АНАЛИЗ ДАННЫХ В НАУКЕ И ТЕХНИКЕ

Машинное обучение, динамические системы и управление

Стивен Л. Брантон · Дж. Натан Куц

ДМК Пресс
издательство

Стивен Л. Брантон, Дж. Натан Куц

Анализ данных
в науке и технике

Data-Driven Science and Engineering

Machine Learning, Dynamical Systems, and Control

Steven L. Brunton, J. Nathan Kutz

CAMBRIDGE
UNIVERSITY PRESS

Анализ данных в науке и технике

Машинное обучение, динамические системы и управление

Стивен Л. Брантон, Дж. Натан Куц

Москва, 2021

УДК 001.5, 004.6
ББК 20, 32.97
Б87

Брантон С. Л., Куц Дж. Н.
Б87 Анализ данных в науке и технике / пер. с англ. А. А. Слинкина. – М.: ДМК Пресс, 2021. – 542 с.: ил.

ISBN 978-5-97060-910-1

Открытия, сделанные на основе анализа данных, совершили революцию в моделировании, прогнозировании поведения и управлении сложными системами. В этой книге приводятся сведения из машинного обучения, инженерной математики и математической физики с целью показать, как моделирование и управление динамическими системами сочетаются с современными методами науки о данных. Рассказывается о многих достижениях в области научных расчетов, которые позволяют применять управляемые данными методы к изучению разнообразных сложных систем, таких как турбулентность, науки о мозге, климатология, эпидемиология, финансы, робототехника и автономные системы.

Книга рассчитана на интересующихся студентов старших курсов и аспирантов первого года обучения инженерных и физических специальностей, в ней рассматривается широкий круг тем и методов на уровне от введения до недавних работ.

УДК 001.5, 004.6
ББК 20, 32.97

ISBN 978-1-108-42209-3 (англ.)
ISBN 978-5-97060-910-1 (рус.)

Содержание

От издательства

Отзывы и пожелания

Мы всегда рады отзывам наших читателей. Расскажите нам, что вы думаете об этой книге – что понравилось или, может быть, не понравилось. Отзывы важны для нас, чтобы выпускать книги, которые будут для вас максимально полезны.

Вы можете написать отзыв на нашем сайте www.dmkpress.com, зайдя на страницу книги и оставив комментарий в разделе «Отзывы и рецензии». Также можно послать письмо главному редактору по адресу dmkpress@gmail.com; при этом укажите название книги в теме письма.

Если вы являетесь экспертом в какой-либо области и заинтересованы в написании новой книги, заполните форму на нашем сайте по адресу http://dmkpress.com/authors/publish_book/ или напишите в издательство по адресу dmkpress@gmail.com.

Скачивание исходного кода примеров

Скачать файлы с дополнительной информацией для книг издательства «ДМК Пресс» можно на сайте www.dmkpress.com на странице с описанием соответствующей книги.

Список опечаток

Хотя мы приняли все возможные меры для того, чтобы обеспечить высокое качество наших текстов, ошибки все равно случаются. Если вы найдете ошибку в одной из наших книг, мы будем очень благодарны, если вы сообщите о ней главному редактору по адресу dmkpress@gmail.com. Сделав это, вы избавите других читателей от недопонимания и поможете нам улучшить последующие издания этой книги.

Нарушение авторских прав

Пиратство в интернете по-прежнему остается насущной проблемой. Издательства «ДМК Пресс» и Springer очень серьезно относятся к вопросам защиты авторских прав и лицензирования. Если вы столкнетесь в интернете с незаконной публикацией какой-либо из наших книг, пожалуйста, пришлите нам ссылку на интернет-ресурс, чтобы мы могли применить санкции.

Ссылку на подозрительные материалы можно прислать по адресу электронной почты dmkpress@gmail.com.

Мы высоко ценим любую помощь по защите наших авторов, благодаря которой мы можем предоставлять вам качественные материалы.

Об авторах

Стивен Л. Брантон – доцент факультета общего машиностроения в Вашингтонском университете. Также является внештатным сотрудником отделения прикладной математики и науки о данных Института eScience. Область его научных интересов охватывает применение науки о данных и машинного обучения к динамическим системам и управлению в области гидрогазодинамики, биомеханики, оптики, энергетических систем и производства. Является автором двух учебников, лауреатом премии армии и ВВС для молодых ученых, получил право преподавания в инженерном колледже Вашингтонского университета и удостоен премии для молодых преподавателей.

Дж. Натан Куц – профессор прикладной математики Вашингтонского университета, был деканом факультета до 2015 года. Также является внештатным профессором отделения электротехники и физики и старшим научным сотрудником отделения науки о данных в Институте eScience. Область научных интересов охватывает сложные системы и анализ данных, конкретно применение методов машинного обучения и динамических систем и управление в разнообразных приложениях. Автор двух учебников, лауреат премии Боинг за отличное преподавание прикладной математики, а также премии CAREER Национального научного фонда США.

Предисловие

Эта книга посвящена растущей области знаний на пересечении методов обработки больших данных, прикладной оптимизации и классических дисциплин инженерной математики и математической физики. Мы готовили данный материал на протяжении ряда лет, в основном для лекций, читаемых студентам старших курсов и аспирантам технических и физических факультетов.

