Hilbert–Schmidt 積分作用素論による 遅延座標埋め込み再考：経験的モデリングのための力学再構成に向けて

中野　直人　(JST さきがけ／北海道大学大学院理学研究院)*

1. 導入

スカラー時系列データ（サンプル時間幅 Δt）

$$\{f(t)\,|\,t \in T\}, \quad T = \{t_j = j\Delta t\,|\,j = 1, 2, 3, \dots\}$$

に対して，それを規則的に並べてベクトルを作ることを遅延座標系という．たとえば，

$$(f(t), f(t + k\Delta t), f(t + 2k\Delta t), \dots, f(t + k(N-1)\Delta t))$$

は，埋め込み間隔が $k\Delta t$ で埋め込み次元が N の遅延座標系である．これはスカラー時系列データをベクトル化する手っ取り早い手法であり，これまで多くの研究者によって時系列解析に用いられてきた．たとえば，ロジスティック写像

$$x_{n+1} = ax_n(1 - x_n) \tag{1}$$

は，$a = 3.8$ のときカオス的な振る舞いを見せるが（図 1左），(x_n, x_{n+1}) による 2次元埋め込みをおこなうと全ての点は放物線の上に乗っていることがわかる．これにより，x_n と x_{n+1} の間に函数関係があることがわかり，元の力学系 (1) をデータだけから推定することができる．

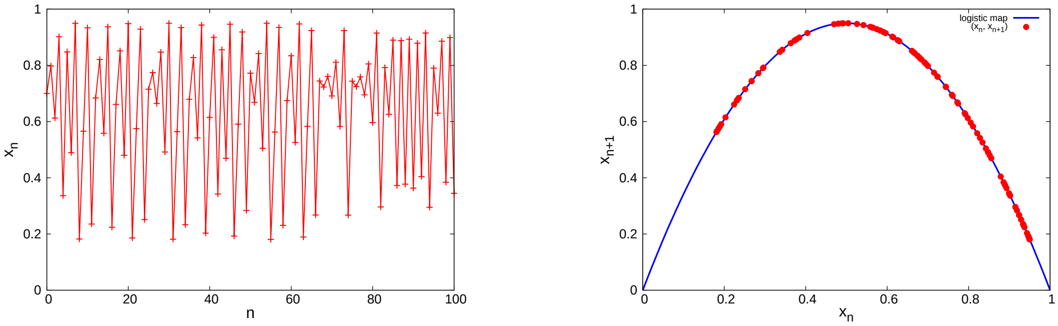

図 1: (左) $a = 3.8$ のときのロジスティック写像 (1) の軌道．(右) その 2次元埋め込み (x_n, x_{n+1})

本研究は科学技術振興機構さきがけ（課題番号 JPMJPR14E7），科学研究費助成事業 挑戦的萌芽研究（課題番号 16K13772），科学研究費助成事業 基盤研究 (B)（特設分野研究）（課題番号 26310201）の助成を受けた．また，本研究の一部は明治大学先端数理科学インスティテュート現象数理学研究拠点のコンピュータシステムの利用による．
キーワード：遅延座標埋め込み，時系列解析，力学再構成，データ駆動型解析，Hilbert–Schmidt 積分作用素

* 〒060-0810 札幌市北区北 10 条西 8 丁目　北海道大学大学院理学研究院
e-mail: n_nakano@math.sci.hokudai.ac.jp

また，時系列データとして観測した対象が連続的な力学系の解の離散サンプルであるとみなせば，それの従う力学を推定するには $f'(t)$ や $f''(t)$ を求めれば良さそうである．これは，$\Delta t \ll 1$ であれば，

$$f'(t) \approx \frac{f(t+\Delta t)-f(t)}{\Delta t}, \quad f''(t) \approx \frac{f(t+2\Delta t)-2f(t+\Delta t)+f(t)}{(\Delta t)^2}$$

であることから，$(f(t), f'(t), f''(t))$ の代わりに $(f(t_j), f(t_{j+1}), f(t_{j+2}))$ の座標で考えればよい．この一般化として Packard ら [4] によって，N 次元遅延座標には $(N-1)$ 次元力学系が対応することが見出されていた．例えば，ローレンツ方程式

$$x' = \sigma(y-x), \quad y' = x(\rho - z) - y, \quad z' = xy - \beta z \tag{2}$$

$(\sigma = 10,\ \rho = 28,\ \beta = \frac{8}{3})$ では，図 2 左の $(x(t), y(t))$ プロットと $(x(t), x(t+0.1)$ のプロットは良く似た形状を与えている．

