arXiv:2603.06872v1 [math.NA] 6 Mar 2026

若干输运方程的核方法及其在学习用于逼近 Koopman 特征函数的核中的应用：经由变分方法、格林函数与特征线法的统一途径

Boumediene Hamzi[1,2],Houman Owhadi[1],和 Umesh Vaidya[3]

[1]计算与数学科学系，加州理工学院，帕萨迪纳，加利福尼亚州，美国[2]艾伦·图灵研究所，伦敦，英国[3]机械工程系，克莱姆森大学，克莱姆森，南卡罗来纳州，美国

摘要

我们提出一个统一的理论与计算框架，用于构造针对输运方程定制、并适配非线性动力系统之 Koopman 特征函数的再生核。这些特征函数满足一类输运型偏微分方程（PDE），我们用三种具有解析基础的方法对其进行求逆：（i）再生核希尔伯特空间（RKHS）中的 Lions 型变分原理，（ii）与格林函数的卷积，以及（iii）沿特征流经由拉普拉斯变换构造的预解算子。我们证明，在温和的光滑性与因果性假设下，这三种构造得到相同的核。我们进一步表明，当真实的 Koopman 特征函数位于该 RKHS 中时，相应的核特征函数（Mercer 模态）在 L^2 中收敛于这些真实的 Koopman 特征函数。我们的方法通过无网格的凸优化框架在数值上实现，并辅以边界正则化以处理特征函数爆破。一种多核学习（MKL）方案通过残差最小化自动选择核。最后，我们证明同一框架可原样适用于更广泛的一类线性输运偏微分方程，包括平流方程、连续性方程和刘维尔方程。

变分原理、格林函数与特征线法的统一，使得人们能够开发用于近似输运方程特征函数（包括 Koopman 算子的特征函数）的新方案，并提出一种数据驱动方法，用于学习适用于这些近似的核。数值实验验证了该方法的实用性和稳健性。

目录

1 引言 **3**

2 数学基础 72.1 Lions变分方法与再生核希尔伯特空间.7 2.2 面向输运偏微分方程的 Lions变分方法.9

3 核构造的统一框架：从 Koopman 偏微分方程到再生核希尔伯特空间表示 1 **1**

3.1 通过格林函数与特征线恢复特征函数并构造核.11 3.2 核的谱分解与 Koopman 模态 . . . . . 15 3.3 与 Lions 变分框架的联系 18 3.4 不同方法的等价性.19

4 Koopman 特征函数的变分近似 2 **0**

4.1 基于利翁斯的变分优化.20 4.2 核的选择与再生核希尔伯特空间几何的作用. 26 4.3 通过 Lions 变分方法进行 Koopman 特征函数的变分核学习.28 4.4 基于特征线法的核的选择 33

5 E对其他输运方程的扩展 4 **1**

5.1 线性平流方程.42 5.2 连续性方程.43 5.3 刘维尔方程.44 5.4 含衰减项的输运方程.45

附录 **46**

A 再生核希尔伯特空间（RKHS）46 B Koopman 算子与特征函数 48B.1 Koopman 算子及其谱.48 B.2 Koopman 特征函数分解.49**C 格林函数与特征线 50 D 定理 3.7 的证明 51**

1 引言

再生核希尔伯特空间（RKHS）的理论长期以来一直是分析偏微分方程（PDE）解及其数值近似的有力框架。在开创性工作中，Jacques-Louis Lions [1,2]证明，可以通过在恰当选取的希尔伯特空间中采用变分公式来“求逆”椭圆算子——该空间通常是点值连续的 Sobolev空间——从而得到一个再生核。具体而言，Lions 证明，这类空间中的每个函数都可以通过与唯一核的内积恢复；在有利条件下，该核具有如下谱展开形式：

$$K(x,y) = \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j(x)\,\psi_j(y). \tag{1}$$

基于这些思想，Engliˇs、Lukkassen、Peetre 和 Persson [3]将这一变分框架推广到了更广泛的一类椭圆算子和边值问题。他们的推导通常用经典的格林核或泊松核来表示再生核，从而凸显出核如何同时体现区域的几何结构与微分算子的解析性质。与此同时，Auchmuty [4]通过谱（Steklov）展开构造调和函数的希尔伯特空间，提出了一种替代方法。他的方法用边界迹空间刻画函数空间，并将再生核明确表示为 Steklov 特征函数的展开。这不仅恢复了再生性质，还为核提供了具体公式，进一步印证了 Lions 最初提出的变分原理。

另一方面，时间序列数据广泛存在于各个科学领域，推动了基于统计与机器学习方法的大量预测方法的发展 [5–22]。动力系统理论为理解此类数据背后的支配规律提供了工具。

Koopman 算子理论源于 Koopman [23]，的奠基性工作，它提供了一种线性视角，用以研究非线性动力学。近年来，动力系统的研究日益聚焦于 Koopman 算子——一种线性、无限维的算子，它支配着非线性动力系统 [24]的观测函数沿轨迹的演化。Koopman 分析的一个核心目标是提取该算子的特征函数，因为它们揭示了系统内在的模态结构。

由Lions开创、并由Engliš等人与Auchmuty加以完善的技术，为从经典变分原理通往再生核的谱理论提供了一座自然的桥梁。正如调和函数可通过基于核的变分公式得以恢复，我们构造再生核，使其Mercer特征函数逼近Koopman 特征函数。我们的方法不仅统一了这些视角，还给出一种实用的数值方案：一个严格凸的优化

问题，该问题定义在再生核希尔伯特空间中，其极小元能够在稳定性与正则化下捕捉所需的特征函数。作为线性算子，Koopman算子的谱分解编码了对于分析与综合至关重要的丰富信息。例如，主特征函数揭示了状态空间的几何；它们的联合零水平集刻画了平衡点 [24]的稳定流形与不稳定流形。这些特征函数与极限集或平稳动力学相关联，例如动力系统的平衡点或极限环。例如，对于平衡动力学，主特征函数的特征值将与系统在该平衡点处线性化的特征值相同。在 [25–27], 中，这些特征函数被用于辨识平衡点的稳定性边界与吸引域。此外，如 [28,29]所示，它们在最优控制综合中发挥着关键作用。一种用于计算Koopman 特征函数的路径积分公式在 [30]中被提出。然而，挑战仍然存在：Koopman算子往往同时具有离散谱与连续谱 [24], ，而通过有限维投影逼近无穷维算子可能导致“谱污染” [31]。

本文提出一种直接计算主 Koopman 特征函数的数值方法，无需显式构造 Koopman 算子。具体而言，我们提出了一种计算与平衡动力学相关的 Koopman 算子的主特征函数的方法。我们的方法基于 [30], 中提出的分解原理：与平衡点相关的主特征函数部分由平衡点处向量场的线性化决定。我们的工作也受到数据驱动的 Koopman 学习相关广泛文献的启发，例如扩展动态模态分解（ EDMD） [32], 通过作用于预先选定的基函数空间来近似 Koopman 算子。从这一角度看，我们提出了一种受 Lions 构造核的变分方法启发、从数据中学习基函数的方法。近期研究将核方法与 Koopman 算子理论相结合 [33–38], ，利用再生核希尔伯特空间框架 [39] 改善正则化、收敛性和可解释性 [40,41]。核方法如今在动力系统分析 [7,33,42–46, 46–62],以及代理建模 [63]中发挥着核心作用。

我们利用这样一个事实：主特征函数所对应的特征值与系统在平衡点处线性化后的特征值相同，因此可将谱计算问题化为求解线性平流型偏微分方程。为此，我们将 Lions 的经典思想用于输运型（或平流型）特征值问题：

$$f(x)\cdot\nabla\varphi(x)=\lambda\varphi(x),\quad \text{或者等价地}\qquad L\varphi(x):=f(x)\cdot\nabla\varphi(x)-\lambda\varphi(x)=0. \tag{2}$$

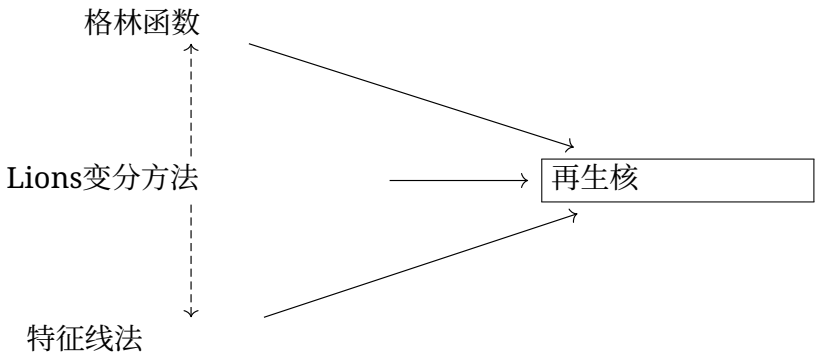
我们的目标是以统一且便于数值处理的方式，为解空间构造一个再生核 $K(x,\ y)$。我们采用两种直接的方法：

1. 格林函数法通过对称化一个来构造 $K(x,\ y)$

求解偏微分方程 $L_x G(x,\xi) = \delta(x-\xi)$ 的因果格林函数 $G(x,\xi)$。

2. 特征线法。该方法利用向量场 $f(x)$ 所生成流的结构，通过沿特征曲线积分来求解偏微分方程。将解算子表示为沿流进行拉回作用的半群，并对其取拉普拉斯变换，即可得到一个预解核，该核作为解空间的再生核。当流映射已明确可知或能够高效模拟时，这种构造尤为自然，并且与 Koopman 算子理论密切相关。所得核不仅与 Lions变分解和格林函数卷积相一致，还提供了对解空间的几何化且融入动力学信息的表示。

在适当的假设下，这些构造与变分框架相结合，可得出等价的再生核。也就是说，通过格林函数获得的核与通过变分方法或特征线法导出的核一致。这还使我们能够提出一种新方法，从数据中学习近似 Koopman特征函数的核。下图对此进行了说明



(3)

最后，尽管我们的主要关注点是构造Koopman特征函数，但我们的方法具有足够的通用性，可应用于多种输运型方程，包括线性平流方程、连续性方程、刘维尔方程和衰减输运方程。

通过变分方法将经典再生核理论与现代动力系统分析统一起来，为非线性动力学的数据驱动研究提供了一个严谨而灵活的框架。它使人们能够开发新颖的方案，以近似输运方程的特征函数（包括Koopman算子的特征函数），并提出一种数据驱动方法，用于学习适合这些近似任务的核。

我们的贡献。

• **核统一定理**。 我们证明，通过（*i*）Lions 变分求逆、（*ii*）因果格林函数对称化，以及（*iii*）特征流的拉普拉斯预解式得到的再生核，在温和的光滑性与因果性假设下，在数学上完全相同。

• **核模态的谱收敛**。 我们证明，当 Koopman 特征函数属于再生核希尔伯特空间时，所构造核的 Mercer 特征函数会在 L^2 中收敛到 Koopman 特征函数。这一结果连接了基于核的方法与谱方法，并为数据驱动的核近似提供了理论依据。

• **主 Koopman 特征函数的变分求解器**。 我们将 Koopman 特征值偏微分方程改写为再生核希尔伯特空间中的凸优化问题，从而得到一种无需网格的正则化算法，即使特征函数出现边界爆破，该算法仍保持适定。

• **处理爆破特征函数**。 对于 Koopman 特征函数在边界附近发散的系统（例如一维三次示例），我们引入边界迹惩罚和边界层惩罚项，将优化限制在内部子域中，并保证解的存在性、唯一性和数值稳定性。

• **奇异特征函数的数值策略**。 我们实现边界迹惩罚和边界层惩罚项，以稳定地恢复出现边界发散的 Koopman 特征函数。即使特征函数在整个区域上并非平方可积，这些技术也能实现一致的数值恢复。

• **动力学信息核**。 我们框架中的所有核均通过求解输运型偏微分方程（$f \cdot \nabla - \lambda$）$\phi = 0$，并采用三种具有解析依据的构造方法——格林函数、变分求逆和基于流的预解式——推导而来，从而确保再生核希尔伯特空间结构能够编码输运几何和 Koopman 谱特征。

•**路径积分核构造**。 我们提出一种受路径积分公式启发的核构造方法，用于计算 Koopman 特征函数。

• **无监督核学习**。 一种多核学习（MKL）方案通过最小化 Koopman 残差本身来调整核权重，从而自动平衡表达能力与光滑性，无需手动进行参数调优。

• **可扩展性与验证**。 我们的框架可原样应用于其他线性输运方程——包括平流、连续性、刘维尔和衰减模型——从而展示其广泛适用范围与实际效用。这种可扩展性由解析等价性支撑，并在第 5 节中加以说明。

•**Koopman谱核一致性**。 当核由精确的 Koopman 特征函数构造时，其 Mercer 分解会精确恢复这些模态。这为基于核的谱学习提供了理论依据。

•**谱收敛定理**。 在温和假设下，当 Koopman 特征函数属于再生核希尔伯特空间时，统一核的 Mercer 模态在 L^2 中收敛于 Koopman 特征函数。

2 数学基础

2.1 Lions 的变分方法与再生核希尔伯特空间

Lions 的奠基性工作为通过变分框架构造偏微分方程解空间的再生核奠定了基础。在其最初的设定中，Lions 考虑了定义在具有光滑边界的区域上的调和函数空间，其中函数的边界值属于适当的 Sobolev空间。他的方法可概括为以下几个关键思想:

• **变分公式与表示定理：** Lions 证明，如果选择一个希尔伯特空间 H （例如 Sobolev空间），使得点求值泛函

$$\delta_x : H \to \mathbb{R}, \quad \delta_x(u) = u(x), \tag{4}$$

是连续的，那么根据 Riesz 表示定理，存在唯一函数 $K(x, \cdot) \in H$ （称为再生核[1]）满足

$$u(x) = \langle u, K(x, \cdot) \rangle_H \quad \text{for all } u \in H. \tag{5}$$

这一结果通常通过求解一个最小化问题获得

$$\min_{u \in H,\, u(x)=1} \|u\|_H^2, \tag{6}$$

使得最小化解与 $K(x, \cdot)$ 成正比。

• **通过 Mercer定理进行谱展开：** 在适当的假设下——例如区域的光滑性、恰当的边界正则性以及点值的连续性——再生核 $K(x, y)$ 是连续且正定的。Mercer定理因此保证 $K(x, y)$ 存在正交归一展开

$$K(x, y) = \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j(x) \psi_j(y), \tag{7}$$

[1]关于再生核希尔伯特空间的简要回顾，请参见附录A

其中，$\{\psi_j\}$ 是 H的正交归一基。因此，Lions 变分表述自然导出核的谱表示。

• **格林函数作为显式求逆机制：** 在 Lions 的工作中，通过使用算子的格林函数，明确地实现了变分求逆。也就是说，如果能够构造一个格林函数 $G(x,\ \xi)$，使其满足

$$L_x\, G(x,\xi) = \delta(x-\xi) \tag{8}$$

（并满足适当的因果条件或边界条件），那么便可以通过显式积分公式表示再生核，

$$K(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)\, G(y,\xi)\, w(\xi)\, d\xi, \tag{9}$$

对于适当的权函数 $w(\xi) > 0$。这样，格林函数法便是抽象变分求逆的一种具体实现；进行相关的谱展开后，它会得到相同的核。

• **假设与适用性：** Lions 的方法能否成功取决于若干关键假设：

– 假设区域 Ω 足够光滑，因此经典格林函数存在，且点值在 H 中连续。– Ω 的边界必须规整（通常至少为 C^1 或利普希茨边界；某些展开则要求更高的正则性）。– H 上的内积经过选取，使得求值泛函 δ_x 有界，从而令 H 成为再生核希尔伯特空间。

在这些条件下，变分问题是适定的，并且再生核既唯一，又可以用谱展开表示。

• **与其他方法的联系：**尽管 Lions 的方法最初是为椭圆（调和）问题提出的，但其核心思想自然可以推广到更一般的情形。在后续章节中，我们将说明，格林函数法和特征线法虽然起点不同，却能得到与通过 Lions 变分表述所得再生核等价的结果。这种等价性凸显了该方法的稳健性：无论是通过变分原理恢复核、借助格林函数进行显式积分求逆，还是分析沿特征线的演化（并应用拉普拉斯变换），所得的核都满足

$$u(x) = \langle u, K(x,\cdot)\rangle_H, \tag{10}$$

对所有 $u \in H$，从而完整地刻画了解空间的结构。

总之，Lions 的方法既提供了抽象的变分框架，又通过格林函数提供了构造再生核的显式方法。当其被应用于 Koopman 特征函数问题时，

$$f(x) \cdot \nabla \varphi(x) = \lambda \varphi(x), \tag{11}$$

$$\dot{x} = f(x) \tag{12}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = f \cdot \nabla \psi = \mathcal{A}\psi \tag{13}$$

$$\mathcal{A}\varphi = \lambda \varphi \tag{14}$$

$$\dot{x} = f(x) + \sigma \xi \tag{15}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = f \cdot \nabla \psi + \sigma^2 \nabla^2 \psi \tag{16}$$

尽管算子 L 是一阶的（且按经典意义来说并非椭圆算子），但同样的基本原理仍然适用。通过定义一个适当的解希尔伯特空间，变分方法保证了再生核及其 Mercer 展开的存在。后续章节将证明，通过格林函数法和特征线法得到的再生核，与通过 Lions变分方法推导出的再生核等价，从而为这些不同的方法提供一个统一的框架。

2.2 Lions 的输运偏微分方程变分方法

输运方程用于描述给定速度场作用下物理量的传播，其特征是仅包含一阶导数。这类方程广泛应用于流体动力学、统计力学和动力系统等领域。在许多情况下（例如在 Koopman 算子理论[2]中），人们关注如下形式的特征函数方程

$$f(x) \cdot \nabla \varphi_\lambda(x) = \lambda \varphi_\lambda(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \tag{17}$$

