

大自由度力学系の Koopman 作用素論に基づく次元縮約について

中尾 裕也

東京工業大学 工学院 システム制御系

〒 152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W8-16

Email: nakao@sc.e.titech.ac.jp

1. はじめに

実世界の現象の多くは、流体現象に代表されるように、大きな自由度を持つ。しかし、エネルギーの散逸がある系では、系を力学系として見たときに、その相空間(状態空間)の体積は縮小し、系の状態は高次元の相空間中にある低次元の集合に漸近する。従って、もしうまくそのような低次元の集合を特徴づける良い変数を見出すことができれば、大自由系であっても少数の変数で近似的に記述できることが期待され、系の解析や制御に有用だと考えられる。そのような力学系に対する近似的な次元削減法は、一般に縮約理論と呼ばれ、古くから各種の研究がなされてきている。

流体系などの偏微分方程式により記述される系に対して古くから知られている次元削減手法の例としては、Proper Orthogonal Decomposition (POD) が有名である^(1,2)。これは統計学における主成分分析と同様の手法で、系の状態をエネルギー (L^2 ノルム) の観点から最も良く近似できるように系のデータから定めた直交関数系を用いて近似する。この手法はもちろん有用だが、系の状態を直交する線形なモードの重ね合わせとして表すため、非線形な現象に対して必ずしも直観的な分解を与えるとは限らない。例えば、カルマン渦列のような流れ場に適用しても、流れの力学的な特徴を自然な形で捉えているとは言い切れない形状のモードに分解される。そのため、非線形な力学系の特徴を踏まえた自然な次元削減の方法が模索されてきている。

本稿では、近年注目されている力学系の Koopman 作用素に基づく解析法について、特に次元縮約に関する観点から概説する。Koopman 作用素は、もとは von Neumann による量子力学の作用素論的な定式化に触発されて、Koopman が古典 Hamilton 力学系に対する作用素論的な定式化を提案したことに由来するものであり、非常に古い歴史を持つ^(3,4)。従来、Hamilton 力学系の数理的な解析において主に議論されていたが⁽⁵⁾、今世紀になって Mezić ら^(6,7,8,9,10,11,12)により散逸力学系の解析に展開され、さらに、流体力学分野で新たなデータ解析法として注目を集めていた動的モード分解法との関係^(13,14)が明らかにされたことをきっかけに、大きな注目を集め、応用数学を中心に様々な分野で盛んに研究されてきている。

Koopman 作用素は、力学系の状態変数そのものではなく、その観測量の時間発展を記述する。そのため、系の状態が非線形な時間発展方程式に従っていても、観測量の時間発展は線形な方程式で記述される。その一方で、観測量は無限次元空間の要素となるが、Koopman 作用素の主要な固有値に対応する少数個の固有関数に注目することにより、系統的な近似のもとで系の次元を削減できる場合がある。

本稿では、まず常微分方程式で記述される力学系に対する Koopman 作用素論的な観点からの縮約の枠組みを述べた後、偏微分方程式に対する Koopman 作用素論的なアプローチについて述べる。

2. 常微分方程式で記述される力学系の縮約

2.1 例

Kaiser らによる簡潔な平面上の力学系の例を考えよう (図 1)⁽¹⁵⁾。

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu x \\ \lambda(y - x^2) \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{x} = (x, y)$ は系の状態変数、 $\mu < 0, \lambda < 0$ はパラメータである。右辺のベクトル場を $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (\mu x, \lambda(y - x^2))$ とする。この系は y の式に x^2 の項が含まれているため非線形である。明らかに原点 $(0, 0)$ は固定点 (平衡点, 不動点) で、その線形安定性を特徴づける原点での Jacobi 行列は

$$J = D\mathbf{F}(\mathbf{x})|_{(0,0)} = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \quad (2)$$

となり、その固有値は μ, λ である。 $\mu < 0, \lambda < 0$ なので、原点は線形安定である。

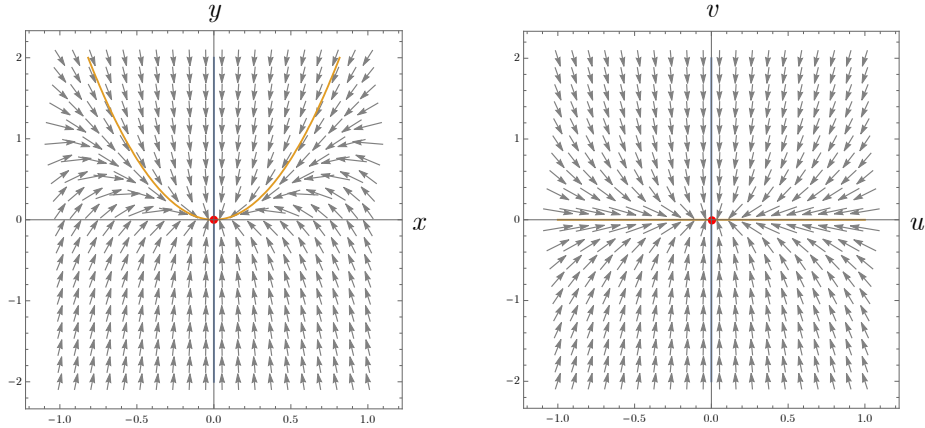


Fig.1: (左) 式 (1) の (x, y) 平面上のベクトル場。太線は「遅い多様体」。 (右) 式 (5) の (u, v) 平面上のベクトル場。

ここで、以下の線形作用素を考えよう。

$$A = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \nabla = \mu x \frac{\partial}{\partial x} + \lambda(y - x^2) \frac{\partial}{\partial y} \quad (3)$$

