ガウス過程Koopmanモード分解

川島貴大（総合研究大学院大学 統計科学専攻 博士課程4年）

背景：Koopmanモード分解

Koopmanモード分解 [1]は未知の力学系にしたがう多次元（時）系列データを可算無限個のモードの和に分解する方法である．

D次元観測値を$\{\boldsymbol{y}_t\}$，P次元潜在変数を$\{\boldsymbol{x}_t\}$とし，潜在空間上のダイナミクスを$\boldsymbol{f}: \boldsymbol{x}_t \mapsto \boldsymbol{x}_{t+1}$と書く．また観測値は潜在変数から観測量$\boldsymbol{g} = (g_1, \ldots, g_D)^\top$，$g_d \in \mathcal{G}$を通して得られるとする：

$$\boldsymbol{x}_{t+1} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_t), \quad \boldsymbol{y}_t = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_t).$$

目的はT個の観測値の組$\{\boldsymbol{y}_t\}_{t=1}^T$からダイナミクスを推定することであるが，$\boldsymbol{f}$は一般に非線形である．そこで代わりにKoopman作用素$\mathcal{K}: \mathcal{G} \to \mathcal{G}$を

$$(\mathcal{K} g_d)(\boldsymbol{x}_t) = g_d(\boldsymbol{x}_{t+1})$$

として定義する．潜在空間上のダイナミクス$\boldsymbol{f}$の非線形性によらず，関数空間上のダイナミクス$\mathcal{K}$は線形となることが知られており，$\mathcal{K}\phi_k = \lambda_k \phi_k$なるスペクトル分解を考えられる．これにより，

$$\boldsymbol{y}_t = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_t) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(\boldsymbol{x}_t)\boldsymbol{w}_k = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(\boldsymbol{x}_{t-1})\boldsymbol{w}_k \qquad (1)$$

と観測値$\boldsymbol{y}_t$を可算無限個のモードに分解できる．

Koopmanモード分解によって特徴づけられた量は教師なし学習により推定される．代表的なアルゴリズムは動的モード分解 [2]で，行列分解によって高速かつ安定に$\{\lambda_k\}, \{\boldsymbol{w}_k\}$を推定できる一方，ダイナミクスに線形低ランク性を仮定するため，複雑な非線形性を捉えるには力不足であるといえる．

提案法：ガウス過程Koopmanモード分解

本研究ではKoopmanモード分解の非線形確率的生成モデルとして，ガウス過程Koopmanモード分解 (GPKMD)を開発した．

式(1)からパラメータ推定のための損失関数として

$$\sum_{t=1}^{T} \left\{ \left\| \boldsymbol{y}_t - \sum_{k=1}^{K} \phi_k(\boldsymbol{x}_t)\boldsymbol{w}_k \right\|^2 + \left\| \boldsymbol{y}_t - \sum_{k=1}^{K} \lambda_k \phi_k(\boldsymbol{x}_{t-1})\boldsymbol{w}_k \right\|^2 \right\}$$

なるものが考えられる．ここで$\phi_k(\boldsymbol{x}) = \sum_l b_{kl}\psi_l(\boldsymbol{x})$と固有関数の基底展開をすれば，損失関数に対応する$t$時点の尤度として

$$\begin{aligned} & p(\boldsymbol{y}_t | \{\boldsymbol{x}_t\}, \{\lambda_k\}, \{\boldsymbol{w}_k\}, \{b_{kl}\}, \sigma^2) \\ &= \mathcal{CN}\left(\boldsymbol{y}_t \middle| \sum_{k=1}^{K} \left(\sum_l b_{kl}\psi_l(\boldsymbol{x}_t) \right) \boldsymbol{w}_k, \sigma^2 \boldsymbol{I}_D \right) \\ &\times \mathcal{CN}\left(\boldsymbol{y}_t \middle| \sum_{k=1}^{K} \lambda_k \left(\sum_l b_{kl}\psi_l(\boldsymbol{x}_{t-1}) \right) \boldsymbol{w}_k, \sigma^2 \boldsymbol{I}_D \right) \end{aligned}$$

が得られる．$\mathcal{CN}(\cdot,\cdot)$は複素正規分布を表す．さらにふたつの$\mathcal{CN}(\cdot,\cdot)$から展開係数$\{b_{kl}\}$を事前分布$p(b_{kl}) = \mathcal{CN}(0, \sigma_b^2/2)$のもとそれぞれ周辺化除去すると，GPKMDの尤度が得られる：

