

時変動的モード分解

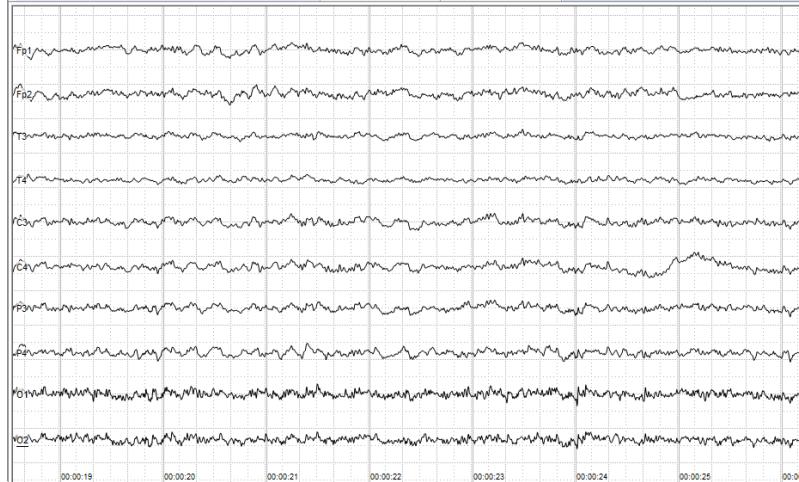
武石 直也 (理研AIP)

2019/6/7

第33回人工知能学会全国大会

背景

- 力学系／時系列信号を要約する量をデータから得たい



- Science 現象の分析・理解, 実験計画, etc.
- Engineering 圧縮, 機械学習のための特徴抽出, etc.

動的モード分解 (DMD)

[Rowley+, 2009; Schmid, 2010]

- 時系列データ

$$\{x_1, x_2, \dots, x_T\}, \quad x_t \in \mathcal{M} \subset \mathbb{C}^d \text{ or } \mathbb{R}^d$$

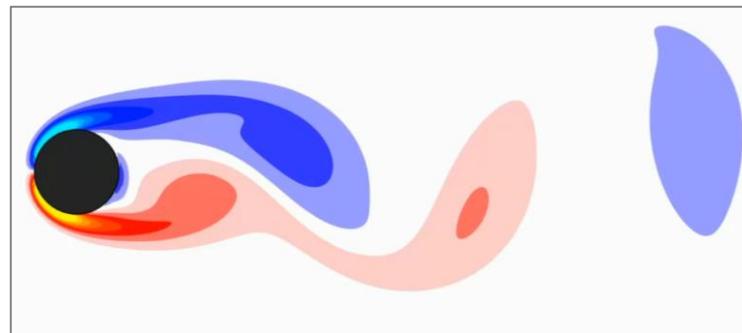
- DMD : 時間波形 \times 空間パタン (動的モード) の和に分解

$$x_t \approx \sum_{i=1}^r (\lambda_i)^t \cdot w_i, \quad \lambda_i \in \mathbb{C}, w_i \in \mathbb{C}^d$$

- 計算が容易 ... $x_{t+1} \approx Ax_t$ なる行列 A の固有値分解
- ノイズ対応, ベイズ推論, 非線形特徴量など様々な拡張
- Koopman作用素との関係性

動的モード分解の応用例 1/3

- coherent patterns の抽出 ... 例: 流体場 [無数の文献]



