

# ベイズ的動的モード分解

武石 直也<sup>§</sup>, 河原 吉伸<sup>†,‡</sup>, 田部井 靖生<sup>‡</sup>, 矢入 健久<sup>§</sup>

<sup>§</sup>東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻, <sup>†</sup>大阪大学 産業科学研究所  
<sup>‡</sup>理化学研究所 革新知能統合研究センター

2016/5/26

第 31 回人工知能学会全国大会@名古屋

## 本発表の概要

DMD を確率化・ベイズ化しました.

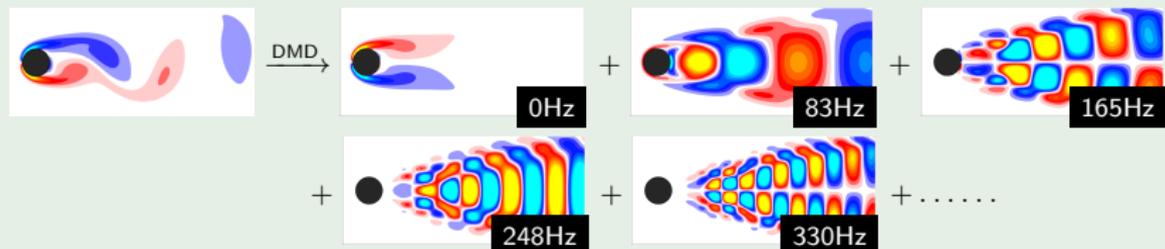


# Dynamic mode decomposition (DMD) (1/2)

動的モード分解 (DMD) : 力学系 (動的システム) のモード分解手法

- ▶ 流体力学の分野で広く利用 [Rowley+ '09, Schmid '10]
- ▶ その他の適用先: 流体制御, ロボティクス, 電力システム, 気象学, 神経科学, 疫学, 音響現象, 金融, コンピュータビジョン, ...
- ▶ 特徴抽出, 予測, 安定性解析, 最適制御などにも利用可能

## 例 (カルマン渦列)



→ 流れ場を少数のモード (w/ 周波数・減衰率) で表現できる。

# Dynamic mode decomposition (DMD) (2/2)

Input: 時系列データ  $(\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m)$  ( $m$  が時系列長)

## アルゴリズム (DMD [Tu+ '14])

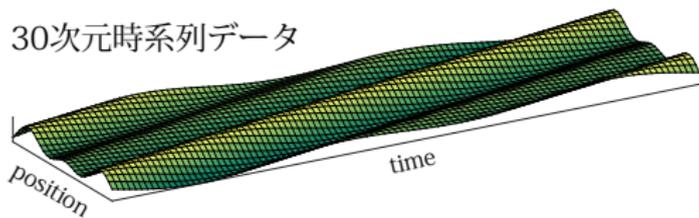
1.  $\mathbf{Y}_0 = [\mathbf{y}_0 \cdots \mathbf{y}_{m-1}] \in \mathbb{C}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{Y}_1 = [\mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_m] \in \mathbb{C}^{n \times m}$
2. 線形モデル  $\mathbf{Y}_1 \approx \mathbf{A}\mathbf{Y}_0$  の最小二乗推定:  $\mathbf{A} = \mathbf{Y}_1\mathbf{Y}_0^\dagger$
3.  $\mathbf{A}$  の固有値分解:  $\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \lambda_i\mathbf{w}_i$  for  $i = 1, \dots, n$ 
  - ▶ 高次元の場合は  $\mathbf{A}$  を直接は求めず, Krylov 部分空間や主成分空間に射影した行列の固有値を計算

Output: モード分解  $\mathbf{y}_t \approx \sum_{i=1}^n \lambda_i^t \mathbf{w}_i$

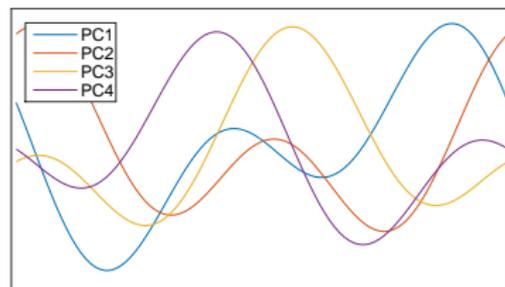
- ▶ 固有値  $\lambda_i \in \mathbb{C}$
- ▶ 動的モード  $\mathbf{w}_i \in \mathbb{C}^n$
- ▶ 固有値は, モードの周波数・減衰率

