動的モード分解に対する確率解析

法政大学 情報科学部
相島 健助[*1]
Kensuke Aishima
Faculty of Computer and Information Sciences, Hosei University

1　はじめに

観測した時系列データを解析し，その背後にある重要な非線形ダイナミクスを見出すことは，数理モデリングの重要な応用技術である．本稿では，時系列データの解析手法として近年注目されている動的モード分解について議論する．動的モード分解とは，もともと流体の分野で 2010 年頃 [14] 等にて提案された次元削減アルゴリズムであり，データ駆動型解析手法の一つと言える．よく英語の略記で DMD (Dynamic Mode Decomposition) と表記され，近年脚光を浴び，活用範囲の広がりとともに実に多くの変種が提案されている．本研究と関連の強い論文だけでも [3, 4, 7, 10, 12, 16] などが挙げられ，近年のデータサイエンスの流行も後押しとなり，精力的に研究が行われ実に多くの成果が報告されている．本稿で議論するのは，実用上重要な確率的ノイズを含むデータセットに対する動的モード分解の理論的な性質である．

実用上の重要性から，近年ノイズに対して頑健な計算手法の開発が進められている．最初にそのような試みが見られたのが，2016 年の [7] であり Noise-corrected DMD，Forward-backward DMD，Total least squares DMD が提案されている．最後の Total least squares DMD については同時期に [10] にても提案され，この手法に特化して詳細な結果が与えられている．上の研究に続き，2017 年の [3] では，2012 年頃に提案された Optimized DMD [6] をノイズへの頑健さから再度見直し性能のよさを報告している．さらに，2019 年には，ノイズへの強さを重視し新たに Consistent DMD [4] が提案されている．この流れとは別に，確率分布の導入によりノイズを表現するモデルを与え，データから確率分布（を定めるパラメータ）を推定することでノイズを除去する枠組みが示され，具体的に Bayesian DMD 等が提案されている [15]．このように最近になってノイズの影響を考慮した計算手法の開発が進められてはいるが，現状で報告されている各手法のノイズへの強さの検証は，ある種の単純な最適性の議論や数値実験によるものにとどまっている．統計的な意味での漸近解析はほとんど行われておらず，本稿でも示す Gleser による統計解析の結果 [8, Lemma 3.3] に基づくものが見られるのみである．そもそも，ここ 10 年程度に渡り実に多様な研究が行われてきた中で，ノイズの影響をどのような数理モデリングにより定式化し解析すべきなのかが曖昧な現状にある．

この現状に対し，筆者は [1] にて最も基本的な誤差の統計モデルを与え，動的モード分解の漸近解析を行った．本稿では，この最新の結果の背景となる数学解析について，[1] と重なる部分も多いが，下記の順で詳細に解説を行う．まず，動的モード分解の理論背景となる非線形ダイナミクスに対する合成作用素のスペクトル解析から説き起こすことで，ノイズに対して頑健と考えられる動的モード分

[*1] aishima@hosei.ac.jp

解の中で Total least squares DMD に着目し，統計的な意味での漸近解析を行う．具体的には，数値線形代数における特異値分解 [9, §2.4] による Total least squares 問題の数値解法 [9, §6.3] とその統計解析の結果 [8, Lemma 3.3] [11, Lemma 4.6] に基づき，サンプル数に対する理論的な漸近収束性（推定量の一致性）を示す．アルゴリズム的な研究が多い現状において，このような理論的な観点から一つの筋道を与え，研究の歴史的経緯と現状および今後の課題について整理する意義は大きい．この筋道を念頭に，数値的にサンプル数に対する漸近的な収束性（推定量の一致性）を検証し，主に数値線形代数の観点から今後期待される研究の方向性を提示する．

2　合成作用素のスペクトル解析と動的モード分解

本稿で漸近解析の対象とする動的モード分解が近年非常に注目されている理由の一つが，その提案とほぼ同時期に [12] にて合成作用素のスペクトル解析と結びつき，非線形ダイナミクスの解析手法としての理論基盤が指摘されたことであろう．本節ではこの理論背景について述べる．

