

階層型クラスタリングを用いた Koopman 作用素の低次元化による計算量削減 Reduction of computational costs of the Koopman operator using hierarchical clustering

西方 智也[†] 大久保 潤[†]
Tomoya Nishikata Jun Ohkubo

1. はじめに

非線形系の時間発展を線形の計算で扱うための方法として Koopman 作用素が知られている[1]. 近年, 対象モデルの時系列データと辞書を用いて近似的な Koopman 行列を構築する拡張動的モード分解(Extended Dynamic Mode Decomposition, EDMD)[2]という手法が盛んに研究されている. しかし, 対象モデルの観測量の次元や辞書サイズが大きい場合, 同定した Koopman 行列のサイズが増加し, 計算量も大きくなってしまふ. 物理モデルの特性を活かしたシミュレーション手法への応用も模索されているが[3], こういった手法においては事前に対象の特徴を知っておく必要がある. また, データから学習した Koopman 行列の利用に関しても, 固有値解析による議論が中心となることが多く, 他の視点からの効率化や特徴づけに関する研究は, まだ不十分な状況と言える.

本研究では, 物理モデルの時系列データから得られた Koopman 行列に対して階層型クラスタリングを用いた解析を行う. これにより, それぞれの似ている行, 列を抽出できる. これらの解析に基づいて行列の要素の合成することで, 低次の Koopman 行列を導出し, 計算量削減を行う手法を提案する.

2. Koopman 作用素

状態量 \mathbf{x}_t の非線形系の時間発展関数 $F(\mathbf{x}_t) = \mathbf{x}_{t+1}$ について考える. Koopman 作用素[1]とは, 状態量ではなく観測量 $\mathbf{y}_t = \mathbf{g}(\mathbf{x}_t)$ に対して, 線形演算による時間発展をもたらす作用素のことである. Koopman 作用素 \mathcal{K} を用いた計算式は次のように定義される.

$$\mathcal{K}\mathbf{y}_t = \mathbf{g} \circ F(\mathbf{x}_t) = \mathbf{y}_{t+1} \quad (1)$$

Koopman 作用素 \mathcal{K} により, 非線形系を線形演算で解析できるようになるが, 一方で無限次元を考える必要がある. そのため計算機上でそのまま扱うことは容易ではない.

3. EDMD

EDMD[2]は, スナップショットペアと辞書を用いて, Koopman 作用素を近似し, Koopman 行列 \mathbf{K} を同定する手法である. スナップショットペアとは時系列データにおける, 時間発展前の状態量と時間発展後の状態量のペアデータ ($\mathbf{X}_1 = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_s], \mathbf{X}_2 = [\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_{s+1}]$) のことである. 辞書とは関数の集合であり, EDMD で用いられる辞書関数として, べき乗の辞書, 放射基底関数など様々な関数が辞書関数として知られている. 辞書 $\Psi(\mathbf{x})$ は D 個の関数によって $\Psi(\mathbf{x}) = [\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x}), \dots, \psi_D(\mathbf{x})]^T$ と表記される. また EDMD では辞書関数を観測量として用いて, 次のように時間発展を行う.

$$\mathbf{K}\Psi(\mathbf{x}_t) = \Psi(\mathbf{x}_{t+1}) \quad (2)$$

ここで Koopman 行列 \mathbf{K} は, 状態量のスナップショットペア $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2$ と辞書 $\Psi(\mathbf{x})$ を用いて, 最小二乗問題を解くことによって求めることができる. 具体的には, 以下のように定義する行列 \mathbf{G} と行列 \mathbf{A} を用いて Koopman 行列 $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ が計算される.

$$\mathbf{G} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \Psi(\mathbf{x}_i) \Psi(\mathbf{x}_i)^T \quad (3)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \Psi(\mathbf{x}_i) \Psi(\mathbf{x}_{i+1})^T \quad (4)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{A}\mathbf{G}^\dagger \quad (5)$$

4. 階層型クラスタリングによる Koopman 行列の低次元化

階層型クラスタリングを用いた Koopman 行列の低次元化手法を提案する. 階層型クラスタリングとはデータから最も似ているデータ同士を順にまとめていき, いくつかのクラスタに分類するクラスタリング手法である. ここでは階層型クラスタリングによって Koopman 行列内の似ている行と列をそれぞれ抽出し, それらを同じ要素として扱うことにより, 低次の Koopman 行列の利用を可能とする.