其中 $f: \Omega \to \mathbb{R}^d$ 是一个光滑向量场， λ 是谱参数。方程（17）称为输运方程，因为：

1. 它只涉及一阶导数。

[2]关于 Koopman 算子理论的简要回顾，请参见附录 B。

2. 项 $f(x) \cdot \nabla\varphi_\lambda(x)$ 表示沿由微分方程定义的流的方向导数

$$\dot{s}_t(x) = f(s_t(x)), \quad s_0(x) = x. \tag{18}$$

3. 由于不存在二阶平滑项，因此解只需沿特征线平流。

4. 在 Koopman 分析中，演化由下式给出

$$[U_t\varphi_\lambda](x) = \varphi_\lambda(s_t(x)) = e^{\lambda t}\,\varphi_\lambda(x), \tag{19}$$

并对 t 关于 $t = 0$ 求导即可还原式 (17)。

我们的目标是推导与该算子相关的再生核 $K(x,\ y)$ r

$$L\varphi(x) := f(x) \cdot \nabla\varphi(x) - \lambda\,\varphi(x), \tag{20}$$

采用两种互补的方法：

1. **格林函数方法**：通过求解下式，得到推迟格林函数$G(x,\ \xi)$

$$L_x\,G(x,\xi) = \delta(x - \xi) \tag{21}$$

（其中 L_x 表示算子作用于变量 x），然后通过卷积构造对称核：

$$K(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)\,G(y,\xi)\,w(\xi)\,d\xi, \tag{22}$$

其中 $w(\xi) > 0$ 是一个权函数。

2. **特征线法（预解核）**：我们将方程 (17) 的解沿特征线写为

$$\varphi_\lambda(x) = \exp\big(\lambda\,T(x)\big)g(s_{-T(x)}(x)), \tag{23}$$

其中 $T(x)$ 是经过 x 的特征线到达指定初始超曲面所需的时间。由此得到 Koopman 半群

$$[T_t g](x) = g\big(s_{-t}(x)\big), \tag{24}$$

其拉普拉斯变换（预解算子）定义了核

$$K_\alpha(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\,\delta\big(y - s_t(x)\big)dt, \quad \alpha > \operatorname{Re}\lambda. \tag{25}$$

在论文的最后一节中，我们还展示了这些方法在几种著名输运方程中的应用：线性平流方程、连续性方程和刘维尔方程。随后，我们证明这两种方法得到相同的再生核，并解释这种等价性的意义。

3 核构造的统一框架：从 Koopman 偏微分方程到再生核希尔伯特空间表示

本节提出一个统一框架，用于恢复输运型偏微分方程对应的 Koopman 特征函数并构造再生核。我们证明，可以通过格林函数或特征流等价地恢复这些特征函数；按照 Lions 的思路，借助变分公式，两种方法得到的再生核也相同。我们推导出显式的核表示，建立其谱分解，并证明格林函数、半群和变分方法三者等价。

3.1 通过格林函数和特征线恢复特征函数并构造核

格林函数法 考虑算子

$$L\varphi(x) = f(x) \cdot \nabla\varphi(x) - \lambda\varphi(x), \tag{26}$$

并定义其格林函数 $G(x,\ \xi)$，满足

$$L_x G(x, \xi) = \delta(x - \xi). \tag{27}$$

按照 Lions 的方法，可以通过从超曲面 Σ 传播初始或边界数据 g 来恢复特征函数：

$$\varphi_\lambda(x) = \int_\Sigma G(x, \xi)\, g(\xi)\, dS(\xi). \tag{28}$$

该公式的证明请参见定理 C.1。

特征线法。 沿着定义的特征流 $s_t(x)$ by

$$\dot{s}_t(x) = f(s_t(x)), \quad s_0(x) = x, \tag{29}$$

特征函数满足

$$\varphi_\lambda(s_t(x)) = e^{\lambda t}\, \varphi_\lambda(x). \tag{30}$$

给定 Σ上的初始数据 g ，通过沿反向特征线传输即可恢复特征函数：

$$\varphi_\lambda(x) = e^{\lambda T(x)} g\big(s_{-T(x)}(x)\big), \tag{31}$$

其中， $T(x)$ 是沿着流到达 Σ 所需的时间。该公式的证明见定理 C.2。

基于格林函数的方法和特征线法都能得到等价的恢复公式，详细内容见附录C。

给定格林函数，我们通过卷积构造再生核 :

$$K(x,y)=\int_{\Omega} G(x,\xi)G(y,\xi)w(\xi)\,d\xi, \tag{32}$$

其中 $w(\xi)$是一个正权函数。

或者，利用定义如下的半群 T_t

$$[T_t g](x)=g(s_{-t}(x)), \tag{33}$$

我们通过拉普拉斯变换定义预解核:

$$K_\alpha(x,y)=\int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta\big(y-s_t(x)\big)\,dt, \tag{34}$$

对于 $\alpha>\mathrm{Re}\,\lambda$。

两个核都是对称、正定的，并且编码了输运算子 L 的因果动力学。

定理3.1 （格林函数核的存在性与正则性）。 设$\Omega\subset\mathbb{R}^d$是具有 $C^{1,\alpha}$ 边界的有界区域，并设 $f\in C^1(\Omega;\mathbb{R}^d)$ 生成完备流 s_t。固定 $\lambda\in\mathbb{C}$ 并定义输运算子

$$L:=f\cdot\nabla-\lambda. \tag{35}$$

假设如下:

1. 流 s_t 在Ω上光滑且可逆。*2.* 存在横截超曲面 $\Sigma\subset\Omega$，使得每个点 $x\in\Omega$ 都位于一条在有限时间内与 Σ 相交的唯一流线上。

3. 权函数 $w\in C(\Omega)$ 满足 $w>0$。

则求解下列方程的推迟格林函数 $G(x,\xi)$

$$L_x G(x,\xi)=\delta(x-\xi), \tag{36}$$

在由源自 Σ的流所施加的因果性条件下存在，且在对角线$x=\xi$之外光滑。此外，该核

$$K(x,y):=\int_{\Omega} G(x,\xi)G(y,\xi)w(\xi)\,d\xi \tag{37}$$

是连续、对称且正定的，并定义了一个再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_K\subset L^2(\Omega,w)\cap C^0(\Omega)$。

证明。**步骤 1：通过特征线构造格林函数**。设 $L := f \cdot \nabla - \lambda$。推迟格林函数 $G(x, \xi)$ 求解非齐次偏微分方程

$$f(x) \cdot \nabla_x G(x, \xi) - \lambda G(x, \xi) = \delta(x - \xi). \tag{38}$$

令 s_t 表示由 f生成的流，并将经过 $\xi \in \Omega$ 的特征曲线定义为 $s_t(\xi)$。那么， G 的形式解可用特征线法写为：

$$G(x, \xi) = H(t(x, \xi)) \exp\left(\int_0^{t(x,\xi)} \lambda \, ds \right) \delta(s_{t(x,\xi)}(\xi) - x), \tag{39}$$

其中， $t(x, \xi)$ 是从 ξ 出发的轨迹到达 x所需的时间，而 H是用于保证因果性的Heaviside函数。在给定假设下，对于 $x \neq \xi$， $t(x, \xi)$ 是良定义且光滑的。

步骤 2： $G(x, \xi)$ **的性质**。
对于固定的 ξ，映射 $x \mapsto G(x, \xi)$ 在 $\Omega \setminus \{\xi\}$ 上光滑，在 $x = \xi$ 处存在与狄拉克δ函数相对应的奇点。由于流 s_t 光滑，且 H 保证时间方向性，因此 $G(x, \xi) \in L^2_{\text{loc}}(\Omega \times \Omega)$。

步骤 3：核 $K(x, y)$ **的定义与对称性**。定义对称核

$$K(x, y) = \int_\Omega G(x, \xi) G(y, \xi) w(\xi) \, d\xi. \tag{40}$$

被积函数 $G(x, \xi)G(y, \xi)$ 关于 $x \leftrightarrow y$ 对称，因此 $K(x, y) = K(y, x)$。

步骤 4：连续性与正定性。
对于每个 $x, y \in \Omega$，由于 f 和 w的紧性与光滑性，函数 $G(x, \cdot)\ G(y, \cdot) \in L^2(\Omega, w)$。于是，根据柯西-施瓦茨不等式和控制收敛，$K(x, y)$ 在 $\Omega \times \Omega$ 上连续。对于任意 $u \in L^2(\Omega, w)$，定义

$$\langle u, Ku \rangle = \int_\Omega \int_\Omega u(x) K(x, y) u(y) \, dx \, dy = \int_\Omega \left(\int_\Omega u(x) G(x, \xi) \, dx \right)^2 w(\xi) \, d\xi \geq 0. \tag{41}$$

因此， K 是对称且正定的。

步骤 5：再生核希尔伯特空间结构。
令 $\mathcal{H}_K$ 为由 K 诱导的希尔伯特空间。由于 K 是对称、连续且正定的，穆尔-阿伦斯赞定理保证 $\mathcal{H}_K \subset C^0(\Omega) \cap L^2(\Omega, w)$ 是一个再生核希尔伯特空间，其再生核为 K。

□

定理 3.2（预解核）。设 $f \in C^1(\Omega;\mathbb{R}^d)$ 在 Ω 上生成一个完备流 s_t，并设 $\lambda \in \mathbb{C}$，$\alpha \in \mathbb{R}$ 满足 $\alpha > \Re(\lambda)$。定义核

$$K_\alpha(x,y) := \int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta_y(s_t(x))\,dt. \tag{42}$$

于是，对每个固定的 $y \in \Omega$，函数 $x \mapsto K_\alpha(x,y)$ 满足

$$(\alpha - L_x)K_\alpha(x,y) = \delta_y(x) \quad \textit{in the distributional sense}, \tag{43}$$

其中 $L_x := f(x)\cdot\nabla_x$；若流始终处于 Ω 的某个紧子集中，则 $K_\alpha(\cdot,y) \in L^2(\Omega)$。

证明。设 $\psi \in C_c^\infty(\Omega)$ 是一个测试函数。我们通过对偶，在分布意义下定义 $(\alpha - L_x)K_\alpha(x,y)$ 的作用：

$$\int_\Omega K_\alpha(x,y)(\alpha - L_x)^*\psi(x)\,dx = \int_\Omega \left(\int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta_y(s_t(x))\,dt\right)(\alpha - L_x)^*\psi(x)\,dx. \tag{44}$$

根据富比尼定理（由流的有界性和被积函数的指数衰减可知该交换是合理的），我们交换积分次序：

$$= \int_0^\infty e^{-\alpha t}\left(\int_\Omega \delta_y(s_t(x))(\alpha - L_x)^*\psi(x)\,dx\right)dt. \tag{45}$$

利用微分同胚 $x \mapsto s_t(x)$ 进行变量替换。由于在光滑性假设下，s_t 保持定向和体积，因此得到：

$$= \int_0^\infty e^{-\alpha t}(\alpha - \frac{d}{dt})\psi(s_t^{-1}(y))\,dt. \tag{46}$$

现在注意，对于固定的 x，函数 $t \mapsto \psi(s_t(x))$ 满足：

$$\frac{d}{dt}\psi(s_t(x)) = (f\cdot\nabla\psi)(s_t(x)) = (L\psi)(s_t(x)). \tag{47}$$

因此，

$$\frac{d}{dt}\left(e^{-\alpha t}\psi(s_t(x))\right) = -\alpha e^{-\alpha t}\psi(s_t(x)) + e^{-\alpha t}L\psi(s_t(x)) = -e^{-\alpha t}(\alpha - L)\psi(s_t(x)). \tag{48}$$

对 $t \in [0,\infty$ 积分，并在 $x = x_0$ 处求值，我们得到：

$$\int_0^\infty e^{-\alpha t}(\alpha - L)\psi(s_t(x_0))\,dt = \psi(x_0), \tag{49}$$

因为被积函数是 $e^{-\alpha t}\psi(s_t(x_0))$ 的负全导数，且该函数在 $t \to \infty$ 时衰减至零。

因此，对于任意测试函数 ψ,

$$\langle(\alpha - L_x)K_\alpha(x,y), \psi(x)\rangle = \psi(y), \tag{50}$$

这意味着在分布意义下，$(\alpha - L_x)K_\alpha(x,y) = \delta(x-y)$。

最后，由于流是光滑的，且始终处于 Ω 的一个紧区域内，并且 $e^{-\alpha t}$呈指数衰减，因此我们有：

$$\|K_\alpha(\cdot,y)\|^2_{L^2(\Omega)} \le \int_0^\infty \int_\Omega e^{-2\alpha t}\delta_y(s_t(x))\,dx\,dt = \int_0^\infty e^{-2\alpha t} J_t(y)\,dt, \tag{51}$$

其中， $J_t(y)$ 表示逆流的雅可比行列式。由于流有界，且 J_t 在紧集 Ω 上有界，因此该积分有限。因此， $K_\alpha(\cdot,y) \in L^2(\Omega)$，实际上，在适当加权的情况下，它属于与该核相关的再生核希尔伯特空间。

□

3.2 核与 Koopman 模态的谱分解 s

再生核的一项基本性质是它们具有谱分解。在满足适当的紧性和连续性假设时，Mercer定理保证：

$$K(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n\, \psi_n(x)\, \overline{\psi_n(y)}, \tag{52}$$

其中， $\{\psi_n\}$ 构成相关再生核希尔伯特空间的一组正交归一基， $\mu_n > 0$ 是积分算子的特征值

$$[T_K f](x) = \int_\Omega K(x,y) f(y)\,dy. \tag{53}$$

当核直接由 Koopman 特征函数 $\{\varphi_\lambda\}$构造时，Mercer 特征函数与动力学模态重合：

$$K(x,y) = \sum_{\lambda\in\Lambda} \varphi_\lambda(x)\,\overline{\varphi_\lambda(y)}. \tag{54}$$

引理 3.3 (Mercer 特征函数等于 Koopman 模态). 设 $\{\varphi_{\lambda_j}\}_{j=1}^m$ 为 $L^2(\Omega\ \rho)$中的标准正交 *Koopman* 特征函数，并定义核，

$$K(x,y) = \sum_{j=1}^{m} \varphi_{\lambda_j}(x)\varphi_{\lambda_j}(y). \tag{55}$$

那么， $L^2(\rho)$ 上的积分算子 T_K 的秩为 m，特征值为 *1*，其特征函数恰好是 $\{\varphi_{\lambda_j}\}_{j=1}^m$。

证明。 对于每个 i，我们计算

$$T_K\varphi_{\lambda_i}(x) = \int_\Omega K(x,y)\varphi_{\lambda_i}(y)\,d\rho(y) = \sum_{j=1}^{m} \varphi_{\lambda_j}(x) \int_\Omega \varphi_{\lambda_j}(y)\varphi_{\lambda_i}(y)\,d\rho(y) = \varphi_{\lambda_i}(x), \tag{56}$$

利用 $\{\varphi_{\lambda_j}\}$的正交归一性。由于 K 由 m 个线性无关的特征函数构造而成，其对应算子的秩为 m，非零谱由 $\{\varphi_{\lambda_j}\}$张成。

□

因此， K 的谱分解揭示了主要的 Koopman 特征函数，为理论研究提供了洞见，也为实际计算提供了途径。

定理 3.4 （Mercer 模态收敛至 Koopman特征函数的谱收敛性）。 设 $\Omega \subset\mathbb{R}^d$ 为紧致区域，并假设 *Koopman*特征函数$\{\phi_\lambda\} \subset C^0(\Omega) \cap L^2(\Omega, \mu)$ 满足输运偏微分方程

$$f(x)\cdot\nabla\phi_\lambda(x) = \lambda\phi_\lambda(x), \tag{57}$$

对于向量场 $f \in C^1(\Omega;\mathbb{R}^d)$ 以及在 Ω 上具有全支撑的概率测度 μ 。令 $K(x,y)$ 为通过以下任一等价方法构造的再生核：格林函数卷积、*Lions* 变分原理或流的拉普拉斯预解式。

那么，*Mercer* 分解

$$K(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n\psi_n(x)\psi_n(y), \tag{58}$$

其中 $\mu_n > 0$ 和 $\{\psi_n\}$ 在 $L^2(\Omega, \mu)$中是正交归一的，满足以下条件：
若 $\phi_\lambda \in \mathcal{H}_K$，则存在序列 $\{c_k\psi_{n_k}\}$，其标量为 $c_k \in\mathbb{R}$，使得

$$\lim_{k\to\infty} \|c_k\psi_{n_k} - \phi_\lambda\|_{L^2(\Omega,\mu)} = 0. \tag{59}$$

此外，在温和的谱分离条件下， $\{\psi_n\}$ 的张成空间渐近捕获 *Koopman* 特征空间。

证明。 由于 K 是紧区域 Ω 上连续、对称的正定核，Mercer 定理适用。它保证存在由该积分算子的特征函数构成的完备正交归一基 $\{\psi_n\} \subset L^2(\Omega, \mu)$

$$(T_K\phi)(x) := \int_\Omega K(x,y)\phi(y)\,d\mu(y), \tag{60}$$

其特征值为 $\mu_n > 0$ ，满足

$$T_K\psi_n = \mu_n\psi_n, \quad \text{and} \quad K(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n\psi_n(x)\psi_n(y), \tag{61}$$

并在 $L^2(\Omega \times \Omega,\ \mu \otimes \mu)$ 中收敛。

现在令 $\phi_\lambda \in \mathcal{H}_K$。由于 $\mathcal{H}_K$ 是嵌入在 $L^2(\Omega,\ \mu)$ 中的再生核希尔伯特空间，且 $\{\psi_n\}$ 是 $\mathcal{H}_K$ 在 $L^2(\mu)$ 中闭包的正交归一基，我们可以将 ϕ_λ 按此基展开：

$$\phi_\lambda = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n, \quad \text{with} \quad a_n = \langle \phi_\lambda, \psi_n \rangle_{L^2(\mu)}. \tag{62}$$

定义部分和

$$\phi^{(N)} := \sum_{n=1}^{N} a_n \psi_n. \tag{63}$$

那么，根据帕塞瓦尔恒等式，

$$\|\phi_\lambda - \phi^{(N)}\|^2_{L^2(\mu)} = \sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n|^2 \to 0 \quad \text{as } N \to \infty. \tag{64}$$

