動的モード分解（DMD）のお勉強

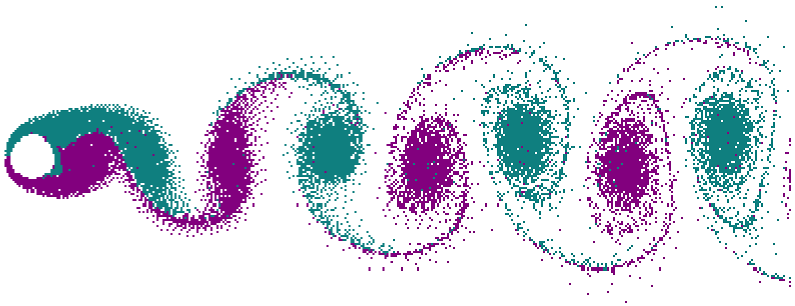
- 概要
- 理論
- 話題

概要

Gif. from Wikipedia

◎　動機

実験or数値計算で得られた高次元時系列データを分析したい.



概要

◎　固有直交分解　（昔からあるモード解析法，主成分分析とも）

○　アイデア

観測ベクトルの時系列：$\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_m$

各 $\boldsymbol{y}_t$ を少数の基底 $\boldsymbol{\varphi}_1, \cdots, \boldsymbol{\varphi}_r$ で低次元近似表現したい．

→ $\boldsymbol{y}_t \approx \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i^T \boldsymbol{y}_t$（ここで，$\boldsymbol{\varphi}_i^T \boldsymbol{y}_t$は射影成分を意味する）

最小二乗法：$\min_{\{\boldsymbol{\varphi}_i\}} \sum_{t=0}^{m} \| \boldsymbol{y}_t - \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i^T \boldsymbol{y}_t \|^2$, s.t. 各$\boldsymbol{\varphi}_i$ が直交.

→（式変形）

→ 固有値分解 $[\sum_{t=0}^{m} \boldsymbol{y}_t \boldsymbol{y}_t^T] \boldsymbol{\varphi}_i = \boldsymbol{R} \boldsymbol{\varphi}_i = \rho_i \boldsymbol{\varphi}_i$

○　注意

最適化において，t 番目と t+1番目のデータの関係を直接評価していない．

概要

◎　動的モード分解　（今日のメインテーマ）

○　アイデア

観測ベクトルの時系列： $\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_m$

データの行列：$\boldsymbol{Y}_0 = [\boldsymbol{y}_0, \cdots, \boldsymbol{y}_{m-1}], \boldsymbol{Y}_1 = [\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_m]$

最小二乗法： $\min_{\boldsymbol{A}} \|\boldsymbol{Y}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}_0\|^2 \rightarrow \boldsymbol{A} = \boldsymbol{Y}_1 \boldsymbol{Y}_0{}^{\dagger}$

固有値分解：$\boldsymbol{A}\boldsymbol{\omega}_i = \lambda_i \boldsymbol{\omega}_i$

モード分解：$\boldsymbol{y}_t \approx \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_{t-1} = \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{y}_0 = \sum_i \lambda_i{}^t \boldsymbol{\omega}_i$