後述するように、この A は式 (1) の力学系の Koopman 作用素の無限小生成作用素 (infinitesimal generator, 以下単に generator) である。この作用素 A は、固有値 μ, λ とこれらに対応する固有関数

$$\phi_\mu(x, y) = x, \quad \phi_\lambda(x, y) = y - \frac{\lambda}{\lambda - 2\mu} x^2 \quad (4)$$

を持つ。これは、実際に A を作用させてみれば、 $A\phi_\mu(x, y) = \mu\phi_\mu(x, y)$, $A\phi_\lambda(x, y) = \lambda\phi_\lambda(x, y)$ が満たされることからすぐに確認できる。ここで、原点の Jacobi 行列の固有値 μ, λ が A の固有値ともなっているが、これは線形安定な固定点に対して一般に成り立つ性質である。

さて、 ϕ_μ, ϕ_λ は (x, y) に対して実数を与える関数だが、これを (x, y) から新しい変数 $u = \phi_\mu(x, y), v = \phi_\lambda(x, y)$ への変数変換と考えてみる。すると、変換された (u, v) は

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{d\phi_\mu}{dt} \\ \frac{d\phi_\lambda}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dx}{dt} \\ \frac{dy}{dt} - \frac{\lambda}{\lambda - 2\mu} 2x \frac{dx}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu x \\ \lambda \left(y - \frac{\lambda}{\lambda - 2\mu} x^2 \right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu u \\ \lambda v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (5)$$

という線形な方程式に従う。このように、Koopman 固有関数により、元の非線形系が線形系に変換される。式 (5) はすぐに解くことができ、その解は $u(t) = u(0)e^{\mu t}, v(t) = v(0)e^{\lambda t}$ という形で与えられる (図 1)。これを元の (x, y) に変換すれば式 (1) の解が得られる。

ここで、固有値 λ が μ に比べてずっと小さい ($\lambda \ll \mu < 0$) としよう。すると、変数 v は u に比べてずっと速く 0 に近づき、その後 u がゆっくりと 0 に近づく。元の座標では、変数 x, y は $v = \phi_\lambda(x, y) = 0$ を満たす曲線

$$y = \frac{\lambda}{\lambda - 2\mu} x^2$$

に速やかに近づき、その後、この曲線上を 0 に向けてゆっくりと減衰する。このような曲線は系の「遅い多様体 (slow manifold)」と呼ばれる。今の場合、系自体は 2 次元だが、 $\lambda \ll \mu < 0$ なので、実質的には系はすぐ

に上記の1次元の曲線上に到達する．そこで， λ に対応する速い緩和ダイナミクスを無視すれば，系の次元を2から1に減らす，つまり，縮約することができる．以上の例は，Koopman固有関数を用いることにより，系を大域的に線形化した上で，速いダイナミクスを落として次元を減らす，という操作が系統的に実行できることを示している．

2.2 Koopman 作用素とその固有関数

常微分方程式で表される力学系の Koopman 作用素を一般的に考えよう．時刻 t における系の状態が N 次元の実ベクトル $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^N$ で表され，常微分方程式

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \quad (6)$$

に従って時間発展しているとする．ベクトル場 $\mathbf{F}$ は十分に滑らかで解析的であるとする．系の状態を $\tau (\geq 0)$ 時間発展させる写像 (フロー (flow), 流れ) を $S^\tau : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ とする．すなわち，

$$\mathbf{x}(t + \tau) = S^\tau \mathbf{x}(t) \quad (7)$$

フローは $S^0 \mathbf{x} = \mathbf{x}$ ，および $S^{t+s} \mathbf{x} = S^t(S^s \mathbf{x})$ ($t, s \geq 0$) を満たす．

系の状態 $\mathbf{x}$ に対してある観測値を与える関数を観測量 (observable) と呼び，これを写像 $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{C}$ で表す．観測量のなす空間を $\mathcal{G}$ とすると，系の Koopman 作用素 $U^\tau : \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$ は

$$(U^\tau f)(\mathbf{x}) = f(S^\tau \mathbf{x}) \quad (8)$$

により定義される．ここで $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ はある与えられた系の状態である．この式は， $\mathbf{x}$ を初期状態として τ 時間発展させた状態 $S^\tau \mathbf{x}$ を観測量 f で観測して得られる値が，観測量 f を τ 時間発展させた $U^\tau f$ という観測量で初期状態 $\mathbf{x}$ を観測して得られる値と等しくなるように， f の時間発展を決めることを意味する．系の状態と観測量の時間依存性を陽に書くと，

$$f_\tau(\mathbf{x}(0)) = (U^\tau f_0)(\mathbf{x}(0)) = f_0(S^\tau \mathbf{x}(0)) = f_0(\mathbf{x}(\tau)) \quad (9)$$

となり，時刻0での観測量を f_0 とすると，時刻 τ での観測量は Koopman 作用素 U^τ を用いて $f_\tau = U^\tau f_0$ となり， f_τ を用いて $\mathbf{x}(0)$ を観測すると， f_0 を用いて $\mathbf{x}(\tau)$ を観測した場合と同じ値が得られるということの意味している．この状況を図2に示す．フローの性質から，すぐに $U^0 f = f$, $U^{t+s} f = U^t(U^s f)$, $U^t(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1(U^t f_1) + c_2(U^t f_2)$ (c_1, c_2 は任意の定数) であることを示すことができ， U^t は半群をなす線形作用素であることが分かる．

次式で定義される U^τ の generator を考えよう．

$$Af(\mathbf{x}) = \lim_{\tau \rightarrow +0} \frac{U^\tau f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})}{\tau} \quad (10)$$

時刻 τ での系の状態 $S^\tau \mathbf{x}$ は， τ が十分に小さければ，

$$S^\tau \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{F}(\mathbf{x})\tau + O(\tau^2) \quad (11)$$

