Data Driven for Scientific Applications

Juan Carlos Cabral, DSc.
jccabral@pol.una.py

IV Encuentro de Matemáticas y Estadística aplicada a las Ciencias Sociales y Económicas

Outline

¿Qué es DMD?

Dynamic Mode Decomposition (DMD)

Es una técnica de análisis de datos que descompone la evolución temporal de un sistema dinámico en modos espaciales que capturan sus patrones de comportamiento. Utiliza datos de series temporales para calcular los modos dinámicos, que representan las frecuencias y amplitudes de las oscilaciones presentes en el sistema. Estos modos pueden utilizarse para predecir la evolución futura del sistema.

Schmid (2008) desarrolló la descomposición en modo dinámico en la comunidad de dinámica de fluidos para identificar estructuras espacio-temporales a partir de datos de alta dimensión.

Conjuntos de datos

Estamos interesados en analizar conjuntos amplios de datos $X \in \mathbb{C}^{n\times m}$:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_m \\ | & | & & | \end{bmatrix}.$$

donde $x_k \in \mathbb{C}^n$ pueden ser mediciones de simulaciones y experimentos.
Las columnas a menudo se denominan instantáneas (*snapshots*), y m es el número de instantáneas en X.
Para muchos sistemas $n >> m$, se tiene como resultado una matriz alta y delgada, a diferencia de una matriz baja y gruesa cuando $n << m$.

SVD

En Álgebra Lineal, la descomposición en valores singulares (*Singular Value Decomposition - SVD*) es una descomposición matricial única que existe para cada matriz de valores reales o complejos $X \in \mathbb{C}^{n \times m}$:

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

donde $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ y $V \in \mathbb{C}^{m \times m}$ son matrices unitarias con columnas ortonormales, y $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times m}$ es una matriz con entradadas reales y no negativas en la diagonal y ceros fuera de ella.

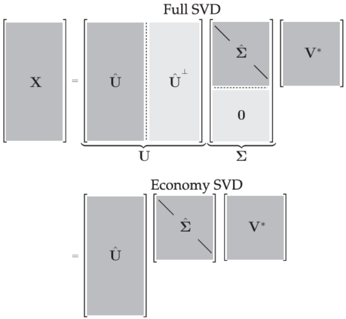
SVD

Cuando $n > m$, la matriz Σ tiene como máximo m elementos distintos de cero en la diagonal, y puede escribirse como $\Sigma = \begin{bmatrix} \hat{\Sigma} \\ 0 \end{bmatrix}$.
Por lo tanto, es posible representar exactamente X usando la SVD económica:

$$X = U\Sigma V^* = \begin{bmatrix} \hat{U} & \hat{U}^{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\Sigma} \\ 0 \end{bmatrix} V^* = \hat{U}\hat{\Sigma}V^*.$$

SVD

Esquema de matrices en el SVD completo y económico



Las columnas de U son llamados vectores singulares izquierdos de X y las columnas de V son vectores singulares derechos. Los elementos diagonales de $\hat{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ se llaman valores singulares y están ordenados de mayor a menor. El rango de X es igual al número de valores singulares distintos de cero.

Aproximación matricial

SVD proporciona una aproximación óptima de rango bajo a una matriz X. Una aproximación de rango r se obtiene manteniendo r valores y vectores singulares, descartando el resto.

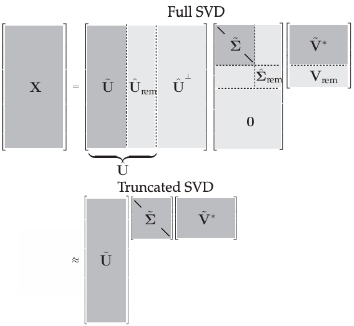
Theorem (Eckart-Young(1936))

La aproximación óptima de rango r a X, en el sentido de mínimos cuadrados, es dada por el truncamiento SVD de rango r de $\tilde{X}$

$$\underset{\tilde{X}, s.t. rank(\tilde{X})=r}{\arg\min} \|X - \tilde{X}\|_F = \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^*$$

Truncamiento

Esquema de SVD truncado.

