arXiv:2603.20102v1 [math.DS] 20 Mar 2026

# 量子理论视角下的Koopman算子与传递算子技术

DIMITRIOS GIANNAKIS 和 MICHAEL MONTGOMERY

Abstract. 关于经典动力学与量子力学的算子理论表述之间数学联系的研究，至少可追溯至20世纪30年代Koopman和冯·诺依曼的工作。此后数十年间，许多作者常常彼此独立地发展了这一研究，并逐步形成了如今广为人知的经典动力学的Koopman–von Neumann表示框架。本文综述了这一框架在保测遍历动力系统中的若干方面，并将其与近期适用于数据驱动数值实现的Koopman算子和传递算子近似技术联系起来。概括而言，这些方法基于以下表示：(i) 将经典可观测量表示为作用于希尔伯特空间上的算子代数中的元素；(ii) 将经典概率测度表示为该代数状态空间中的元素，并通过提升后的Koopman算子和传递算子分别诱导可观测量和态的动力演化。本文所综述的技术有一个共同主题：利用具有余代数结构的再生核希尔伯特空间（即所谓的“再生核希尔伯特代数”），以辅助经典对象的量子表示；同时利用福克空间构建表达能力强且能保持结构的近似方案（尤其是保持复合算子的正性和乘法性）。本文还讨论了将量子算法用于近似具有纯点谱的系统中观测量的Koopman 演化。

## 1. Introduction

设 $\Phi\colon X \to X$ 是概率空间 $(X, \Sigma, \mu)$ 上的可逆保测变换。经典的算子理论方法可追溯至 Koopman 和 von Neumann 的研究 [51, 52], ，其思路是通过该变换在可观测量空间 $L^p(\mu)$ 上诱导的（线性）作用来研究它。在这些空间上，动力学通过 Koopman（或复合）算子作用，

$$U\colon L^p(\mu) \to L^p(\mu), \quad Uf = f \circ \Phi,$$

它是 $L^p(\mu)$ 的等距同构，其中 $p \in [1, \infty]$。当 $p \in (1, \infty]$ 时，Koopman算子是 Perron–Frobenius（或传递）算子的对偶，

$$P\colon L^q(\mu) \to L^q(\mu), \quad Pf = f \circ \Phi^{-1},$$

其中 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$。令 $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mu$ 表示 $L^p(\mu)$ 与 $L^q(\mu)$ 之间的自然配对，则有

$$\langle Pw, f \rangle_\mu = \langle w, Uf \rangle_\mu, \quad \forall f \in L^p(\mu), \quad \forall w \in L^q(\mu),$$

因此， $\Phi$ 在 $L^p(\mu)$ 中对可观测量的作用，与具有密度 $w = \frac{d\nu}{d\mu} \in L^q(\mu)$ 的绝对连续测度 $\nu \ll \mu$ 之间存在对偶性。

—

算子理论视角是遍历理论中许多基础性结果的核心。例如， $\Phi\colon X \to X$ 当且仅当相对于 $\mu$ 是遍历的， $U$ 在 1 处的特征值是单的，并且它

*Key words and phrases.* Koopman算子、传递算子、量子信息科学、Koopman–冯·诺依曼表示 、再生核希尔伯特空间。

当且仅当 $U$ 除 1 [95]之外没有其他特征值时是弱混合的。与弱混合系统相对应的是具有纯点谱的系统；即那些保测变换，其 Koopman算子 $U$ 的特征子空间之并在 $L^p$中稠密（$\mu$， $p \in [1,\infty)$）。Halmos–von Neumann 定理 [39] 断言， $U$的点谱，记为 $\sigma_p$（$U$），完全刻画了这类系统。更具体地说，定义在标准概率空间上的两个保测、遍历的纯点谱系统~，其 Koopman算子分别为 $U$ 和 $U$，当且仅当 $\sigma_p$（$U$） $= \sigma_p$（$U$）时，在测度论意义下同构~。此外，每个此类系统都同构于紧阿贝尔群上的一个旋转系统，且点谱 $\sigma_p$（$U$）是 $\mathbb{T}^1$的一个子群。在连续时间动力学下，具有适当正则性的保测流 $\Phi^t$： $X \to X$， $t \in \mathbb{R}$在 $L^2$上诱导出一个强连续酉Koopman群 $\{U^t\}_{t\in\mathbb{R}}$（$\mu$， $U^t f = f \circ \Phi^t$）。根据 Stone 关于单参数酉群的定理 [89], ，该群完全由其生成元$V$（$D$（$V$） $\to L^2$（$\mu$））所刻画；该生成元是定义在稠密子空间 $D$（$V$） $\subseteq L^2$（$\mu$）上的斜自伴算子，通过范数极限 $Vf = \lim_{t\to 0}$（$U^t f - f$）$/t$定义，并通过 Borel函数演算给出 $U^t = e^{tV}$。生成元 $V$的一个基本性质是，它作为代数 $D$（$V$）$\cap L^\infty$（$\mu$）上的导子作用，满足莱布尼茨法则，

$$V(fg) = (Vf)g + f(Vg), \quad \forall f, g \in D(V) \cap L^\infty(\mu). \tag{1}$$

事实上，(1) 刻画了 $L^2(\mu)$ 上哪些斜自伴算子是复合算子 [92]的酉Koopman群的生成元。关于遍历理论中的这些及其他算子理论结果，参见 [3, 23, 38] 。

除了在分析研究中发挥重要作用之外，近年来，算子方法还广泛应用于数据分析、预测和控制的数值技术中 [9,11,63,72]。概括而言，这些方法根据沿一条动力学轨迹或一组轨迹采集的一个或多个可观测量的样本，构建 Koopman 算子和/或传递算子的近似，其近似类型取决于具体任务。例如，在预测问题中，自然会考虑在强算子拓扑下对 ˆ$U$ of $U$ 的近似（这里设想 ˆ $Uf \approx Uf$ 是对给定观测量 $f$ 在一个时间步“未来”的预测），由此与统计学习理论产生了富有成效的交汇 [15]。

在特征提取应用中，关注点往往是近似谱数据，例如 $U$、 $P$ 的谱元素和/或生成元 $V$，以及相应的谱测度。这些方法通常需要谨慎选择函数空间，并采用比预测问题更强的近似形式。例如，20 世纪 90 年代早期的研究 [26] 使用乌拉姆方法 [94] ，在 H¨older 连续函数空间中近似一致扩张映射的传递算子 $P$；在该空间中， $P$ 是拟紧的，研究目标是找出兼具高正则性与缓慢相关衰减的可观测量。在 [22] 中，研究者再次使用乌拉姆方法近似传递算子的特征值和特征向量，以识别随机扰动动力系统中近似不变集和近周期集，其中转移函数是连续的。在 Koopman 算子方面，数据驱动技术始于 [64, 67, 68] 的研究：该研究采用谐波平均近似点谱，并将其与不变的周期相空间分割联系起来 $L^2$。论文 [79] 将动态模态分解（DMD）技术 [81, 82] 解释为一种近似 Koopman 特征值及其相应空间投影的方法；这些投影如今称为 Koopman 模态，由此开启了基于高维快照数据进行 Koopman 谱计算的研究。在算法层面，DMD 与主振荡型分析和线性逆建模密切相关；自 20 世纪 80 年代以来，这些方法一直是地球物理科学中广受欢迎的模态分解方法，例如 [40, 75]。

近年来，受到广泛关注的一个问题是：如何一致地表征与混合动力系统相关的 $L^2$ 上 Koopman 算子或传递算子的连续谱；例如，参见 [12, 13, 19, 35, 53]。其他方法则着重采用正则性更高的函数空间，例如解析函数空间 [65,85,97], 、分数阶 Sobolev 空间 [27], 、再生核希尔伯特空间（RKHS） [16, 49, 78],、再生核巴拿赫空间 [42],，以及适应动力学的各向异性巴拿赫空间 [6], ，以检测孤立特征值和共振。关于 Koopman 算子与传递算子的谱逼近技术及其应用的文献，读者可参阅综述论文 [9,11,72],，以及本论文集中其他章节。

**1.1. 算子理论方法与量子力学。** 除了为分析非线性状态空间动力学提供强有力的工具外，算子理论形式体系还为经典理论与量子理论搭建了桥梁。

从代数的角度看，人们为经典动力系统关联一个含幺阿贝尔可观测量代数，动力学通过 Koopman 算子以代数同态的形式作用于该代数。在上述概率空间 $(X,\ \Sigma,\ \mu)$ 的保测可逆变换情形下，一个自然的选择是 $\mathfrak{A} := L^\infty(\mu)$，它是一个冯·诺伊曼代数 [91]（即一个带有巴拿赫空间预对偶的交换 $C^*$-代数，$\mathfrak{A}_* := L^1(\mu)$），其运算为逐点函数乘法和复共轭。Koopman 算子在该代数上的作用是一个
$^*$-同构，

$$U(fg) = (Uf)(Ug), \quad U(f^*) = (Uf)^*, \quad \forall f, g \in \mathfrak{A},$$

其中，莱布尼茨法则 (1) 是这一性质在连续时间情形下的类似形式。

另一方面，在量子理论中，可观测量代数 $\mathfrak{B}$ 是非阿贝尔的——通常将其选为单位元 $C^*$-代数 $\mathfrak{B} \subseteq B(H)$，其中 $H$ 是希尔伯特空间，$B(H)$ 是有界算子空间，并配备算子复合和伴随算子 [77]。再次考虑 $(X, \Sigma, \mu)$ 上的保测可逆变换 $\Phi$，自然可以选取希尔伯特空间 $H = L^2(\mu)$（Koopman算子和传递算子在其上作为酉算子 $U^* \equiv U^{-1} \equiv P$ 作用），并令 $\mathfrak{B} = B(H)$。在这种选择下，$\mathfrak{B}$ 是一个冯 · 诺伊曼代数，其预对偶为 $\mathfrak{B}_* = B_1(H)$（即 $H$ 上配备迹范数的迹类算子空间）。 $H$ 上的酉Koopman算子具有伴随作用 $\mathcal{U}$: $\mathfrak{B} \to \mathfrak{B}$, $\mathcal{U}A = UAU^*$，它仍然是一个 $^*$-同构，

$$\mathcal{U}(AB) = (\mathcal{U}A)(\mathcal{U}B), \quad \mathcal{U}(A^*) = (\mathcal{U}A)^*, \quad \forall A, B \in \mathfrak{B}.$$

现在回想一下，$\mathfrak{A} = L^\infty(\mu)$有一个表示 $\pi$: $\mathfrak{A} \to \mathfrak{B}$ 到 $\mathfrak{B} = B(L^2(\mu))$，它将 $f \in \mathfrak{A}$ 映射为乘法算子 $\pi f \in \mathfrak{B}$，其中$(\pi f)g = fg$。不难验证，$\pi$ 是一个˜ ˜忠实的 $^*$-表示（也就是说，$\pi f = \pi f$当且仅当 $f = f$，并且$(\pi f)^* = \pi(f^*)$，且与 Koopman 演化 $\pi \circ U = \mathcal{U} \circ \pi$相容。这种关系可以用一个交换图表示:

$$\begin{array}{ccc} \mathfrak{A} & \xrightarrow{U} & \mathfrak{A} \\ {\scriptstyle\pi}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle\pi} \\ \mathfrak{B} & \xrightarrow{\mathcal{U}} & \mathfrak{B} \end{array}, \tag{2}$$

这说明，可以将 $\pi$ 视为把 $\mathfrak{A}$中经典可观测量的动力学嵌入到 $\mathfrak{B}$中量子可观测量的动力学中。

通过考察代数 $\mathfrak{A}$ 和 $\mathfrak{B}$的态的演化（即正的单位泛函），可以得到上述观点的对偶图景。令 $\mathfrak{A} = L^\infty(\mu)$，设 $S_*(\mathfrak{A})$ 为 $\mathfrak{A}_* = L^1(\mu)$ 中的概率密度集合；也就是说，$S_*(\mathfrak{A})$ 由满足 $\int_X \sigma \, d\mu = 1$ 的正元 $\sigma \in L^1(\mu)$ 构成。每个$\sigma \in S_*(\mathfrak{A})$ 都诱导出一个态 $\mathbb{E}_\sigma$: $\mathfrak{A} \to \mathbb{C}$，该态实现统计期望，$\mathbb{E}_\sigma f := \int_X \sigma f \, d\mu$。

这类态称为正规态。可以直接验证，在传递算子 $P$ 作用于 $L^1(\mu)$ 下， $\mathfrak{A}_*$ 保持不变，并且对任意 $f \in \mathfrak{A}$ 和 $\sigma \in \mathfrak{A}_*$，对偶关系 $\mathbb{E}_{P\sigma} f = \mathbb{E}_\sigma(Uf)$ 都成立。

在 $\mathfrak{B} = B(H)$ 的量子情形中， $H = L^2(\mu)$，正规态由密度算子诱导；也就是说，它们是 $\mathfrak{B}_* = B_1(H)$ 中具有单位迹的正迹类算子。将所有此类算子的集合记为 $S_*(\mathfrak{B})$。每个 $\rho \in S_*(\mathfrak{B})$ 都会诱导一个正规态 $\mathbb{E}_\rho$： $\mathfrak{B} \to \mathbb{C}$ 定义为 $\mathbb{E}_\rho A = \mathrm{tr}(\rho A)$。与经典情形中的 $\mathbb{E}_\sigma f$ 类似，量 $\mathbb{E}_\rho A$ 是相对于由 $\rho$ 诱导的态而言，量子可观测量 $A$ 的期望值。此外，定义 $\mathcal{P}$： $B_1(H) \to B_1(H)$ 为 $\mathcal{P}A = U^* A U$，对于每个量子可观测量$A \in \mathfrak{B}$ 和密度算子 $\rho \in S_*(\mathfrak{B})$，我们都有对偶关系 $\mathbb{E}_{\mathcal{P}\rho} A = \mathbb{E}_\rho(\mathcal{U}A)$，这与经典情形类似。特别是，可以将 $\mathcal{P}$ 视为传递算子 $P$的量子版本。在量子力学中，分别通过 $\mathcal{U}$ 演化可观测量以及通过 $\mathcal{P}$ 演化态，通常称为海森堡绘景和薛定谔绘景。

为完善经典–量子对应，我们将 $S_*(\mathfrak{A})$ 中的经典概率密度嵌入到 $S_*(\mathfrak{B})$ 中的密度算子，这一嵌入与可观测量的嵌入$\pi$ 具有对偶作用，关键区别在于密度的嵌入是非线性的。具体而言，我们将 $\Gamma\colon S_*(\mathfrak{A}) \to S_*(\mathfrak{B})$ 定义为 $\Gamma(\sigma) = \langle \sigma^{1/2}, \cdot \rangle_H \sigma^{1/2}$；由 $\sigma$ 是概率密度这一事实可知， $\Gamma(\sigma)$ 是一个秩一密度算子，它沿单位向量$\sigma^{1/2} \in H$进行投影。相应的态 $\mathbb{E}_{\Gamma(\sigma)}$ 称为 $\mathfrak{B}$ 的向量态，是纯态的一个例子（即在赋予弱-* 拓扑的 $\mathfrak{B}$的态集合中的极点）。

