

連続スペクトルの擬固有関数を用いた非線形力学におけるスペクトル解析

坂田 逸志¹, 河原 吉伸^{1,2}

¹ 理研 AIP, ² 大阪大学

e-mail : itsushi.sakata@riken.jp

1 概要

非線形力学系のスペクトル解析において、行列計算に基づく動的モード分解 (DMD) の拡張手法である ResidualDMD (ResDMD) は連続スペクトルを扱える。本研究では、ResDMD から得られるスペクトル特性を反映した擬固有関数に対し、カーネル主角を用いてクラスタリングを行う手法を提案する。熱雑音を含む信号や結合カオス系への応用を通じ、複雑な動力学の特徴抽出における本手法の有効性を示す。

2 DMD における連続スペクトルの問題

動的モード分解 (DMD)[1] は、非線形システムに導入される Koopman 作用素をデータから近似する手法であり、近年様々な分野で応用が広がっている。Koopman 作用素 \mathcal{K} は、離散時間の状態空間における非線形システム $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$ に対し、観測可能関数 g に対して $[\mathcal{K}g](\mathbf{x}) = (g \circ \mathbf{F})(\mathbf{x})$ と定義される。DMD は、Koopman 作用素を近似した行列の固有分解から得られた固有値 λ_j と固有関数 φ_j を用いて、観測信号を次式のように分解する：

$$g(\mathbf{x}_n) = [\mathcal{K}^n g](\mathbf{x}_0) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \lambda_j^n \varphi_j(\mathbf{x}_0) \quad (1)$$

しかし、Koopman 作用素は連続スペクトルを持つ可能性があり、DMD によるモード表現は不十分である。例えば、測度保存系においては、単位円板上の固有関数と一般化固有関数のパラメータ化された集合を用いて以下のように表される：

$$g(\mathbf{x}_n) = [\mathcal{K}^n g](\mathbf{x}_0) = \sum_{\lambda \in \sigma_p(\mathcal{K})} c_\lambda \lambda^n \varphi_\lambda(\mathbf{x}_0) + \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\theta} \phi_{\theta,g}(\mathbf{x}_0) d\theta \quad (2)$$

ここで、 $\sigma_p(\mathcal{K})$ は \mathcal{K} の固有値の集合、 $\phi_{\theta,g}$ は一般化固有関数である。

3 ResDMD と提案手法

ResDMD[2] は、DMD の枠組みを拡張し、連続スペクトルの分析が可能な擬スペクトル [3] を計算する手法である。固有値に対応する任意の複素数 λ とその固有ベクトル g に対し、レゾルベントノルムから計算されるスペクトルとの残差 $[\text{res}(\lambda, g)]^2$ は以下のように定義される：

$$[\text{res}(\lambda, g)]^2 = \frac{\langle \mathcal{K}g, \mathcal{K}g \rangle - \lambda \langle g, \mathcal{K}g \rangle - \bar{\lambda} \langle \mathcal{K}g, g \rangle + |\lambda|^2 \langle g, g \rangle}{\langle g, g \rangle} \quad (3)$$

ResDMD はデータからの近似として、 $\mathcal{K}^* \mathcal{K}$ に対応する行列を新たに計算することで、右辺を計算可能にしている。残差 $[\text{res}(\lambda, g)]^2$ が微量 ϵ よりも小さくなるような集合を ϵ -擬スペクトルと呼び、擬スペクトルの要素である (λ, g) はそれぞれ擬固有値、擬固有関数と呼ばれる。

本研究で提案する手法の核心は、ResDMD から得られる擬固有関数間の非線形な類似性を適切に評価し、それに基づいてクラスタリングを行うことで、連続スペクトルを持つダイナミクスから部分空間を抽出することである。このために、以下の三つの手法を組み合わせている：

1) カーネル主角 [4]：擬固有関数間の非線形な類似性を評価する。擬固有関数 $g_{(i)}$ と $g_{(j)}$ の間の類似度は、以下の一般化固有値問題による固有値 a_{ij} から得られる：

$$\begin{pmatrix} 0 & (g_{(i)}^* g_{(j)})^* \\ g_{(i)}^* g_{(j)} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{v} = a_{ij} \begin{pmatrix} g_{(j)}^* g_{(j)} & 0 \\ 0 & g_{(i)}^* g_{(i)} \end{pmatrix} \mathbf{v} \quad (4)$$