（λ：モード振動数・減衰率，ω：動的モード）

○　特徴

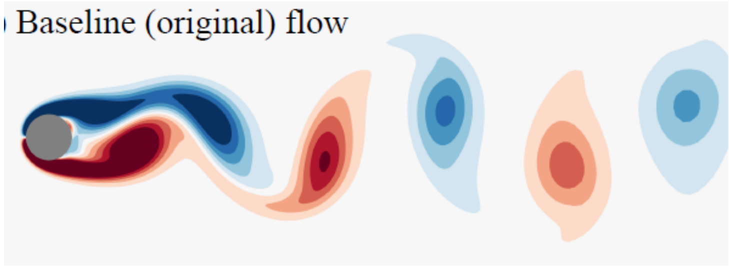
最適化において，t 番目と t+1番目のデータの関係を直接評価している．

→　モード分解の手続きの中で，時間的な情報をより使っている．

概要

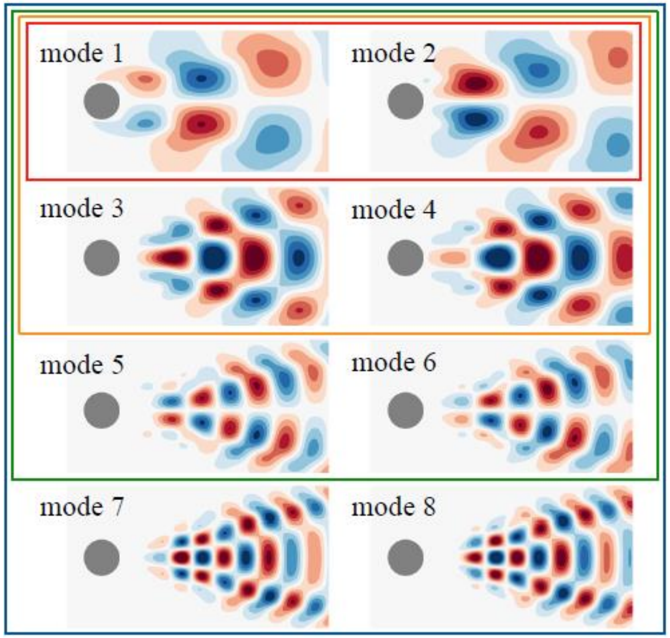
Figs. from Taira et al (2019)

◎ 比較： 周期的円筒流れ

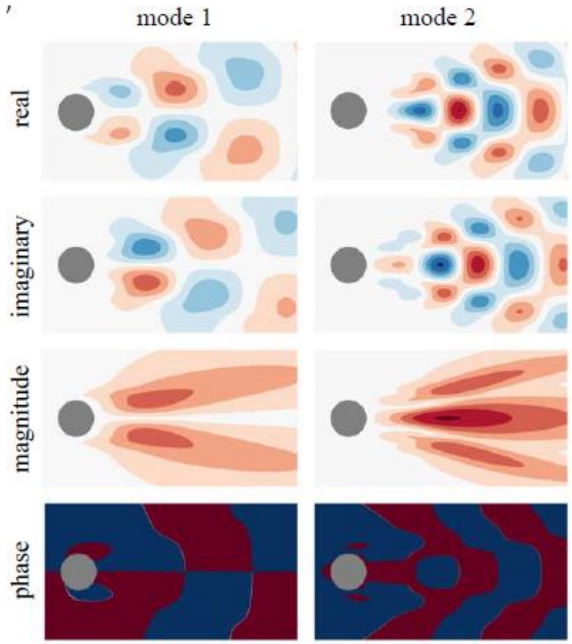


←snapshot

固有直交分解



動的モード分解



- 概要
- 理論
- 話題

理論

◎　線形代数の復習

○　スカラ体上のベクトル空間

・　ベクトル加法性

単位元: $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{0}=\boldsymbol{u}$,　逆元: $\boldsymbol{u}+(-\boldsymbol{u})=\boldsymbol{0}$

結合: $\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w}$, 可換: $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{u}$

・　スカラ乗法性

分配: $a(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})=a\boldsymbol{u}+a\boldsymbol{v}$,　$(a+b)\boldsymbol{u}=a\boldsymbol{u}+b\boldsymbol{u}$

両立: $(ab)\boldsymbol{u}=a(b\boldsymbol{u})$,　単位元: $1\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}$

○　線形写像・線形作用素

$$T(a\boldsymbol{u}+b\boldsymbol{v})=aT\boldsymbol{u}+bT\boldsymbol{v}$$

理論

◎ クープマン作用素 （離散時間の場合をやります）

○ 定義

非線形状態方程式：$\boldsymbol{x}_{t+1} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_t)$，1次元観測方程式：$\boldsymbol{y}_t = g(\boldsymbol{x}_t)$
クープマン作用素 K は，g に対して次のように作用する作用素である.

