

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「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」
研究課題「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」

研究終了報告書

研究期間 2019年10月～2025年03月

研究代表者：河原 吉伸
(大阪大学 大学院情報科学研究科
教授)

§1 研究実施の概要

(1)実施概要

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をその動力学的特性を介して直接結びつけ扱う方法論を構築する。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的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・制御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。

このような目的の下、本研究課題では、主に下記の4つの研究項目を設定して取り組んできた。

(課題1) 力学系の作用素論的データ解析のための統計的推測法の確立

(課題2) 系の点スペクトル以外を扱う拡張のための数理体系の構築

(課題3) 数理モデルと抽出情報を統合的に用いた学習・予測のための計算体系の構築

(課題4) 諸科学におけるデータ解析への横断的適用による展開

まず(課題1)は、作用素論的解析に基づく統計的推測法とその数学的解釈のための原理を確立し、作用素論的データ解析の創出と体系化を目的とするものである。(課題2)は、これの複雑な現象への適用を実現するための数理的拡張であり、科学的に興味のあるより広い範囲の現象を扱うことを可能とするために必要となるものである。(課題3)は、これら課題により得られる方法を、数理モデルと統合的に用いて、複雑現象に対する予測や、学習機構の拡張へ利用する方法論的な展開である。そして(課題4)では、生物モデリング・グループにおける課題を中心として、複数ドメインにおける動的機構の解析が重要となる課題へ開発手法を横断的に適用しその有用性を検証するものである。これらの各課題に対して、本研究課題では、機械学習・数理統計グループ、数学グループ、非線形物理グループ、生物モデリング・グループ、の4つの異なる分野研究者で構成される研究グループで連携しつつ、国内・国外の関連研究者とも連携して研究に取り組むというものである。

本研究課題では、研究開始からこれまでに於いて、非線形力学系の作用素論的解析の適用可能範囲の原理的拡大(偏微分方程式で表される系、量子散逸系、オートマトン)や、連続的な作用素スペクトルに関するデータ駆動による情報抽出のための方法論構築(再正核ヒルベルト C^* 加群や、Rigged ヒルベルト空間を用いた枠組み JetEDMD など)、またこれらをつなぐ数理的枠組み(作用素の有界性、スペクトルの収束に関する理論)を進めてきた。また、これらを将来予測や制御・強化学習へ適用するためのアルゴリズム構築についても進め、大域的安定性を保証した動力学モデル学習法や、動力学の対称性に基づくオフライン強化学習、強化学習のための新たな機構を持つ学習モデルなど、作用素論的解析の原理的応用による機械学習分野における重要な成果が得られてきた。一方で、動的モード分解などの手法をドメインへ適用し、例えば静止状態脳波における動作指標の予測性の確認など、科学的にも重要な知見獲得へ至る成果がこれまでにいくつか得られている。

(2)顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 作用素論的データ解析の数理的拡張、特に連続スペクトルを扱う枠組みへの拡張と、それを保証する数学的基盤

概要: 機械学習 G の橋本、河原、及び数学 G の石川、池田、紅村、勝良らの共同研究により、再生核ヒルベルト空間の理論を拡張し、 C^* 代数上の Hilbert 加群の理論を用いた再生核ヒルベルト C^* 加群、及びこれに基づくカーネル平均埋め込みの理論構築を行なった。また一方で、機械学習 G の河原、橋本、及び数学 G の石川、池田らにより、Rigged ヒルベルト空間の枠組みを用いた JetEDMD という枠組みとその数理基盤に関する枠組み提案を行い、有限データから連続的スペクトルの抽出を行うための極めて新規性の高い枠組みも構築された。これらの成果は、特に前者については機械学習分野などにおける再生核ヒルベルト空間の適用可能性を原理的に拡大する重要な成果であると同時に、両成果とも、当課題に関連しては、作用素論的データ解析で扱うことが可能な力学系を原理的に拡張する基礎となるものであり、従来扱うことが難しかった連続スペクトルを持つ力学系(相互作用を持つ系など)や量子力学系などへの適用を実現するものであり、関連