と表せる．さらに観測量 f が Taylor 展開できるとすると， U^τ の作用を

$$U^\tau f(\mathbf{x}) = f(S^\tau \mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \mathbf{F}(\mathbf{x})\tau + O(\tau^2)) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x})\tau + O(\tau^2) \quad (12)$$

と表せるので，これを式 (10) に代入すると， A の $f(\mathbf{x})$ への作用は

$$Af(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \nabla f(\mathbf{x}) \quad (13)$$

となることが分かる．この A が前節の式 (3) で導入したものであった． A を用いて，観測量 f の時間発展は，

$$\frac{d}{dt}f_t(\mathbf{x}) = Af_t(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \nabla f_t(\mathbf{x}) \quad (14)$$

と表せる (時刻 t を陽に書いた)．なお，式中の $\mathbf{x}$ は時間発展しないことに注意していただきたい．また， A を用いて Koopman 作用素は $U^\tau = e^{A\tau}$ と表せる．

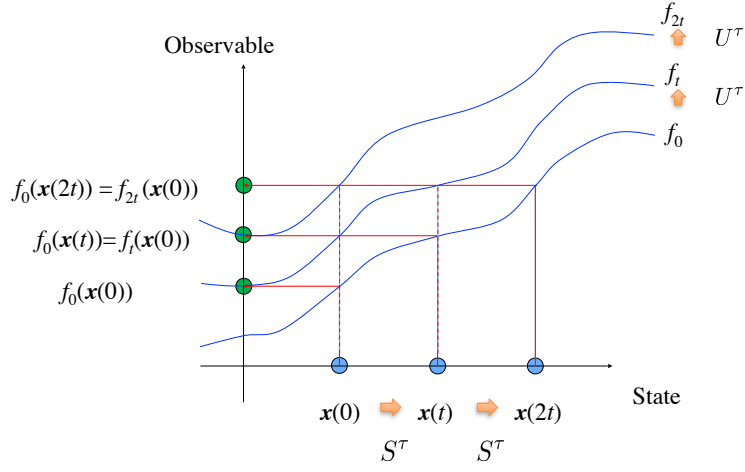


Fig.2: 状態 x の時間発展と観測量 f の時間発展の関係。

さて、Koopman 作用素 U^τ は線形なので、 A も線形作用素であり、その固有値と固有関数を考えるのは自然である。固有値を λ 、対応する固有関数を ϕ_λ とすると、固有値方程式は

$$A\phi_\lambda(x) = \lambda\phi_\lambda(x) \quad (15)$$

となる。これを式 (14) に代入すると、 ϕ_λ の時間発展は

$$\frac{d}{dt}\phi_\lambda(x) = A\phi_\lambda(x) = \lambda\phi_\lambda(x) \quad (16)$$

となり、積分して $\phi_{\lambda,t}(x) = e^{\lambda t}\phi_{\lambda,0}(x)$ となる (t 依存性を陽に書いた)。よって、 ϕ_λ は U^τ の固有値 $e^{\lambda t}$ の固有関数でもある。特に、 x を $F(x_0) = 0$ を満たす系の固定点 x_0 にとると、 $S^\tau x_0 = x_0$ なので、 $\lambda = 0$ でない限り $\phi(x_0) = 0$ となる。

線形安定な固定点 x_0 を持つ系では、 x_0 での Jacobi 行列の固有値は A の固有値ともなっており、重要な役割を果たす (以下、これらを主要な固有値と呼ぶ)。このことは以下のように示せる。固定点を x_0 として、その近傍の任意の点 $x = x_0 + y$ を考える。ここで y は微小変位を表すベクトルである。 ϕ_λ が固有値 λ の Koopman 固有関数であり、 ϕ_λ 、 $F(x)$ とも x_0 の周りに Taylor 展開できるとする。

$$\phi_\lambda(x) = \phi_\lambda(x_0 + y) = \phi_\lambda(x_0) + \nabla\phi_\lambda(x_0) \cdot y + O(y^2) \quad (17)$$

$$F(x) = F(x_0 + y) = F(x_0) + DF(x_0)y + O(y^2) \quad (18)$$

ここで $\phi_\lambda(x_0) = 0$ 、 $F(x_0) = 0$ である。これらを固有値方程式 (15) に代入すると、最低次では

$$(DF(x_0)y) \cdot (\nabla\phi_\lambda(x^*)) = \lambda(\nabla\phi_\lambda(x^*)) \cdot y \quad (19)$$

という式が得られ、これが任意の y について成立することから、

$$DF(x_0)^\top(\nabla\phi_\lambda(x^*)) = \lambda(\nabla\phi_\lambda(x^*)) \quad (20)$$

となる。よって、 λ は固定点 x_0 の Jacobi 行列 $DF(x_0)$ の転置行列の固有値となり、また Koopman 固有関数の勾配ベクトル $\nabla\phi_\lambda(x_0)$ はその固有ベクトルとなる。なお、 A の形より、 ϕ_1, ϕ_2 が A の固有値 λ_1, λ_2 の固有関数なら、 $\phi_1\phi_2$ も固有値 $\lambda_1 + \lambda_2$ の固有関数である。

$$A\phi_1(x)\phi_2(x) = (\lambda_1 + \lambda_2)\phi_1(x)\phi_2(x) \quad (21)$$

この意味で Koopman 固有値と固有関数は無数に存在する。

ここで、重要な事実として、解析的な観測量は、主要な固有値に対する Koopman 固有関数を用いて展開できることが知られている (証明は文献⁽¹⁰⁾などを参照)。