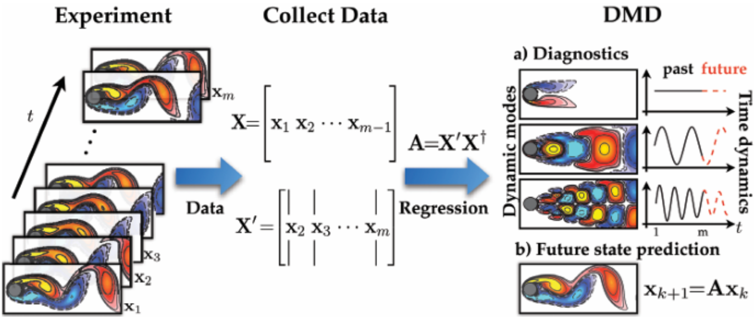


Para valores de truncamiento r que son menores que el número de valores singulares distintos de cero (es decir, el rango de X), el SVD truncado solo se aproxima a X:

$$X \approx \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^*.$$

Aplicaciones

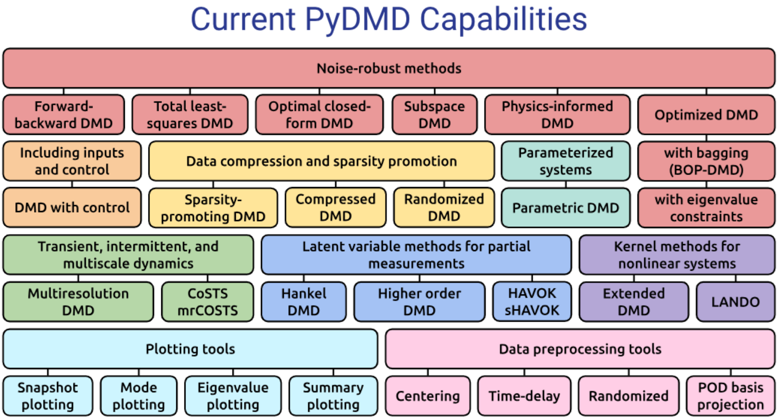
Descripción general de DMD ilustrada en el flujo de fluido que pasa por un cilindro circular con el número de Reynolds 100 (Kutz et al.,2016).



Una de las principales ventajas de la DMD es su formulación simple en términos de regresión lineal ya que no requiere conocimiento de las ecuaciones que gobiernan el sistema.
Presentamos extensiones algorítmicas líderes y las limitaciones actuales de la teoría DMD.

- Compresión y álgebra lineal aleatoria (*CompressedSensing*).
- Entradas y control (*DMD*): $x_{k+1} \approx Ax_k + Bu_k$.
- Sistemas no Lineales (*eDMD*): A través del operador Koopman, $y_{k+1} \approx A_Y y_k$.
- Eliminación de ruido. Se deben tener en cuenta los efectos del ruido del sensor y las perturbaciones estocásticas.
- Sistemas dinámicos complejos y de alta dimensión. el DMD de multiresolución (mrDMD), descompone las dinámicas en diferentes escalas de tiempo, aislando patrones transitorios e intermitentes.

Extenciones [1]



[1] https://github.com/PyDMD/PyDMD

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

DMD se basa inherentemente en datos y el primer paso es recopilar varios pares de instantáneas del estado de un sistema a medida que evoluciona en el tiempo.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{x}(t_1) & \mathbf{x}(t_2) & \cdots & \mathbf{x}(t_m) \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}' = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{x}(t_1') & \mathbf{x}(t_2') & \cdots & \mathbf{x}(t_m') \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

El DMD busca la descomposición espectral principal del operador lineal de mejor ajuste A que relaciona las dos matrices de instantáneas en el tiempo:

$$X' \approx AX$$

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

Si asumimos un muestreo uniforme en el tiempo, esto se convierte en:

$$x_{k+1} \approx A x_k$$

Matemáticamente, el operador A de mejor ajuste se define como

$$A = \underset{A}{\arg\min} \|\tilde{X} - AX\|_F = \tilde{X} X^{\dagger}$$

donde $\|\cdot\|_F$ es la norma de Frobenius y $\dagger$ denota la pseudoinversa.
Se destaca que existen conexiones entre la DMD como en la teoría de Koopman.