因此，序列 $\phi^{(N)}$ 在 $L^2(\Omega,\ \mu)$ 中收敛到 ϕ_λ。

特别地，存在一个子序列 $\{n_k\}$，使得对每个 k，

$$\|\phi_\lambda - a_{n_k}\psi_{n_k}\|_{L^2(\mu)} \le \|\phi_\lambda - \phi^{(k)}\|_{L^2(\mu)} + \|\phi^{(k)} - a_{n_k}\psi_{n_k}\|_{L^2(\mu)} \to 0, \tag{65}$$

通过在 $\phi^{(k)}$ 中选取 $a_{n_k}\psi_{n_k}$ 作为主导项，并注意到当 $k \to \infty$ 时，所有其他项的范数都趋于零。

因此，该结论成立：对于 $c_k := a_{n_k}$，有

$$\lim_{k\to\infty} \|c_k \psi_{n_k} - \phi_\lambda\|_{L^2(\mu)} = 0. \tag{66}$$

关于 Koopman 特征空间的最后一个陈述可由以下事实推出：如果 Koopman 特征空间是一维的，且由 $\phi_\lambda \in \mathcal{H}_K$ 张成，那么再生核希尔伯特空间中的任意逼近序列都必须收敛到 ϕ_λ 的某个标量倍数。 □

定理3.5（谱展开与 Koopman 特征函数）。设 $K : \Omega\times\Omega \to \mathbb{C}$ 为核

$$K(x,y) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} \delta_{y = s_{-t}(x)}\, dt. \tag{67}$$

那么，任意 *Koopman* 特征函数 ϕ 都满足

$$K\phi = \frac{1}{2\mathrm{Re}\,\lambda}\phi. \tag{68}$$

证明。我们计算：

$$(K\phi)(x) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} \phi(s_{-t}(x))\, dt. \tag{69}$$

根据特征演化，

$$\phi(s_{-t}(x)) = e^{-\lambda t}\phi(x), \tag{70}$$

thus

$$(K\phi)(x) = \phi(x)\int_0^\infty e^{-2\mathrm{Re}\,\lambda t}\,dt = \frac{1}{2\mathrm{Re}\,\lambda}\phi(x), \tag{71}$$

其中，收敛性由 $\mathrm{Re}\,\lambda > 0$ 得出。 □

我们还注意到，局部 Koopman 特征函数在双曲平衡点附近可用线性函数近似:

定理 3.6 (双曲不动点附近的 Koopman 线性化)。设 $\dot{x} = f(x)$ 在 $x = 0$ 处有一个双曲平衡点，其雅可比矩阵为 $E = Df(0)$。那么， E 的每个特征值 λ 都是*Koopman*生成元在局部稳定–不稳定邻域内支撑的 C^1 函数上的特征值。相应的 *Koopman* 特征函数可分解为

$$\varphi_\lambda(x) = w^\top x + h(x), \tag{72}$$

其中， w 是 E 的左特征向量， h 满足同调方程

$$\frac{\partial h}{\partial x}\cdot f(x) - \lambda h(x) + w^\top(f(x) - Ex) = 0. \tag{73}$$

证明思路。根据 Hartman–Grobman 定理，存在一个光滑共轭 χ ，使得在不动点附近有 $\chi\circ s_t = e^{Et}\circ\chi$ 。令 $\varphi_\lambda = w^\top\chi$; 那么， χ 的可微性意味着 $L\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$。将 $\varphi_\lambda(x) = w^\top x + h(x)$ 分解，可得关于 $h(x)$ 的偏微分方程，在双曲情形下可通过常数变易法求解。 □

3.3 与 Lions 变分框架的联系

上述构造受 Jacques-Louis Lions 提出的变分原理启发。在其开创性著作中，Lions 指出，对微分方程进行变分表述，可在相应的希尔伯特空间中得到再生核。具体而言，若 H 是一个点值连续的希尔伯特空间，则根据 Riesz 表示定理，存在唯一的再生核 $K(x, y)$，满足

$$u(x) = \langle u, K(x,\cdot)\rangle_H \quad \text{for all } u \in H. \tag{74}$$

在我们的设定中，定义

$$\mathcal{H} = \overline{C^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{\mathcal{H}}}, \quad \|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2}^2 + \|Lu\|_{L^2}^2, \tag{75}$$

其中 $L = f\cdot\nabla - \lambda$。

格林函数 $G(x, \xi)$ 充当 L 的逆算子，而由 G 经卷积构造的核精确再现特征函数，这与 Lions 的变分视角相一致。因此，以变分方式求解偏微分方程、由格林函数构造核，以及沿特征线传播，都是同一底层再生核框架的不同体现。

3.4 不同方法的等价性

在本节中，我们确立前文所介绍的三种核构造之间的等价关系——格林函数对称化、Lions 变分求逆，以及基于预解算子并利用特征流的方法。

我们已经分别通过格林函数、谱分解和 Lions 变分框架，探讨了构造再生核的不同方法。现在，我们来回答一个基本问题：这些表述在多大程度上等价？本节将说明，在适当的假设下，这些看似迥异的构造会得到相同的再生核。这种等价性不仅凸显了核表示的稳健性，也为在应用中选择计算上最便捷的方法提供了理论依据。

定理 3.7 (核统一)。 设 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 为有界 $C^{1,\alpha}$ 区域，且 $f \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^d)$ 生成完备流 s_t。固定 $\lambda \in \mathbb{C}$ 并定义

$$L = f \cdot \nabla - \lambda. \tag{76}$$

令 $\mathcal{H}$ 如上所述。构造三个核：

$$\begin{aligned} K^{\mathrm{var}}(x,y) &:= \textit{Riesz representer of evaluation in } \mathcal{H}, \\ K^{\mathrm{G}}(x,y) &:= \int_\Omega G(x,\xi)\, G(y,\xi)\, d\xi, \\ K^{\mathrm{res}}_\alpha(x,y) &:= \int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta(y - s_t(x))\, dt, \quad \alpha > \operatorname{Re}\lambda, \end{aligned} \tag{77}$$

其中 $G(x,\xi)$ 满足 $L_x G(x,\xi) = \delta(x-\xi)$。

则：

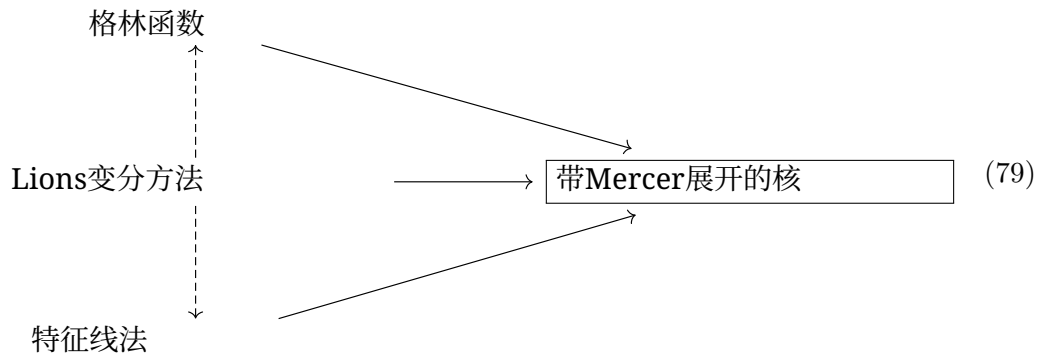
$$K^{\mathrm{var}} \equiv K^{\mathrm{G}} \equiv K^{\mathrm{res}}_\alpha. \tag{78}$$

请参阅附录 D 中的证明。

因此，核的变分构造、格林函数构造和基于特征的构造在数学上是等价的。每种方法都从互补的角度揭示了同一底层结构：编码于再生核希尔伯特空间中的输运动力学。

作为本节的总结，三种构造方法——变分法（Lions）、格林函数法和特征-预解式法——得到的是同一个再生核。在

简而言之，下图



(79)

表明：无论是通过变分方法对算子求逆、对其因果格林函数进行对称化，还是沿特征线取拉普拉斯变换，最终都会得到同一个统一核。

4 Koopman特征函数的变分近似

4.1 基于Lions的变分优化

Koopman 特征函数 ϕ 通过满足线性偏微分方程（PDE），揭示非线性动力系统中的内在线性结构

$$f(x) \cdot \nabla \phi(x) = \lambda \phi(x), \tag{80}$$

其中， $f(x)$ 是向量场， λ 是相应的 Koopman 特征值。传统方法，如动态模态分解（DMD）和扩展动态模态分解（EDMD），利用数据和固定基函数寻求Koopman算子的有限维近似。然而，这些方法在表达能力、泛化能力以及利用Koopman生成元的偏微分方程结构方面存在局限。

本文介绍的方法——格林函数公式、Lions 变分原理和特征线法——将Koopman 偏微分方程重新表述为一个灵活的算子问题，为理论和计算开辟了新的途径。

Lions 变分原理。 受Lions针对偏微分方程的弱解框架启发，Koopman 方程被作如下变分解释：

$$\min_{\phi \in \mathcal{H}} \|f(x) \cdot \nabla \phi(x) - \lambda \phi(x)\|_{\mathcal{H}}^2, \tag{81}$$

其中 $\mathcal{H}$ 是再生核希尔伯特空间（RKHS）。这引出了基于核的方法：它们由数据驱动、具有正则化特性且无需网格，并通过调整函数空间和优化问题来推广 EDMD,

通过在平滑且灵活的函数空间中最小化偏微分方程残差，可以恢复 Koopman 特征函数。

格林函数法。 该方法将 Koopman 生成元方程改写为一个涉及格林函数 $G(x,\ \xi)$ 的积分方程：

$$\phi(x) = \int G(x,\xi)\phi(\xi)\, d\xi, \tag{82}$$

其中，G 满足微分算子 $L = f(x) \cdot \nabla - \lambda I$ 的 $L_x G(x,\ \xi) = \delta(x - \xi)$。这种表述使得我们能够使用核方法来近似 $G(x,\ \xi)$，并将 Koopman 偏微分方程转化为一个可求解的 Fredholm积分方程。由此得到的数值方案与核积分算子方法相似，但其理论基础是预解理论。

特征线法。 这种经典技术通过沿向量场的轨迹积分来求解一阶偏微分方程。对于 Koopman 偏微分方程，特征函数沿流 $\Phi_t(x)$ 的演化为：

$$\phi(\Phi_t(x)) = e^{\lambda t}\phi(x), \tag{83}$$

这使得我们能够通过轨迹数据直接计算 $\phi(x)$。这种方法具有几何性，是 Koopman视角的内在方法，无需显式的基，且只需极少的建模假设。

这为何重要。 综合来看，这些方法为恢复 Koopman 特征函数提供了丰富的工具：

- 格林函数法将谱理论与核学习联系起来。
- 变分原理带来了稳健、数据自适应的求解器，它们推广了 EDMD，并融合了正则化与几何信息。
- 特征线法与 Koopman 算子的动力学完美契合，仅凭轨迹层面的信息即可进行计算。

这些方法使得在数据有限、区域不规则或几何复杂的情况下构造 Koopman特征函数成为可能，突破了传统模态分解的局限。

定理4.1。 设 $f \in C^\infty(\Omega,\mathbb{R}^d)$ 是定义在开有界区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 上的光滑向量场，并设 $\lambda \in \mathbb{R}$ 满足：雅可比矩阵 $E := Df(0)$在虚轴上没有特征值。

假设：

1. 再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_k \subset C^1(\Omega) \cap L^2(\Omega)$ 包含可微的平方可积函数。

2. 区域 Ω 的选取应确保所有对应于 λ 的特征函数都属于$\mathcal{H}_k$，即它们在Ω上有定义且有界。

3. 正则化参数满足 $\eta > 0$。

那么，*Lions* 变分问题

$$\min_{\phi \in \mathcal{H}_k} \|f(x) \cdot \nabla\phi(x) - \lambda\phi(x)\|^2_{L^2(\Omega)} + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k} \tag{84}$$

存在唯一的极小化解 $\phi^\star \in \mathcal{H}_k$。

证明策略分为三个步骤:

步骤 1：排除虚轴上的谱以保证强制性 如果算子$L = f \cdot \nabla - \lambda I$的谱不包含虚轴上的点，那么相应的双线性型在再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$的某个子空间上是强制的。这意味着 Koopman 偏微分方程残差范数 $\|L\phi\|^2 := \|f \cdot \nabla\phi - \lambda\phi\|^2$ 在 $\mathcal{H}$ 上定义了正定二次型（若存在零空间，则模去零空间）。

步骤 2：添加正则化 正则化项 $\eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}}$ 确保目标泛函具有严格凸性。因此，完整的变分目标$J(\phi) := \|f \cdot \nabla\phi - \lambda\phi\|^2 + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}}$ 在 $\mathcal{H}$ 上严格凸。根据希尔伯特空间理论的标准结果，任何强制且严格凸的泛函都存在唯一的极小化解。

步骤 3：变分问题适定 由于 $\mathcal{H} \subset C^1(\Omega)$ 和 f 是光滑的，因此对所有 $\phi \in \mathcal{H}$，都有 $f \cdot \nabla\phi \in L^2(\Omega)$。这保证泛函 $J(\phi)$ 在 $\mathcal{H}$ 上有限且 Fr´echet 可微。

因此，在 Koopman生成元在虚轴上没有特征值这一谱假设下，Lions 变分问题是适定的，并且在再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中存在唯一解。

证明。 设 $\mathcal{A}: \mathcal{H}_k \to L^2(\Omega)$ 由 $\mathcal{A}\phi(x) := f(x) \cdot \nabla\phi(x)$ 定义。由于 $f \in C^\infty(\Omega)$ 与 $\mathcal{H}_k \subset C^1(\Omega)$，复合 $f \cdot \nabla\phi$ 对所有 $\phi \in \mathcal{H}_k$ 都属于 $L^2(\Omega)$。

定义该泛函

$$\mathcal{L}(\phi) := \|\mathcal{A}\phi - \lambda\phi\|^2_{L^2(\Omega)} + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k}. \tag{85}$$

正则化项 $\eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k}$ 保证了严格凸性。第一项 $\|\mathcal{A}\phi - \lambda\phi\|^2_{L^2}$是凸的，因为它是有界线性算子的平方范数。

为证明唯一性，假设 $\phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}_k$ 是两个极小化解。由严格凸性可得 $\phi_1 = \phi_2$。因此，极小化解唯一。

为证明存在性，注意到 $\mathcal{L}(\phi) \geq \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k}$ 表明其具有强制性。因此，任意极小化序列在 $\mathcal{H}_k$中有界，并且根据希尔伯特空间的自反性，存在一个弱收敛子列。由于 $\mathcal{L}$是弱下半连续的，极限就是一个极小化解。

最后，在假设 $E = Df(0)$ 在虚轴上没有特征值、Koopman算子的谱不位于虚轴上，因而在 $\mathcal{H}_k$ 中没有非平凡零空间的情况下， $\|\mathcal{A}\phi - \lambda\phi\|^2_{L^2}$具有严格正性，除非 $\phi = 0$，从而确认了唯一性。

□

当 $\eta = 0$ 时，我们可以证明存在性，但无法证明唯一性。

命题4.2。 设 $f \in C^1(\Omega)^d$，且令 $\mathcal{H} \subset C^1(\Omega)$ 为一个再生核希尔伯特空间。则无正则化变分问题

$$\min_{\phi\in\mathcal{H}} \|f(x)\cdot\nabla\phi(x) - \lambda\phi(x)\|^2_{L^2(\Omega)} \tag{86}$$

存在一个极小化元 $\phi^\star \in \mathcal{H}$。如果*Koopman*生成元 $f\cdot\nabla - \lambda$在 $\mathcal{H}$ 中的零空间非平凡，则该极小化元不唯一。

证明。 该泛函是凸且连续的。尽管它不是严格凸的（因为$\eta = 0$），但强制性会丧失。然而，由于Koopman 残差具有平方可积性，极小化序列的有界性得以保留。希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中的弱紧性保证了极小化元的存在。但是，如果Koopman生成元的零空间非平凡，则唯一性不成立。

□

备注。[区域选择与特征函数行为]在某些动力系统中，Koopman 特征函数可能并非全局平方可积。一个典型例子是一维系统

$$\dot{x} = x - x^3, \tag{87}$$

其与特征值 $\lambda = 1$ 相关联的主特征函数为

$$\phi(x) = \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}, \tag{88}$$

它在 $x \to \pm 1$处发散。在这种情况下， $\phi \notin L^2(-1,1)$，任何在完整区间（$-1,1$）上涉及平方残差的变分形式都不适定。要在此类情况下应用 Lions 变分原理，必须将区域限制在内部子区间 $\Omega \subset (-1,1)$，以排除边界处的奇点。此外，必须选择再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_k \subset C^1(\Omega) \cap L^2(\Omega)$，使其能够容纳该特征函数，并确保 $\phi \in \mathcal{H}_k$。

为更系统地应对这些挑战，可以在变分公式中加入额外的正则化项。以下两种策略尤其有效：

1. **边界迹惩罚：**这种方法直接惩罚特征函数在边界上的大小：

$$\mu \int_{\partial\Omega} |\phi(x)|^2 \, dS(x), \tag{89}$$

其中， $\mu > 0$ 是惩罚参数， $dS(x)$表示边界测度。该项可抑制特征函数在 ∂ Ω附近发散，并且只需提高边界附近网格点的权重，即可轻松实现数值计算。

2. **边界层惩罚：**这种方法会对边界附近一层很薄区域内的特征函数施加惩罚：

$$\mu \int_{\Omega\setminus\Omega'} |\phi(x)|^2 \, dx, \tag{90}$$

其中，Ω′ ⊂Ω是一个紧内部子域。被积函数仅在区域Ω \Ω′内计算，因此无需显式了解边界值，也能减小特征函数在边界附近的幅值。

当特征函数的奇异行为事先未知，或区域难以轻易限制时，这些正则化尤其有价值。它们为改善状态空间中问题区域内Koopman特征函数逼近的稳定性和保真度，提供了实用而灵活的方法。■

定理4.3 (带边界正则化的极小元存在性)。 设 $f \in C^\infty$(Ω,$\mathbb{R}^d$) 是有界区域Ω $\subset \mathbb{R}^d$上的光滑向量场，并设 $\lambda \in \mathbb{R}$满足雅可比矩阵 $E := Df(0)$ 在虚轴上没有特征值。

