

データ駆動型微分方程式の導出*

東京海洋大学大学院学術研究院

堤夏輝 (Natsuki Tsutsumi)

概要

本研究では、決定論的時系列データから微分方程式の導出を行う。はじめに時系列データから時間微分値の推定を行ったのち、それに対して動径基底関数を用いて回帰を行うことで、非線形の次数などの仮定をせずにデータを表現できる微分方程式を導出する。導出された微分方程式は短期軌道を近似するだけでなく、統計的性質や不変集合も近似している。本手法は偏微分方程式や遅延微分方程式などから生成される時系列データにも適用可能であり、流体現象の表現にも成功している。

1 はじめに

時系列データに基づいて将来の変化を予測する技術は多くの場面で求められる。そのため、そのような技術は現在に至るまで多く研究されている。その中に、決定論的時系列の変化を予測するための技術としてデータから微分方程式を推定する手法がある。時系列データを支配する微分方程式が導出できると、将来の短期的な変化だけでなく、力学的性質なども把握することができる。また、そのようにして導出された微分方程式が低次の多項式のような解析的に扱いやすい形であると、理論的発展にも貢献することができる。SINDy[1]ではLassoといわれる線形回帰の手法を用いて少ない項数で時系列データの変化を十分表現できる微分方程式を推定している。この手法は得られている時系列データを表現する微分方程式が低次の多項式で表現可能であるという条件を必要としている。応用上は時系列データを生成している力学系が低次の多項式であっても、すべての変数を観測することが困難であったり、どの変数を用いればよく表現できるかが未知である場合も多く、この条件を満たさないことが多い。そこで、我々は最近この条件を緩めた場合にも適用可能である手法の提案を行った[5]。提案手法では、表現方法を低次の多項式に限定せず、より広範に適用できるようにしている。

本稿では、我々が提案した手法を用いて流体力学のマクロ変数の変動を記述する微分方程式の導出を行う。流体現象の基礎方程式はNavier-Stokes方程式として知られているが、マクロ変数の変動を記述する閉じた支配方程式の解析的導出は一般に成功していない。そこで、数値的にマクロ変数の時系列データを計算し、それを用いて閉じた微分方程式の導出を行う。はじめに、2章で流体力学のマクロ変数について紹介する。3章では、我々が提案した手法を流体時系列データに適用しながら説明する。そのようにして導出された微分方程式を数値積分し推定軌道を得る手法の紹介とその精度評価を4章で行う。最後に5章で、本レポートのまとめと応用可能性についての考察を行う。