2) スペクトラルクラスタリング [5]：カーネル主角から得られた類似度行列 A と次数行列 D をもちいて正規化グラフラプリアン $L = I - D^{-1}A$ を計算し、その固有ベクトルを用いて低次元空間への埋め込みを行う。このアプローチにより、データの非線形構造を保持しつつ、ノイズに対して頑健なクラスタリングが可能となる。

3) ファジィ C-means 法 [6]：連続スペクトルの重複に対処するため、埋め込んだ低次元空間においてソフトクラスタリングを適用する。

以上によって、擬スペクトルの特徴量を用いることで複雑なダイナミクスをモードの集合として解析可能な手法を示した。

4 結果と結言

本研究では、ResDMD を用いた擬固有関数のクラスタリングが、連続スペクトルを持つ動的システムの解析に有効であることを示すため、2つの数値実験を行った。1次元振動子モデルと結合ヘノン写像モデルを用いた実験において、それぞれ熱雑音下での信号分離と一般化同期現象の特定に成功した。これらの結果は、提案手法が複雑な非線形システムの特徴を捉える上で優れた性能を持つことを示唆している。今後はカーネル法を用いた高次元データへの適用や直接一般化固有関数を近似するようなアプローチを検討していく。

参考文献

- [1] Schmid, Peter J. "Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data." *Journal of fluid mechanics* 656 (2010): 5-28.
- [2] Colbrook, Matthew J., and Alex Townsend. "Rigorous data - driven computation of spectral properties of Koopman operators for dynamical systems." *Communications on Pure and Applied Mathematics* 77.1 (2024): 221-283.
- [3] L. N. Trefethen and M. Embree, Spectra and Pseudospectra: The Behavior of Nonnormal Matrices and Operators. *Princeton University Press*, 2005.
- [4] Wolf, Lior, and Amnon Shashua. "Learning over sets using kernel principal angles." *Journal of Machine Learning Research* 4.Oct (2003): 913-931.
- [5] Shi, Jianbo, and Jitendra Malik. "Normalized cuts and image segmentation." *IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence* 22.8 (2000): 888-905.
- [6] Bezdek, James C. Pattern recognition with fuzzy objective function algorithms. *Springer Science & Business Media*, 2013.

関数値カーネルの Toeplitz 行列積による近似

橋本 悠香^{1,2}, Hafid Ayoub³, 池田 正弘^{2,4}, Kadri Hachem⁵

¹NTT, ²理研 AIP, ³東京大学, ⁴慶應大学, ⁵Aix-Marseille University

e-mail: yuka.hashimoto@ntt.com

1 概要

カーネル法において、適切なカーネル関数の選択は重要である。本稿では、関数同士の積を、Toeplitz 行列同士の積により近似することで、これまで頻繁に用いられてきた多項式カーネル・product カーネル・separable カーネルの3つを一般化することを提案する。関数同士の積は可換であるが、Toeplitz 行列同士の積は非可換であるため、関数の変数に沿った相互作用が生まれる。これにより、関数で表されるデータの変数に沿った振る舞いを捉えることが可能となる。

2 はじめに

カーネル法は機械学習における最も基本的なツールの一つであり [1]、リッジ回帰、主成分分析、サポートベクターマシンなどに適用されている。カーネル法は、正定値カーネルによって構築される再生核ヒルベルト空間 (RKHS) と呼ばれる関数空間によって特徴付けられる。標準的な正定値カーネルは実数値または複素数値であり、スカラー値関数を学習するのに適しているが、ベクトル値、関数値、または作用素値の出力に対するカーネル法も研究されている [2, 3]。この場合のカーネルは、作用素値または関数値の正定値関数であり、関連する特徴空間はベクトル値の再生カーネルヒルベルト空間 (vvRKHS) または再生カーネルヒルベルト C^* 加群 (RKHM) となる。カーネル法における大きな課題の一つは、正定値カーネルの選択である。特に vvRKHS や RKHM において、適切な関数値または作用素値カーネルの構築は難しい。