$$Kg(\boldsymbol{x}_t) = (g \circ \boldsymbol{f})(\boldsymbol{x}_t) = g(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_t)) = g(\boldsymbol{x}_{t+1})$$

○ 線形観測の場合

線形観測 g, g' に対して次が成り立つため（具体的には最初の等式），
K は線形作用素である（ただし無限次元）.

$$\begin{aligned} K(ag(\boldsymbol{x}) + bg'(\boldsymbol{x})) &= K\big((ag + bg')(\boldsymbol{x})\big) = (ag + bg')\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\big) \\ &= ag\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\big) + bg'\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\big) = aKg(\boldsymbol{x}) + bKg'(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

理論

◎ クープマン固有関数

作用素の線形性から，（適当な条件下で）固有値・固有関数が定義される.

$$\varphi(\boldsymbol{x}_{t+1}) = K\varphi(\boldsymbol{x}_t) = \lambda\varphi(\boldsymbol{x}_t)$$

このとき，次のように書ける.

$$g(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} b_i \varphi_i(\boldsymbol{x}_0)$$

$$g(\boldsymbol{x}_t) = K^t g(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} b_i K^t \varphi_i(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} b_i {\lambda_i}^t \varphi_i(\boldsymbol{x}_0)$$

理論

◎ クープマン固有関数（多次元）

観測関数$g_1, g_{2,}\cdots$は,（無限次元）ベクトル空間の要素である.
（有限次元での$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$でいうところの, $\boldsymbol{u}$ の空間に相当する）

→ 観測関数$g_1, g_{2,}\cdots$は, 同じ 固有関数φ_i を用いて展開表現できる.
（有限次元での$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ は, 同じ 固有ベクトル$\boldsymbol{u}_i$を用いて展開表現できる）

→ 前ページと同様に, 次のように書ける.

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{b_i}\varphi_i\,(\boldsymbol{x}_0)$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_t) = K^t\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{b_i}K^t\varphi_i\,(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{b_i}{\lambda_i}^t\varphi_i\,(\boldsymbol{x}_0)$$

理論

◎ クープマン固有関数展開の有限次元近似

有限次元近似：$\boldsymbol{y}_t = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_t) \approx \sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{b}_i {\lambda_i}^t \varphi_i(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{m} {\lambda_i}^t \boldsymbol{\omega}_i$ とすると，

$$\boldsymbol{Y}_0 = [\boldsymbol{y}_0 \quad \cdots \quad \boldsymbol{y}_{m-1}] = [\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m] \begin{bmatrix} 1 & \cdots & {\lambda_1}^{m-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & {\lambda_m}^{m-1} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{Y}_1 = [\boldsymbol{y}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{y}_m] = [\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m] \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & {\lambda_1}^{m-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & {\lambda_m}^{m-1} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Y}_1 {\boldsymbol{Y}_0}^{\dagger} \approx [\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m] \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix} [\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m]^{\dagger}$$

$$\boldsymbol{A}[\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m] \approx [\boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\omega}_m] \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix} = [\lambda_1 \boldsymbol{\omega}_1 \quad \cdots \quad \lambda_m \boldsymbol{\omega}_m]$$

となり，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{\omega}_i = \lambda_i \boldsymbol{\omega}_i$ の固有値問題と，クープマン固有値・固有関数が対応付く．

理論

◎　動的モード分解（DMD）：　再掲

○　アイデア

状態ベクトルの時系列：$\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_m$

データの行列：$\boldsymbol{Y}_0 = [\boldsymbol{y}_0, \cdots, \boldsymbol{y}_{m-1}], \boldsymbol{Y}_1 = [\boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_m]$