* 本研究は一橋大学齊木吉隆教授、東京海洋大学中井拳吾助教との共同研究である。

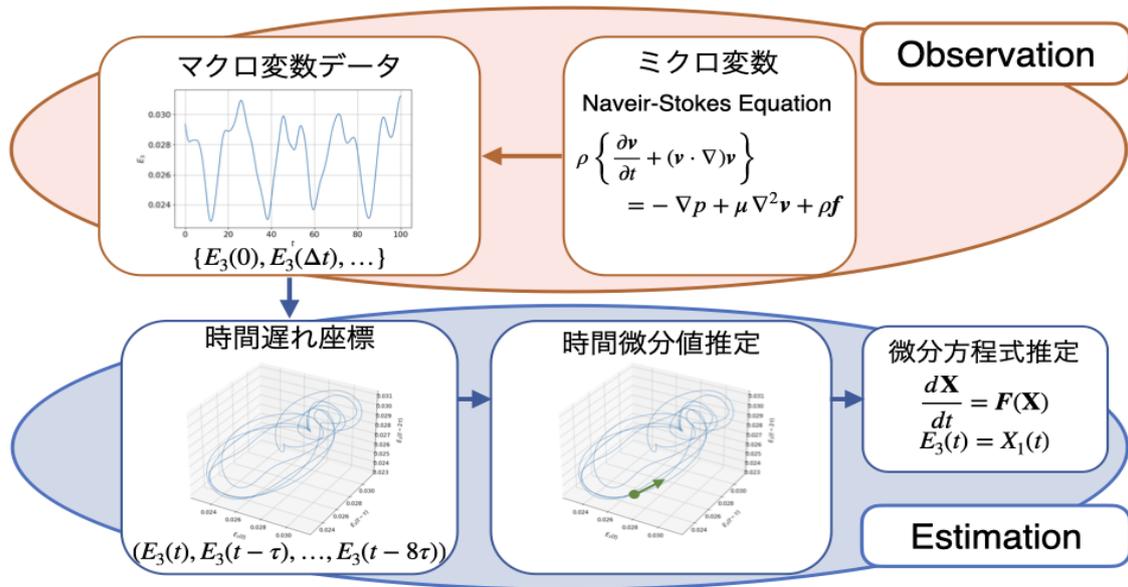


図 1 微分方程式推定の手順.

2 流体力学のマクロ変数

3次元流体の基礎方程式として Navier-Stokes 方程式が知られている。これは3次元のベクトル場の変化を記述している。このベクトル場をフーリエ変換し一定の周波数帯ごとに絶対値を合計したものは、その周波数帯のエネルギーを意味しており、本稿ではこの流体マクロ変数に注目する。このマクロ変数の変動を表現する閉じた微分方程式を Navier-Stokes 方程式から解析的に導出することは困難である。Navier-Stokes 方程式を数値的に解くことで、マクロ変数の時系列データを計算することができる。今回は、[2]で導入されている流体マクロ変数 $E_3(t)$ の変動を表現できる微分方程式を数値計算による時系列データから導出することを行う。

3 微分方程式モデリング

最近、我々はカオス性を持つ時系列データからその変化を記述する微分方程式を推定する手法を提案した [5]。本章ではその手法を前章で導入した流体の $E_3(t)$ 時系列データに適応しながら説明する。手順を図 1 に示している。

3.1 時間遅れ項による埋め込み

はじめに、時系列の時間遅れ座標を作成する。あるカオス性を持つデータの変動を自励系常微分方程式として表現するためには3次元以上が必要であることが知られている。また、スカラー時系列からアトラクタを再構成するために時間遅れ座標系が有用であることも知られている [4]。そこで、 $E_3(t)$ 時系列の変動を記述する微分方程式を推定するにあたり、その時間遅れ項を変数として追加する：

$$\mathbf{X}(t) := (E_3(t), E_3(t - \tau), \dots, E_3(t - 8\tau)) \quad (\tau = 1.5). \quad (1)$$

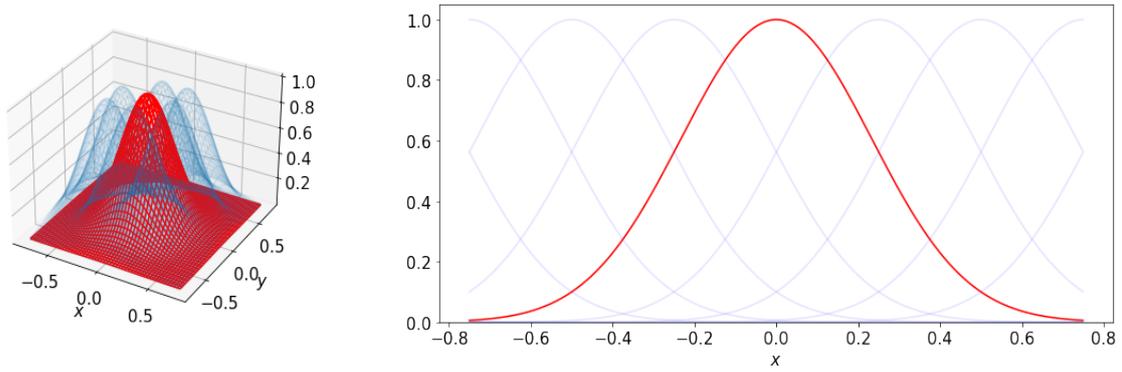


図2 Gauss型動径関数の概形 [5]. Gauss型動径関数 $\phi_j(\mathbf{x})$ の概形を2次元(左図)と1次元(右図)で表している. 中心点 \mathbf{c}_j に近いと最大値1に近く, 遠くなると0に近くなる. Gauss型動径関数は局所的な構造を表現することに有用である.