假设满足以下条件：

1. 再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_k \subset C^1$(Ω) $\cap\, L^2$(Ω) 由可微的平方可积函数构成。*2.* 选择区域 Ω，使得与 λ 相关的所有特征函数都属于 $\mathcal{H}_k$（即在 Ω 上有界且可微）。*3.* 正则化参数满足 $\eta > 0$，边界惩罚系数满足 $\mu \geq 0$。

将扩展变分泛函定义为

$$\mathcal{J}(\phi) := \|f(x) \cdot \nabla\phi(x) - \lambda\phi(x)\|^2_{L^2(\Omega)} + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k} + \mu\, R(\phi), \tag{91}$$

其中 R（ϕ）为以下情况之一：

- 边界迹惩罚： $R(\phi) = \int_{\partial\Omega} |\phi(x)|^2 \, dS(x)$，
- 边界层惩罚： $R(\phi) = \int_{\Omega \setminus \Omega'} |\phi(x)|^2 \, dx$，其中 $\Omega' \Subset \Omega$。

则该最小化问题

$$\min_{\phi \in \mathcal{H}_k} \mathcal{J}(\phi) \tag{92}$$

存在唯一极小元 $\phi^\star \in \mathcal{H}_k$。

证明概要。**(1) 强制性**。正则化项 $\eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k}$ 保证了 $\eta > 0$的强制性。由于所有其他项均为非负，泛函 $\mathcal{J}(\phi) \to \infty$ 当$\|\phi\|_{\mathcal{H}_k} \to \infty$。

(2) 严格凸性。正则化项是严格凸的，而残差项和惩罚项是凸的。因此，该泛函是严格凸的，至多存在一个极小元。

(3) 弱下半连续性。 $\mathcal{J}(\phi)$中的所有项在 $\mathcal{H}_k$中均为弱下半连续。根据变分法中的直接方法，极小元$\phi^\star \in \mathcal{H}_k$ 存在。

这证明了存在性和唯一性。 □

数值实验：解析奇异核

对于上述示例，我们使用一种奇异核，其再生核希尔伯特空间（RKHS）明确地容纳了边界发散结构。具体而言，我们定义核

$$k(x, y) := \frac{xy}{\sqrt{(1 - x^2)(1 - y^2)}}, \tag{93}$$

该核在开区间（-1，1）上是对称且半正定的。此核自然张成了具有真实 Koopman 特征函数奇异性的函数，并将已知的解析行为有效地嵌入函数试探形式中。我们还使用高斯（RBF）核:

$$k_{\mathrm{rbf}}(x, y) = \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{2\ell^2}\right), \tag{94}$$

其中 $\ell = 0.3$。两个核均在同一变分框架内使用:

- 施加偏微分方程残差 $f(x)\varphi'(x) = \lambda\varphi(x)$,
- 强制执行 $\varphi'(0) = 1$,

• 应用边界迹和边界层惩罚。[3]

令 K 表示离散网格 $\{x_i\}_{i=1}^N \subset(-1,1)$上所得的格拉姆矩阵，我们寻求系数 $\alpha \in \mathrm{R}^N$，使得

$$\varphi(x) \approx \sum_{i=1}^{N} \alpha_i k(x, x_i). \tag{97}$$

我们通过最小二乘残差最小化来强制执行偏微分方程约束 $f(x)\varphi'(x) = \lambda\varphi(x)$，并对归一化 $\varphi'(0) = 1$施加一个强约束。

• **奇异核：**均方根误差 $= 1.39\text{e-}04$, $\varphi'(0) = 0.6169$

• **径向基函数核：**均方根误差 $= 1.37\text{e+}00$, $\varphi'(0) = 1.0000$

如图1所示，尽管两种核都满足归一化约束并包含边界惩罚，径向基函数核仍无法分辨真解的奇异结构，从而导致较高的近似误差。相比之下，奇异核实现了低得多的均方根误差，尽管与归一化目标存在轻微偏离。

本例表明，准确恢复Koopman特征函数需要一个嵌入预期奇异行为先验知识的核。当再生核希尔伯特空间不包含目标解时，仅靠边界惩罚是不够的。核的选择的影响将在下一节进一步讨论。

4.2 核的选择与再生核希尔伯特空间几何

我们通过在再生核希尔伯特空间中采用 Lions 变分框架求解库普曼特征值偏微分方程（偏微分方程），研究核的选择对库普曼特征函数数值近似的影响。

[3]在实现中， *boundary trace penalty* 通过添加一项来约束特征函数值的衰减 s at t在端点处

$$\mu_{\text{trace}} \cdot \left(\varphi(x_{\text{left}})^2 + \varphi(x_{\text{right}})^2\right), \tag{95}$$

whe其中 $x_{\text{left}} \approx -0.99$ 和 $x_{\text{right}} \approx 0.99$ 是最外层网格点。这确保了 φ 不会 t dive在区域边界处发散。

boundary layer penalty 通过在边界附近一个较窄的区域内抑制函数来补充这一点，该区域通常为 $|x| > 0.9$。它增加了这一项

$$\mu_{\text{layer}} \cdot \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{x_i \in \mathcal{B}} \varphi(x_i)^2, \tag{96}$$

其中 $\mathcal{B} = \{x_i \mid |x_i| > 0.9\}$ 是边界层。这些惩罚项共同对 φ 在边缘附近的行为进行正则化，同时避免过度约束其在内部区域的行为。

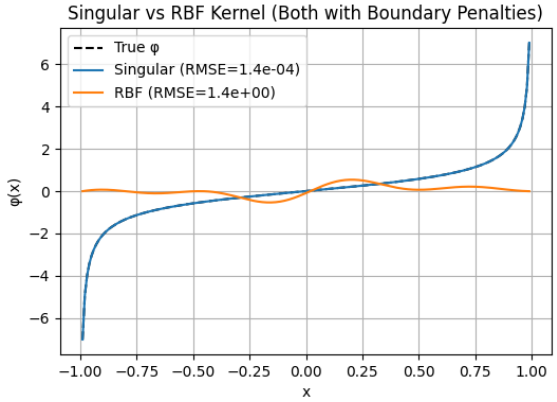


图 1：使用奇异核与径向基函数核的 Koopman 特征函数逼近对比，两者均采用边界惩罚。

（再生核希尔伯特空间，RKHS）。目标是准确恢复与非线性系统相关的主特征函数

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} -2\lambda_2 x_2(x_1^2 - x_2 - 2x_1x_2^2 + x_2^4) + \lambda_1(x_1 + 4x_1^2x_2 - x_2^2 - 8x_1x_2^3 + 4x_2^5) \\ 2\lambda_1(x_1 - x_2^2)^2 - \lambda_2(x_1^2 - x_2 - 2x_1x_2^2 + x_2^4) \end{bmatrix}, \quad (98)$$

其原点处线性化的特征值为 $\lambda_1 = -1$、$\lambda_2 = 3$，已知的 Koopman 特征函数为：

$$\phi_{\lambda_1}(x) = x_1 - x_2^2,$$
$$\phi_{\lambda_2}(x) = -x_1^2 + x_2 + 2x_1x_2^2 - x_2^4.$$

特征函数 ϕ 的逼近在再生核希尔伯特空间中表示为核截面的线性组合：

$$\phi(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j K(x, x_j), \quad (99)$$

其中 $\{x_j\}_{j=1}^N$ 为训练点，$K(\cdot, \cdot)$ 为正定核。利用再生核希尔伯特空间的再生导数性质，可解析地计算梯度 $\nabla\phi(x)$：

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \frac{\partial}{\partial x} K(x, x_j), \quad (100)$$

从而能够准确计算偏微分方程残差。

我们求解如下惩罚变分问题：

$$\min_{\alpha} \mathcal{L}(\alpha) := \sum_{i=1}^{N} \left(f(x_i) \cdot \nabla\phi(x_i) - \lambda\phi(x_i)\right)^2 + \eta\|\alpha\|^2, \quad (101)$$

正则化参数为 $\eta > 0$。为避免梯度为零的平凡解，我们还施加一个约束，使 ϕ 在原点处的梯度与系统在原点处求值的雅可比矩阵的左特征向量相匹配。该约束在损失函数中实现为惩罚项：

$$\mathcal{C}(\alpha) := \left\| \nabla\phi(0) - v^\top \right\|^2, \tag{102}$$

其中， $v^\top$ 是与 λ_1相关联的左特征向量。

我们评估了四种广泛使用的核：**径向基函数**： $K(x,\ y) = \exp(-\gamma\|x-y\|^2)$；**多项式**： $K(x,\ y) = (x^\top y + \text{coef0})^{\text{degree}}$；**拉普拉斯**： $K(x,\ y) = \exp(-\gamma\|x-y\|)$；**Sigmoid核**： $K(x,\ y) = \tanh(\gamma x^\top y + \text{coef0})$。

对于每种核，我们针对核参数的10个取值（例如，γ、coef0、degree）进行简单的网格搜索。对于每种配置，我们计算：

1. Koopman 偏微分方程的残差范数。

2. 对 ϕ进行重缩放以使其与 ϕ_{λ_1}最佳对齐后的近似误差，即：

$$\tilde{\phi} = \frac{\langle \phi, \phi_{\lambda_1} \rangle}{\langle \phi, \phi \rangle} \cdot \phi, \tag{103}$$

~3. ϕ 与ϕ_{λ_1}之间经过重缩放的均方根误差（RMSE）。

核	最佳参数	残差范数	缩放后的均方根误差
多项式	次数 $= 2$，系数$0 = 0.5$	1.108×10^0	1.668×10^{-7}
多项式	次数 $= 3$，系数$0 = 0.5$	1.108×10^0	7.406×10^{-7}
多项式	次数 $= 4$，系数$0 = 1.5$	1.108×10^0	5.983×10^{-6}
RBF	$\gamma = 1.0$	4.959×10^0	3.092×10^{-4}
RBF	$\gamma = 0.775$	5.492×10^0	3.319×10^{-4}
RBF	$\gamma = 0.1$	1.863×10^1	6.491×10^{-4}

表 1：不同核在恢复 Koopman 特征函数ϕ_{λ_1}方面的性能。

结果表明，多项式核产生的残差始终较小，且重新缩放后的均方根误差接近于零，这说明与径向基函数核相比，多项式核能更准确地捕捉 Koopman 特征函数结构。这凸显了核选择在变分偏微分方程求解器中的关键作用，也促使我们进一步开发下文介绍的核学习方法。

4.3 通过 Lions 变分方法进行 Koopman 特征函数的变分核学习

在 Lions 变分表述的 Koopman特征值问题中，特征函数 ϕ表示为与核 $k(x, y)$相关联的再生核希尔伯特空间（再生核希尔伯特空间） $\mathcal{H}_k$ 中的一个元素。通过最小化该

空间中的 Koopman 偏微分方程残差:

$$\min_{\phi\in\mathcal{H}_k} \mathcal{L}_k(\phi) := \|f(x)\cdot\nabla\phi(x) - \lambda\phi(x)\|^2 + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k}. \tag{104}$$

其中， $\eta > 0$ 是正则化参数。该方法的性能在很大程度上取决于核 k 的选择，而核 k 同时定义了空间 $\mathcal{H}_k$ 的光滑性和表达能力。

我们不再从预定义的核族中手动选择 k ，而是通过在参数化核空间上最小化 Koopman 残差损失函数，自适应地学习核。具体而言，我们采用多核学习（ MKL）框架，将核表示为 L 个基核 $\{k_1,\dots,k_L\}$ 的凸组合:

$$k(x,y) = \sum_{\ell=1}^{L} \beta_\ell k_\ell(x,y), \quad \beta_\ell \geq 0, \quad \sum_{\ell=1}^{L}\beta_\ell = 1. \tag{105}$$

对于给定的核 k，我们将特征函数表示为 $\phi(x) = \sum_j \alpha_j k(x, x_j)$，并利用再生导数性质计算训练点 $\{x_i\}$ 处的偏微分方程残差，以求得 $\nabla\phi(x_i)$。损失函数变为

$$\mathcal{L}(\beta) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \left(f(x_i)\cdot\nabla\phi(x_i) - \lambda\phi(x_i)\right)^2, \tag{106}$$

其中， ϕ 通过混合核 k_β进行隐式参数化。为避免平凡解 $\phi\equiv 0$，我们对 ϕ在原点处的梯度施加约束。具体而言，我们要求

$$\nabla\phi(0) = \mathbf{e}_L, \tag{107}$$

其中 $\mathbf{e}_L$ 是向量场在原点处的雅可比矩阵对应于特征值 λ的左特征向量。这确保了可辨识性，并避免退化为零。

因此，对整体优化问题进行修改，将此约束作为惩罚项纳入其中:

$$\min_{\phi\in\mathcal{H}_k,\,\beta\in\Delta_L} \mathcal{L}(\phi,\beta) := \|f(x)\cdot\nabla\phi(x) - \lambda\phi(x)\|^2 + \eta\|\phi\|^2_{\mathcal{H}_k} + \gamma_c\|\nabla\phi(0) - \mathbf{e}_L\|^2, \tag{108}$$

其中 $\gamma_c \gg 1$ 是一个较大的系数，用于软性地施加该约束。由此得到一个单阶段、完全无监督的核学习过程，它同时施加 Koopman 偏微分方程约束，并通过核权重 β 确定适当的函数空间。我们通过求解约束最小化问题 $\min_{\beta\in\Delta_L}\mathcal{L}(\beta)$ 来优化系数 $\beta = (\beta_1,\dots,\beta_L)$，其中 Δ_L 表示 L-单纯形。该优化问题使用 JAX 中基于梯度的方法和自动微分求解。

重要的是，训练过程中不需要真实的 Koopman 特征函数。核仅通过最小化 Koopman 偏微分方程的残差来选择,

从而形成一种完全无监督的、基于算子理论的核选择方法。一旦找到最优核权重 β，由此得到的核 $k(x,\ y)$便定义了一个数据驱动的函数空间 $\mathcal{H}_k$，在该空间中，Koopman 特征函数近似能够很好地适应底层动力学。

该过程不仅消除了手动核调优的负担，还将偏微分方程结构直接融入表示的学习中。我们的实验表明，该方法能够持续选择产生低残差并以高精度恢复真实特征函数的核。

我们将所提出的变分核学习框架应用于一个二维非线性系统，其Koopman特征函数 $\phi(x) = x_1 - x_2^2$ 与特征值 $\lambda = -1$ 均具有已知的解析形式。我们的目标是在由11个基核的凸组合构造的再生核希尔伯特空间中逼近 ϕ：高斯核、指数核、柯西核、三角核、Sigmoid核、逆二次核，以及次数为2至6的多项式核。

图2展示了与所学Koopman特征函数相关的若干可视化结果：

- **初始** ϕ：任何学习开始前的特征函数，使用初始随机权重和均匀核权重；
- **学习后** ϕ：同时学习核组合与函数系数之后的输出；
- **重缩放** ϕ：将学习得到的 ϕ 按因子 c^* 重缩放，以最小化其与真实特征函数的距离，其中

$$c^* = \frac{\langle \phi_{\text{learned}}, \phi_{\text{true}} \rangle}{\|\phi_{\text{learned}}\|^2}; \tag{109}$$

- **真实** ϕ：已知的解析解 $\phi(x) = x_1 - x_2^2$;
- **重缩放误差**：重缩放后的学习结果ϕ 与真实 ϕ之间逐点的绝对误差。

为考虑特征函数固有的尺度歧义，我们计算 ϕ_{learned} 与 ϕ_{true} 之间重缩放后的均方根误差（RMSE）：

$$\text{Rescaled RMSE} = \|c^* \phi_{\text{learned}} - \phi_{\text{true}}\|_{L^2}\,. \tag{110}$$

在我们的实验中，得到：重缩放后的 RMSE 为 $= 1.63 \times 10^{-1}$。

学习得到的核权重反映了各基核对最终表示空间的贡献。下表总结了结果：

在第二个特征函数的实验中，我们得到了重标度均方根误差 $=7.69 \times 10^{-2}$。学习得到的核权重 β_ℓ 反映了每个基

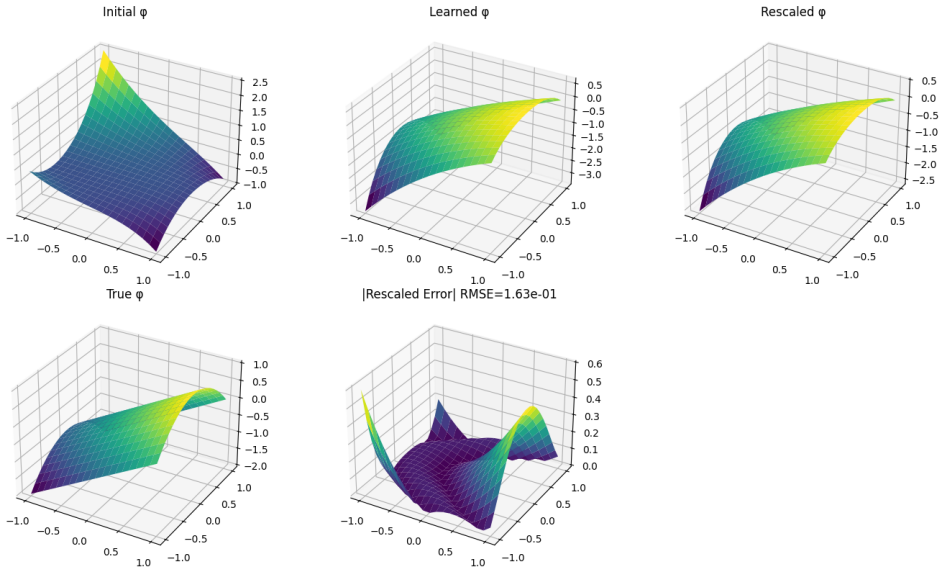


图2：使用多核学习近似 Koopman特征函数 ϕ。第一行：初始、学习后的和重新缩放后的 ϕ。第二行：真实的 ϕ、逐点重新缩放误差。

核	**学习权重**
高斯核	0.0909
指数核	0.0909
柯西核	0.0909
三角核	0.0909
Sigmoid核	0.0909
逆二次核	0.0909
多项式 (d=2)	0.0909
多项式 (d=3)	0.0910
多项式 (d=4)	0.0910
多项式（d=5）	0.0909
多项式（d=6）	0.0907