Обычно такие студенты имеют подготовку в области линейной алгебры, дифференциальных уравнений и научных расчетов, а инженеры также знакомы с теорией управления и (или) дифференциальными уравнениями в частных производных. Однако в большинстве учебных программ научно-технических вузов методы обработки данных и (или) оптимизации освещаются слабо или не включены вовсе. С другой стороны, студенты, обучающиеся по специальностям «информатика» и «статистика», плохо знакомы с динамическими системами и теорией управления. Нашей целью было написать введение в прикладную науку о данных для обеих групп. Включенные в книгу методы отбирались по трем критериям: (1) релевантность, (2) простота и (3) общность. Мы стремились представить широкий круг тем от вводного материала до методов, реально применяемых в исследованиях.

Открытие на основе анализа данных революционизировало наши подходы к моделированию, прогнозированию поведения и управлению сложными системами. Самые насущные научно-технические задачи нашего времени не поддаются эмпирическим моделям и выводам, основанным на первопринципах. Все чаще исследователи обращаются к подходам на основе анализа данных при изучении широкого спектра сложных систем, как то: турбулентность, науки о мозге, климатология, эпидемиология, финансы, робототехника, автономные системы. Такие системы обычно являются нелинейными, динамическими, многомасштабными в пространстве и во времени, многомерными и имеют доминирующие паттерны, которые необходимо охарактеризовать и смоделировать, чтобы в конечном итоге обеспечить сбор данных, прогнозирование, оценку и управление. Благодаря современным математическим методам вкупе с невиданной ранее доступностью данных и располагаемыми вычислительными ресурсами мы теперь можем подступиться к неприступным до недавнего времени проблемам. Упомянем лишь малую толику новых методов: надежное восстановление изображения по разреженным и зашумленным измерениям случайных пикселей, управление турбулентностью с помощью машинного обучения, оптимальное размещение датчиков и приводов, идентификация допускающих интерпретацию нелинейных динамических систем на основе одних лишь данных и модели пониженного порядка, позволяющие ускорить изучение и оптимизацию систем со сложной многомасштабной физикой.

Движущим началом современной науки о данных является доступность больших и постоянно увеличивающихся объемов данных вследствие замечательных инноваций в области разработки дешевых датчиков, возросших на порядки вычислительных мощностей и практически неограниченной емкости устройств хранения и скорости передачи. Такое изобилие данных открывает перед учеными и инженерами во всех областях новые возможности для изобретений на основе анализа данных; часто в этой связи говорят о четвертой парадигме научного открытия [245]. Эта четвертая парадигма представляет собой естественную кульминацию первых трех: эмпирического эксперимента, аналитического вывода и вычислительного исследования. Интеграция всех трех методик создает новаторскую платформу для новых открытий на основе данных. Этот процесс научного открытия не нов и по сути дела повторяет усилия титанов научной революции: Иоганна Кеплера (1571–1630) и сэра Исаака Ньютона (1642–1727). Оба сыграли ключевую роль в разработке теоретических принципов небесной механики на базе сочетания эмпирических подходов, основанных на анализе данных, и аналитических вычислений. Наука о данных не заменяет математическую физику и технику, но дополняет ее с учетом достижений XXI века, что больше напоминает возрождение, нежели революцию.

Наука о данных сама по себе не нова, ее предложил больше 50 лет назад Джон Тьюки, предвидевший появление науки, в центре внимания которой будет обучение на данных, или *анализ данных* [152]. С тех пор в науке о данных преобладают два разных подхода [78]. Сообщество *машинного обучения* состоит в основном из специалистов по информатике и интересуется в первую очередь разработкой быстрых, масштабируемых и качественных алгоритмов прогнозирования. Сообщество же *статистического обучения*, которое вовсе необязательно во всем противопоставлять первому, больше сосредоточено на факультетах математической статистики и занимается выводом интерпретируемых моделей. Обе методологии могут похвастаться значительными успехами и закладывают математические и вычислительные основания методов науки о данных. Целью ученых и инженеров должно стать использование этих методов для выведения из результатов наблюдений и обсчета моделей (чаще нелинейных), которые правильно улавливают динамику системы *и* количественно и качественно обобщаются на ненаблюдавшиеся области фазового, параметрического или прикладного пространства. А в этой книге нашей целью будет применение статистических методов и методов машинного обучения к решению технических задач.

Рассматриваемые вопросы

В книге обсуждается целый ряд ключевых тем. Во-первых, во многих сложных системах присутствуют доминирующие *низкоразмерные паттерны* данных, несмотря на быстрое увеличение разрешающей способности измерений и вычислений. Базовая структура открывает возможность эффективного размещения датчиков и компактного представления для моделирования и управления. Выделение паттернов тесно связано со второй темой: отысканием *преобразований координат*, позволяющих упростить систему.

Действительно, богатая история математической физики вращается вокруг преобразований координат (например, спектральные разложения, преобразование Фурье, обобщенные функции и т. д.), хотя эти методы в большинстве своем были ограничены простой идеализированной геометрией и линейной динамикой. Умение выводить преобразования *на основе данных* открывает возможность обобщить их на новые задачи с более сложной геометрией и граничными условиями. На протяжении всей книги мы будем интересоваться *динамическими системами и управлением*, т. е. применением методов, основанных на анализе данных, к моделированию и управлению систем, изменяющихся во времени. Красной нитью проходит тема *управляемой данными прикладной оптимизации*, поскольку едва ли не каждый рассматриваемый вопрос так или иначе связан с оптимизацией (например, нахождение *оптимальных* низкоразмерных паттернов, *оптимальное* расположение датчиков, *оптимизация* в машинном обучении, *оптимальное* управление и т. д.). И еще одна, даже более фундаментальная тема – большинство данных организовано в массивы для анализа, а широкое развитие численных инструментов линейной алгебры, начиная с 1960-х годов, лежит в основе математических методов матричных разложений и стратегий решения, встречающихся в этой книге.

