

時変動的モード分解

Time-Varying Dynamic Mode Decomposition

武石 直也

Naoya Takeishi

理化学研究所 革新知能統合研究センター

RIKEN Center for Advanced Intelligence Project

In this talk, I introduce a data-driven method for modal decomposition of possibly time-varying dynamical systems. The formulation of the method is based on the probabilistic version of dynamic mode decomposition (DMD). While DMD and its many variants extract modes with fixed frequencies and decay rates, the proposed method aims to extract modes that have time-varying frequencies and decay rates. I show, with the results of preliminary experiments, that the proposed method works properly on time-varying dynamics.

1. 背景

1.1 動的モード分解

動的モード分解 (dynamic mode decomposition, DMD) [Schmid 10, Rowley+ 09] とは、時系列データ^{*1}を比較的少数の動的モードと呼ばれる要約量に分解して表現する手法である。そのようなモード分解表現は、流体場観測などの高次元時系列データの理解、制御器の設計、信号処理などに活用されてきた。

時系列データ $\{\mathbf{v}_j \in \mathbb{C}^d \mid j = 0, 1, \dots, m\}$ をもっているとする。ただし、 j は時刻にあたるインデックスである。DMD は最終的に次のようなモード分解表現を与える：

$$\mathbf{v}_j \approx \sum_{i=1}^r (\lambda_i)^j \mathbf{w}_i \varphi_{i,0}, \quad \text{for } j = 0, \dots, m. \quad (1)$$

式 (1) は次のように解釈できる。すなわち、時刻 j における観測 \mathbf{v}_j は、 i 番目の空間パターンを表すベクトル (動的モードと呼ぶ) $\mathbf{w}_i \in \mathbb{C}^d$ の線形結合 (for $i = 1, \dots, r$) で表され、 \mathbf{w}_i は減衰率 $|\lambda_i|$ および角振動数 $\angle \lambda_i$ をもつ。なお、 $\varphi_{i,0}$ は初期条件に依存する係数である。DMD はこのように時系列データをいくつかの (減衰) 振動モードに分解する手続きである。この形式の分解は力学系のクープマン作用素 [Mezić 05] と関連付けて論じられることがあり、DMD は (一定の条件のもとで) 非線形力学系から得られた時系列データにも適用する意味があると考えられている。

式 (1) の分解を計算する方法はいくつか提案されてきた。よく用いられるのは、次のように線形モデリングと固有値分解に基づく方法である。まず、

$$\mathbf{x}_j := \mathbf{v}_{j-1}, \quad \mathbf{y}_j := \mathbf{v}_j, \quad \text{for } j = 1, \dots, m,$$

と表し、次のふたつのデータ行列を考える：

$$\mathbf{X} := [\mathbf{x}_1 \quad \dots \quad \mathbf{x}_m], \quad \mathbf{Y} := [\mathbf{y}_1 \quad \dots \quad \mathbf{y}_m].$$

さらに、 $\mathbf{A} := \mathbf{Y}\mathbf{X}^\dagger$ とする。ただし \mathbf{X}^\dagger は \mathbf{X} の疑似逆行列。このとき、DMD の λ_i および \mathbf{w}_i は、 \mathbf{A} の (任意の順序

連絡先: naoya.takeishi@riken.jp

^{*1} 等間隔の時系列データである必要はなく、等間隔または間隔のわかっていない観測ペアの集合があればよい。

で) i 番目の固有値および固有ベクトルとして得られる。上記の手順は $r = d$ のときそのまま実行してよい。 $r < d$ の場合は、特異値分解による次元削減がはさまれる。詳しくは文献 [Schmid 10, Tu+ 14]などを参照。

1.2 確率的動的モード分解

DMD のような分解はデータの確率モデリングとそのパラメタ推定でも実現できる。確率的 DMD [Takeishi+ 17] では、データに対して次の確率モデルを考える：

$$\begin{cases} \mathbf{x}_j \sim \mathcal{CN}(\sum_{i=1}^r \mathbf{w}_i \varphi_{i,j}, \sigma^2 \mathbf{I}), \\ \mathbf{y}_j \sim \mathcal{CN}(\sum_{i=1}^r \lambda_i \mathbf{w}_i \varphi_{i,j}, \sigma^2 \mathbf{I}), \end{cases} \quad \text{for } j = 1, \dots, m. \quad (2)$$