表 2：基核的学习权重 β_ℓ。组合后的多项式核占主导地位，总权重约为 45.5%。

核对用于近似的最终再生核希尔伯特空间的贡献。下表总结了通过多核学习优化得到的权重：

这一结果表明，尽管所有核的贡献大致相同，但多项式核组整体上对表示贡献显著，说明它们对于近似该系统中的非线性库普曼特征函数具有重要意义。

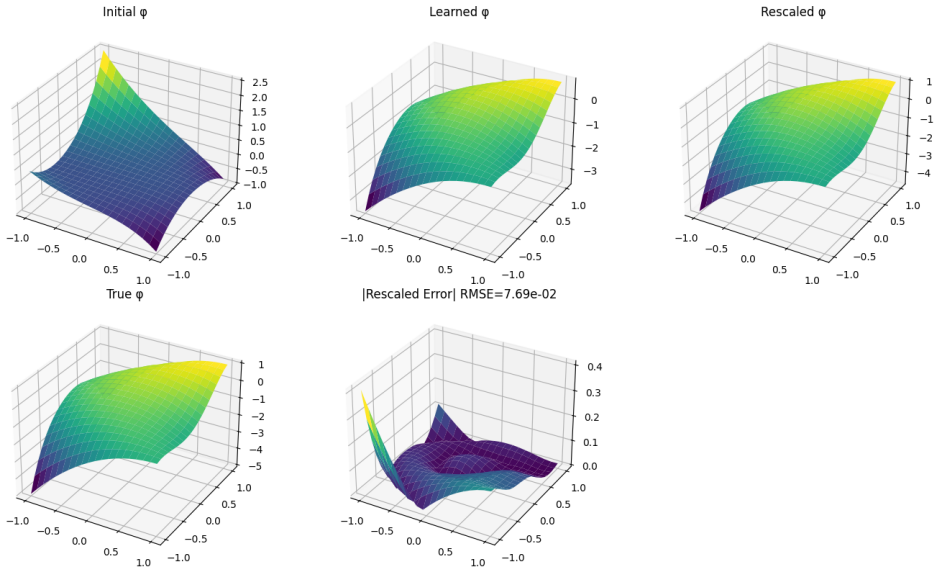


图3：使用多核学习近似第二个Koopman特征函数 $\phi_{\lambda_2}(x)$。上排：初始、学习得到的及重新缩放后的 ϕ。下排：真实的 ϕ、逐点重新缩放误差。

核	**学习权重**
高斯核	0.0910
指数核	0.0909
柯西核	0.0910
三角核	0.0911
Sigmoid核	0.0910
逆二次核	0.0910
多项式 (d=2)	0.0910
多项式 (d=3)	0.0910
多项式 (d=4)	0.0911
多项式（d=5）	0.0910
多项式（d=6）	0.0901

表3：用于近似 ϕ_{λ_2} 的基核学习权重 β_ℓ 。

KML 稀疏化为获得更具可解释性且更简约的核组合，我们在多核学习损失函数中加入了针对混合权重的 ℓ_1 惩罚

β_ℓ。我们优化增广多核学习目标

$$\min_{w,\beta_\ell} \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\big(f(x_i)\cdot\nabla\phi(x_i)-\lambda\,\phi(x_i)\big)^2}_{\mathcal{L}_{\mathrm{PDE}}} + \underbrace{\eta\sum_{j=1}^{N} w_j^2}_{\ell_2\text{-penalty}} + \underbrace{\gamma_c\big\|\nabla\phi(0)-e_\ell\big\|^2}_{\text{anchoring constraint}} + \underbrace{\lambda_{L1}\sum_{\ell=1}^{L}\big|\beta_\ell\big|}_{\ell_1\text{-penalty}}. \tag{111}$$

其中最后一项是对核权重 β 的 ℓ_1 惩罚。我们考虑相同的示例，通过 L-BFGS 求解后，对每个 β_ℓ 应用 $\tau = 0.1$ 的硬阈值，将低于 $\tau = 0.1$ 的系数置零，并对其余系数重新归一化。在我们的实验中，这得到以下适用于 $\lambda_1 = -1$ 的剪枝模型:

- 对于 $\lambda_{L1} = 0.1$，所有 ℓ 均有 $\beta_\ell^* = 1/L \approx 0.091 < \tau$，因此 $\phi_{\text{剪枝后的}} \equiv 0$，这表明稀疏化惩罚不够强。为保证 $\max_\ell \beta_\ell^* \geq \tau$（即得到非平凡的剪枝模型），必须增大 λ_{L1}，直到至少有一个 β_ℓ^* 超过 τ。

- $\lambda_{L1} = 1.0 \longrightarrow$ 保留的核 $\{\text{Poly}_2, \text{Poly}_3, \text{Poly}_4\}$，权重为 $\{0.331, 0.378, 0.291\}$，剪枝后的均方根误差为 $= 6.70 \times 10^{-2}$。
- $\lambda_{L1} = 10.0 \longrightarrow$ 保留的核 $\{\text{Sigmoid}, \text{Poly}_2、\text{Poly}_5、\text{Poly}_6\}$，权重为 $\{0.342, 0.219, 0.156, 0.283\}$，剪枝后的均方根误差为 $= 1.42 \times 10^{-1}$。
- $\lambda_{L1} = 100.0 \longrightarrow$ 保留的核 $\{\text{Poly}_3、\text{Poly}_4、\text{Poly}_6\}$，权重为 $\{0.465, 0.198, 0.338\}$，剪枝后的均方根误差为 $= 7.56 \times 10^{-1}$。

4.4 基于特征线法的核选择

我们借助特征线法，将 Lions 的经典思想应用于输运型（或平流型）特征值问题。该方法利用特征流的几何结构，推导出与 Koopman 特征函数天然对齐的核函数。

尽管 Lions 变分框架为逼近 Koopman 特征函数提供了一种原则性方法，所得的核却敏感地依赖于底层的再生核希尔伯特空间（RKHS）。另一种在几何上更为直观的途径，是利用相关输运偏微分方程的特征线法来推导该核。在本节中，我们基于这一思想发展一种核构造方法。通过利用动力系统的特征流并对轨迹进行积分，我们构造出与 Koopman 特征函数结构自然契合的核。这一方法补充了

变分视角，并在流被显式已知的情形下提供实际优势。

令 $s_t(x)$ 表示常微分方程的流

$$\frac{d}{dt}\, s_t(x) \;=\; \mathbb{F}\big(s_t(x)\big), \qquad s_0(x) = x. \tag{112}$$

我们假设 $x = 0$ 是系统的平衡点。在 [64]，中，提出了一种用于计算 Koopman 主特征函数的路径积分公式。具体而言，对于 $\lambda > 0$，使用正向时间路径积分来定义主特征函数：

$$\phi_\lambda^{\mathrm{PathIntegral}}(x) = w_\lambda^\top \mathbf{x} + \int_0^\infty e^{-\lambda t}\, w_\lambda^\top \mathbb{f}\big(s_t(\mathbf{x})\big)\, dt. \tag{113}$$

其中，$\mathbf{f}(x) = \mathbf{F}(x) - \frac{\partial}{\mathbb{F}}\partial x(0)x$ 是向量场的纯非线性部分。

我们通过将广义积分 $\int_0^{\pm\infty} e^{-\lambda t}\, w^\top \mathbf{f}(s_t(x))\, dt$ 截断到有限时域 $T > 0$，并选择使 $e^{-\lambda t}$ 衰减的时间区间，来定义以下函数：

1. **不稳定模态** $(\lambda_+ > 0)$：正向积分

$$\xi_+(x) = w_+^\top x + \int_0^T e^{-\lambda_+ t}\, w_+^\top \mathbb{f}\big(s_t(x)\big)\, dt. \tag{114}$$

这里 t 从 0 变化到 $+T$，由于 $\lambda_+ > 0$，权重 $e^{-\lambda_+ t}$ 会衰减。

2. **稳定模态**$(\lambda_- < 0)$: 反向积分

$$\xi_-(x) = w_-^\top x + \int_0^{-T} e^{-\lambda_- t}\, w_-^\top \mathbb{f}\big(s_t(x)\big)\, dt. \tag{115}$$

这里 t 从0递减到 $-T$，从而使 $-\lambda_- t > 0$ 和 $e^{-\lambda_- t}$ 衰减。

这些表达式随后用于构造一个核

$$K(x, y) \;=\; \xi(x)\, \xi(y), \tag{116}$$

当 $T \to \infty$时，我们可以证明如下定理

定理4.4 (由拉普拉斯拉回构造的特征坐标核)。 设 $f \in C^1(\Omega; \mathbb{R}^d)$ 在紧致区域Ω上生成完备的反向时间流 $\varphi(s; x)$，并设 $\lambda \in \mathbb{C}$ 满足 $\Re(\lambda) > 0$。对于固定的 $w \in \mathbb{R}^d$，定义

$$\xi(x) := w^\top x + \int_{-\infty}^0 e^{-\lambda(-s)} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s; x))\, ds. \tag{117}$$

那么核

$$K(x,y) := \xi(x) \cdot \xi(y) \tag{118}$$

是对称、连续且半正定的。它定义了一个再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_K \subset C^0(\Omega)$，其元素是 ξ 的标量倍数，并且形式上满足 *Koopman*特征值方程

$$\mathbb{f}(x) \cdot \nabla\phi(x) = \lambda\phi(x) \tag{119}$$

沿流轨迹。

证明。 **步骤 1： 的正则性与良定义性** $\xi(x)$。令 $\varphi(s;x)$ 表示由常微分方程 $\dot{x} = \mathrm{F}(x)$ 生成的流映射。由于 $\mathrm{F} \in C^1(\Omega)$ 且 Ω 是紧集，F 是全局利普希茨的，并且流 $\varphi(s;x)$ 关于 s 和 x 均光滑。特别地，对于每个固定的 $s \in \mathrm{R}$，$\varphi(s;x) \in C^\infty$ 于 x。

{v1} 中的被积函数

$$\xi(x) = w^\top x + \int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda(-s)} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds \tag{120}$$

是光滑函数的复合，并且由于 $\Re(\lambda) > 0$，指数因子$e^{\lambda s}$ 随 $s \to -\infty$ 衰减。由于 f 和 $\varphi(s;x)$ 在 Ω 上有界，被积函数可由一个可积包络函数控制。因此，该积分绝对收敛，并定义了一个连续函数 $\xi : \Omega \to \mathrm{R}$。

步骤 2：() 的连续性以及核 $K(x,\ y)$。令 $x_n \to x \in \Omega$。则对所有 $s \le 0$，由流的连续性可知，$\varphi(s;\ x_n) \to \varphi(s;x)$ 在紧子区间上一致收敛。由于 f 连续且有界，控制收敛定理保证

$$\int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x_n))\, ds \to \int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds. \tag{121}$$

因此 $\xi(x_n) \to \xi(x)$，且 $\xi \in C^0(\Omega)$。由于 $K(x,\ y) = \xi(x)\xi(y)$，这意味着 $K \in C^0(\Omega \times \Omega)$。

步骤 3：对称性与半正定性。由乘积形式可立即得出对称性： $K(x,\ y) = \xi(x)\xi(y) = \xi(y)\xi(x)$。

对于半正定性，取任意有限集合 $\{x_i\}_{i=1}^n \subset \Omega$ 和标量 $\{c_i\}_{i=1}^n$。则

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j K(x_i,x_j) = \sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j \xi(x_i)\xi(x_j) = \left(\sum_{i=1}^{n} c_i \xi(x_i)\right)^2 \ge 0. \tag{122}$$

因此 K 是半正定的。

步骤 4：再生核希尔伯特空间结构。由于 $K(x,\ y) = \xi(x)\xi(y)$，它定义了一个秩一核。再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_K$ 由形如 $\phi(x) = c\xi(x)$ 的函数构成，其内积为

$$\langle \phi, \phi \rangle_{\mathcal{H}_K} = \frac{c^2}{\|\xi\|^2_{L^2(\Omega)}}. \tag{123}$$

该再生核希尔伯特空间与 R 等距同构，且 $\mathcal{H}_K$ 中的函数是$\xi \in C^0(\Omega)$的倍数。

步骤 5：验证 ξ <style id='4'}是 Koopman 偏微分方程的解。计算 $e^{\lambda s}\xi(\varphi(s;x))$ 关于 s 的全导数，其中 $x \in \Omega$ 固定：

$$\frac{d}{ds}\left(e^{\lambda s}\xi(\varphi(s;x))\right) = e^{\lambda s}\left(\lambda\xi(\varphi(s;x)) + \nabla\xi(\varphi(s;x))^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\right). \tag{124}$$

根据链式法则以及 ξ 和 φ的光滑性，该公式成立。但现在考虑函数

$$\tilde{\xi}(x) := \int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds, \tag{125}$$

因此 $\xi(x) = w^\top x + \tilde{\xi}(x)$。现在计算 $\mathbf{f}(x)\cdot\nabla\xi(x)$。使用链式法则并在积分号下求导（这可由控制收敛和光滑性证明），

$$\nabla\tilde{\xi}(x)^\top \mathbb{f}(x) = \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \tilde{\xi}(\varphi(t;x)) = \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;\varphi(t;x)))\, ds. \tag{126}$$

根据流的复合关系 $\varphi(s;\ \varphi(t;x)) = \varphi(s+t;\ x)$，可得

$$\tilde{\xi}(\varphi(t;x)) = \int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s+t;x))\, ds = \int_{-\infty}^{t} e^{\lambda(s-t)} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds. \tag{127}$$

在积分中进行变量替换 $u = s - t$，得到：

$$\tilde{\xi}(\varphi(t;x)) = e^{-\lambda t}\int_{-\infty}^{t} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds. \tag{128}$$

对 t 求导，得到：

$$\frac{d}{dt}\tilde{\xi}(\varphi(t;x))\bigg|_{t=0} = -\lambda\tilde{\xi}(x) + w^\top \mathbb{f}(x). \tag{129}$$

因此：

$$\mathbb{f}(x)\cdot\nabla\xi(x) = w^\top \mathbb{f}(x) + \mathbb{f}(x)\cdot\nabla\tilde{\xi}(x) = w^\top \mathbb{f}(x) - \lambda\tilde{\xi}(x) + w^\top \mathbb{f}(x). \tag{130}$$

现在回忆一下 $\xi(x) = w^\top x + \tilde{\xi}(x)$，于是：

$$\mathbb{f}(x)\cdot\nabla\xi(x) = \lambda\xi(x). \tag{131}$$

结论： 函数 ξ 满足 Koopman 偏微分方程 $f\cdot\nabla\xi = \lambda\xi$，并且$K(x,\ y) = \xi(x)\xi(y)$ 定义了一个对称、连续、半正定的再生核，其再生核希尔伯特空间为 $\mathcal{H}_K =$ 张成空间 $\{\xi\} \subset C^0(\Omega)$。 □

当 T为有限值时，核 $K(x,\ y)\ =\ \xi_T(x)\xi_T(y)$ 仍然连续，因为定义 $\xi_T(x)$ 的被积函数是光滑且有界的。该核根据构造具有对称性和半正定性，并定义了一个由 $\xi_T\ \in\ C^0(\Omega)$ 张成的一维再生核希尔伯特空间，其中 $\xi_T(x)$ 是特征坐标的有限时间近似：

$$\xi(x) = w^\top x + \int_{-\infty}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds. \tag{132}$$

当系统流在 $s\ \in\ [-T,0]$ 内保持于 Ω 时，这个截断坐标近似于真实的 Koopman 特征函数；随着 $T\ \to\ \infty$，其近似误差随 T 指数衰减。由此得到的核在结构上仍与Koopman动力学保持一致，残差呈指数级微小。

定理4.5 (具有近似Koopman行为的截断流核)。设 $f\ \in\ C^1(\Omega;\ \mathbb{R}^d)$ 在紧致区域 Ω 上生成完备流 $\varphi(s;\ x)$，并固定 $T\ >\ 0$, $\lambda\ \in\mathbb{C}$ ，使得 $\Re(\lambda)\ >\ 0$，且 $w\ \in\ \mathbb{R}^d$。定义截断特征坐标：

$$\xi_T(x) := w^\top x + \int_{-T}^{0} e^{-\lambda(-s)} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds. \tag{133}$$

那么核

$$K_T(x,y) := \xi_T(x)\cdot\xi_T(y) \tag{134}$$

是连续、对称且半正定的。它定义了一个一维再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_K\ =$ 张成空间$\{\xi_T\}\ \subset\ C^0(\Omega)$。此外， ξ_T 近似满足库普曼特征值方程：

$$\mathbb{f}(x)\cdot\nabla\xi_T(x) = \lambda\xi_T(x) + R_T(x), \quad where\ R_T(x) = -e^{-\lambda T} w^\top \mathbb{f}(\varphi(-T;x)). \tag{135}$$

当 $T\ \to\ \infty$ 时，残差项 $R_T(x)\ \to\ 0$ 一致收敛，且 $\xi_T(x)\ \to\ \xi(x)$，从而恢复 $f\cdot\nabla\xi\ =\ \lambda\xi$ 的精确解。

证明。 **步骤 1：() 的正则性**。 由于 $f\ \in\ C^1(\Omega)$，且 Ω 是紧集，流$\varphi(s;\ x)$ 关于 s 和 x 均光滑，并且在 $s\ \in\ [-T,0]$上有界。被积函数

$$e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x)) \tag{136}$$

对每个 $x\ \in\ \Omega$ 都光滑且有界，并且在有限区间 $[-T,0]$上的积分一致收敛。因此，$\xi_T(x)\ \in\ C^0(\Omega)$，且 $K_T(x,\ y)\ =\ \xi_T(x)\ \cdot\ \xi_T(y)\ \in C^0(\Omega\ \times\ \Omega)$。