映射 $\Gamma$ 是将概率密度嵌入量子态的一个例子，此类方法如今统称为 Koopman–von Neumann 嵌入 [4, 62]。自 20 世纪 50 年代首次出现的早期文献 [21, 83, 84], 以来，Koopman–von Neumann 方法已应用于数学和应用领域的多个方向，包括半群理论、统计力学、量子模拟、等离子体动力学、动理学理论和混合经典–量子系统；例如， [44, 45, 57, 70, 88]。该形式体系也已扩展并应用于半经典 [7, 8, 45] 和相对论 [29, 66] 动力学领域。

回到这里讨论的保测例子，映射 $\Gamma$ 交织了经典与量子传递算子 $\Gamma \circ P = \mathcal{P} \circ \Gamma$，并满足与式 (2) 类似的交换图，

$$\begin{array}{ccc} S_*(\mathfrak{A}) & \xrightarrow{P} & S_*(\mathfrak{A}) \\ {\scriptstyle\Gamma}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle\Gamma} \\ S_*(\mathfrak{B}) & \xrightarrow{\mathcal{P}} & S_*(\mathfrak{B}) \end{array} . \tag{3}$$

因此，与可观测量的情形类似，我们有一个动态一致的嵌入，将经典概率密度（表示正规经典统计态）嵌入量子密度算子（表示正规量子态）中。总之，本小节所述经典–量子演化与海森堡–薛定谔绘景之间的对应关系可以表示为

$$\mathbb{E}_\sigma(Uf) = \mathbb{E}_{P\sigma} f = \mathbb{E}_{\Gamma(\sigma)}(\mathcal{U}(\pi f)) = \mathbb{E}_{\mathcal{P}\Gamma(\sigma)}(\pi f), \quad \forall f \in \mathfrak{A}, \quad \forall \sigma \in S_*(\mathfrak{A}). \tag{4}$$

**1.2. 本文的目标与计划。** 本文综述了 Koopman 算子与传递算子技术，这些技术在一定程度上利用了将经典动力学嵌入非交换算子代数的方法，类似于式 (2) 和 (3)。本文所述内容主要取自 [17, 18, 25, 28, 30, 31, 33]。我们以这些方法为例，旨在突出非交换算子空间的一些性质，这些性质对于经典动力系统的分析与近似技术

具有重要意义。具体而言，我们着重讨论：（i）有限维投影下可观测量与代数态的正性保持；以及（ii）谱正则化后生成元的莱布尼茨法则恢复。需要指出的是，关于经典动力学量子模拟方法的全面综述不在本文讨论范围之内。基于截断 Carleman线性化 [14, 58, 98], 矩阵乘积态 [50, 71, 99], Lie–Trotter–Suzuki近似 [59], 薛定谔化 [43], 酉算子线性组合 [1, 5], 量子相位估计 [60], 量子储层计算机 [76], 和迭代量子测量 [2]的方法，是这一领域文献中的最新实例，有兴趣的读者可以参阅相关资料。本文未涉及的另一个重要主题是数值近似。尽管本文不讨论这些方面，但所介绍的所有方法都适用于数据驱动近似方案，并能在适当的大数据极限下提供收敛保证。有关这些技术的细节（主要基于机器学习的核方法和再生核希尔伯特空间理论），可参见上述参考文献。

本文其余部分安排如下。第2节将介绍一种量子力学数据同化（QMDA）方案 [25, 28] ，该方案利用量子密度算子（而非经典情形中的概率密度）来表示关于部分观测动力系统状态的不确定知识。第3节将回顾一类函数空间的性质，这类空间称为再生核希尔伯特代数（RKHAs） [17, 18, 32], ，它们是具有额外代数结构和余代数结构的再生核希尔伯特空间，可用于构建量子力学嵌入。第4节将介绍一些方法，这些方法利用再生核希尔伯特代数的性质，将保测系统的 Koopman 算子/传递算子提升为作用于与多体量子系统相关联的福克空间上的演化算子 [30, 31]。第5节将回顾一种基于再生核希尔伯特代数的技术 [33] ，用于在量子计算机上模拟具有纯点谱的连续时间系统。

除非另有说明，下文均假设状态空间 $X$ 是一个紧致可度量的豪斯多夫空间，动力学 $\Phi\colon X \to X$（或连续时间下的 $\Phi^t\colon X \to X$）是连续且可逆的，并假设 $\mu$ 是一个动力学不变的博雷尔概率测度。上述假设中有些可以放宽，但为避免技术问题，我们在此采用这些假设。我们用 $\iota\colon C(X) \to L^2(\mu)$ 表示从定义在 $X$ 上的连续函数所构成的巴拿赫空间（赋予最大范数）到 $L^2(\mu)$ 的（连续）限制映射。

## 2. 量子力学数据同化

数据同化是一种用于对部分观测的动力系统进行状态估计和预测的框架 [55, 61]。其序贯表述也称为滤波，它基于一种预测—校正流程：利用正向模型演化系统状态的概率分布，直至获得新的观测；此时，在分析步骤中将该概率分布更新为后验分布，以校正模型误差和/或先验分布中的不确定性。自卡尔曼关于滤波的开创性研究以来 [46] （该研究在假设所有分布均为高斯分布的前提下，利用贝叶斯定理执行分析步骤），数据同化已发展成为目标跟踪 [93], 、天气预报[47], 以及许多其他涉及复杂系统的重要应用中不可或缺的工具 [54]。本节将综述一种针对保测动力学 [25, 28] 的数据同化量子力学表述：该表述分别在 $L^1(\mu)$ 中使用概率密度、在 $B_1(H)$、 $H = L^2(\mu)$ 中使用密度算子，以表示经典表述和量子表述中关于系统状态的不确定认知。

**2.1. 贝叶斯滤波的量子力学表述**。设时间步 $n \in \mathbb{N}$ 的滤波概率密度为 $\sigma_n \in L^1(\mu)$。那么，经典数据同化中的预报步骤相当于通过传递算子将 $\sigma_n$ 向前推进，即 $\tilde{\sigma}_{n+1} = P\sigma_n$。这给出了时间步 $n+1$ 的先验密度 $\tilde{\sigma}_{n+1}$，此时系统尚未获得新的观测。我们已经在第 1.1 节看到如何以量子力学方式表示这一过程 $\tilde{\rho}_{n+1} = \mathcal{P}\rho_n$，其中$\rho_n \in B_1(H)$ 是时间步 $n$ 的量子密度算子。特别地，如果我们有

$$\rho_n = \Gamma(\sigma_n), \tag{5}$$

量子态 $\mathbb{E}_{\rho_n}$ 能够对任意经典观测量 $f \in L^\infty(\mu)$ 给出一致的统计预测，其含义见式 (4)。

接下来，我们考虑贝叶斯分析步骤的量子力学表述。在经典情况下，我们将对系统在时间步 $n+1$ 的观测建模为一个事件，即一个可测集 $\Omega_{n+1} \subseteq X$。例如，对于通过观测量 $h$观测的系统：$X \to \mathbb{R}$，使用分辨率为 $\delta > 0$的探测器时，我们有 $\Omega_{n+1} = h^{-1}(I_{n+1})$，其中 $I_{n+1} \subset \mathbb{R}$是一个长度为 $\delta$ 的区间，包含探测器记录的 $h$ 的测量值。可测观测映射 $h$：$X \to Y$取值于潜在的高维观测空间 $Y \subseteq \mathbb{R}^d$ 时，也可以采用类似的处理方式。

令 $\chi_{\Omega_{n+1}}$：$X \to \mathbb{R}$ 为 $\Omega_{n+1}$的特征函数。假设 $\int_X \chi_{\Omega_{n+1}} \tilde{\sigma}_{n+1}\, d\mu > 0$，给定 $\Omega_{n+1}$ 时 $\tilde{\sigma}_{n+1}$ 的贝叶斯后验 $\sigma_{n+1} \in L^1(\mu)$ 为

$$\sigma_{n+1} \equiv \tilde{\sigma}_{n+1}|_{\Omega_{n+1}} = \frac{\tilde{\sigma}_{n+1}\chi_{\Omega_{n+1}}}{\int_X \tilde{\sigma}_{n+1}\chi_{\Omega_{n+1}}\, d\mu}. \tag{6}$$

从代数的角度来看，特征函数$\chi_{\Omega_{n+1}}$ 是 $L^\infty(\mu)$中的一个正元，且其上界为代数单位元$0 \le \chi_{\Omega_{n+1}}(x) \le 1_X(x)$，对 $\mu$-几乎处处的 $x \in X$成立。

在量子理论中，表示经典事件的特征函数的对应物是正算子 $e \in B(H)$，其上界为单位算子 $0 \le e \le \mathrm{Id}$。这类算子称为量子效应。它们构成相应的效应代数，在量子逻辑和量子概率的表述中发挥着核心作用；例如， [37]。

对于效应 $e \in B(H)$和密度算子 $\rho \in B_1(H)$，若满足$\mathrm{tr}(\rho e) > 0$，则后验密度算子 $\rho_n|_e$ 定义为

$$\rho|_e = \frac{\sqrt{e}\rho\sqrt{e}}{\mathrm{tr}(\sqrt{e}\rho\sqrt{e})}, \tag{7}$$

其中 $\sqrt{\cdot}$ 表示正算子的平方根。直观地说，式（7）可以视为非交换贝叶斯规则。

在我们的数据同化框架中，可以将经典事件以量子力学的方式表示为一种效应，它通过相应的特征函数充当乘法算子——具体而言，式（6）中的事件 $\Omega_{n+1}$ 表示为效应 $e_{n+1} \in B(H)$，其中 $e_{n+1}f = \chi_{\Omega_{n+1}} f$。应用贝叶斯公式（7）后，得到由在时间步 $n+1$观测到的事件 $\Omega_{n+1}$ 诱导的后验密度算子 $\rho_{n+1} = \tilde{\rho}_{n+1}|_{e_{n+1}}$。很容易验证，在式（5）下， $\rho_{n+1}$ 与经典后验分布 $\sigma_{n+1}$一致；也就是说，$\Gamma(\sigma_{n+1}) = \rho_{n+1}$。

对此方法的一种推广是采用核函数 $\kappa$: $Y \times Y \to [0,1]$，其对应的特征映射 $\varphi$: $Y \to H$ 定义为 $\varphi(y) = \kappa(y, h(\cdot))$。将 $\varphi(y)$ 提升为乘法算子，便得到一个效应值特征映射 $\varepsilon$: $Y \to B(H)$，其中 $\varepsilon(y)f = \varphi(y)f$。令 $y_{n+1} = h(x_{n+1}) \in Y$ 表示在时间步 $n+1$ 观测到的数据，其对应的经典状态为 $x_{n+1} \in X$，则后验密度算子$\rho|_{\varepsilon(y_{n+1})}$与通过似然函数 $\varepsilon(y_{n+1})$对 $\tilde{\sigma}_{n+1}$ 进行条件化所得到的后验密度 $\sigma_{n+1}$ 一致；即， $\sigma_{n+1} = \tilde{\sigma}_{n+1}\varphi(y_{n+1})/Z$，其中 $Z = \int_X \varphi(y_{n+1})\, d\mu$。

采用上述任一种方法，反复执行前文所述的量子力学预测和分析步骤，会得到一个密度算子序列 $\rho_1$，$\rho_2$，……，它属于 $B_1(H)$，并且与在经典贝叶斯滤波下针对观测数据 $y_n = h(x_n)$ 所得到的概率密度序列 $\sigma_1$，$\sigma_2$，……一致（也就是说，对于每个 $n \in \mathbb{N}$，关系式 (5) 都成立）。这些观测数据由经典动力学轨迹 $x_{n+1} = \Phi(x_n)$ 所诱导，概率密度序列属于 $L^1(\mu)$。

2.2. **保持正性的投影**。除特殊情况外（例如，不变测度 $\mu$支撑在一条有限周期轨道上），第 2.1 节所述的量子力学系统是无限维的。为了构建实用的数据同化算法，我们将该系统投影到有限维空间。

设 $\Pi_0, \Pi_1, \ldots$ 为作用于 $H$ 的一列有限秩正交投影，并强收敛于单位算子，即 $\lim_{L\to\infty} \Pi_L f = f$，对每个 $f \in H$均成立。一个典型例子是，可由 $H$的标准正交基 $\{\phi_l\}_{l=0}^{\infty}$构造族 $\{\Pi_L\}_{L=0}^{\infty}$；也就是说，$\Pi_L f = \sum_{l=0}^{L-1} \langle \phi_l, f\rangle_H \phi_l$。为便于具体讨论，以下均假设选取了这样一族投影。设 $H_L \subset H$ 为 $\Pi_L$的值域。算子代数 $B(H_L)$ 的维数为 $L^2$，且与由 $L \times L$复矩阵构成的代数 $\mathbb{M}_L(\mathbb{C})$ 同构。特别地，$A \in B(H_L)$ 可表示为矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{M}_L(\mathbb{C})$，其元素为$A_{ij} = \langle \phi_i, \phi_j\rangle_H$。代数 $B(H_L)$ 也可视为 $B(H)$ 的子代数，由所有满足 $\ker A \supseteq H_L$ 且 $\operatorname{ran} A \subseteq H_L$的元素 $A$组成。

利用投影 $\Pi_L$，我们可以通过线性映射 $\mathbf{\Pi}_L$: $B(H) \to B(H)$，将算子 $A \in B(H)$ 压缩为 $B(H_L)$ 中的有限秩算子，其中 $A_L = \mathbf{\Pi}_L A := \Pi_L A \Pi_L$。具体而言，我们有投影 Koopman 算子 $U_L = \mathbf{\Pi}_L U$、投影乘法算子（Toeplitz 算子）$\pi_L f = \mathbf{\Pi}_L(\pi f)$，以及效应值特征映射 $\varepsilon_L = \mathbf{\Pi}_L \circ \varepsilon$。我们还有投影量子密度算子 $\Gamma_L(\sigma) = \mathbf{\Pi}_L(\Gamma(\sigma))/\operatorname{tr}(\mathbf{\Pi}_L(\Gamma(\sigma)))$；当 $\mathbf{\Pi}_L(\Gamma(\sigma)) \neq 0$ 时，这些算子都有定义。所有这些映射都在适当的算子拓扑下收敛；具体而言，$U_L$、$\pi_L f$ 和 $\varepsilon_L(y)$ 在 $B(H)$ 的强拓扑下收敛，而对于任意概率密度 $\sigma \in L^1(\mu)$，$\Gamma_L(\sigma)$ 在 $B_1(H)$ 的范数拓扑下收敛。

根据这些定义，QMDA 的有限维形式本质上类似于第 2 节中的无限维方案：将 $B(H)$ 中的所有算子替换为利用 $\mathbf{\Pi}_L$ 得到的、位于 $B(H_L)$ 中的压缩版本。该投影的一个关键性质是正性保持；也就是说，$\mathbf{\Pi}_L$ 将 $B(H)$ 中的正元映射为 $B(H_L)$ 中的正元。这与对 $H$ 的正交投影不同，后者通常无法保持函数的正性（例如，对正函数 $f$ 进行$L^2$ 正交投影 $\Pi_L f$，可能会产生振荡并使函数取负值）。实际上，将经典数据同化嵌入无限维算子代数 $B(H)$之前 再投影到有限维，使我们能够利用算子非交换空间的性质（即算子共轭下的正性保持），从而构造出具有结构保持性质的有限维近似，而这些性质无法通过在经典层面进行近似获得。在这方面，我们的方法与一种理念相契合：尽可能推迟离散化；这一理念已在贝叶斯逆问题的背景下得到倡导 [90]。