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{n=1}^N \frac{1}{n!} \sum_{j_1=1}^{\infty} \cdots \sum_{j_n=1}^{\infty} c_{j_1, \dots, j_n} \phi_{\lambda_1}(\mathbf{x}) \cdots \phi_{\lambda_n}(\mathbf{x}) \quad (22)$$

従って、観測量 f の時間発展は、Koopman 作用素 $U^t = e^{At}$ を作用させて

$$(U^t f)(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{n=1}^N \frac{1}{n!} \sum_{j_1=1}^{\infty} \cdots \sum_{j_n=1}^{\infty} c_{j_1, \dots, j_n} e^{(\lambda_1 + \dots + \lambda_n)t} \phi_{\lambda_1}(\mathbf{x}) \cdots \phi_{\lambda_n}(\mathbf{x}) \quad (23)$$

となる。ここで、 $(U^t f)(\mathbf{x}) = f(S^t \mathbf{x})$ は時刻 t での観測量を表しているので、一般には非線形な系の観測量の時間発展を線形な演算によって求められることになる。特に、 f として $\mathbf{x}$ の各要素の値をそのまま返す関数を選べば、 $\mathbf{x}$ から出発した系の状態の時間発展が得られる。

前述の例のように、小さな (負で絶対値の大きい) 実部を持つ固有値に対応する成分は減衰が速いので、それらを消去することで近似的に次元を減らすことができる。例えば、最も緩和の遅いモードに対応する固有値を λ_1 のみに着目すると、観測量の時間発展は

$$f(S^t \mathbf{x}) = (U^t f)(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_0) + c_1 \phi_{\lambda_1}(\mathbf{x}) e^{\lambda_1 t} \quad (24)$$

と近似され、長時間のダイナミクスが固有値 λ_1 に対応する成分に支配されることを示している。ここで、 $|\phi_{\lambda_1}(\mathbf{x})|$ が等しい値となる状態 $\mathbf{x}$ の集合はアイソステイブル (isostable)^(10, 11, 12) と呼ばれ、これらの状態は互いに等しいタイミングを保ちつつ一定のレートで $\mathbf{x}_0$ に漸近してゆく。

2.3 力学系の次元縮約

2.1 節で述べた Koopman 固有関数に基づく次元縮約の手順を一般的に述べよう。 N 次元の力学系

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \quad (25)$$

が線形安定な固定点 $\mathbf{x}_0$ を持ち、その Jacobi 行列の固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ は全て実部が負とする。これらは系の主要な Koopman 固有値でもあり、対応する Koopman 固有関数を $\phi_1, \dots, \phi_N$ とする。これらを用いて新しい変数

$$y_n = \phi_n(\mathbf{x}) \quad (n = 1, \dots, N) \quad (26)$$

を導入すると、それぞれの y_n は互いに独立に線形な時間発展方程式

$$\frac{d}{dt} y_n = \frac{d}{dt} \phi_n(\mathbf{x}) = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \nabla \phi_n(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_n(\mathbf{x}) = A \phi_n(\mathbf{x}) = \lambda_n y_n \quad (n = 1, \dots, N) \quad (27)$$

に従う。つまり、系は線形化されてそれぞれのモードに分解される。また、系が外力 $\mathbf{p}(t)$ を受けており、

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) + \mathbf{p}(t) \quad (28)$$

に従うとすると、変数 $y_n = \phi_n(\mathbf{x})$ の従う方程式は

$$\frac{d}{dt} y_n = \frac{d}{dt} \phi_n(\mathbf{x}) = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \nabla \phi_n(\mathbf{x}) = (\mathbf{F}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}) \cdot \nabla \phi_n(\mathbf{x}) = \lambda_n y_n + \mathbf{Z}(y_1, \dots, y_N) \cdot \mathbf{p} \quad (n = 1, \dots, N) \quad (29)$$

となる。ここで、 $\mathbf{Z}(y_1, \dots, y_N)$ は、 $\nabla \phi_n(\mathbf{x})$ を $y_1, \dots, y_N$ の関数として表したものである。ここで、例えば固有値を途中の M 番目までのみ考慮し、それよりも減衰の速い変数は最初から $y_j = 0$ ($j > M$) と近似すれば、

$$\frac{d}{dt} y_n(t) \approx \lambda_n y_n(t) + \mathbf{Z}(y_1, \dots, y_M, 0, \dots, 0) \cdot \mathbf{p}(t) \quad (n = 1, \dots, M) \quad (30)$$

という M 次元に次元を落とした発展方程式が得られる。このように、Koopman 固有関数を用いることによって、系統的に系を次元縮約することができる。

3. 偏微分方程式で記述される力学系への適用

3.1 Koopman 作用素とその固有関数

前節では有限次元の常微分方程式で記述される力学系に対する Koopman 作用素論的な観点からの次元縮約について述べた。この議論は、形式的にはそのまま偏微分方程式に拡張できる。以下、文献⁽¹⁸⁾に沿ってその概略を述べる。簡単のため、空間 1 次元の偏微分方程式に話を限り、時刻 t の系の状態 (場) が実変数 $u(x, t)$ で与えられ、以下の形の式に従うとしよう。

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \mathcal{F}\{u(x, t)\} \quad (31)$$

ここで幅 L の区間を考えており、 $x \in [0, L]$ は空間座標である。右辺の $\mathcal{F}$ は系の発展法則を表し、 $u(x, t)$ とその偏微分からなるとする。両端 $x = 0, L$ では適切な境界条件 (Dirichlet, Neumann など) を課す。この系は、 $\mathcal{F}\{u_0(x)\} = 0$ を満たす線形安定な孤立した一様定常解 $u_0(x) = 0$ ($0 \leq x \leq L$) を持つと仮定する。もし元の系が非一様な定常解 $u_0(x)$ をもつ場合には、 $u(x, t) - u_0(x)$ を改めて $u(x, t)$ とおく。この一様定常解 u_0 の吸引領域を $\mathcal{B}$ で表す。後の例では、拡散方程式

$$\mathcal{F}\{u(x, t)\} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (32)$$

