

クープマン作用素解析による動的な物理現象へのデータ駆動アプローチ

山梨大学 正会員 宮本 崇

1. はじめに

深層学習に代表されるデータ駆動科学の手法は、新たな科学パラダイムと技術革新を導く方法論として注目され、様々な分野で応用が進んでいる。土木分野においても、既設構造物の維持管理を中心に諸場面での応用が進む傾向にある一方で、データ数の不足やタスク処理過程に対する説明性・解釈性の問題など、多くの分野に共通する課題も同時に顕在化させている。更に、物理現象に対するデータ駆動モデルの適用においては、物理的な法則に矛盾しない結果を与えるモデルである必要がある。

こうした課題に対処するための方針の1つとして、数理モデルとデータ駆動モデルの統合が近年に重要視されている。本稿では、そのような方針に基づく方法論の一つとして、動的な現象に対する解析モデルを与えるクープマン作用素解析に着目し、その手法や性質を概説するとともに、簡単な数値実験を通して有効性を検証する。

2. クープマン作用素解析

クープマン作用素解析は、動的な現象の観測データに基づいて、現象の支配方程式の性質の解析や現象の時間発展の予測を行うための方法論である。この方法論は、後述のように計算モデルの背後に現象の因果的な法則性を仮定していることや、現象に関する事前知識を計算モデルの設計に反映可能なことなどから、動的な物理現象に対する有用な性質を有した数理モデル・データ駆動統合型のアプローチとして近年に研究が進んでいる¹⁾。ここでは、観測データ系列を用いた解析手順を概説する。

今、ある物理現象に関する観測データ系列 $\{\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_t\}$ が得られており、任意のステップ k について $\mathbf{x}_k$ は未知の非線形写像 F によって次のステップへ推移しているものとする。

$$\mathbf{x}_{k+1} = F(\mathbf{x}_k) \quad (1)$$

また、 N 個の非線形関数 $(g_1, \dots, g_N) = \mathbf{g}$ を用いて新たなデータ系列 $\{\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_t\}$ を以下のように定義する。

$$\mathbf{y}_i = (g_1(\mathbf{x}_i) \cdots g_N(\mathbf{x}_i))^T = \mathbf{g}(\mathbf{x}_i) \quad (2)$$

このとき、任意のステップ k について $\mathbf{y}_k$ と $\mathbf{y}_{k+1}$ の間に以下のような線形変換が成立しているものと仮定する。

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{y}_k \quad (3)$$

$$\therefore \mathbf{y}_t = \mathbf{A}\mathbf{y}_{t-1} = \mathbf{A}^2\mathbf{y}_{t-2} = \cdots = \mathbf{A}^t\mathbf{y}_0 \quad (4)$$

すると、 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{\phi}_i$ と固有値 λ_i ($i = 1, \dots, N$) を用いて次式が成立する。

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{A}^t\mathbf{y}_0 = \mathbf{A}^t \sum_{i=1}^N c_{i0}\boldsymbol{\phi}_i = \sum_{i=1}^N c_{i0}\mathbf{A}^t\boldsymbol{\phi}_i = \sum_{i=1}^N c_{i0}\lambda_i^t\boldsymbol{\phi}_i \quad (5)$$

ここで、 c_{i0} は $\boldsymbol{\phi}_i$ による $\mathbf{y}_0$ の展開係数である。(5) 式は、データ系列 $\mathbf{y}_t$ の時間発展が、 λ_i^t によって時間振動する空間的なモード $\boldsymbol{\phi}_i$ の線形和として表現できることを意味している。

$\mathbf{A}$ やその固有ベクトル $\boldsymbol{\phi}_i$ 、固有値 λ_i は、動的モード分解 (Dynamic Mode Decomposition: DMD)²⁾ などのアルゴリズムによってデータ系列 $\{\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_t\}$ から推定が可能である。そのようにして得られた $\mathbf{A}$ などの値を用いて求められる、 $\{\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_t\}$ の性質や時間発展の予測値を通じて、元のデータ系列 $\{\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_t\}$ の有する非線形的な発展則 (1) の性質や時間発展を解析することが、クープマン作用素解析の概要である。

Key Words: クープマン作用素解析, データ駆動科学, 非線形動力学

〒400-8511 山梨県甲府市武田 4-3-11

3. 数理モデルとデータ駆動モデルの統合としてのクープマン作用素解析

クープマン作用素解析においては、データ系列 $\{y_0, \dots, y_t\}$ における線形則 (3) が良い近似で成り立つ必要があり、そのためには適切な非線形関数 g を用いることが重要となる。そのような g の要件は、非線形則 (1) に関する（部分的な）事前知識に基づいて数理的に分析することが可能である^{1),3)}。また、クープマン作用素解析の計算モデルは、その背後に現象の非線形則 (1) を仮定したものであり、物理現象の解析や予測に適したデータ駆動モデルであると言える。