本研究では、非可換幾何学および C^* 環の分野で議論されてきた spectral truncation [4] に基づく、新しいクラスの関数値正定値カーネルを提案する。提案するカーネルは、truncation する空間 (truncated 空間) の次元に対応する自然数 n でパラメータ付けられており、既存の典型的なカーネル (多項式カーネル・product カーネル・separable カーネル) を一般化する。関数を truncated 空間に射影することで、 $n \times n$ の Toeplitz 行列を得る。2つの関数が与えられた際の積は、各点での積になるため、各点での関係性しか捉えることができない。一方、関数を Toeplitz 行列で近似することで、積の非可換性から、これらの関数の変数に沿った関係性を捉えることが可能となる。また、提案するカーネルが n が無限大に近づくにつれて既存のカーネルに収束することを示す。

3 関数値正定値カーネルと spectral truncation

\mathbb{T} を 1 次元トーラスとし、 $\mathcal{A} = C(\mathbb{T})$ とおく。

定義 1 \mathcal{A} 値関数 $k: \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{A}$ が次の条件を満たす時、正定値カーネルと呼ばれる。

- 任意の $x, y \in \mathcal{X}$, $z \in \mathbb{T}$ に対して $k(x, y) = \overline{k(y, x)}(z)$,
- 任意の $n \in \mathbb{N}$, $c_i \in \mathcal{A}$, $x_i \in \mathcal{X}$, $z \in \mathbb{T}$ に対して、 $\sum_{i,j=1}^n c_i^* k(x_i, x_j) c_j(z) \geq 0$.

$j \in \mathbb{Z}$, $z \in \mathbb{T}$ に対して、 $e_j(z) = e^{ijz}$ とおく。また、 M_x を、 $x \in \mathcal{A}$ に関する $L^2(\mathbb{T})$ 上の掛け算作用素とする。ただし、 i は虚数単位である。 P_n を、 n 次元空間 $\text{Span}\{e_1, \dots, e_n\}$ への射影とし、 M_x を、 $P_n M_x P_n$ により近似する。このとき、 $P_n M_x P_n$ の表現行列 $R_n(x) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ の (j, l) 成分は、以

下のように書ける.

$$R_n(x)_{j,l} = \langle e_j, M_x e_l \rangle_{L^2(\mathbb{T})} = \int_{\mathbb{T}} x(t) e^{-i(j-l)t} dt.$$

$R_n(x)$ の (j, l) 成分は $j - l$ のみに依存するため, $R_n(x)$ は Toeplitz 行列である.

行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対して, $S_n(A) \in C(\mathbb{T})$ を, $S_n(A)(z) = 1/n \sum_{j,l=0}^{n-1} A_{j,l} e^{i(j-l)z}$ と定義する. ただし, $A_{j,l}$ は A の (j, l) 成分である. S_n は, 表現行列 $R_n(x)$ を, 元の関数 x に戻す役割を果たす.

4 Toeplitz 行列を用いたカーネルの構成

前節で定義した R_n , S_n を用いて, 以下のようにカーネルを構成する.

定義 2 $q \in \mathbb{N}$, $\alpha_i \geq 0$, $a_j \in \mathcal{A}$, $i = 1, 2$ と $j = 1, \dots, q$ に対して, $\tilde{k}_{i,j} : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ と $\tilde{k} : \mathcal{A}^d \times \mathcal{A}^d \rightarrow \mathbb{C}$ を, 複素数値正定値カーネルとする. また, $\tilde{k}_{i,j}(x, y)$ により, 写像 $z \mapsto \tilde{k}_{i,j}(x(z), y(z))$ を表す. $x = [x_1, \dots, x_d], y = [y_1, \dots, y_d] \in \mathcal{A}^d$ と $z \in \mathbb{T}$ に対して, 以下のように定義する.

$$\begin{aligned} k_n^{\text{poly},q}(x, y) &= S_n \left(\sum_{i=1}^d \alpha_i (R_n(x_i))^* R_n(y_i)^q \right), \\ k_n^{\text{prod},q}(x, y) &= S_n \left(\prod_{j=1}^q R_n(\tilde{k}_{1,j}(x, y))^* \prod_{j=1}^q R_n(\tilde{k}_{2,j}(x, y)) \right), \\ k_n^{\text{sep},q}(x, y) &= \tilde{k}(S_n(R_n(x)), S_n(R_n(y))) S_n \left(\prod_{j=1}^q R_n(a_j)^* \prod_{j=1}^q R_n(a_j) \right). \end{aligned}$$

例えば, $k_n^{\text{poly},q}(x, y)$ の場合, 関数同士の積 $(x_i^*)^q y_i^q$ は可換であり, 各点ごとの積となるが, R_n を用いて Toeplitz 行列 $R_n(x_i)$ と $R_n(y_i)$ を構成することにより, $(R_n(x_i))^* R_n(y_i)^q$ は非可換な積となる. これにより, 構成されるカーネルの $z \in \mathbb{T}$ における値 $k_n^{\text{poly},q}(x, y)(z)$ は, $x_i(z)$ や $y_i(z)$ だけでなく, $z \neq w$ となる $x_i(w)$ や $y_i(w)$ にも依存する.