時系列データ



動的モード

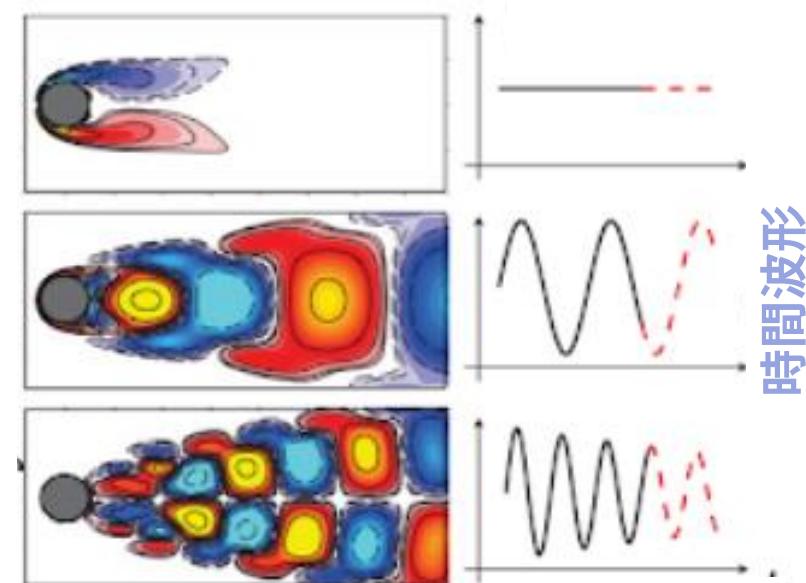
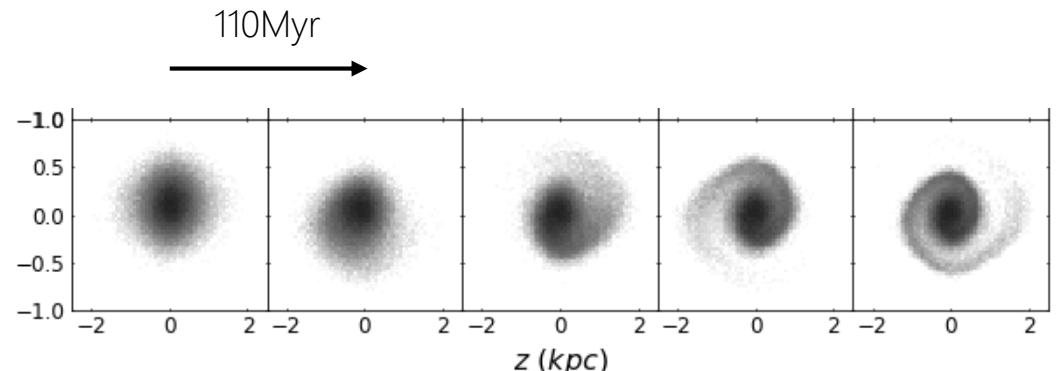


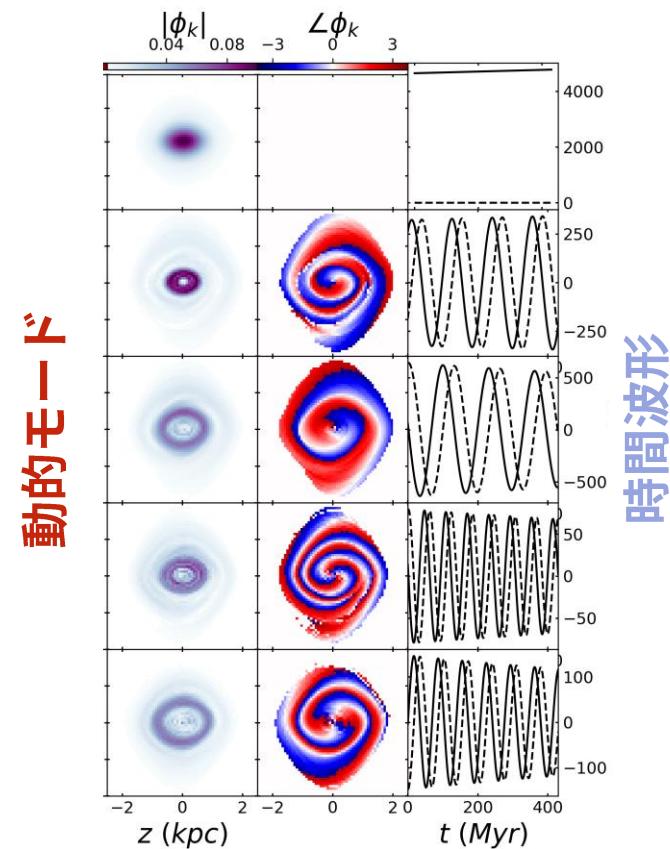
illustration from the book [Kutz+, 2016a]

動的モード分解の応用例 2/3

- coherent patterns の抽出 ... 例: 銀河形成 [Darling & Widrow, arXiv:1904.08896]