Благодарности

Мы в долгу перед многими талантливыми студентами, сотрудниками и коллегами, которые делились ценными замечаниями и предложениями и оказывали нам поддержку. Особенно мы благодарны Джошуа Проктору (Joshua Proctor), который стоял у истоков этой книги и помогал при планировании ее структуры и организации. Мы также извлекли много полезного из бесед с Бингом Брантоном (Bing Brunton), Игорем Мезичем (Igor Mezić), Берндом Ноаком (Bernd Noack) и Сэмом Тайрой (Sam Taira). Эта книга была бы невозможна без помощи наших сотрудников и коллег, исследования которых отражены в тексте.

На протяжении работы над книгой и чтения соответствующих курсов мы получали чрезвычайно ценные отзывы и комментарии от наших замечательных студентов и постдоков: Трэвиса Эшкама (Travis Askham), Майкла Ау-Юнга (Michael Au-Yeung), Цзе Бая (Zhe Bai), Идо Брайта (Ido Bright), Кэтлин Чемпион (Kathleen Champion), Эмили Кларк (Emily Clark), Чарльза Делаханта (Charles Delahunt), Даниэля Дылевски (Daniel Dylewski), Бена Эричсона (Ben Erichson), Чарли Фислера (Charlie Fiesler), Синь Фу (Xing Fu), Чена Гонга (Chen Gong), Тарена Гормана (Taren Gorman), Джейкоба Гросека (Jacob Grosek), Сета Хирша (Seth Hirsh), Микала Джонсона (Mikala Johnson), Юрики Кайзер (Eurika Kaiser), Мейсона Кема (Mason Kamb), Джеймса Кьюнерта (James Kunert), Бетани Луш (Bethany Lusch), Педро Майа (Pedro Maia), Критики Манохара (Krithika Manohar), Найла Мэнгана (Niall Mangan), Арианы Мендибль (Ariana Mendible), Томаса Морена (Thomas Mohren), Меган Моррисон (Megan Morrison), Маркуса Куэйда (Markus Quade), Сэма Руди (Sam Rudy), Сюзанны Саргсян

(Susanna Sargsyan), Изабель Шерл (Isabel Scherl), Эли Шлизермана (Eli Shlizerman), Джорджа Степанянца (George Stepaniants), Бена Строма (Ben Strom), Чань Суна (Chang Sun), Роя Тэйлора (Roy Taylor), Мегханы Велагар (Meghana Velagar), Джейка Вехолта (Jake Weholt) и Мэтта Уильямса (Matt Williams). Наши студенты подвигли нас на написание этой книги, благодаря им мы каждый день приходим на работу с радостью и волнением.

Мы также благодарны руководителю издательской группы в Cambridge University Press Лоран Коулз (Lauren Cowles), на которую могли положиться на протяжении всего процесса работы.

Онлайновые материалы

Мы с самого начала предполагали, что к книге будут прилагаться обширные дополнительные материалы: код, данные, видео, домашние задания и рекомендуемые способы построения курса. Все эти материалы можно найти на сайте databookuw.com.

Код в сети полнее, чем в книге, в частности включен код генерации рисунков, пригодных для публикации. Визуализация данных была поставлена на первое место среди методов науки о данных в опросе «Состояние науки о данных и машинного обучения», проведенном на Kaggle 2017. Поэтому мы настоятельно рекомендуем читателям скачать код с сайта и в полной мере воспользоваться командами построения графиков и диаграмм.

Мы также записали и разместили на YouTube лекции по большинству тем, включенных в книгу. Есть дополнительные видео для студентов, желающих восполнить пробелы в подготовке по научным расчетам и основам прикладной математики. Этот текст задуман одновременно как справочное пособие и источник материалов к нескольким курсам, рассчитанным на студентов разного уровня. Большинство глав самостоятельны, на их основе можно разработать *курсы молодого бойца*, рассчитанные примерно на 10 часов каждый.

Как пользоваться этой книгой

Книга рассчитана на начинающих аспирантов и продвинутых студентов старших курсов научных и технических факультетов. Поэтому методы машинного обучения излагаются с азов, но при этом мы предполагаем, что студенты умеют моделировать физические системы с помощью дифференциальных уравнений и решать их с помощью таких программ, как **ode45**. Рассматриваются как начальные вопросы, так и актуальные исследовательские методы. Наша цель – представить цельный взгляд и математический инструментарий для решения научно-технических задач. Но книга может быть также полезна студентам, изучающим информатику и статистику, которые зачастую мало знают о динамических системах и теории управления. На основе представленного материала можно разработать несколько курсов, программы некоторых из них имеются на сайте книги и включают домашние задания, наборы данных и код.

Прежде всего мы хотели, чтобы книга была интересной, чтобы она вдохновляла, открывала глаза и вооружала знаниями молодых ученых и инженеров. Мы пытались по возможности не слишком усложнять, не жертвуя при этом глубиной и широтой охвата, без которых не может быть никакой исследовательской работы. Многие главы можно было бы развернуть в целые книги, и такие книги есть. Однако мы также стремились к полноте в той мере, в какой этого можно ожидать от книги, посвященной столь обширной и быстро развивающей области. Мы надеемся, что книга придется вам по вкусу, что вы овладеете всеми описанными в ней методами и измените мир с помощью прикладной науки о данных!