定義 2 で定義したカーネルに対して, 以下の定理が成り立つ.

定理 3 $k_n^{\text{poly},q}$ と $k_n^{\text{sep},q}$ は, \mathcal{A} 値正定値カーネルである. また, $x, y \in \mathcal{A}$ と $z \in \mathbb{T}$ に対して, $k_n^{\text{poly},q}(x, y)(z) \rightarrow k^{\text{poly},q}(x, y)(z)$, $k_n^{\text{prod},q}(x, y)(z) \rightarrow k^{\text{prod},q}(x, y)(z)$, $k_n^{\text{poly},q}(x, y)(z) \rightarrow k^{\text{poly},q}(x, y)(z)$ が成り立つ. ただし, $k^{\text{poly},q}(x, y)(z) = \sum_{i=1}^d \alpha_i \overline{x_i(z)} y_i(z)^q$, $k^{\text{prod},q}(x, y)(z) = \prod_{j=1}^q \overline{\tilde{k}_{1,j}(x(z), y(z))} \tilde{k}_{2,j}(x(z), y(z))$, $k^{\text{sep},q}(x, y) = \tilde{k}(x, y) \prod_{j=1}^q (a_j^*)^q a_j^q$.

$k_n^{\text{prod},q}$ については, 少し修正することで正定値カーネルにすることが可能である.

参考文献

- [1] B. Schölkopf and A. J. Smola. *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond*. MIT Press, 2001.
- [2] H. Kadri et al. Operator-valued kernels for learning from functional response data. *JMLR*, 17(20):1–54, 2016.
- [3] Y. Hashimoto et al. Reproducing kernel Hilbert C^* -module and kernel mean embeddings. *JMLR*, 22(267):1–56, 2021.
- [4] F. Dandrea, F. Lizzi, and P. Martinetti. Spectral geometry with a cut-off: Topological and metric aspects. *J. Geom. Phys.*, 82:18–45, 2014.

Koopman 作用素理論の深層学習への応用

幡谷龍一郎

理化学研究所革新知能統合研究センター

e-mail : ryuichiro.hataya@riken.jp

1 概要

非線形力学系を線形作用素である Koopman 作用素を通して解析するアプローチは、流体力学や制御、機械学習分野での応用されている。深層学習分野においても、深層モデルの最適化の過程を非線形力学系と捉え、Koopman 作用素を用いて分析、加速する研究が見られる。本講演ではこのような深層学習分野における応用を、著者らの最近の研究も交えながら紹介する。

2 Koopman 作用素

\mathbb{R}^m 上の離散力学系 $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ を考える。適当な関数空間 \mathcal{G} 上の観測関数 $g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ が与えられたとき、 $\mathcal{K}g = g \circ f$ を満たすような線形作用素を Koopman 作用素という。この作用素は観測関数 g を通して力学系を 1 ステップ進めるとみることでもある。つまり、 $t \in \mathbb{N}, \mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^m$ として、 $\mathcal{K}g(\mathbf{x}_t) = g(f(\mathbf{x}_t)) = g(\mathbf{x}_{t+1})$ 。作用素は、任意の $g \in \mathcal{G}$ に対して $\mathcal{K}g \in \mathcal{G}$ を満たすものとする。ここで、 \mathcal{K} が点スペクトルのみをもち、固有値 $\lambda_i \in \mathbb{C}$ と固有関数 $\phi_i: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}$ とに分解され、 $g = \sum_i v_i \phi_i, v_i = \langle g, \phi_i \rangle$ と展開されるとすると、任意の時刻の観測量を $g(\mathbf{x}_t) = \sum_i \lambda_i^t v_i \phi_i(\mathbf{x}_0)$ と推定し、その漸近的な振る舞いを λ_i によって分類することができる。