ある多様体 M 上で定義された非線形関数 f により生成される時系列 $z_0, z_1, \ldots$ について考える．つまり，

$$z_k \in M,\ z_{k+1} = f(z_k),\ k = 0, 1, \ldots$$

と表される現象の解析手法について考える．

具体的には，合成作用素を導入しそのスペクトル解析を行う．これは M から $\mathbb{R}$ への写像 g に対して，線形作用素 $\mathcal{K}$ を f の合成により

$$g : M \to \mathbb{R},\ \mathcal{K}(g) = g \circ f \tag{1}$$

と定義することから始まる．上記の実数空間 $\mathbb{R}$ は複素数空間 $\mathbb{C}$ で考えても下記の議論は同様だが，議論の単純化のため $\mathbb{R}$ とする．ここでの g は任意の非線形関数であり，したがって $\mathcal{K}$ はいわゆる引き戻しを与える作用素である．この作用素 $\mathcal{K}$ はクープマン作用素と呼ばれることも多い．続いて，$\mathcal{K}$ の固有関数を ψ_i $(i = 1, 2, \ldots)$ とおく．つまり

$$\mathcal{K}(\psi_i) = \lambda_i \psi_i\ (i = 1, 2, \ldots)$$

が成り立つ．ここで，有限個の固有関数で展開できる g について考えると

$$g = \sum_{i=1}^{r} \psi_i,\ g(z_k) = \sum_{i=1}^{r} \psi_i(z_k) \in \mathbb{R}$$

と表せる．この条件は強すぎるため扱えるダイナミクスは [12, §2.2] のような周期軌道などに限定されるが，実は数学解析を行う上でこのような強い条件を課すことはよく見受けられる [2, 5, 15, 16]．より一般的なダイナミクスを扱うために，上の等号が近似的に成り立つ場合を考えることは多いが，その扱いは後に少し考慮することにし，ここでは議論の単純化のため上の等号が成り立つ条件下で考える．このとき

$$g \circ f = \sum_{i=1}^{r} \psi_i \circ f = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \psi_i, \quad g(z_{k+1}) = g \circ f(z_k) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \psi_i(z_k) \in \mathbb{R}$$

となり，$g(z_k)$ と $g(z_{k+1})$ が明解な関係式で結び付くことが分かる．

上の関数 g は物理的には可観測量を想定し，したがって時系列 $z_0, z_1, \ldots$ に対して g を作用させた $g(z_0), g(z_1), \ldots$ が解析の対象となる．そこで，先の関係式に再度着目すると，帰納的に

$$g(z_k) = \sum_{i=1}^{r} {\lambda_i}^k \psi_i(z_0) \in \mathbb{R}$$

が分かる．時系列の解析上，固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, r)$ は重要であり，いわゆるモーメントである $g(z_0), \ldots g(z_{2r-1})$ が観測できれば，$\psi_i(z_0)$ $(i = 1, \ldots, r) \neq 0$ という条件下で，ハンケル行列の線形方程式あるいは一般化固有値問題に帰着して固有値を計算することができる．

観測において，上の性質をもつ複数の g を導入することは多い．そこで，$\boldsymbol{g} = [g_1, \ldots, g_m]^\top$ とし，各 g_j $(j = 1, \ldots, m)$ は共通して有限個の固有関数 ψ_i $(i = 1, \ldots, r)$ の線形和で表せること，つまり

$$\boldsymbol{c}_1, \ldots, \boldsymbol{c}_r \in \mathbb{C}^m, \quad \boldsymbol{g} = \sum_{i=1}^{r} \psi_i \boldsymbol{c}_i$$

と書けることを仮定する．固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, m)$ は複素数になりうるため $\boldsymbol{c}_i$ $(i = 1, \ldots, m)$ の要素は複素数も考慮している．さらに，前提として，可観測量の次元 m は部分空間の次元 r 以上とし，

$$r \leq m,\ \boldsymbol{g} = \sum_{i=1}^{r} \psi_i \boldsymbol{c}_i,\ \boldsymbol{g}(z_k) = \sum_{i=1}^{r} \psi_i(z_k) \boldsymbol{c}_i \in \mathbb{R}^m \tag{2}$$

とする．このとき

$$\boldsymbol{g}(z_{k+1}) = \sum_{i=1}^{r} \psi_i \circ f(z_k) \boldsymbol{c}_i = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \psi_i(z_k) \boldsymbol{c}_i \in \mathbb{R}^m.$$

したがって，ランク r の $m \times m$ 行列

$$A \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad \mathrm{rank}(A) = r$$