Общеупотребительные методы оптимизации, уравнения, символы и акронимы

Наиболее распространенные стратегии оптимизации

Метод наименьших квадратов (обсуждается в главах 1 и 4) минимизирует сумму квадратов разностей (ошибок) между фактическими данными и предсказаниями модели. В случае линейного метода наименьших квадратов, когда данные аппроксимируются линейной функцией, имеется решение в замкнутой форме, которое можно найти, приравняв к нулю производную ошибки по каждому неизвестному. Этот подход широко используется в технике и прикладных науках для аппроксимации полиномиальными функциями. Применение нелинейного метода наименьших квадратов обычно требует итеративного уточнения путем аппроксимации нелинейного решения линейным на каждой итерации.

Градиентный спуск (обсуждается в главах 4 и 6) – основной метод выпуклой оптимизации в многомерных системах. Для минимизации ошибки вычисляется градиент аппроксимирующей функции. Решение обновляется итеративно путем *спуска с горы* в пространстве решений. Одномерным вариантом градиентного спуска является метод Ньютона–Рафсона. В многомерном пространстве метод часто находит только локальный минимум. Важнейшими инновациями в приложениях больших данных являются стохастический градиентный спуск и алгоритм обратного распространения, благодаря чему оптимизация сводится к самому вычислению градиента.

Чередующийся градиентный спуск (Alternating Descent Method – ADM) (обсуждается в главе 4) позволяет избежать вычисления градиента за счет того, что на каждом шаге производится оптимизация по одной неизвестной. Таким образом, все неизвестные переменные считаются постоянными, за исключением одной, по которой производится линейный поиск (невыпуклая оптимизация). Эта переменная обновляется, после чего фиксируется, и то же самое повторяется для другой переменной. На одном шаге итерации перебираются все неизвестные, а сами итерации продолжаются до тех пор, пока не будет достигнута желаемая точность.

Расширенный метод Лагранжа (Augmented Lagrange Method – ALM) (обсуждается в главах 3 и 8) – класс алгоритмов для решения задач условной оптимизации. Они похожи на методы штрафования тем, что заменяют задачу оптимизации с ограничениями последовательностью задач без ограничений и прибавляют к целевой функции штрафной член, который играет роль множителя Лагранжа. Расширенный метод Лагранжа – не то же самое, что метод множителей Лагранжа.

Линейное программирование и симплекс-метод – безотказные алгоритмы выпуклой оптимизации. В линейном программировании целевая функция линейно зависит от неизвестных, а ограничениями являются линейные равенства и неравенства. Вычислив область допустимых решений – выпуклый политоп, – алгоритм линейного программирования находит в полиэдре точку, в которой функция принимает наименьшее (или наибольшее) значение, если таковая существует. Симплекс-метод – это конкретная итеративная процедура линейного программирования, которая по заданному опорному допустимому решению пытается найти другое опорное решение, для которого целевая функция принимает меньшее значение, и тем самым производит оптимизацию.

Наиболее употребительные уравнения и символы

Линейная алгебра

Линейная система уравнений

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \tag{0.1}$$

Матрица $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p\times n}$ и вектор $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{p}$ обычно известны, а вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n}$ неизвестен.

Уравнение для собственных значений

$$\mathbf{AT} = \mathbf{T\Lambda}. \tag{0.2}$$

Столбец $\boldsymbol{\xi}_k$ матрицы $\mathbf{T}$ является собственным вектором матрицы $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, соответствующим собственному значению λ_k: $\mathbf{A}\boldsymbol{\xi}_k = \lambda_k\boldsymbol{\xi}_k$. Матрица $\mathbf{\Lambda}$ – диагональная матрица, содержащая эти собственные значения, в простейшем случае все n собственных значений различны.

Замена координат

$$\mathbf{x} = \mathbf{\Psi a}. \tag{0.3}$$

Вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n}$ можно записать как $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{n}$ в системе координат, определенной столбцами матрицы $\mathbf{\Psi} \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Уравнение измерений

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x}. \tag{0.4}$$

Вектор $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ является измерением состояния $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ в результате применения матрицы измерений $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{p\times n}$.

Сингулярное разложение

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^* \approx \tilde{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{\Sigma}}\tilde{\mathbf{V}}^*. \tag{0.5}$$

Матрицу $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{n\times m}$ можно разложить в произведение трех матриц $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{C}^{n\times m}$ и $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{m\times m}$. Матрицы $\mathbf{U}$ и $\mathbf{V}$ *унитарные*, т. е. $\mathbf{U}\mathbf{U}^* = \mathbf{U}^*\mathbf{U} = \mathbf{I}^{n\times n}$ и $\mathbf{V}\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^*\mathbf{V} = \mathbf{I}^{m\times m}$, где * обозначает операцию комплексного сопряжения и транспонирования. Столбцы $\mathbf{U}$ (соответственно $\mathbf{V}$) ортогональны и называются левыми (соответственно правыми) *сингулярными векторами*. На главной диагонали диагональной матрицы $\mathbf{\Sigma}$ находятся убывающие неотрицательные элементы, называемые *сингулярными значениями*.

Часто $\mathbf{X}$ аппроксимируется матрицей низкого ранга $\tilde{\mathbf{X}} = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{\Sigma}}\tilde{\mathbf{V}}^*$, где $\tilde{\mathbf{U}}$ и $\tilde{\mathbf{V}}$ содержат первые $r \ll n$ столбцов $\mathbf{U}$ и $\mathbf{V}$ соответственно, а $\tilde{\mathbf{\Sigma}}$ – левый верхний блок $\mathbf{\Sigma}$ размера $r\times r$. В контексте пространственных мод, моделей пониженного порядка и размещения датчиков матрица $\tilde{\mathbf{U}}$ часто обозначается буквой $\mathbf{\Psi}$.