Koopman 作用素は数値的には動的モード分解と呼ばれるアルゴリズムによって近似される。これは、観測関数の組 $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_n), g_i \in \mathcal{G}$ と $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_\tau$ を用意し、 $\mathbf{K} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}} \sum_{t=0}^{\tau-1} \|\mathbf{A}\mathbf{g}(\mathbf{x}_t) - \mathbf{g}(\mathbf{x}_{t+1})\|_2^2$ を解くものである。 \mathbf{K} と \mathcal{K} には、任意の $\mathbf{g} = \mathbf{c}^H \mathbf{g}, \mathbf{c} \in \mathbb{C}^n$ について、 $\mathcal{K}g \approx \mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{g}$ という関係がある。

3 深層学習

深層学習はニューラルネットワークのパラメータを与えられた目的関数に対して最適化（学習と呼ばれる）することにより行う。ニューラルネットワークは「層」などと呼ばれる L 個の関数 $f_l: \mathbb{R}^{d_{l-1}} \rightarrow \mathbb{R}^{d_l} (l = 1, \dots, L)$, ただし $d_0, \dots, d_L \in \mathbb{N}$, を合成して得られる関数 $f = f_L \circ f_{L-1} \circ \dots \circ f_1$ である。各層の関数はたとえば $f_l(\mathbf{h}_l) = \mathbf{W}_l \mathbf{h}_l + \mathbf{b}_l, \mathbf{W}_l \in \mathbb{R}^{d_l \times d_{l-1}}, \mathbf{b}_l \in \mathbb{R}^{d_l}, \mathbf{h}_l \in \mathbb{R}^{d_{l-1}}$ のような変換である。これらのパラメータ $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{W}_1, \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{W}_L, \mathbf{b}_L)$ は一般的には、データ \mathcal{D} に依存した何らかの目的関数 $L(\boldsymbol{\theta}; \mathcal{D})$ を最小化するように、逐次的に更新する。時刻 t でのパラメータを $\boldsymbol{\theta}_t$ と書くことにすれば、パラメータは勾配降下法によって、 $\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \eta_t \nabla_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}_t; \mathcal{D})$ （ただし η_t は時刻 t での学習率）などといった形で更新される。

このように、深層学習には層方向と時間方向の力学系を見いだすことができる。層方向の力学系に対して Koopman 作用素を用いた研究としては、パラメータを共有した無限層のニューラルネットワークの不動点を近似するもの [1] やニューラルネットワークの複雑さを層に対応する Koopman 作用素の作用素ノルムを利用して表現するもの [2] が挙げられる。一方、時間方向の力学系に対して Koopman 作用素を利用すると、勾配降下法の時間発展を予測することが可能になり、勾配降下法を加速 [3]、あるいは将来的に消失するパラメータやその要素を推定 [4] した研究がある。

4 ハイパーパラメータ最適化への応用

勾配降下法の学習率のようにパラメータの学習を支配するメタなパラメータはハイパーパラメータと呼ばれる。以下ではハイパーパラメータを ϕ と表す。実際に深層学習を用いる上では、このハイパーパラメータも最適化する必要がある。ここでは、パラメータの学習に用いたデータ \mathcal{D} とは異なるデータ \mathcal{D}' を用意し、学習終了時刻 T ($\gg 1$) での \mathcal{D}' に関する目的関数 $L(\theta_T(\phi); \mathcal{D}')$ を小さくするように、ハイパーパラメータも勾配降下法によって最適化することを考える。つまり、ハイパーパラメータの更新は超勾配 $\nabla_{\phi} L(\theta_T(\phi); \mathcal{D}')$ による。

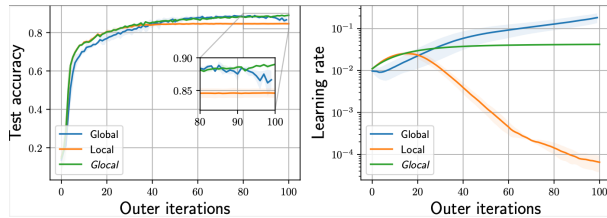


図 1. FMNIST の学習において、ハイパーパラメータ最適化を行った際の正解率と学習率の変化

このような、「大域的」な超勾配を用いたハイパーパラメータ最適化は扱う目的関数を直接最小化しているが、深層学習では大きな T を使うため、計算コストが大きくなり、扱いにくい。そこで、適当な τ ($\ll T$) ステップ後の超勾配 $\nabla_{\phi} L(\theta_{\tau}(\phi); \mathcal{D}')$ が $\nabla_{\phi} L(\theta_T(\phi); \mathcal{D}')$ を近似していると考えられるアプローチが提案さ