する基礎分野において今後の発展につながる重要な成果であると考え。

(主な論文)

- Y. Hashimoto, I. Ishikawa, M. Ikeda, F. Komura, T. Katsura, Y. Kawahara, “Reproducing Kernel Hilbert C*-Modules and Kernel Mean Embeddings,” *Journal of Machine Learning Research*, 22(267), pp.1-56, 2021.
- T. Iwata and Y. Kawahara, “Neural Dynamic Mode Decomposition for End-to-End Modeling of Nonlinear Dynamics,” *Journal of Computational Dynamics* 10(2) 268-280 2023.
- I. Sakata and Y. Kawahara, “Enhancing Spectral Analysis in Nonlinear Dynamics with Pseudoeigenfunctions from Continuous Spectra,” *Scientific Reports* 14 19276, 2024.
- I. Ishikawa, Y. Hashimoto, M. Ikeda, and Y. Kawahara, “Koopman operators with intrinsic observables in rigged reproducing kernel Hilbert spaces,” arXiv:2403.02524.
- M. Ikeda, I. Ishikawa, and Y. Sawano, “Boundedness of composition operators on reproducing kernel Hilbert spaces with analytic positive definite functions,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol.511, Issue 1, 126048, 2022.
- N. Hatano, M. Ikeda, I. Ishikawa and Y. Sawano, “Boundedness of composition operators on Morrey spaces and weak Morrey spaces,” *Journal of Inequalities and Applications*, Vol. 2021, Article number: 69, 2021.
- M. Ikeda, I. Ishikawa and K. Taniguchi, “Boundedness of composition operators on higher order Besov spaces in one dimension,” *Mathematische Annalen*, Vol.388, pp.4487–4510, 2024.

2. クープマン解析を適用可能な力学系の原理的拡大

概要：非線形 G を中心に、力学系分野における著名な研究者である I. Mezić 氏(UC San Diego) との共同研究などにおいて、偏微分方程式で記述される大自由度力学系や量子散逸力学系、またオートマトンなどに対するクープマン・スペクトル解析の形式に対する定式化を与えた。従来の常微分方程式に対する議論を観測汎関数を導入することによって拡張し、安定な定常解に漸近する線形偏微分方程式や量子方程式等に対するクープマン固有汎関数の具体的表式を与えるなど、作用素論的解析の適用拡大のための基礎となる重要な成果を与えた。これらの結果は、偏微分方程式で記述されることが多い実現象や、近年重要性が増す量子現象のクープマン・スペクトル解析と動的モード分解の基礎となるものであり、関連する基礎分野において今後の発展につながる重要な結果であると考え。

(主な論文)

- Yuzuru Kato and Hiroya Nakao, "Semiclassical optimization of entrainment stability and phase coherence in weakly forced quantum limit-cycle oscillators", *Phys. Rev. E* 101, 012210 (2020), DOI: 10.1103/PhysRevE.101.012210
- Hiroya Nakao and Igor Mezić, “Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations”, *Chaos* 30, 113131 (2020), DOI: 10.1063/5.0011470.
- Yuzuru Kato and Hiroya Nakao, "Quantum coherence resonance", *New Journal of Physics* New Journal of Physics 23, 043018 (2021), DOI: 10.1088/1367-2630/abf1d7
- Shohei Takata, Yuzuru Kato, and Hiroya Nakao, "Fast optimal entrainment of limit-cycle oscillators by strong periodic inputs via phase-amplitude reduction and Floquet theory", *Chaos* 31, 093124 (2021), DOI: 10.1063/5.0054603
- Yuzuru Kato, Jinjie Zhu, Wataru Kurebayashi, and Hiroya Nakao, “Asymptotic Phase and Amplitude for Classical and Semiclassical Stochastic Oscillators via Koopman Operator Theory”, *Mathematics* 2021, 9, 2188 (2021), DOI: 10.3390/math9182188
- Keisuke Taga, Yuzuru Kato, Yoshinobu Kawahara, Yoshihiro Yamazaki, and Hiroya Nakao, "Koopman spectral analysis of elementary cellular automata", *Chaos* 31, 103121 (2021), DOI: 10.1063/5.0059202
- Yuzuru Kato and Hiroya Nakao, “A definition of the asymptotic phase for quantum nonlinear oscillators from the Koopman operator viewpoint”, *Chaos* 32, 063133 (2022), DOI: 10.1063/5.0088559
- Norihisa Namura, Shohei Takata, Katsunori Yamaguchi, Ryota Kobayashi, and Hiroya Nakao, “Estimating asymptotic phase and amplitude functions of limit-cycle oscillators from time series data”,