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

El algoritmo DMD aprovecha la reducción de dimensionalidad para calcular los valores propios dominantes y los vectores propios de A sin requerir ningún cálculo explícito utilizando A directamente.
La pseudoinversa $X^{\dagger}$ se calcula mediante la descomposición en valores singulares de la matriz X y por tanto la matriz A tendrá como máximo rango m.
En lugar de calcular A directamente, calculamos la proyección de A sobre estos vectores singulares principales, lo que da como resultado una pequeña matriz $\tilde{A}$ de tamaño como máximo $m \times m$.

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

El algoritmo DMD exacto (Tu et al.,2014) viene dado por los siguientes pasos:

- Paso 1. Calcular la descomposición del valor singular de X

$$X \approx \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^*,$$

  donde $\tilde{U} \in \mathbb{C}^{n\times r}$, $\tilde{\Sigma} \in \mathbb{C}^{r\times r}$ y $\tilde{V} \in \mathbb{C}^{m\times r}$ y $r \leq m$ denota el rango exacto o aproximado de la matriz de datos X.

- Paso 2. La matriz A completa se puede obtener calculando la pseudoinversa de X:

$$A = X'\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1}\tilde{U}^*$$

  Sin embargo, sólo estamos interesados en los valores propios y vectores propios principales de A y, por lo tanto, podemos proyectar A en los vectores singulares de U:

$$\tilde{A} = \tilde{U}^*A\tilde{U} = \tilde{U}^*X'\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1}$$

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

:

- Paso 2. Continuación
  Sin embargo, sólo estamos interesados en los valores propios y vectores propios principales de A y, por lo tanto, podemos proyectar A en los vectores singulares de U:

  $$\tilde{A} = \tilde{U}^* A \tilde{U} = \tilde{U}^* X' \tilde{V} \tilde{\Sigma}^{-1}$$

  La matriz de orden reducio $\tilde{A}$ define un modelo lineal para la dinámica del vector $\tilde{x}$

  $$\tilde{x}_{k+1} = \tilde{A} \tilde{x}_k.$$

  Tenga en cuenta que la matriz $\tilde{U}$ proporciona un mapa para reconstruir el estado completo x a partir del estado reducido $\tilde{x}$: $x = \tilde{U} \tilde{x}$.

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

:

- Paso 3. Se calcula la descomposición espectral de $\tilde{A}$:

$$\tilde{A}W = W\Lambda$$

.

- Paso 4. Los modos DMD de alta dimensión se reconstruyen utilizando el autovectores W del sistema reducido y la matriz de instantáneas X' según:

$$\Phi = X'\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1}W.$$

Estos modos DMD son vectores propios de la matriz A de alta dimensión correspondiente a los valores propios en Λ (Tu et al.,2014), esto es $A\Phi = \Phi\Lambda$.

El algoritmo DMD (*exact DMD*)

:

- Paso 3. Se calcula la descomposición espectral de $\tilde{A}$:

$$\tilde{A}W = W\Lambda$$

.

- Paso 4. Los modos DMD de alta dimensión se reconstruyen utilizando el autovectores W del sistema reducido y la matriz de instantáneas X' según:

$$\Phi = X'\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1}W.$$

Estos modos DMD son vectores propios de la matriz A de alta dimensión correspondiente a los valores propios en Λ (Tu et al.,2014), esto es $A\Phi = \Phi\Lambda$.

Descomposición espectral y expansión DMD

Uno de los aspectos más importantes del DMD es la capacidad de expandir el estado del sistema en términos de una descomposición espectral basada en datos:

$$\mathbf{x}_k = \sum_{j=1}^{r} \boldsymbol{\phi}_j \lambda_j^{k-1} b_j = \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{\Lambda}^{k-1} \mathbf{b},$$

donde ϕ_j son modos DMD (autovectores de la matriz A), λ_j son los valores propios DMD (autovalores de la matriz A) y b_j es la amplitud del modo. El vector b de amplitudes de modo generalmente se calcula como:

$$b = \Phi^{\dagger} x_1$$

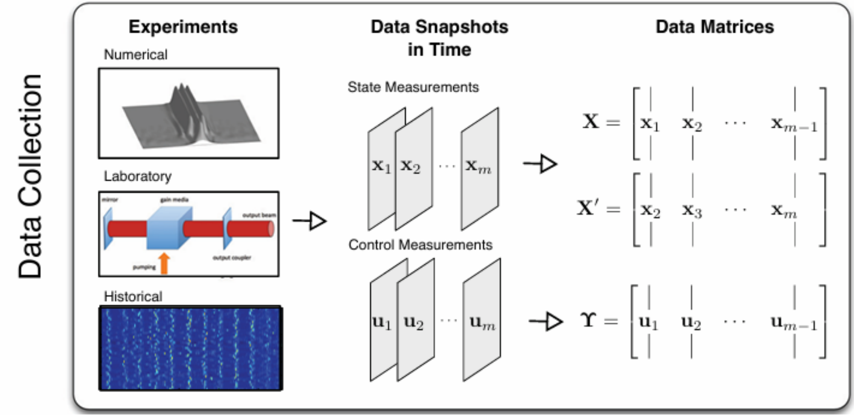
Las matrices W y Λ son ambas de tamaño $r \times r$, a diferencia de la matriz Φ que es $n \times r$.

DMDc

El DMDc es un método que extiende la DMD para incorporar el efecto de control para extraer modelos de bajo orden de sistemas complejos de alta dimensión.
La descomposición en modo dinámico con control (DMDc) aprovecha todas las ventajas de DMD y proporciona la innovación adicional de poder eliminar la ambigüedad entre la dinámica subyacente y los efectos de la actuación, lo que da como resultado modelos de entrada-salida precisos.

DMDc

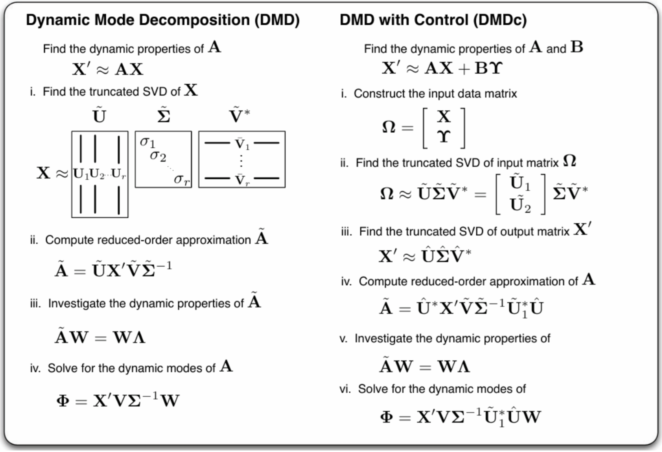
Se describe la recopilación de datos a partir de datos numéricos, de laboratorio o históricos y la conservación de los datos en matrices para los métodos.



DMDc

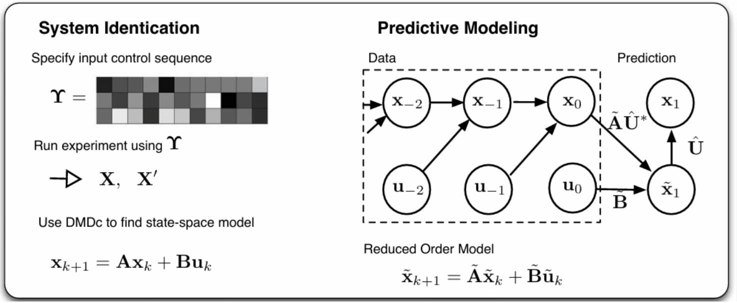
Reducción de Modelo

Se describe el procedimiento para comparar los métodos DMD y DMDc.



DMDc

Aplicaciones



Algunos de los desafíos en el área de la Descomposición de Modos Dinámicos (DMD) incluyen:

- Complejidad Computacional.
- Ruido en los Datos.
- Interpretación de Modos.
- Generalización de Modelos.

Agradecimientos

[1] Juan Carlos Cabral. Email: jccabral@pol.una.py.