［招待講演］Koopman 作用素論に基づく力学系の次元縮約と非線形リズムへの応用

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
E-mail: †nakao@sc.e.titech.ac.jp

あらまし Koopman 作用素論に基づく非線形力学系の次元縮約法と，その非線形リズム現象への応用について紹介する．近年注目されている Koopman 作用素論に基づき，力学系の観測量の時間発展を記述する Koopman 作用素の固有関数を用いた座標変換によって，系の大域的な線形化と次元削減を系統的に行うことができることを述べ，古典的な非線形振動子に対する位相縮約理論がその典型であり，これが自然な形で位相-振幅縮約理論に拡張されることを説明する．応用として非線形振動子の注入同期の最適化などの解析例を示す．
キーワード 力学系の次元縮約, Koopman 作用素, 非線形リズム, 同期現象

Dimensionality reduction of dynamical systems via Koopman operator theory and applications to nonlinear rhythms

Hiroya NAKAO†

† Department of Systems and Control Engineering Tokyo Institute of Technology
O-okayama 2–12–1–W8–16, Meguro, Tokyo 152–8552, Japan
E-mail: †nakao@sc.e.titech.ac.jp

Abstract A method of dimensionality reduction for nonlinear dynamical systems via the Koopman operator theory and its application to nonlinear rhythmic phenomena are discussed. Coordinate transformation using eigenfunctions of the Koopman operator, which describe the time evolution of observables of dynamical systems, facilitates systematic global linearization and dimensionality reduction of the system. It is shown that the classical phase reduction theory for nonlinear oscillators can be considered a typical example of such dimensionality reduction and it can further be extended to phase-amplitude reduction. As an application, optimal injection locking of nonlinear oscillators will be analyzed.
Key words Reduction of dynamical systems, Koopman operator, nonlinear rhythms, synchronization

1. まえがき

近年，Koopman 作用素に基づく力学系の解析に興味がもたれている．Koopman 作用素は力学系の観測量の時間発展を記述する作用素であり，1920-30 年代の量子力学の発展に触発されて Koopman [1] が古典ハミルトン系の観測量に関して導入したもので，その後すぐに von Neumann によって詳しく議論されていた [2]．従来は主にハミルトン力学系等に関する数理的な解析の中で主に議論されてきていたが [3]，今世紀によって Mezić らによって散逸力学系に対して議論が拡張されたことによって適用可能な対象が著しく拡大し，応用数学や制御理論等の分野を中心に盛んに研究されるようになった [4]〜[7]．さらに，流体力学分野で新たな時空間モード解析手法として提案されていた動的モード分解 (Dynamic mode decomposition, DMD) との関係が明らかにされたことにより [8], [9]，非常に幅広い分野から注目を集めるようになっている．国内では早い時期から薄 [10] が Mezić らと先駆的な共同研究を開始しており，ごく最近，この分野の第一人者である Mauroy, 薄, Mezić らにより，Koopman 作用素の応用に関する様々な結果を取りまとめた書籍が Springer より出版されている [12]．

本講演では，特に Koopman 作用素を用いた非線形力学系の大域線形化と次元縮約の典型例とみなすことのできる，非線形振動子の古典的な位相縮約理論 [13]〜[16] について概説する．Koopman 作用素論の観点により，振動子の位相だけでなく，周期軌道からの距離 (振幅) についても一貫した見方が導入されることを述べ，注入同期 [17] の最適化などへの応用例を示す．

2.　Koopman 作用素

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 [4]〜[7], [10]．N 次元の常微分方程式で記述される連続時間力学系を

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \tag{1}$$

としよう．ここで，$\boldsymbol{x}(t) \in \mathbb{R}^N$ は時刻 t における系の状態で，$\boldsymbol{F} : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ は滑らかなベクトル場である．系のフロー，つまり系の状態を時間 τ 発展させる写像 S^τ を

$$S^\tau \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}(t+\tau) \tag{2}$$

とすると，系の観測量，すなわち系の状態 $\boldsymbol{x}$ に対して複素数を与える関数 $g : \mathbb{R}^N \to \mathbb{C}$ に対して，Koopman 作用素 K^τ は

$$(K^\tau g)(\boldsymbol{x}) = g(S^\tau \boldsymbol{x}) \tag{3}$$

と定義される．つまり，初期状態 $\boldsymbol{x}$ を τ 時間発展させて観測量 g で測定した値が，観測量 g を τ 時間発展させた観測量 $K^\tau g$ によって初期状態 $\boldsymbol{x}$ を測定した値と等しくなるような観測量 g の時間発展を与える．系のフロー S^τ が非線形であっても K^τ が線形作用素となることは容易にわかる．