および Burgers 方程式

$$\mathcal{F}\{u(x, t)\} = -u(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (33)$$

を考察する。

式 (31) で表される系の Koopman 作用を定義しよう。この場合、観測量 f は場の変数 u に対して複素数 $f[u]$ を与える汎関数 $f: \mathcal{B} \rightarrow \mathbb{C}$ となり (関数から値への写像なので汎関数と呼ぶことにする)、Koopman 作用素は f に対して

$$(U^\tau) f[u] = f[S^\tau u] \quad (34)$$

と定義される。前と同様、 $S^t: \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ は $S^t u(x, s) = u(x, s + t)$ を満たす式 (31) のフローで、 $U^t f$ は観測量 f を t 時間発展させたもの、 $S^t u$ は u を t 時間発展させた場の変数を表す。フロー S^t の性質より U^t が線形作用素となることも同様である。 U^t の generator は、以下のように与えられる。

$$A f[u] = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U^\tau f[u] - f[u]}{\tau} = \int_0^L \mathcal{F}\{u(x)\} \frac{\delta f[u]}{\delta u(x)} dx \quad (35)$$

ここで、 $\delta f[u]/\delta u(x)$ は $f[u]$ の $u(x)$ による汎関数微分で、式 (13) における勾配ベクトルに対応するものである⁽¹⁸⁾。この A を用いて Koopman 作用素は $U^t = \exp(A t)$ と表される。常微分方程式の場合と同様に、

$$A \phi_\lambda[u] = \lambda \phi_\lambda[u] \quad (36)$$

を満たす A の固有汎関数を導入しよう。前と同様、定常解 u_0 に対しては、 $A \phi_\lambda[u_0] = 0$ なので、 $\lambda = 0$ でない限り $\phi_\lambda[u_0] = 0$ となる。

3.2 線形系の固有汎関数

特に、系の時間発展が線形な偏微分方程式に従い、線形作用素 $\mathcal{L}$ によって $\mathcal{F}\{u(x, t)\} = \mathcal{L}u(x, t)$ と表される場合を考えよう。例えば拡散方程式であれば $\mathcal{L} = \partial^2/\partial x^2$ である。

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \mathcal{L}u(x, t) \quad (37)$$

この $\mathcal{L}$ が、実部が負の離散固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ を持つとして、 λ に対する固有関数を $q_\lambda(x)$ とする。

$$\mathcal{L}q_\lambda(x) = \lambda q_\lambda(x) \quad (38)$$

また、ふたつの関数 $a(x), b(x)$ の L^2 内積を $\int_0^L a(x)\overline{b(x)}dx$ として、 $\mathcal{L}$ のこの内積に対する随伴作用素を $\mathcal{L}^*$ 、固有値 λ に対応する固有関数を $w_\lambda(x)$ とする。

$$\mathcal{L}^* w_\lambda(x) = \overline{\lambda} w_\lambda(x) \quad (39)$$

このとき、 u の線形汎関数

$$\phi_\lambda[u] = \int_0^L u(x)\overline{w_\lambda(x)}dx \quad (40)$$

は A の固有値 λ の固有汎関数となっている。実際、随伴作用素の定義より、

$$A\phi_\lambda[u] = \int \{\mathcal{L}u(x)\} \frac{\delta\phi_\lambda[u]}{\delta u(x)} dx = \int \{\mathcal{L}u(x)\} \overline{w_\lambda(x)} dx = \int u(x) \{\overline{\mathcal{L}^* w_\lambda(x)}\} dx = \lambda \int u(x) \overline{w_\lambda(x)} dx = \lambda \phi_\lambda[u] \quad (41)$$

このように、線形系では $\mathcal{L}^*$ の固有関数を用いて Koopman 固有汎関数を構成でき、Koopman 固有値は $\mathcal{L}$ の固有値 (主要な固有値) を含む。

さて、変数 u, v に対するふたつの偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \mathcal{F}\{u(x, t)\}, \quad \frac{\partial}{\partial t} v(x, t) = \mathcal{G}\{v(x, t)\} \quad (42)$$

を考えよう。 $\mathcal{F}, \mathcal{G}$ は系のそれぞれの時間発展を表す。それぞれの系のフローを $S_\mathcal{F}^t, S_\mathcal{G}^t$ 、Koopman 作用素を $U_\mathcal{F}^t, U_\mathcal{G}^t$ 、generator を $A_\mathcal{F}, A_\mathcal{G}$ とする。このとき、滑らかな写像 $v = \Phi(u)$ で、

$$\Phi(S_\mathcal{F}^t u) = S_\mathcal{G}^t \Phi(u) \quad (43)$$

となるものが存在するとき、ふたつの系は互いに conjugate であると言われる⁽¹⁸⁾。この場合、 $\phi_\lambda[v]$ が $U_\mathcal{G}^t$ の固有値 $e^{\lambda t}$ の Koopman 固有関数であったとすると、

$$U_\mathcal{G}^t \phi_\lambda[v] = \phi_\lambda[S_\mathcal{G}^t v] = \phi_\lambda[S_\mathcal{G}^t \Phi(u)] = \phi_\lambda[\Phi\{S_\mathcal{F}^t u\}] = U_\mathcal{F}^t \phi_\lambda[\Phi(u)] = e^{\lambda t} \phi_\lambda[v] = e^{\lambda t} \phi_\lambda[\Phi(u)] \quad (44)$$