この9次元データの変動を記述する微分方程式を推定することで, $E_3(t)$ の表現を達成する.

3.2 時間微分値の推定

次にデータの各時点における時間微分値を推定する. 離散時間で得られた $\mathbf{X}(t)$ ($t = \tilde{t} + k\delta$) を用いて, テイラー近似によって時間微分値を推定する. 本研究では以下の6次テイラー展開による:

$$\frac{d\mathbf{X}(\tilde{t})}{dt} \approx \frac{1}{60\delta} \{ \mathbf{X}(\tilde{t} + 3\delta) - 9\mathbf{X}(\tilde{t} + 2\delta) + 45\mathbf{X}(\tilde{t} + \delta) - 45\mathbf{X}(\tilde{t} - \delta) + 9\mathbf{X}(\tilde{t} - 2\delta) - \mathbf{X}(\tilde{t} - 3\delta) \}.$$

本研究では δ を手元データの時間間隔としているが, データにノイズが含まれる場合は δ を大きくとることでノイズによる推定誤差を小さくすることができる. また, 推定結果はこの δ やテイラー展開次数に強く依存しない.

3.3 Gauss型動径関数の導入と線形モデル

データから微分方程式を推定するにあたり, 線形回帰を用いる. 線形回帰とは, 事前に用意した関数(慣習的に基底関数と呼ばれる)の線形和で近似したい関数を表現(線形モデル)し, その係数をデータから推定することで, 関数近似を達成する手法である. 本節では今回用いた線形モデルを説明し, データから係数を推定する手法は次節で紹介する.

今回の設定では, $\mathbf{X}(t)$ の時間微分値が $\mathbf{X}(t)$ の低次多項式で表現されることは期待されない. つまり, 線形モデルとして各変数の多項式を用いたモデルはうまく適用できないと考えられる. そのような場合, Gauss型動径関数という局在化した関数 $\phi_j(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} \in \mathcal{R}^9$) を用いることが有用である [5]. 今回は一次多項式と ϕ_j を組み合わせた, 以下の線形モデルを用いる:

$$\frac{dX_i}{dt} \approx \beta_0^{(i)} + \sum_{d=1, \dots, D} \beta_d^{(i)} X_d + \sum_{j=1, \dots, J} \beta_{D+j}^{(i)} \phi_j(\mathbf{X}) \quad (i = 1, \dots, D). \quad (2)$$

ここで, $D = 9$ は \mathbf{X} の次元であり, X_d は \mathbf{X} の第 d 成分, J は導入した Gauss型動径関数の

総数である。また，Gauss 型動径関数 $\phi_j(\mathbf{x})$ は以下で表される関数である：

$$\phi_j(\mathbf{x}) := \exp \left\{ -\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{c}_j|^2}{\sigma^2} \right\}. \quad (3)$$

ここで， \mathbf{c}_j は j 番目の中心点で δ_{grid} 間隔の格子状に配置されており， σ^2 は $\phi_j(\mathbf{x})$ の実質的なサポートを決定するパラメータで 2 つのパラメータ m, p によって次のように設定される：

$$\sigma^2 := \frac{((m-1)\delta_{grid})^2}{-\log_e p}. \quad (4)$$

Gauss 型動径関数の概形は図 2 に示している。本研究においては $(\delta_{grid}, m, p) = (0.50, 3, 0.10)$ とした。