特に，Koopman 作用素の generator (無限小生成子) は

$$Ag(\boldsymbol{x}) = \lim_{\tau\to+0} \frac{K^\tau g(\boldsymbol{x}) - g(\boldsymbol{x})}{\tau} = \lim_{\tau\to+0} \frac{g(S^\tau \boldsymbol{x}) - g(\boldsymbol{x})}{\tau} \tag{4}$$

で定義され，τ が十分に小さい時に $S^\tau \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\tau + O(\tau^2)$ と近似でき，また g が $\boldsymbol{x}$ の周りで Taylor 展開できると仮定すると

$$Ag(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla g(\boldsymbol{x}) \tag{5}$$

と表すことができる．この A も明らかに線形作用素であり，これを用いて g の連続的な時間発展は

$$\frac{d}{dt} g(\boldsymbol{x}) = Ag(\boldsymbol{x}) \tag{6}$$

と表される．ここで，$\boldsymbol{x}$ ではなく g が時間発展することに注意されたい．

以下，系 (1) が指数関数的に安定な固定点または周期軌道をアトラクターとして持つとして，状態 $\boldsymbol{x}$ がその吸引領域内にある場合を考える．A は線形作用素なので，その固有値問題を考えることは有用である．Koopman 固有値を λ, 対応する Koopman 固有関数を $\phi^{(\lambda)}$ として，固有値方程式は

$$A\phi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}) = \lambda\phi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}) \tag{7}$$

である．ここで，固有値 λ はアトラクターの線形安定性を特徴づける系の指数 (固定点の固有値，あるいは周期軌道の Floquet 指数) を含むことが知られており，それらは主要な固有値と呼ばれる．固有関数も当然観測量であり，

$$\frac{d}{dt}\phi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}) = A\phi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}) = \lambda\phi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}) \tag{8}$$

に従って時間発展し，その解は容易に求められる．解析的な観測量は，主要な固有値に対する Koopman 固有関数の冪級数によって展開できることが知られているため，一般の観測量の時間発展も，線形な時間発展によって記述することができる．また，固有値の実部が大きな負の値を持つものは減衰が速い成分に対応するため，それらを 0 と近似してしまうことにより，系の次元削減を系統的に行うことができる．

このように，Koopman 作用素の観点から，力学系 (1) が非線形であっても，これを無限次元の関数空間にリフトすることによって系を線形化し，さらに固有値に基づいて遅いダイナミクスのみに注目することで，系の次元削減を系統的に行うことができる．その一方で，観測量は一般に無限次元の関数空間の要素となり，その扱いは難しくなる．

3.　位相振幅縮約理論

位相縮約理論は，リミットサイクル振動子の状態を近似的にその漸近位相のみで表し，簡潔な位相方程式を導く方法で，リミットサイクル振動子の同期現象の解析に大きな役割を果たしてきた [13]〜[16]．近年の Koopman 作用素論の発展に伴い，非線形振動子に対して従来は幾何学的な観点から導入されていた漸近位相が Koopman 作用素の固有関数を用いて定義され，さらにこれを拡張してリミットサイクルからの距離を表す (漸近) 振幅も自然に導入された [18]．また，これに基づいて系の位相-振幅方程式も系統的に導かれた [19], [20]．

力学系 (1) が指数関数的に安定なリミットサイクル χ を持ち，状態 $\boldsymbol{x}$ がその吸引領域内から出発して χ に近づく状況を考える．χ の (角) 振動数を ω，非ゼロで最も虚軸に近い Floquet 指数を λ とすると，$i\omega$ と λ は系の主要な固有値となることが知られており，対応する Koopman 固有関数を Ψ, R とすると

$$\frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{x}) = A\Psi(\boldsymbol{x}) = i\omega\Psi(\boldsymbol{x}) \tag{9}$$

$$\frac{d}{dt}R(\boldsymbol{x}) = AR(\boldsymbol{x}) = \lambda R(\boldsymbol{x}) \tag{10}$$