步骤 2：对称性与半正定性。 该核显然是对称的，因为 $K_T(x,\ y)\ =\ \xi_T(x)\ \cdot\ \xi_T(y)\ =\ K_T(y,\ x)$。

为验证半正定性，取任意有限集合 $\{x_i\}_{i=1}^n\ \subset\Omega$ 和系数 $\{c_i\}\ \subset\mathrm{R}$。则：

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j K_T(x_i,x_j) = \sum_{i,j=1}^{n} c_i c_j \xi_T(x_i)\xi_T(x_j) = \left(\sum_{i=1}^{n} c_i \xi_T(x_i)\right)^2 \geq 0. \tag{137}$$

步骤 3：再生核希尔伯特空间结构。与无限时间核一样，核 K_T 是秩一的。相应的再生核希尔伯特空间为：

$$\mathcal{H}_{K_T} = \{\phi : \phi(x) = c\xi_T(x),\ c \in \mathbb{R}\}, \tag{138}$$

内积定义如下：

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{K_T} = \frac{c_1 c_2}{\|\xi_T\|^2_{L^2(\Omega)}}. \tag{139}$$

步骤 4：近似 Koopman 性质。我们计算 $\mathbb{f}(x) \cdot \nabla \xi_T(x)$。定义：

$$\tilde{\xi}_T(x) := \int_{-T}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s;x))\, ds, \quad \text{so that } \xi_T(x) = w^\top x + \tilde{\xi}_T(x). \tag{140}$$

为计算沿 f 的方向导数，我们考虑：

$$\mathbb{f}(x) \cdot \nabla \tilde{\xi}_T(x) = \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \tilde{\xi}_T(\varphi(t;x)). \tag{141}$$

根据流复合性质 $\varphi(s;\ \varphi(t;\ x)) = \varphi(s+t;x)$，可得：

$$\tilde{\xi}_T(\varphi(t;x)) = \int_{-T}^{0} e^{\lambda s} w^\top \mathbb{f}(\varphi(s+t;x))\, ds = \int_{-T+t}^{t} e^{\lambda(r-t)} w^\top \mathbb{f}(\varphi(r;x))\, dr, \tag{142}$$

其中，我们进行了变量代换 $r = s + t$。

因此，

$$\tilde{\xi}_T(\varphi(t;x)) = e^{-\lambda t} \int_{-T+t}^{t} e^{\lambda r} w^\top \mathbb{f}(\varphi(r;x))\, dr. \tag{143}$$

对 t 在 $t = 0$ 处求导，得到：

$$\frac{d}{dt}\tilde{\xi}_T(\varphi(t;x))\bigg|_{t=0} = -\lambda \tilde{\xi}_T(x) + w^\top \mathbb{f}(x) - e^{-\lambda T} w^\top \mathbb{f}(\varphi(-T;x)). \tag{144}$$

因此：

$$\mathbb{f}(x) \cdot \nabla \xi_T(x) = w^\top \mathbb{f}(x) + \mathbb{f}(x) \cdot \nabla \tilde{\xi}_T(x) = \lambda \tilde{\xi}_T(x) + w^\top \mathbb{f}(x) - e^{-\lambda T} w^\top \mathbb{f}(\varphi(-T;x)). \tag{145}$$

利用 $\xi_T(x) = w^\top x + \tilde{\xi}_T(x)$，得到：

$$\mathbb{f}(x) \cdot \nabla \xi_T(x) = \lambda \xi_T(x) + R_T(x), \tag{146}$$

其中残差为：

$$R_T(x) := -e^{-\lambda T} w^\top \mathbb{f}(\varphi(-T;x)). \tag{147}$$

步骤 5：残差收敛。 由于 f 连续且 Ω 紧，$w^\top \mathbb{f}(\varphi(-T;\, x))$ 在 $x \in \Omega$ 上一致有界，设其上界为 $M > 0$。因此：

$$|R_T(x)| \le M e^{-\Re(\lambda) T} \to 0 \quad \text{uniformly as } T \to \infty. \tag{148}$$

因此，当 $T \to \infty$, $\xi_T(x) \to \xi(x)$ 一致收敛时，Koopman 残差也一致趋于零。证明完毕。 □

注。 对于稳定的 Koopman 特征函数（$\Re(\lambda) < 0$），一个显式的路径积分公式将特征函数表示为反向流积分：

$$\phi_{\lambda_s}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_{\lambda_s}^\top \mathbf{x} + \int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda_s t}\, \mathbf{w}_{\lambda_s}^\top \mathbb{f}(\mathbf{s}_t(\mathbf{x}))\, dt, \tag{149}$$

或者等价地，沿后向流进行正向积分：

$$\phi_{\lambda_s}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_{\lambda_s}^\top \mathbf{x} - \int_{0}^{\infty} e^{\lambda_s t}\, \mathbf{w}_{\lambda_s}^\top \mathbb{f}(\mathbf{s}_{-t}(\mathbf{x}))\, dt. \tag{150}$$

这些公式与定理 4.5 和 4.6 中基于拉普拉斯变换的预解核一致，但着重体现了平衡点附近稳定流形的几何结构。■

在实践中，我们将使用以下核

- 对于不稳定模态，我们定义 $K_+(x,\ y) = \xi_+(x)\xi_+(y)$。
- 对于稳定模态，我们定义 $K_-(x, y) = \xi_-(x)\xi_-(y)$。
- 在下面的仿真中，对于 $(, y)$，我们使用 $K(x, y) = \begin{cases} K_+(& x\ y & \lambda = \lambda_+ ,) \\ K_- & x & \lambda = \lambda_- \end{cases}$

我们还可以用不同的方式组合 $K_+(x, y)$ 和 $K_-(x, y)$，即 $K(x, y) = \begin{pmatrix} \xi^+ \\ \xi^-(x)\ (x) \end{pmatrix}$

或 $K(x, y) = \xi^+(x)\xi^+(x) + \xi^-(x)\xi^-(x)$，或 $K(x, y) = \xi_+(x)\xi_-(y)$。

这些可作为我们近似全局特征函数所在空间的再生核。具体而言，我们寻求

$$\Phi(x) \;=\; \sum_{j=1}^{N} \alpha_j\, K(x, x_j) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \xi(x)\xi(x_j) = \xi(x) \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \xi(x_j). \tag{151}$$

其中 x_j 为配置点。代入 Koopman 偏微分方程

$$\nabla\Phi(x) \cdot \mathbb{f}(x) \;-\; \lambda\, \Phi(x) \;=\; 0 \tag{152}$$

并在每个 x_i 处求值，得到线性系统

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Big[\nabla_x K(x_i, x_j) \cdot \mathbb{f}(x_i) \;-\; \lambda\, K(x_i, x_j) \Big] \;=\; 0, \quad i = 1, \ldots, N, \tag{153}$$

然后再加入约束条件

$$\nabla\Phi(0) \;=\; w, \tag{154}$$

这样便排除了零解，并将 Φ 唯一归一化，使其在一阶上与选定的左特征向量 w 一致。因此，我们实际上有

$$\Phi(x) = c\,\xi(x), \tag{155}$$

其中 $\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\xi(x_j)=:\; c$，而 $\nabla\Phi(0) \;=\; w$ 则仅用于确定常数 c。

系数 $\{\alpha_j\}$ 通过最小化惩罚最小二乘泛函来确定

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Big(\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\big[\nabla_x K(x_i,x_j)\cdot\mathbb{f}(x_i)-\lambda K(x_i,x_j)\big]\Big)^2 \;+\; \mu_{\mathrm{grad}}\big\|\nabla\Phi(0)-w\big\|^2 \;+\; \mu_{\mathrm{reg}}\|\alpha\|^2. \tag{156}$$

计算 $\xi(x)$ 的实际注意事项 由于“路径积分”公式

$$\xi(x) \;=\; w_-^{\top}x \;+\; \int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda_- s}\, w_-^{\top}\,\mathbb{f}\big(\varphi(s;x)\big)\,ds \tag{157}$$

同时将 x 作为流 $\varphi(s;x)$ 的端点并置于积分内部，因此在实际计算中可通过以下步骤实现：

i. **截断时间范围**。选择一个有限的 $T>0$ 使得

$$\int_{-\infty}^{0}(\cdots)\,ds \;\approx\; \int_{-T}^{0}(\cdots)\,ds. \tag{158}$$

ii. **计算反向轨迹**。 对于每个目标点 x，反向求解常微分方程：

$$\frac{d}{ds}\varphi(s;x) = \mathbb{F}\big(\varphi(s;x)\big), \quad \varphi(0;x)=x, \quad s\in[-T,0]. \tag{159}$$

（例如，通过在 $[0,-T]$ 上调用 solve ivp。）

iii. **计算加权积分**。 在 $[-T,0]$ 上采样网格 s_j，计算$w_-^{\top}\mathbf{f}(\varphi(s_j;\,x))\;e^{-\lambda_- s_j}$，并用求积公式[4]近似 $\int_{-T}^{0}(\cdots)\;ds$。

[4]在我们的实现中，我们将半无限区间 $[-T,0]$ 划分为 M 个大小为$\Delta t = T/M$的小步，并求和：$x_0 = x,\qquad x_{k+1} = x_k + \Delta t\,\mathbf{f}(x_k)\qquad s_k = -\,k\,\Delta t,$

$$\xi(x) \;\approx\; w^{\top}x \;+\; \sum_{k=0}^{M-1} e^{-\lambda\,(s_k+\frac{\Delta t}{2})}\; w^{\top}\mathbb{f}\Big(\tfrac{x_k+x_{k+1}}{2}\Big)\,\Delta t. \tag{160}$$

对于 $M = 1$(因此 $T = \Delta$)，这可简化为单步公式： $\xi(x)\approx \quad w^{\top}x \quad +\Delta t\,e^{-\lambda\,\frac{\Delta t}{2}}\;w^{\top}\mathbf{f}\Big(\tfrac{x+s_{\Delta t}(x)}{2}\Big)$, $s_{\Delta t}(x) = x+\Delta t\,\mathbf{f}(x)$。

iv. **求出逐点值**。将这两项合并，得到

$$\xi(x) \;\approx\; w_-^\top x \;+\; \sum_j w_-^\top \mathbb{f}\big(\varphi(s_j;x)\big)\, e^{-\lambda_- s_j}\, \Delta s_j. \tag{161}$$

v. **（可选）全局代理**。如果需要处处得到 $\xi(\cdot)$，请选择采样点 x_i，通过上述方法计算 $\xi(x_i)$，并通过i在最小二乘法中施加偏微分方程 $\nabla\xi\cdot f=\lambda\xi$ （以及归一化条件），拟合 $\xi(x)\approx\sum\alpha_i K(x,\ x_i)$。

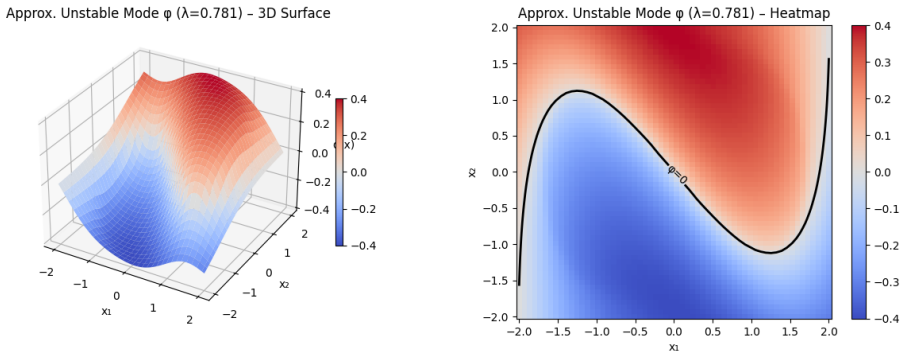
数值实验（杜芬振子）我们考虑杜芬振子

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad \dot{x}_2 = -\delta x_2 - x_1(\beta + \alpha x_1^2), \tag{162}$$

参数为 $\delta = 0.5$、 $\beta = -1.0$ 和 $\alpha = 1.0$。在原点处线性化得到雅可比矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\beta & -\delta \end{bmatrix}, \tag{163}$$

其特征值为 $\lambda_+ > 0$ 和 $\lambda_- < 0$。
接下来的图展示了在网格上学习得到的特征函数：



Fig图 4：Koopman 特征函数 $\phi_{\lambda+}(x)$ 的曲面和热图可视化 .

5 对其他输运方程的扩展

在前几节中，我们构建了一个统一框架，用于构造适用于输运型偏微分方程（PDE）的再生核，并特别关注 Koopman 特征函数逼近。该框架的核心是三种互补方法——Lions 变分原理、格林函数反演和特征线法。在适当假设下，这些方法均可得到等价的核。

本节将这些方法从 Koopman 相关偏微分方程扩展到更广泛的一类线性输运方程，这类方程常见于数学物理和动力系统中。其中包括线性平流方程、连续性方程、刘维尔方程以及带衰减的输运方程。尽管具体形式各异，这些偏微分方程都具有典型的一阶输运结构，因此适用于此前讨论的核构造。

对于每个方程，我们都展示了如何系统地运用格林函数方法和预解核（特征流）方法，为其解空间推导再生核。这些示例体现了我们框架的灵活性和可扩展性，表明为 Koopman 分析开发的理论见解和计算工具能够自然地推广到输运理论中的其他重要情形。

5.1 线性平流方程

线性平流方程是最简单的输运模型之一:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\,\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \tag{164}$$

其中 c 是常数平流速度。对于相应的特征值问题，考虑如下形式的算子

$$L\varphi(x) = c\,\frac{d\varphi}{dx} - \lambda\,\varphi(x). \tag{165}$$

格林函数方法： 我们寻求一个因果（推迟）格林函数$G(x,\xi)$，使其满足

$$L_x\,G(x,\xi) = \delta(x-\xi). \tag{166}$$

一个形式解为

$$G(x,\xi) = H(x-\xi)\exp\!\left(-\frac{\lambda}{c}(x-\xi)\right), \tag{167}$$

其中， H 是用于确保因果性的 Heaviside函数（即，对于 $x<\xi$， $G(x,\xi)=0$ ）。
随后通过对称化构造再生核:

$$K(x,y) = \int_{\mathbb{R}} G(x,\xi)\,G(y,\xi)\,w(\xi)\,d\xi, \tag{168}$$

其中 $w(\xi)>0$ 经过适当选取（通常取为勒贝格测度）。

特征线法：线性平流方程的特征线是由下式给出的直线

$$s_t(x) = x + c\,t. \tag{169}$$

沿着这些特征线，特征值问题的一个解具有如下形式

$$\varphi(x) = e^{\frac{\lambda}{c}(x-x_0)}\, g(x_0), \tag{170}$$

其中， x_0 是给定初始曲面上特征线的起点。预解核通过对流诱导半群取拉普拉斯变换来定义：

$$K_\alpha(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\, \delta\big(y - s_t(x)\big)\, dt. \tag{171}$$

适当选择 α 并进行归一化，即可得到一个再生核，它等价于通过格林函数法得到的核。

5.2 连续性方程

连续性方程描述了质量等物理量的守恒，其形式为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\, f(x)) = 0. \tag{172}$$

考虑稳态速度场 $f(x)$，可以针对如下形式的算子建立一个特征值问题

$$L\varphi(x) = f(x) \cdot \nabla\varphi(x) - \lambda\, \varphi(x). \tag{173}$$

格林函数方法：推迟格林函数 $G(x,\xi)$ 可通过求解以下方程确定

$$L_x\, G(x,\xi) = \delta(x - \xi), \tag{174}$$

并在超曲面上施加适当的边界条件或初始条件。随后，重现核为

$$K(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)\, G(y,\xi)\, w(\xi)\, d\xi. \tag{175}$$

特征线法：特征线描述了守恒量被输运时所沿的轨迹。将解写成

$$\varphi(x) = \exp\big(\lambda\, T(x)\big) g\big(s_{-T(x)}(x)\big), \tag{176}$$

其中， $T(x)$表示反向特征线到达初始曲面所需的时间，对相应的半群取拉普拉斯变换，可得

$$K_\alpha(x,y)=\int_0^\infty e^{-\alpha t}\,\delta\big(y-s_t(x)\big)\,dt. \tag{177}$$

在适当选择参数的情况下，这个预解核与格林函数法推导出的预解核一致。

5.3 刘维尔方程

在哈密顿动力学中，刘维尔方程描述相空间密度的演化：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\{\rho,H\}=0, \tag{178}$$

其中， $\{\cdot,\cdot\}$ 是泊松括号， H 是哈密顿量。将其改写为相空间中的输运方程后，可得如下形式的算子

$$L\varphi(x,p)=f(x,p)\cdot\nabla_{x,p}\varphi(x,p)-\lambda\,\varphi(x,p). \tag{179}$$

格林函数方法： 通过求解方程，构造推迟格林函数$G((x,p),(\xi,\pi))$

$$L_{(x,p)}\,G\big((x,p),(\xi,\pi)\big)=\delta\big((x,p)-(\xi,\pi)\big), \tag{180}$$

满足因果性条件后，进而构造再生核

$$K\big((x,p),(y,q)\big)=\int_\Omega G\big((x,p),(\xi,\pi)\big)\,G\big((y,q),(\xi,\pi)\big)\,w(\xi,\pi)\,d\xi\,d\pi. \tag{181}$$

特征线法：相空间轨迹充当特征线，解沿这些特征线传播：

$$\varphi(x,p)=\exp\big(\lambda\,T(x,p)\big)g\big(s_{-T(x,p)}(x,p)\big). \tag{182}$$

对由这些特征线定义的半群取拉普拉斯变换，预解核由下式给出

$$K_\alpha\big((x,p),(y,q)\big)=\int_0^\infty e^{-\alpha t}\,\delta\big((y,q)-s_t(x,p)\big)\,dt. \tag{183}$$

同样，通过适当的选择，该核与利用格林函数方法得到的核相一致。

5.4 带衰减项的输运方程

包含衰减（或阻尼）项的输运方程可写为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + f(x) \cdot \nabla u = -\lambda\, u. \tag{184}$$