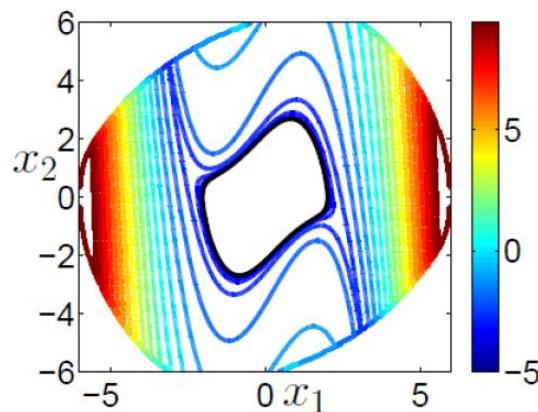


時系列データ

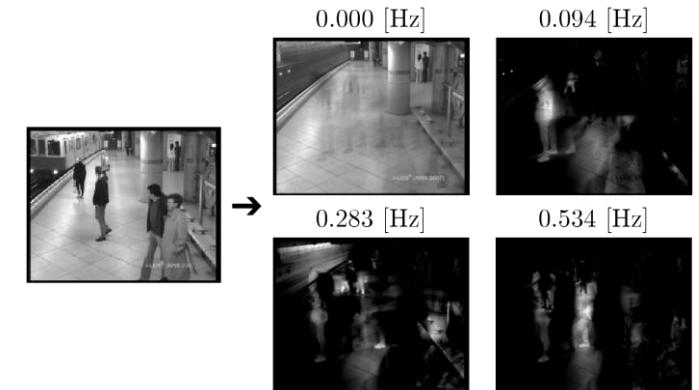


動的モード分解の応用例 3/3

- そのほか,
 - 状態空間の解析
 - reduced order modeling / 次元削減 / 特徴抽出
 - 信号処理
 - 制御器設計
- など



[Mauroy & Mezić, 2016]



[Takeishi+, 2017a]

動的モード分解の問題点

- (再掲) 動的モード分解

$$x_t \approx \sum_{i=1}^r (\lambda_i)^t \cdot w_i$$

- 各モードの時間波形 = 周波数 $\angle\lambda$, 減衰率 $|\lambda|$ を固定した正弦波
 - この簡単さのおかげで分解が解釈しやすい ☺
 - しかし, 時間変化する力学系
非周期的／off-attractor 軌道 に適用しにくい ☹
 - 既存の解決策 ... multi-resolution DMD [Kutz+, 2016b]
 - データを時間方向に分割し, 各時間領域でDMD ... 領域間の対応がとりにくい ☹

確率的動的モード分解 [Takeishi+, 2017b]

- (再掲) 動的モード分解

$$\boldsymbol{x}_t \approx \sum_{i=1}^r (\lambda_i)^t \cdot \boldsymbol{w}_i$$

- これを確率モデルで実現

$$\boldsymbol{x}_t \sim \text{CN}\left(\sum_i \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{\varphi}_{t,i}, \sigma^2 \boldsymbol{I}\right), \quad \boldsymbol{x}_{t+1} \sim \text{CN}\left(\sum_i \lambda_i \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{\varphi}_{t,i}, \sigma^2 \boldsymbol{I}\right),$$

$$\boldsymbol{\varphi}_{t,i} \sim \text{CN}(0, 1) \quad (\text{CN: circularly symmetric complex normal})$$

➤ 実際、この最尤推定は $\sigma^2 \rightarrow 0$ でDMDに一致

時変（確率的）動的モード分解

- (再掲) 動的モード分解の問題点
 - 各モードが周波数 ω , 減衰率 λ を固定した正弦波をもつ
→ 時変力学系, 非周期的軌道, 過渡現象に適用しにくい

- 動的モードの周波数・減衰率 (λ) が変化できるようにする

$$\mathbf{x}_t \sim \text{CN} \left(\sum_i \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right), \quad \mathbf{x}_{t+1} \sim \text{CN} \left(\sum_i \lambda_{t,i} \mathbf{w}_i \varphi_{t,i}, \sigma^2 \mathbf{I} \right),$$

$$\begin{bmatrix} \varphi_{t,i} \\ \lambda_{t,i} \end{bmatrix} \sim \text{CN} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ \lambda_{0,i} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & \omega_i \\ \bar{\omega}_i & \nu_i \end{bmatrix} \right)$$