# 次元削減: PCA vs DMD

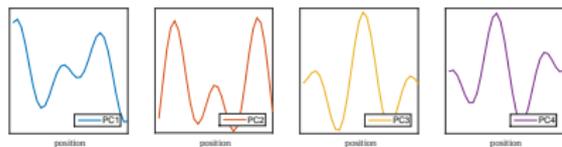
30次元時系列データ



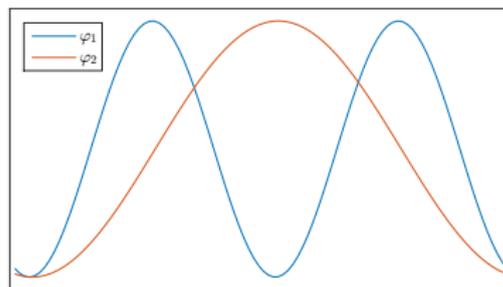
PCA



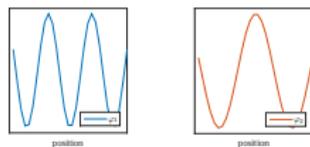
time



DMD



time



DMD: 時系列データのモード分解手法  
( $\mathbf{A} = \mathbf{Y}_1 \mathbf{Y}_0^\dagger$  の固有値分解)

なぜ線形のモード分解をして良いのか？

# Koopman spectral analysis

## 定義 (Koopman operator [Koopman '31])

非線形力学系  $\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_t)$  ( $\mathbf{x} \in \mathcal{M}$  は状態量)

- ▶ **observable** 関数  $g : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$  or  $\mathbb{C}$
- ▶ **Koopman operator** 作用素  $\mathcal{K}$  s.t.  $\mathcal{K}g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{f}(\mathbf{x}))$ 
  - ▶  $\mathcal{K}$  は 線形・無限次元 作用素

$\mathcal{K}$  は線形  $\rightarrow$  固有値・固有関数:  $\mathcal{K}\varphi_i(\mathbf{x}) = \lambda_i\varphi_i(\mathbf{x})$

- ▶  $g$  を  $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\}$  の線形和で表す:  $g(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} w_i\varphi_i(\mathbf{x}_0)$
- ▶ 両辺に  $\mathcal{K}^t$  を作用  $\rightarrow$  モード分解:  $g(\mathbf{x}_t) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^t w_i\varphi_i(\mathbf{x}_0)$
- ▶ 固有値  $\lambda_i$  は, モード  $w_i\varphi_i(\mathbf{x}_0)$  の周波数・減衰率

## Koopman spectral analysis: 言い方を変えると...

非線形力学系  $\xrightarrow{g, \mathcal{K}}$  線形力学系 に lift できる!

- ▶ しかし,  $\mathcal{K}$  は無限次元なので計算が難しい ☹  
→ Koopman invariant subspace への  $\mathcal{K}$  の制限によって有限次元化

**Recent theory** in the case of dissipative systems

# Koopman invariant subspace への $\mathcal{K}$ の制限

## 定義 (Koopman invariant subspace)

observable の空間を  $\mathcal{G}$  とする。Koopman invariant subspace  $G$  とは,

$$G \subset \mathcal{G} \quad \text{such that} \quad \forall g \in G, \mathcal{K}g \in G$$

無限次元線形作用素  $\mathcal{K} : \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$  の  $G$  への制限,  $K : G \rightarrow G$  を考える。

- ▶  $G$  が有限個の関数で張られる場合,  $K$  は有限次元線形作用素

## 仮定 (有限次元 $G$ の存在)

有限次元の Koopman invariant subspace  $G$  と, その基底  $\{g_1, \dots, g_n\}$  が存在する。

# Koopman invariant subspace による DMD の正当化

## 仮定 (有限次元 $G$ の存在)

有限次元の Koopman invariant subspace  $G$  と, その基底  $\{g_1, \dots, g_n\}$  が存在する.

## アルゴリズム (DMD [Tu+ '14])

1.  $\mathbf{Y}_0 = [\mathbf{y}_0 \ \dots \ \mathbf{y}_{m-1}] \in \mathbb{C}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{Y}_1 = [\mathbf{y}_1 \ \dots \ \mathbf{y}_m] \in \mathbb{C}^{n \times m}$
2. 線形モデル  $\mathbf{Y}_1 \approx \mathbf{A}\mathbf{Y}_0$  の最小二乗推定:  $\mathbf{A} = \mathbf{Y}_1\mathbf{Y}_0^\dagger$
3.  $\mathbf{A}$  の固有値分解:  $\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \lambda_i\mathbf{w}_i$  for  $i = 1, \dots, n$