れている。この「局所的」なアプローチは計算が容易であるものの、大域的な超勾配との乖離により不適切な最適化を行ってしまうことがある。

筆者の最近の研究 [5] では、Koopman 作用素を用いて、局所 (local) 法と大域 (global) 法両者の「いいとこ取り」を行う *glocal* 法を提案している。具体的には局所的な超勾配の列 $[\nabla_{\phi} L(\theta_1(\phi); \mathcal{D}'), \dots, \nabla_{\phi} L(\theta_{\tau}(\phi); \mathcal{D}')]$ を用意し、DMD によって Koopman 作用素を推定し、 $\nabla_{\phi} L(\theta_T(\phi); \mathcal{D}')$ を予測し最適化に用いる。local, global, および提案法の *glocal* 法によってハイパーパラメータ最適化した結果を図 4 に示した。右の学習率の推移を見ると、提案法が高コストな大域的な超勾配を用いることなく global 法をよく追従していることが分かる。

5 まとめと今後

本発表では深層学習の層方向、時間方向に関する力学系を Koopman 作用素理論を通して扱うことが理論的にも応用的にも効果的であることを紹介した。特に深層学習の時間方向の力学系は確率的最適化であることが一般的で、今後はその影響を考慮した方法を確立することが必要となる。

参考文献

- [1] T. Konishi and Y. Kawahara, “Stable invariant models via Koopman spectra.” *Neural Networks*, 165, 393–403, 2023.
- [2] Y. Hashimoto et al., “Koopman-based generalization bound: New aspect for full-rank weights.”, In *Proc. of ICLR 2024*, 2024.
- [3] A. S. Dogra and R. T. William. “Optimizing neural networks via Koopman operator theory.” *Advances in NeurIPS 2020*, 2020.
- [4] W. T. Redman et al., “An operator theoretic view on pruning deep neural networks.” In *Proc of ICLR 2022*, 2022.
- [5] R. Hataya and Y. Kawahara, “Glocal Hypergradient Estimation with Koopman Operator.” *arXiv*, 2024.

局所解析汎関数上の押し出しの有限次元近似について

石川 勲¹

¹ 愛媛大学

e-mail : ishikawa.isao.zx@ehime-u.ac.jp

1 導入

本稿では、有限データから局所解析汎関数上の解析写像による押し出しを“有限次元近似”する手法 [1] について説明する（講演では力学系に限定するが、本稿では一般の写像対する主張を述べる）。

$E := \mathbb{C}^d$ および $F := \mathbb{C}^r$ とし、 E および F 上の通常の内積をそれぞれ $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ および $\langle \cdot, \cdot \rangle_F$ とする。コンパクトな樽型集合 $K \subset E$ を固定する。ここで、 E の樽型集合とは、 0_E の閉凸近傍であって、任意の $|a| \leq 1$ の $a \in \mathbb{C}$ に対して $aK \subset K$ となる集合として特徴付けられる（ 0_E は E の零ベクトルである）。例えば、 0_E を中心とする閉球および多重円盤はコンパクトな樽型集合である。 K によって誘導される E 上のノルムを次のように定義する：

$$|z|_K := \inf\{r > 0 : z/r \in K\}. \quad (1)$$

例えば、 $K = \{z \in E : \|z\|_E \leq r\}$ が半径 r の閉球である場合、 $|z|_K = \|z\|_E/r$ となる。 $z \in K$ であることは $|z|_K \leq 1$ であることが必要十分であることに注意する。