尽管在无限维极限（$L \to \infty$）下具有保正性且渐近相容，有限维量子力学数据同化方案在结构上仍与其无限维对应方案存在某些差异。从某种意义上说，有限维方案比其底层的无限维系统更具“量子力学”特性：

- 乘法算子 $\{\pi f : f \in L^\infty(\mu)\}$ 构成$B(H)$的一个（极大）阿贝尔子代数。相比之下，投影乘法算子 $\pi_L f$ 通常不对易，并在 $B(H_L)$中生成一个非交换代数。

• 一般而言，投影量子态 $\Gamma_L(\sigma)$并非经典概率密度函数经由 $\Gamma$映射得到的像。也就是说，一般不存在概率密度 $\sigma_L \in L^1(\mu)$，使得 $\Gamma_L(\sigma)$等于 $\langle \sigma_L^{1/2}, \cdot\rangle_H \sigma_L^{1/2}$。事实上，我们有 $\Gamma_L(\sigma) \propto \langle \psi_L, \cdot\rangle_H \psi_L$，其中$\psi_L = \Pi_L \sigma^{1/2}$ 扮演量子力学波函数的角色，但不一定为正。

• 投影的 Koopman 算子 $U_L$ 并非复合算子。因此，映射$f \mapsto U_L f$ 不能解释为可观测量在经典流下的演化，$\sigma \mapsto U_L^* \sigma$也不能解释为密度的演化。相较之下，$A \mapsto U_L A U_L^*$是作用于 $B(H)$ 上的定义良好的量子操作（即完全正映射，其对偶映射不保持迹递增；见 [41]），与开放量子系统相关。如果 $H_L$ 恰好是 $U$ 下的不变子空间，那么 $U_L$ 便定义了一个量子信道（即封闭量子系统），但通常并非如此。如果关注的是保持 $H_L$ 上近似库普曼动力学的幺正性，那么可以用文献中已有的一种技术得到的幺正近似来替代算子压缩 $U \mapsto \Pi_L U \Pi_L$；例如，[12, 19, 34, 35]

## 3. Reproducing kernel Hilbert algebras

我们将回顾本章后续各节中所采用的再生核希尔伯特代数的定义、性质与构造。关于这些对象的详细分析可参见 [32]。关于再生核希尔伯特空间理论的论述，请参见 [74, 87]。

**3.1. 定义与基本构造**。设 $\mathcal{H}$ 是定义在集合 $X$ 上的复值函数再生核希尔伯特空间，其再生核为 $k$: $X \times X \to \mathbb{C}$，内积为 $\langle \cdot, \cdot\rangle_{\mathcal{H}}$。我们用 $k_x := k(x, \cdot)$ 表示 $x \in X$ 处的核截面，并用 $\delta_x$: $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 表示相应的逐点求值泛函，$\delta_x f = f(x) = \langle k_x, f\rangle_{\mathcal{H}}$。我们还令 $\varphi$: $X \to \mathcal{H}$ 表示典范特征映射，$\varphi(x) = k_x$。

**定义 1**（再生核希尔伯特代数）。集合 $X$ 上的再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 称为再生核希尔伯特代数（*RKHA*），如果 $k_x \mapsto k_x \otimes k_x$、$x \in X$可延拓为有界线性映射 $\Delta$: $\mathcal{H} \to \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$。

因此

$$\langle k_x, \Delta^*(f \otimes g)\rangle_{\mathcal{H}} = \langle \Delta k_x, f \otimes g\rangle_{\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}} = \langle k_x \otimes k_x, f \otimes g\rangle_{\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}} = \langle k_x, f\rangle_{\mathcal{H}} \langle k_x, g\rangle_{\mathcal{H}} = f(x)g(x),$$

可以推出，$\Delta^*$ 是实现逐点乘法的有界线性映射。因此，$\mathcal{H}$ 同时是希尔伯特函数空间和交换代数，其中的运算为逐点函数乘法。令 $\pi$: $\mathcal{H} \to B(\mathcal{H})$为将 $f \in \mathcal{H}$映射到乘法算子（$\pi f$）: $g \mapsto fg$的乘子表示，可以直接验证，算子范数 $\|f\|_{\mathrm{op}} := \|\pi f\|_{B(\mathcal{H})}$在 $\mathcal{H}$上生成的拓扑比希尔伯特空间范数生成的拓扑更粗，并且满足

$$\|fg\|_{\mathrm{op}} \le \|f\|_{\mathrm{op}} \|g\|_{\mathrm{op}}.$$

因此，$\mathcal{H}$ 关于逐点函数乘法构成巴拿赫代数。¯当 $k$ 是实值核时，我们还可以赋予 $\mathcal{H}$ 逐点复共轭 *: $f \mapsto f$，使其成为巴拿赫 * 代数。当常值函数 $\mathbf{1}$: $X \to \mathbb{C}$ 满足 $\mathbf{1}(x) = 1$ 属于 $\mathcal{H}$时，$\mathcal{H}$ 是以 $\mathbf{1}$为单位元的含幺代数。此外，希尔伯特空间范数与算子范数等价，因为 $\|f\|_{\mathcal{H}} \le \|\mathbf{1}\|_{\mathcal{H}} \cdot \|f\|_{\mathrm{op}}$，即

$$\frac{1}{\|\mathbf{1}\|_{\mathcal{H}}} \|f\|_{\mathcal{H}} \le \|f\|_{\mathrm{op}} \le \|\Delta\|_{B(\mathcal{H})} \|f\|_{\mathcal{H}}.$$

除了具有巴拿赫代数结构外，再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}$ 还是一个余交换、余结合的余代数，其余乘算子为 $\Delta\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$。特别地，$\Delta$的余结合性，即$(\Delta \otimes \mathrm{Id}) \circ \Delta = (\mathrm{Id} \otimes \Delta) \circ \Delta$，是由乘法的结合性（即 $\Delta^*$）推得的一项重要性质。该性质使我们能够将 $\Delta$ 从 $\mathcal{H}$ 扩展到张量积空间 $\mathcal{H}^{\otimes(n+1)}$, $n \in \mathbb{N}$，其定义为 $\Delta_n\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H}^{\otimes(n+1)}$

$$\Delta_1 = \Delta, \quad \Delta_n = (\Delta \otimes \mathrm{Id}^{\otimes(n-1)})\Delta_{n-1} \quad \text{for } n > 1.$$

接下来，令 $\sigma(\mathcal{H})$ 表示 RKHA $\mathcal{H}$ 作为巴拿赫代数的谱，即由（自动连续的）乘法线性泛函 $\chi\colon \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 构成的集合，

$$\chi(fg) = (\chi f)(\chi g), \quad \forall f, g \in \mathcal{H},$$

赋予 $\mathcal{H}^* \supset \sigma(\mathcal{H})$ 的弱-$^*$ 拓扑。对每个 $x \in X$，逐点评价泛函 $\delta_x = \langle \varphi(x) \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ 都是谱中的元素，由此诱导出映射 $\hat{\varphi}\colon X \to \sigma(\mathcal{H})$，其中 $\hat{\varphi}(x) = \delta_x$。若特征映射 $\varphi$ 是单射，则 $\hat{\varphi}$也是单射，并且谱 $\sigma(\mathcal{H})$包含一个以子集形式嵌入其中的 $X$ 副本。

某些含幺再生核希尔伯特代数具有一项有用性质，即映射 $\hat{\varphi}$具有双射性。该性质意味着（例如，[17, 推论 7]），每个元素 $f \in \mathcal{H}$ 的谱 $\sigma_{\mathcal{H}}(f)$（即满足 $f - z$ 在 $\mathcal{H}$中没有乘法逆元的复数$z$ 的集合）等于其值域 $\sigma_{\mathcal{H}}(f) = f(X)$。这进而使得可以对 $\mathcal{H}$中的函数使用全纯函数演算，

$$a(f) = \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma \frac{a(z)}{z - f}\, dz,$$

其中，$a\colon D \to \mathbb{C}$是定义域 $D \subseteq \mathbb{C}$上的任意全纯函数，该定义域包含 $\sigma_{\mathcal{H}}(f)$，而 $\Gamma$是围绕 $\sigma_{\mathcal{H}}(f)$的适当若尔当曲线并集。特别地，对于满足$\xi(x) \geq \varepsilon > 0$ 对所有 $x \in X$均成立的每个 $\xi \in \mathcal{H}$，根据全纯函数演算，$n$次根 $\xi^{1/n}$ 对于每个 $n \in \mathbb{N}$都属于 $\mathcal{H}$。将此类根良好地定义为 $\mathcal{H}$ 的元素，在第4节讨论的方案中发挥着关键作用。

**3.2. 再生核希尔伯特代数的示例**。这里考虑的主要示例类建立在紧致阿贝尔群 $G$上。令 $G$ 为 $G$ 的庞特里亚金对偶，并令 $\mu$、$\hat{\mu}$ 分别表示 $G$、$\hat{G}$上的哈尔测度，其中 $\mu$ 已归一化为概率测度。我们用 $\mathcal{F}\colon L^1(G) \to C_0(\hat{G})$ 和 $\hat{\mathcal{F}}\colon L^1(\hat{G}) \to C_0(G)$ 表示傅里叶变换，并用 $*\colon L^1(\hat{G}) \times L^1(\hat{G}) \to L^1(\hat{G})$ 表示对偶群上的卷积：

$$(\mathcal{F}f)(\gamma) = \int_G f(x)\gamma(-x)\, d\mu(x), \quad (\hat{\mathcal{F}}\hat{f})(x) = \int_{\hat{G}} \hat{f}(\gamma)\gamma(x)\, d\hat{\mu}(x),$$

$$(\hat{f} * \hat{g})(\gamma) = \int_{\hat{G}} \hat{f}(\gamma')g(\gamma - \gamma')\, d\hat{\mu}(\gamma').$$

$\hat{}$ 注意，由于 $G$ 的紧致性，对偶群 $G$ 具有离散拓扑，且 $\hat{\mu}$ 是计数测度。有关群上的傅里叶分析的更多细节，请参见例如 [80]。

根据博赫纳定理，对于每个正函数 $\lambda \in L^1(\hat{G})$，平移不变函数 $\hat{k}\colon G \times G \to \mathbb{C}$定义为 $k(x, x') = (\mathcal{F}\lambda)(x - x')$，是一个连续的正定核，并具有与之关联的连续函数再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$。由于 $G$是紧的，空间 $\mathcal{H}$ 可以通过对傅里叶系数的衰减条件来刻画，

$$\mathcal{H} = \left\{ f \in C(G) : \sum_{\gamma \in \hat{G}} \frac{|\mathcal{F}f(\gamma)|^2}{\lambda(\gamma)} < \infty \right\}.$$

此外，根据 Mercer 定理，再生核 $k$ 可以表示为以下一致收敛级数

$$k(x,x') = \sum_{\gamma\in\hat{G}} \lambda(\gamma)\overline{\gamma(x)}\gamma(x'), \quad \forall x,x' \in G,$$

and

$$\{\psi_\gamma := \sqrt{\lambda(\gamma)}\gamma\}_{\lambda(\gamma)\neq 0} \tag{8}$$

是 $\mathcal{H}$ 的标准正交基。若 $\lambda$ 是严格正函数，则 $\mathcal{H}$ 是 $C(G)$ 的稠密子空间（等价地， $k$ 是所谓的通用核 [86]），且相应的特征映射 $\varphi\colon G \to \mathcal{H}$ 是单射。

**ˆ定义 2**。若严格正、可求和函数 $\lambda\colon G \to \mathbb{R}_{>0}$ 满足次卷积的条件，则称其为次卷积函数：ˆ存在 $C > 0$，使得 $\lambda * \lambda \leq C\lambda$ 在 $G$ 上逐点成立。

在 Beurling 卷积代数的背景下，次卷积函数的研究历史悠久，例如 [24,36,48]。在 [32], 中，由次卷积函数 $\lambda$ 诱导的再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 被证明是再生核希尔伯特代数（RKHA），且 $\Delta$ 很容易被对角化

$$\Delta\psi_\gamma = \sum_{\alpha+\beta=\gamma} \sqrt{\frac{\lambda(\alpha)\lambda(\beta)}{\lambda(\gamma)}}\psi_\alpha \otimes \psi_\beta, \quad \gamma \in \hat{G}.$$

$G = \mathbb{T}^N$、ˆ$G \cong \mathbb{Z}^N$ 的标准例子包括具有次指数衰减的函数族 $\{\lambda_\tau\colon \mathbb{Z}^N \to \mathbb{R}_{>0}\}_{\tau>0}$，其中

$$\lambda_\tau(j) = \prod_{i=1}^{N} e^{-\tau|j_i|^p} \tag{9}$$

对固定的 $p \in (0,\ 1)$。对于每个这样的 $p$，我们都有一个由马尔可夫核族 $k_\tau$生成的含幺再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$ 一参数族，即，

$$k_\tau(x,x') \geq 0, \quad \int_G k_\tau(x,\cdot)\, d\mu = 1, \quad \forall x,x' \in X;$$

见 [17]。此外，在这种情形下，对偶群 ˆ$G$ 的元素 $\gamma$ 是标准的傅里叶函数，$\gamma_j(x) = e^{ij\cdot x}$，其中某个 $j \in \mathbb{Z}^N$ 使用参数化 $x \in [0, 2\pi)^N$ 表示 $N$ 维环面。

**注 3**。作为一个涉及非紧阿贝尔群的例子， $G = \mathbb{R}^N$，考虑 ˆ$G \cong \mathbb{R}^N$ 上的以下权函数，

$$\lambda^{-1}(x) = e^{\tau|x|^p}(1+|x|)^s(\ln(e+|x|))^t. \tag{10}$$

这些权函数在以下任一条件下是次卷积的： $0 < p < 1$、 $\tau > 0$、 $s,\ t \in \mathbb{R}$，或 $p \in \{0,1\}$ 且 $s > N$[24,36]。

**定义 4**。若函数 $\lambda\colon$ˆ $G \to \mathbb{R}_{>0}$ 满足盖尔范德–雷科夫–希洛夫（*GRS*）条件，则称其满足

$$\lim_{n\to\infty} \lambda(n\gamma)^{1/n} = 1, \quad \forall \gamma \in \hat{G},$$

以及 贝尔林–多马（*BD*）条件（如果

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\ln\big(\lambda^{-1}(n\gamma)\big)}{n^2} < \infty, \quad \forall \gamma \in \hat{G}.$$

对于 $\tau > 0$, $p \in (0,1)$，族 (9) 和 (10) 中的函数 $s,t \geq 0$ 同时满足 GRS 条件和 BD 条件（此外还是次卷积的），这对 $\mathcal{H}_\tau$ 有两点影响。首先，GRS 条件意味着相应的映射 $\hat{\varphi}_\tau\colon G \to \sigma(\mathcal{H}_\tau)$ 是一个同胚 [18,32]。其次，如 [32], 所示，BD 条件意味着 $\mathcal{H}_\tau$ 包含支撑包含于任意具有非空内部的紧集中的函数。这些条件对于在 $\mathbb{T}^N$ 或 $\mathbb{R}^N$ 的一般紧豪斯多夫子空间 $X$ 上构造再生核希尔伯特代数至关重要（例如，动力系统的吸引子）。我们可以将范围限制在 $\mathcal{H}_\tau(X) := \overline{\operatorname{span}}\{k_{\tau,x} \mid x \in X\}$，它也是一个具有余乘法 $\Delta|_{\mathcal{H}_\tau(X)}$ 的再生核希尔伯特代数。更重要的是，作为巴拿赫代数，$\mathcal{H}_\tau(X)$ 的谱是 $X$，因此，$\sigma_{\mathcal{H}_\tau(X)}(f) = f(X)$。这使得我们能够使用第 3.1 节所述的 $\mathcal{H}_\tau(X)$ 中函数的全纯函数演算。请注意，紧支撑函数的存在性会自动意味着 $\mathcal{H}_\tau(X)$ 包含非解析元素。关于违反 GRS 条件时解析延拓的示例，见 [18, 第 3] 节。

