahara, “Predicting behavior through dynamic modes in resting–state fMRI data,” *NeuroImage*, **247**: 118801, 2022.