3.4 Ridge 回帰

線形モデル (式 (2)) の係数を推定する方法について説明する。本節では，一般的な線形モデル

$$y \approx \sum_{k=1, \dots, K} \beta_k x_k \quad (5)$$

における推定を考える。今回は Ridge 回帰と呼ばれる手法を用いる。Ridge 回帰とは以下の目的関数 (L) を最小化するパラメータ $\boldsymbol{\beta} := \{\beta_k\}$ を推定値とする手法である：

$$L(\boldsymbol{\beta}) := \frac{1}{N} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|_{l_2}^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_{l_2}^2. \quad (6)$$

ここで， N は推定に用いるデータ数， $\mathbf{y} := \{y_n\}_{n=1, \dots, N}$ ， $\mathbf{X} := \{x_k^{(n)}\}_{(n,k)}$ ， λ は正則化パラメータと呼ばれる事前に決めたパラメータである。第 1 項は予測値とデータ値の誤差の二乗平均を表している。これだけだと，手元データに過適合してしまい汎化性能が落ちてしまう過学習が起りやすいことが知られている。それを抑えるために，目的関数にパラメータの L_2 ノルムである第 2 項を追加している。式 (6) の最小化は解析的に行うことができるため，Ridge 推定量 $\boldsymbol{\beta}^{\text{Ridge}}$ は以下で記述できる：

$$\boldsymbol{\beta}^{\text{Ridge}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{N} \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (7)$$

ただし， \mathbf{I} は単位行列を表している。今回は $\lambda = 10^{-7}$ としている。

4 精度評価

本章では推定された微分方程式を用いた近似軌道生成とその軌道の評価を行う。また，長期軌道生成を行う Stagger and Step 法の概要を説明する。

4.1 短期軌道

まずはじめに短期軌道について考える。推定された \mathbf{X} に関する微分方程式を 4 次 Runge-Kutta 法を用いて数値積分した結果を図 3 に示している。これを見ると， $t = 80$ までは本来の

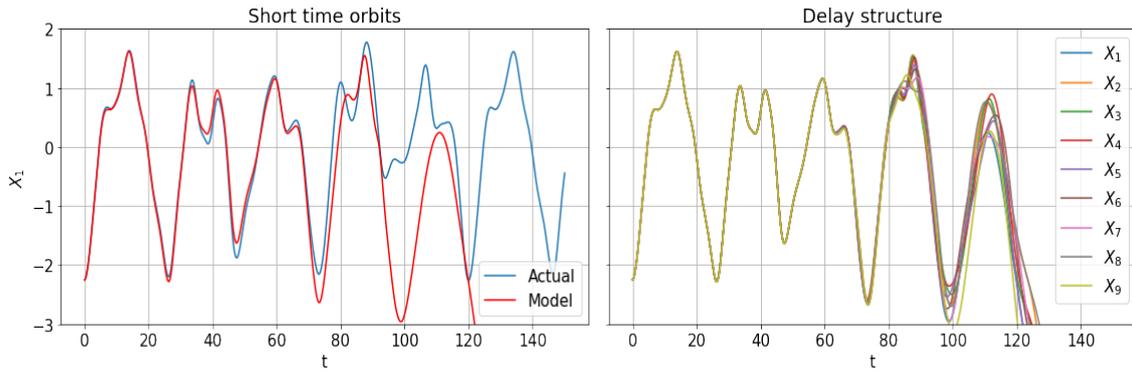


図3 Runge-Kutta法によって数値積分した短期軌道. 3章で推定した微分方程式を数値積分することで, $E_3(t)$ の推定軌道を求めることができる. 4次Runge-Kutta法によって数値積分した $X_1(t)$ (Model)とそれが近似したい時系列である $E_3(t)$ (Actual)を一緒に左図に示している. $t = 80$ までは本来の軌道をよく近似しているが, それ以降は逸れはじめ, その後発散していることがわかる. さて, \mathbf{X} は $E_3(t)$ の時間遅れ座標であるため, 数値積分によって推定された軌道も時間遅れ構造をもっていることが望ましい. それを確認するために, 各変数を適切な時間並行移動した結果を右図に示している. 推定軌道が本来の軌道をよく近似していた $t = 80$ までは時間遅れ構造が保たれているが, それ以降は時間遅れ構造が失われている. このことから, 時間遅れ構造の再現度によって推定軌道が本来の軌道を表現できているかを判定できると考えられる.

