4I2-4

ベイズ的動的モード分解

Bayesian Dynamic Mode Decomposition

武石 直也 [*1] 河原 吉伸 [*2*3] 矢入 健久 [*1]
Naoya Takeishi Yoshinobu Kawahara Takehisa Yairi

[*1]東京大学大学院 工学系研究科
School of Engineering, the University of Tokyo

[*2]大阪大学 産業科学技術研究所
The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University

[*3]理化学研究所 革新知能統合研究センター
Center for Advanced Intelligence Project, RIKEN

Dynamic mode decomposition (DMD) is a data-driven method for calculating a modal representation of a nonlinear dynamical system, and has been utilized in various fields of science and engineering. In this talk, we introduce reformulations of DMD, namely *probabilistic DMD* and *Bayesian DMD*, with which we can explicitly incorporate observation noises, conduct posterior inference on DMD-related quantities and consider extensions of DMD in a systematic way. Furthermore, we introduce two examples of application: *Bayesian sparse DMD* and *mixtures of probabilistic DMD*.

1. 背景

複雑な現象の理解のために何らかの基準でモデルやデータを複数のモードに分解することは解析の標準的な手法のひとつである．中でも，固有直交分解（proper orthogonal decomposition，POD）は力学系をエネルギーに基づいたモードに分解する手法として知られる（[Holmes+ 12] などを参照されたい）．また，データに基づく POD と同様の手順からなる手法として固有値分解（principal component analysis，PCA）も広く用いられている（[Jolliffe 02] などを参照）．

動的モード分解（dynamic mode decomposition，DMD）は非線形ダイナミクスに基づくデータに対するモード分解手法として注目を集めており，流体解析の分野 [Rowley+ 09, Schmid 10] で提案されてから，様々な分野で応用されている（[Susuki+ 14, Proctor+ 15, Berger+ 15, Brunton+ 16a, Kutz+ 16] など）．なお，DMD の流体解析での使用例を知るためには [Rowley+ 09, Schmid 10] を，手続きの詳細については [Tu+ 14] を，Koopman 解析との関係からなる理論的詳細については [Budišić+ 12, Mezić 13, Tu+ 14] を参照されたい．一般的に用いられている DMD のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す．

Algorithm 1 (Dynamic mode decomposition [Tu+ 14])**.**

(1) 時系列 $\{\boldsymbol{y}_0, \dots, \boldsymbol{y}_m\}$ から，次のデータ行列を作成する．

$$\boldsymbol{Y}_0 = \begin{bmatrix}\boldsymbol{y}_0 & \dots & \boldsymbol{y}_{m-1}\end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{Y}_1 = \begin{bmatrix}\boldsymbol{y}_1 & \dots & \boldsymbol{y}_m\end{bmatrix}. \tag{1}$$

ただし，$\boldsymbol{y}_i \in \mathbb{C}^n$．

(2) $r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{Y}_0)$ として，特異値分解 $\boldsymbol{Y}_0 = \boldsymbol{U}_r \boldsymbol{S}_r \boldsymbol{V}_r^{\mathsf{H}}$ を計算する．ただし，$\boldsymbol{U}_r \in \mathbb{C}^{n\times r}$，$\boldsymbol{S}_r \in \mathbb{C}^{r\times r}$，$\boldsymbol{V}_r \in \mathbb{C}^{m\times r}$．

(3) 行列 $\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{U}_r^{\mathsf{H}} \boldsymbol{Y}_1 \boldsymbol{V}_r \boldsymbol{S}_r^{-1}$ の固有値 λ，固有ベクトル $\tilde{\boldsymbol{w}}$ を計算する．

(4) 固有値 λ に対応する動的モード $\boldsymbol{w} = \lambda^{-1} \boldsymbol{Y}_1 \boldsymbol{V}_r \boldsymbol{S}_r^{-1} \tilde{\boldsymbol{w}}$ を計算する．

Contact: Naoya Takeishi, the University of Tokyo, Tokyo, Japan. takeishi@ailab.t.u-tokyo.ac.jp

