

動的モード分解とその確率モデリング

川島 貴大^{1, 2, 3}

December 10, 2021 @日本大学 AIRC 講演会

¹ 総合研究大学院大学 統計科学専攻

² 統計数理研究所

³ 国立精神・神経医療研究センター

1. イントロダクション
2. 特異値分解と固有直交分解
3. 動的モード分解 (DMD)
4. DMD の確率的モデリング
5. むすび

イントロダクション

何者？

- ・ なまえ：川島 貴大
- ・ 主な興味：ベイズ統計・ガウス過程・生物統計など

経歴：

期間	所属	身分
- 2017/03	神戸市立工業高等専門学校	準学士（工学）
- 2019/04	電気通信大学	学士（工学）
- 2021/03	電気通信大学大学院	修士（工学）
2019/04 -	国立精神神経・医療研究センター	科研費研究員
2021/04 -	総合研究大学院大学 統計科学専攻	D&特別研究員
2021/04 -	統計数理研究所	RA

今日のおはなし

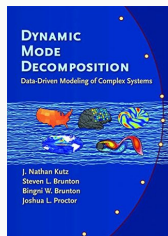
メインテーマ：動的モード分解 (DMD)

もとは計算流体力学から生まれた多次元系列データ解析法だが、一般的な教師なし学習の手法として広がりつつある。

本日の主なトピック

- ・ 動的モード分解の基礎
- ・ 自身の研究について
 - ・ 動的モード分解の確率的モデリング

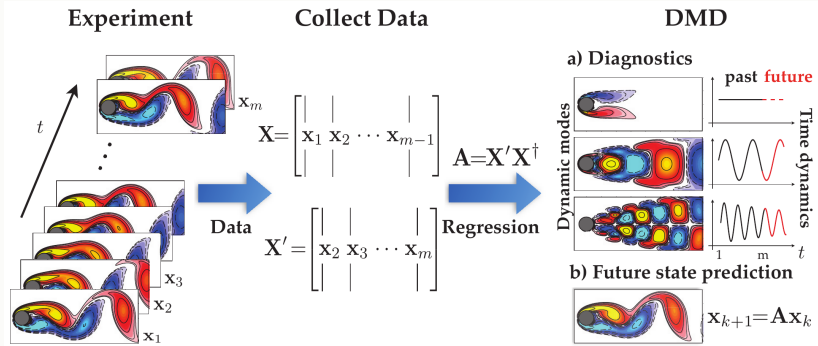
現在 DMD の教科書 [1] の PDF が版元から公開中！



モード分解

物理学におけるモード：個々の周波数をもつ振動成分

DMDは多次元（時）系列データをモード分解することで系のダイナミクスを調べる方法

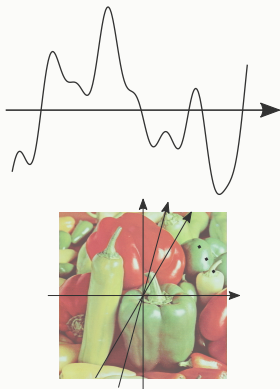


DMDの概要図. 文献[1]より引用.

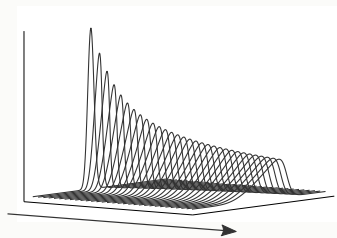
DMD とフーリエ変換

「振動成分に分解」と聞いてまず思い浮かぶのはフーリエ変換.