が成立する．ここで $\Psi(\boldsymbol{x}) = e^{i\Phi(\boldsymbol{x})}$ を満たす $\Phi(\boldsymbol{x}) = \arg \Psi(\boldsymbol{x})$ を考えると，これは任意の吸引領域内の $\boldsymbol{x}$ について

$$\frac{d}{dt}\Phi(\boldsymbol{x}) = \omega \tag{11}$$

を満たしており，$\boldsymbol{x}$ の時間発展とともに $\Phi(\boldsymbol{x})$ は常に一定の振動数 ω で増加することが分かる．そのような $\Phi(\boldsymbol{x})$ は振動子の漸近位相と呼ばれ，従来は幾何学的に定義されていた [13]〜[16]．$\Phi(\boldsymbol{x})$ の等高線はアイソクロン (isochron) と呼ばれる．

一方，$R(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ が時間発展して χ に漸近するとともに一定の減衰率 $\mathrm{Re}\,\lambda$ で指数関数的に減衰し，$\boldsymbol{x}$ が χ の直上にあるときには 0 となる．つまり，R は状態の χ からの距離を表す．そのような振幅も非線形振動子の研究で考えられてきていたが [21]，これが実部が負の Koopman 固有値に対応する Koopman 固有関数として明確に定義されたことになる．Mauroy らは $R(\boldsymbol{x})$ の等高線をアイソステイブル (isostable) と名付けた [18]．なお，状態が N 次元のリミットサイクルは $N-1$ 個の振幅を持つが，ここでは系の漸近的なダイナミクスを支配する最も減衰の遅い振幅のみを考えている．

位相縮約理論，あるいは位相振幅縮約理論では，リミットサイクルを持つ力学系 (1) が，弱い摂動 $\boldsymbol{p}(t)$ を受けて

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{p} \tag{12}$$

に従う場合を考える．このとき，$\boldsymbol{p}(t)$ が十分に小さければ系の振動は持続する．非摂動系の漸近位相と振幅 Φ, R を用いて系の位相を $\theta = \Phi(\boldsymbol{x})$, 振幅を $r = R(\boldsymbol{X})$ と導入すると，最低次近似で

$$\frac{d\phi}{dt} = \omega + \boldsymbol{Z}(\phi) \cdot \boldsymbol{p}, \quad \frac{dr}{dt} = \lambda r + \boldsymbol{I}(\phi) \cdot \boldsymbol{p} \tag{13}$$

という形の位相振幅方程式が得られる [19], [20]．ここで $\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{I}$ はそれぞれ漸近位相と振幅の摂動に対する感受関数であり，関数 Φ と R のリミットサイクル上での勾配により与えられる．

位相方程式は古くから振動子の同期現象の解析ツールとして主要な役割を果たしてきた．一方，振幅方程式については，比較的最近になって Koopman 作用素論の観点で振幅という概念が明示的に定式化されてから使われれるようになっている．振幅方程式は系の状態のリミットサイクルから外れ具合の解析に用いることができ，例えば [22] では，振動子の注入同期の問題において振幅方程式を用いて振幅が抑制されるような入力信号を求めることにより，従来法よりも強い入力を与えてより速い同期を達成できることを示している．

4. まとめ

近年の Koopman 作用素論の発展により，従来，幾何学的な立場から議論されていた非線形振動子の漸近位相に新たな観点が与えられ，また振幅関数が明確に定義され，位相振幅縮約理論が導かれた．本稿で述べた常微分方程式以外にも，ノイズを受ける確率的な力学系 [26]，反応拡散系や流体系のような偏微分方程式で記述される空間的に広がりを持つ系 [23]〜[25]，あるいは離散時間の有限状態系 [29] などにも，Koopman 作用素論の枠組みを拡張することが可能であり，また，それらの系が漸近安定な非線形振動を示すのであれば，位相振幅縮約方程式を導くことができる．無論，Koopman 固有値や固有関数を求められる場合は非常に限られるが，機械学習やデータ駆動的な方法の応用によりこれを解決する様々な研究が実施されている [30], [31]．近年では量子散逸力学系の非線形振動に対する Koopman 作用素論の観点からの位相の定義などについても議論も進んでおり [27], [28]，今後のさらなる発展が見込まれる．

謝　辞

本研究は JSPS 科研費 JP22K11919, JP22H00516, JPJSBP120202201 および JST CREST JP-MJCR1913 の助成を受けたものです．

文　献

[1] Koopman, O. Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space, PNAS, 17, 315, 1931.

[2] von Neumann, J. Zur operatorenmethode in der klassischen mechanik, Annals of Mathematics, 33, 587-642, 1932.