Physical Review E 106, 014204 (2022), DOI: 10.1103/PhysRevE.106.014204

• Yuzuru Kato and Hiroya Nakao, “Turing instability in quantum activator-inhibitor systems”, Scientific Reports 12, 15573 (2022), DOI: 10.1038/s41598-022-19010-0

• Keisuke Taga, Yuzuru Kato, Yoshihiro Yamazaki, Yoshinobu Kawahara, Hiroya Nakao, “Dynamic mode decomposition for Koopman spectral analysis of elementary cellular automata”, Chaos 34, 013125 (2024), DOI: 10.1063/5.0159069

• Norihisa Namura, Tsubasa Ishii, and Hiroya Nakao, "Designing two-dimensional limit-cycle oscillators with prescribed trajectories and phase-response characteristics", IEEE Transactions on Automatic Control, vol. 69, no. 5, pp. 3144-3157, May 2024, DOI: 10.1109/TAC.2023.3337728, Date of Publication: 29 November 2023

• Koichiro Yawata, Kai Fukami, Kunihiro Taira, and Hiroya Nakao, “Phase autoencoder for limit-cycle oscillators”, Chaos 34, 063111 (2024), DOI: 10.1063/5.0205718

• Kai Fukami, Hiroya Nakao, and Kunihiro Taira, “Data-driven transient lift attenuation for extreme vortex gust-airfoil interactions”, Journal of Fluid Mechanics 992, A17 (2024). DOI:10.1017/jfm.2024.592

3. 複雑現象の精緻な将来予測や制御・強化学習への原理的応用

概要：機械学習 G の武石、河原は、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、複雑な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な現象（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。本枠組みは、原理的には、本課題で進める作用素論的方法の拡張性を有しており、偏微分方程式で表される系や量子散逸系などへも拡張できるものである。一方で、機械学習 G の河原、Weissenbacher 氏らは、近年強化学習の実用化のために注目されるオフライン強化学習における作用素表現を用いた一般化と、動力学における対称性を Lie 群などを用いて導入し、既存のモデルよりも飛躍的に良い性能が出ることを確認するなどした。更にこれを発展させ、環境の動力学的な対称性を一種のトランスフォーマー機構により利用することで効率的な特徴変換を実現する強化学習の枠組み提案を行い、多くのベンチマークで大幅な性能向上が可能であることを確認した。さらに河原らは、古典的なカルマンフィルターやその学習法に一般化との関連について議論し、汎用的な非線形確率力学系へ適用可能な枠組みを与えるなどした。これらの成果は、本課題で開発してきた作用素論的データ解析の原理が、複雑な動力学に関する情報の抽出を介して、機械学習に関連する諸課題へ原理的応用可能であることを示す重要な成果であると考ええる。

（主な論文）

• N. Takeishi and Y. Kawahara, “Learning Dynamics Models with Stable Invariant Sets,” Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence (AAAI'21) 9782-9790 2021.

• M. Weissenbacher, S. Sinha, A. Garg, and Y. Kawahara, “Koopman Q-learning: Offline Reinforcement Learning via Symmetries of Dynamics,” Proceedings of The 39th International Conference on Machine Learning (ICML'22), PMLR 162, pp.23645-23667 2022.