まず EDMD によって導出された Koopman 行列に対して階層型クラスタリングを行う. ここで行方向のクラスタ数 N によるクラスタを $\mathbf{C}^r = [C_1^r, \dots, C_N^r]$, 列方向のクラスタ数 M によるクラスタを $\mathbf{C}^c = [C_1^c, \dots, C_M^c]$ と表記し, クラスタ C_i^r, C_j^c の k 番目のインデックスをそれぞれ C_{ik}^r, C_{jk}^c と表記する. このクラスタに基づいて, 式(6)のように Koopman 行列の要素を合成し, 低次の Koopman 行列 $\mathbf{K}' \in \mathbb{R}^{N \times M}$ を導出する.

$$K'_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{|C_i^r|} \sum_{l=1}^{|C_j^c|} K(C_{ik}^r, C_{jl}^c)}{|C_i^r| |C_j^c|} \quad (6)$$

ここで導出された \mathbf{K}' を用いる場合, 辞書の表現を \mathbf{K}' に対応させる必要がある. そのため, Koopman 行列を作用させる前の辞書を $\Psi_B(\mathbf{x}) = [\psi_{B_1}(\mathbf{x}), \dots, \psi_{B_M}(\mathbf{x})]^T$, 作用させた後の辞書を $\Psi_A(\mathbf{x}) = [\psi_{A_1}(\mathbf{x}), \dots, \psi_{A_N}(\mathbf{x})]^T$ として, 辞書の表現と関係性を次のように定義する.

$$\psi_{B_j}(\mathbf{x}) \triangleq \sum_{k=1}^{|C_j^c|} \psi_{C_{jk}^c}(\mathbf{x}) \quad (7)$$

$$\psi_{A_i}(\mathbf{x}) \triangleq \psi_{C_{i1}^r}(\mathbf{x}) \quad (8)$$

$$\mathbf{K}'\Psi_B(\mathbf{x}_t) = \Psi_A(\mathbf{x}_t) \quad (9)$$

ここで式(8)について, クラスタ C_i^r に属する辞書関数は, 行の合成の結果から, 互いに似ている関係である. そのためここでは代表として1番目の辞書を用いて定義する. このとき, 繰り返し時間発展の計算を行うためには, $\Psi_A(\mathbf{x}_t)$ から $\Psi_B(\mathbf{x}_{t+1})$ に辞書を変換する必要がある. この変換を行

[†] 埼玉大学 Saitama University

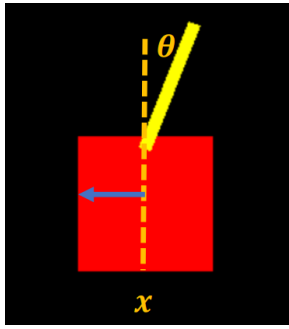


図 1: Cart-Pole モデル

列の計算によって行うためには, $R\Psi_A(x_t) = \Psi_B(x_{t+1})$ の形で作用させる行列 $R \in \mathbb{R}^{M \times N}$ が必要となる. ここでは行列 R をリメイク行列と呼ぶことにする. リメイク行列 R は式 (7), (8) の関係性から次のように導出する.

$$R_{ji} = \sum_{k=1}^{|C_i^r|} \sum_{l=1}^{|C_j^c|} \mathbb{1}[C_{ik}^r = C_{jl}^c] \quad (10)$$

導出したリメイク行列を用いて, 辞書の時間発展を次のように表記できる. なお, $RK' = K'_B \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $K'R = K'_A \in \mathbb{R}^{M \times M}$ である.

$$RK'\Psi_B(x_t) = K'_B\Psi_B(x_t) = \Psi_B(x_{t+1}) \quad (11)$$

$$KR\Psi_A(x_t) = K'_A\Psi_A(x_t) = \Psi_A(x_{t+1}) \quad (12)$$

5. 実験結果

本研究では Cart-Pole モデルに対して, 提案手法を利用し性能を確認する. Cart-Pole とは図 1 のような台の上に棒を立て, 棒が倒れないように水平方向に動かす物理モデルである. モデルの状態変数は台車の座標 x , 棒の角度 θ , そしてそれぞれの速度, 角速度 $\dot{x}, \dot{\theta}$ をまとめて $\mathbf{x} = [x, \theta, \dot{x}, \dot{\theta}]$ と表す. 今回は Cart-Pole のデータとして時間間隔 $\Delta t = 0.05$, タイムステップ数 100 のデータを用いる. そして学習データ数 100 で EDMD を行い, 評価データ数 100 を用いて提案手法の評価を行う. また階層型クラスタリングは最短距離法を用いる. また時間発展は式 (12) による計算を用いて行う.