## 4. Fock Space Amplification

放大是算子代数和表示论中的常用技术。与动力系统算子方法相关的经典例子包括 Stinespring 膨胀定理和 Sz.-Nagy 膨胀定理。前者将 $C^*$-代数之间的完全正映射（包括量子信道；见第2节）分解为通过输入 $C^*$-代数在辅助希尔伯特空间上的表示（“提升”）实现的映射；后者则将希尔伯特空间上的压缩算子提升为更大希尔伯特空间上的酉算子 [73]。本节中，我们采用福克空间构造，以保结构的方式将作用于再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$ 上的 Koopman算子的谱正则化近似 $U_\tau^t$ 嵌入更高维空间。我们将在第 4.3 节看到，这种放大将恢复莱布尼茨法则。在量子场论中，Fock 空间通过一种称为二次量子化 [56]的框架来模拟多体量子系统。因此，自然可以将下文介绍的方法视为把经典动力学嵌入场论系统。

**4.1. 福克空间构造**。我们将考察由福克空间构造得到的两种不同的扩张。由于张量代数 $T^{\otimes}(\mathcal{H}_\tau) := \mathbb{C} \oplus \mathcal{H}_\tau \oplus \mathcal{H}_\tau^{\otimes 2} \oplus \dots$ 是以 $\mathcal{H}_\tau$ 为生成元的自由代数，我们可以将乘法算子表示为算子的张量积，并通过商恢复 $\mathcal{H}_\tau$ 的代数结构。令 $F(\mathcal{H}_\tau) = T^{\otimes}(\mathcal{H}_\tau)$ 表示全福克空间，该空间在内积下是闭的

$$\begin{aligned} \langle a, b\rangle_{F(\mathcal{H}_\tau)} &= \bar{a}b, \quad a,b \in \mathbb{C}, \\ \langle a, f\rangle_{F(\mathcal{H}_\tau)} &= 0, \quad a \in \mathbb{C}, \quad f \in \mathcal{H}_\tau, \\ \langle f_1 \otimes \cdots \otimes f_n, g_1 \otimes \cdots \otimes g_n\rangle_{F(\mathcal{H}_\tau)} &= \prod_{i=1}^{n} \langle f_i, g_i\rangle_{\mathcal{H}_\tau}, \quad f_i, g_i \in \mathcal{H}_\tau. \end{aligned} \tag{11}$$

我们还可以定义加权对称福克空间 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$，它是对称张量代数 $T^{\vee}(\mathcal{H}_\tau)$ 的闭包：$= \mathbb{C} \oplus \mathcal{H}_\tau \oplus \mathcal{H}_\tau^{\vee 2} \oplus \dots$ 关于满足以下条件的内积（参见式 (11)）

$$\begin{aligned} \langle a, b\rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} &= \bar{a}b, \quad a,b \in \mathbb{C}, \\ \langle a, f\rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} &= 0, \quad a \in \mathbb{C}, \quad f \in \mathcal{H}_\tau, \\ \langle f_1 \vee \cdots \vee f_n, g_1 \vee \cdots \vee g_n\rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} &= \frac{w^2(n)}{n!^2} \sum_{\sigma,\sigma' \in S_n} \prod_{i=1}^{n} \langle f_{\sigma(i)}, g_{\sigma'(i)}\rangle_{\mathcal{H}_\tau}, \quad f_i, g_i \in \mathcal{H}_\tau, \end{aligned}$$

对于严格正权函数 $w$: $\mathbb{N}_0 \to \mathbb{R}_{>0}$。这里，$\vee$ 表示对称张量积，定义为取平均

$$f_1 \vee \cdots \vee f_n = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} f_{\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes f_{\sigma(n)}, \quad f_i \in \mathcal{H}_\tau,$$

在 $n$元置换群 $S_n$上，而 $\mathcal{H}_\tau^{\vee n}$是由对称张量构成的 $\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}$的闭子空间。映射 $f_1 \otimes \cdots \otimes f_n \mapsto f_1 \vee \cdots \vee f_n$ 通过线性延拓定义了从 $\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}$到 $\mathcal{H}_\tau^{\vee n}$的正交投影。我们用 $\Omega \equiv 1 \in \mathbb{C} \subset F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 表示福克空间的“真空”向量。按照惯例，我们总是选择 $w$，使得 $w(0) = 1$。

在 [31], 中证明了，若 $w^{-2}$ 可求和且为次卷积的，

$$w^{-2} \in \ell^1(\mathbb{N}_0), \quad w^{-2} * w^{-2}(n) \le C w^{-2}(n),$$

$F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 关于对称张量积构成一个含幺巴拿赫代数，其范数$|||\cdot|||_{F_w(\mathcal{H}_\tau)}$ 与希尔伯特空间范数等价，

$$|||f \vee g|||_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} \le |||f|||_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} |||g|||_{F_w(\mathcal{H}_\tau)}, \quad \forall f, g \in F_w(\mathcal{H}_\tau),$$

并且 $\Omega$ 是其单位元。此外，与 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 相关联的还有一个余乘积，即一个有界算子$\Delta$: $F_w(\mathcal{H}_\tau) \to F_w(\mathcal{H}_\tau) \otimes F_w(\mathcal{H}_\tau)$，满足

$$\Delta^*(f \otimes g) = f \vee g.$$

在诸多可能的构造中，本文采用次指数族中的权函数

$$w(n) = e^{\sigma n^p}, \quad \sigma > 0, \quad p \in (0, 1).$$

请回想，这族权函数也曾用于构造第 3.1 节中的再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$，不过一般而言，用于构造 $\mathcal{H}_\tau$ 和 $F_w$（$\mathcal{H}_\tau$）的权函数彼此独立。

加权 Fock 空间的巴拿赫代数结构尤其有用，因为（正如我们将在第 4.3 节中看到的）这个巴拿赫代数的谱给出了近似 Koopman 动力学的一组空间实现。为此，我们可以将 $F_w$（$\mathcal{H}_\tau$）的谱（即非零乘性泛函 $\chi$: $F_w$（$\mathcal{H}_\tau$）$\to \mathbb{C}$ 的集合）刻画为集合

$$\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau)) = \left\{ \chi = \langle \xi, \cdot \rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} : \xi = \sum_{n=0}^{\infty} w^{-2}(n) \eta^{\vee n} : \eta \in (\mathcal{H}_\tau)_{R_w} \right\} \subset F_w(\mathcal{H}_\tau)^*,$$

其中，$R_w$ 是级数 $\sum_{n=1}^{\infty} w^{-2}$（$n$）$z^n$，$z \in \mathbb{C}$ 的收敛半径。由于 $w \in \ell^2$（$\mathbb{N}$），我们有 $R_w \ge 1$，而上述定义中的可取向量集合 $\eta$ 包含 $\mathcal{H}_\tau$ 的单位球。黎斯表示定理给出了谱的一种对偶实现，称为余谱，

$$\sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau)) = \left\{ \xi \in F_w(\mathcal{H}_\tau) : \langle \xi, \cdot \rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} \in \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau)) \right\} \subset F_w(\mathcal{H}_\tau).$$

等价地，我们有：$\sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 是 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 的子集，由满足$\Delta\xi = \xi \otimes \xi$的元素 $\xi$组成。我们分别赋予 $\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 和 $\sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ $F_w(\mathcal{H}_\tau)$上的弱-$^*$拓扑$^*$以及 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$上的弱拓扑。赋予这些拓扑后，它们成为紧豪斯多夫空间。

加权 Fock 空间 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 可通过 Gelfand 映射 $\Gamma(\xi)(\chi) = \chi(\xi)$ 实现为定义在$C(\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau)))$ 上的连续函数构成的再生核希尔伯特代数；参见 [32]。此外，$F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 还具有一个相关的

特征映射 $\tilde{\varphi}_\tau\colon X \to F_w(\mathcal{H}_\tau)$，其中

$$\tilde{\varphi}_\tau(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^{-2}(n)}{\varpi_\tau^n} \varphi_\tau(x)^{\vee n},$$

$\varphi_\tau\colon X \to \mathcal{H}_\tau$ 是与 $\mathcal{H}_\tau$ 相关联的典范特征映射（见第 3.1 节），而 $\varpi_\tau$ 是一个常数，其选取使得 $\varpi_\tau \geq \sup_{x\in X}\|\varphi_\tau(x)\|_{\mathcal{H}_\tau}$。因此，$\tilde{\varphi}_\tau$的值域落在余谱$\sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau))$中，这意味着 $\hat{}\varphi_\tau\colon X \to \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$，其中

$$\hat{\varphi}_\tau(x) = \langle \tilde{\varphi}_\tau(x), \cdot \rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)}$$

是一个从状态空间映射到加权 Fock 空间谱的良定义映射。我们将状态空间在此映射下的像记为 $X_\tau = \hat{}\varphi_\tau(X)$。

4.2. **谱近似**。我们希望利用再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$ 及其相关 Fock 空间的泛函分析性质，构造酉 Koopman 动力学在$H = L^2(\mu)$上的嵌入。然而，对于一般的动力流 $\Phi^t\colon X \to X$ 和定义在 $X$ 上的再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_\tau$，Koopman算子 $f \mapsto f \circ \Phi^t$ 未必能良定义为从 $\mathcal{H}_\tau$ 到其自身的线性映射（更不用说酉映射）。即使 $U^t\colon \mathcal{H}_\tau \to \mathcal{H}_\tau$是一个良定义的酉算子，从 $L^2$ 情形获得的直觉也表明，对于足够复杂的动力学，它会是一个具有非平凡连续谱、不可对角化的算子，从而妨碍依赖其特征分解的计算（例如，见第 5 节）。为克服这一局限，我们对斜自伴生成元 $V\colon D(V) \to H$ 进行正则化，以构造一族逼近算子 $W_\tau\colon D(W_\tau) \to \mathcal{H}_\tau$，它们是定义在再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$上的斜自伴算子。这些算子可对角化，并生成酉算子 $U_\tau^t = e^{tW_\tau}$，在适当意义下逼近Koopman算子 $U^t\colon H \to H$。

沿用第 3.1 节的记号，令 $K_\tau\colon H \to \mathcal{H}_\tau$ 为与 $H_\tau$ 的再生核相关联的（希尔伯特–施密特）积分算子，$K_\tau f = \int_X k_\tau(\cdot, x) f(x)\, d\mu(x)$。根据再生核希尔伯特空间的标准结果，$K_\tau^*\colon \mathcal{H}_\tau \to H$ 实现了限制映射，将 $\mathcal{H}_\tau$ 中逐点定义的函数映射到其在 $H$ 中对应的等价类。定义 $G_\tau\colon H \to H$ 为 $G_\tau = K_\tau^* K_\tau$，我们将假设再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_\tau$ 的构造方式使得 $\{G_\tau\}_{\tau>0} \cup \mathrm{Id}$ 构成一个马尔可夫算子半群，且 $\operatorname{ran} G_\tau \subset D(V)$。特别地，族 $\{G_\tau\}_{\tau>0}$ 是 $H$ 上的近似单位，对每个 $f \in H$ 都有 $\lim_{\tau\to 0^+}\|G_\tau f - f\|_H = 0$。还可以证明，$K_\tau$ 具有极分解 $K_\tau = T_\tau G_\tau$，其中 $T_\tau\colon H \to \mathcal{H}_\tau$ 是满足 $T_\tau f = K_{\tau/2} f$ 的部分等距算子。有关构造具有这些性质的核族的更多细节，参见例如 [30, 31]。

接下来，我们将用到以下关于斜自伴算子收敛的概念；例如，[10, 20]。

**定义 5.** 设 $A\colon D(A) \to \mathbb{H}$ 是希尔伯特空间 $\mathbb{H}$ 上的斜自伴算子，且 $A_\tau\colon D(A_\tau) \to \mathbb{H}$ 是由 $\tau$索引的一族斜自伴算子，其预解式分别为 $R_z(A) = (zI - A)^{-1}$ 和$R_z(A_\tau) = (zI - A_\tau)^{-1}$，其中复数 $z$属于 $A$和 $A_\tau$的预解集。

(1) 若对某个（从而对每个）$z \in \mathbb{C} \setminus i\mathbb{R}$，预解式 $R_z(A_\tau)$ 强收敛到 $R_z(A)$，则称族 $A_\tau$ 在强预解式意义下于 $\tau \to 0^+$ 时收敛到 $A$；也就是说，对每个 $f \in \mathbb{H}$，$\lim_{\tau\to 0^+} R_z(A_\tau) f = R_z(A) f$。(2) 若对每个$t \in \mathbb{R}$，酉算子 $e^{tA_\tau}$ 强收敛到 $e^{tA}$，则称族 $A_\tau$ 在强动力学意义下于 $\tau \to 0^+$ 时收敛到 $A$；也就是说，对每个 $f \in \mathbb{H}$，$\lim_{\tau\to 0^+} e^{tA_\tau} f = e^{tA} f$。

例如，[20, 命题 10.18], 表明，强预解式收敛与强动力学收敛是等价的概念。就我们的目的而言，这意味着，如果一族斜自伴算子 $V_\tau$ 在 $H$ 上以 $V$强预解式意义收敛于 Koopman 生成元，那么

由这些算子 $e^{tV_\tau}$ 生成的酉演化群会一致地逼近由 $V$ 生成的 Koopman 群 $U^t = e^{tV}$。强预解式收敛与强动力学收敛还意味着谱测度的某种强收敛形式，例如，[19, 命题 13]。

根据这些定义，我们的福克空间扩增方案基于一族近似算子 $V_\tau$：$D(V_\tau) \to H$，它们具有以下性质：

(V1) $V_\tau$ 是斜自伴算子。(V2) $V_\tau$ 是实数，即对于所有 $f \in D(V_\tau)$，$V_\tau f = V_\tau f$。(V3) $V_\tau$ 是可对角化的。(V4) $V_\tau$ 在 0 处有一个简单特征值，其对应的特征函数为 **1**。(V5) $D(V_\tau)$ 将 ran $G_{\tau/2}$ 包含为一个子空间。(V6) 当 $\tau \to 0^+$ 时，$V_\tau$ 在强预解式意义下收敛，因此也在强动力学意义下收敛，

to

$V$.