を用いて

$$\boldsymbol{g}(z_{k+1}) = A\boldsymbol{g}(z_k)\ (k = 0, 1, \ldots) \tag{3}$$

と表すことができる．一般的な条件下で，行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ の非零固有値とそれに対応する固有ベクトルは $\lambda_i, \boldsymbol{c}_i$ $(i = 1, \ldots, r)$ であり，帰納法により $\boldsymbol{g}(z_k) = \sum_{i=1}^{r} {\lambda_i}^k \psi_i(z_0) \boldsymbol{c}_i$ $(k = 0, 1, \ldots)$ が分かる．こうして $\boldsymbol{g}$ を基に得られる $\lambda_i, \boldsymbol{c}_i$ $(i = 1, \ldots, r)$ について，まず λ_i $(i = 1, \ldots, r)$ は合成作用素 $\mathcal{K}$ の固有値であり，そして $\boldsymbol{c}_i$ $(i = 1, \ldots, r)$ の各要素は $\boldsymbol{g}$ の各要素を固有関数で展開した場合の係数である．これらは $\boldsymbol{g}$ の背後にあるダイナミクス $z_{k+1} = f(z_k)$ $(k = 0, 1, \ldots)$ の特徴を示すものであり，このような解析を行うことがいわゆるスペクトル解析である．

上記の議論では，$g : M \to \mathbb{R}$ という関数に対し，これを複数導入することで $\boldsymbol{g}$ を定義した場合のスペクトル解析を行ったが，別の方針のスペクトル解析も見受けられる．それは，直接 M から $\mathbb{R}^m$ への写像として $\boldsymbol{g}$ を導入し，合成作用素 $\mathcal{K}$ も高次元化し $\mathcal{K}(\boldsymbol{g}) = \boldsymbol{g} \circ f$ と定義した場合の式 (3) を満たす A を求めることであり，例えば [4, 10] にて議論されている．この場合，$\mathcal{K}$ の（高次元の）固有関数 $\boldsymbol{\psi}_1, \ldots, \boldsymbol{\psi}_r$ の線形和で書ける $\boldsymbol{g}$ に対して，上記と同様の計算により，A の非零固有値が

λ_i $(i=1,\dots,r)$ であり，対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{\psi}_i(z_0)$ $(i=1,\dots,r)$ であることが分かる．このスペクトル解析は先のものとやや意味合いが異なるが，いずれにせよ，時系列 $\boldsymbol{g}(z_0),\boldsymbol{g}(z_1),\dots$ を基に式 (3) の A の固有値・固有ベクトルを計算することが重要である．

上記の議論において，実際に観測を行うのは時系列 $\boldsymbol{g}(z_0),\boldsymbol{g}(z_1),\dots$ の一部である場合は多い．この場合の観測データの扱いに関する方法論が [16] にて示されており，本稿の議論はこれに基づいている．つまり，$\ell=1,2,\dots,n$ とし，$\boldsymbol{g}(z_{k_\ell}),\boldsymbol{g}(z_{k_\ell+1})$ を観測するという前提条件の下で

$$\bar{\boldsymbol{x}}_\ell=\boldsymbol{g}(z_{k_\ell}),\ \bar{\boldsymbol{y}}_\ell=\boldsymbol{g}(z_{k_\ell+1}),\\ \bar{X}=[\bar{\boldsymbol{x}}_1,\dots,\bar{\boldsymbol{x}}_n],\ \bar{Y}=[\bar{\boldsymbol{y}}_1,\dots,\bar{\boldsymbol{y}}_n]$$

とおく．目的は，この行列データセット $\bar{X},\bar{Y}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ に対して，$A\bar{X}=\bar{Y}$ を満たす $A\in\mathbb{R}^{m\times m}$ の固有値と固有ベクトルを求めることである．

上記の問題設定が動的モード分解に結び付く．動的モード分解とは，時系列データに対する次元削減アルゴリズムであり，それによりデータの本質的な部分を抽出する解析手法と見なせる．計算上は，上記の行列 $A\in\mathbb{R}^{m\times m}$ が高次元ベクトル空間に対応する大規模行列であることを意識し，行列 A を陽的に構成することなく，データセット $\bar{X},\bar{Y}$ から直接所望の固有値と固有ベクトルを得る技術である．大きく分けて，アーノルディ過程 [9, §10.5] に基づく計算手法と特異値分解 [9, §2.4] に基づく計算手法が存在する．前者の手法が最初に提案されたものでありこの手法も重要ではあるが，これは観測のベクトル列 $\boldsymbol{g}(z_0),\boldsymbol{g}(z_1),\dots$ がすべて得られることを想定するため本稿の前提条件に合致しない．また，本稿では観測ノイズに焦点を当てるため，後者の特異値分解に基づく手法の方が相性がよく，これについて議論する．