[3] Gaspard, P. *Chaos, scattering and statistical mechanics*, Cambridge University Press, 2005.

[4] Mezic, I. Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions, Nonlinear Dynamics, 41, 309–325, 2005.

[5] Budisić, R. Mohr, and I. Mezić, Applied Koopmanism, Chaos, 22, 047510, 2012.

[6] Mezić, I. Analysis of fluid flows via spectral properties of the Koopman operator, Ann. Rev. Fluid Mech., 45, 357–378, 2013.

[7] Mauroy A. and Mezić, I. Global stability analysis using the eigenfunctions of the Koopman operator, IEEE Transactions on Automatic Control, 61, 3356–3369, 2016.

[8] Schmid, P. J. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, J. Fluid Mech., 656, 5–28, 2010.

[9] Rowley, C.W., Mezić, I., Bagheri, S., Schlatter, P. and Henningson, D.S. . Spectral analysis of nonlinear flows, J. Fluid Mech. 641, 115–127, 2009.

[10] 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.

[11] 薄良彦. クープマン作用素による非線形ダイナミカルシステムの解析と制御, 信学技報 118, 55-55, 2019.

[12] Mauroy, A., Susuki, Y., and Mezić, I. *The Koopman Operator in Systems and Control*, Springer, 2020.

[13] Winfree, A. T. *The geometry of biological time*. Springer, 2001.

[14] Kuramoto, Y. *Chemical oscillations, waves, and turbulence*. Springer, 1984.

[15] Kuramoto, Y. and Nakao, H. On the concept of dynamical reduction. the case of coupled oscillators. Philosophical Transactions of the Royal Society A, 377(2160).20190041, 2019.

[16] Nakao, H. Phase reduction approach to synchronisation of nonlinear oscillators, Contemporary Physics 57, 188–214, 2016.

[17] Tanaka, H.-A. Optimal entrainment with smooth, pulse, and square signals in weakly forced nonlinear oscillators. Physica D, 288, 1-22, 2014.

[18] Mauroy, A., Mezić, I., and Moehlis, J. Isostables, isochrons, and Koopman spectrum for the action–angle representation of stable fixed point dynamics, Physica D 261, 19–30, 2013.

[19] Wilson, D. and Moehlis, J. Isostable reduction of periodic orbits. Phys. Rev. E 94, 052213, 2016.

[20] Shirasaka, S., Kurebayashi, W. and Nakao, H. Phase-amplitude reduction of transient dynamics far from attractors for limit-cycling systems. Chaos, 27(2), 023119, 2017.

[21] Goldobin, D. S., Teramae, J-n., Nakao, H., and Ermentrout, G. B. Dynamics of limit cycle oscillators subject to general noise, Phys. Rev. Letters 105, 154101, 2010.

[22] Takata, S., Kato, Y., and Nakao, H. Fast optimal entrainment of limit-cycle oscillators by strong periodic inputs via phase-amplitude reduction and Floquet theory. Chaos, 31, 093124, 2021.

[23] 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.

[24] Nakao, H. and Mezić, I. Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations, Chaos 30, 113131, 2020.

[25] Nakao, H. Phase and amplitude description of complex oscillatory patterns in reaction-diffusion systems, in Physics of Biological Oscillations, Springer, 2021.

[26] Kato, Y., Zhu, J., Kurebayashi W., and Nakao H. Asymptotic phase and amplitude for classical and semiclassical stochastic oscillators via Koopman operator theory. Mathematics, 9(18), 2188, 2021.

[27] Kato, Y., Yamamoto, N., and Nakao, H. Semiclassical phase reduction theory for quantum synchronization. Phys. Rev. Research, 1, 033012, 2019.

[28] Kato, Y., and Nakao, H. A definition of the asymptotic phase for quantum nonlinear oscillators from the Koopman operator viewpoint. Chaos 32, 063133, 2022.

[29] Taga, K., Kato, Y., Kawahara Y., Yamazaki, Y., Nakao, H. Koopman spectral analysis of elementary cellular automata, Chaos 31, 103121, 2021.

[30] Kawahara, Y. in Proceedings of the Conference on Neural Information Processing Systems, Barcelona [Adv. Neural Inf. Process. Syst. 29, 911, 2016].

[31] Brunton, S.L. and Kutz, J.N., *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems, and control*, Cambridge University Press, 2019.