より $\phi_\lambda[\Phi(u)]$ は $U_\mathcal{F}^t$ の固有値 $e^{\lambda t}$ の Koopman 固有関数となっており、当然、generator $A_\mathcal{F}, A_\mathcal{G}$ に対しても $A_\mathcal{F} \phi_\lambda[\Phi(u)] = \lambda \phi_\lambda[\Phi(u)]$ 、 $A_\mathcal{G} \phi_\lambda[v] = \lambda \phi_\lambda[v]$ を満たしている。

特に、 v が式 (37) の形の線形偏微分方程式に従っており、 $\mathcal{G}\{v(x, t)\} = \mathcal{L}v(x, t)$ と表せるならば、式 (40) より $\phi_\lambda[v] = \int v(x)\overline{w_\lambda(x)}dx$ は $A_\mathcal{G}$ の固有値 λ に対応する Koopman 固有関数となるので、これを用いて v の運動方程式に共役な u の運動方程式の generator $A_\mathcal{F}$ の Koopman 固有関数を $\phi_\lambda[\Phi(u)]$ と表すことができる。次節の具体例では、これを用いて拡散方程式と Burgers 方程式の Koopman 固有関数を議論する。

3.3 次元縮約

偏微分方程式で表される力学系についても、形式的には常微分方程式で表される力学系の場合と同様に、系を縮約することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \mathcal{F}\{u(x, t)\} \quad (45)$$

について、線形安定な定常解 u_0 の周りで線形化した系

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \mathcal{L}u(x, t) \quad (46)$$

の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ とする。 u_0 は線形安定なので、これらの固有値の実部は全て負である。ここで、もとの式 (45) と線形化した式 (46) が conjugate であることを仮定しよう。すると、式 (45) の Koopman 固有値は式 (46) と等しく、またそれらは $\mathcal{L}$ の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ を含む。これらの主要な固有値に対応する Koopman 固有汎関数を $\phi_1, \phi_2, \dots$ 、として、新しい変数を

$$y_n = \phi_n[u] \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (47)$$

により導入すると,

$$\frac{d}{dt}y_n = \frac{d}{dt}\phi_n[u] = \int \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\delta \phi_n[u]}{\delta u(x)} dx = \int \mathcal{F}\{u\} \frac{\delta \phi_n[u]}{\delta u(x)} dx = A\phi_n[u] = \lambda_n y_n \quad (48)$$

より, それぞれの y_n は互いに独立に線形な時間発展方程式

$$\frac{d}{dt}y_n(t) = \lambda_n y_n(t) \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (49)$$

に従い, 系は大域的に線形化される. また, 系が t と x に依存する外力 $p(x, t)$ を受けて

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \mathcal{F}\{u(x, t)\} + p(x, t) \quad (50)$$

に従う場合には,

$$\frac{d}{dt}y_n = \frac{d}{dt}\phi_n[u] = \int \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\delta \phi_n[u]}{\delta u(x)} dx = \int (\mathcal{F}\{u\} + p) \frac{\delta \phi_n[u]}{\delta u(x)} dx = A\phi_n[u] + \int \frac{\delta \phi_n[u]}{\delta u(x)} p dx \quad (51)$$

より

$$\frac{d}{dt}y_n(t) = \lambda_n y_n(t) + \int \zeta(y_1(t), y_2(t), \dots) p(x, t) dx \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (52)$$

に従う. ここで, $\zeta(y_1, y_2, \dots)$ は, 式 (51) 中の $u(x) = u(x, t)$ で評価した汎関数微分 $\delta \phi_n[u]/\delta u(x)$ を $y_1, y_2, \dots$ の関数として表したものである. 前と同様, 途中の M 番目までの固有値のみを考慮し, それよりも減衰の速い変数を最初から $y_j = 0$ ($j > M$) と近似することにより, 偏微分方程式で記述される系を M 次元の常微分方程式に次元縮約することができる. このように, 様々な仮定が必要ではあるが, Koopman 固有関数を用いることにより, 偏微分方程式で記述される力学系についても系統的に次元縮約を行うことができる.

4. 例: 拡散方程式と Burgers 方程式

例として, まず区間 $[0, L]$ 上の変数 $u(x, t)$ に対する拡散方程式を考えよう. 両端で Neumann 境界条件を課す.

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0 \quad (53)$$

この系は初期条件で決まる安定な一様定常解

$$u_0(x) = \frac{1}{L} \int_0^L u(x', 0) dx' = \text{const.} \quad (0 \leq x \leq L) \quad (54)$$

に漸近するが, この $u_0(x)$ を差し引いた $u(x, t) - u_0(x)$ を $u(x, t)$ と定義しなおすと, この新しい $u(x, t)$ はもとの $u(x, t)$ と同じ拡散方程式と境界条件 (53) に従い, かつ $t \rightarrow \infty$ で $u(x, t) \rightarrow 0$ となる.

L^2 内積に対して $\mathcal{L} = \partial^2/\partial x^2$ は自己随伴なので, $\mathcal{L}^*(= \mathcal{L})$ の固有値 λ_n と固有関数 w_n は,

$$\lambda_n = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad w_n(x) = \cos(\sqrt{|\lambda_n|}x) = \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (55)$$

と求められる. よって, 単に u の Fourier 係数

$$\phi_n^D[u] = \int_0^L u(x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (56)$$

で与えられる u の汎関数が, 式 (53) の generator A_D の固有値 λ_n の Koopman 固有関数となる.

$$A_D \phi_n^D[u] = \int u(x) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right\} dx = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \int u(x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \lambda_n \phi_n^D[u] \quad (57)$$

この場合, Koopman 固有汎関数を用いて変数 $y_n = \phi_n^D[u]$ を導入すると, $dy_n/dt = \lambda_n y_n$ に従うが, これは拡散方程式に従う場の変数の Fourier 係数に関する良く知られた方程式そのものである.