ガウス過程Koopmanモード分解(GPKMD)のモデル

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{W}, \sigma^2) &= \mathcal{CN}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y})|\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I} + \sigma_b^2(\boldsymbol{K}_1 \otimes \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^*)) \\ &\times \mathcal{CN}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y})|\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I} + \sigma_b^2(\boldsymbol{K}_0 \otimes \boldsymbol{W}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Lambda}^*\boldsymbol{W}^*)), \\ p(\boldsymbol{X}) &= \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{0}, s_x^2\boldsymbol{I})\mathcal{MN}(\boldsymbol{X}_1|\boldsymbol{O}, \boldsymbol{I}, \boldsymbol{K}_X + s_x^2\boldsymbol{I}). \end{aligned}$$

$\boldsymbol{X}$以外のパラメータには無情報事前分布を適用する．ここで

$$\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K], \quad \boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\{\lambda_k\}_{k=1}^K),$$
$$\boldsymbol{K}_1 = [k(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_{t'})]_{t,t'=1}^T, \boldsymbol{K}_0 = [k(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_{t'})]_{t,t'=0}^{T-1}, \boldsymbol{K}_X = [k_x(\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_{t'})]_{t,t'=0}^{T-1}.$$

$\boldsymbol{X}$の事前分布にはガウス過程力学モデル [3]が入っている．

提案するGPKMDはガウス過程潜在変数モデル [4]に代表される教師なしガウス過程モデルの一種とみなせ，確率的生成モデルとして各パラメータや潜在変数を推定することができる．

計算量の削減：共分散行列の低ランク近似

GPKMDの尤度の共分散行列は$DT \times DT$と巨大であり，愚直な評価には多大な計算量を要する．

$\boldsymbol{K}_1 \approx \boldsymbol{U}_K \boldsymbol{\Sigma}_K^2 \boldsymbol{U}_K^\top, \boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}_W \boldsymbol{\Sigma}_W \boldsymbol{V}_W^*$ なる特異値分解が得られていれば，尤度第一項の共分散行列の逆行列は