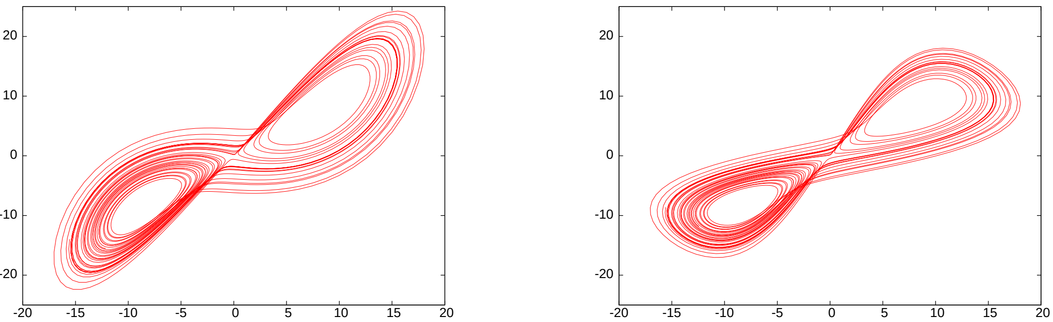

図 2: (左) ローレンツ方程式 (2) の軌道の $(x(t), y(t))$．(右) その x の 2 次元埋め込み $(x(t), x(t+0.1))$

この埋め込み理論は，ベクトル時系列データのある一つの変数だけに着目したスカラーデータに対しても応用することができるということが画期的であった．すなわち，N 次元の自励系の力学系 $\boldsymbol{x}' = F(\boldsymbol{x})$ に対して，この部分変数 $x_i(t)$ のスカラー時系列に対して埋め込み理論を用いることで，$x_i(t)$ の情報だけから元の力学系の再構成を試みたのである．実際，図 2 では $x(t)$ の情報だけで（正確には $x(t)$ だけではなく，2 時刻での情報を用いているが）$(x(t), y(t))$ に相当する情報が得られている．

この遅延座標埋め込みの手法は，数学的な正当性は Takens[6] の埋め込み定理に始まり，Sauer らの “Embedology” [5] などで得られている．ざっくり言うと，$x_i(t)$ に対して十分大な埋め込み次元の遅延座標系を与える写像は埋め込みになっているということである．さらに大雑把に説明すると，埋め込みによって再構成されたアトラクタは元のアトラクタと微分同相になるということである．そのため，この手法は部分的にしか観測できない大規模系に対しても，さらにその大規模系の力学系が unknown であっても，埋め込むことで元の力学系の性質が推測できるのではないかという夢の手法として注目された．Takens らによる数学的な保証があるのも手伝い，これまで工学的な手法の運用の研究が進められてきた．（運用の手法は [1] や [2] が詳しい．）

ここまで読むと，すでに遅延座標に関しては数学的な研究の余地はないように思える．一方で，遅延座標埋め込みには埋め込み間隔や埋め込み次元をどうしたら良いかの絶対的な方法論は（誤解を恐れず言えば）まだない．埋め込まれたデータから情報

を抜き出すのはいずれも玄人作業であり，中々どうして難しい．図 2 では埋め込み間隔を 0.1 としているが，これを 0.3 とすると図 3 左のように再構成したアトラクタの端がめくれたようになっていまい，また 1.0 とすると元のアトラクタの形状とは似ても似つかぬものとなってしまう．今はローレンツ方程式 (2) の解が図 2 左のようになることを知っているため，図 2 右のような形状を与える埋め込み間隔であれば良いとわかる．しかし，どんな力学系に従うかわからない未知のデータの解析の場合ではそうはいかない．本研究ではその問題に対して，解析的な手法を用いて解決していくことを目的とする．

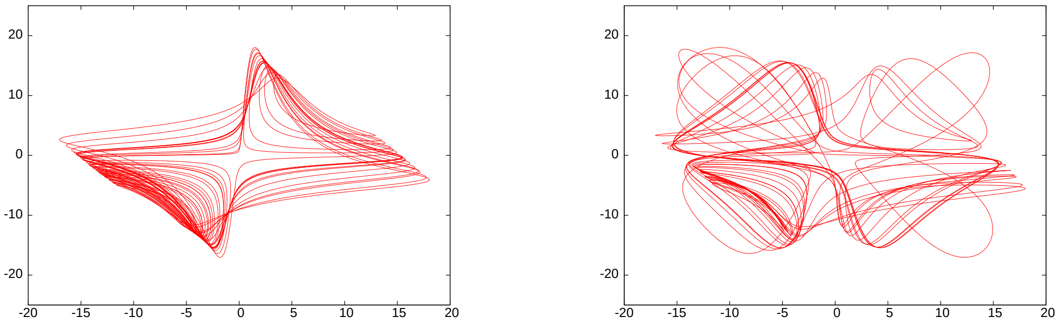

図 3: (左) ローレンツ方程式 (2) の x の 2 次元埋め込み $(x(t), x(t+0.3))$．(右) その x の 2 次元埋め込み $(x(t), x(t+1.0))$

