

令和 6 年 6 月 9 日現在

機関番号：32682

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K03747

研究課題名（和文）遅延座標系と代数幾何の理論による次元縮約と埋め込みの数理科学的研究

研究課題名（英文）A mathematical study of dimensionality reduction and embedding by theories of delay-coordinate systems and algebraic geometry

研究代表者

中野 直人（Nakano, Naoto）

明治大学・先端数理科学研究科・特任准教授

研究者番号：30612642

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、遅延座標埋め込みによるアトラクタ再構成手法を、代数幾何学の消去理論を元に、構成的観点から解明することを目的として行われた。埋め込みの変数による方程式の性質を詳細に調べるため、その方程式の定める代数多様体の特異点を検証し、ブローアップによる変数の設定を適切に行う方法論を整備した。また、ランダムネットワークと遅延座標系を組み合わせたデータ駆動モデリング手法による時系列予測タスクの性能評価については、予測精度や構成したモデルのリアプノフ指数を元の力学系と比較することで、力学再構成の評価を行い、提案手法の有効性を示すことができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

データからモデル方程式をデータ駆動的に構築することはデータ科学において重要な問題である。モデル方程式を導出するには、昨今の流行りと言えば機械学習的手法を用いることができる。一方、対象のデータがどう生成されたかのメカニズムを調べるには力学系の方法論が有効であり、時系列埋め込みの研究が必要である。本研究では、従来の埋め込み理論とは異なり、構成的な観点から遅延座標埋め込みの方法論を構築した。これに基づくネットワークモデルの構成も可能となった。これらの成果により、部分変数から全体の力学系を推定、再構成するというデータ解析研究に関して数理科学的な貢献を行えたものと考えている。

研究成果の概要（英文）：This study aimed to elucidate the method of attractor reconstruction by delay embedding from a constructive point of view based on the elimination theory of algebraic geometry. To investigate the properties of equations with embedded variables in detail, we verified the singularities of the algebraic manifolds defined by the equations. We developed a methodology to set up variables by blowup properly. In addition, to evaluate the performance of a time series prediction task using a data-driven modelling method that combines a random network and a delay coordinate system, we assessed the dynamics reconstruction by comparing the prediction accuracy and the Lyapunov exponent of the constructed model with the original dynamical system. We were able to demonstrate the effectiveness of the proposed method.

研究分野：時系列予測の数理科学

キーワード：遅延座標系 代数幾何学 次元縮約 埋め込み理論 データ駆動型解析

## 1. 研究開始当初の背景

スカラー時系列データに対して、時間遅延幅を決めて座標のように並べてベクトル化させたものを遅延座標系といい、遅延座標系の空間におけるベクトル時系列データを作る操作を遅延座標埋め込み、もしくは **Takens** 埋め込みという。遅延座標系を用いるとスカラー時系列が従う力学系の情報が引き出せることが知られており (**Packard et al. 1980**)、時系列解析の手法として研究されてきた。この手法は、多次元力学系において、部分的に観測した変数の時系列の遅延座標埋め込みから力学系全体の情報を再構成することを目的として考案された。遅延座標埋め込みの数学的な正当化は **Takens (1981)**, **Sauer, Yorke and Casdagli (1991)** による「埋め込み定理」があり、不変集合のボックスカウント次元の 2 倍より大きな次元の遅延座標の空間に埋め込むのであれば、全体のアトラクタの「再構成」が可能であることを示している。

一方で、遅延座標埋め込みについては、埋め込み次元や遅延座標の遅延幅などの埋め込み方を変えると、得られる埋め込みデータ点集合が変わり、引き出せる情報にロバストさがなく、実用上は未知の力学系の時系列に対してどれくらいの次元に埋め込めば良いかわからないことや、「再構成」とはいうものの埋め込み点集合から元の力学系のアトラクタ自体の具体的な復元方法については埋め込み定理は何も言及していないことが問題点として挙げられる。

埋め込み定理に依拠した時系列解析事例は数多あれども、これらの点を系統立てて議論している研究は極めて少ない。従前の埋め込み定理のような定性的な理解ではなく、構成的なアプローチによる遅延座標埋め込みの解明が必要であるため、本研究に着手した。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、遅延座標埋め込みによるアトラクタ再構成手法を、代数幾何学の消去理論を元に、構成的観点から解明することである。**Gröbner** 基底を用いて、次元縮約と復元のプロセスを表すことができれば、直接的に遅延座標埋め込み時系列解析手法の理解につなげることができる。また、変数消去理論から縮約方程式の次元なども与えられるので、埋め込み次元などの埋め込み手法とアトラクタ再構成に対する関係を明らかにすることが期待できる。

## 3. 研究の方法

遅延座標埋め込みによる力学再構成手法を、代数幾何学の消去理論を元にして構成的観点から解明するため、本研究では力学系の縮約に関して **Gröbner** 基底によって得られる縮約方程式の性質を詳細に調べた。与えられた力学系から着目する変数に閉じた方程式を導出するために **Gröbner** 基底を用いる手法は知られているが、この手法を逆に辿ることで元の方程式の候補を定める手法を考案した。