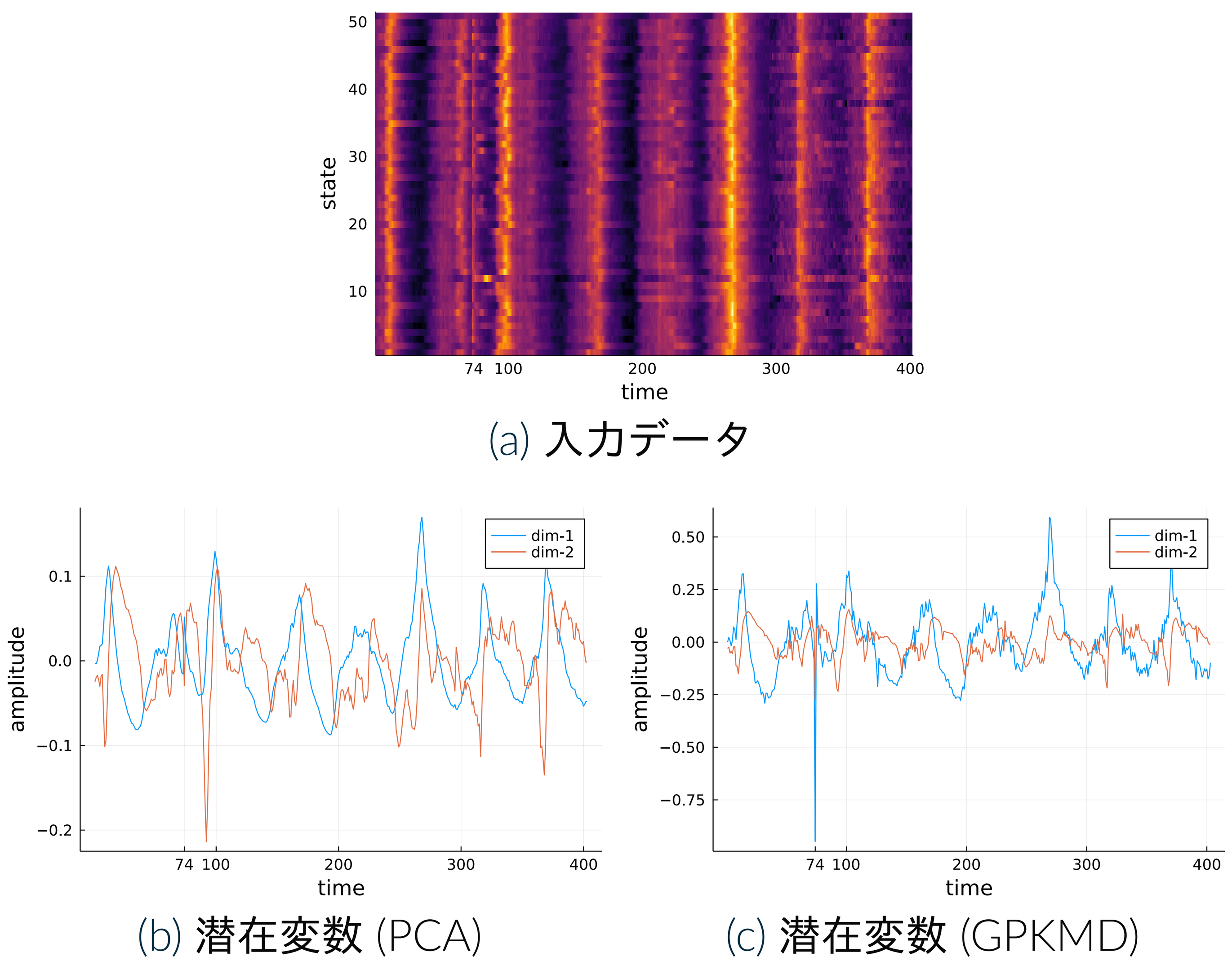
$$\begin{aligned} (\sigma^2\boldsymbol{I} + \sigma_b^2(\boldsymbol{K}_1 \otimes \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^*))^{-1} &\approx \sigma^{-2}\boldsymbol{I} - \sigma^{-2}\sigma_b^2 \underbrace{(\boldsymbol{U}_K\boldsymbol{\Sigma}_K \otimes \boldsymbol{U}_W\boldsymbol{\Sigma}_W)}_{DT \times KS} \\ &\times \underbrace{(\sigma^2\boldsymbol{I} + \sigma_b^2(\boldsymbol{\Sigma}_K^2 \otimes \boldsymbol{\Sigma}_W^2))^{-1}}_{KS \times KS \text{ (diagonal)}} \underbrace{(\boldsymbol{U}_K\boldsymbol{\Sigma}_K \otimes \boldsymbol{U}_W\boldsymbol{\Sigma}_W)^*}_{KS \times DT}. \end{aligned}$$

となり，計算量が大幅に削減される．行列式も同様に近似可能．

実験：Google Flu Trends

実データでの実験として，Google Flu TrendsデータにGPKMDを適用した．モード数は$K = 6$，潜在空間の次元は$P = 2$とし，共役勾配法によるMAP推定で学習を実行した．
入力は2007/12/02から2015/08/09の各週($T = 402$)における，アメリカの$D = 51$州でのインフルエンザの流行度とした．

Figure 1はPCAとGPKMDによる潜在変数$\{\boldsymbol{x}_t\}$の推定結果である．GPKMDによる潜在変数では，PCAでは捉えられなかった$t = 74$のスパイク的な振る舞いを捕捉できた．



(a) 入力データ

(b) 潜在変数 (PCA)　(c) 潜在変数 (GPKMD)

Figure 1. (a) Google Flu Trendsデータ（対数変換後）．(b) 潜在変数（PCA）．(c) 潜在変数（GPKMD）．

むすび

本研究ではKoopmanモード分解の非線形確率的生成モデルであるGPKMDを開発した．紙面の都合上割愛したが，他のパラメータ$\{\lambda_k\}, \{\boldsymbol{w}_k\}$に関しても解釈可能な値を推定することが可能である．今後の課題として，ガウス過程のスパース変分近似による事後分布推定法の確立などが挙げられる．

本研究は現在，日野英逸教授（統数研）との共同研究として論文投稿中である．

参考文献

[1] Rowley, C. et al., "Spectral Analysis of Nonlinear Flows," *J. Fluid Mech. 641*, (2009)

[2] Schmid, P. J., "Dynamic Mode Decomposition of Numerical and Experimental Data," *J. Fluid Mech. 656*, (2010)

[3] Wang, J. et al., "Gaussian Process Dynamical Models," *NeurIPS 18* (2005)

[4] Lawrence, N., "Probabilistic Non-linear Principal Component Analysis with Gaussian Process Latent Variable Models," *JMLR 6*, (2005)