[2CPM2-02] 緩和時系列を用いたより複雑なダイナミクスの推定

奥野彰文[1,2], 森下侑哉[3], 本武陽一[4]

[1]統計数理研究所, [2]理化学研究所, [3]京都大学, [4]一橋大学

戦略プロジェクトでの雑談から始まった研究.
奥野は時系列を全くやったことが無かったので，勉強がてらとりあえず一本.

- Akifumi Okuno, Yuya Morishita, and Yoh-ichi Mototake. Autoregressive with Slack Time Series Model for Forecasting a Partially-Observed Dynamical Time Series. IEEE Access. 2024.

何をしたのか

- 全ての時点で完全に欠測した要素などを考慮するARSモデルを提案.
- 予測が良くなる可能性を示唆.

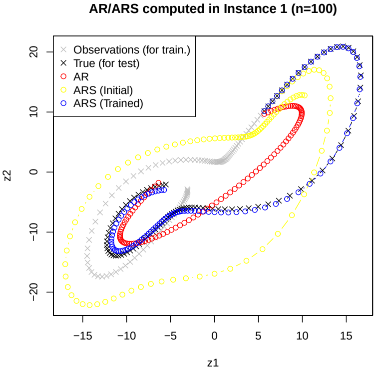
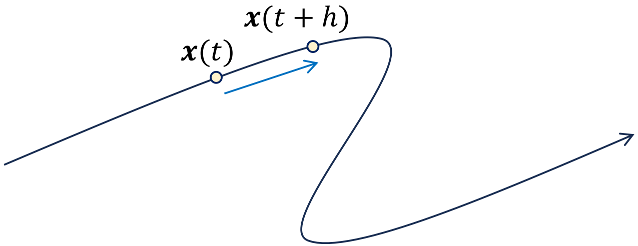


Figure: ローレンツ軌道での例

力学系とは



ある evolution function φ について $\mathbf{x}(t+h) = \varphi(h, \mathbf{x}(t))$ となるとき，$\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ は力学系に従うという．

- 例1) 天体の軌道
- 例2) 核融合プラズマの温度/密度/...

線形時不変性

力学系は以下の微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\varphi(t', \mathbf{x}(t))}{\mathrm{d}t'}\Big|_{t'=0} = \underbrace{f_t(\mathbf{x}(t))}_{\text{time-derivative}},$$

により定まる．f_tが線形時不変 (つまり $f_t(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$) ならば，

$$\mathbf{x}(t+h) = B\mathbf{x}(t) + O(h^2),\ \text{ただし}\ B = B(h) := I + hA.$$

したがって，$\{x(ih)\}_{i=1}^{n}$ が観測されていれば，1階の自己回帰モデル

$$\hat{B} := \arg\min_{B} \sum_{i=1}^{n-1} \|\mathbf{x}((i+1)h) - B\mathbf{x}(ih)\|_2^2.$$

により力学系 $x(t)$ の軌道が予想できる．

着眼点: 力学系に含まれるいくつかの要素は欠測しうる

ここでは $\mathbf{x}(t)$ が線形時不変な力学系に従い，一部の要素のみが観測できているとする:

$$\mathbf{x}(t) = (\underbrace{\mathbf{z}(t)}_{\text{観測}}, \underbrace{\mathbf{z}^{\dagger}(t)}_{\text{欠測}}).$$

欠測はなぜ起こりうるのか?

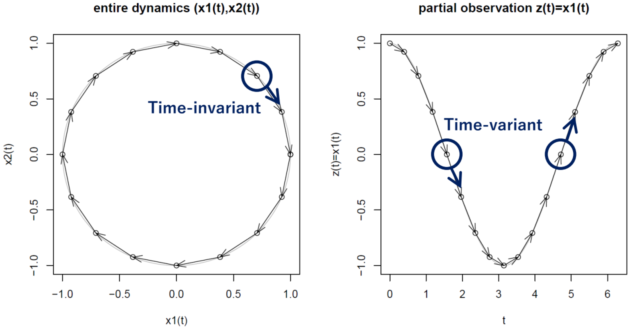
- そもそも物理的に観測が難しかったり，
- 状態変化に関係する要素が全て特定できていなかったり.

欠測があると何が起こるか? $\Rightarrow$ $\mathbf{z}(t)$が複雑な系に従う場合がある.

欠測の一番簡単な例

力学系 $\mathbf{x}(t) = (\cos t, \sin t)$ は円運動とする:

- 全体 $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^2$ は時不変な系なのに
- 一部のみの観測 $z(t) = x_1(t) = \cos t$ は時変な系になってしまう.
  - 一部だけ見て軌道を考える方が難しい.