その計算手法は下記のとおりである．まず $\bar{X}$ の特異値分解を計算する．より正確には，r 個の非零特異値とそれに対応する特異ベクトルを計算する．そして r 個の非零特異値を対角成分とする対角行列 Σ，対応する特異ベクトルを U,V とし，今 $\bar{X}$ のランクが r であると仮定すると，$\bar{X}=U\Sigma V^\top$ であるから，$\bar{Y}=AU\Sigma V^\top$ である．この関係に注意し，レイリー・リッツの技法 [13, §4.3] で目的の固有値・固有ベクトルを求める．具体的には，$U^\top\bar{Y}V\Sigma^{-1}$ を計算するとこれが $U^\top AU$ に等しいことが分かるので，U がなす部分空間への射影により固有値・固有ベクトルを近似的に計算できる．つまり，上記 $U^\top AU$ の固有値・固有ベクトルを $\lambda_{\mathrm{dmd}},\boldsymbol{w}_{\mathrm{dmd}}$ とおくと A の固有値は λ_{dmd}，固有ベクトルは $U\boldsymbol{w}_{\mathrm{dmd}}$ である．

標準的な動的モード分解の計算手法は上記の通りだが，背景となる合成作用素のスペクトル解析に留意して，式 (2) の等号は厳密ではなく近似の場合も考慮したい．言い換えれば，A のランクは厳密に r ではなく，ランク r の行列でよい近似が可能と考えることは多い．この条件を念頭に，レイリー・リッツの技法が絶対値の大きい固有値と対応する固有ベクトルを近似すること，特異値分解がランク r の最良近似行列を与えることは注目に値し，この機能がそのまま上記の計算手法の長所となる．しかしながら，おおよそランク r で近似できる行列 A の固有値問題に対する理論解析を行うには，そのランク r の行列と A の関係を数学的に厳密に定式化して摂動に関する議論に帰着する必要がある．この観点から，摂動が確率的な場合の数学議論を整理していくことが本稿の主目的である．

以下では，式 (2) の通り $\boldsymbol{g}$ の各要素が予め定められた有限個の固有関数で展開できることは仮定する．この仮定は強すぎるが，代わりに，データセットには確率的な振る舞いをするノイズが含まれていることにする．つまり，$\bar{X},\bar{Y}$ が直接得られるのではなく，その観測にはノイズが含まれる．一般

の $\boldsymbol{g}$ に対して，式 (2) のように有限個の固有関数の和で近似した場合の打切り誤差を，確率的ノイズと解釈できる問題設定もあるかもしれないが，そのような議論は今後の課題と見なす．本稿の議論は要するに純粋な確率的ノイズの影響の数学解析であり，データセットに対する次の確率モデル

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{x}_\ell = g(z_{k_\ell}) + \boldsymbol{\xi}_{k_\ell},\ \boldsymbol{y}_\ell = g(z_{k_\ell+1}) + \boldsymbol{\xi}_{k_\ell+1},\\ &X = [\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n],\ Y = [\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_n].\end{aligned}$$

を考える．上式でのベクトル $\boldsymbol{\xi}_j$ の各要素は確率変数である．観測可能な X, Y を用いて $A\bar{X} = \bar{Y}$ を満たす A の固有値・固有ベクトルを計算したい．この目的を達成するための手法として提案されたのが Total least squares DMD [7, 10] である．以下では，これを TLS 型動的モード分解と呼ぶ．

3　TLS 型動的モード分解

本節では，TLS 型動的モード分解について説明する．まず，与えられた $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ に対して

$$\begin{aligned}&\min_{A_{\mathrm{tls}}, \Delta X, \Delta Y} \|\Delta X\|_{\mathrm{F}}^2 + \|\Delta Y\|_{\mathrm{F}}^2\\ &\text{s.t. } Y + \Delta Y = A_{\mathrm{tls}}(X + \Delta X)\end{aligned}$$