$E_3(t)$ 時系列と推定された軌道 $X_1(t)$ が類似していることがわかる. また, その期間においては変数間の時間遅れ構造, すなわち

$$X_1(t) \approx X_2(t + \tau) \approx \dots \approx X_9(t + 8\tau), \quad (8)$$

が成立していることもわかる. しかし, $t = 80$ 以降は2つの時系列の差は拡大していき, 推定された $X_1(t)$ 軌道は発散している. それと同じタイミングで, 時間遅れ構造である式(8)が成り立たなくなっている. つまり, 数値積分した軌道がよく本来の軌道を近似している時は時間遅れ構造が保たれており, そうでない時は時間遅れ構造が失われている. 以上のことより, 推定された微分方程式はベクトル場としてよく近似できているが, それのアトラクタ上に近似したい $E_3(t)$ の軌道が表現されていないといえる. これにより, 短期の予測は成功しても, 長期に近似する軌道を計算することに失敗しているといえる.

4.2 長期軌道

前節では, 推定された微分方程式はベクトル場をよく近似しているが, Runge-Kutta法では長期軌道を生成できないことを確認した. 本節では, 長期軌道を生成する手法として Stagger and Step法[3]を導入し, 推定された長期軌道の統計的性質が $E_3(t)$ 時系列のそれを近似していることを確認する.

推定された微分方程式はデータの流れをベクトル場としてよく近似している. そのため, 適切に数値積分することが可能であれば, 長期軌道も生成できると思われる. しかし, 表現したい軌道は推定された微分方程式のアトラクタ上に表現されていないため, Runge-Kutta法による数値積分では長期軌道を得ることができない. 実は, それはカオティックサドルという不変集合上に表現されていることが以降の解析によりわかる. カオティックサドルとは, 吸引しな