Algorithm 1 は，行列 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Y}_1 \boldsymbol{Y}_0^\dagger$（$\dagger$ は Moore–Penrose pseudoinverse を示す）の固有値・固有ベクトルを計算しているに過ぎない．行列 $\boldsymbol{A}$ はデータの遷移を線形に「近似した」ものとして見なせるが，一定条件下において，この線形モデリングは非線形力学系から生成されたデータに対しても正当化できる．その条件は主に，データが力学系の Koopman 作用素 [Koopman 31, Mezić 05, Mezić 13] に関する不変部分空間をなす観測関数から生成されているということである．詳しくは [Tu+ 14, Brunton+ 16b] を参照されたい．エルゴード仮定における DMD の Koopman 解析への収束については，[Arbabi+ 16] が参考になる．

本稿では，DMD に対応する確率モデルを示し（Section 2.），DMD のベイズ的拡張を提案する（Section 3.）．また，確率的／ベイズ的扱いによる応用例として，ベイズ的スパース DMD（Section 4.）および混合確率的 DMD（Section 5.）を紹介する．DMD とこれらの拡張との関係は，PCA とその拡張である確率的 PCA [Tipping+ 99a]，ベイズ的 PCA [Bishop 99]，確率的スパース PCA [Guan+ 09] および混合確率的 PCA [Tipping+ 99b] との関係とよく似ている．

2. 確率的 DMD

式 (1) から記法を変更して，行列 $\boldsymbol{Y}_\ell$ の j 列目をベクトル $\boldsymbol{y}_{\ell,j} \in \mathbb{C}^n$ で表す（$\ell = 0, 1$，$j = 1, \dots, m$）．このデータベクトルに対して，次の観測モデルをおく．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}_{0,j} | \varphi_{1:k,j} &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^{k} \varphi_{i,j} \boldsymbol{w}_i,\ \sigma^2 \boldsymbol{I}\right), \\ \boldsymbol{y}_{1,j} | \varphi_{1:k,j} &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_i \varphi_{i,j} \boldsymbol{w}_i,\ \sigma^2 \boldsymbol{I}\right).\end{aligned} \tag{2}$$

ただし，$\mathcal{CN}(\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \boldsymbol{I})$ は平均 $\boldsymbol{\mu}$，分散 σ^2 の複素正規分布である．また，$\boldsymbol{w}_{1:k}$，$\lambda_{1:k}$ および σ^2 はモデルのパラメタである．一方，$\varphi_{i,j}$ には次の事前分布を考える．

$$\varphi_{i,j} \sim \mathcal{CN}(0,\ 1). \tag{3}$$

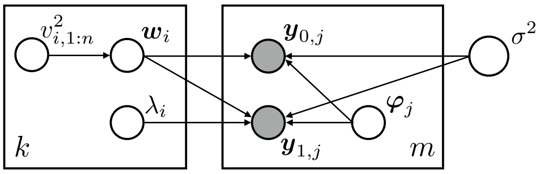


図 1: A graphical model of Bayesian DMD.

$(\boldsymbol{Y}_0, \boldsymbol{Y}_1)$ が与えられたときの $\boldsymbol{w}_{1:k}$ および $\lambda_{1:k}$ の最尤推定量は total-least-squares DMD (TLS-DMD，[Dawson+ 16]）の出力と一致する．特に，データにノイズがない場合（$\sigma^2 \to 0$）には Algorithm 1 の出力と一致する．

3.　ベイズ的 DMD

モデル (2) 中のパラメタについても事前分布を考えることで，ベイズ的扱いを実現する．まず $\boldsymbol{w}_{1:k}$ について，

$$\boldsymbol{w}_i | v^2_{i,1:n} \sim \mathcal{CN}\left(\boldsymbol{0},\ \mathrm{diag}\left(v^2_{i,1}, \ldots, v^2_{i,n}\right)\right). \tag{4}$$

さらに $v^2_{i,d}$ $(d = 1, \ldots, n)$ について，

$$v^2_{i,d} \sim \mathrm{InvGamma}\left(\alpha_v,\ \beta_v\right). \tag{5}$$

また $\lambda_{1:k}$ および σ^2 について，

$$\lambda_i \sim \mathcal{CN}\left(0,\ 1\right), \quad \sigma^2 \sim \mathrm{InvGamma}\left(\alpha_\sigma,\ \beta_\sigma\right). \tag{6}$$