• M. Ohnishi, I. Ishikawa, K. Lowrey, M. Ikeda, S.M. Kakade, and Y. Kawahara, “Koopman Spectrum Nonlinear Regulators and Efficient Online Learning,” Transactions on Machine Learning Research 2024.

• M. Weissenbacher, R. Agarwal, and Y. Kawahara, “SiT: Symmetry-invariant Transformers for Generalisation in Reinforcement Learning,” Proceedings of the 41st International Conference on Machine Learning (ICML'24) PMLR 235, pp.52695-52719, 2024.

• M. Weissenbacher, E. Routis, and Y. Kawahara, “Self-supervised Color Generalization in Reinforcement Learning,” Transactions on Machine Learning Research, 2024.

• N. Ke, R. Tanaka, and Y. Kawahara, “Learning Stochastic Nonlinear Dynamics with Embedded Latent Transfer Operators,” Proceedings of the 28th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS'25), PMLR 258:4861–4869, 2025.

<代表的な論文>

1. 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*, Vol.22, No.267, pp.1-56, 2021.

概要：機械学習 G の橋本、河原、及び数学 G の石川、池田、紅村、勝良らの共同研究により、再生核ヒルベルト空間の理論を拡張し、 C^* 代数上の Hilbert 加群の理論を用いた再生核ヒルベルト C^* 加群、及びこれに基づくカーネル平均埋め込みの理論構築を行なった。本成果は、機械学習分野などにおける再生核ヒルベルト空間の適用可能性を原理的に拡大する重要な成果であると同時に、当課題に関連しては、作用素論的データ解析で扱うことが可能な力学系を原理的に拡張する基礎となるものであり、従来扱うことが難しかった連続スペクトルを持つ力学系（相互作用を持つ系など）や量子力学系などへの適用を実現するなど、関連する基礎分野において今後の発展につながる重要な成果であると考えている。

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.

概要：非線形 G の中尾は、力学系分野における第一人者である I. Mezić 氏 (UC San Diego) との共同研究において、偏微分方程式で記述される大自由度力学系に対するクープマン・スペクトル解析の形式に対する初めての定式化を与えた。従来の常微分方程式に対する議論を観測汎関数を導入することによって拡張し、安定な定常解に漸近する線形偏微分方程式に対するクープマン固有汎関数の具体的表式を与えた。また線形系と共役な非線形系のクープマン固有汎関数の表式を与え、Burgers 方程式等の具体例についてこれを議論した。これらの結果は、一般に偏微分方程式で記述されることが多い実現象のクープマン・スペクトル解析と動的モード分解の基礎となるものであり、関連する基礎分野において今後の発展につながる重要な結果であると考えている。

3. M. Weissenbacher, S. Sinha, A. Garg and Y. Kawahara, “Koopman Q-learning: Offline Reinforcement Learning via Symmetries of Dynamics,” *Proc. of The 39th Int'l Conf. on Machine Learning (ICML'22)*, PMLR 162 23645-23667, 2022.

概要：近年強化学習の実用化のために注目されるオフライン強化学習における作用素表現を用いた一般化と、動力学における対称性を Lie 群などを用いて導入し、既存のモデルよりも飛躍的に良い性能が達成できることを確認するなどした。強化学習において標準的な定式化である Q-学習を自然な形で一般化する定式化となっている点も理論的に重要であると言える。

§2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 機械学習・数理統計グループ

研究代表者：河原 吉伸 (大阪大学 大学院情報科学研究科 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)

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

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)

研究項目：

- ・力学系における Koopman 作用素の関数解析的研究
- ・再生核ヒルベルト C^* 加群の研究
- ・大規模相互作用系における幾何学的手法による流体力学極限の研究