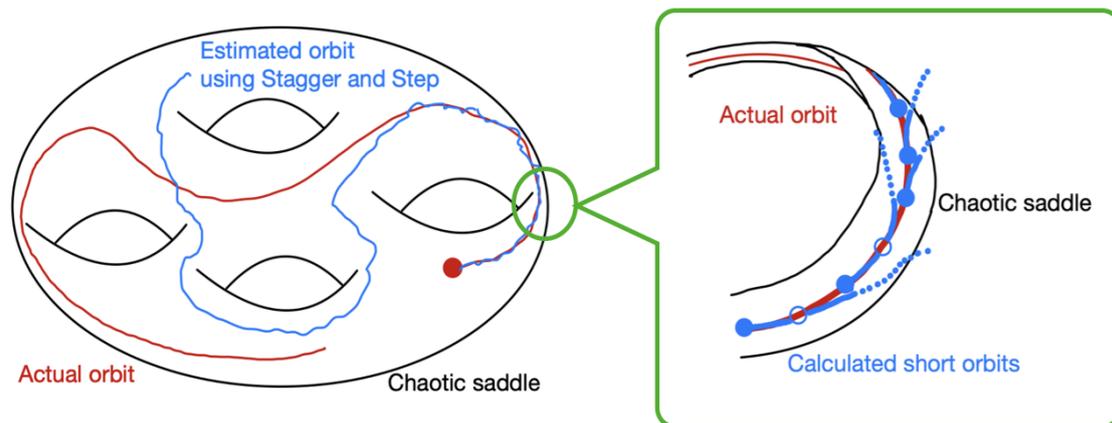


図4 Stagger and Step 法による軌道生成イメージ. 近傍を吸引しない領域をもつカオスの不変集合をカオティックサドルといい, 3章で推定された微分方程式において, 表現したい $E_3(t)$ 軌道はの上にあると考えられる. そのために Runge-Kutta 法による数値積分では軌道が発散してしまった. カオティックサドル上の軌道を生成する手法の1つに Stagger and Step 法が存在する. Stagger and Step 法は短期軌道の繋ぎ合わせとして長期軌道を生成する. 今回は時間遅れ構造が再現されているかで計算された軌道がカオティックサドル上に存在しているかを判定している. 時間遅れ構造が失われた場合は, 一定時間戻った地点にノイズを加え, 時間遅れ構造が保たれる点を探している. カオス性により Stagger and Step 法により生成された軌道は本来の軌道と一定時間後にずれることに注意が必要である.

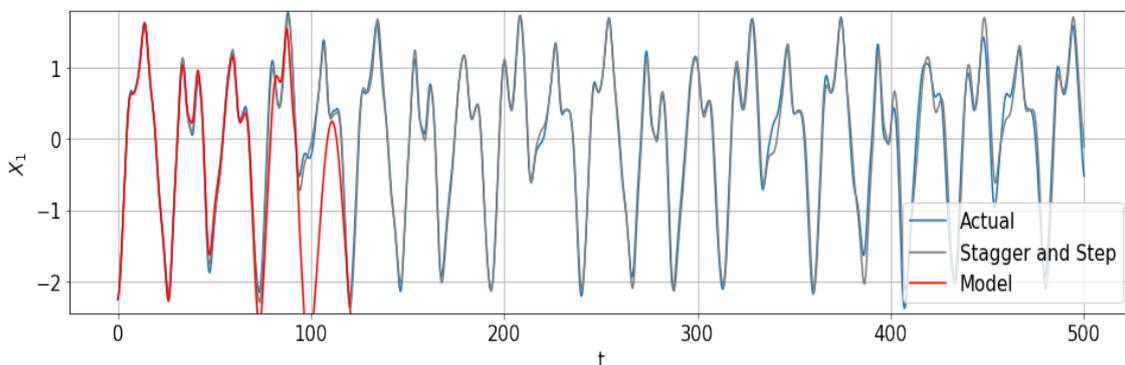


図5 Stagger and Step 法による短期軌道. Stagger and Step 法によって計算された短期軌道 (Stagger and Step) を図3に示した軌道 (Actual も Model) とともに示している. Stagger and Step 法を適用することで, 推定軌道は発散せずに本来の軌道と似た軌道となっている. ただし, カオス性により一定時間後に Actual と Stagger and Step の軌道がずれている点に注意が必要である.

い近傍を持つカオスの不変集合のことであり, その上の軌道を数値計算によって推定すると, 推定された軌道は数値計算の誤差が影響しその不変集合から逸脱する. そこで, カオティックサドル上の軌道を生成する手法として Stagger and Step 法が提案されている. Stagger and Step 法は, 数値計算誤差によって不変集合上から軌道がずれないように微小なノイズを入れることによって, 不変集合上を振る舞い続ける軌道断片として長期軌道を生成するものである. Stagger and Step 法による軌道生成のイメージを図4に示している.