ただし、 $\mathcal{CN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ は平均 $\boldsymbol{\mu}$ 、分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ の複素正規分布である。ここで、 λ および \mathbf{w} は通常の DMD と同様の意味合いのパラメタであり、 σ^2 は観測ノイズを表すパラメタである。また、 φ は潜在変数であり次の事前分布をおく：

$$\varphi_{i,j} \sim \mathcal{CN}(0, 1), \quad \text{for } j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3)$$

観測ノイズ σ^2 がゼロの場合、潜在変数 φ を周辺化した際の λ および \mathbf{w} の最尤推定は DMD の一種の解と一致する [Takeishi+ 17]。

2. 時変動的モード分解

DMD によるモード分解表現は空間パターン (動的モード) \mathbf{w} それぞれに減衰率/振動数 λ が付随する形であるため解釈がしやすい。しかし、その欠点のひとつは動的モードが常に一定の減衰率/振動数をもつという仮定にある。この仮定は、リミットサイクルにある現象をとらえたデータや短期間のデータであれば大きな問題にならないことが多いが、過渡的な現象をとらえたデータや長期間のデータの解析では成り立たず分解表現が不適切になるおそれがある。そこで本稿では、確率的 DMD のパラメタ λ を可変にすることを提案する。

2.1 モデル

提案手法では、観測モデルは式 (2) のかわりに次のようにおく。これは λ_i が時刻によって異なる値がとれるようにされているだけである。

$$\begin{cases} \mathbf{x}_j \sim \mathcal{CN}(\sum_{i=1}^r \mathbf{w}_i \varphi_{i,j}, \sigma^2 \mathbf{I}), \\ \mathbf{y}_j \sim \mathcal{CN}(\sum_{i=1}^r \lambda_{i,j} \mathbf{w}_i \varphi_{i,j}, \sigma^2 \mathbf{I}), \end{cases} \quad \text{for } j = 1, \dots, m. \quad (4)$$

$\lambda_{i,j}$ は点推定されるパラメタではなく事前分布を持つ潜在変数として扱われる．潜在変数 φ と新しい潜在変数 λ の事前分布は次のように置く．

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \varphi_j \\ \lambda_j \end{bmatrix} &\sim \mathcal{CN} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\lambda}_0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \text{diag}(\boldsymbol{\omega}) \\ \text{diag}(\boldsymbol{\omega})^H & \text{diag}(\boldsymbol{\nu}) \end{bmatrix} \right), \\ &\text{for } j = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし, $\varphi_j := [\varphi_{1,j} \dots \varphi_{r,j}]^T$ および $\lambda_j := [\lambda_{1,j} \dots \lambda_{r,j}]^T$ と表した．また, $\boldsymbol{\lambda}_0 := [\lambda_{1,0} \dots \lambda_{r,0}] \in \mathbb{C}^r$, $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{C}^r$, および $\boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^r$ は新たなパラメタである． \cdot^H は行列の複素共役転置を表す．このモデルでは, $\lambda_{i,j}$ は一定の値をもつパラメタではなく $\lambda_{i,0}$ のまわりに分布するため, 各時刻で異なる実現値を取り得る．

2.2 モーメントマッチングによるパラメタ推定

式 (4) および式 (5) で表される確率モデルのパラメタ推定はモーメントマッチング (文献 [Anandkumar+ 14, Anandkumar+ 15] などを参照) で行うことができる．基本的な考え方は次の通りである．式 (4) および式 (5) から, \mathbf{x} と \mathbf{y} に関する二次のモーメントは次のように表される．

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^H] = \mathbf{W} \mathbf{W}^H + \sigma^2 \mathbf{I}, \quad (6)$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}_j \mathbf{y}_j^H] = \mathbf{W} \text{diag}(\bar{\boldsymbol{\lambda}}_0) \mathbf{W}^H, \quad (7)$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{y}_j \mathbf{y}_j^H] = \mathbf{W} \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}_0 \circ \bar{\boldsymbol{\lambda}}_0 + \boldsymbol{\omega} \circ \bar{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\nu}) \mathbf{W}^H + \sigma^2 \mathbf{I}. \quad (8)$$

ただし, \cdot は複素共役を表す．また, $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{C}^d$ として, 三次のモーメントに対応する写像

$$T(\boldsymbol{\eta}) := \mathbb{E}[\bar{\mathbf{y}}_j \mathbf{x}_j^T (\boldsymbol{\eta}^T \mathbf{x}_j)] : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d},$$

を考える．この量は

$$\mathbb{E}[\bar{\mathbf{y}}_j \mathbf{x}_j^T (\boldsymbol{\eta}^T \mathbf{x}_j)] = 2\mathbf{W} \text{diag}(\bar{\boldsymbol{\omega}}) \text{diag}(\mathbf{W}^H \bar{\boldsymbol{\omega}}) \mathbf{W}^H, \quad (9)$$