2. Derivative embedding

ここでヒントとなるのが，Gibson ら [3] の Derivative embedding である．Derivative embedding とは $(f(t), f'(t), f''(t))$ というように導関数を座標のように並べていく手法である．彼らは，Packard らのアイディアと同様に，遅延座標と Derivative embedding と Legendre 多項式による埋め込みによる関係性を論じていた．筆者はここで，

$$\begin{pmatrix} f_i \\ f_{i+1} \\ f_{i+2} \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_i \\ f_{i+1} \\ f_{i+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f_i + f_{i+1} + f_{i+2})/\sqrt{3} \\ (f_{i+2} - f_i)/\sqrt{2} \\ (f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})/\sqrt{6} \end{pmatrix} \tag{3}$$

という直交行列 $\mathbb{Q}$ による座標回転を考えてみた．ただし，$f_j = f(t_j)$ である．(3) の右辺は，平均，1 階と 2 階の前進差分の形となっているため，$\Delta t \ll 1$ であれば

$$\begin{pmatrix} (f_i + f_{i+1} + f_{i+2})/\sqrt{3} \\ (f_{i+2} - f_i)/\sqrt{2} \\ (f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})/\sqrt{6} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(t_j) \\ f'(t_j) \\ f''(t_j) \end{pmatrix} \tag{4}$$

が成り立つことがわかる．ここで，

$$a_0 = \sqrt{3}, \quad a_1 = \sqrt{2}\Delta t, \quad a_2 = \frac{(\Delta t)^2}{\sqrt{6}} \tag{5}$$

である．(3) は $\mathbb{Q}$ によって座標を変えただけであるため，(3) の左辺と右辺のデータ点の分布は全く同じである．そのため，3 次遅延座標系自体が，a_1, a_2, a_3 でスケールはされるものの，位置 $f(t)$，速度 $f'(t)$，加速度 $f''(t)$ の情報を持つことがわかる．このこ

とは容易に一般化でき，$\Delta t \ll 1$ であれば，N 次の遅延座標系自体が $(N-1)$ 次までの導函数の情報を持つことが示される．

仮に $f(t)$ が微分方程式

$$F\left(f, f', f''\right) = 0, \tag{6}$$

に従うとしよう．すると，上のように 3 次遅延座標を $\mathbb{Q}$ で回転させたベクトル

$$\begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} = \mathbb{Q} \begin{pmatrix} f_i \\ f_{i+1} \\ f_{i+2} \end{pmatrix}$$

は，$\mathbb{R}^3$ 内の曲面

$$F\left(\frac{x}{a_0}, \frac{y}{a_1}, \frac{z}{a_2}\right) = 0 \tag{7}$$

の $O(\Delta t)$-近傍内に分布することがわかる．これにより，データ点から元の微分方程式が推定できることがわかる．

これを用いると，原理的には元の力学系の次元に到達するまで十分高い埋め込み次元の遅延座標系を構成すれば，本質的にそのデータ点自体が derivative embedding を与えることになっており，さらに元の力学系の再構成が可能となるのである．これは Packard らや Gibson らのアイディアを実にシンプルに表す手段であると言える．

だがしかし，これでもまだ十分とは言えない．高次元に埋め込んでもデータの分布がどうなっているかは，4 次元以上に埋め込めば視覚的にはわからない．さらに，連続力学系の再構成に対しては，遅延座標埋め込みでも derivative embedding でも $\Delta t \ll 1$ の仮定が必要である．実用上は，データのサンプル時間幅 Δt がその函数の変動に対して十分小さいとは限らない．さらに，この手法を用いるためにさらに時間解像度の細かいデータを観測することができるとも限らない．

次元の問題に対しては，高次元遅延座標系埋め込んでから，“重要な”部分空間へデータ点を射影することにより，問題の解決を狙う．ここでは主成分分析の手法を用いる．

3. 遅延座標主成分展開

スカラー時系列データ

$$f_1,\ f_2,\ \ldots,\ f_M$$

の N 次元遅延座標系に対する主成分分析とは以下の手順によって行う．データ行列を $\mathbb{X} = (X_{ij})$ とする．

$$\mathbb{X} = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \ldots & f_{M-N+1} \\ f_2 & f_3 & \ldots & f_{M-N+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_N & f_{N+1} & \ldots & f_M \end{pmatrix}. \tag{8}$$