を満たす A_{tls} を求めたい．上のノルムはフロベニウスノルムである．これが TLS (Total Least Squares) 問題であり，かなり一般的な条件下で解は一意的に存在し，特異値分解を用いて数値的に解くことができる [9, §6.3]．この性質に着目し，[7, 10] では TLS 型動的モード分解が提案されている．その計算手法は下記のとおりである．

[TLS 型動的モード分解の計算手法]

1. $Z = [X^\top, Y^\top]^\top \in \mathbb{R}^{2m\times n}$
2. Z の特異値分解を計算し Q を r 本の右特異ベクトルから成る $n \times r$ 直交行列とする
3. $\widehat{X} = XQ, \widehat{Y} = YQ$
4. 特異値分解を計算：$\widehat{X} = U\Sigma V^\top$ $(U \in \mathbb{R}^{m\times r}, \Sigma \in \mathbb{R}^{r\times r}, V \in \mathbb{R}^{r\times r})$
5. $\widetilde{A}_{\mathrm{dmd}} = U^\top \widehat{Y} V \Sigma^{-1}$
6. 固有値・固有ベクトルを計算：$\widetilde{A}_{\mathrm{dmd}}\widetilde{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{dmd}} = \lambda_{\mathrm{dmd}}\widetilde{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{dmd}}$
7. $\boldsymbol{w}_{\mathrm{dmd}} = U\widetilde{\boldsymbol{w}}_{\mathrm{dmd}}$

この手法において，$\widehat{X}$ の Moore-Penrose の一般逆行列 [9, §5.5] を用いて

$$\widehat{X}^\dagger = V\Sigma^{-1}U^\top, \quad \widehat{A}_{\mathrm{tls}} = \widehat{Y}\widehat{X}^\dagger \tag{4}$$

と定義すると，$r = m$ の場合であれば TLS 問題の解 A_{tls} は $\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ である．一般の $r \le \min(m, n)$ において，$\widehat{X}, \widehat{Y} \in \mathbb{R}^{m\times r}$ であることに着目すると，$\widehat{A}_{\mathrm{tls}}\widehat{X} = \widehat{Y}$ であるから，

$$\widetilde{A}_{\mathrm{dmd}} = U^\top \widehat{A}_{\mathrm{tls}} U \tag{5}$$

が成り立つことが分かる．したがって，TLS 型動的モード分解は，$\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ に対して r 次元部分空間 U を用いるレイリー・リッツの技法 [13, §4.3] により $\widetilde{A}_{\mathrm{dmd}}$ の固有値問題に帰着している．式 (4) より

$\mathrm{rank}(\widehat{A}_{\mathrm{tls}}) = r$ であることにも注意すると $\lambda_{\mathrm{dmd}}, \boldsymbol{w}_{\mathrm{dmd}}$ は $\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ の固有値と固有ベクトルであり，特に，$r = m$ なら $\widetilde{A}_{\mathrm{dmd}}$ は直交行列 U による $\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ の相似変換で得られる行列ということになる．

以上の議論に基づき，[7, 10] では上記の TLS 型動的モード分解を提案しているが，誤差の統計的な漸近解析はほとんど行われていない．本稿では漸近解析について深く考察するため，下記の問題設定における動的モード分解を考える．

問題 1. 観測された行列 $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ は，$E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ を各要素を乱数とする行列として，

$$A\bar{X} = \bar{Y}, X = \bar{X} + E, Y = \bar{Y} + F,$$

を満たす．このとき $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ の m 個の固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, m)$ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{w}_i$ $(i = 1, \ldots, m)$ を求めたい．

さらに，乱数行列 $E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ には次の仮定をおく．

仮定 1. 行列 $[E^\top, F^\top]^\top$ の各列は独立同分布であり，平均 $\mathbf{0}$ 共分散行列 $\sigma^2 I \in \mathbb{R}^{2m\times 2m}$ である．さらに，収束先 $\lim_{n\to\infty} n^{-1}\bar{X}\bar{X}^\top$ が存在する．

仮定 2. 仮定 1 の下で，$\lim_{n\to\infty} n^{-1}\bar{X}\bar{X}^\top$ が正定値対称行列である．

上の条件下で，1981 年 Gleser は TLS 問題の解 A_{tls} の A への概収束を証明している [8, Lemma 3.3]．この性質を TLS 型動的モード分解の計算手法に合わせて記述すると，次の通りである．