と表せる．これらのモーメントはデータを用いて推定できる．そこで, 式 (6) から式 (9) の関係を用いて, モーメントからパラメタ σ^2 , $\boldsymbol{\lambda}_0$, \mathbf{W} , $\boldsymbol{\omega}$, および $\boldsymbol{\nu}$ を推定する．この推定には行列の同時対角化などを用いる [Anandkumar+ 15]．

2.3 EM アルゴリズムによるパラメタの改善

上記のようなモーメントマッチングによる方法では, モーメントをデータから正確に推定することが難しいためにパラメタ推定も不正確になることがある．また, モーメントマッチングでは潜在変数 φ および λ の事後分布は得られない．特に, λ の事後分布はモードの減衰率/振動数が時刻によってどう異なるかを知るために有用であるから推論したい．

そこで, 潜在変数の事後分布推論 (E ステップ) とパラメタ更新 (M ステップ) を繰り返す EM アルゴリズムを行うことを考える．EM アルゴリズムの収束先が大域解である保証は一般にはないが, モーメントマッチングで得られるパラメタを初期値として EM アルゴリズムを適用することで局所解の問題を回避できる．なお, E ステップにおいて事後分布は解析的には得られないため, 次の平均場近似のもとで変分ベイズ法による近似を行う :

$$\begin{aligned} p(\varphi_j, \lambda_j | \mathbf{X}, \mathbf{Y}) &\approx q(\varphi_j) q(\lambda_j) \\ &:= \mathcal{CN}(\mathbf{m}_j^\varphi, \mathbf{V}_j^\varphi) \mathcal{CN}(\mathbf{m}_j^\lambda, \mathbf{V}_j^\lambda). \end{aligned}$$

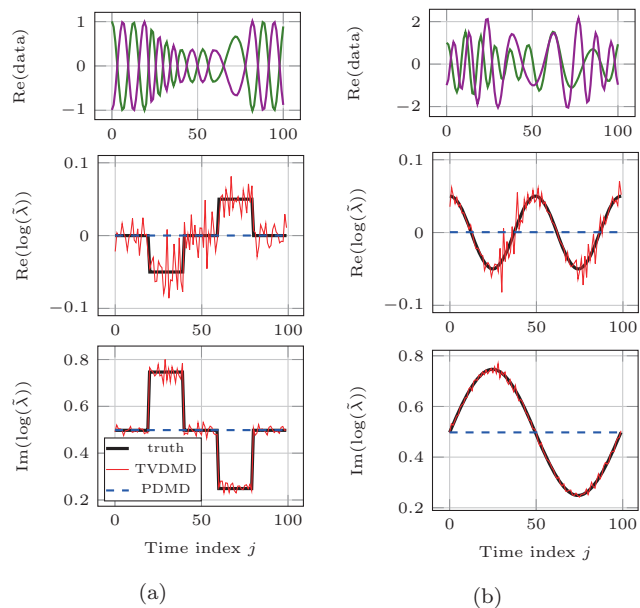


図 1: (a) 矩形波 λ , (b) 正弦波 λ の設定による実験データ (上部), $\log(\lambda)$ の実部の推定結果 (中部), および $\log(\lambda)$ の虚部の推定結果 (下部)．TVDMD が提案手法, PDMD が通常の確率的 DMD を表す．

E ステップでは, $\mathbf{m}_{1:m}^{\varphi, \lambda}$ および $\mathbf{V}_{1:m}^{\varphi, \lambda}$ についての最適化を行うことになる．一方, M ステップでは

$$\mathbb{E}_{q(\varphi_j)q(\lambda_j)} \left[\sum_{j=1}^m \log p(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j, \varphi_j, \lambda_j) \right],$$

の最大化を σ^2 , $\boldsymbol{\lambda}_0$, \mathbf{W} , $\boldsymbol{\omega}$, および $\boldsymbol{\nu}$ について行う．

3. 関連研究

DMD を時不変でない力学系に適用しようとする試みはこれまでもいくつか存在する．Multi-resolution DMD [Kutz+ 16] では, 低周波成分の除去とデータの分割を繰り返し行うことで, データの (時間) 領域ごとに異なる動的モードを抽出することを可能にしている．文献 [Mezić and Surana 16] では, 周期的に変化する力学系に対する分解を考えている．また, 文献 [Maćešić 17] では, DMD を逐次的に計算することで力学系の変化に対応させることを提案している．さらに, 筆者らは factorially-switching DMD [Takeishi+ 18] と題して, 動的モードが各時刻でオン/オフになるモデルを提案した．