$\mathbf{y}_t = [g_1(\mathbf{x}_t) \ \dots \ g_n(\mathbf{x}_t)]^\top$  である場合,  $\mathbf{A}$  が  $K$  と漸近的に一致.

i.e., 観測が  $G$  の基底からなる場合, **DMD** は非線形系にも適用可能 ☺

ここまで前置き

## ここからの内容

### ベイジアンの洗礼

- ▶ DMD を確率的に拡張 (probabilistic DMD)
- ▶ 確率的混合モデルとして利用 (mixtures of PDMD)
- ▶ パラメタにも事前分布をおいて、ベイズ的に拡張 (Bayesian DMD)
- ▶ 動的モード数の自動決定に利用 (ARD / sparse Bayesian DMD)

### PCA の確率的・ベイズ的拡張とのアナロジー

- ▶ probabilistic PCA [Tipping&Bishop '99]
- ▶ mixtures of PPCA [Tipping&Bishop '99]
- ▶ Bayesian PCA [Bishop '99]
- ▶ sparse probabilistic PCA [Guan&Dy '09]

# Probabilistic DMD

$K$  の固有値  $\lambda$ , 固有関数  $\varphi$  による  $\mathbf{g}$  のモード分解:

- ▶  $\mathbf{g}(\mathbf{x}_t) \approx \sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \varphi_i(\mathbf{x}_t)$
  - ▶  $\mathbf{g}(\mathbf{x}_{t+1}) \approx \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{w}_i \varphi_i(\mathbf{x}_t)$
- 確率モデル化

## 定義 (Probabilistic DMD)

データ  $\{\mathbf{g}(\mathbf{x}_0), \dots, \mathbf{g}(\mathbf{x}_m)\}$ , パラメタ  $\mathbf{w}_{1:n}, \lambda_{1:n}$ , 潜在変数  $\varphi_{0:m,1:n}$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_t) \sim \mathcal{CN} \left( \sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_{t+1}) \sim \mathcal{CN} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right)$$

$$\varphi_{t,i} \sim \mathcal{CN}(0, 1)$$

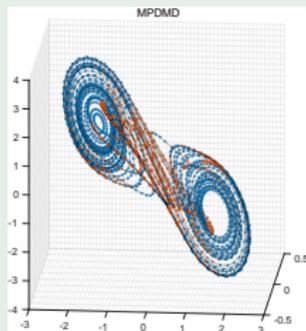
→ 最尤推定が total-least-squares DMD [Dawson+'16] と一致 ☺

# Probabilistic DMD の応用例: Mixtures of PDMD

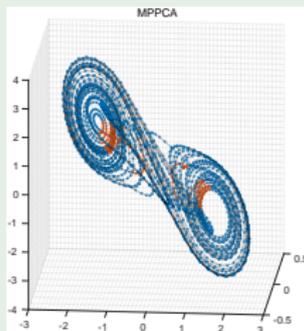
$k$  個の PDMD を用意し、各時刻のデータがいずれかの PDMD から生成されているとする。

## 例 (MPDMD)

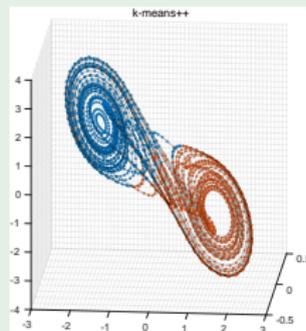
Chua 回路 [Matsumoto 84] で生成した軌跡に MPDMD ( $k = 2$ ) を適用し、クラスタ割当の事後分布により色分け:



MPDMD



MPPCA



k-means++

## Bayesian DMD (1/2)

### 定義 (Bayesian DMD)

Probabilistic DMD の尤度・ $\varphi$  の事前分布:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_t) \sim \mathcal{CN} \left( \sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_{t+1}) \sim \mathcal{CN} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right)$$

$$\varphi_{t,i} \sim \mathcal{CN}(0, 1)$$

にくわえて, パラメタ  $\mathbf{w}, \lambda$  の事前分布をおく:

$$\mathbf{w}_i | v_{i,1:n}^2 \sim \mathcal{CN}(\mathbf{0}, \text{diag}(v_{i,1}^2, \dots, v_{i,n}^2))$$