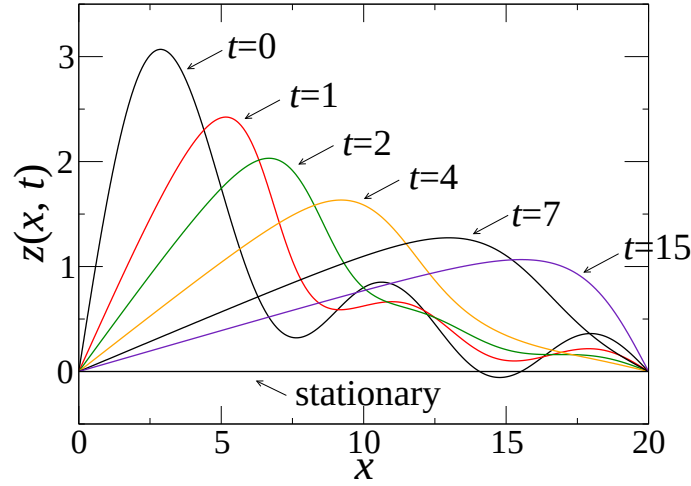


Fig.3: Burgers 方程式の時間発展の例.

次に区間 $[0, L]$ 上の変数 $z(x, t)$ が Burgers 方程式に従うとしよう. 両端において Dirichlet 境界条件を課す.

$$\frac{\partial}{\partial t} z(x, t) = -z(x, t) \frac{\partial}{\partial x} z(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} z(x, t), \quad z(0, t) = z(L, t) = 0 \quad (58)$$

を課す. 図 3 に示すように, Burgers 方程式の解は, 一過性のダイナミクスの後, 安定な一様解 $z_0(x) = 0$ に向けて減衰する. Burgers 方程式と拡散方程式は, よく知られた Hopf-Cole 変換^(16, 17, 18, 19)

$$z(x, t) = -2 \frac{\partial}{\partial x} \ln v(x, t) = -2 \frac{1}{v(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} v(x, t), \quad v(x, t) = c(t) \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^x z(y, t) dy \right) \quad (59)$$

によって互いに変形できる. ここで, 係数 $c(t)$ は適切に選ぶ必要がある. $z(x, t)$ が式 (58) を満たせば, $v(x, t)$ は拡散方程式と Neumann 境界条件

$$\frac{\partial}{\partial t} v(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} v(x, t), \quad \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial v}{\partial x}(L, t) = 0 \quad (60)$$

を満たし, 逆もまた成立する. 従って, Hopf-Cole 変換は式 (43) の写像 Φ を与える. よって, Burgers 方程式の Koopman 固有値は拡散方程式のものと一致することが分かり, Koopman 固有値と固有汎関数を

$$\lambda_n = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad \phi_n^B[z] = \int_0^L \left\{ c[z] \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^x z(y) dy \right) - v_\infty \right\} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (61)$$

と求めることができる. ここで

$$c[z] = \left(\int_0^L \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^x z(y) dy \right) dx \right)^{-1} \quad (62)$$

である. Koopman 固有汎関数を用いて変数 $y_n(t) = \phi_n^B[u(x, t)]$ を導入すれば, 各 y_n はやはり

$$\frac{dy_n}{dt} = \lambda_n y_n \quad (63)$$

に従い, 非線形な Burgers 方程式の時間発展を線形に時間発展するモードに分解できたことになる. 図 4 に, 図 3 の時間発展する数値解を上記の Koopman 固有汎関数に代入して系を観測すると, 実際に観測値が指数関数的な減衰を示し, また理論から予想される正しい固有値が得られることを示す.

なお, Hopf-Cole 変換を用いて Burgers 方程式の Koopman 固有値と固有汎関数を求められることについては, Page & Kerswell⁽¹⁶⁾ や Kutz ら⁽¹⁷⁾ により以前から指摘されており, Koopman 固有汎関数による変換を用いた制御法についても Wilson & Djouadi などによって議論されている⁽¹⁹⁾.

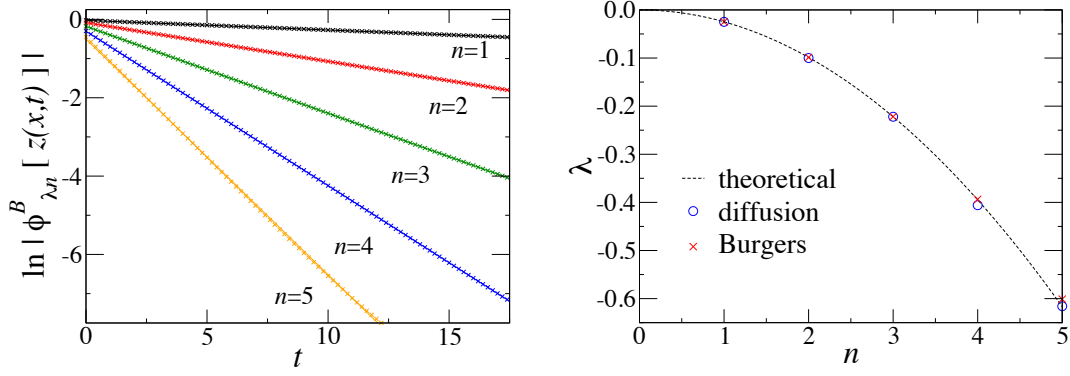


Fig.4: Burgers 方程式の Koopman 固有汎関数による観測値 ($n = 1, 2, 3, 4$) の時間発展 (左) と Koopman 固有値 (右).