また、この手法によって、力学系に従って得られる時系列データから、力学系を再構成することができるため、データから正規方程式を導出するモデリング手法について研究を行った。さらに、この遅延座標系によるモデルもネットワーク構造で表現できることから、ランダムネットワークと遅延座標系を組み合わせたデータ駆動モデリング手法を考案し、時系列予測タスクの性能評価に取り組んだ。これは、力学系の再構成において高い予測精度を達成するネットワーク構造を探索することを目指すものである。

## 4. 研究成果

**Gröbner** 基底によって得られる縮約方程式の性質を詳細に調べるため、縮約方程式の定める代数多様体の特異点を検証し、ブローアップによる変数の設定を適切に行う方法論を整備することが可能となった。同じ縮約方程式を持つ高次元の方程式は無限に存在するため、その中から元の力学系に対応するブローアップとなるように設計することが必要である。元の力学系からその部分的な観測変数だけで閉じた空間への射影と、その部分変数から元の力学系全体への復元の両者の対応関係を **Gröbner** 基底を用いて理論的に与えることが可能となった。

この手法における重要な問題点は、力学系の復元によって得られる変数の適切な選択である。復元によって得られる変数は、相空間内での座標回転等の変数変換に対する冗長性を有するし、元の力学系の次元より大きな次元の空間でも再構成自体は可能であるからだ。そのため、本研究では元の力学系を正規方程式系と仮定し、その場合に正規系として復元することと冗長な次元の空間までブローアップさせないことを制限においた復元手法を確立した。これにより、ある 1 つの変数に対して代数方程式の形で与えられた時系列モデルから、元の方程式と同等な 1 階正規方程式系を導くことが可能となった。

ランダムネットワークと遅延座標系を組み合わせたデータ駆動モデリング手法による時系列予測タスクの性能評価については、予測精度や構成したモデルのリアプノフ指数を元の力学系と比較することで、力学再構成の評価を行い、提案手法の有効性を示すことができた。特に力学系のエミュレーションタスクにおいては、学習済みのデータ生成器が元の力学系の最大リアプノ

フ指数に近くなるようなネットワーク構造が適切であることが数値的に示された。これらにより学習性能の高いネットワーク構造の特徴づけを行うことができた。

データからモデル方程式をデータ駆動的に構築することはデータ科学において重要な問題であるが、部分変数から全体の力学系を推定、再構成するという研究に関して数理科学的な貢献を行えたものと考えている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Haruna Junichi, Toshio Riki, Nakano Naoto	4. 巻 107
2. 論文標題 Path integral approach to universal dynamics of reservoir computers	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 34306
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.107.034306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chiba Yuki, Miyaji Tomoyuki, Ogawa Toshiyuki	4. 巻 13
2. 論文標題 Computing Morse decomposition of ODEs via Runge-Kutta method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 40 ~ 43
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.13.40	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件（うち招待講演 7件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 春名純一, 兔子尾理貴, 中野直人
2. 発表標題 Reservoir computing における普遍性と計算性能
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoto Nakano
2. 発表標題 Reconstruction of dynamical systems based on machine learning technique
3. 学会等名 One day workshop on RDS (2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 春名純一, 兔子尾理貴, 中野直人
2. 発表標題 リザーバ計算機における普遍性と計算能力のサイズ依存性
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会・物性
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 春名純一, 兔子尾理貴, 中野直人
2. 発表標題 リザーバ計算機における普遍性と高次統計
3. 学会等名 第24回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中野直人
2. 発表標題 時系列埋め込みによるデータ駆動モデルとその状態制御に向けて
3. 学会等名 第64回自動制御連合講演会 OS09「低次元モデルに基づく先進的流体制御」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中野直人
2. 発表標題 時系列埋め込みでモデリング・機械学習との関連
3. 学会等名 2021年度MIMS研究集会「現象と数理モデル-数理モデリング学の形成に向けて-」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Chiba, Tomoyuki Miyaji, Toshiyuki Ogawa
2. 発表標題 Computing Morse decomposition of ODEs by non-rigorous numerics
3. 学会等名 International Workshop on Reliable Computing and Computer-Assisted Proofs (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮路智行
2. 発表標題 力学系に対する位相的計算法とその応用
3. 学会等名 大阪大学MDSモデリング部門主催ワークショップ「工学と数学の接点を求めて」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 千葉悠喜, 宮路智行, 小川知之
2. 発表標題 Runge-Kutta法によるMorse分解の近似計算の性能
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮路智行
2. 発表標題 Runge-Kutta法によるMorse分解の近似計算
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野直人
2. 発表標題 力学系と機械学習を用いた時系列解析
3. 学会等名 大阪大学MMDSモデリング部門主催ワークショップ「工学と数学の接点を求めて」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野直人
2. 発表標題 力学系理論と機械学習の手法によるデータ駆動型モデリングによる時系列解析と予測
3. 学会等名 日本応用数学会「ものづくり企業に役立つ応用数理手法の研究会」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野直人
2. 発表標題 力学系理論と機械学習の手法を用いた時系列解析
3. 学会等名 MIMS研究集会 現象と数理モデル ~数理モデリング学の形成に向けて~(招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	石塚 裕大  (Ishitsuka Yasuhiro)  (50761136)	九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・助教    (17102)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	宮路 智行  (Miyaji Tomoyuki)  (20613342)	京都大学・理学研究科・准教授     (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関