$$v_{i,d}^2 \sim \text{InvGamma}(\alpha_v, \beta_v)$$

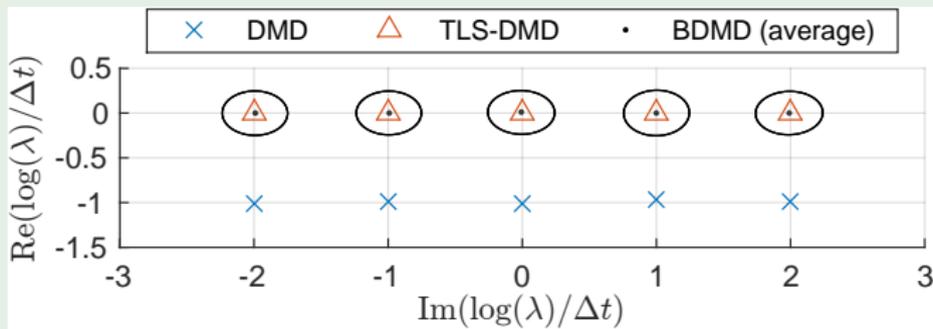
$$\lambda_i \sim \mathcal{CN}(0, 1), \quad \sigma^2 \sim \text{InvGamma}(\alpha_\sigma, \beta_\sigma)$$

→ Gibbs sampler が容易に構成可能 ☺

## Bayesian DMD (2/2)

### 例 (Bayesian DMD)

リミットサイクル (周期的な軌道) + 観測ノイズからデータを生成。  
→ 連続時間固有値 ( $\log(\lambda)/\Delta t$ ) は虚軸上に分布



- ▶ Bayesian DMD の結果は total-least-squares DMD と一致.
- ▶ Bayesian DMD によって, 固有値の事後分布が計算できる.

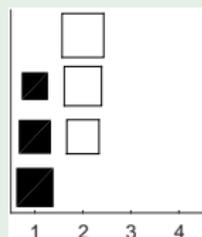
# Bayesian DMD の応用例: 関連度自動決定

動的モード  $w$  の事前分布をラプラス分布にすることで、動的モード数の選択（関連度自動決定, ARD）を行う。

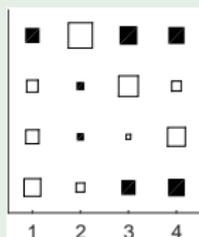
## 例 (ARD)

ランク落ち線形系  $\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t +$  観測ノイズからデータ生成。

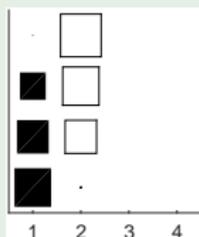
- ▶ SP-DMD [Jovanović+ '14]: lasso による後処理でモードを選択
- ▶ BDMD: ARD なしの Bayesian DMD
- ▶ BDMD-sp: Bayesian DMD + ARD prior



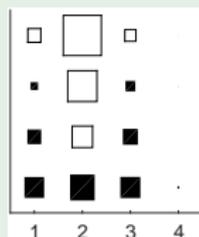
(a) true  $\mathbf{A}$



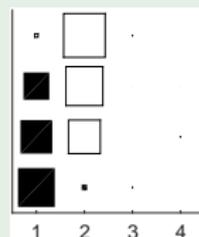
(b) DMD



(c) SP-DMD



(d) BDMD



(e) BDMD-sp

# まとめ

## 動的モード分解 (DMD)

- ▶ 一定条件下で非線形力学系に対しても適用可能なモード分解手法

## 貢献① DMD の確率的拡張

- ▶ 応用例として、混合確率的 DMD (MPDMD) を紹介

## 貢献② DMD のベイズ的拡張

- ▶ 応用例として、関連度自動決定 (ARD) を紹介

N. Takeishi et al.: Bayesian Dynamic Mode Decomposition, in *Proc. of IJCAI 2017*. もご覧ください.

武石 直也 (takeishi@ailab.t.u-tokyo.ac.jp)

# Sparse Bayesian DMD

## 定義 (Sparse Bayesian DMD)

尤度と  $\varphi$  の事前分布:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(\mathbf{x}_t) &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I}\right) \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_{t+1}) &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I}\right) \\ \varphi_{t,i} &\sim \mathcal{CN}(0, 1) \end{aligned}$$

パラメタの事前分布 ( $\gamma_i$  はハイパーパラメタ) :

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i | v_{i,1:n}^2 &\sim \mathcal{CN}(\mathbf{0}, \sigma^2 \text{diag}(v_{i,1}^2, \dots, v_{i,n}^2)) \\ v_{i,d}^2 &\sim \text{Exponential}(\gamma_i^2 / 2) \\ \lambda_i &\sim \mathcal{CN}(0, 1), \quad \sigma^2 \sim \text{InvGamma}(\alpha_\sigma, \beta_\sigma) \end{aligned}$$