在此，衰减项的存在将算子修改为

$$L\varphi(x) = f(x) \cdot \nabla\varphi(x) - \lambda\, \varphi(x). \tag{185}$$

格林函数方法：该算子的推迟格林函数满足

$$L_x\, G(x,\xi) = \delta(x-\xi), \tag{186}$$

再生核构造为

$$K(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)\, G(y,\xi)\, w(\xi)\, d\xi. \tag{187}$$

特征线法：沿特征曲线，解可表示为

$$\varphi(x) = e^{\lambda T(x)}\, g\big(s_{-T(x)}(x)\big), \tag{188}$$

and 相关半群的拉普拉斯变换给出预解核

$$K_\alpha(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\, \delta\big(y - s_t(x)\big)\, dt. \tag{189}$$

在参数选择适当时，这个再生核等价于通过格林函数方法得到的再生核。

总结： 对于上述各类输运方程——线性平流方程、连续性方程、刘维尔方程和含衰减项的输运方程——相同的两种方法都能为解空间构造一个再生核。在格林函数方法中，通过对算子求逆（并施加适当的因果条件）得到格林函数，然后通过对称化构造核。在特征线法中，解沿流传播，对所得半群进行拉普拉斯变换即可得到预解核。在适当条件下，这两种方法都能得到等价的再生核，从而统一地捕捉输运过程的基本特征及其因果动力学。

这一统一处理表明，最初由Lions提出、并经由变分方法与格林函数法加以推广的反演思想，具有足够的稳健性，可应用于一大类输运方程。所得再生核不仅允许通过表示定理重构特征函数，还为输运现象的经典分析与数据驱动方法之间架起了有力桥梁。

结论。 我们提出了一个严格且可扩展的框架，用于基于三种等价的解析表述构造与Koopman特征值问题相一致的再生核。所得核诱导出再生核希尔伯特空间，其Mercer 特征函数逼近真实的Koopman 模态，并使稳健的变分求解器即使在存在边界奇异性时仍保持稳定。我们的框架还融入了数据自适应核学习方案，并可自然推广到其他一阶输运偏微分方程。这些组成部分共同构成了一种连贯的无网格方法，用于学习、表示和计算输运驱动系统的谱特征。

附录

A 再生核希尔伯特空间（再生核希尔伯特空间）

我们简要概述统计学习理论中所用的再生核希尔伯特空间 [39]。再生核希尔伯特空间理论的早期发展工作由 N. Aronszajn [65]完成。

定义 A.1. 设 $\mathcal{H}$ 是定义在集合 $\mathcal{X}$上的函数希尔伯特空间。记$\langle f, g\rangle$ 为 $\mathcal{H}$上的内积，并令 $\|f\| = \langle f, f\rangle^{1/2}$为 $\mathcal{H}$中的范数，其中 f和$g \in \mathcal{H}$。若存在函数 $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$，使得

i. $K_x := K(x, \cdot) \in \mathcal{H}$ *for all* $x \in \mathcal{H}$.

ii. K *spans* $\mathcal{H}$*:* $\mathcal{H} = \overline{span\{K_x \mid x \in \mathcal{X}\}}$.

iii. K具有再生性质： $\forall f \in \mathcal{H}, \quad f(x) = \langle f, \quad K_x\rangle$。

k 称为 $\mathcal{H}$的再生核。方便明确表示这种依赖关系时，我们用 $\mathcal{H}_K$ 表示再生核为 K 的再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 。

再生核的重要性质总结如下命题所示。

命题 A.2. *[65]* 如果 K 是希尔伯特空间 $\mathcal{H}$的再生核，那么

i. $K(x, y)$ 是唯一的。

ii. $\forall x, y \in \mathcal{X}$, $K(x, y) = K(y, x)$ （对称性）。

iii. $\sum_{i,j=1}^{q} \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \geq 0$ 对于 $\alpha_i \in \mathbb{R}, \quad x_i \in \mathcal{X}$和 $q \in \mathbb{N}+$ （正定性）。

iv. $\langle K(x, \cdot)\ K(y, \cdot)\rangle = K(x, y)$.

定义在紧致区域 $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$ 上的再生核常见示例包括：(1) 常数核： $K(x,y) = m > 0$ (2) 线性核： $K(x,y) = x_x y_y$ (3) 多项式核： $K($ $x \ y \ =$ $e^{-||x-y||_2/\sigma^2}$ $\sigma > 0 \ \ 5$ $K \ x \ ^{+} = e^{-||x-y||_2^2/\sigma^2}$ $\sigma > 0 \ \ 6 \ ,) ($ $1 + x \cdot y)^d$，其中 $d \in \mathbb{N}$ (4) 拉普拉斯核： $K(,)$，其中 $(\ )$ 高斯核： $(\ , y)$，其中 $(\ )$ 三角核： $K(x,y) = \max\{0, 1 - \frac{||x-y||_2^2}{\sigma}\}$，其中 $\sigma > 0$。(7) 局部周期核： $K(x,y) = \sigma^2 e^{-2\frac{\sin^2(\pi||x-y||_2/p)}{\ell^2}} e^{-\frac{||x-y||_2^2}{2\ell^2}}$，其中 $\sigma, \ell, p > 0$。

定理 A.3。 *[65]* 设 $K: \ \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ 是一个对称正定函数。则存在一个函数希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，其定义于 $\mathcal{X}$ 上，并以 K作为再生核。反之，设 $\mathcal{H}$ 是一个函数希尔伯特空间 $f: \ \mathcal{X} \to \mathbb{R}$，满足 $\forall x \in \mathcal{X}$、$\exists \kappa_x > 0$，使得 $|f(x)| \leq \kappa_x \|f\|_{\mathcal{H}}$、$\forall f \in \mathcal{H}.$。则 $\mathcal{H}$具有再生核 K。

定理 A.4。 *[65]* 设 $K(x, \ y)$ 是紧致区域或流形 X上的正定核。则存在一个希尔伯特空间 $\mathcal{F}$ 和一个函数 $\Phi: \ X \to \mathcal{F}$，使得

$$K(x,y) = \langle \Phi(x), \Phi(y) \rangle_{\mathcal{F}} \quad for \quad x, y \in X.$$

Φ 称为特征映射，而 $\mathcal{F}$ 称为特征空间[5]。

核方法的主要优势之一是，它们能够为预测提供解析的不确定性估计——无论是在贝叶斯框架（高斯过程）中，还是通过再生核希尔伯特空间范数中的频率学派集中界。

贝叶斯预测方差。假设我们观测到含噪数据 $y = (y_1, \ldots, y_n)^\top$ with $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$, $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$，并设定高斯过程先验 $f \sim \mathcal{GP}\big(0, K(\cdot,\cdot)\big)$。令 $K_{nn} = [K(x_i, x_j)]_{i,j=1}^n$ and $k_x := (K(x, x_1) \ldots, K(x, x_n))^\top$。那么测试点 x处的后验分布为

$$\begin{aligned} m_n(x) &= k_x^\top \big(K_{nn} + \sigma^2 I_n\big)^{-1} y, \\ s_n^2(x) &= K(x,x) - k_x^\top \big(K_{nn} + \sigma^2 I_n\big)^{-1} k_x, \end{aligned} \tag{190}$$

其中 $m_n(x)$ 是预测均值， $s_n^2(x)$ 是闭式后验方差，用于量化认知不确定性。注意，随着在 x 附近采集更多数据， $s_n^2(x) \downarrow 0$ ，从而为主动学习或贝叶斯优化方案提供明确的指导。

频率学派误差界。 对于调节参数为 $\hat{}\lambda > 0$ 的核岭回归，估计量 $f_\lambda \in \mathcal{H}_K$ 满足逐点不等式

$$|f(x) - \hat{f}_\lambda(x)| \ \leq \ \big\|f - \hat{f}_\lambda\big\|_{\mathcal{H}_K} \sqrt{K(x,x)}, \tag{191}$$

[5]特征空间的维数可以是无穷的，例如在高斯核的情形下。

从而 $\sqrt{K(x,x)}$充当局部敏感性系数。结合标准预言机 $\hat{}$或关于 $\|f-f_\lambda\|_{\mathcal{H}_K}$的集中界，（191）可给出渐近有效的频率学置信域，而无需任何重采样。

B Koopman算子与特征函数

B.1 Koopman算子及其谱

本节简要概述 Koopman算子的谱理论。更多详细信息请参见 $[66, 67]$ 。考虑如下动力系统

$$\dot{x} = f(x), \tag{192}$$

定义在状态空间 $\mathcal{Z} \subseteq \mathrm{R}^n$ 上。假设向量场 f 是光滑函数。令 C^0 表示从 $\mathcal{Z}$ 到 C 的连续函数空间，并令 $\mathcal{F} \subseteq C^0$ 表示观测函数 $\psi: \mathcal{Z} \to \mathrm{C}$ 的函数空间。Koopman算子及其谱的定义如下。

定义 B.1 (Koopman算子)。 与 (192) 相对应的 ***Koopman*算子族** $\mathbb{U}_t : \mathcal{F} \to \mathcal{F}$ 定义为

$$[\mathbb{U}_t\psi](x) = \psi(s_t(x)). \tag{193}$$

其中 $s_t(x)$ 是动力系统 ***(192)*** 的解。若进一步假设 ψ 连续可微，则 $\varphi(x,t):=[\mathbb{U}_t\psi](x)$ 满足偏微分方程 *[68]*

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} f =: \mathcal{K}_f \varphi \tag{194}$$

在初始条件 $\varphi(x,0) = \psi(x)$ 下，算子 $\mathcal{K}_\mathbf{f}$ 是$\mathbb{U}_t$ 的无穷小生成元，即:

$$\mathcal{K}_f \psi = \lim_{t \to 0} \frac{(\mathbb{U}_t - I)\psi}{t}. \tag{195}$$

很容易验证，每个 U_t 都是函数空间 $\mathcal{F}$上的线性算子。

定义 B.2。 *[Koopman* 的特征值和特征函数*]* 设函数 $\psi_\lambda(x)$至少为 C^1，若其满足以下条件，则称其为与特征值 λ 相关的 ***Koopman*算子的特征函数**:

$$[\mathbb{U}_t\psi_\lambda](x) = e^{\lambda t}\psi_\lambda(x). \tag{196}$$

利用 ***Koopman*生成元，（*196*）** 可写为

$$\frac{\partial \psi_\lambda}{\partial x} f = \lambda \psi_\lambda. \tag{197}$$

Koopman算子的主特征函数 是特征函数，其对应的特征值与非线性系统在平衡点处线性化后的特征值相匹配。对于系统（192）的平衡点，若满足双曲性假设，则谱的这一部分是良好定义的。

方程（196）和（197）给出了 Koopman谱的一般定义。然而，谱也可以在有限时间内或状态空间的某个子集上定义。本文所关注的谱可以在状态空间的该子集上得到良好定义。

定义 B.3 (开特征函数 [66])。 设 $\psi_\lambda : \mathcal{C} \to \mathbb{C}$，其中 $\mathcal{C} \subset \mathcal{Z}$ 不是不变集。设 $\tau^-(x)$ 和 $\tau^+(x)$ 分别为解 $x \in \mathcal{C}$ 存在的时间区间的下确界和上确界，并令 $\tau \in (\tau^-(x)\ \tau^+(x)) = I_x$ 为一个连通开区间，使得对所有时间 $\tau \in I_x$，均有 $\tau(x) \in \mathcal{C}$ 。若

$$[\mathbb{U}_\tau \psi_\lambda](x) = \psi_\lambda(s_\tau(x)) = e^{\lambda\tau}\psi_\lambda(x), \quad \forall \tau \in I_x. \tag{198}$$

则 $\psi_\lambda(x)$ 称为 *Koopman*算子族 $\mathbb{U}_t$ 的开特征函数，其特征值为$t \in \mathbb{R}$ λ。

若$\mathcal{C}$ 是 $\mathcal{Z}$ 中的真不变子集，即对每个 $x \in \mathcal{C}$， $I_x = \mathrm{R}$，则 ψ_λ 称为子域特征函数。若$\mathcal{C}$ $= \mathcal{Z}$ ，则 ψ_λ 是与特征值 λ对应的普通特征函数，其定义见（196）。当$\mathcal{C}$ 为开集时，根据 [66, 定义 5.2、引理 5.1]中概述的构造过程，可以将上述开特征函数从$\mathcal{C}$ 扩展到更大的可达集。令 $\mathcal{P}$ 为该较大区域。系统动力学在原点处线性化的特征值，即 $E := \frac{\partial f}{\partial x}(0)$，将构成 Koopman算子 [66, 的特征值（命题 5.8]）。我们将致力于构造相应的特征函数，称为主特征函数，并定义在区域 $\mathcal{P}$上。主特征函数可用作非线性系统线性表示中的坐标变换，并与著名的 Hartman-Grobman定理（关于线性化）和 Poincaré正规形建立联系 [69]。主特征函数将在状态空间的真子集 $\mathcal{P}$ 上定义（称为子域特征函数），或在整个 $\mathcal{Z}$ [66,上定义（引理 5.1、推论 5.1、5.2 和 5.8]）。

B.2 Koopman 特征函数的分解

根据 [30], ，我们将主特征函数分解为线性部分和非线性部分。具体而言，将非线性系统分解为线性部分和非线性部分:

$$\dot{x} = f(x) = Ex + (f(x) - Ex) =: Ex + f(x). \tag{199}$$

其中 $E = \frac{\partial f}{\partial x}(0)$ 中， Ex 为线性部分， $f(x) := f(x) - Ex$ 为纯非线性部分。为便于阐述并保持符号的连续性，我们介绍

具有单实特征值的特征函数的近似结果；复数情形的扩展留待未来工作。设 λ 为Koopman生成元以及 E的特征值。与特征值λ 对应的特征函数可分解为线性部分和非线性部分。

$$\phi_\lambda(x) = w^\top x + h(x), \tag{200}$$

其中， $w^\top x$ 和 $h(x)$分别是特征函数的线性部分和纯非线性部分。将 (200) 代入 Koopman 特征函数的一般表达式，即

$$\frac{\partial \phi_\lambda}{\partial x}(x) \cdot f(x) = \lambda \phi_\lambda(x) \tag{201}$$

并利用 (199)，得到 w 和 $h(x)$需满足的以下方程

$$w^\top E = \lambda w^\top, \quad \frac{\partial h}{\partial x}(x) \cdot f(x) - \lambda h(x) + w^\top f(x) = 0. \tag{202}$$

因此，特征函数的线性部分可求为矩阵 E对应于特征值 λ 的左特征向量，而非线性项满足线性偏微分方程。

C 格林函数与特征线

定理 C.1. 设 $f \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^d)$ 生成完备流 s_t，且令 $\lambda \in \mathbb{C}$ 满足$\mathrm{Re}\,\lambda > 0$。假设 $\phi : \Omega \to \mathbb{C}$ 满足 *Koopman* 特征函数偏微分方程

$$f(x) \cdot \nabla \phi(x) = \lambda \phi(x). \tag{203}$$

Then

$$\phi(x) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} g(s_{-t}(x))\, dt, \tag{204}$$

其中， g 是辅助源函数（例如边界数据或初始数据）。

证明。 沿着轨迹 $t \mapsto s_t(x)$，根据链式法则可得

$$\frac{d}{dt} \phi(s_t(x)) = f(s_t(x)) \cdot \nabla \phi(s_t(x)) = \lambda \phi(s_t(x)). \tag{205}$$

求解这个常微分方程可得

$$\phi(s_t(x)) = e^{\lambda t} \phi(x). \tag{206}$$

重新整理得,

$$\phi(x) = e^{-\lambda t} \phi(s_t(x)). \tag{207}$$

乘以 $g(s_{-t}(x))$，并在由 $e^{-\lambda t}$ 加权的 $t \in [0, \infty)$ 上积分，即得所述公式。收敛性由 $\mathrm{Re}\,\lambda > 0$ 得出。 □

定理 C.2。 在相同假设下，解沿特征线满足

$$\phi(s_t(x)) = e^{\lambda t}\phi(x), \quad \textit{or equivalently} \quad \phi(x) = e^{-\lambda t}\phi(s_t(x)). \tag{208}$$

证明。 特征线法将偏微分方程化为常微分方程

$$\frac{d}{dt}\phi(s_t(x)) = \lambda\phi(s_t(x)), \tag{209}$$

积分后得到

$$\phi(s_t(x)) = e^{\lambda t}\phi(x). \tag{210}$$

重新整理即可得到所需形式。 □

定理 C.3（格林函数解与特征线解的等价性）。 格林函数解与特征线法解一致。

证明。 这两种构造都涉及追踪后向流 $s_{-t}(x)$，并以 $e^{-\lambda t}$ 加权。对特征线解在 t 上积分，恰好得到格林函数表示。

□

D 定理 3.7 的证明

定理 D.1. 设 K^{var}、 K^{G} 和 K_α^{res} 分别表示与输运算子相关的变分核、格林函数核和预解核

$$L\phi(x) = f(x)\cdot\nabla\phi(x) - \lambda\phi(x), \tag{211}$$

其中 f 是生成完备流的光滑向量场。那么，在满足关于 f 的适当正则性条件且 Ω 有界的情况下，我们有：

$$K^{\mathrm{var}}(x,y) = K^{\mathrm{G}}(x,y) = K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y), \quad \textit{for all } \alpha > \mathrm{Re}(\lambda). \tag{212}$$

证明。 我们分两步进行。

步骤 1： $K^{\mathrm{var}} = K^{\mathrm{G}}$**.** 定义带有图范数的希尔伯特空间 $\mathcal{H}$：

$$\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|Lu\|_{L^2(\Omega)}^2. \tag{213}$$

由于 f 光滑且 Ω 有界，输运算子 L 在诸如 $C^\infty(\overline{\Omega})$ 这样的适当稠密子空间上是良定义且连续的。

逐点求值泛函先验上未必有界，但通过构造 $\mathcal{H}$，我们可以借助与测试函数的对偶来定义广义求值。

因此，根据 Riesz 表示定理（在求值有界的假设下，或使用适当的平滑化测试函数），对于每个 $x \in \Omega$，都存在唯一的 $K^{\mathrm{var}}(x, \cdot) \in \mathcal{H}$ 满足：

$$\langle K^{\mathrm{var}}(x,\cdot), v\rangle_{\mathcal{H}} = v(x), \quad \forall v \in \mathcal{H}. \tag{214}$$