$f : K \rightarrow F$ を解析写像とし、これは K の開近傍上に定義された正則写像が存在し、その制限が f と一致することを意味する。 $f(K) \subset L$ となるコンパクトな凸集合 $L \subset F$ を固定する。 $\mathcal{O}_E(K)$ および $\mathcal{O}_F(L)$ をそれぞれ K および L 上の解析関数の空間とする。これらに適切な位相を付与し、局所凸空間として扱う。すると、解析写像 $f : K \rightarrow L \subset F$ は**引き戻し**と呼ばれる連続線形写像 $f^* : \mathcal{O}_F(L) \rightarrow \mathcal{O}_E(K)$; $h \mapsto h \circ f$ を誘導する。したがって、局所解析汎関数上の連続線形写像 $f_* := (f^*)' : \mathcal{O}_E(K)' \rightarrow \mathcal{O}_F(L)'$ を得る。これを**押し出し**と呼ぶ。ここで、 $(f^*)'$ は f^* の双対写像であり、 $\mathcal{O}_E(K)'$ および $\mathcal{O}_F(L)'$ はそれぞれ $\mathcal{O}_E(K)$ および $\mathcal{O}_F(L)$ の強位相を入れた双対空間とする。

$\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^d$ および $p \in K$ に対して、 $\delta_p^\alpha \in \mathcal{O}_E(K)'$ を p における α 階微分、すなわち、 $\delta_p^\alpha(h) := (\partial_{z_1}^{\alpha_1} \cdots \partial_{z_d}^{\alpha_d} h)(p)$ と定義する。 $\alpha = (0, \dots, 0)$ の場合、 δ_p^0 の代わりに δ_p と表記する。 $m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対して、 $\mathcal{O}_E(K)'$ の有限次元部分空間を次のように定義する：

$$\mathfrak{D}_{p,m} := \text{span} \left(\left\{ \delta_p^\alpha : \alpha = (\alpha_i)_{i=1}^d \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^d, \alpha_1 + \cdots + \alpha_d \leq m \right\} \right).$$

また、 $r_m^E := \dim(\mathfrak{D}_{p,m}) = \binom{m+d}{d}$ とする。任意の $m \geq 0$ に対して $f_*(\mathfrak{D}_{p,m}) \subset \mathfrak{D}_{f(p),m}$ が成り立つことに注意する。さらに、 $\cup_{m \geq 0} \mathfrak{D}_{p,m}$ および $\cup_{m \geq 0} \mathfrak{D}_{f(p),m}$ の両方がそれぞれ $\mathcal{O}_E(K)'$ および $\mathcal{O}_F(L)'$ において稠密であることも証明できる。そこで、有限次元ベクトル空間間の線型写像を $f_*|_{\mathfrak{D}_{p,m}} : \mathfrak{D}_{p,m} \rightarrow \mathfrak{D}_{f(p),m}$ を $\mathcal{O}_E(K)'$ から $\mathcal{O}_F(L)'$ への押し出し f_* の適切な有限次元対応物とみなすことにして、これを有限のデータから推定することを考える。

2 主定理

以下では、簡単のため、 $p = 0_E$ かつ $f(0_E) = 0_F$ の場合のみを考える。 $\{\alpha^{(i)}\}_{i=1}^\infty = \mathbb{Z}_{\geq 0}^d$ 番号付を次のように定義する： $\alpha^{(i+1)}$ は $i = 1, \dots, d$ の場合に i 番目の基本ベクトルであり、 $i \leq j$ ならば $|\alpha^{(i)}| \leq |\alpha^{(j)}|$ となる。同様に $\{\beta^{(i)}\}_{i=1}^\infty = \mathbb{Z}_{\geq 0}^r$ にも同様の番号付を与える。また、 $i \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対

して,

$$u_i(z) := \frac{z^{\alpha^{(i)}}}{\sqrt{\alpha^{(i)}!}}, \quad v_i(w) := \frac{w^{\beta^{(i)}}}{\sqrt{\beta^{(i)}!}},$$

と定義する. ここで, 多重指数記法を用いていることに注意する: $z^\alpha := \prod_{i=1}^d z_i^{\alpha_i}$, および, $\alpha! := \prod_{i=1}^d \alpha_i!$ であり, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^d$ および $z = (z_1, \dots, z_d) \in \mathbb{C}^d$ とする. $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $z \in E$, および, $w \in F$ に対して, $\mathbb{C}^{1 \times r_n^E}$ および $\mathbb{C}^{1 \times r_n^F}$ の (横) ベクトルを次のように定義する:

$$\mathbf{u}_{p,n}(z) := (u_{p,1}(z), u_{p,2}(z), \dots, u_{p,r_n^E}(z)), \quad \mathbf{v}_{q,n}(w) := (v_{q,1}(w), v_{q,2}(w), \dots, v_{q,r_n^F}(w)).$$