Регрессия и оптимизация

Оптимизация переопределенных и недоопределенных линейных систем

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}}(\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 + \lambda g(\mathbf{x})) \text{ или} \tag{0.6a}$$

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}) \text{ при условии } \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \le \varepsilon. \tag{0.6b}$$

Здесь $g(\mathbf{x})$ – штраф регрессии (со штрафным параметром λ для переопределенных систем). Для переопределенных и недоопределенных систем линейных уравнений $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, когда решений либо не существует, либо бесконечно много, для нахождения решения нужно задать ограничение или штраф; эта процедура называется *регуляризацией*.

Оптимизация переопределенных и недоопределенных линейных систем

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}}(f(\mathbf{A}, \mathbf{x}, \mathbf{b}) + \lambda g(\mathbf{x})) \text{ или} \tag{0.7a}$$

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}) \text{ при условии } f(\mathbf{A}, \mathbf{x}, \mathbf{b}) \le \varepsilon. \tag{0.7b}$$

Это обобщение линейной системы на нелинейную систему $f(\cdot)$ с регуляризацией $g(\cdot)$. Такие переопределенные и недоопределенные системы часто решаются методами градиентного спуска.

Композиционная оптимизация для нейронных сетей

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{A}_j}(f_M(\mathbf{A}_M, \cdots f_2(\mathbf{A}_2, (f_1(\mathbf{A}_1, \mathbf{x})) \cdots) + \lambda g(\mathbf{A}_j)). \tag{0.8}$$

Здесь $\mathbf{A}_k$ – матрицы весов связей между k-м и $(k + 1)$-м слоями нейронной сети. Обычно это сильно недоопределенная система, которая регуляризируется прибавлением $g(\mathbf{A}_j)$. Композиция и регуляризация весьма важны как для порождения выразительных представлений данных, так и для предотвращения переобучения.

Динамические системы и системы пониженного порядка

Нелинейное обыкновенное дифференциальное уравнение (динамическая система)

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(\mathrm{t}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), t; \boldsymbol{\beta}). \tag{0.9}$$

Вектор $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ описывает состояние системы, изменяющейся во времени t, $\boldsymbol{\beta}$ – вектор параметров, а $\mathbf{f}$ – векторное поле. В общем случае $\mathbf{f}$ – липшицева функция, что гарантирует существование и единственность решения.

Система с линейной зависимостью выхода от входа

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{u} \tag{0.10a}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{D}\mathbf{u}. \tag{0.10b}$$

Состояние системы представлено вектором $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, входы (приводы) – вектором $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^q$, а выходы (датчики) – вектором $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$. Матрицы $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, $\mathbf{D}$ определяют динамику, управляющее воздействие, стратегию работы датчиков и эффект сквозного управления соответственно.

Нелинейное отображение (динамические системы с дискретным временем)

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k). \tag{0.11}$$

Состояние системы на k-й итерации представлено вектором $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, а $\mathbf{F}$ – потенциально нелинейное отображение. Часто это отображение описывает продвижение итераций во времени, т. е. $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}(k\Delta t)$; в таком случае потоковое отображение обозначается $\mathbf{F}_{\Delta t}$.

Операторное уравнение Купмана (с дискретным временем)

$$\mathcal{K}_t g = g \circ \mathbf{F}_t \Rightarrow \mathcal{K}_t\varphi = \lambda\varphi. \tag{0.12}$$

Линейный оператор Купмана $\mathcal{K}_t$ экстраполирует функции измерения состояния $g(\mathbf{x})$ с помощью потока $\mathbf{F}_t$. Собственные значения и собственные векторы $\mathcal{K}_t$ обозначаются λ и $\varphi(\mathbf{x})$ соответственно. Оператор $\mathcal{K}_t$ применяется к гильбертову пространству измерений.

Нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных (УрЧП)

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{N}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_{xx}, \cdots, x, t; \boldsymbol{\beta}). \tag{0.13}$$

Состояние УрЧП описывается вектором $\mathbf{u}$, $\mathbf{N}$ – нелинейный оператор эволюции, нижние индексы обозначают взятие частных производных, а x и t –

пространственная и временная переменные соответственно. УрЧП параметризуется значениями, собранными в векторе $\boldsymbol{\beta}$. Состояние УрЧП $\mathbf{u}$ может быть непрерывной функцией $u(x, t)$, а может быть дискретизировано в нескольких точках пространства, $\mathbf{u}(t) = [u(x_1, t)\ u(x_2, t) \cdots u(x_n, t)]^T \in \mathbb{R}^n$.

Разложение Галеркина

Непрерывное разложение Галеркина имеет вид:

$$u(x,t) \approx \sum_{k=1}^{r} a_k(t)\psi_k(x). \tag{0.14}$$

Функции $a_k(t)$ – коэффициенты, отражающие временную динамику, а $\psi_k(x)$ – пространственные моды. Для многомерного дискретизированного состояния разложение Галеркина принимает вид $\mathbf{u}(t) \approx \sum_{k=1}^{r} a_k(t)\boldsymbol{\psi}_k$. Пространственные моды $\boldsymbol{\psi}_k \in \mathbb{R}^n$ могут быть столбцами матрицы $\boldsymbol{\Psi} = \tilde{\mathbf{U}}$.

