

【構成メンバー】

- ・ チームディレクター(PI) : 河原吉伸
- ・ 特別研究員: 坂田逸志, 野口聖史
- ・ 基礎科学特別研究員: Pongsit Thanasutives
- ・ テクニカルスタッフ: 西村能博
- ・ 客員研究員: 藤井慶輔, 橋本悠香, 藤澤将広, 小西卓哉
- ・ その他, 6名の研究パートタイマー(博士前期・後期課程学生・学部生)

【1】潜在空間表現および転送作用素の推定による確率的力学系の学習

(目的) 非線形・確率的な挙動、部分観測問題がある力学系のモデリング:

- ・ 状態変数の更新を、転送作用素により記述・推定するアルゴリズムの提案
- ・ 確率実現理論に基づくスペクトル学習により有意な潜在表現を獲得

① 確率分布のRKHSへの埋め込み

RKHS \mathbb{H} と確率測度の空間 $\mathbb{M}_+(\mathbb{X})$ 、
確率測度 $P \sim \mathbb{M}_+(\mathbb{X})$ の埋め込み:
 $\mu: \mathbb{M}_+(\mathbb{X}) \rightarrow \mathbb{H}, P \rightarrow \int \phi(x) dP(x)$

② 転送作用素

$\Pr(x(t+1) \in A | x(t) = x) = \int_A p_{tx}(z|x) dz$
確率密度関数の更新:
 $(\mathcal{T}p_t)(x) = \int p_{tx}(x|z)p_t(z) dz$

確率分布の発展 \Leftrightarrow 埋め込み空間上の遷移

確率変数 x, y とその特徴写像 $\phi_x(\cdot), \phi_y(\cdot)$ (RKHS $\mathbb{H}_x, \mathbb{H}_y$)
埋め込み転送作用素 $\mathcal{T}_e: \mathbb{H}_x \rightarrow \mathbb{H}_y$ が計算可能:

$\hat{\mathcal{T}}_e = \Phi_y \Phi_x^\top (\Phi_x \Phi_x^\top + \epsilon I)^{-1}; \Phi_x := [\phi_x(x_1), \dots, \phi_x(x_N)]$ (Φ_y も同様)

スペクトル学習: マルコフ性を満たす状態変数の推定

観測値関数 $u: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ について、過去と未来の情報の空間

$S_t^- := \text{span}\{u(y(t-1)), u(y(t-2)), \dots\}$
 $S_t^+ := \text{span}\{u(y(t)), u(y(t+1)), \dots\}$

射影空間 $\mathcal{P}(S_t^+ | S_t^-)$ 上でのマルコフ性を満たす状態過程を構築
特徴空間上の正準相関解析を介した推定アルゴリズムを提案

応用例: 逐次状態推定

学習された作用素を用いて、
無限次元空間上のカルマン更新を計算

予測: $\mu(x(t))^+ = \mathcal{T}_e \mu(x(t-1))^+ + C_{x(t)}^- \mathcal{T}_e^{-1} \mu(x(t-1))^+ + C_{x(t)}^+$

更新: $\mu(x(t))^+ = \mu(x(t))^+ + G_{x(t)} (\phi(x(t)) - O_e \mu(x(t))^+)$

- *1: 共分散作用素 *2: RKHS上のノイズの共分散
- *3: カルマンゲイン作用素

多重振り子の軌跡を示す動画系列の予測

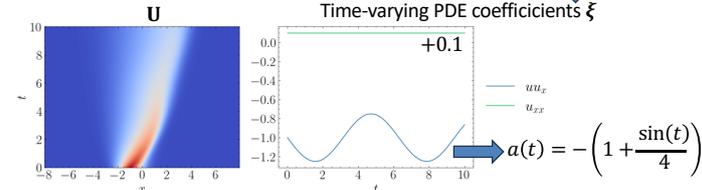
ベンチマーク同等以上の性能を記録
ノイズ環境下では明確に改善

Model (train/test length)	without noise MSE	with noise MSE
EITD-RF (1.5k)	0.2175	0.2942
RKN (1.5k)	0.2198	0.2944
LSTM (1.5k)	0.2527	0.3167
EITD-RF (15k)	0.2924	0.2986
RKN (15k)	0.2888	0.3258
LSTM (15k)	0.3030	0.3158

【2】Bayesian model selection for variable-coefficient PDE discovery

[Example] Time-dependent Burgers' equation: $u_t = 0.1u_{xx} + a(t)uu_x$

$u(x, t)$: State variable we observe in a spatiotemporal domain (size $N_t \times N_x$)

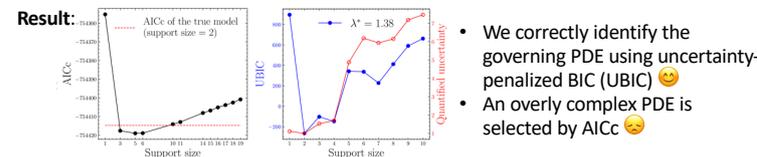


Objective: Data-driven discovery of the governing equation with variable coefficients
Assumption: The governing PDE is sparse, i.e., composed of only a few important terms