构造满足性质 (V1)–(V6) 的算子族 $V_\tau$ 的方法可见于[19, 34, 35],，但在下文中也可以采用任何具有类似性质的其他技术。

令 $X_\mu$ =supp($\mu$) 为不变测度 $\mu$ 的（紧）支集，并将斜伴随算子 $W_\tau$：$D(W_\tau) \to \mathcal{H}_\tau$ 定义在稠密定义域 $D(W_\tau) = T_\tau(D(V_\tau)) \oplus \mathcal{H}_\tau(X_\mu)^\perp$ 上，如下所示：$W_\tau = T_\tau V_\tau T_\tau^*$。注意，$W_\tau$ 的良定义性取决于性质 (V5)。根据性质 (V3)，对于每个 $\tau > 0$，$W_\tau$ 都是可对角化算子。此外，根据性质 (V4)，$W_\tau$ 在 $\mathcal{H}_\tau(X_\mu)$ 上的限制具有如下特征分解

$$W_\tau \zeta_{j,\tau} = i\omega_{j,\tau}\zeta_{j,\tau}, \quad j \in \mathbb{N}_0, \quad \omega_{0,\tau} = 0, \quad \omega_{2j,\tau} = -\omega_{2j-1,\tau}, \quad \zeta_{2j,\tau} = \overline{\zeta_{2j-1,\tau}},$$

其中 $\omega_{j,\,\tau} \in \mathbb{R}$ 和 $\{\zeta_{j,\tau}\}_{j\in\mathbb{N}_0}$ 构成 $\mathcal{H}_\tau$ 的标准正交基。我们将上文中的 $\zeta_{j,\,\tau}$ 视为近似 Koopman 特征函数，将 $\omega_{j,\,\tau}$ 视为其对应的特征频率。注意，与 $L^2$ 中的 Koopman 特征函数不同，$\zeta_{j,\,\tau}$ 是定义在 $X$ 上的逐点定义函数，其正则性由再生核 $k_\tau$ 控制。

根据斜自伴性，$V_\tau$ 和 $W_\tau$ 分别在$H$和 $\mathcal{H}_\tau$上生成强连续单参数酉群。这些酉算子 $e^{tV_\tau}$和 $e^{tW_\tau}$ 可以互换使用，以近似 $H$中可观测量的 Koopman 演化，如下所示。

**引理 6** ([30, 引理 8])**.** 对于任意 $f \in H$、$t \in \mathbb{R}$和 $\tau > 0$，都有 $K_\tau^* e^{tW_\tau} K_\tau f = G_{\tau/2} e^{tV_\tau} G_{\tau/2} f$。此外，以下结论成立。

*(1)* 对于任意 $f \in H$，$\lim_{\tau\to 0^+} K_\tau^* e^{tW_\tau} K_\tau f = U^t f$。

*(2)* 对于任意 $f \in \mathcal{H}_1$，$\lim_{\tau\to 0^+} K_\tau^* e^{tW_\tau} f = U^t \iota f$。

尽管作为 $\tau \to 0^+$具有动力学一致性，近似生成元 $V_\tau$ 和 $W_\tau$ 与 Koopman 生成元 $V$相比，在结构上有一项重要差异：它们通常不满足莱布尼茨法则（参见 (1)）。具体而言，尽管 $\zeta_{i,\tau}\zeta_{j,\tau}$是 RKHA$\mathcal{H}_\tau$中的定义良好元素，但它们作为 $W_\tau$的特征函数的逐点乘积，却未必仍是特征函数。然而，$W_\tau$ 在强预解式收敛意义下“接近”生成元 $V$（后者确实满足莱布尼茨法则），这表明诸如 $\zeta_{i,\,\tau}\zeta_{j,\tau}$ 这样的乘积应当包含有用的动力学信息。在接下来的小节中，我们将转向第 4.1 节所述的福克空间中的自由代数框架，以捕捉这些信息。

4.3. **恢复莱布尼茨法则**。为了从有限组近似特征函数 $\zeta_{j,\tau}$ 中利用更多信息，并将放大的近似 Koopman 算子对角化为分块对角形式，我们将在福克空间中使用莱布尼茨法则和非平凡提升（见 [30, 31]）。

**4.3.1. 提升至全福克空间。** [30] 的方案将正则化生成元 $W_\tau$ 提升为 $\tilde{}$ $\tilde{}$ 斜自伴算子 $\tilde{W}_\tau$: $D(\tilde{W}_\tau) \to F(\mathcal{H}_\tau)$，其定义方式是对以下表达式作线性延拓

$$\begin{aligned}\tilde{W}_\tau(f_1 \otimes f_2 \otimes \cdots \otimes f_n) = &(W_\tau f_1) \otimes f_2 \otimes \cdots \otimes f_n \\ &+ f_1 \otimes (W_\tau f_2) \otimes \cdots \otimes f_n \\ &+ \dots \\ &+ f_1 \otimes f_2 \otimes \cdots \otimes (W_\tau f_n)\end{aligned} \tag{12}$$

$\tilde{}$对于 $f_1$、.....、 $f_n \in D(W_\tau)$，根据构造， $W_\tau$满足莱布尼茨法则

$$\tilde{W}_\tau(f \otimes g) = (\tilde{W}_\tau f) \otimes g + f \otimes (\tilde{W}_\tau g)$$

$\tilde{}$对于张量积，任意满足上述方程左右两边有定义的 $f$、 $g \in D(W_\tau)$ 都成立。因此，我们有:

$\tilde{}$(1) 点谱 $\sigma_p(W_\tau)$ 是由 $\sigma_p(W_\tau)$ 生成的 $i\mathbb{R}$ 的阿贝尔子群的并集。(2) $\tilde{W}_\tau$生成一个酉算子的一参数群 $\tilde{U}_\tau^t = e^{t\tilde{W}_\tau}$, $t \in \mathbb{R}$，该群关于张量积按乘法作用，

$$\tilde{U}_\tau^t(f \otimes g) = (\tilde{U}_\tau^t f) \otimes (\tilde{U}_\tau^t g), \quad \forall, f, g \in F(\mathcal{H}_\tau).$$

综合以上结果可知，对于每个向量 $q \in L^2(\mu)$，若其具有表示$\xi \in \mathcal{H}_{\tau_0}$，其中某个 $\tau_0 > 0$ 以及形如 $\xi = \xi_1 \dots \xi_n$ 的乘法分解，其中某个$\xi_1$、.....、 $\xi_n \in \mathcal{H}_{\tau_0}$，则有

$$\Delta_{n-1}^* \tilde{U}_\tau^t \xi = \Delta_{n-1}^* \left( \bigotimes_{i=1}^n U_\tau^t \xi_i \right) = \prod_{i=1}^n U_\tau^t \xi_i \xrightarrow{\tau \to 0^+} U^t q$$

在 $L^2(\mu)$ 范数下，其中 $\Delta_{n-1}^*$: $\mathcal{H}_\tau^{\otimes n} \to \mathcal{H}_\tau$ 是 $n$ 重乘法

$$\Delta_{n-1}^* = \Delta^* \circ (\mathrm{Id}_{\mathcal{H}_\tau} \otimes \Delta_{n-2}^*), \quad \Delta_1^* = \Delta^*.$$

直观而言，由再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}_\tau$生成的福克空间 $F(\mathcal{H}_\tau)$ 允许在福克空间的张量积上“分配”可观测量和态的 Koopman 演化，其分级 $n \in \mathbb{N}$ 的上限可能任意高。

**4.3.2. 扩增至加权对称福克空间。** 上述分析同样适用于加权 Fock 空间方法。然而， $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 的巴拿赫代数结构提供了一种新的动力学解释。固定 $W_\tau$、 $\{\zeta_{i,\tau}\}_{i=0}^\infty$ 的特征函数，如第4.2节所述。我们将看到，扩增近似库普曼算子可表示为在一族参数化的、可能是无限维的环面中的任意一个环面上，对无理旋转进行前复合。

令 $\mathbb{A}_w$ 为 $\ell^2(\mathbb{N}_0)$ 的子集，由满足范数 $\|a\|_{\ell^2(\mathbb{N})} \le R_w$ 且为非负元素的向量 $a = (a_j)j$ 组成。对于每个 $a \in \mathbb{A}_w$ 以及每个由模为 1 的元素 $z_j$ 构成的序列 $z =(z_j)_j \in \ell^\infty(\mathbb{N})$，定义向量

$$\xi_{\tau,a,z} = \sum_{n=0}^\infty w^{-2}(n) \left( a_0 + \sum_{j=1}^\infty a_j z_j \zeta_{j,\tau} \right)^{\vee n} \in \sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau)),$$

以及谱 $\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 的子集 $\mathbb{T}_{\tau,\ a}$

$$\mathbb{T}_{\tau,a} = \left\{ \chi_{\tau,a,z} \equiv \langle \xi_{\tau,a,z}, \cdot \rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)} : z = (z_j)_j \in \ell^\infty(\mathbb{N}),\ z_j \in \mathbb{T}^1 \subset \mathbb{C} \right\}.$$

每个集合 $\mathbb{T}_{\tau,\,a}$ 的拓扑结构都是一个环面，其维数等于 $(a_1,\ a_2,\ \ldots)$ 中非零元素的个数。下文中，$\mathbb{S}_\tau = \bigcup_{a\in\mathbb{A}_w} \mathbb{T}_{\tau,\,a} \subset \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 将表示这些环面的（不相交）并集。

˜ ˜定义一个提升映射 $W_\tau\colon\ D(W_\tau) \to F_w(\mathcal{H}_\tau)$，与式（12）类似，但将 $\otimes$ 替换为对称张量积 $\vee$。然后，近似 Koopman 算子 $\tilde{U}_\tau^t = e^{tW_\tau}$ 诱导出一个流 $R_\tau^t\colon\ \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau)) \to \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$，$t\in\mathbb{R}$，其中 $R_\tau^t(\chi) = \chi\circ\tilde{U}_\tau^t$。此外，每个环面 $\mathbb{T}_{\tau,\,a}$ 都是 $R_\tau^t$ 下的不变集。在这些集合上，$R_\tau^t$ 具有由特征频率 $\omega_{j,\,\tau}$ 生成的旋转系统的形式：

$$R_\tau^t(\chi_{\tau,a,z}) = \chi_{\tau,a,z^{(t)}},$$

其中 $z = (z_j)_{j\in\mathbb{N}}$ 且 $z^{(t)} = (e^{-i\omega_{j,\,\tau}t} z_j)_{j\in\mathbb{N}}$。等价地，我们有

$$R_\tau^t(\langle \xi_{\tau,a,z}, \cdot\rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)}) = \langle \tilde{U}_\tau^{-t}\xi_{\tau,a,z}, \cdot\rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)},$$

因此，向量 $\xi_{\tau,\,a,\,z}$ 在伴随（“Perron–Frobenius”）算子 $\tilde{U}_\tau^{t*} = \tilde{U}_\tau^{-t}$ 的作用下演化。

旋转系统 $R_\tau^t$ 构成了正则化 Koopman 动力学 $U_\tau^t$ 的一个拓扑模型，即加权 Fock 空间 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 谱上的旋转系统。这并非显而易见，因为 $U_\tau^t$ 并不是由原始状态空间 $X$ 上的流所诱导的复合算子。由于 $\hat{}\, X_\tau$ 是 $\mathbb{S}_\tau \subset \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 的子集（且 $\mathbb{S}_\tau$ 在 $R_\tau^t$ 下保持不变），环面的并集 $\mathbb{S}_\tau$ 为研究与正则化 Koopman 算子 $U_\tau^t$（由 $R_\tau^t$ 表示）相关的动力系统，以及原始动力系统 $\Phi^t$（由映射 $\hat{}\,\varphi_\tau$ 下其像 $\hat{}\, X_\tau$ 表示），提供了一个共同的拓扑框架。

一个重要的问题是，这些环面和旋转系统是否都能保留近似 Koopman 动力学的信息。如果选择权函数 $a\in\mathbb{A}_w$ 为严格正，那么函数 $\xi\in F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 在环面 $\mathbb{T}_{\tau,\,a}$ 上的取值就能唯一确定 $\xi$（见 [31]）。这意味着，$\mathbb{T}_{\tau,\,a}$ 上的旋转系统能够唯一确定扩增近似库普曼算子 $\tilde{U}_\tau^t$。我们将在第 5 节中看到，如何将环面上的旋转系统实现为量子电路。

**4.4. 观测量和态向量的嵌入。** 为了在福克空间中应用莱布尼茨法则，我们必须将观测量和态向量都提升到福克空间。这里将讨论的两种方案分别来自两个不同的代数同态，

$$\Delta_{n-1}^*\colon \mathcal{H}_\tau^{\otimes n} \to \mathcal{H}_\tau,$$
$$|_X\colon F_w(\mathcal{H}_\tau) \to F_w(\mathcal{H}_\tau)(X),$$

其中 $|_X$ 表示限制映射。在这两种方法中，我们都利用观测量或态的高维嵌入，它们通过 $\Delta_n^*$ 或 $|_X$ 映射到所需的观测量或态。˜我们将这些高维嵌入称为提升（例如，如果 $f|_X = f$，则 $f\in F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 是 ˜$f\in F_w(\mathcal{H}_\tau)(X)$ 的提升）。

**4.4.1. 张量网络方法。** 我们首先讨论方案 [30]，它可以实现为˜ ˜树张量网络。给定一个态向量 $\xi\in\mathcal{H}_\tau$，我们将选择 $\xi\in\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}$，使得 $\Delta_{n-1}^*\xi = \xi$。此外，给定一个观测量 $f\in L^\infty(\mu)$ 和正则化参数 $\sigma,\ \tau>0$，我们选择映射

$$f \mapsto A_{f,\sigma,\tau,n} = K_\sigma^{\otimes n}\Delta_{n-1}K_\tau M_f K_\tau^*\Delta_{n-1}^*(K_\sigma^*)^{\otimes n} \in B(\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}) \tag{13}$$

作用于张量积空间 $\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}$ 上的量子可观测量。注意，(13)与第 2 节中使用的 $\pi\colon\ L^\infty(\mu) \to B(H)$ 类似，具有保正性，但它不是 $L^\infty(\mu)$ 上的代数同态。忽略核算子 $K_\sigma^{\otimes n}$ 的平滑作用，我们可以看到有限

乘法性如何在关于纯量子态 $\rho \propto \langle (\xi^{1/n})^{\otimes n},\ \cdot \rangle_{\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}} (\xi^{1/n})^{\otimes n}$ 的量子期望 $A_{f,\ \sigma,\ \tau,\ n}$ 中得到保证，

$$\left\langle \Delta_{n-1} K_\tau M_f K_\tau^* \Delta_{n-1}^* (U_\tau^t \xi^{1/n})^{\otimes n}, (U_\tau^t \xi^{1/n})^{\otimes n} \right\rangle_{\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}} = \left\langle K_\tau M_f K_\tau^* (U_\tau^t \xi^{1/n})^n, (U_\tau^t \xi^{1/n})^n \right\rangle_{\mathcal{H}_\tau^{\otimes n}}.$$

特别是在时间 $t = 0$，我们也恢复了初始统计期望。参见 [30, 图 4]，其中示意说明了如何将上述计算组织成张量网络。在下文的命题 7 中，我们将通过常值观测量的统计期望进行归一化，因为算子 $\Delta_{n-1}$不是单位范数，可能导致统计期望发生缩放。

用于张量网络方案的态可以构造为：近似 $L^\infty(\mu)$中可观测量相对于 $L^1(\mu)$中概率密度的统计期望（如第 2 节所述），以及连续观测量 $f \in C(X)$的逐点评估。作为后者的示例，设状态空间 $X$ 为 $N$维环面，并令$p_{\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\kappa}} \in C^\infty(\mathbb{T}^N) \cap \mathcal{H}_\tau$表示冯·米塞斯分布，其局部性参数为 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1、\ \ldots\ldots、\ \mu_N) \in [0, 2\pi)^N$，集中参数为$\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1、\ \ldots\ldots、\ \kappa_N) \in \mathbb{R}_+^N$，

$$p_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\kappa}} = \prod_{i=1}^N p_{\mu_i,\kappa_i} \qquad p_{\mu,\kappa}(\theta) = \frac{e^{\kappa \cos(\theta - \mu)}}{I_0(\kappa)}.$$