ここで，第 j 列は j 番目の遅延ベクトル $\boldsymbol{X}_j := (X_{1,j}, X_{2,j}, \ldots, X_{N,j}) = (f_j, f_{j+1}, \ldots, f_{j+N-1})^{\mathrm{T}}$ となっている．さらに時間方向平均 $\bar{\boldsymbol{X}} = (\bar{X}_1, \bar{X}_2, \ldots, \bar{X}_N)^{\mathrm{T}}$ を

$$\bar{X}_i = \frac{1}{M'} \sum_{j=1}^{M'} X_{i,j} \left(= \frac{1}{M'} \sum_{j=1}^{M'} f_{j+i-1} \right)$$

と定める．ただし $M' = M - N + 1$ である．これに対して，$\mathbb{X}$ の誤差共分散行列を $\mathbb{V} = (V_{ij})$ とする．その各成分は

$$V_{ij} = \frac{1}{M'} \sum_{k=1}^{M'} (X_{ik} - \bar{X}_i)(X_{jk} - \bar{X}_j) = \frac{1}{M'} \sum_{k=1}^{M'} (f_{i+k-1} - \bar{X}_i)(f_{j+k-1} - \bar{X}_j)$$

と与えられる．主成分分析は，この $\mathbb{V}$ の固有値問題として定式化できる．$\mathbb{V}$ は非負定値対称行列であるので，固有ベクトルから正規直交基底を作ることができる．固有値を降順で並べ

$$\lambda^{(1)} \geq \lambda^{(2)} \geq \ldots \geq \lambda^{(N)} \geq 0$$

$\boldsymbol{\varphi}^{(n)}$ をそれに対応する正規直交基底となる固有ベクトルを与えると，遅延ベクトルは

$$\boldsymbol{X}_j = \sum_{k=1}^{N} \left(\boldsymbol{X}_j, \boldsymbol{\varphi}^{(k)} \right)_{\mathbb{R}^N} \boldsymbol{\varphi}^{(k)} \tag{9}$$

と展開することができる．

この手法は，(**??**) より，(2 値の）自己相関函数の固有ベクトルによる展開である．自己相関函数は，フーリエ変換を通じてパワースペクトルと関連するため，この手法はフーリエエネルギーの高い順に基底ベクトルを選ぶことになっている．

4. Hilbert–Schmidt 積分作用素

実はこのことは，データを離散ではなく連続化して考えると，背後にある数学的構造がわかりやすい．ここでは，$\Delta t \to 0$ の極限を考え，データは $\{f(t)\}_{0 \leq t \leq T}$ とする．無限次元の遅延座標としては

$$X(t, x) := f(t + x)$$

を用いる．ここで $x \in [0, L]$ とする．上述の主成分分析の連続版は，

$$V(x, y) = \frac{1}{T} \int_0^T (X(t, x) - \bar{X}(x))(X(t, y) - \bar{X}(y)) \mathrm{d}t$$

を積分核にもつコンパクト作用素

$$V u(x) = \int_0^L V(x, y) u(y) \mathrm{d}y$$

の固有函数展開である．講演では，これに付随する遅延座標主成分展開の数学的構造と Hilbert–Schmidt の積分作用素論を用いた時系列解析手法についての詳細を紹介し，経験的モデリングに向けた数理科学的手法について解説したい．

参考文献

[1] 合原一幸（編）, 池口徹, 山田泰司, 小室元政, “カオス時系列解析の基礎と応用”, 産業図書, (2000).

[2] 宮野尚哉, “時系列解析入門”, DGC ライブラリ 19, サイエンス社, (2002)

[3] J. F. Gibson, J. D. Farmer, M. Casdagli and S. Eubank, “An analytic approach to practical state space reconstruction”, *Physica* D, **57**, 1-30, (1992).

[4] N. H. Packard, J. P. Crutchfield, J. D. Farmer and R. S. Shaw, “Geometry from a time series”, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 712-716, (1980).

[5] T. Sauer, J. A. Yorke and M. Casdagli, “Embedology”, *J. Stat. Phys.*, **65**, 579-616, (1991).

[6] F. Takens, “Detecting strange attractors in turbulence”, Lecture Note in Mathematics (Springer–Verlag), **898**, 366-381 (1981).