以上をグラフィカルモデルで表すと Figure 1 のようになる．本研究では，ベイズ的 DMD における事後分布推論は Gibbs sampling によって行った．

Example 1 (観測ノイズのあるデータに対する DMD). Stuart–Landau 方程式：

$$r_{t+1} = r_t + \Delta t(\mu r_t - r_t^3), \quad \theta_{t+1} = \theta_t + \Delta t(\gamma - \beta r_t^2)$$

は，$r = \sqrt{\mu}$ にリミットサイクルをもつ．そこで，$\mu = 1, \gamma = 1, \beta = 0, \Delta t = 0.01, r_0 = \sqrt{\mu}, \theta_0 = 0$ において 10,000 ステップの数値積分を行い，次の観測関数でデータを生成した（$\boldsymbol{e}_t$ は平均ゼロ，分散 10^{-4} の白色雑音）．

$$\boldsymbol{y}_t = \begin{bmatrix} e^{-2i\theta_t} & e^{-i\theta_t} & 1 & e^{i\theta_t} & e^{2i\theta_t} \end{bmatrix}^\mathsf{T} + \boldsymbol{e}_t.$$

DMD（Algorithm 1），TLS-DMD [Dawson+ 16] およびベイズ的 DMD（BDMD）による固有値の推定結果を Figure 2 に示す． ただし，図中の黒線楕円はサンプリング結果の 95%信用区間を示す．TLS-DMD と BDMD ではともに正しい推定が得られているが，BDMD によって点推定ではなく事後分布の推定が得られている．

4.　ベイズ的スパース DMD

ベイズ的 DMD の事前分布の一部を変更することで，動的モードに関してスパース正則化をおいた DMD を実現することができる．具体的には，事前分布 (4) および (5) を次のように変更する．

$$\boldsymbol{w}_i | v^2_{i,1:n} \sim \mathcal{CN}\left(\boldsymbol{0}, \sigma^2\,\mathrm{diag}\left(v^2_{i,1}, \ldots, v^2_{i,n}\right)\right), \tag{7}$$

$$v^2_{i,d} \sim \mathrm{Exponential}(\gamma_i^2/2). \tag{8}$$

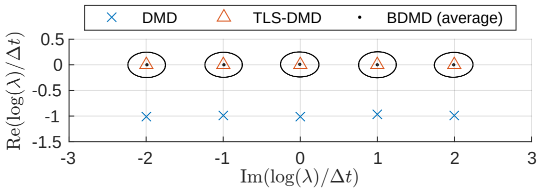


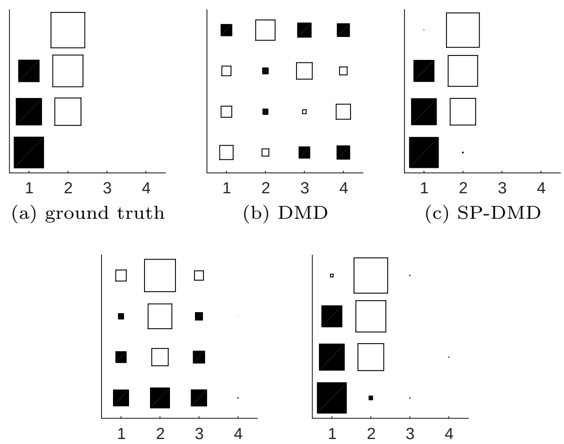
図 2: The estimated eigenvalues. The true eigenvalues lie on the imaginary axis since the data are periodic.

ただし，$\gamma_{1:k}$ はハイパーパラメタである．本研究では，このハイパーパラメタはモンテカルロ EM の枠組みで推定した．詳細は [Park+ 08] を参照されたい．

Example 2 (関連度自動決定). ランク落ちした行列 $\boldsymbol{A}$（Figure 3a）によって，次のようにデータを生成した（$\boldsymbol{e}_t$ は平均ゼロ，分散 10^{-4} の白色雑音）．

$$\boldsymbol{y}_t = A\begin{bmatrix} 0.9^t & 0.7^t & 0 & 0 \end{bmatrix}^\mathsf{T} + \boldsymbol{e}_t.$$