Problem formulation: System of linear equations given a discretization U

For each time step t_i we formulate: $U_i^+ = Q_i^+ \xi^i$

- [Candidate library] Q^i is overcomplete, e.g., its columns contain $U_{xx}, U^i U_x$, etc.
- [PDE Coefficient] ξ^i is found by best-subset regression. Its uncertainty \mathcal{U} is quantified by Bayesian inference. k denotes #nonzeros, i.e., the support size.
- Sum the information criterion over all time steps to perform model selection
- $AIC(\xi^i) = -2llf(\xi^i) + 2k$; where llf is the log-likelihood function
- [Proposal: Penalize high uncertainty] $UBIC(\xi^i) = -2llf(\xi^i) + (\log N_x)(\mathcal{U} + k)$



- 主要な発表文献**
- [1] *N. Ke, *R. Tanaka, and Y. Kawahara (*: equal contributions), "Learning Stochastic Nonlinear Dynamics with Embedded Latent Transfer Operators," AISTATS'25, PMLR 258:4861–4869, 2025.
 - [2] P. Thanasutives, Y. Kawahara, and K. Fukui, "Bayesian Model Selection for Variable-coefficient Partial Differential Equation Discovery," Result in Engineering, 106930, 2025.
 - [3] S. Noguchi and Y. Kawahara, "Wavy Transformers," Advances in Neural Information Processing Systems 38, 2025.
 - [4] Y. Mivauchi, M. Ikeda, and Y. Kawahara, "Generalized Stochastic Resilience for Early Warning Signals Based on Koopman Operator," Nonlinear Dynamics (accepted)

2025年度中の主要な成果

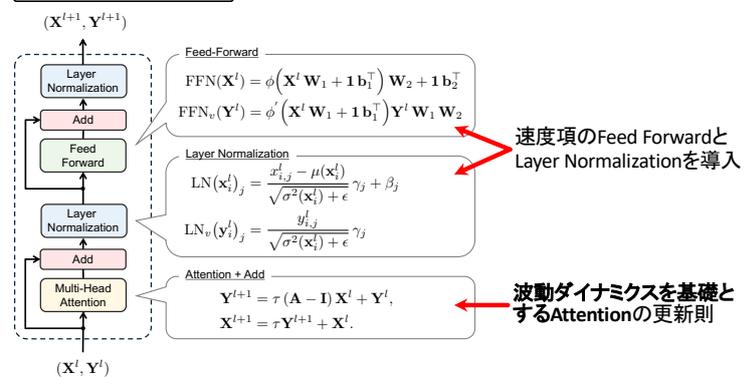
- 【1】潜在空間表現および転送作用素の推定による確率的力学系の学習 [1]
- 【2】Bayesian model selection for variable-coefficient PDE discovery [2]
- 【3】波動ダイナミクスに従う新たなTransformerの提案 [3]
- 【4】クープマン作用素を用いたティッピングの検知手法の開発 [4]

【3】波動ダイナミクスに従う新たなTransformerの提案

Transformerの隠れ状態ダイナミクスは完全グラフにおける拡散過程として解釈できる。その観点から、Transformerで問題となるOver-smoothingは、エネルギー散逸として特徴付けることができる。

→ この解釈を元に、保存系である波動ダイナミクスに従う「Wavy Transformer」を提案

Wavy Transformer Block Transformerの情報伝播に波動を導入



グラフデータに対する適用例 → 波動導入により深いモデルの破綻を大幅に改善

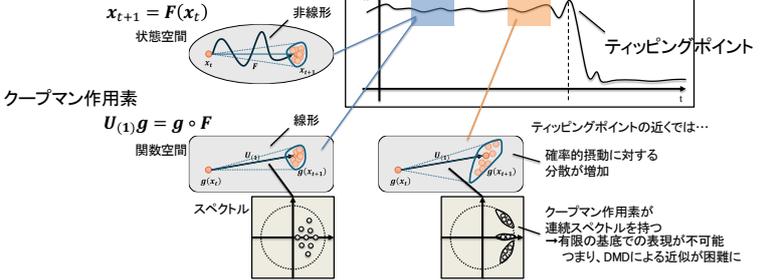
Dataset	Metric ↑	#Layer	Diffusion	+ Wave	Δ
OGBN-Arxiv	Acc	7	24.44 ± 4.51	66.73 ± 0.33	+42.29
OGBN-Proteins	ROC-AUC	5	69.42 ± 2.31	80.14 ± 0.67	+10.72

論文中では、画像・言語タスクに対しても検証し、一貫した性能向上を確認

【4】クープマン作用素を用いたティッピングの検知手法の開発

システムの振る舞いが急激に遷移するティッピングポイントの近傍における、クープマン作用素のスペクトル的・確率的性質について解明。

動的システム(時間の発展を記述する)



この結果を用いて、動的モード分解(DMD)の枠組みを用いてティッピングポイントへの近さを予測する早期警告信号(EWS)を開発。