现在，将格林函数 $G(x, \xi)$ 定义为以下方程的解：

$$L_x G(x,\xi) = \delta(x-\xi) \tag{215}$$

在分布意义下。对于 $v \in C_c^\infty(\Omega)$：

$$v(x) = \int_\Omega G(x,\xi)(Lv)(\xi)\, d\xi, \tag{216}$$

根据双曲输运方程的格林公式。

定义对称核：

$$K^{\mathrm{G}}(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)G(y,\xi)\, d\xi. \tag{217}$$

那么对于 $v \in \mathcal{H}$：

$$\int_\Omega K^{\mathrm{G}}(x,y)v(y)\, dy = \int_\Omega G(x,\xi)\left(\int_\Omega G(y,\xi)v(y)\, dy\right) d\xi. \tag{218}$$

由于 G 充当 L 的逆算子，这便复现了 $v(x)$。因此，根据里斯表示元的唯一性：

$$K^{\mathrm{var}}(x,y) = K^{\mathrm{G}}(x,y). \tag{219}$$

步骤 2： $K^{\mathrm{G}} = K_\alpha^{\mathrm{res}}$。使用特征线法，格林函数可写成如下积分表示：

$$G(x,\xi) = \int_0^\infty e^{-\lambda t}\delta(\xi - s_t(x))\, dt, \tag{220}$$

其中， s_t 表示由 f生成的流。

因此：

$$K^{\mathrm{G}}(x,y) = \iint_0^\infty e^{-\lambda(t_1+t_2)}\delta(s_{t_1}(x) - s_{t_2}(y))\, dt_1 dt_2. \tag{221}$$

将变量替换为 $\tau = t_2 - t_1$ 并化简（利用流的不变性），得到：

$$K^{\mathrm{G}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\lambda\tau}\left(\int_0^\infty e^{-2\lambda t}\delta(s_\tau(x) - y)\, dt\right) d\tau. \tag{222}$$

在指数衰减下，对 t 的积分会产生因子 $1/(2\lambda)$，从而得到 ：

$$K^{\mathrm{G}}(x,y) \propto \int_0^\infty e^{-\lambda\tau}\delta(s_\tau(x) - y)\, d\tau, \tag{223}$$

这与预解核的定义一致：

$$K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta(y - s_t(x))\,dt, \tag{224}$$

for 适当选择接近 λ 的 α （具体而言， $\alpha >$Re(λ) 可确保收敛性）。

因此：

$$K^{\mathrm{G}}(x,y) = K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y). \tag{225}$$

谱与算子性质。 由于 K 是对称、半正定的，并且根据构造是平方可积的（在对 f 的正则性假设和 Ω 有界的条件下， $K \in L^2(\Omega \times \Omega)$），因此积分算子 T_K 是希尔伯特–施密特算子，因而是紧的。若 $K(x,\ x)$ 可积，则它是迹类的，并且具有 Mercer 展开：

$$K(x,y) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \phi_j(x)\phi_j(y) \tag{226}$$

且在相应的再生核希尔伯特空间范数下收敛。

结论。 因此，我们证明了：

$$K^{\mathrm{var}}(x,y) = K^{\mathrm{G}}(x,y) = K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y). \tag{227}$$

□

参考文献

[1] J.-L. Lions，《再生核与最优性系统》，载于数学及其应用方面，A. Barroso 编。ElsevierScience Publishers B.V.，1986 年，第 573–582 页。

[2]——，《关于再生核的一些评论》，米兰数学与物理研讨会汇刊，第 58 卷，第 209–230 页，1988 年。

[3] M. Engli˘s、D. Lukkassen、J. Peetre 和 L.-E. Persson，《关于 jacques-louis lions 的调和函数及其他函数再生核公式》，纯粹与应用数学杂志 *¨ur die reine undangewandte Mathematik*，第 2004 卷，第 570 期，第 89–129 页，2004 年。 [在线]。可访问：https://doi.org/10.1515/crll.2004.035

[4]G. Auchmuty，“实调和函数希尔伯特空间的再生核”，*SIAM*数学分析杂志，第41卷，第6期，第1994–2020页，2009年。 [在线]。获取地址：https://epubs.siam.org/doi/abs/10. 1137/080739628

[5] H.Kantz 和 T. Schreiber，非线性时间序列分析。美国：剑桥大学出版社，1997年。

[6]M. Casdagli，“混沌时间序列的非线性预测”，*Physica D*：非线性现象，第35卷，第3期，第335–356页，1989年。 [在线]。可获取：http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167278989900742

[7] J. L. Hudson、M. Kube、R. A. Adomaitis、I. G. Kevrekidis、A. S. Lapedes和R. Farber，“非线性信号处理与系统辨识：电化学反应时间序列的应用”，《化学工程科学》，第45卷，第8期，第2075–2081页，1990年。 [在线]。可获取：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000925099080079T

[8]R. Rico-Martinez、K. Krischer、I. Kevrekidis、M. Kube 和 J. Hudson，“铜电溶解数据的离散时间与连续时间非线性信号处理”，《化学工程通讯》，第 118 卷第 1 期，页 25–48，1992年。[9] O. Grandstrand，“利用神经网络进行非线性系统辨识：动力学与不稳定性”，载于《化学工程师神经网络》，A. B. Bulsari 编。Elsevier：Elsevier，1995年，第 16 章，页 409–442。[10] R. Gonz´alez-Garc´ıa、R. Rico-Mart´ınez 和 I. Kevrekidis，“分布参数系统辨识：一种基于神经网络的方法”，《计算机与化学工程》，第 22 卷，页 S965–S968，1998年，第八届欧洲计算机辅助过程工程研讨会。 [在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135498001914[11]A. Chattopadhyay、P. Hassanzadeh、K. V. Palem 和 D. Subramanian，“利用深度学习方法层级结构（储备池计算、人工神经网络和循环神经网络长短期记忆）对多尺度 Lorenz 96 混沌系统进行数据驱动预测”，$CoRR$，第 abs/1906.08829 卷，2019年。 [在线]。网址：http://arxiv.org/abs/1906.08829[12] S. L. Brunton、J. L. Proctor 和 J. N. Kutz，“通过非线性动力系统稀疏辨识从数据中发现控制方程”，《美国国家科学院院刊》，第 113 卷第 15 期，页 3932–3937，2016年。[在线]。网址：https://www.pnas.org/content/113/15/3932[13] J. Pathak、Z. Lu、B. R. Hunt、M. Girvan 和 E. Ott，“利用机器学习再现混沌吸引子并根据数据计算李雅普诺夫指数”，《*Chaos*：非线性科学跨学科期刊》，第 27 卷第 12 期，页 121102，2017年。 [在线]。网址：https://doi.org/10.1063/1.5010300[14] A. Nielsen，《实用时间序列分析：统计学与机器学习预测》。O’Reilly Media，2019年。

[15] H. Abarbanel, 《观测混沌数据分析》, 丛书: 非线性科学研究所。Springer New York, 2012年。[16] G. Pillonetto、M. H. Quang 和 A. Chiuso, "一种新的基于核的非线性系统辨识方法", *IEEE* 自动控制汇刊, 第 56 卷第 12 期, 页 2825–2840, 2011年12月。[17] W.-X. Wang、R. Yang、Y.-C. Lai、V. Kovanis 和 C. Grebogi, "利用压缩感知预测非线性动力系统中的灾变", 《物理评论快报》, 第 106 卷第 15 期, 页 154101, 2011年4月。[18] S. L. Brunton、J. L. Proctor 和 J. N. Kutz, "通过非线性动力系统稀疏辨识从数据中发现控制方程", 《美国国家科学院院刊》, 第 113 卷第 15 期, 页 3932–3937, 2016年。[19] B. Lusch、J. N. Kutz 和 S. L. Brunton, "用于非线性动力学通用线性嵌入的深度学习", 《自然·通讯》, 第 9 卷第 1 期, 页 4950, 2018年12月。[20] J. L. Callaham、J. V. Koch、B. W. Brunton、J. N. Kutz 和 S. L. Brunton, "利用数据驱动的平衡模型学习主导物理过程", 《自然·通讯》, 第 12 卷第 1 期, 页 1016, 2021年12月。[21]A. A. Kaptanoglu、K. D. Morgan、C. J. Hansen 和 S. L. Brunton, "磁流体力学的物理约束低维模型: 第一性原理与数据驱动方法", 《物理评论*E*》, 第 104 卷第 1 期, 页 015206, 2021年7月。[22]J. N. Kutz 和 S. L. Brunton, "简约性: 物理信息机器学习的终极正则化器", 非线性动力学, 2022年1月。[23] B. O. Koopman 和 J. v. Neumann, "连续谱动力系统", 《美国国家科学院院刊》, 第 18 卷第 3 期, 页 255–263, 1932年。[24] I. Mezi´c, "动力系统的谱性质、模型降阶与分解", 非线性动力学, 第 41 卷第 1 期, 页 309–325, 2005年。[25] A. Mauroy 和 I. Mezi´c, "利用 Koopman 算子的特征函数进行全局稳定性分析", *IEEE* 自动控制汇刊, 第 61 卷第 11 期, 页 3356–3369, 2016年。[26] B. Umathe 和 U. Vaidya, "用于识别稳定性边界的谱 Koopman 方法", *IEEE* 控制系统快报, 2023年。[27] A. R. Matavalam、B. Hou、H. Choi、S. Bose 和 U. Vaidya, "利用 Koopman 算子进行数据驱动的暂态稳定性分析", 《国际电力与能源系统期刊》, 第 162 卷, 页 110307, 2024年。

[28] U. Vaidya, “Koopman算子的谱分析与非线性最优控制”，收录于*2022*年*IEEE*第*61*届决策与控制会议（*CDC*）。IEEE，2022年，第3853–3858页。[29] ——，“当Koopman遇上Hamilton和Jacobi”，预印本，2024年。[30] S. A. Deka、S. S. Narayanan和U. Vaidya，“计算Koopman特征函数的路径积分公式”，收录于*2023*年*IEEE*第*62*届决策与控制会议（*CDC*）。IEEE，2023年，第6641–6646页。[31] M. Colbrook，“无限维谱计算的数学基础”，博士论文，2020年。[32] M. O. Williams、I. G. Kevrekidis和C. W. Rowley，“Koopman算子的数据驱动近似：扩展动态模态分解”，《非线性科学杂志》，第25卷，第6期，第1307–1346页，2015年。[33] S. Klus、F. N¨uske、S. Peitz、J.-H. Niemann、C. Clementi和C. Sch¨utte，“Koopman生成元的数据驱动近似：模型降阶、系统辨识与控制”，*Physica D*：非线性现象，第406卷，文章编号132416，2020年。[34] B. Peherstorfer、S. L. Brunton和J. N. Kutz，“用于具有对称性的系统模型降阶与控制的数据驱动Koopman算子”，《*SIAM*应用动力系统杂志》，第19卷，第3期，第1894–1920页，2020年。[35] S. Klus、F. N¨uske、P. Koltai、I. G. Kevrekidis、C. Sch¨utte和C. Clementi，“基于核的动态模态分解”，*Journal of Computational Dynamics*，第2卷，第2期，第247–265页，2015年。[36] S. Das和D. Giannakis，“再生核希尔伯特空间中的Koopman谱”，《应用与计算调和分析》，第49卷，第2期，第573–607页，2020年。 [在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S1063520320300427[37] B. Hou、S. Sanjari、N. Dahlin、S. Bose和U. Vaidya，“再生核希尔伯特空间中动力系统的稀疏学习：一种算子理论方法”，收录于国际机器学习会议。PMLR，2023年，第13 325–13 352页。[38] I. Ishikawa、Y. Hashimoto、M. Ikeda和Y. Kawahara，“装备再生核希尔伯特空间中具有内在观测量的Koopman算子”，2024年。[在线]。网址：https://arxiv.org/abs/2403.02524[39] F. Cucker和S. Smale，“论学习的数学基础”，《美国数学学会通报》，第39卷，第1期，第1–49页，2002年。

[40] Y. Chen、B. Hosseini、H. Owhadi和A. M. Stuart，“利用高斯过程求解和学习非线性偏微分方程”，计算物理学杂志，第447卷，2021年。[41] H. Owhadi，“计算图补全”，数学科学研究，第9(2)卷，第27号，2021年。 [在线]。网址：https://arxiv.org/abs/ 2110.10323[42] J. Lee、B. Hamzi、B. Hou、H. Owhadi、G. Santin和U. Vaidya，“用于近似Koopman算子特征函数的核方法”，*Physica D*：非线性现象，第476卷，文章编号134662，2025年，2025年4月17日在线发布，正式出版版本日期为2025年4月18日。[43] B. Hamzi、C. Kuehn和S. Mohamed，“关于具有临界转变的多尺度系统核方法的一点说明”，*Mathematical Methods in the AppliedSciences*，第42卷，第5期，第1535–1544页，2018年。[44] J. Bouvrie和B. Hamzi，“再生核希尔伯特空间中非线性控制系统的平衡降阶”，收录于第*48*届*Allerton*通信、控制与计算年会论文集。IEEE，2010年，第998–1005页。[45] ——，“随机强迫非线性系统的经验估计量：可观测性、可控性与不变测度”，收录于*2012*年美国控制会议（*ACC*）论文集。IEEE，2012年，第4142–4148页。[46] B. Hamzi和F. Colonius，“用于离散时间线性自治系统与控制系统近似的核方法”，*SN*应用科学，第1卷，第7期，第1–12页，2019年。[47] B. Haasdonk、B. Hamzi、G. Santin和D. Wittwar，“用于中心流形近似的贪心核方法”，*ICOSAHOM 2018*，国际谱方法与高阶方法会议论文集，第427卷，第1期，2018年，https: //arxiv.org/abs/1810.11329。[48] ——，“用于中心流形近似的核方法及中心流形定理的一种弱数据驱动版本”，*Physica D*，2021年。[49] P. Giesl、B. Hamzi、M. Rasmussen和K. Webster，“基于含噪数据近似Lyapunov函数”，*Journal of Computational Dynamics*，第7卷，第57–81页，2019年，https://arxiv.org/abs/1601.01568。[50]B. Hamzi和H. Owhadi，“从数据中学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第一部分：参数化核流”，*Physica D*：非线性现象，第421卷，文章编号132817，2021年。 [在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278920308186

[51] S. Klus、F. Nuske 和 B. Hamzi，“基于核的Koopman生成元和薛定谔算子近似”，*Entropy*，第22卷，2020年，https://www.mdpi.com/1099-4300/22/7/722。[52]R. Alexander 和 D. Giannakis，“利用核类比技术预测非线性时间序列的算子理论框架”，*Physica D*：非线性现象，第409卷，页码132520，2020年。 [在线]。网址：http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016727891930377X[53] A. B. S. K. B. H. P. Koltai 和 C. Schutte，“通过转移流形的核嵌入降低复杂亚稳态系统的维数”，《非线性科学杂志》，第31卷第3期，2019年。[54]J. Bouvrie 和 B. Hamzi，“随机强迫非线性系统的经验估计量：可观测性、可控性与不变测度”，*2012*年美国控制会议论文集，第294–301页，2012年，https: //arxiv.org/abs/1204.0563v1。[55] ——，“用于近似非线性系统的核方法”，*SIAM*控制与优化杂志，2017年，https://arxiv.org/abs/1108.2903。[56] ——，“用于近似非线性系统若干关键量的核方法”，*Journal of Computational Dynamics*，第1卷，2017年，http: //arxiv.org/abs/1204.0563。[57]B. Hamzi、C. Kuehn 和 S. Mohamed，“关于利用核方法处理具有临界转变的多尺度系统的简注”，*Mathematical Methods intheAppliedSciences*，第42卷第3期，第907–917页，2019年。 [在线]。网址：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/mma.5394[58] L. Yang、X. Sun、B. Hamzi、H. Owhadi 和 N. Xie，“从数据中学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第五部分：用于132个混沌动力系统的稀疏核流”，*Physica D*，第460卷，2022年。[59] L. Yang、B. Hamzi、Y. Kevrekidis、H. Owhadi、X. Sun 和 N. Xie，“从数据中学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第六部分：基于豪斯多夫度量的核流，用于学习吸引子和不变集”，*Physica D*，2023年。[60] B. Hou、A. R. R. Matavalam、S. Bose 和 U. Vaidya，“在再生核希尔伯特空间中传播系统动力学中的不确定性”，*Physica D*：非线性现象，页码134168，2024年。[61]J. Lee、B. Hamzi、Y. Kevrekidis 和 H. Owhadi，“高斯过程简化微分方程”，2024年9月。[在线]。网址：https://www.researchgate.net/publication/383680496 Gaussian Processes Simplify Differential Equations

[62] D. Lengyel、B. Hamzi、H. Owhadi 和 P. Parpas，“用于从数据中学习动力系统的数据自适应核学习的核平方和：一种全局优化方法”，*arXiv*预印本 *arXiv:2408.06465*，2024年。 [在线]。网址：https://www.arxiv.org/pdf/2408.06465[63] G. Santin 和 B. Haasdonk，“用于代理建模的核方法”，系统与数据驱动方法和算法，2019年，https://arxiv.org/abs/1907. 105566。[64]S. A. Deka、S. S. K. S. Narayanan 和 U. Vaidya，“计算Koopman特征函数的路径积分公式”，2023年。 [在线]。网址：https://arxiv.org/abs/2307.06805[65] N. Aronszajn，“再生核理论”，美国数学会汇刊，第68卷第3期，第337–404页，1950年。 [在线]。网址：http://dx.doi.org/10.2307/1990404[66] I. Mezi´c，“Koopman算子的谱、函数空间中的谱展开与状态空间几何”，《非线性科学杂志》，第30卷第5期，第2091–2145页，2020年。[67] ——，“Koopman算子、几何与动力系统学习”，美国数学会通讯，第68卷第7期，第1087–1105页，2021年。[68] A. Lasota 和 M. C. Mackey，《混沌、分形与噪声：动力学的随机性方面》。纽约：施普林格出版社，1994年。[69] V. Arnold，《常微分方程理论中的几何方法》。施普林格出版社，2012年。