最小二乗法でAを求める：$\min_{\boldsymbol{A}} \|\boldsymbol{Y}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}_0\|^2 \ \rightarrow \ \boldsymbol{A} = \boldsymbol{Y}_1 \boldsymbol{Y}_0^{\dagger}$

固有値分解：$\boldsymbol{A}\boldsymbol{\omega}_i = \lambda_i \boldsymbol{\omega}_i$

モード分解：$\boldsymbol{y}_t \approx \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_{t-1} = \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{y}_0 = \sum_i \lambda_i^{\ t} \ \boldsymbol{\omega}_i$

（λ：モード振動数・減衰率，ω：動的モード）

○　特徴

モード分解の手続きの中で，時間的な情報も使っている．

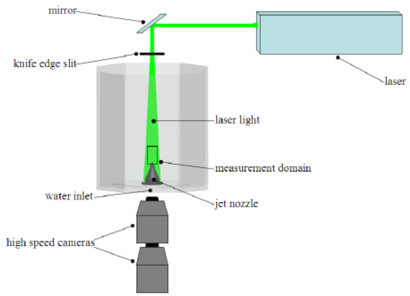
（最適化において，t 番目と t+1番目のデータの関係を評価した項がある）

- 概要
- 理論
- 話題

話題

Figs. from Violato et al (2009) and Schmid et al (2012)

◎ 適用例



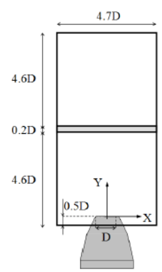


Fig. 4 Decomposition of a three-dimensional low-Mach number jet at $Re = 5{,}000$. Iso-surfaces of the λ_2-criterion of the two most dominant dynamic modes (besides the mean flow): **a** DM_1 with $St = 0.325$, and **b** DM_2 with $St = 0.646$. A quarter of the circumferential dependence has been eliminated for an improved visualization

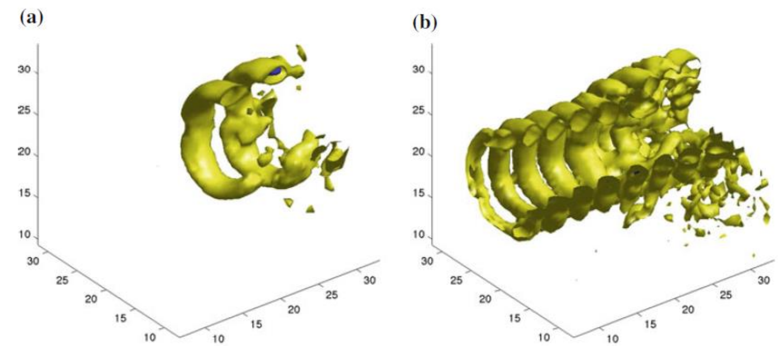
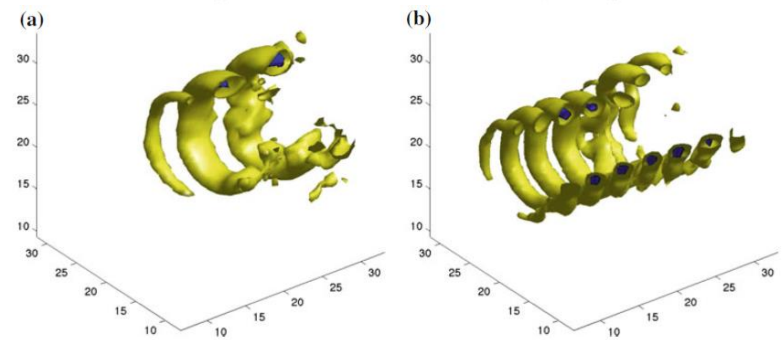