補題 1 (概収束 [8, Lemma 3.3])**.** 問題 1 において，仮定 1，2 の下で，$r = m$ として TLS 型動的モード分解を計算する．このとき式 (4) で定義する $\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ に対して確率 1 で

$$\lim_{n\to\infty} \widehat{A}_{\mathrm{tls}} = A.$$

上の補題に基づき，$\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ の固有値・固有ベクトルを求めれば漸近的に A の固有値・固有ベクトルが得られることになる．この Gleser [8] の結果に基づく理論背景は TLS 型動的モード分解を提案する [10] において指摘されているが，行列 A がランク落ちする場合は考慮されていない．ただし，TLS 型動的モード分解の計算精度のよさは，[7, 10] 或いはその後の論文 [3, 4] において数値実験によりある程度立証されている．

実は，動的モード分解の研究とは別途で，数多くある TLS 問題に関する数値線形代数の研究の中で，上の論点に対し部分的な解答を与える研究成果 [11] がある．これを次節にて紹介し，TLS 型動的モード分解の漸近収束性を示す．

4 ランク落ちのデータ行列の場合の漸近解析

TLS 問題に対する Gleser [8] とも関連し，[11] では次のランク制約付き問題が検討されている．

$$\begin{aligned}
&\min_{A_{\mathrm{tls}}, \Delta X, \Delta Y} \|\Delta X\|_{\mathrm{F}}^2 + \|\Delta Y\|_{\mathrm{F}}^2 \\
&\text{s.t. } Y + \Delta Y = A_{\mathrm{tls}}(X + \Delta X), \\
&\qquad Z = [X^\top, Y^\top]^\top, \Delta Z = [\Delta X^\top, \Delta Y^\top]^\top, \\
&\qquad \mathrm{rank}(Z + \Delta Z) = r(< m).
\end{aligned}$$

表 1　サンプル数に対する収束の例（各値は 100 回の試行の平均値）

		$n = 50$	$n = 100$	$n = 200$
厳密な低ランク行列	固有値の誤差	5.5E−02	3.1E−02	1.9E−02
	固有ベクトルの誤差	2.6E−02	1.3E−02	7.2E−03
	行列の誤差	2.6E−01	1.9E−01	1.4E−01
正弦波の離散化	固有値の誤差	4.7E−02	3.2E−02	1.6E−02
	固有ベクトルの誤差	4.1E−01	4.4E−01	3.5E−01
	行列の誤差	2.3E−01	1.6E−01	1.1E−01

この問題は観測できる行列 Z がランク r の低ランク行列で近似できることを想定する．つまり，ノイズの確率モデルとしては次のようなものが対応する．

問題 2. 観測された行列 $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ は，$E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ を各要素を乱数とする行列として，

$$A\bar{X} = \bar{Y}, X = \bar{X} + E, Y = \bar{Y} + F,$$
$$\bar{Z} = [\bar{X}^\top, \bar{Y}^\top]^\top, \mathrm{rank}(\bar{Z}) = r(< m),$$

を満たす．このとき $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ の r 個の固有値 λ_i $(i = 1, \dots, r)$ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{w}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ を求めたい．

問題 2 の A は一意ではないが，TLS 型動的モード分解を計算するとき，[11, Lemma 4.6] に基づき次の補題の収束性が分かる．

補題 2 (概収束 [11, Lemma 4.6])**.** 行列 $\bar{A}$ を問題 2 の A に対するフロベニウスノルムの意味での最小ノルム解とする．仮定 1 の下で，$\lim_{n\to\infty} n^{-1}\bar{X}\bar{X}^\top$ のランクを r として TLS 型動的モード分解を計算すると，式 (4) で定義する $\widehat{A}_{\mathrm{tls}}$ に対して確率 1 で

$$\lim_{n\to\infty} \widehat{A}_{\mathrm{tls}} = \bar{A}.$$

この補題に基づき，TLS 型動的モード分解の計算手法により最小ノルム解 $\bar{A}$ の固有値・固有ベクトルが得られることが期待できる．しかしながら，動的モード分解で必要とされる A が上の最小ノルム解 $\bar{A}$ で適切かどうかは議論の余地がある．この論点を明快に解決するのが，筆者の最新の研究成果 [1] であり，詳細はこちらで確認されたい．