フーリエ変換の対象



DMD の対象



> DMD は「空間構造の時間発展」にフォーカスできる

特異値分解と固有直交分解

特異値分解

特異値分解 (SVD; Singular Value Decomposition)

任意の K ランク行列 $A \neq O \in \mathbb{C}^{D \times T}$ は

- $U^*U = I$ となる $U \in \mathbb{C}^{D \times K}$
- $V^*V = I$ となる $V \in \mathbb{C}^{T \times K}$
- 実対角行列 $\Sigma \in \mathbb{R}^{K \times K}$

によって次の行列積で表せる：

$$A = U \Sigma V^*$$

$$AA^* = U \Sigma V^* V \Sigma U^* = U \Sigma^2 U^*, \quad A^*A = V \Sigma^2 V^*$$

› 行列 A の SVD は対称行列 AA^* , A^*A の固有値分解と対応

特異値分解の概念図

$$\text{rank}(A) = K$$

の場合

$$\begin{array}{c} \boxed{A} \\ D \times T \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{U} \\ D \times K \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\Sigma} \\ K \times K \end{array} \begin{array}{c} \boxed{V^*} \\ K \times T \end{array}$$

U, V の各列ベクトルを左/右特異ベクトル， Σ の対角成分 σ_k を特異値と呼ぶ.

$\text{rank}(A) > K$ の場合も，大きい K 個の特異値と対応する特異ベクトルのみを考えれば K ランク近似が可能.

特異値分解と主成分分析

D 次元の観測データ $\mathbf{y}_t \in \mathbb{C}^D$ が T 時点ぶん得られているとする：

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \\ \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 & \cdots & \mathbf{y}_T \\ | & | & \cdots & | \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{D \times T}.$$

$\sum_t \mathbf{y}_t = \mathbf{0}$ であれば、SVD $\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^*$ と共分散行列 \mathbf{S} について

$$\mathbf{S} = \frac{1}{T} \mathbf{Y}\mathbf{Y}^* = \mathbf{U} \left(\frac{1}{T} \mathbf{\Sigma}^2 \right) \mathbf{U}^*$$

▷ SVD は主成分分析 (PCA) と等価

左特異ベクトル \mathbf{U} は主部分空間への射影行列とみなせる

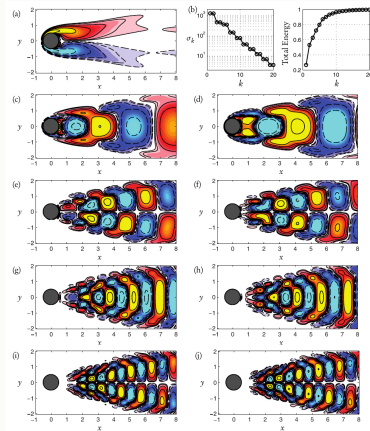
固有直交分解

流体力学では PCA は固有直交分解 (POD) と呼ばれ, モード分解に用いられてきた.

$Y \approx U_K \Sigma_K V_K^*$ と K ランク近似

左特異ベクトル $\{u_k\}$ が k 番目のモード

▶ 振動成分に分解できている (右図)



固有直交分解の利点と問題点

POD は実装のしやすさでも計算効率でもお手軽

- ・ 実装は SVD/PCA 一発
- ・ 次元数 D ・ データ数 T 片方が 100,000 オーダー程度でもほとんど問題ナシ
- ・ データ行列がもっと巨大でも randomized PCA などで効率化可能

🗨️ しかし POD はデータの時間的構造を考慮できない

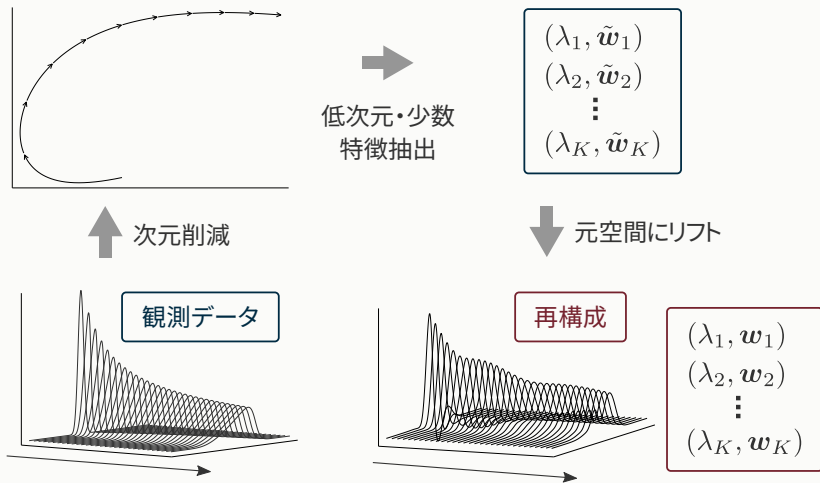
c.f. 確率的 PCA の尤度 : $Y \sim \prod_t \mathcal{N}(y_t | Wx_t + \mu, \sigma^2 I)$.