Fig. 7 Decomposition of a three-dimensional low-Mach number jet at $Re = 5{,}000$ using a proper orthogonal decomposition. Iso-surfaces of the λ_2-criterion of the two most dominant POD modes. A quarter of the circumferential dependence has been eliminated for an improved visualization. **a** POD_1, **b** POD_2



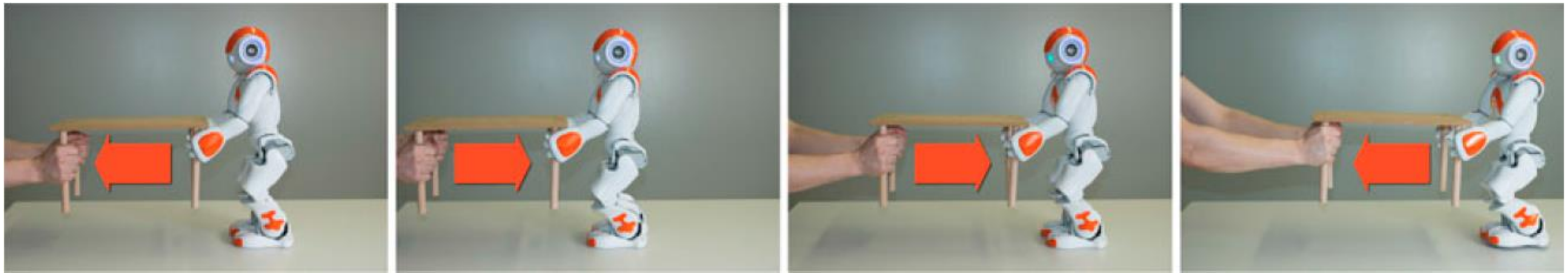
Schmid et al, Decomposition of time-resolved tomographic PIV, *Experiments in Fluids*, 2012.

- PIV実験データでPODとDMDを比較らしい・・・（わたし流体分かんない ）
- ``transitional water jet at a Reynolds number of Re = 5,000.'' らしい.
- モードや固有値を見て何かを考察している・・・（わたし流体分かんない ）

話題

Fig. from Berger et al (2014)

◎ 適用例： ロボット



Berger et al, Estimation of perturbations in robotic behavior using dynamic mode decomposition, *Advanced Robotics*, 2014.

- Behavior-specificなタスクを扱う.
- 力センサノイズ，接触力，人間由来の外部摂動，を切り分けたい.
- 事前訓練では，正規の場合の挙動をDMDを使ってモード分解しておく.
  適用時に，モードに基づいて人間由来外部摂動を推定し，挙動を切替る.
- DMDを要素として組み込んだが，不満があったから部分的に改造した.

話題

◎　課題として認識されているらしいこと？

○　時空間の変数分離ができない系

（未解決課題として言及されるに留まっているっぽい？）

○　そのままだと実験データのノイズに弱い.

→　noise-robustになるようにDMDを拡張.

○　非線形観測データ

→　逐次線形化による拡張（要，理論的妥当性）

○　連続スペクトルの取り扱い

→　時間遅れ座標の導入，振幅-周波数をゆるく相関させてモード解析

○　機械学習手法を用いたクープマン固有関数の推定

→　スパース回帰，深層学習.

眺めた資料

[1] https://ja.wikipedia.org/wiki/カルマン渦

[2] Brunton and Kutz, *Data-driven science and engineering*, 2019.

[3] Taira et al, Modal analysis of fluid flow: application and outlook, *AIAA Journal*, 2019.

[4] 平，固有直交分解による流体解析: 2. 応用，*ながれ*, 2011.

[5] Rowley et al, Spectral analysis of nonlinear flow, *Journal of Fluid Mechanics*, 2009.

[6] Schmid et al, Decomposition of time-resolved tomographic PIV, *Experiments in Fluids*, 2012.

[7] Violato et al, Application of Powell's analogy for the prediction of vortex-pairing sound in a low-Mach number jet based on time-resolved planar and tomographic PIV, *Proceedings of AIAA/CAES conference on aeroacoustics*, 2009.