観測ノイズ $\boldsymbol{e}$ の影響により，有効な動的モードの数は自明ではない．sparsity-promoting DMD（SP-DMD，[Jovanović+ 14]）では，lasso による後処理によって有効なモード数を決定している．Figure 3 に，DMD（Algorithm 1），SP-DMD，通常のベイズ的 DMD（BDMD），スパース正則化ベイズ的 DMD（BDMD-sp）による行列 $\boldsymbol{A}$ の推定結果を示す．BDMD-sp によって，二段階の後処理なしに SP-DMD と同様の結果が得られている．



(a) ground truth　(b) DMD　(c) SP-DMD

(d) BDMD　(e) BDMD-sp

図 3: The true and the estimated dynamic modes in each column. The filled square denotes a positive value, and the empty denotes a negative value.

5.　混合確率的 DMD

確率モデル (2) を変更することで，DMD を混合モデルに拡張できる．具体的には，次のようなモデルを考える．

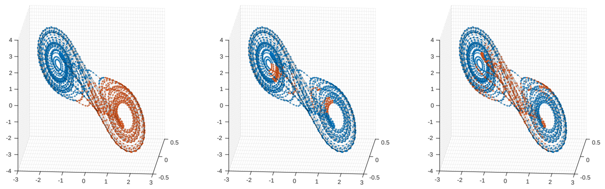
$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}_{0,j} | \varphi_{1:k,j,c}, z_j = c &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^{k} \varphi_{i,j,c}\boldsymbol{w}_{i,c},\ \sigma_c^2 \boldsymbol{I}\right), \\ \boldsymbol{y}_{1,j} | \varphi_{1:k,j,c}, z_j = c &\sim \mathcal{CN}\left(\sum_{i=1}^{k} \lambda_{i,c}\varphi_{i,j,c}\boldsymbol{w}_{i,c},\ \sigma_c^2 \boldsymbol{I}\right). \end{aligned} \tag{9}$$

ただし，$z \in \{1, \ldots, q\}$ は混合要素に対応する潜在変数で，新たな添字 c は c 番目の混合要素を示す．z に対しては新たなパラメタ $\pi_{1:q}$（$\sum_{c=1}^{q} \pi_c = 1$）をもって事前分布 $p(z_j = c) = \pi_c$ を考える．本研究では，パラメタ $\boldsymbol{w}_{1:k}$，$\lambda_{1:k}$ および σ^2，ならびに潜在変数 $\varphi_{1:k,1:m}$ および $z_{1:m}$ の推定に確定的アニーリング [Ueda+ 98] および EM アルゴリズムを用いた．

Example 3 (軌跡のクラスタリング)．Chua 回路モデル：

$$\dot{x} = 15.6\,(y + 0.286x + 0.2145(|x+1| - |x-1|))\,,$$
$$\dot{y} = x - y + z, \quad \dot{z} = -28y$$

によってデータを生成し，混合確率的 DMD（MPDMD）を適用した．また，比較として混合確率的 PCA（MPPCA）[Tipping+ 99b] および k-means++ [Arthur+ 07] も適用した．いずれの手法でも混合要素数（MPDMD なら q）は 2 に設定した．その結果を Figure 4 に示す．MPDMD によって，軌跡が異なる挙動をする部分ごとに分けられている．



(a) k-means++　(b) MPPCA　(c) MPDMD

図 4: The clustering results (best viewed in color).

6. まとめ

本稿では，動的モード分解（dynamic mode decomposition，DMD）の拡張として確率的 DMD およびベイズ的 DMD を提案し，それに基づく応用例としてベイズ的スパース DMD および混合確率的 DMD を紹介した．これらの確率的／ベイズ的扱いによって DMD において観測ノイズを明示的に考慮したりパラメタの事後分布推論が行えるほか，DMD の拡張が統一的枠組みで考えられる．本研究では事後分布推論に Gibbs sampling を用いたが，大規模データに適用するためにはより効率的な推論手法が望ましく，今後の課題である．

参考文献

[Arbabi+ 16] H. Arbabi and I. Mezić. Ergodic theory, dynamic mode decomposition and computation of spectral properties of the Koopman operator. arXiv:1611.06664v2, 2016.

[Arthur+ 07] D. Arthur and S. Vassilvitskii. k-means++: the advantages of careful seeding. In *Proceedings of the eighteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, pages 1027–1035, 2007.