对于概率分布 $(w_i)_{i=1}^\infty$ 集

$$\xi = F_{\kappa,\tau}(x) = p_{x,\boldsymbol{\kappa}} / \|p_{x,\boldsymbol{\kappa}}\|_{\mathcal{H}_\tau}, \quad \boldsymbol{\kappa} = (\kappa, \ldots, \kappa) \in \mathbb{R}_+^N,$$
$$\eta_\tau = w_1 \frac{\xi}{\|\xi\|_{\mathcal{H}_\tau}} + w_2 \frac{\xi^{1/2} \otimes \xi^{1/2}}{\|\xi^{1/2}\|_{\mathcal{H}_\tau}^2} + w_3 \frac{\xi^{1/3} \otimes \xi^{1/3} \otimes \xi^{1/3}}{\|\xi^{1/3}\|_{\mathcal{H}_\tau}^3} + \ldots,$$

and

$$\tilde{\Xi}_{\kappa,\tau}(x) = \langle \eta_\tau, \cdot \rangle_{F(\mathcal{H}_\tau)} \eta_\tau.$$

˜在上文中，我们将 $\Xi_{\kappa,\tau}$：$X \to B_1(F(H_\tau))$ 解释为“量子特征映射”（而 $F_{\kappa,\tau}$：$X \to \mathcal{H}_\tau$ 是取值于再生核希尔伯特代数的经典特征映射）。我们令 $\tilde{\mathcal{P}}_\tau^t$：$B_1(F_w(\mathcal{H}_\tau)) \to B_1(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 表示由 $\tilde{U}_\tau^t$ 诱导的量子转移算子，其定义与第 1.1 节中的 $\mathcal{P}$：$B_1(H) \to B_1(H)$ 类似。于是，对于连续观测量的 Koopman 演化，我们有如下逐点逼近结果。

**命题 7.** 固定 $f \in C(\mathbb{T}^N)$，并在满足 [30], 的假设下，定义 $\tilde{f}_\kappa^{(t)},_{\sigma,\tau,n} \in C(\mathbb{T}^N)$，其中$\tilde{f}_\kappa^{(t)},_{\sigma,\tau,n}(x)$由相对于量子态˜$\Xi_{\kappa,\tau}(x)$对 $A_{f,\sigma,\tau,n}$ 取归一化期望得到，即：

$$\tilde{f}_{\kappa,\sigma,\tau,n}^{(t)}(x) = \frac{\mathbb{E}_{\tilde{\mathcal{P}}_\tau^t(\tilde{\Xi}_{\kappa,\tau}(x))} A_{f,\sigma,\tau,n}}{\mathbb{E}_{\tilde{\mathcal{P}}_\tau^t(\tilde{\Xi}_{\kappa,\tau}(x))} A_{\mathbf{1},\sigma,\tau,n}}.$$

那么，对于每个 $x \in X$，极限$_{\kappa \to \infty}$极限$_{\sigma \to 0^+}$极限$_{\tau \to 0^+}$ $\tilde{f}_\kappa^{(t)},_{\ \sigma,\ \tau,\ n}$（$x$）$= U^t f$（$x$）。

4.4.2. 二次量子化方法。对于二次量子化方案，给定 $f \in F_w(\mathcal{H}_\tau)(X) =:$ ˜ ˜ ˜$\mathcal{H}_\tau$，我们将选取一个观测量 $f \in F_w(\mathcal{H}_\tau)$，使得 $f|_X = f$。另一方面，态向量由一个从 $X$ 到 $\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 的特征映射给出。这使得我们在选择这种提升时拥有相当大的自由度。下文所选的提升主要是为了便于进行数值实验。

我们将采用第4.1节中函数 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 与 RKHA ˆ $F_w(\mathcal{H}_\tau) \subset C(\sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau)))$ 的对应关系。随后可使用积分算子将 $f \in H$ 表示为 RKHA 的元素

$\hat{}F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 在有限维环面 $\mathbb{T}_{\tau,\ a} \subset \mathbb{S}_\tau$ 上的限制是关于坐标 $z_j$的任意高次多项式 $m \in \mathbb{N}$。

Let $\kappa$： $X \times X \to \mathbb{R}_{>0}$ 是一个严格正、有界、连续的核函数，使得 at

$$\kappa(x,y) < \kappa(x,x), \quad \forall x, y \in X : x \neq y. \tag{14}$$

例如，给定一个度量 $d$： $X \times X \to \mathbb{R}$，该度量化了 $X$ 的拓扑，满足（14）的典型核是径向高斯核，

$$\kappa(x,y) = \exp\left(-\frac{d^2(x,y)}{\varepsilon^2}\right), \quad \varepsilon > 0.$$

对于任意这样的核 $\kappa$ 和 $\tau > 0$，定义平滑核 $\kappa_\tau$： $X \times X \to \mathbb{R}_{>0}$，其中 $\kappa_\tau$（·， $y$） $=K_\tau\iota\kappa$（·， $y$） $\in \mathcal{H}_\tau$。此外，对于 $m \in \mathbb{N}$，定义积分算子 $\mathcal{K}_{m,\ \tau}$： $H \to F_w$（$\mathcal{H}_\tau$）以及 $\hat{}\mathcal{K}_{m,\ \tau}$： $H \to \hat{}F_w$（$\mathcal{H}_\tau$），其中

$$\mathcal{K}_{m,\tau} f = \int_X \kappa_\tau^{\vee m}(\cdot, y) f(y)\, d\mu(y), \quad \hat{\mathcal{K}}_{m,\tau} f = \Gamma \mathcal{K}_{m,\tau} f = \int_X (\Gamma \kappa_\tau(\cdot, y))^m f(y)\, d\mu(y).$$

这些算子的良定义性已在 [31] 中得到验证。注意，对于每个 $x \in X$，逐点幂 $y \mapsto$（$\kappa_\tau$（$x$， $y$））$^m$ 都属于 RKHA $\mathcal{H}_\tau \subset C$（$X$），其再生核为

$$\tilde{k}_\tau(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^{-2}(n)}{\varpi_\tau^n} k_\tau(x,y)^n,$$

$\tilde{}$其中 $\varpi_\tau$是一个归一化函数，其选取旨在确保对于每个 $x \in X$， $k_\tau(x,\cdot)$ 都属于 $\sim F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 的余谱。此外， $\kappa_\tau^{\vee m}(\cdot, y) \in F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 位于 $\kappa_\tau(\cdot, y)^m \in \mathcal{H}_\tau$之上，

$$\tilde{\pi}(\kappa_\tau^{\vee m}(\cdot, y)) = \kappa_\tau(\cdot, y)^m,$$

其中 $\tilde{\pi}$： $F_w(\mathcal{H}_\tau) \to F_w(\mathcal{H}_\tau)(X)$ 是投影到 $F_w(\mathcal{H}_\tau)(X)$ 上的唯一正交投影 .

我们通过积分算子将可观测量 $f \in L^2_{\mathrm{vol}}$ 提升至再生核希尔伯特空间的元素 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$：$\mathcal{K}_{m,\tau}$，具体而言，$g_{m,\tau} := \mathcal{K}_{m,\tau} f$。我们还将使用 $h_{m,\tau} := \mathcal{K}_{m,\tau} 1_X$进行归一化。函数 $\hat{}g_{m,\tau}$ 和 $\hat{}h_{m,\tau}$ 在 Koopman 算子 $\hat{}\ U_\tau^t$ 的作用下幺正演化至

$$\hat{g}_{m,\tau}^{(t)} := \hat{U}_\tau^t \hat{g}_{m,\tau}, \quad \hat{h}_{m,\tau}^{(t)} := \hat{U}_\tau^t \hat{h}_{m,\tau},$$

分别。

为了利用 $\hat{}g_{m,\tau}^{(t)}$ 和 $\hat{}h_{m,\tau}^{(t)}$ 构造真实 Koopman 演化 $U^t f$ 的近似，我们借助特征映射将这些函数拉回到状态空间 $X$。令 $\sigma > 0$ 和 $\tau \in (0, \sigma/2]$，我们定义映入 $\mathcal{H}_\sigma$ 的典范特征映射 $\varphi_\sigma$： $X \to \mathcal{H}_\sigma$，

$$\varphi_\sigma(x) = k_\sigma(x, \cdot),$$

以及 $\varphi_\sigma^{(\mu)}$ 在子空间 $\mathcal{H}_\sigma(X_\mu) \subseteq \mathcal{H}_\sigma$ 上的投影，

$$\varphi_\sigma^{(\mu)} = \mathrm{proj}_{\mathcal{H}_\sigma(X_\mu)} \circ \varphi_\sigma.$$

随后我们定义 $\tilde{\varphi}_\sigma^{(\mu)}$： $X \to F_w(\mathcal{H}_\sigma)$

$$\tilde{\varphi}_\sigma^{(\mu)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^{-2}(n)}{\varpi_\sigma^{2n}} \varphi_\sigma^{(\mu)}(x)^{\vee n}, \quad \varpi_\sigma = \sup_{x \in X} \|\varphi_\sigma(x)\|_{\mathcal{H}_\sigma}.$$

由于 $\sigma > \tau$，我们有 $F_w(\mathcal{H}_\sigma) \subset F_w(\mathcal{H}_\tau)$，因此可以将 $\tilde{\varphi}_\sigma^{(\mu)}$视为映射到 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 的特征映射，它基于与 $\mathcal{H}_\sigma(X_\mu) \subseteq \mathcal{H}_\sigma \subseteq \mathcal{H}_\tau$ 相关联的典范特征向量。特别地，对于每个

$\sigma \geq \tau$ 我们有 $\tilde{\varphi}_{\sigma}^{(\mu)}(x) \in \sigma_{\mathrm{co}}(F_w(\mathcal{H}_\tau))$，因为 $\varpi_\sigma = \|\varphi_\sigma(x)\|_{\mathcal{H}_\sigma} \geq \|\varphi_\sigma(x)\|_{\mathcal{H}_\tau}$，且 $\|\varphi_\sigma^{(\mu)}(x)\|_{\mathcal{H}_\sigma} \trianglelefteq |\varphi_\sigma(x)\|_{\mathcal{H}_\sigma}$。

因此，我们得到一个特征映射 $\hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}: X \to \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$，通过以下方式映射至 $F_w(\mathcal{H}_\tau)$ 的谱：

$$\hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}(x) = \langle \tilde{\varphi}_{\sigma}^{(\mu)}(x), \cdot \rangle_{F_w(\mathcal{H}_\tau)}.$$

根据构造，状态空间在此特征映射下的像 $\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)} = \hat{\varphi}_{\sigma,\tau}(X)$ 包含于环面 $\mathbb{S}_\tau \subset \sigma(F_w(\mathcal{H}_\tau))$ 的并集中，因此我们可以利用限制在 $\mathbb{S}_\tau$ 上的旋转系统 $R_\tau^t$，对每个点 $\hat{\varphi}_{\sigma,\tau}(x)$ 进行动态演化。

注 8。构造基于 $\varphi_\sigma^{(\mu)}$ 的两参数特征映射族 $\hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}$（而非例如 $\mathcal{H}_\tau$ 的典范特征映射 $\varphi_\tau$）的一个原因，是在取与 Koopman 算子逼近相关的 $\tau \to 0^+$ 极限时，控制特征向量作为 $H$ 元素的正则性。事实上，由 $\{G_\tau\}_{\tau>0}$ 的半群结构（见第4.2节）可知，对于每个 $\tau \in (0, \sigma/2]$ 和 $x \in X$，

$$\varphi_\sigma^{(\mu)}(x) = K_\tau G_{\frac{\sigma}{2}-\tau} q_\sigma(x),$$

对于连续函数 $q_\sigma: X \to H$。那么，强收敛（引理 6）意味着

$$\lim_{\tau \to 0^+} \left\| K_\tau^* U_\tau^t \varphi_\sigma^{(\mu)}(x) - U^t \iota \varphi_\sigma^{(\mu)}(x) \right\|_H = 0, \quad \forall x \in X.$$

进一步可得

$$q_\sigma(x) = K_{\sigma/2}^* \varphi_{\sigma/2}(x),$$

这使得能够将 $H$ 与 $q_\sigma(x)$ 的内积和再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_{\sigma/2}$中的逐点评估联系起来，

$$\langle q_\sigma(x), f \rangle_H = \langle \varphi_{\sigma/2}, K_{\sigma/2} f \rangle_{\mathcal{H}_{\sigma/2}} = (K_{\sigma/2} f)(x), \quad \forall f \in H, \quad \forall x \in X.$$

接下来可以证明，对于足够小的 $\tau$，$\hat{h}^{(t)}|_{\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}}$ 有正的下界，因此在 $C(\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)})$ 中存在乘法逆元。因此，

$$\hat{f}_{m,\tau}^{(t)} := \frac{\hat{g}_{m,\tau}^{(t)}|_{\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}}}{\hat{h}_{m,\tau}^{(t)}|_{\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}}}, \quad f_{m,\sigma,\tau}^{(t)} := \hat{f}_{m,\tau}^{(t)} \circ \hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}|_X \equiv \frac{\hat{g}_{m,\tau}^{(t)} \circ \hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}|_X}{\hat{h}_{m,\tau}^{(t)} \circ \hat{\varphi}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}|_X}$$

分别是定义在 $\hat{X}_{\sigma,\tau}^{(\mu)}$ 和 $X$上的良定义连续函数。因此，我们有 e:

**命题 9** ([31, 定理 6])。在上述记号和假设下，根据极限，$f_{m,\sigma,\tau}^{(t)} \to U^t f$ $\mu$-几乎处处成立

$$\lim_{m\to\infty} \lim_{\sigma \to 0^+} \lim_{\tau \to 0^+} \left\| \iota(f_{m,\sigma,\tau}^{(t)} - U^t f) \right\|_H = 0.$$

## 5. Quantum simulation of systems with pure point spectra

本节将重点放在具有纯点谱的保测遍历流上；也就是说，对于这类连续时间保测遍历系统，Koopman算子的特征子空间之并在 $L^p(\mu)$, $p \in [1, \infty)$ 中稠密。这些系统是高度结构化动力学的例子，在许多方面都与弱混合截然相反。

如第 1 节所述，根据 Halmos–von Neumann 定理 [39], ，每个遍历的纯点谱系统在测度论意义下都同构于紧阿贝尔群上的旋转系统。在连续时间情形下，生成元的点谱 $\sigma_p$（$V$）是虚轴的一个加法子群，因此根据谱映射定理，可得到其 Koopman算子的点谱

作为群同态， $\sigma_p(V) \ni i\omega \mapsto e^{i\omega t} \in \sigma_p(U^t)$ 。正如我们将在下文看到的，对于这类受限系统，生成元谱的群结构使得相关酉Koopman群能够进行张量积分解，并可在量子计算机上实现高效的基于量子门的实现。

As 作为一个具体例子，我们考虑环面 $X = \mathbb{T}^d$ 上的遍历旋转 $\Phi^t\colon X \to X$ ，

$$\Phi^t(\theta) = \theta + \alpha \cdot \theta \mod 2\pi, \quad t \in \mathbb{R},$$

其中 $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_d) \in \mathbb{R}^d$ 是有理线性无关的频率参数。该系统是测度论同构类中的一个典型代表，其对应的纯点谱连续时间遍历系统具有由 $d$ 基本频率生成的谱。具体而言，我们有

$$\sigma_p(V) = \{i(j_1\alpha_1 + \cdots + j_d\alpha_d) : j_1, \ldots, j_d \in \mathbb{Z}\}, \tag{15}$$