> y_t と $y_{t'}$ の間の独立性を暗に仮定

動的モード分解 (DMD)

動的モード分解 (DMD)

POD の弱点を克服するため提案されたのが DMD [2].



線形ダイナミクスの最小二乗解

DMD では、データの時間発展を近似する線形ダイナミクスの低ランク近似を考える。

まず $D \times (T - 1)$ のラグありデータ行列を 2 つ用意：

$$\mathbf{Y}_0 = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{T-1}), \mathbf{Y}_1 = (\mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T).$$

すると、 $\mathbf{y}_t \approx \mathbf{A}\mathbf{y}_{t-1}$ とデータの時間発展を記述する \mathbf{A} は

$$\underline{\mathbf{Y}_1 \approx \mathbf{A}\mathbf{Y}_0}$$

とも書ける。

この近似がもっともよくなる K ランク行列は、 \mathbf{Y}_0 の擬似逆行列

$$\underline{\mathbf{Y}_0^- := \mathbf{V}_K \boldsymbol{\Sigma}_K^{-1} \mathbf{U}_K^*}$$

を使って $\arg \min_{\mathbf{A}} \|\mathbf{Y}_1 - \mathbf{A}\mathbf{Y}_0\|_F^2 = \underline{\mathbf{Y}_1 \mathbf{Y}_0^-}$ と書ける

低次元ダイナミクスの表現

$A \in \mathbb{C}^{D \times D}$ の大きい K 個の固有値と固有ベクトルを求めれば、データのダイナミクスを捉えられると考えよう。

K 次元への射影行列 U_K による A の縮約表現 $U_K^* A U_K$ は、

$$\begin{aligned} U_K^* A U_K &\approx U_K^* Y_1 Y_0^{-1} U_K = U_K^* Y_1 V_K \Sigma_K^{-1} U_K^* U_K \\ &= \underline{U_K^* Y_1 V_K \Sigma_K^{-1}} =: \tilde{A}. \end{aligned}$$

> 固有値分解 $\tilde{A} = U_K^* Y_1 V_K \Sigma_K^{-1} = \tilde{W} \Lambda \tilde{W}^*$ を求めれば OK

\tilde{A} の固有値・固有ベクトルを $\{(\lambda_k, \tilde{w}_k)\}_{k=1}^K$ と書く。

高次元ダイナミクスの固有値・固有ベクトル

データの K 次元空間上の近似的な線形ダイナミクス

$$\tilde{A} = U_K^* Y_1 V_K \Sigma_K^{-1} \approx U_K^* A U_K$$

について、 \tilde{A} の固有値分解 $\tilde{A} = \tilde{W} \Lambda \tilde{W}^*$ を求めた。

ここで

$$\tilde{A} = \tilde{W} \Lambda \tilde{W}^* \approx U_K^* A U_K$$

は、両辺の左右から直交行列 \tilde{W}^* , \tilde{W} を掛けると

$$\Lambda \approx (U_K \tilde{W}_K)^* A (U_K \tilde{W}_K).$$

➤ A の支配的な K 個の固有値・固有ベクトルは $\{(\lambda_k, U_K \tilde{w}_k)\}_{k=1}^K$

DMD のアルゴリズム (概要)

1. $D \times (T - 1)$ のラグありデータ行列を 2 つ用意：
 $\mathbf{Y}_0 = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{T-1}), \mathbf{Y}_1 = (\mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T)$
2. K ランク特異値分解 (SVD) $\mathbf{Y}_0 \approx \mathbf{U}_K \boldsymbol{\Sigma}_K \mathbf{V}_K^*$
3. K 次元時間発展行列 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_K^* \mathbf{Y}_1 \mathbf{V}_K \boldsymbol{\Sigma}_K^{-1}$ を固有値分解
4. $\tilde{\mathbf{A}}$ の固有値・固有ベクトルをもとの空間にリフト