実際に Stagger and Step 法によって生成した軌道を図5に示している. 軌道が発散せず,

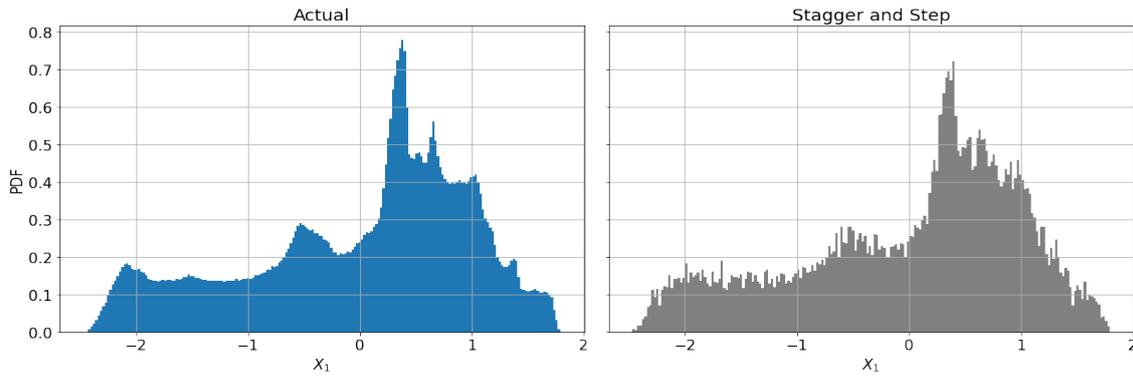


図6 Stagger and Step 法による長期軌道の不変密度分布. Stagger and Step 法を用いることで発散しない軌道を生成できるため, それによる長期軌道から不変密度分布を推定した (右図). 本来の $E_3(t)$ 軌道の不変密度分布 (左図) と比較すると, 似たような不変密度分布となっていることがわかる. このことから, 推定された微分方程式は $E_3(t)$ の力学的性質も表現していることがわかる.

本来の $E_3(t)$ 軌道と似た軌道が長く生成できていることがわかる. ただし, カオス性によりしばらくすると軌道がずれている点に注意が必要である. また, 長期軌道によって計算された不変密度分布も本来のものをよく近似していることが図6からわかる. 以上により Stagger and Step 法によって, 推定された微分方程式から本来の軌道に類似する軌道を生成できていると言える. この意味で推定された微分方程式は元の力学系をよく表現していることがわかる.

5 議論

本稿は, 解析的に閉じた微分方程式を導出することが困難な流体マクロ変数を表現する微分方程式をデータから推定することを行った. 推定された微分方程式を Runge-Kutta 法で数値積分すると, 元の時系列を短期的によく近似する軌道を生成することができた. しかし, 表現したい軌道はアトラクタ上の軌道としては表現されておらず, 長期の軌道は発散してしまった. そこで, Stagger and Step 法を用いることで, 元の時系列の統計的性質をよく近似している発散しない長期軌道を生成することができた. 以上のことから, 流体マクロ変数を閉じた微分方程式の変数として表現することに成功したといえる.

今回用いた手法 [5] は, 式 (2) の左辺を入れ替えることで同じ力学系から生成された他の変数に応用が可能である. 我々は $E_3(t)$ の変動を表現する微分方程式と同じ線形モデルを用いて他の流体マクロ変数を表現することにも成功している. つまり, $E_3(t)$ の時間遅れ座標系によって $E_i(t) (i \neq 3)$ の変動を再現することができ, それは $E_3(t)$ 時系列に他のマクロ変数の変動を表現するのに十分な情報が含まれていることを意味している. このように, 今回用いた手法はスカラー時系列の軌道やその構造推定だけでなく, 変数間の関係なども記述可能であると考えられる.

参考文献

- [1] S. L. Brunton, J. L. Proctor, and J. N. Kutz. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *Proceedings of the National*

- Academy of Sciences*, 113(15):3932–3937, 2016.
- [2] K. Nakai and Y. Saiki. Machine-learning inference of fluid variables from data using reservoir computing. *Physical Review E*, 98(2):023111, 2018.
 - [3] D. Sweet, H. E. Nusse, and J. A. Yorke. Stagger-and-step method: Detecting and computing chaotic saddles in higher dimensions. *Physical Review Letter*, 86:2261–2264, 2001.
 - [4] F. Takens. Detecting strange attractors in turbulence. In D. Rand and L.-S. Young, editors, *Dynamical Systems and Turbulence, Warwick 1980*, pages 366–381, Berlin, Heidelberg, 1981. Springer Berlin Heidelberg.
 - [5] N. Tsutsumi, K. Nakai, and Y. Saiki. Constructing differential equations using only a scalar time-series about continuous time chaotic dynamics. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 32(9):091101, 2022.