因此，由于 $\alpha_1, \ldots, \alpha_d$ 有理线性无关，生成元的点谱与动力学状态空间的庞特里亚金对偶 $\mathbb{T}^d \simeq \mathbb{Z}^d$ 同构。

**5.1. 动力系统的RKHA嵌入。** 设 $\mathcal{H}$ 是定义在 $\mathbb{T}^d$ 上、由 $\mathbb{Z}^d$ 上的次卷积权函数构造的连续可微函数再生核希尔伯特代数；例如 (9) 中的次指数权重 $\lambda^{-1/2}$。Koopman算子 $U^t\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, $U^t f = f \circ \Phi^t$ 在 $\mathcal{H}$ 上是良定义的酉算子，并构成一个由斜自伴算子 $V\colon D(V) \to \mathcal{H}, D(V) \subset \mathcal{H}$ 生成的强连续群，其点谱由 (15) 给出，与 $L^p$ 情形相同。相应的正交归一特征向量可选为 (8) 中经缩放的特征标 $\psi_j$ ；也就是说，RKHA $\mathcal{H}$ 上的生成元 $V$ 可对角化为

$$V\psi_j = i\omega_j\psi_j, \quad \omega_j = j_1\alpha_1 + \cdots + j_d\alpha_d.$$

这里， $\sigma_p(V)$ 的群结构体现了这样一个事实： $V$ 在再生核希尔伯特代数 $\mathcal{H}$ 上满足莱布尼茨法则 (1) 的类似形式。在 $L^2$ 的情形下， [92] 已证明，在代数 $L^\infty(\mu) \cap D(V)$ 上满足 (1)，是斜自伴算子 $V\colon D(V) \to L^2(\mu)$ 成为酉 Koopman 群生成元的充要条件。鉴于莱布尼茨法则是生成连续时间确定性动力系统的向量场的一项基本结构性质，我们猜想，类似结果也适用于再生核希尔伯特代数上的复合算子酉群。

在量子计算的背景下，再生核希尔伯特代数能够有效地结合两种能力：借助有界乘法算子 $\pi f \in B(\mathcal{H})$ 表示经典可观测量 $f \in \mathcal{H}$ ，以及将 $x \in X$ 处的逐点评估实现为量子力学期望值。具体而言，对于 $x \in X$ ，我们将向量态 $\mathbb{E}_x \in S_*(B(\mathcal{H}))$ 定义为

$$\mathbb{E}_x A := \frac{\langle k_x, Ak_x\rangle_{\mathcal{H}}}{k(x,x)}.$$

那么，对于每个观测量 $f \in \mathcal{H}$ 和演化时间 $t \in \mathbb{R}$ ，我们有

$$f(\Phi^t(x)) = \mathbb{E}_x(\mathcal{U}^t M_f),$$

其中 $\mathcal{U}^t\colon B(\mathcal{H}) \to B(\mathcal{H})$ 是共轭算子 $\mathcal{U}^t A = U^t A U^{t*}$，其定义方式与 $L^2$ 情形类似（见第 1 节）。等价地，我们可以考察正规态在对偶算子 $\mathcal{P}^t$ 下的演化： $S_*(B(\mathcal{H})) \to S_*(B(\mathcal{H}))$, $\mathcal{P}^t\rho = U^{t*}\rho U^t$。定义量子特征映射 $\Xi\colon X \to S_*(B(\mathcal{H}))$，将 $x \in X$ 映射到与 $\mathbb{E}_x$相关联的秩一密度算子， $\rho_x = \langle k_x, \cdot\rangle_{\mathcal{H}} k_x / k(x,x)$，则 $\Xi$ 将 $X$ 上的逐点经典动力学与 $S_*(B(\mathcal{H}))$ 上的量子动力学交织起来，即，

$$\mathcal{P}^t \circ \Xi = \Xi \circ \Phi^t.$$

我们可以将这种对应关系提升到博雷尔概率测度层面，因为紧Hausdorff空间 $X$ 上的博雷尔概率测度集合，可以与 $C^*$-代数在 $X$上的连续函数所构成的状态空间相识别， $C(X)$ 配备上确界范数。状态空间 $X$ 在映射 $\delta\colon\ X \to S(C(X))$ 下弱-$^*$ 连续地嵌入到 $S(C(X))$ 中，该映射将各点映射为相应的 Dirac测度， $\delta(x) = \delta_x$。此映射将 $\Phi^t$ 下的状态空间动力学与概率测度在推前映射 $\Phi^t_*$ 下的动力学交织起来： $S(C(X)) \to S(C(X))$， $\Phi^t_* \circ \delta = \delta \circ \Phi^t$。

接下来，利用量子特征映射 $\Xi$，我们定义一个映射 $Q\colon\ S(C(X)) \to S_*(B(\mathcal{H}))$，它通过算子值（Bochner）积分 $Q(\nu) = \int_X \Xi(x)\, d\nu(x)$，将 $X$ 上的博雷尔概率测度映射为 $\mathcal{H}$ 上的正规量子态。映射 $Q$ 是单射的（由$\mathcal{H}$的再生核的普适性保证），并且从弱-$^*$ 到弱连续；它还将 $\Phi^t_*$ 下的经典统计演化与 $\mathcal{P}^t$下的量子演化交织起来，

$$\mathcal{P}^t \circ Q = Q \circ \Phi^t_*.$$

此外，根据构造可得 $\Xi = Q \circ \delta$。

上述关系可通过如下交换图加以概括：

$$\begin{array}{ccc} X & \xrightarrow{\Phi^t} & X \\ {\scriptstyle\delta}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle\delta} \\ S(C(X)) & \xrightarrow{\Phi^t_*} & S(C(X)) \\ {\scriptstyle Q}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle Q} \\ S_*(B(\mathcal{H})) & \xrightarrow{\mathcal{P}^t} & S_*(B(\mathcal{H})) \end{array} . \tag{16}$$

该图比 $L^p$中针对保测动力学的交换图（3）更为一般，因为（16）刻画了任意博雷尔概率测度的演化（而非（3）中的 $\mu$ 绝对连续测度），其中包括 $X$ 中各个态通过其作为Dirac测度的表示所描述的演化。当然，应当注意的是，为了在本小节中实现经典与量子描述层次之间动力学关系的这种一般性，我们已将所研究的系统类别显著限制为纯点谱系统。

在结束本小节之前，我们指出，与 $L^2$ 空间不同，由实值元素 $f \in \mathcal{H}$ 定义的乘法算子 $M_f$ 通常不是自伴算子，因此不能构成可进行物理测量的量子可观测量（例如，在量子电路的输出阶段）。为克服这一问题，我们可以用自伴算子 $S_f = (M_f + M_f^*)/2 \in B(\mathcal{H})$表示 $f \in \mathcal{H}$；随后可以验证，当 $f$ 且 $\mathcal{H}$ 的再生核为实值时， $\mathbb{E}_x S_f = \mathbb{E}_x M_f$。

**5.2. 量子模拟算法。** 令 $\mathbb{B}$ 为复数域上的抽象二维希尔伯特空间，其标准正交基为 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$。我们将 $\mathbb{B}$ 视为与一个量子比特相关联的量子力学希尔伯特空间。具有 $n$ 个量子比特的量子计算机对应于维数为 $2^n$的张量积希尔伯特空间 $\mathbb{B}_n = \mathbb{B}^{\otimes n}$。我们将使用记号 $|b\rangle = |b_0\rangle \otimes \cdots \otimes |b_n\rangle$，其中 $b = (b_1, \ldots, b_n) \in \{0,1\}^n$ 表示由 $\mathbb{B}$的 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 基诱导的 $\mathbb{B}_n$ 张量积基中的元素；在此语境下，该基称为量子计算基。为便于后文讨论，我们引入作用于 $\mathbb{B}$上的泡利 $Z$ 算子，它由以下特征值/特征向量关系定义： $Z|0\rangle = |0\rangle$ 和 $Z|1\rangle = -|1\rangle$。关于量子计算的详细介绍，请参阅文献 [69]。

我们通过定义一族投影$\hat{\Pi}_q$: $\mathcal{H} \to \mathbb{B}_n$，其中 $q \in \mathbb{N}$ 且 $n = d(q+1)$，构造一种量子算法，用于近似上述 $\mathcal{H}$ 上的量子动力学，并根据（16）近似 $\mathbb{T}^d$ 上的经典动力学。这些投影将 $\mathcal{H}$ 上的生成元 $V$映射为斜自伴算子$\hat{V}_q$: $\mathbb{B}_n \to \mathbb{B}_n$、 $V_q = \Pi_q V \Pi_q$。这些投影的选取方式保证了相应的 $\mathbb{B}_n$上的幺正演化算子$\hat{U}_q^t = e^{t\hat{V}_q}$可由量子算法实现；该算法的运行时间有一个与 $n$无关的常数上界，并使用含有$n$个量子逻辑门的量子电路，门数为 $O(n)$。此外，随着 $q$ 增大，量子计算系统给出的量子期望将恢复原系统中可观测量的演化。具体而言，我们有

$$\lim_{q\to\infty} \operatorname{tr}\Big((\hat{\mathcal{P}}_q^t \hat{\Xi}_q(x))(\hat{\pi}_q f)\Big) = \mathbb{E}_x(\mathcal{U}^t M_f) = f(\Phi^t(x))$$

对于所有 $f \in \mathcal{H}$、 $x \in X$ 和 $t \in \mathbb{R}$，其中$\hat{\Xi}_q$: $X \to S_*(B(\mathbb{B}_n))$ 和$\hat{\pi}_q$: $\mathcal{H} \to B(\mathbb{B}_n)$ 分别是投影量子特征映射和观测量的表示，

$$\hat{\Xi}_q(x) = \frac{\hat{\Pi}_q \Xi(x) \hat{\Pi}_q}{\operatorname{tr}\Big(\hat{\Pi}_q \Xi(x) \hat{\Pi}_q\Big)}, \quad \hat{\pi}_q f = \hat{\Pi}_q(\pi f)\hat{\Pi}_q,$$

而$\hat{\mathcal{P}}_q^t$: $S_*(B(\mathbb{B}_n)) \to S_*(B(\mathbb{B}_n))$ 是由$\hat{U}_q^t$ 诱导的量子态演化$\hat{\mathcal{P}}_q^t \rho = \hat{U}_q^{t*} \rho \hat{U}_q^t$。$\hat{}$为构建 $\Pi_q$，我们从 $2^n$ 维子空间 $\mathcal{H}_q \subset \mathcal{H}$ 出发，定义如下:

$$\mathcal{H}_q = \operatorname{span}\{\psi_j : j = (j_1, \ldots, j_d) \in J_q^d\}$$

对于 $J_q = \{-2^q, \ldots, -1, 1, \ldots, 2^q\}$。请注意，0 不包含在索引集 $J_q$ 中。我们为每个 $j_i \in J_q$ 指派一个二进制字符串 $\beta_q(j_i) \in \{0,1\}^{q+1}$，该字符串由整数 $\tilde{j}_i \in \{0, \ldots, 2^{q+1}-1\}$ 的二进制表示给出，其

$$\tilde{j}_i = \begin{cases} j_i + 2^q, & j_i < 0, \\ j_i + 2^q - 1 & j_i > 0, \end{cases}$$

并通过拼接为每个 $j \in J_q^d$指定 $\boldsymbol{\beta}_q(j) \in \{0,1\}^{d(q+1)}$， $\boldsymbol{\beta}_q(j) = (\beta_q(j_1) \ldots, \beta_q(j_d))$。$\hat{}$接着，我们通过线性扩展定义 $\Pi_q$

$$\hat{\Pi}_q \psi_j = \begin{cases} |\boldsymbol{\beta}_q(j)\rangle, & j \in J_q^d, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

可以证明 [33]，投影生成元具有如下形式

$$\begin{aligned} \hat{V}_q = {} & \hat{v}_1 Z \otimes I \otimes I \otimes I \otimes \cdots \otimes I \\ & + \hat{v}_2 I \otimes Z \otimes I \otimes I \otimes \cdots \otimes I \\ & + \hat{v}_4 I \otimes I \otimes Z \otimes I \otimes \cdots \otimes I \\ & + \ldots \\ & + \hat{v}_{2^{n-1}} I \otimes \cdots \otimes I \otimes Z, \end{aligned} \tag{17}$$

其中$\hat{v}_1, \ldots, \hat{v}_{2^{n-1}}$是复值系数，通过计算傅里叶–沃尔什变换$\hat{}$ [96]（作用于投影生成元的谱 $\sigma_p(V_q)$）确定。

由（17）可知，酉算子$\hat{U}_q^t = e^{t\hat{V}_q}$可进行因式分解

$$\hat{U}_q^t = \bigotimes_{i=0}^{n-1} e^{t\hat{v}_{2^i} Z}, \tag{18}$$

这可以通过相位旋转来实现：这些旋转作用于 $n$个量子比特，并行执行，且量子比特之间无需通信。因此，所得量子算法的运行时间为常数，可使用深度为 $O(n)$ 的量子电路实现，如上所述。需要注意的是，莱布尼茨法则 (1) 对该算法的高效性至关重要。尤其是，能够将生成元分解为 (17) 的形式，而非更一般的傅里叶–沃尔什展开，依赖于莱布尼茨法则所蕴含的点谱 $\sigma_p(V)$ 的群结构。还应注意，要完成整个计算，必须在实现 (18) 的量子电路前后分别组合适当的量子态制备和测量阶段。整个量子电路的深度主要由测量阶段的量子傅里叶变换决定，其深度为 $O(n^2)$；参见 [33]。

**致谢**。 作者感谢美国国防部基础研究办公室通过范内瓦·布什教员奖学金项目（拨款编号 N00014-21-1-2946）提供的支持，感谢美国海军研究办公室通过多学科大学研究计划（拨款编号 N00014-19-1-242）提供的支持，以及美国能源部通过拨款 DE-SC0025101 提供的支持。

## References

[1] D. An、J.-P. Liu 和 L. Lin, *Linear combination of Hamiltonian simulation for nonunitary dynamics with optimal state preparation cost* **131** 2023 , 《物理评论快报》 ()。

[2] J. Andress、A. Engel、Y. Shi 和 S. Parker, *Quantum simulation of nonlinear dynamical systems using repeated measurement* 2024 ()。[3] V. Baladi, *Positive transfer operators and decay of correlations*, 《非线性动力学高级丛书》第16卷，世界科学出版社，新加坡，2000年。[4] J. A. Barandes, *The history of Hilbert-space formulations of classical physics*, 2025年。[5] S. Bharadwaj 和 K. R. Sreenivasan, *Compact quantum algorithms for time-dependent differential equations*, 《物理评论研究》7（2025）。[6] M. Blank、G. Keller 和 C. Liverani, *Ruelle–Perron–Frobenius spectrum for Anosov maps*, 《非线性》15（2002），第6期，1905–1973。[7] D. I. Bondar、R. Cabera、R. R. Lompay、M. Yu. Ivanov 和 H. A. Rabitz, *Operational dynamic modeling transcending quantum and classical mechanics* **109** 2012 190403 , 《物理评论快报》 ()，。