5　数値実験結果

本節で，漸近的な収束性を検証する数値例を記す．実験は MATLAB で行い，二つの問題例に対して TLS 型動的モード分解の計算手法の収束性を検証した．

1 つ目の問題例では，$m = 200, r = 2$ とし，標準正規分布による乱数行列の QR 分解により列が直交する行列 $Q \in \mathbb{R}^{m\times r}$ を生成し，

$$A = Q \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} Q^\top,$$

とする．さらに，$m \times n$ の乱数行列 W を発生させ，$\bar{X} = AW, \bar{Y} = A\bar{X}$ とする．このとき $\bar{X}, \bar{Y}$ はともにランク $r = 2$ の行列となる．そして，各要素に独立に，平均 0，標準偏差 0.1 の 正規分布でノイズを加えたものを X, Y とする．この X, Y をもとに，サンプル数 n を変化させながら TLS 型動的モード分解を計算した結果が表 1 の厳密な低ランク行列に対する結果として記されている．固有値の誤差は，A の真の固有値と計算された固有値の差の二乗和の平方根で計算している．固有ベクトルの誤差も同様で，複素数になることに注意して，固有ベクトルの真値と計算値の内積の絶対値を計算し，これと 1 との差を誤差と定義している．行列の誤差は式 (4) で定義する A_{tls} を用いて $\|A - A_{\text{tls}}\|_{\text{F}}/\|A\|_{\text{F}}$ と定義する．表の結果はこの計算の試行の 100 回の平均であり，サンプル数 n を大きくするほど誤差が減少していくことが確認できる．この問題例では，A を TLS 問題の最小ノルム解で与えているため，理論的な収束性が観察しやすいものとなっている．

2 つ目の問題例では，多くの実験検証を行っている [7] を参考に正弦波を用いた．ここでは基本的な性質を検証するため，実際には [7] におけるものよりも単純な [17, §2.3] の問題例を参考に

$$f(x, t) = \sin(x - t)\exp(t)$$

を対象にした．上式で x が空間座標，t が時刻に対応し，空間方向は $0 \le x \le 2\pi$ を m 分割し，時間方向は $0 \le t \le \pi/2$ を n 分割して離散化されたデータをもつことにする．そして $\delta t = \pi/1000$ として，$\bar{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ が離散点 x_i $(i = 1, \ldots, m)$，t_j $(j = 1, \ldots, n)$ における $f(x_i, t_i)$ $(i = 1, \ldots, m, j = 1, \ldots, n)$ の値からなる行列で，$\bar{Y} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ が $f(x, t + \delta t)$ $(i = 1, \ldots, m, j = 1, \ldots, n)$ の値からなる行列である．ノイズは行列の各要素に独立に標準正規分布で与え X, Y とする．先の問題例と同様に，X, Y に対し，空間次元は $m = 200$ とし，時間方向がサンプル数 n でありこれを変化させながら TLS 型動的モード分解を計算した結果が表 1 の正弦波の離散化に対する結果である．この例からも，サンプル数 n を大きくするほど誤差が減少していくことが確認できる．ただし，この問題例では，真の解となる行列 A を [17, §2.3] における定義で与えたため，離散化の違い（サンプル数 n の違い）により行列 A が変動し，純粋にノイズの影響のみが誤差に現れているとは言い難く，この点は慎重な議論を要する．

6 まとめと今後の課題

本稿では，近年注目されている動的モード分解について，統計的な意味での漸近解析を軸にした場合の研究の歴史的経緯を明確にした．動的モード分解の研究と別途ではあるが，Gleser [8] に誘発されたランク制約付きの TLS 問題に対する計算手法の漸近収束性 [11] が数値線形代数の研究成果として存在し，この結果を基に TLS 型動的モード分解の収束性を示した．加えて，上記の漸近収束性の数値実験による検証を行った．

動的モード分解の本格的な漸近解析を行う上で，統計と数値線形代数がどのように関わってくるのか，本稿でその議論のきっかけを与えることができたであろう．しかしながら，直ちに気づく課題として，TLS 問題の解の行列 A がランク落ちする場合，解は一意ではなく TLS 型動的モード分解の計算手法で得られるのは最小ノルム解に対応する固有値・固有ベクトルであるが，最小ノルム解は動的モード分解において適切かどうか不明である．もう一つの論点として，本稿で示した収束性は行列としての収束性であり，安直に固有値・固有ベクトルの収束性を断定できるであろうか．特に，対角