潜在変数
として扱う

潜在変数 φ との相関も考慮した事前分布

パラメタ推定方法①

- モーメントマッチングによる方法

$$\mathbf{x}_t \sim \text{CN}(\mathbf{W}\boldsymbol{\varphi}_t, \sigma^2\mathbf{I}), \quad \mathbf{x}_{t+1} \sim \text{CN}(\mathbf{W}\text{diag}(\boldsymbol{\lambda}_t)\boldsymbol{\varphi}_t, \sigma^2\mathbf{I}),$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_t \\ \boldsymbol{\lambda}_t \end{bmatrix} \sim \text{CN}\left(\begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\lambda}_0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & \text{diag}(\boldsymbol{\omega}) \\ \text{diag}(\bar{\boldsymbol{\omega}}) & \boldsymbol{\nu} \end{bmatrix}\right),$$

where $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \ \cdots \ \mathbf{w}_r]$, $\boldsymbol{\lambda}_t = [\lambda_{t,1} \ \cdots \ \lambda_{t,r}]$, $\boldsymbol{\varphi}_t = [\varphi_{t,1} \ \cdots \ \varphi_{t,r}]$, etc.

- このモデルの下での x の 2, 3 次モーメント

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}_t \mathbf{x}_t^H] = \mathbf{W} \mathbf{W}^H + \sigma^2 \mathbf{I}, \quad \mathbb{E}[\mathbf{x}_t \mathbf{x}_{t+1}^H] = \mathbf{W} \text{diag}(\bar{\boldsymbol{\lambda}}_0) \mathbf{W}^H, \dots,$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}_{t+1} \mathbf{x}_t^H (\boldsymbol{\eta}^H \bar{\mathbf{x}}_t)] = 2 \mathbf{W} \text{diag}(\bar{\boldsymbol{\omega}}) \text{diag}(\mathbf{W}^H \bar{\boldsymbol{\eta}}) \mathbf{W}^H : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}$$

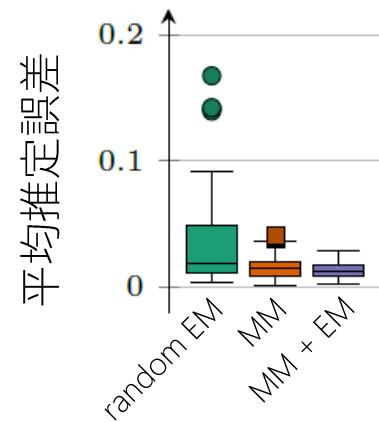
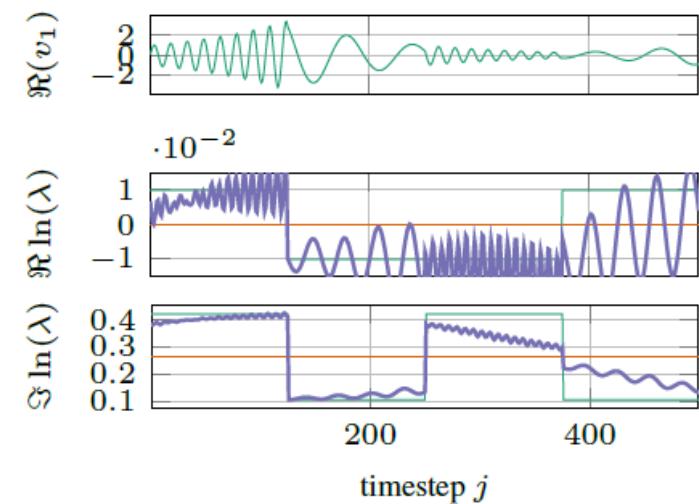
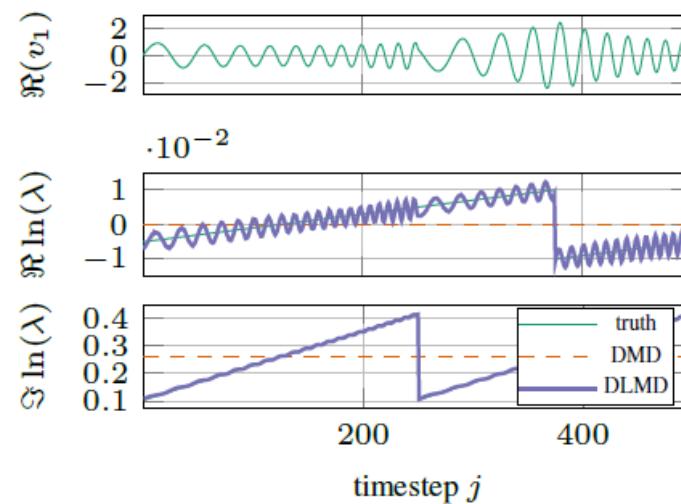
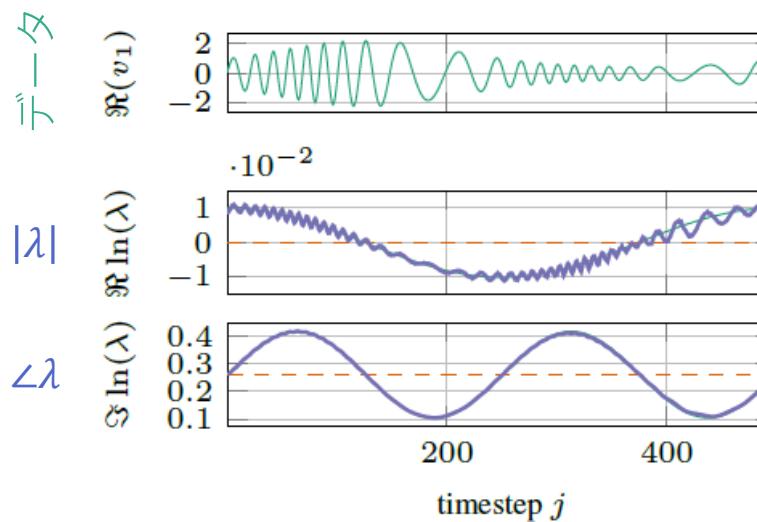
- データから推定したモーメントの同時行列分解でパラメタ推定