$Z = (z^1, \dots, z^N) \in E^N$ および $W = (w^1, \dots, w^N) \in F^N$ に対して, $\mathbf{U}_{n,Z} \in \mathbb{C}^{N \times r_n^E}$ および $\mathbf{V}_{n,W} \in \mathbb{C}^{N \times r_n^F}$ を次のように定義する:

$$\mathbf{U}_{n,Z} := \begin{pmatrix} \mathbf{u}_n(z^1) \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n(z^N) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V}_{n,W} := \begin{pmatrix} \mathbf{v}_n(w^1) \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n(w^N) \end{pmatrix}.$$

$z^i \in K$ および $w^i = f(z^i)$ を $i = 1, \dots, N$ と仮定する. すると, $m \leq n$ である整数 m および n に対して, $\hat{\mathbf{C}}_{m,n,Z} \in \mathbb{C}^{r_m^E \times r_m^F}$ を $\mathbf{V}_{n,W}^* (\mathbf{U}_{n,Z}^*)^\dagger \in \mathbb{C}^{r_n^E \times r_n^F}$ の大きさ (r_m^F の首座小行列として定義する:

$$\mathbf{V}_{n,W}^* (\mathbf{U}_{n,Z}^*)^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{C}}_{m,n,Z} & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad (2)$$

ここで, $(\cdot)^\dagger$ は擬似逆行列を示す. この行列 $\hat{\mathbf{C}}_{m,n,Z}$ を構築する手順は, [2] において $E = F$ の場合に提案されたものであり, Jet Extended Dynamic Moded Decomposition と呼ばれる.

$p' \in E$, $\mathbf{r} := (r_1, \dots, r_d) \in \mathbb{R}_{>0}^d$ に対して, $\Delta_{\mathbb{R}}(p'; \mathbf{r}) := \{x \in \mathbb{R}^d : |x_i - p'_i| \leq r_i\}$ と定義する.

定理 1. $m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ とする. μ を $K \cap \mathbb{R}^d$ 上のボレル確率測度として, $K \cap \mathbb{R}^d$ 上の Lebesgue 測度に関して絶対連続であるとする. $\rho : K \cap \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ を μ の Radon–Nykodim 微分とする. $\{z^i\}_{i=1}^\infty \subset K$ とし, $Z_N := (z^1, \dots, z^N) \in K^N$ と定義する. \mathbf{C}_m を基底 $(\delta_{0_E}^{\alpha^{(i)}})_{i=1}^{r_m^E}$ および $(\delta_{0_F}^{\beta^{(i)}})_{i=1}^{r_m^F}$ に関する $f_*|_{\mathfrak{D}_{0_E,m}} : \mathfrak{D}_{0_E,m} \rightarrow \mathfrak{D}_{0_F,m}$ の表現行列とする. 以下を仮定する:

- (i) $\hat{\mu}_N := N^{-1} \sum_{i=1}^N \delta_{z^i}$ が $N \rightarrow \infty$ のとき μ に弱収束する,
- (ii) $p' \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_d) \in \mathbb{R}_{>0}^d$ が存在し, $\Delta_{\mathbb{R}}(p'; \mathbf{r}) \subset K$ かつ $\text{ess.inf}_{\Delta_{\mathbb{R}}(p'; \mathbf{r})}(\rho) > 0$ である.

すると, 任意の $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対して, $m \leq n$ ならば次の不等式が成り立つ:

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \left\| \mathbf{C}_m - \hat{\mathbf{C}}_{m,n,Z_N} \right\|_{\text{Fr}} \lesssim \|(2\tau|\cdot|_K)^n\|_{L^2(\mu)}, \quad (3)$$

ここで, $\tau := \max_{i=1,\dots,d} (1 + |p'_i|/r_i)$ であり, $\|\cdot\|_{\text{Fr}}$ は行列のフロベニウスノルムである.

参考文献

- [1] Isao Ishikawa. Finite-dimensional approximations of push-forwards on locally analytic functionals and truncation of least-squares polynomials. *arXiv:2404.10769*, 2024.
- [2] Isao Ishikawa, Yuka Hashimoto, Masahiro Ikeda, and Yoshinobu Kawahara. Koopman operators with intrinsic observables in rigged reproducing kernel Hilbert spaces, 2024.