4. 実験結果

次のようにデータを生成した． $j = 1, \dots, 100$ について,

$$\mathbf{h}_j = \begin{bmatrix} \lambda_j & 0 \\ 0 & \bar{\lambda}_j \end{bmatrix} \mathbf{h}_{j-1}, \quad \mathbf{v}_j = \mathbf{h}_j + \mathbf{e}_j, \quad (10)$$

ただし, \mathbf{e} は観測ノイズで各要素は平均 0, 分散 0.01 の正規分布から生成される．また, λ_j は j によって変化するように設定した．今回は二種類の設定を試した．ひとつは矩形波のように λ が変化する設定で, その設定による \mathbf{v} を図 1a 上部に示した．もうひとつは正弦波のように λ が変化する設定で, その設定による \mathbf{v} を図 1b 上部に示した．

それぞれの設定での提案手法 (TVDM) および通常の確率的 DMD (PDMD) による λ の推定結果を図 1a および 1b の中部と下部に示した。PDMD による推定 (青点線) は真値 (黒実線) に関係なく常に一定の λ となっている一方, TVDM による推定 (赤実線) は真値によく追従している。 $\log(\lambda)$ の実部, すなわち減衰・発散に係る成分の推定には若干のぶれが見られる。ただし, そもそも $\text{Re}(\log(\lambda))$ のスケールが小さいことには注意。 $\log(\lambda)$ の虚部, すなわち振動に係る成分は比較的きれいに推定できている。

5. まとめ

本稿では, 時間的に変化する減衰率や振動数をもつ動的モードを計算するための方法を提案した。提案手法は確率モデリング, モーメントマッチングによるパラメータ推定, および EM アルゴリズムによるパラメータ推定に基づいている。モーメントマッチングによって無意味な局所解を避けることができるのが利点である。また, 本稿の最後では予備実験の結果を示し, 提案手法が時間的に変化する減衰率や振動数を推定できることを確認した。今後, 流体場データやモーションキャプチャデータなどに本手法を適用し, 有用な動的モード抽出が行えるかを確認するための実験を進める。

参考文献

- [Anandkumar+ 14] Anandkumar, A., Ge, R., Hsu, D., Kakade, S. M., and Telgarsky, M.: Tensor decomposition for learning latent variable models. *Journal of Machine Learning Research*, 15:2773–2832, 2014.
- [Anandkumar+ 15] Anandkumar, A., Foster, D. P., Hsu, D., Kakade, S. M., and Liu, Y.-K.: A spectral algorithm for latent Dirichlet allocation. *Algorithmica*, 72:193–214, 2015.
- [Kutz+ 16] Kutz, J. N., Fu, X., and Brunton, S. L.: Multiresolution dynamic mode decomposition. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 15(2):713–735, 2016.
- [Maćešić 17] Maćešić, S., Črnjarić-Žic, N., and Mezić, I.: Koopman operator family spectrum for nonautonomous systems – Part 1. arXiv:1703.07324
- [Mezić 05] Mezić, I.: Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions. *Nonlinear Dynamics*, 41:309–325, 2005.
- [Mezić and Surana 16] Mezić, I. and Surana, A.: Koopman mode decomposition for periodic/quasi-periodic time dependence. In *IFAC-PapersOnLine*, vol. 49, no. 18, pp. 690–697, 2016.
- [Rowley+ 09] Rowley, C. W., Mezić, I., Bagheri, S., Schlatter, P., and Henningson, D. S.: Spectral analysis of nonlinear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 641:115–127, 2009.
- [Schmid 10] Schmid, P. J.: Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data. *Journal of Fluid Mechanics*, 656:5–28, 2010.
- [Takeishi+ 17] Takeishi, N., Kawahara, Y., Tabei, T., and Yairi, T.: Bayesian dynamic mode decomposition. In *Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence*, pp. 2814–2821, 2017.
- [Takeishi+ 18] Takeishi, N., Yairi, T., and Kawahara, Y.: Factorially switching dynamic mode decomposition for Koopman analysis of time-variant systems. In *Proceedings of the 57th IEEE Conference on Decision and Control*, pp. 6402–6408, 2018.
- [Tu+ 14] Tu, J. H., Rowley, C. W., Luchtenburg, D. M., Brunton, S. L., and Kutz, J. N.: On dynamic mode decomposition: Theory and applications. *Journal of Computational Dynamics*, 1(2):391421, 2014.