DMD のアルゴリズム (概要)

1. $D \times (T - 1)$ のラグありデータ行列を 2 つ用意：
 $\mathbf{Y}_0 = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{T-1}), \mathbf{Y}_1 = (\mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T)$
2. K ランク特異値分解 (SVD) $\mathbf{Y}_0 \approx \mathbf{U}_K \boldsymbol{\Sigma}_K \mathbf{V}_K^*$
3. K 次元時間発展行列 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_K^* \mathbf{Y}_1 \mathbf{V}_K \boldsymbol{\Sigma}_K^{-1}$ を固有値分解
4. $\tilde{\mathbf{A}}$ の固有値・固有ベクトルをもとの空間にリフト

DMD のアルゴリズム (概要)

1. $D \times (T - 1)$ のラグありデータ行列を 2 つ用意：
 $\mathbf{Y}_0 = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{T-1}), \mathbf{Y}_1 = (\mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T)$
2. K ランク特異値分解 (SVD) $\mathbf{Y}_0 \approx \mathbf{U}_K \boldsymbol{\Sigma}_K \mathbf{V}_K^*$
3. K 次元時間発展行列 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_K^* \mathbf{Y}_1 \mathbf{V}_K \boldsymbol{\Sigma}_K^{-1}$ を固有値分解
4. $\tilde{\mathbf{A}}$ の固有値・固有ベクトルをもとの空間にリフト

DMD のアルゴリズム (概要)

1. $D \times (T - 1)$ のラグありデータ行列を 2 つ用意：
 $\mathbf{Y}_0 = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{T-1}), \mathbf{Y}_1 = (\mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_T)$
2. K ランク特異値分解 (SVD) $\mathbf{Y}_0 \approx \mathbf{U}_K \Sigma_K \mathbf{V}_K^*$
3. K 次元時間発展行列 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_K^* \mathbf{Y}_1 \mathbf{V}_K \Sigma_K^{-1}$ を固有値分解
4. $\tilde{\mathbf{A}}$ の固有値・固有ベクトルをもとの空間にリフト

DMD は結局

$$\mathbf{y}_t \approx \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \mathbf{w}_k b_k$$

というモード分解の近似がよくなるパラメータを

$$(\lambda_k, \mathbf{w}_k) = (\lambda_k, \mathbf{U}_K \tilde{\mathbf{w}}_k)$$

として求めていることになる。

b_k はモードの振幅で、 $\{(\lambda_k, \mathbf{w}_k)\}_{k=1}^K$ が求まったあとに

$$\min_{\{b_k\}} \sum_{t=1}^T \left\| \mathbf{y}_t - \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \mathbf{w}_k b_k \right\|^2$$

を解いて求めれば OK. b_k に L1 ペナルティを与えることも可能 [3].

DMDにより離散力学系 $\mathbf{y}_t \approx \mathbf{A}\mathbf{y}_{t-1}$ の線形ダイナミクス \mathbf{A} の固有値・固有ベクトル $\{(\lambda_k, \mathbf{U}_K \tilde{\mathbf{w}}_k)\}_{k=1}^K$ が求まった.

これらと連続力学系 $\frac{d}{dt}\mathbf{y}(t) = \mathbf{A}_{\text{cont}}\mathbf{y}(t)$ との対応をみることで \mathbf{A}_{cont} の固有値・固有ベクトルが求まる

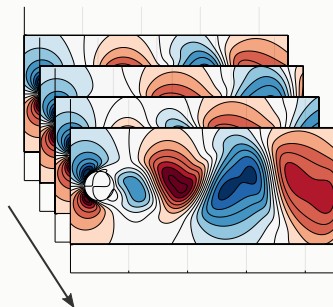
>  任意の時点 t における内挿・外挿が可能となる

時間発展を陽に考慮しない POD では内挿・外挿は難しい.