Список обозначений

Размерности

K количество ненулевых элементов K-разреженного вектора $\mathbf{s}$
m количество снимков данных (т. е. столбцов $\mathbf{X}$)
n размерность состояния $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
p размерность измерения, или выходной переменной $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$
q размерность выходной переменной $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^q$
r ранг усеченного сингулярного разложения или иной низкоранговой аппроксимации

Скаляры

s частота в лапласовой области
t время
δ скорость обучения в методе градиентного спуска
Δt временной шаг
x пространственная переменная
Δx пространственный шаг
σ сингулярное значение
λ собственное значение
λ параметр разреженности при разреженной оптимизации (раздел 7.3)
λ множитель Лагранжа (разделы 3.7, 8.4 и 11.4)
τ порог

Векторы

$\mathbf{a}$ вектор амплитуд мод $\mathbf{x}$ в базисе $\boldsymbol{\Psi}$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^r$
$\mathbf{b}$ вектор измерений в линейной системе $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
$\mathbf{b}$ вектор амплитуд мод в разложении по динамическим модам (раздел 7.2)
$\mathbf{Q}$ вектор, содержащий функцию потенциала в алгоритме PDE-FIND

$\mathbf{r}$ вектор невязок
$\mathbf{s}$ разреженный вектор $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$
$\mathbf{u}$ регулируемая переменная (главы 8, 9, 10)
$\mathbf{u}$ вектор состояния УрЧП (главы 11 и 12)
$\mathbf{w}$ экзогенные входы
$\mathbf{w}_d$ возмущения системы
$\mathbf{w}_n$ шум измерений
$\mathbf{w}_r$ опорная траектория
$\mathbf{x}$ состояние системы $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
$\mathbf{x}_k$ снимок данных в момент t_k
$\mathbf{x}_j$ пример данных $j \in Z := \{1, 2, \cdots, m\}$ (главы 5 и 6)
$\tilde{\mathbf{x}}$ упрощенное состояние $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^r$, т. е. $\mathbf{x} \approx \tilde{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}$
$\hat{\mathbf{x}}$ оценка состояния системы
$\mathbf{y}$ вектор измерений $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$
$\mathbf{y}_j$ метка данных $j \in Z := \{1, 2, \cdots, m\}$ (главы 5 и 6)
$\hat{\mathbf{y}}$ оценка измерения выхода
$\mathbf{z}$ преобразованное состояние $\mathbf{x} = \mathbf{Tz}$ (главы 8 и 9)
$\boldsymbol{\varepsilon}$ вектор ошибок
$\boldsymbol{\beta}$ бифуркационные параметры
$\boldsymbol{\xi}$ собственный вектор оператора Купмана (разделы 7.4 и 7.5)
$\boldsymbol{\xi}$ разреженный вектор коэффициентов (раздел 7.3)
$\boldsymbol{\varphi}$ мода в разложении по динамическим модам
$\boldsymbol{\psi}$ мода собственного ортогонального разложения (POD)
$\boldsymbol{\Upsilon}$ вектор измерений УрЧП в алгоритме PDE-FIND

Матрицы

$\mathbf{A}$ матрица системы уравнений, или динамики
$\tilde{\mathbf{A}}$ редуцированная динамика в r-мерном подпространстве POD
$\mathbf{A}_{\mathbf{X}}$ матричное представление линейной динамики с состоянием $\mathbf{x}$
$\mathbf{A}_{\mathbf{Y}}$ матричное представление линейной динамики с наблюдаемыми переменными $\mathbf{y}$
$(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{B})$ матрицы системы с непрерывным пространством состояний
$(\mathbf{A}_d, \mathbf{B}_d, \mathbf{C}_d, \mathbf{B}_d)$ матрицы системы с дискретным пространством состояний
$(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}, \hat{\mathbf{B}})$ матрицы пространства состояний системы в новых координатах $\mathbf{z} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{x}$
$(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{B}}, \tilde{\mathbf{C}}, \tilde{\mathbf{B}})$ матрицы пространства состояний упрощенной системы ранга r
$\mathbf{B}$ матрица входных данных с приводов
$\mathbf{C}$ матрица линейных измерений состояний
$\mathcal{C}$ матрица управляемости
$\mathcal{F}$ дискретное преобразование Фурье
$\mathbf{G}$ матричное представление линейной динамики состояний и входов $[\mathbf{x}^T\mathbf{u}^T]^T$
$\mathbf{H}$ матрица Ганкеля
$\mathbf{H}'$ матрица Ганкеля с временным сдвигом
$\mathbf{I}$ единичная матрица
$\mathbf{K}$ матричная форма оператора Купмана (глава 7)
$\mathbf{K}$ коэффициент усиления системы управления с замкнутым контуром (глава 8)