パラメタ推定方法②

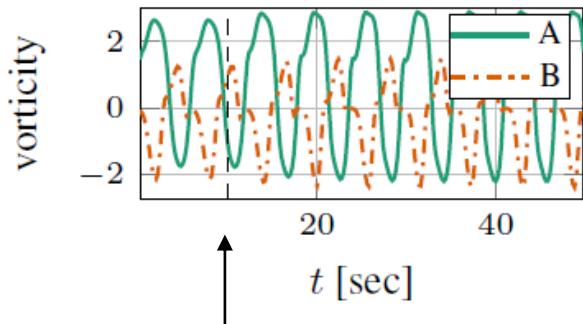
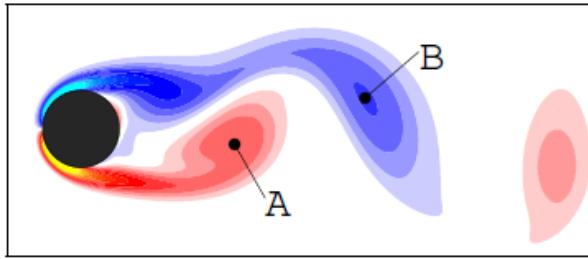
- EMアルゴリズムによる方法
 - Eステップ 潜在変数 φ, λ の事後分布を変分ベイズで近似推定
 - Mステップ 「↑の事後分布のもとでの完全データ尤度の期待値」を最大化することでパラメタ $\mathbf{W}, \sigma^2, \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\nu}$ を更新
- モーメントマッチング ... ☺ global solution ☹ ノイズに弱い
EMアルゴリズム ... ☹ local solution (初期化に注意が必要)
 - モーメントマッチングで初期値を得て、EMで更新