実験：円柱まわりの流れ

円柱まわりの流れに対して DMD を適用してみる

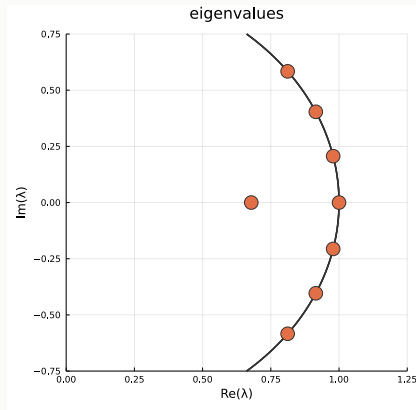
$$D = 199 \times 449 = 89351, T = 151, K = 8$$



円柱まわりの流れデータ

ふつうのデスクトップ PC で実行時間は数秒

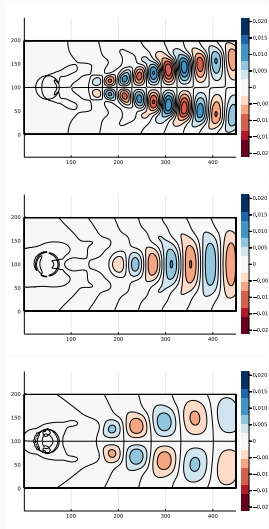
実験：円柱まわりの流れ



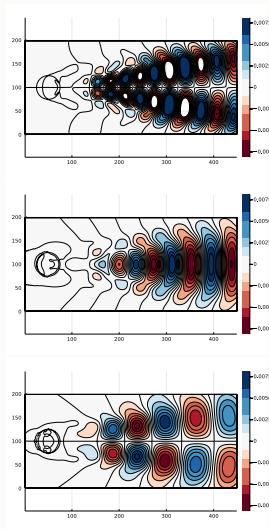
推定された固有値 $\{\lambda_k\}$. 実線は単位円

> 各固有値が $|\lambda_k| \leq 1$ よりダイナミクスは安定

実験：円柱まわりの流れ



モード w_k の実部



モード w_k の虚部

DMD の確率的モデリング

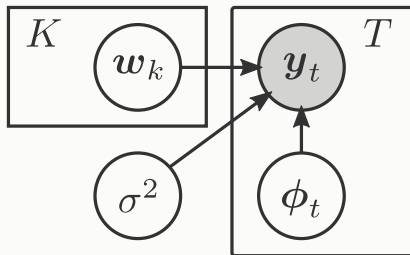
Bayesian DMD

Bayesian DMD [4]: 確率的 PCA を拡張した DMD の確率モデル

確率的 PCA では D 次元データ $\{\mathbf{y}_t\}$ が $K (\leq D)$ 次元潜在変数 $\{\phi_t\}$ の行列 $\mathbf{W} \in \mathbb{C}^{D \times K}$ による変換で生成されたと考えて

$$p(\mathbf{y}_t | \mathbf{W}, \{\phi_t\}, \sigma^2) = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t | \mathbf{W} \phi_t, \sigma^2 \mathbf{I})$$

と尤度が設計される。

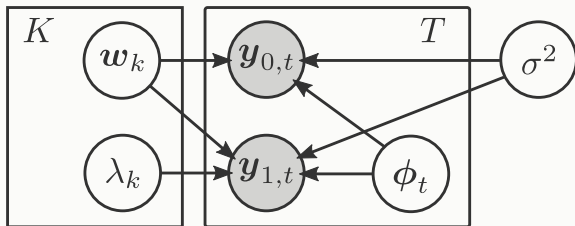


Bayesian DMD

一方 Bayesian DMD では固有値 $\{\lambda_k\}_{k=1}^K$ での時間発展も考慮して

$$p(\mathbf{y}_t | \mathbf{W}, \Lambda, \{\phi_t\}, \sigma^2) = \mathcal{N}(\mathbf{y}_t | \mathbf{W} \phi_t, \sigma^2 \mathbf{I}) \underbrace{\mathcal{N}(\mathbf{y}_t | \mathbf{W} \Lambda \phi_{t-1}, \sigma^2 \mathbf{I})}_{\text{時間発展の項}}$$