[8] Berger et al, Estimation of perturbations in robotic behavior using dynamic mode decomposition, *Advanced Robotics*, 2014.

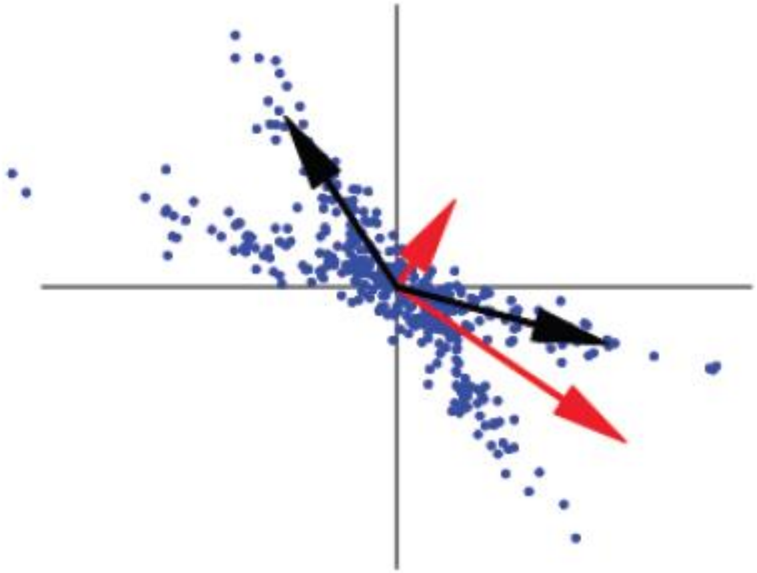
[9] 武石 et al, ベイズ的動的モード分解， *人工知能学会全国大会*, 2017.（英語版 *Proceedings of IJICAI*, 2017）

（赤・・・本筋の資料，黒・・・その他資料）

おまけ

Fig. from 平(2011)

◎　独立成分分析（統計）



赤矢印が主成分分析によるモード，黒矢印が独立成分分析によるモード.

○　・・・　主成分分析とは異なり，データが正規分布していない場合でも有効
×　・・・　大規模データは，今のところ上手く扱えない.

おまけ

◎ スペクトル分解（関数解析）

線形作用素 T のスペクトルは，作用素 $T-\lambda$ が有界な逆作用素を持たないようなスカラー λ で構成される(これは定義).

スペクトルは，数学的には3つの部分に分解される.

- 点スペクトル $\longrightarrow$ 有限次元線形システムで言うところの固有値.
- 連続スペクトル $\longrightarrow$ カオスとかで出てくる.
- 剰余スペクトル $\longrightarrow$ （私は物理的な例を知らないです・・・）

おまけ

◎　観測データを用いたアトラクターの再構成（非線形力学）

○　復習（ストロガッツの教科書１２．４節）

レスラー方程式の観測データの2次元の時間遅れ座標をプロットすると，
レスラーアトラクターに似たストレンジアトラクター（＝カオス）が見える．

○　続き

「時間遅れ埋め込みプレバレント定理（Sauer et al, 1991）」

（私の雑な理解）カオスのボックス計数次元の2倍よりも大きな個数の時間遅れ座標を用意すれば，元々のカオスとデータで再構築したカオスが1-1対応になる．

→　理屈的には，時間遅れ座標でカオスを捉えられる．
→　実際的には，カオスとノイズの分離が必要　（→カオス時系列解析）．

おまけ

◎　波動方程式（振動・波動論）

１次元波動方程式

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

上式を満たす解（進行波解と言うらしい）は，適当な関数 f, g として，

$$u(x,t) = f(x+ct) + g(x-ct)$$

$\rightarrow$ 一般に，時空間が変数分離できない，つまり， $u(x,t) \neq a(x)b(t)$