$\mathbf{K}_f$ коэффициент усиления фильтра Калмана
$\mathbf{K}_r$ коэффициент усиления линейно-квадратичного регулятора (ЛКР)
$\mathbf{L}$ низкоранговая часть матрицы $\mathbf{X}$ (глава 3)
$\boldsymbol{\mathcal{O}}$ матрица наблюдаемости
$\mathbf{P}$ унитарная матрица, применяемая к столбцам $\mathbf{X}$
$\mathbf{Q}$ весовая матрица стоимости отклонений от нулевого состояния в ЛКР (раздел 8.4)
$\mathbf{Q}$ ортогональная матрица в QR-разложении
$\mathbf{R}$ весовая матрица стоимости управляющих воздействий в ЛКР (раздел 8.4)
$\mathbf{R}$ верхнетреугольная матрица в QR-разложении
$\mathbf{S}$ разреженная часть матрицы $\mathbf{X}$ (глава 3)
$\mathbf{T}$ матрица собственных векторов (глава 8)
$\mathbf{T}$ замена координат (главы 8 и 9)
$\mathbf{U}$ левые сингулярные векторы $\mathbf{X}$, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
$\hat{\mathbf{U}}$ левые сингулярные векторы экономичного сингулярного разложения $\mathbf{X}$, $\hat{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
$\tilde{\mathbf{U}}$ левые сингулярные векторы (POD-моды) усеченного сингулярного разложения $\mathbf{X}$, $\tilde{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{n\times r}$
$\mathbf{V}$ правые сингулярные векторы $\mathbf{X}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{m\times m}$
$\tilde{\mathbf{V}}$ правые сингулярные векторы (POD-моды) усеченного сингулярного разложения $\mathbf{X}$, $\tilde{\mathbf{V}} \in \mathbb{R}^{m\times r}$
$\boldsymbol{\Sigma}$ матрица сингулярных значений $\mathbf{X}$, $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{n\times m}$
$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ матрица сингулярных значений экономичного сингулярного разложения $\mathbf{X}$, $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} \in \mathbb{R}^{m\times m}$
$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ матрица сингулярных значений усеченного сингулярного разложения $\mathbf{X}$, $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} \in \mathbb{R}^{r\times r}$
$\mathbf{W}$ собственные векторы $\tilde{\mathbf{A}}$
$\mathbf{W}_c$ грамиан управляемости
$\mathbf{W}_o$ грамиан наблюдаемости
$\mathbf{X}$ матрица данных, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n\times m}$
$\mathbf{X}'$ матрица данных с временным сдвигом, $\mathbf{X}' \in \mathbb{R}^{n\times m}$
$\mathbf{Y}$ проекция матрицы $\mathbf{X}$ на ортогональный базис в рандомизированном сингулярном разложении (раздел 1.8)
$\mathbf{Y}$ матрица данных наблюдаемых величин, $\mathbf{Y} = \mathbf{g}(\mathbf{X})$, $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{p\times m}$ (глава 7)
$\mathbf{Y}'$ матрица данных наблюдаемых величин со сдвигом, $\mathbf{Y}' = \mathbf{g}(\mathbf{X}')$, $\mathbf{Y}' \in \mathbb{R}^{p\times m}$ (глава 7)
$\mathbf{Z}$ эскиз матрицы для рандомизированного сингулярного разложения, $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{n\times r}$ (раздел 1.8)
$\boldsymbol{\Theta}$ матрица измерений, умноженная на разреживающий базис, $\boldsymbol{\Theta} = \mathbf{C}\boldsymbol{\Psi}$ (глава 3)
$\boldsymbol{\Theta}$ матрица функций-кандидатов для SINDy (раздел 7.3)
$\boldsymbol{\Gamma}$ матрица производных функций-кандидатов для SINDy (раздел 7.3)
$\boldsymbol{\Xi}$ матрица коэффициентов функций-кандидатов для SINDy (раздел 7.3)
$\boldsymbol{\Xi}$ матрица нелинейных снимков для DEIM (раздел 12.5)
$\boldsymbol{\Lambda}$ диагональная матрица собственных значений
$\boldsymbol{\Upsilon}$ матрица входных снимков, $\boldsymbol{\Upsilon} \in \mathbb{R}^{q\times m}$
$\boldsymbol{\Phi}$ матрица DMD-мод, $\boldsymbol{\Phi} \triangleq \mathbf{X}'\mathbf{V}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{W}$

$\mathbf{\Psi}$ ортонормированный базис (например, моды Фурье или POD-моды)

Тензоры

$(\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{M})$ тензоры N-мерных массивов размера $I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_N$

Нормы

$\|\cdot\|_0$ псевдонорма ℓ_0 вектора $\mathbf{x}$: количество ненулевых элементов $\mathbf{x}$

$\|.\|_1$ норма ℓ_1 вектора $\mathbf{x}$: $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n}|x_i|$

$\|\cdot\|_2$ норма ℓ_2 вектора $\mathbf{x}$: $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i^2)}$

$\|\cdot\|_2$ норма ℓ_2 матрицы $\mathbf{X}$: $\|\mathbf{X}\|_2 = \max_x \dfrac{\|\mathbf{X}\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2}$

$\|\cdot\|_F$ норма Фробениуса матрицы $\mathbf{X}$: $\|\mathbf{X}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j-1}^{m}|X_{ij}|^2}$

$\|\cdot\|_*$ ядерная норма матрицы $\mathbf{X}$: $\|\mathbf{X}\|_* = \mathrm{trace}\left(\sqrt{\mathbf{X}^*\mathbf{X}}\right) = \sum_{i=1}^{m}\sigma_i$ (для $m \le n$)

$\langle\cdot,\cdot\rangle$ скалярное произведение. Для функций $\langle f(x), g(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g^*(x)dx$

$\langle\cdot,\cdot\rangle$ скалярное произведение. Для векторов $\langle\mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle = \mathbf{u}^*\mathbf{v}$

Операторы, функции и отображения

$\mathcal{F}$ преобразование Фурье

$\mathbf{F}$ отображение динамической системы с дискретным временем

$\mathbf{F}_t$ дискретное потоковое отображение динамической системы

$\mathbf{f}$ динамическая система с непрерывным временем

G преобразование Габора

$\mathbf{G}$ передаточная функция, отображающая входы на выходы (глава 8)

g скалярная функция измерения $\mathbf{x}$

$\mathbf{g}$ скалярная функция измерения $\mathbf{x}$

J функция стоимости для регулирования

ℓ функция потерь в методе опорных векторов (глава 5)