提案法: 緩和時系列を用いた自己回帰

Autoregressive with slack time-series (ARS) model

$$(\hat{B}, \{\hat{z}_i^\dagger\}_{i=1}^n) := \operatorname*{arg\,min}_{B, \{z_i^\dagger\}_{i=1}^{n-1}} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}^\ddagger((i+1)h) - B\mathbf{x}^\ddagger(ih)\|_2^2, \quad \mathbf{x}^\ddagger(ih) = \begin{pmatrix} \mathbf{z}(ih) \\ \mathbf{z}_i^\dagger \end{pmatrix}.$$

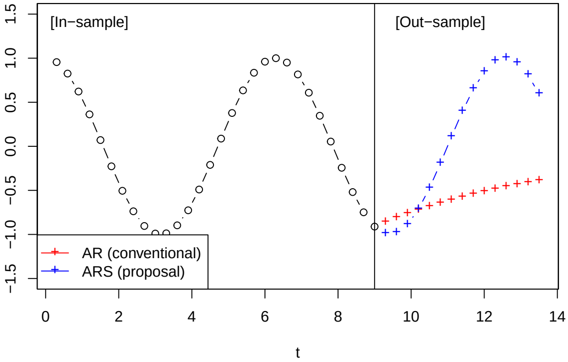
$\{\mathbf{z}_i^\dagger\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}^{s'}$ を特に緩和時系列 *(slack time-series)* と呼ぶ.

- 深層学習などの文脈で，時間遅れ座標の変換で次元を上げる技術など研究されている (Ouala et al. 2020, Ouala et al. 2023, Cheng et al. 2023, ...).
- 愚直にパラメータとして埋めてもいけるのでは? という発想

cf. 状態空間モデル，隠れマルコフモデル，...

ARSを学習してみる

円運動, $h = 0.3$, $n = 30$. 2次元のうち1次元のみ観測できているとする $(z(t) = x_1(t))$.
緩和時系列 $\mathbf{z}^\dagger$ は標準正規分布で初期化して R の $optim$ 関数で愚直に最適化する.



- 完全に軌道が予想できている.

ARSは欠測を復元できるか?

Okuno et al. (2024) Proposition 1, Informal.

$x(t)$は$d = 2$次元の線形時不変な力学系に従うとし，$s = 1$次元のみ観測できるとする．観測のノイズがないとすると，ARSによる予測は元の軌道を復元する．

- 緩和時系列 $z_j^{*\dagger}$ は，自明な自由度を除いて欠測 $z^\dagger(jh)$ と一致する．
- 例えば円運動の場合，欠測している変数は $z^\dagger(jh) = \sin(jh)$ だが，緩和時系列は $z_j^{*\dagger} = \alpha \sin(jh)$, $\alpha \neq 0$ であり定数倍の自由度は残る．が予測は一意に定まる．

さらに拡張: 交互作用

ここで，交互作用を生成する関数を考える:

$$\mathcal{F} : \mathbb{R}^d \ni \mathbf{x} \mapsto (x_1, x_2, \ldots, x_d, x_1 x_2, x_1 x_3, \ldots, x_{d-1} x_d) \in \mathbb{R}^{d(d+1)/2}.$$

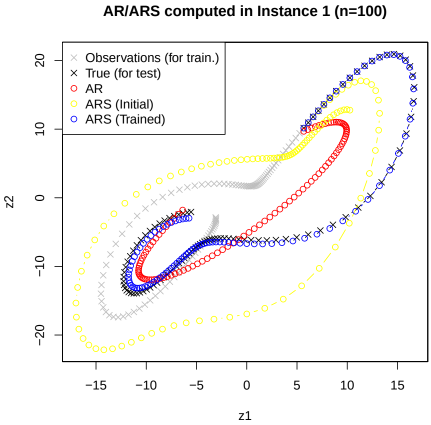
このときARSモデルは交互作用を用いて拡張できる:

$$\hat{\mathbf{x}}^\sharp((i+1)h) = \hat{E}\mathcal{F}(\mathbf{x}^\ddagger(ih)), \quad \hat{E} \in \mathbb{R}^{d \times d(d+1)/2}.$$

- Weierstrassの定理により，ARSと十分高次な$\mathcal{F}$を用いれば任意の連続かつ時不変な力学系を近似できる.

ローレンツ軌道の予測

- ローレンツ軌道(3次元)のうち2次元のみが観測できているとする.
- 緩和時系列 $\mathbf{z}^{\dagger}$ の初期値は真値に正規ノイズを足したものとする.



たくさんの疑問が残っている

(1) $d = 2$次元の線形時不変な軌道はARSで復元できることがわかったが，
$d \geq 3$次元で復元できるか?

(2) $d \geq 3$次元でs次元が観測されているとして，
欠測する$s' = d - s$次元はデータから特定できるか?

(3) s次元の任意の軌道について，$d = s + s'$次元の線形時不変な系が存在するか?

(4) ノイズが入ったらどれくらいの影響を受けるのか?

(5) 実際のデータでどれくらい使えるのか?

まとめ

- Akifumi Okuno, Yuya Morishita, and Yoh-ichi Mototake. Autoregressive with Slack Time Series Model for Forecasting a Partially-Observed Dynamical Time Series. IEEE Access. 2024.
(緩和時系列を用いたより複雑なダイナミクスの推定)

質問やコメントは okuno@ism.ac.jp まで.