[8] D. I. Bondar、F. Gay-Balmaz 和 C. Tronci, *Koopman wavefunctions and classical–quantum correlation dynamics* **475** 2019 20180879 , 《英国皇家学会学报A辑》 ()，。[9] S. L. Brunton、M. Budišić、E. Kaiser 和 J. N. Kutz, *Modern Koopman theory for dynamical systems*, 《工业与应用数学学会评论》64（2022），第2期，229–340。[10] F. Chatelin, *Spectral approximation of linear operators*, 《应用数学经典丛书》，工业与应用数学学会，费城，2011年。[11] M. Colbrook, *The multiverse of dynamic mode decomposition algorithms*, 《数值分析手册》，2024年，第127–230页。[12] M. J. Colbrook, *The mpEDMD algorithm for data-driven computations of measure-preserving dynamical systems* **61** 2023 1608 , 《工业与应用数学学会数值分析杂志》 ()，第3期，1585–。[13] M. J. Colbrook 和 A. Townsend, *Rigorous data-driven computation of spectral properties of Koopman operators for dynamical systems* **77** 2024 221 283 , 《纯粹与应用数学通讯》 ()，–。[14] P. C. S. Costa、P. Schleich、M. E. S. Morales 和 D. W. Berry, *Further improving quantum algorithms for nonlinear differential equations via higher-order methods and rescaling* **11** 2025 , 《npj量子信息》 ()。

[15] F. Cucker 和 S. Smale, *On the mathematical foundations of learning* **39** 2001 1, , 《美国数学会通报》 (), 1–49, 第–期。[16] S. Das 和 D. Giannakis, *Koopman spectra in reproducing kernel Hilbert spaces*, 《应用与计算谐波分析》49（2020），第2期，573–607。[17] , *On harmonic Hilbert spaces on compact abelian groups*, 《傅里叶分析与应用杂志》29（2023），第1期，12。[18] S. Das、D. Giannakis 和 M. Montgomery, *Correction to: On harmonic Hilbert spaces on compact abelian groups* **29** 2023 6, 67 , 《傅里叶分析与应用杂志》 ()，第期。

[19] S. Das、D. Giannakis 和 J. Slawinska, *Reproducing kernel Hilbert space compactification of unitary evolution groups* **54** 2021 75 136 , 《应用与计算谐波分析》（），–。[20] C. R. de Oliveira, *Intermediate spectral theory and quantum dynamics*, 《数学物理进展》第54卷, Birkh¨auser, 巴塞尔, 2009年。[21] G. Della Ricia 和 N. Wiener, *Wave mechanics in classical phase space Brownian motion and quantum theory*, 《数学物理学杂志》7（1966），第8期，1732–1383。[22] M. Dellnitz 和 O. Junge, *On the approximation of complicated dynamical behavior*, 《工业与应用数学学会数值分析杂志》36（1999），491。[23] T. Eisner、B. Farkas、M. Haase 和 R. Nagel, *Operator theoretic aspects of ergodic theory*, 《数学研究生教材》第272卷, 施普林格, 查姆, 2015年。[24] H. G. Feichtinger, *Gewichtsfunktionen auf lokalkompakten Gruppen* ¨《奥地利科学院数学与自然科学部会议报告》188（1979），第8–10期，451–471。[25] D. C. Freeman、D. Giannakis、B. Mintz、A. Ourmazd 和 J. Slawinska, *Data assimilation in operator algebras*, 《美国国家科学院院刊》120（2023），第8期。[26] G. Froyland, *Computer-assisted bounds for the rate of decay of correlations*, 《数学物理通讯》189（1997），第Nn期，237–257。[27] G. Froyland、C. Gonz´alez-Tokman 和 A. Quas, , 《计算动力学杂志》（），第–期。[28] D. Giannakis, *Detecting isolated spectrum of transfer and Koopman operators with Fourier analytic tools* **1** 2014 2, 249 278 , *Quantum mechanics and data assimilation*, 《物理评论E》100（2019）。[29] , *Quantum dynamics of the classical harmonic oscillator*, 《数学物理学杂志》62（2021），042701。[30] D. Giannakis、M. J. Latifi Jebelli、M. Montgomery、P. Pfeffer、J. Schumacher 和 J. Slawinska, *Tensor network approximation of Koopman operators* 2024 , 。[31] , *Second quantization for classical nonlinear dynamics*, 2025年。[32] D. Giannakis 和 M. Montgomery, *An algebra structure for reproducing kernel Hilbert spaces*, 《班纳赫数学分析杂志》19（2025）。[33] D. Giannakis、A. Ourmazd、P. Pfeffer、J. Schumacher 和 J. Slawinska, *Embedding classical dynamics in a quantum computer* **105** 2022 , 《物理评论A》（）。[34] D. Giannakis 和 C. Valva, *Consistent spectral approximation of Koopman operators using resolvent compactification* **37** 2024 7 , 《非线性》（），第期。[35] , *Physics-informed spectral approximation of Koopman operators*, 《物理学D》482（2025）。[36] K. Gr¨ochenig, *Weight functions in time-frequency analysis*, 《伪微分算子：偏微分方程与时频分析》，2007年，第343–366页。[37] S. Gudder, *Quantum probability*, 《量子逻辑与量子结构手册》，2007年，第121–146页。[38] P. R. Halmos, *Lectures on ergodic theory*, 美国数学会，普罗维登斯，1956年。[39] P. R. Halmos 和 J. von Neumann, *Operator methods in classical mechanics II* **43** 1942 2, , 《数学年刊》332 350 （），第–期。[40] K. Hasselmann, *PIPs and POPs: The reduction of complex dynamical systes using principal interaction and oscillation patterns* **93** 1988 9, 11015 11021 , 《地球物理研究杂志：大气》（），第D–期。[41] A. S. Holevo, *Statistical structure of quantum theory*, 《物理学讲义专著》第67卷，施普林格，柏林，2001年。[42] M. Ikeda、I. Ishikawa 和 C. Schlosser, *Koopman and Perron–Frobenius operators on reproducing kernel Banach spaces* **32** 2022 , 《混沌》（）。[43] S. Jin、N. Liu 和 Y. Yu, *Quantum simulation of partial differential equations via Schrödingerization*, 《物理评论快报》133（2024）。[44] I. Joseph, *Koopman-von Neumann approach to quantum simulation of nonlinear classical dynamics*, 《物理评论研究》2（2020），043102。[45] I. Joseph、Y. Shi、M. D. Porter、A. R. Castelli、V. I. Geyko、F. R. Graziani、S. B. Libby 和 J. L. DuBois, *Quantum computing for fusion energy science applications*, 《等离子体物理学》30（2023），第1期。[46] R. E. Kalman, *A new approach to linear filtering and prediction problems*, 《基础工程学杂志》82（1960），第1期，35–45。[47] E. Kalnay, *Atmospheric modeling data assimilation and predictability*, 剑桥大学出版社，剑桥，2003年。[48] E. Kaniuth, *A course in commutative Banach algebras*, 《数学研究生教材》第246卷，施普林格科学+媒体出版社，2009年。[49] Y. Kawahara, *Dynamic mode decomposition with reproducing kernels for Koopman spectral analysis*, 《神经信息处理系统进展》，2016年，第911–919页。

[50] B. N. Khoromskij, *O(d对数 N)-quantics approximation of N-d tensors in high-dimensional numerical modeling*, 《Constr. Approx.》34（2011），257–280。[51] B. O. Koopman, *Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space*, 《Proc. Natl. Acad. Sci.》17（1931），第5期，315–318。[52] B. O. Koopman 和 J. von Neumann, *Dynamical systems of continuous spectra*, 《Proc. Natl. Acad. Sci.》18（1932），第3期，255–263。[53] M. Korda、M. Putinar 和 I. Mezi´c, *Data-driven spectral analysis of the Koopman operator*, 《Appl. Comput. Harmon. Anal.》48（2020），第2期，599–629。[54] W. Lahoz、B. Khattatov 和 R. M´enard（编）, *Data assimilation: Making sense of observations*, 施普林格出版社，柏林，2010。[55] K. Law、A. Stuart 和 K. Zygalakis, *Data assimilation: A mathematical introduction*, 《应用数学文本》第62卷，施普林格，纽约，2015。[56] D. Lehmann, *Mathematical methods of many-body quantum field theory*, 《数学研究札记》第436卷，Chapman & Hall/CRC，博卡拉顿，2004。[57] Y. T. Lin、R. B. Lowrie、D. Aslangil、Y. Subasi 和 A. T Sornborger, *Challenges for quantum computation of nonlinear dynamical systems using linear representations* 2022 ，。[58] J.-P. Liu、H. Ø. Kolden、H. K. Krovi 和 A. M. Childs, *Efficient quantum algorithm for dissipative nonlinear differential equations* **118** 2021 35，2026805118 ，《Proc. Natl. Acad. Sci.》（），第e期。[59] S. Lloyd、G. DePalma、C. Gokler、B. Kiani、Z.-W. Liu、M. Marvian、F. Tennie 和 T. Palmer, *Quantum algorithm for nonlinear differential equations* 2020 ，。[60] Y. M. Lokare、D. Wei、L. Chan、B. M. Rubenstein 和 J. B. Marston, *Steady-state statistics of classical nonlinear dynamical systems from noisy intermediate-scale quantum devices* 2024 ，。[61] A. J. Majda 和 J. Harlim, *Filtering complex turbulent systems*, 剑桥大学出版社，剑桥，2012。[62] D. Mauro, *On Koopman–von Neumann waves*, 《Int. J. Mod. Phys. A》17（2002），1301–1325。[63] A. Mauroy、I. Mezi´c 和 Y. Susuki（编）, *The Koopman operator in systems and control*, 《控制与信息科学讲义》，施普林格，2020。[64] I. Mezi´c, *Spectral properties of dynamical systems model reduction and decompositions*, 《Nonlinear Dyn.》41（2005），309–325。[65] *Spectrum of the Koopman operator spectral expansions in functional spaces and state-space geometry*, 《J. Nonlinear Sci.》30（2020），2091–2145。[66] *A transfer operator approach to relativistic quantum wavefunction*, 《物理学杂志A: 数学与理论》56（2023）。[67] I. Mezi´c 和 A. Banaszuk, *Comparison of systems with complex behavior: Spectral methods*, 《第39届IEEE决策与控制会议论文集》，1999年，第1224–1231页。[68] I. Mezi´c 和 A. Banaszuk, *Comparison of systems with complex behavior*, 《物理学D》197（2004），101–133。[69] M. A. Nielsen 和 I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, 剑桥大学出版社，剑桥，2010。[70] I. Novikau 和 I. Joseph, *Quantum algorithm for the advection-diffusion equation and the Koopman-von Neumann approach to nonlinear dynamical systems* **309** 2025 ，《Comput. Phys. Commun.》（）。[71] I. V. Oseledets, *Approximation of $2^d \times 2^d$ matrices using tensor decomposition*, 《SIAM J. Matrix Anal. A.》31（2010），第4期，2130–2145。[72] S. E. Otto 和 C. W. Rowley, *Koopman operators for estimation and control of dynamical systems*, 《Annu. Rev. Control Robot. Auton. Syst.》4（2021），59–87。[73] V. Paulsen, *Completely bounded maps and operator algebras*, 剑桥大学出版社，剑桥，2003。[74] V. I. Paulsen 和 M. Raghupathi, *An introduction to the theory of reproducing kernel Hilbert spaces*, 《剑桥高等数学研究》第152卷，剑桥大学出版社，剑桥，2016。[75] C. Penland, *Random forcing and forecasting using principal oscillation pattern analysis*, 《Mon. Weather Rev.》117（1989），第10期，2165–2185。[76] P. Pfeffer、F. Heyder 和 J. Schumacher, *Hybrid quantum-classical reservoir computing of thermal convection flow* **4** 2022 ，《Phys. Rev. Research》（）。[77] C.-A. Pillet, *Quantum dynamical systems*, 《开放量子系统 I》，2006年，第107–182页。[78] J. A. Rosenfeld、R. Kamalapurkar、L. F. Gruss 和 T. T. Johnson, *Dynamic mode decomposition for continuous time systems with the Liouville operator* **32** 2022 ，《J. Nonlinear Sci.》（）。[79] C. W. Rowley、I. Mezi´c、S. Bagheri、P. Schlatter 和 D. S. Henningson, *Spectral analysis of nonlinear flows*, 《流体力学杂志》641（2009），115–127。[80] W. Rudin, *Fourier analysis on groups*, Dover Publications，米尼奥拉，2017。

[81] P. J. Schmid, *Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data*, 《流体力学杂志》656（2010），5–28。[82] P. J. Schmid 和 J. L. Sesterhenn, *Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data*, 《美国物理学会通报》，第61届APS会议，2008年，第208页。[83] M. Sch¨onberg, *Application of second quantization methods to the classical statistical mechanics (I)*, 《Nuovo Cim.》9（1952），1139–1182。[84] *Application of second quantization methods to the classical statistical mechanics (II)*, 《Nuovo Cim.》10（1953），419–472。[85] J. Slipantschuk、O. F. Bandtlow 和 W. Just, *Dynamic mode decomposition for analytic maps*, 《非线性科学与数值模拟通讯》84（2020）。[86] B. K. Sriperumbudur、K. Fukumizu 和 G. R. Lanckriet, *Universality characteristic kernels and RKHS embedding of measures* , , 《机器学习研究杂志》（），–。[87] I. Steinwart 和 A. Christmann, *Support vector machines*, 《信息科学与统计》，施普林格，纽约，2008。[88] M. Stengl、P. Gelß、S. Klus 和 S. Pokutta, *Existence and uniqueness of solutions of the Koopman–von Neumann equation on bounded domains* , 《物理学杂志A：数学与理论》（）。[89] M. H. Stone, *On one-parameter unitary groups in Hilbert space*, 《数学年刊》33（1932），第3期，643–648。[90] A. M. Stuart, *Inverse problems: A Bayesian perspective*, 《数值数学学报》19（2010），451–559。[91] M. Takesaki, *Theory of operator algebras I*, 《数学科学百科全书》第124卷，施普林格，柏林，2001。[92] A. F. M. ter Elst 和 M. Lema´nczyk, *On one-parameter Koopman groups*, 《遍历理论与动力系统》37（2017），1635–1656。[93] S. Thrun、W. Burgard 和 D. Fox, *Probabilistic robotics*, 《智能机器人与自主智能体》，麻省理工学院出版社，剑桥，2006。[94] S. M. Ulam, *Problems in modern mathematics*, Dover Publications，米尼奥拉，1964。[95] P. Walters, *An introduction to ergodic theory*, 《数学研究生教材》第79卷，Springer-Verlag，纽约，1981。[96] J. Welch、D. Greenbaum、S. Mostame 和 A. Aspuru-Guzik, *Efficient quantum circuits for diagonal unitaries without ancillas* **16** 2014 033040 , 《新物理学杂志》（），。[97] C. Wormell, *Orthogonal polynomial approximation and dynamic mode decomposition in chaos*, 《工业与应用数学学会数值分析杂志》63（2025），第1期，122–148。[98] H.-C. Wu、J. Wang 和 X. Li, *Quantum algorithms for nonlinear dynamics: Revisiting Carleman linearization with no dissipative conditions* **47** 2025 2, 943 970 , 《工业与应用数学学会科学计算杂志》（），第A期，–a。[99] E. Ye 和 N. F. Loureiro, *Quantized tensor networks for solving the Vlasov–Maxwell equations*, 《等离子体物理学杂志》30（2024），第3期。

Department of Mathematics, Dartmouth College, Hanover, NH 03755, USA.
*Email address*: dimitrios.giannakis@dartmouth.edu

Department of Mathematics, Dartmouth College, Hanover, NH 03755, USA.
*Email address*: michael.r.montgomery@dartmouth.edu