$\mathcal{K}$ оператор Купмана (с непрерывным временем)

$\mathcal{K}_t$ оператор Купмана, ассоциированный с потоковым отображением

$\mathcal{L}$ преобразование Лапласа

$\mathbf{L}$ передаточная функция контура (глава 8)

$\mathbf{L}$ линейное дифференциальное уравнение в частных производных (главы 11 и 12)

$\mathbf{N}$ нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных

O порядок величины

$\mathbf{S}$ функция чувствительности (глава 8)

$\mathbf{T}$ дополнительная функция чувствительности (глава 8)

$\mathcal{W}$ вейвлет-преобразование

μ несогласованность между матрицей измерений $\mathbf{C}$ и базисом $\mathbf{\Psi}$

κ число обусловленности

φ собственная функция Купмана

∇ оператор градиента

$*$ оператор свертки

Наиболее употребительные акронимы

БПФ быстрое преобразование Фурье
ГО глубокое обучение
ОДУ обыкновенное дифференциальное уравнение
СНС сверточная нейронная сеть
УрЧП дифференциальное уравнение в частных производных
DMD разложение по динамическим модам (dynamic mode decomposition)
PCA метод главных компонент (principal components analysis)
POD собственное ортогональное разложение (proper orthogonal decomposition)
ROM модель пониженного порядка (reduced order model)
SVD сингулярное разложение (singular value decomposition)

Прочие акронимы

ДПФ дискретное преобразование Фурье
ИНС искусственная нейронная сеть
ЛДА линейный дискриминантный анализ
НУШ нелинейное уравнение Шрёдингера
ОПФ оконное преобразование Фурье (short time Fourier transform)
ПИД пропорционально-интегрально-дифференцирующий регулятор
РНС рекуррентная нейронная сеть
СГС стохастический градиентный спуск
ADM метод переменных направлений (alternating directions method)
AIC информационный критерий Акаике (Akaike information criterion)
ALM расширенный метод множителей Лагранжа (augmented Lagrange multiplier)
ARMA авторегрессионное скользящее среднее (autoregressive moving average)
ARMAX авторегрессионное скользящее среднее с экзогенным входом (autoregressive moving average with exogenous input)
BIC байесовский информационный критерий (Bayesian information criterion)
BPOD сбалансированное собственное ортогональное разложение (balanced proper orthogonal decomposition)
CCA канонический корреляционный анализ (canonical correlation analysis)
CFD вычислительная гидродинамика (computational fluid dynamics)
CoSaMP согласованное преследование со сжатой выборкой (compressive sampling matching pursuit)
CWT непрерывное вейвлет-преобразование (continuous wavelet transform)
DCT дискретное косинусное преобразование (discrete cosine transform)
DEIM дискретный эмпирический метод интерполяции (discrete empirical interpolation method)
DMDc разложение по динамическим модам с управлением (dynamic mode decomposition with control)

DMDc	разложение по динамическим модам с управлением (dynamic mode decomposition with control)
DNS	прямое численное моделирование (direct numerical simulation)
DWT	дискретное вейвлет-преобразование
ECOG	электрокортикография (electrocorticography)
eDMD	расширенное DMD (extended DMD)
EIM	эмпирический метод интерполяции (empirical interpolation method)
EM	математическое ожидание-максимизация (expectation maximization)
EOF	эмпирические ортогональные функции (empirical orthogonal functions)
ERA	алгоритм реализации собственной системы (eigensystem realization algorithm)
ESC	управление с поиском экстремума (extremum-seeking control)
GMM	модель гауссовой смеси (Gaussian mixture model)
HAVOK	ганкелево альтернативное представление оператора Купмана (Hankel alternative view of Koopman)
ICA	метод независимых компонент (independent component analysis)
JL	Джонсона–Линденштраусса (Johnson–Lindenstrauss)
KL	Кульбака–Лейблера (Kullback–Leibler)
KLT	преобразование Карунена–Лоэва (Karhunen–Loève transform)
LAD	наименьшее абсолютное отклонение (least absolute deviations)
LASSO	оператор наименьшего абсолютного сжатия и выборки (least absolute shrinkage and selection operator)
LQE	линейно-квадратичная модель оценки (linear quadratic estimator)
LQG	линейно-квадратичный гауссов регулятор (linear quadratic Gaussian controller)
LQR	линейно-квадратичный регулятор
LTI	линейная стационарная система (linear time invariant system)
MIMO	с несколькими входами и несколькими выходами (multiple input, multiple output)
MLC	управление на основе машинного обучения (machine learning control)
MPE	оценка отсутствующей точки (missing point estimation)
mrDMD	многомасштабное разложение по динамическим модам (multiresolution dynamic mode decomposition)
NARMAX	нелинейная авторегрессионная модель с экзогенными входами (nonlinear autoregressive model with exogenous inputs)
OKID	идентификация наблюдателей с помощью фильтра Калмана (observer Kalman filter identification)
PBH	критерий Попова–Белевича–Хаутуса (Popov–Belevitch–Hautus test)
PCP	преследование главных компонент (principal component pursuit)
PDE-FIND	функциональная идентификация нелинейной динамики с уравнениями в частных производных (partial differential equation functional identification of nonlinear dynamics)