[Berger+ 15] E. Berger, M. Sastuba, D. Vogt, B. Jung, and H. B. Amor. Estimation of perturbations in robotic behavior using dynamic mode decomposition. *Advanced Robotics*, 29(5):331–343, 2015.

[Bishop 99] C. M. Bishop. Bayesian PCA. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 11:382–388, 1999.

[Brunton+ 16a] B. W. Brunton, L. A. Johnson, J. G. Ojemann, and J. N. Kutz. Extracting spatial-temporal coherent patterns in large-scale neural recordings using dynamic mode decomposition. *Journal of Neuroscience Methods*, 258:1–15, 2016.

[Brunton+ 16b] S. L. Brunton, B. W. Brunton, J. L. Proctor, and J. N. Kutz. Koopman invariant subspaces and finite linear representations of nonlinear dynamical systems for control. *PLoS ONE*, 11(2):e0150171, 2016.

[Budišić+ 12] M. Budišić, R. Mohr, and I. Mezić. Applied Koopmanism. *AIP Chaos*, 22:047510, 2012.

[Dawson+ 16] S. T. M. Dawson, M. S. Hemati, M. O. Williams, and C. W. Rowley. Characterizing and correcting for the effect of sensor noise in the dynamic mode decomposition. *Experiments in Fluids*, 57(42), 2016.

[Guan+ 09] Y. Guan and J. G. Dy. Sparse probabilistic principal component analysis. In *Proceedings of the 12th International Conference on Artificial Inteligence and Statistics (AISTATS)*, pages 185–192, 2009.

[Holmes+ 12] P. Holmes and J. L. Lumley and G. Berkooz. *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*. Cambridge University Press, 2nd edition, 2012.

[Jolliffe 02] I. T. Jolliffe. *Principal Component Analysis*. Springer, 2nd edition, 2002.

[Jovanović+ 14] M. R. Jovanovi'c, P. J. Schmid, and J. W. Nichols. Sparsity-promoting dynamic mode decomposition. *Physics of Fluids*, 26(2):024103, 2014.

[Koopman 31] B. O. Koopman. Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space. In *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 17(5):315–318, 1931.

[Kutz+ 16] J. N. Kutz, X. Fu, and S. L. Brunton. Multiresolution dynamic mode decomposition. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 15(2):713–735, 2016.

[Mezić 05] I. Mezić. Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions. *Nonlinear Dynamics*, 41:309–325, 2005.

[Mezić 13] I. Mezić. Analysis of fluid flows via spectral properties of the Koopman operator. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 45:357–378, 2013.

[Park+ 08] T. Park and G. Casella. The Bayesian lasso. *Journal of the American Statistical Association*, 103:681–686, 2008.

[Proctor+ 15] J. L. Proctor and P. A. Eckhoff. Discovering dynamic patterns from infectious disease data using dynamic mode decomposition. *International Health*, 7(2):139–145, 2015.

[Rowley+ 09] C. W. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, and D. S. Henningson. Spectral analysis of nonlinear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 641:115–127, 2009.

[Schmid 10] P. J. Schmid. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data. *Journal of Fluid Mechanics*, 656:5–28, 2010.

[Susuki+ 14] Y. Susuki and I. Mezić. Nonlinear Koopman modes and power system stability assessment without models. *IEEE Transactions on Power Systems*, 29(2):899–907, 2014.

[Tipping+ 99a] M. E. Tipping and C. M. Bishop. Probabilistic principal component analysis. *Journal of the Royal Statistical Society*, Series B, 61:611–622, 1999.

[Tipping+ 99b] M. E. Tipping and C. M. Bishop. Mixtures of probabilistic principal component analyzers. *Neural Computation*, 11(2):443–482, 1999.

[Tu+ 14] J. H. Tu, C. W. Rowley, D. M. Luchtenburg, S. L. Brunton, and J. N. Kutz. On dynamic mode decomposition: Theory and applications. *Journal of Computational Dynamics*, 1(2):391421, 2014.

[Ueda+ 98] N. Ueda and R. Nakano. Deterministic annealing EM algorithm. *Neural Networks*, 11(2):271–582, 1998.