と尤度が設計される。



> $y_t \approx \sum_k w_k \phi_{k,t} \approx \sum_k \lambda_k w_k \phi_{k,t-1}$ の両近似をバランス

Bayesian DMD の利点と欠点

👍 効率的な最尤推定や事後分布推定

- ＞ 確率的 PCA とのアナロジー

👍 ノイズレベルの推定

👎 パラメータ数の多さ

- ＞ データ点数 T のぶんだけ潜在変数 $\{\phi_t\}$ が増える
- ＞ 入力データによっては推定が不安定？













👎 内挿・外挿の難しさ

- ＞ 新規データ y_* の予測分布は未知の潜在変数 ϕ_* に依存

Bayesian DMD with Variational Matrix Factorization

BDMD-VMF [5]: Bayesian DMD の懸念を払拭するためのモデル

- ・ 少数のパラメータのみに支配
- ・ 欠測データの扱いにも対応

	DMD	Bayesian DMD	BDMD-VMF
計算時間			
不確実性の表現			
パラメータ数			
欠測データ			

DMD では元の空間上のモードを, $\mathbf{w}_k = U_K \tilde{\mathbf{w}}_k$ として推定する.
 係数 b_k も含めて改めて $U_K \tilde{\mathbf{w}}_k = \mathbf{w}_k b_k$ と再定義すれば,

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_t &\approx \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \mathbf{w}_k b_k \\ &= \underline{U_K \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \tilde{\mathbf{w}}_k}. \end{aligned}$$

この式を平均として尤度をモデリング :

$$p(\mathbf{y}_t | U_K, \{\lambda_k\}, \{\tilde{\mathbf{w}}_k\}, \sigma^2) = \mathcal{N} \left(\mathbf{y}_t \mid U_K \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \tilde{\mathbf{w}}_k, \sigma^2 \mathbf{I} \right).$$

▷ SVD の射影行列の意味をもつよう U_K の事前分布を設定

変分行列分解

変分行列分解 (VMF) によって U_K の事前分布を決定する

- ・ 行列 $Y \in \mathbb{C}^{D \times T}$ を $Y \approx U_K V_K^*$ と確率的に分解
- ・ 結果として U_K, V_K が従う ガウス型 (変分) 事後分布 $r(U_K), r(V_K)$ が解析的表現として求まる
- ・ $r(U_K)$ は Y の射影行列の確率表現と解釈可能

$$\begin{array}{ccc} \boxed{Y} & \approx & \boxed{U_K} \quad \boxed{V_K^*} \\ D \times T & & D \times K \quad K \times T \end{array}$$

› この $r(U_K)$ を U_K の周辺化除去のための事前分布として使用

パラメータの周辺化除去

ここまでの手続きで次を得た：

- ・ 尤度 $\mathcal{N}(\mathbf{y}_t | \mathbf{U}_K \sum_k \lambda_k^t \tilde{\mathbf{w}}_k, \sigma^2 \mathbf{I})$
- ・ ガウス型の事前分布 $p(\mathbf{U}_K) = r(\mathbf{U}_K)$

▷ \mathbf{U}_K の周辺化計算が解析的に可能

$$p(\mathbf{y}_t | \{\lambda_k\}, \{\tilde{\mathbf{w}}_k\}, \sigma^2) = \int \mathcal{N} \left(\mathbf{y}_t \mid \mathbf{U}_K \sum_{k=1}^K \lambda_k^t \tilde{\mathbf{w}}_k, \sigma^2 \mathbf{I} \right) r(\mathbf{U}_K) d\mathbf{U}_K$$

この周辺化された尤度を BDMD-VMF のモデルとして用いる

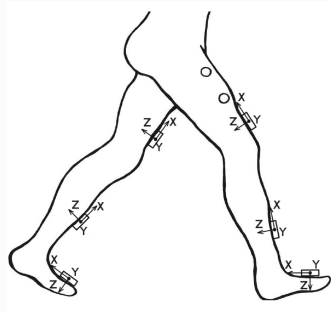
- ・ 少数のパラメータのみに支配（モード数 K のみに依存）
- ・ 欠測があっても OK（VMF が欠測を許す）

実験：欠測のあるジャイロセンサデータ (1)