まず従来の EDMD と提案手法の 1 ステップの平均計算時間の比較を行う. 辞書は 10 次 (辞書サイズ 1001), 9 次 (辞書サイズ 715), 8 次 (辞書サイズ 415) のべき乗の辞書を用いる. また提案手法として Koopman 行列の圧縮率が $[0.8 \times 0.8], [0.6 \times 0.6], [0.4 \times 0.4]$ の行列 K' を用いる. 例えば 10 次の辞書を用いた場合の圧縮率 $[0.8 \times 0.8]$ の行列 K' は $K' \in \mathbb{R}^{800 \times 800}$ となる. それぞれの平均計算時間の結果を表 1 に表す. 表 1 より, 提案手法は従来の Koopman 行列による計算よりも計算量が削減されていることが示された.

次に従来の EDMD と提案手法の精度の比較を行う. 今回はモデルの棒の角度 θ に対して, 100 ステップの予測値の平均二乗誤差を用いて評価する. また次数 10 のべき乗の辞書による結果の比較を実施した. 結果を図 2 に示す. 図 2 の透過部分は四分位範囲を, 太線は中央値を示している. 図 2 の結果から, 従来の Koopman 行列による手法と提案手法は同程度の精度であることが示された.

表 1: 1 ステップの平均計算時間 (ms)

	EDMD	$[0.8 \times 0.8]$	$[0.6 \times 0.6]$	$[0.4 \times 0.4]$
10 次	1.0862	0.6351	0.4246	0.2670
9 次	0.6755	0.4063	0.2709	0.2678
8 次	0.3631	0.2884	0.2305	0.1963

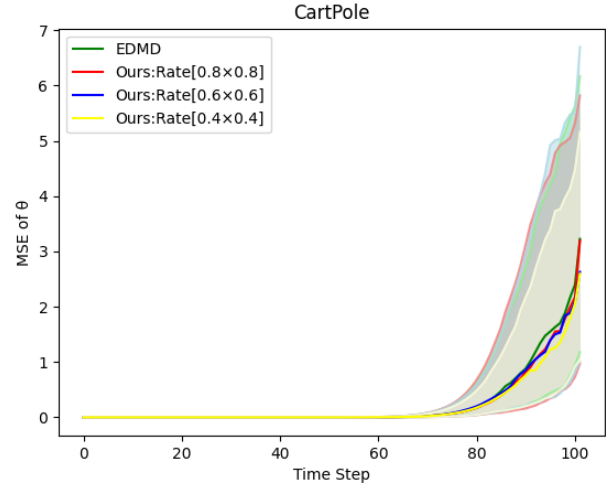


図 2: Cart-Pole の精度比較

6. おわりに

階層型クラスタリングを用いた, Koopman 行列の低次元化の手法を提案した. 提案した手法により求められた低次元の Koopman 行列は, 従来手法の Koopman 行列と比べて, 精度をほとんど落とさずに, 計算量削減可能であることを確認できた.

今後は別の計算量削減手法との比較や, 別の物理モデルでの検証等を実施する予定である.

謝辞

本研究は, JST 創発的研究支援事業 JPMJFR216K の支援を受けたものである.

参考文献

- [1] Bernard O. Koopman, "Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space", PNAS, Vol.17, No.5, pp.315-318 (1931).
- [2] Matthew O. Williams, Ioannis G. Kevrekidis, Clarence W. Rowley, "Data-driven approximation of the Koopman operator: extending dynamic mode decomposition", Journal of Nonlinear Science, Vol. 25, pp.1307-1346 (2015).
- [3] Yunzhu Li Hao He, Jiajun Wu, Dina Katabi, Antonio Torralba, "Learning compositional Koopman operators for model-based control", in Proceedings of ICLR 2020 (2020).