このように、現象に対する知識をデータ駆動モデルの設計に反映できる点や、現象の因果的な法則性を計算モデルの背後に仮定している点において、クープマン作用素解析は数理モデルとデータ駆動モデルの統合的な手法と位置付けることができる。

4. 数値実験

クープマン作用素解析の有効性を確認するために、仮想的な時系列データに対して同方法論を適用する数値実験を行った。

今、以下の2つの方程式に従って離散的に時間発展する量 $\mathbf{x}_k = (x_{1,k} \ x_{2,k})^T$ を考える。

$$x_{1,k+1} = \lambda x_{1,k} \quad (6)$$

$$x_{2,k+1} = \mu x_{2,k} + (\lambda^2 - \mu)(x_{1,k})^2 \quad (7)$$

この系は x_2 の従う方程式に $(x_1)^2$ の項を含んでおり、その時間発展は図-1(a) のように非線形的な挙動を示す。

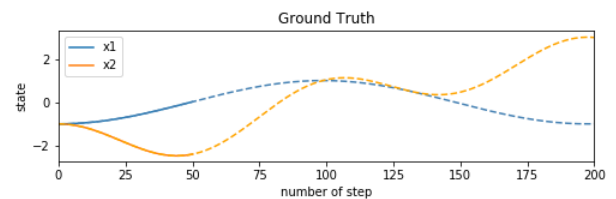
これに対し、ステップ数50までのデータ $\{x_0, \dots, x_{50}\}$ を観測から得られていると仮定したときに、クープマン作用素解析によってステップ数51以降のデータの発展を予測した結果は同図(b), (c)に示したものとなる。ここでは、式(2)における g として恒等関数を用いた場合（通常の動的モード分解（DMD）に相当）と、支配方程式に変数の2次項が含まれていることだけを知っていると仮定して、各変数の2乗の項を加えた場合（拡張動的モード分解（Extended DMD）⁴⁾ の一種に相当）を比較している。系に応じた適切な非線形関数を用いることにより、50ステップ程度のわずかなデータからでも、同図(c)のように現象の非線形的な時間発展をデータ駆動モデルによって適切に予測できていることが分かる。

5. おわりに

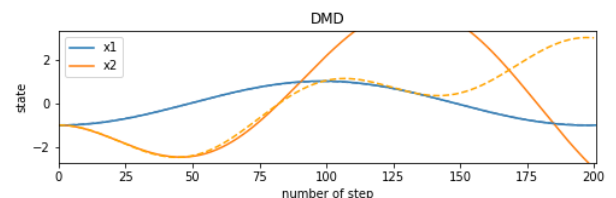
本稿では、動的なデータに対するデータ駆動モデルの一種であるクープマン作用素解析の方法論とその特徴を概説した。クープマン作用素解析は、その計算モデルの設計に現象に対する知識を反映させることが可能な点等、物理現象に対するデータ駆動モデルとして望ましい点を有しており、様々な応用が今後期待できる。

参考文献

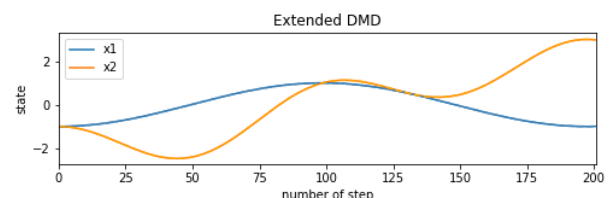
- 1) Kutz, J. N., Proctor, J. L. and Brunton, S. L.: Applied Koopman Theory for Partial Differential Equations and Data-Driven Modeling of Spatio-Temporal Systems, Complexity, Online, 2018.
- 2) Tu, J. H., Rowley, C. W., Luchtenburg, D. M., Brunton, S. L. and Kutz, J. N.: On Dynamic Mode Decomposition: Theory and Applications, Journal of Computational Dynamics, 1(2), pp.391-421, 2014.
- 3) Kamb, M., Kaiser, E., Brunton, S. L. and Kutz, J. N.: Time-Delay Observables for Koopman: Theory and Applications, arXiv:1810.01479, 2018.
- 4) Williams, M. O., Kevrekidis, I. G. and Rowley, C. W.: A Data-Driven Approximation of the Koopman Operator: Extending Dynamic Mode Decomposition, Journal of Nonlinear Science, 25(6), pp 1307-1346, 2015.



(a) 真値



(b) 予測値 1: $g(\mathbf{x}) = (x_1 \ x_2)$ (恒等関数) としたとき



(c) 予測値 2: $g(\mathbf{x}) = (x_1 \ x_2 \ (x_1)^2 \ (x_2)^2)$ としたとき

図-1 データ系列 $\mathbf{x}(\lambda = e^{\frac{\pi i}{10}}, \mu = e^{\frac{\pi i}{20}}, \mathbf{x}^0 = (-1 \ -1)^T$ とした場合) の真値と予測値の比較: ステップ数50までのデータ系列を元に、ステップ数51以降の時間発展を予測