HuGaDB データセット [6] に BDMD-VMF を適用

▷ 自転車運転中の参加者の脚にジャイロセンサを装着

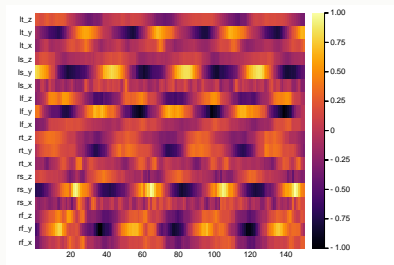
ジャイロセンサは計 6 つ：両脚の太もも・すね・足



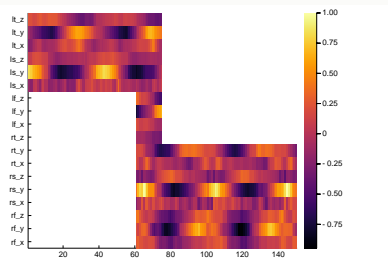
ジャイロセンサの装着位置. 文献 [6] より引用.

実験：欠測のあるジャイロセンサデータ (2)

- ・ 入力次元数 $D = 18$
- ・ データ数 $T = 150$
- ・ モード数 $K = 2$
- ・ データの一部をマスクして欠測させ，復元を試みる



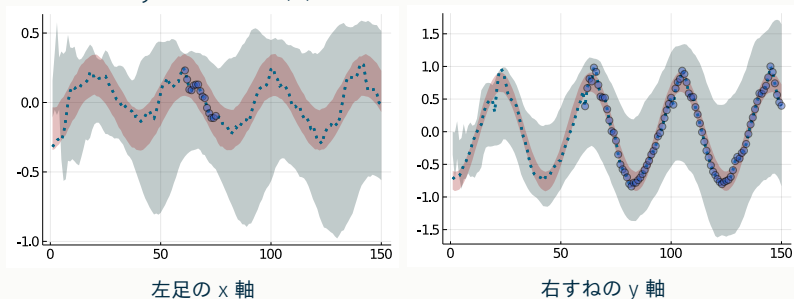
Original (Ground truth)



Masked (Input)

実験：欠測のあるジャイロセンサーデータ (3)

Bayesian VAR(2) と BDMD-VMF による予測分布



点線：真のデータ

マーカー：観測データ（入力）

灰色の領域：95% 信用区間 (Bayesian VAR(2))

赤色の領域：95% 信用区間 (提案法)

👍 提案法による信用区間は非常にタイト

むすび

DMD の基礎と確率的な取り扱いについて紹介した.

今回取り扱わなかった内容もたくさん :

- ・ Koopman モード理論との関連
 - ・ DMD の理論的な妥当性を与える
- ・ カーネル法・NN などと紐付いたさらなる方法論の展開
 - ・ もとの DMD がシンプルなので色々な拡張がなされている
- ・ 現在進行中の研究内容
 - ・ 教師なしガウス過程と DMD

References i

- [1] J.N. Kutz, S.L. Brunton, B.W. Brunton, and J.L. Proctor, “Dynamic Mode Decomposition: Data-Driven Modeling of Complex Systems,” SIAM, 2016
- [2] P.J. Schmid, “Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data,” *Journal of Fluid Mechanics*, 656, 5 – 28, 2010
- [3] M.R. Jovanović, P.J. Schmid, and J.W. Nichols, “Sparsity-promoting dynamic mode decomposition,” *Physics of Fluids*, 26, 024103, 2014
- [4] N. Takeishi, Y. Kawahara, Y. Tabei, and T. Yairi, “Bayesian Dynamic Mode Decomposition,” *IJCAI’17*, 2017.

- [5] T. Kawashima, H. Shouno, and H. Hino, “Bayesian Dynamic Mode Decomposition with Variational Matrix Factorization,” AAI’21, 2021.
- [6] R. Chereshnev, and A. Kertész-Farkas, “HuGaDB: Human Gait Database for Activity Recognition from Wearable Inertial Sensor Networks,” in Analysis of Images, Social Networks and Texts, Springer LNCS, 131–141, 2018.