③ 非線形物理グループ

主たる共同研究者：中尾 裕也（東京科学大学 工学院 教授）

研究項目：

- ・ Koopman 作用素論に基づく非線形振動子の位相振幅縮約と制御
- ・ Koopman 作用素論に基づく量子散逸系の解析
- ・ 大自由度力学系に対する Koopman 作用素論の定式化
- ・ 確率振動系、ネットワーク結合力学系、量子散逸系の非線形ダイナミクスの解析
- ・ データ駆動による大自由度非線形ダイナミクスの縮約数理モデルの推定

④ 生物モデリンググループ

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）

研究項目

- ・ 体内時計に対する縮約モデルの構築
- ・ 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
- ・ ウイルス感染の確率論モデルの構築
- ・ 冬眠中ハムスターの体温時系列に対する時系列解析

(2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

主な国内・国外の連携研究者は下記のようなものである。

[国内]

- ・ 名古屋大学・藤井慶輔准教授：「集団運動に対するデータ駆動による作用素論的解析」
- ・ 理化学研究所・幡谷龍一郎：「力学系の作用素論的方法の拡散モデルへの原理的応用」
- ・ 東京大学・先端科学技術研究センター・小谷潔准教授：「時間遅れを含む非線形振動系に対する位相縮約解析」「流体の非線形振動流に対する位相縮約解析」
- ・ 東京大学・新領域創生科学研究科・小林亮太准教授：「時系列データからの非線形振動子の漸近位相と振幅の推定」
- ・ 慶應義塾大学・物理情報工学科・山本直樹教授：「量子散逸力学系の非線形振動現象に対する位相縮約解析」
- ・ 早稲田大学・理工学術院・山崎義弘教授：「基本セルオートマトンに対する Koopman 解析」
- ・ 大阪電気通信大学・柳田達雄教授：「ネットワーク結合力学系の同期のスパース最適化」
- ・ 大阪大学・大学院情報科学研究科・白坂将准教授：「Koopman 作用素論に基づく非線形振動子の位相振幅縮約理論の定式化」
- ・ 北海道大学 山口良文教授：「冬眠中ハムスターの体温時系列に対する時系列解析」
- ・ 名古屋大学 金尚宏特任准教授：「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」
- ・ 大阪大学・柳澤琢史教授：「脳波解析における動的モード分解や関連手法の適用」

[国外]

- ・ 米国 Courant Institute of Mathematical Sciences・D. Giannakis 准教授：「ヒルベルト C^* 環を用いた Skew-Product 力学系の解析」
- ・ 米国 University of California、Santa Barbara・C. Schlosser 博士：「再生核バナッハ空間の構築と作用素論的解析」
- ・ カナダ University of Toronto・A. Garg 博士、米国 Facebook・S. Sinha 氏：「力学系の作用素表現を用いたオフライン強化学習」
- ・ 米国 University of California、Santa Barbara・I. Mezic 教授：「偏微分方程式に対する Koopman 作用素論の定式化」
- ・ 米国 Washington 大学・Jr-Shin Li 教授、米国 Los Alamos 研究所・Anatoly Zlotnik 博士：「非線形振動子の同期の最適化に関する解析」
- ・ 米国・University of California、Los Angeles・平邦彦教授：「流体の非線形振動流に対する位相縮約解析」
- ・ ベルギー Namur 大学・Timoteo Carletti 教授：「ネットワーク結合力学系における自己組織化現

象の解析」

- 中国・南京理工大学・朱金杰博士:「確率振動系の縮約記述とダイナミクスの解析」
- 米国 Yale 大学・Elena Gracheva 准教授:「冬眠中ハムスターの体温時系列に対する時系列解析」
- 英国 Manchester 大学・Jean-Michel Fustin 博士 (UKRI Future Leaders Fellow):「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」
- シンガポール 南洋理工大学・Xunyuanyuan Yin 助教:「産業プロセスのエネルギー効率化と持続可能性を加速する作用素論的解析に基づく深層学習リアルタイム制御フレームワークの開発」