化不可能な行列の固有値問題の解の数値計算は困難であるが，動的モード分解において同様の困難が生じるかどうか議論の余地がある．以上の疑問点を解決し，TLS 型動的モード分解のよさを数学的に保証するのが，筆者による最新の結果 [1] である．

上の結果により，TLS 型動的モード分解に対する最低限の理論基盤が与えられたことになるが，このことは多くの研究課題を示唆してる．例えば，本稿では合成作用素の性質を基に単純なノイズの確率モデルを与えたが，このモデルの適性も議論の余地がある．また，本稿では TLS 型動的モード分解のみを考察したが，冒頭で述べた通り動的モード分解には様々な変種が存在し，特に，ノイズに強いと考えられている変種に対して本稿で示したような漸近解析を検討する価値はある．これらの変種は，TLS 型動的モード分解と同様に何らかの最適化問題に基づいており，それが最尤法として適切な定式化であれば収束性（一致性）を有することになる．その意味で優れた計算手法を新たに開発することも今後の課題と言える．以上の論点はアーノルディ過程に基づく動的モード分解に対しても当てはまる．数値線形代数の観点から言えば，アーノルディ過程には，歴史的に多項式の零点の数値計算に関する古典的な技術に端を発し，多くの研究の蓄積があるため，研究の切り口や論点は見出しやすい可能性がある．筆者に思いつくだけでも様々な研究の方向性があり，整理して記述することさえ難しいが，他にも論点は多々あると思われ，今後の研究の進展に期待したい．

参考文献

[1] K. Aishima, Strong convergence for the dynamic mode decomposition based on the total least squares to noisy datasets, to appear in JSIAM Letters.

[2] H. Arbabi and I. Mezić, Ergodic theory, dynamic mode decomposition, and computation of spectral properties of the Koopman operator, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 16 (2017), 2096–2126.

[3] T. Askham and J. N. Kutz, Variable projection methods for an optimized dynamic mode decomposition, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 17 (2018), 380–416.

[4] O. Azencot, W. Yin, and A. Bertozzi, Consistent dynamic mode decomposition, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 18 (2019), 1565–1585.

[5] S. L. Brunton, B. W. Brunton, J. L. Proctor, and J. N. Kutz, Koopman invariant subspaces and finite linear representations of nonlinear dynamical systems for control, PLoS ONE, 11(2): e0150171, 2016.

[6] K. K. Chen, J. H. Tu, and C. W. Rowley, Variants of dynamic mode decomposition: boundary condition, Koopman, and Fourier analyses, J. Nonlinear Sci., **22** (2012), 887–915.

[7] S. T. M. Dawson, M. S. Hemati, M. O. Williams, and C. W. Rowley, Characterizing and correcting for the effect of sensor noise in the dynamic mode decomposition, Exp. Fluids, **57** (2016), 1–19.

[8] L. J. Gleser, Estimation in a multivariate “errors in variables” regression model: large sample results, Ann. Statist., **9** (1981), 24–44.

[9] G. H. Golub and C. F. Van Loan, Matrix Computations, 4th ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013.

[10] M. S. Hemati, C. W. Rowley, E. A. Deem, and L. N. Cattafesta, De-biasing the dynamic mode decomposition for applied Koopman spectral analysis of noisy datasets, Theor. Comput. Fluid Dyn., **31** (2017), 349–368.

[11] S. Park and D. P. O'Leary, Implicitly-weighted total least squares, Linear Algebra Appl., **435** (2011), 560–577.

[12] C. W. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, and D. S. Henningson, Spectral analysis of nonlinear flows, J. Fluid Mech., **641** (2009), 115–127.

[13] Y. Saad, Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems, SIAM, Philadelphia, PA, 2011.

[14] P. J. Schmid, Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, J. Fluid Mech., **656** (2010), 5–28.

[15] N. Takeishi, Y. Kawahara, Y. Tabei, and T. Yairi, Bayesian dynamic mode decomposition, In Proc. the 26th IJCAI, 2814–2821, 2017.

[16] J. H. Tu, C. W. Rowley, D. M. Luchtenburg, S. L. Brunton, and J. N. Kutz, On dynamic mode decomposition: Theory and applications, J. Comput. Dyn., **1** (2014), 391–421.

[17] A. Wynn, D. S. Pearson, B. Ganapathisubramani, and P. J. Goulart, Optimal mode decomposition for unsteady flows, J. Fluid Mech., **733** (2013), 473–503.