5. 終わりに

本稿では、近年注目されている Koopman 作用素論的な立場からの力学系の解析や制御に向けたアプローチについて概説した。Koopman 作用素の固有関数を用いた変換により、非線形系であっても線形なモードに分解し、固有値に基づいて系統的に次元を削減できることを示した。また、その手法が、偏微分方程式に対しても形式的には拡張可能なことを述べた。このように、Koopman 作用素論的な観点は、大自由度非線形力学系の解析や制御に対して、新たな観点を与える可能性があり、様々な研究が進められている。また、本稿での数理的な扱いは形式的なものに過ぎないが、数学的により厳密な研究も今後進むと思われる。

さて、応用の観点からすぐに気付く本質的な問題として、Burgers 方程式のような特殊な例外を除いて、大自由度非線形力学系の Koopman 固有関数を求めることは著しく困難なことである。これについては、例えば、定常解近傍での解析に限れば、Koopman 固有関数自体は必要なく、よりシンプルに求められる Koopman 固有関数の勾配のみを用いた議論が可能である。また、Koopman 固有関数を厳密には得られなくても、何らかの機械学習的な方法によってこれを近似できれば系の制御等には有効であり、様々な研究が行われている。

なお、本稿では線形安定な固定点のみを扱ったが、同様の理論を線形安定なリミットサイクル軌道に対しても拡張することができる。その場合、最初の固有値は振動の接方向に対応する減衰しない位相モードに対応し、ふたつ目以降の固有値はリミットサイクルからの離れ具合に対応する振幅モードに対応する。リミットサイクルに対しては古くから位相縮約と呼ばれる次元削減法が確立されていたが、これは Koopman 作用素論的な観点からは上述のような外力を受けた非線形振動系の線形化および次元削減法と考えることができ、近年では位相縮約法を一般化した位相振幅縮約法も定式化されている^(11, 20)。特に流体系の振動現象に対するそのような次元削減によるアプローチは実用的な観点からも重要だと考えられる^(21, 22)。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17H03279, JP18H03287, JPJSBP120202201 および JST CREST JP-MJCR1913 の助成を受けたものです。

参考文献

- (1) Berkooz, G., Holmes, P., & Lumley, J. L.: The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annual review of fluid mechanics* **25**, 539-575 (1993).
- (2) Brunton, S.L. and Kutz, J.N., *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems, and control* (Cambridge University Press, 2019).
- (3) Koopman, O.: Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space, *PNAS* **17**, 315 (1931).
- (4) von Neumann, J.: Zur operatorenmethode in der klassischen mechanik, *Annals of Mathematics* **33**, 587-642 (1932).

- (5) Gaspard, P.: *Chaos, scattering and statistical mechanics* (Cambridge University Press, 2005).
- (6) Mezić, I.: Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions, *Nonlinear Dynamics* **41**, 309–325 (2005).
- (7) Mauroy, A., Susuki, Y., and Mezić, I.: *The Koopman Operator in Systems and Control* (Springer, 2020).
- (8) Budisić, R. Mohr, and I. Mezić, Applied Koopmanism, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **22**, 047510 (2012).
- (9) Mezić, I.: Analysis of fluid flows via spectral properties of the Koopman operator, *Annual Review of Fluid Mechanics* **45**, 357–378 (2013).
- (10) Mauroy A. and Mezić, I.: Global stability analysis using the eigenfunctions of the Koopman operator, *IEEE Transactions on Automatic Control* **61**, 3356–3369 (2016).
- (11) Mauroy, A., Mezić, I., and Moehlis, J.: Isostables, isochrons, and Koopman spectrum for the action–angle representation of stable fixed point dynamics, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **261**, 19–30 (2013).
- (12) 薄良彦: クープマン作用素による非線形ダイナミクスの解析, システム/制御/情報 **61**, 175-181 (2017).
- (13) Schmid, P. J.: Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, *Journal of Fluid Mechanics* **656**, 5–28 (2010).
- (14) Rowley, C.W., Mezić, I., Bagheri, S., Schlatter, P. and Henningson, D.S. : Spectral analysis of nonlinear flows, *Journal of Fluid Mechanics* **641**, 115–127 (2009).
- (15) Kaiser, E. Kutz, J. N., and Brunton, S. L.: Data-driven discovery of Koopman eigenfunctions for control, *Mach. Learn.: Sci. Technol.* **2** 035023 (2021).
- (16) Page J. and Kerswell, R. R.: Koopman analysis of Burgers equation, *Phys. Rev. Fluids* **3**, 071901 (2018).
- (17) Kutz, N., Proctor, J.L., and Brunton, S.L.: Applied Koopman theory for partial differential equations and data-driven modeling of spatio-temporal systems, *Complexity* **2018**, 6010634 (2018).
- (18) Nakao, H. and Mezić, I.: Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations, *Chaos* **30**, 113131 (2020).
- (19) Wilson D. and Djouadi, S.M.: Adaptive isostable reduction of nonlinear PDEs with time varying parameters, *IEEE Control Systems Letters* **5**, 187–192 (2020).
- (20) Nakao, H.: Phase and amplitude description of complex oscillatory patterns in reaction-diffusion systems, in *Physics of Biological Oscillations* (Springer, 2021).
- (21) Taira, K., & Nakao, H.: Phase-response analysis of synchronization for periodic flows. *Journal of Fluid Mechanics* **846**, R2 (2018).
- (22) Loe, I. A., Nakao, H., Jimbo, Y., & Kotani, K.: Phase-reduction for synchronization of oscillating flow by perturbation on surrounding structure. *Journal of Fluid Mechanics*, **911**, R2 (2021).