実験① トイプロブレム

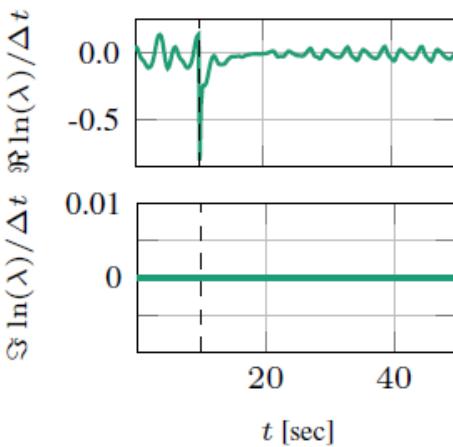
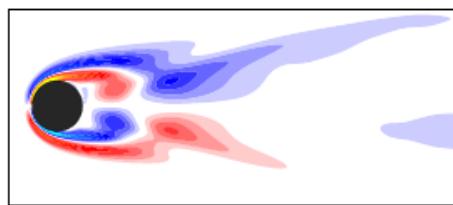
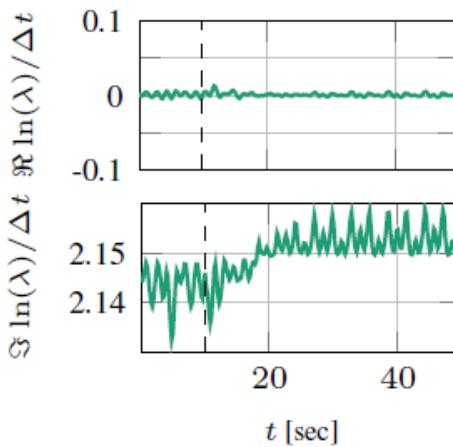
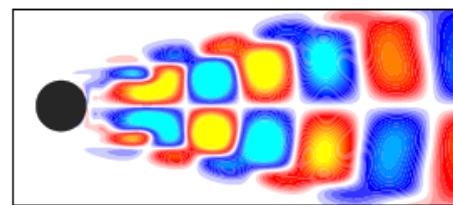
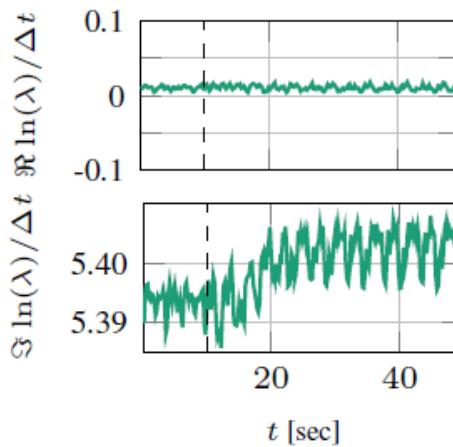
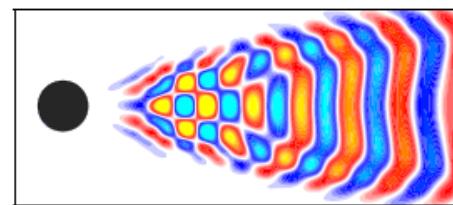
- $x_{t+1} = \text{diag}[\lambda_{t,i} \ \bar{\lambda}_{t,i}]x_t$ からデータを生成
→ ノイズを付加 → $\mathbb{E}[\lambda_{t,i}]$ を推定
- SNR小のとき、特に $|\lambda|$ の推定が不正確



実験② 条件の変化する流体場



流速変更
at $t = 10\text{s}$



まとめ

- 動的モード分解は、時系列データを
時間波形×空間パターン（動的モード）の和に分解する手法
 - 周波数・減衰率が固定された時間波形が得られる
 - しかし、現実的にはもう少し柔軟な分解を得たい.....
- そこで、周波数・減衰率が変化しうる動的モード分解を提案
 - 3次モーメントまで利用したモーメントマッチングで解ける
 - ただ、実用のためには時間方向のなめらか性等があった方がよさそう

謝辞 本研究にあたり、河原吉伸氏（九大／理研）、藤井慶輔氏（名大）
にご議論をいただきました。

参考文献

- [Kutz+, 2016a] Kutz *et al.*, *Dynamic mode decomposition: Data-driven modeling of complex systems*, SIAM, 2016.
- [Kutz+, 2016b] Kutz *et al.*, Multiresolution dynamic mode decomposition, *SIAM J. on Applied Dynamical Systems*, **15**(2):713-735, 2016.
- [Mauroy & Mezić, 2016] Mauroy and Mezić, Global stability analysis using the eigenfunctions of the Koopman operator, *IEEE Trans. on Automatic Control*, **61**(11):3356-3369, 2016.
- [Rowley+, 2009] Rowley *et al.*, Spectral analysis of nonlinear flows, *J. of Fluid Mechanics*, **641**:115-127, 2009.
- [Schmid, 2010] Schmid, Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, *J. of Fluid Mechanics*, **656**:5-28, 2010.
- [Takeishi+, 2017a] Takeishi *et al.*, Sparse nonnegative dynamic mode decomposition, in *Proc. of ICIP*, 2017.
- [Takeishi+, 2017b] Takeishi *et al.*, Bayesian dynamic mode decomposition, in *Proc. of IJCAI*, 2017.