

非負システム調査研究会 秋季研究会

非負システムのクラスタ低次元化

石崎 孝幸 (東工大)

加嶋健司(京大) Antoine Girard(Grenoble Univ.) 井村順一(東工大)
Luonan Chen(Chinese Acad. of Sci.) 合原一幸(東大)



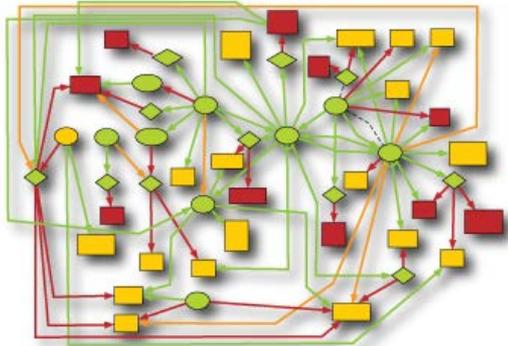
発表の流れ

- ▶ 研究背景
 - ▶ 一般的なモデル低次元化
 - ▶ 非負システムのクラスタ低次元化問題
- ▶ 誤差システムの安定性
 - ▶ フロベニウス固有ベクトル
 - ▶ 対角リアプノフ関数
- ▶ 近似誤差解析
 - ▶ クラスタの可約性
 - ▶ 可制御性グラミアン
- ▶ 数値例
 - ▶ 化学マスター方程式

研究背景

- ▶ ネットワーク上で時間発展するシステム
 - ▶ 多くのサブシステムが相互作用する大規模システム
 - ▶ 直接的(集中的)な解析・制御系設計は難しい

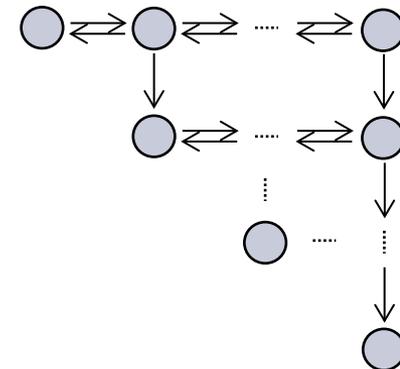
遺伝子発現調節機構



<http://www.cbs.dtu.dk>

$10^3 \sim 10^4$ 個

マルコフ連鎖システム



CME: $10^4 \sim$ 次元

アプローチ: 低次元化に基づくモデルの簡素化

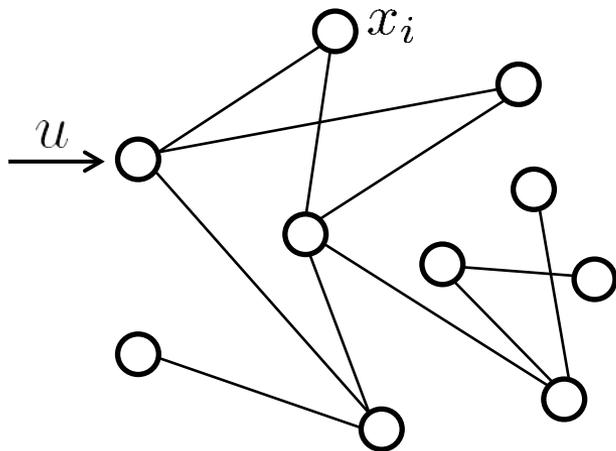
一般的な低次元化における問題点

▶ 一般的な低次元化手法

- ▶ 平衡実現打ち切り法、Krylov部分空間法、Hankelノルム近似
- ▶ システムのネットワーク構造が失われる ☹️

ネットワークシステム

$$\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$$



粗な接続 ☺️

$$Px = \hat{x}$$

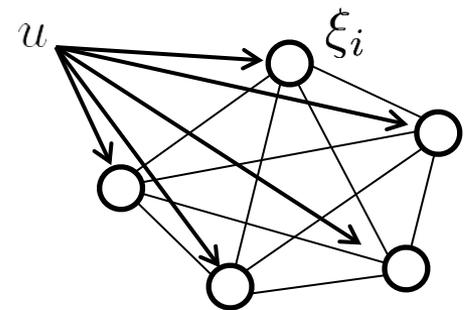


$$P \in \mathbb{R}^{\hat{n} \times n}, \hat{n} < n$$

密行列

低次元モデル

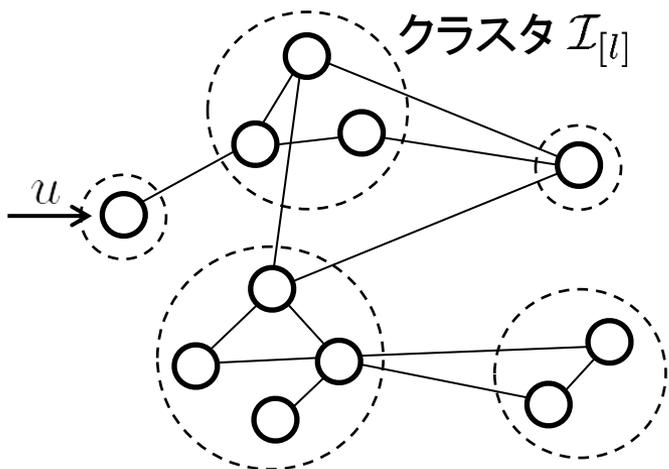
$$\hat{\Sigma} : \begin{cases} \dot{\xi} = PAP^{\dagger}\xi + PBu \\ \hat{x} = P^{\dagger}\xi \end{cases}$$



密な接続 ☹️

クラスタ低次元化

$$\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$$



$$P = \begin{bmatrix} p[1] & & \\ & \ddots & \\ & & p[\hat{n}] \end{bmatrix}$$

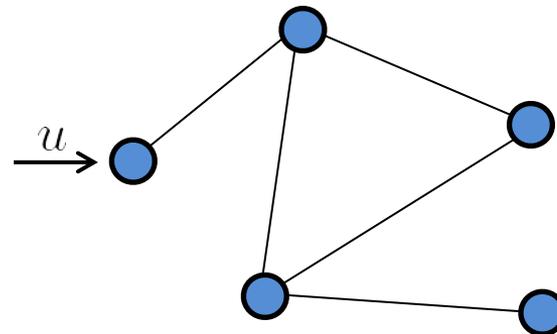
直交射影近似



$p[u]$: 集約重みベクトル

$$\hat{\Sigma} : \begin{cases} \dot{\xi} = PAP^T \xi + PBu \\ \hat{x} = P^T \xi \end{cases}$$

クラスタの集約化



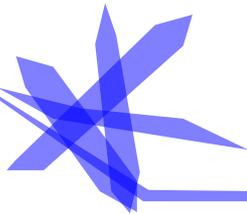
クラスタ間のネットワーク構造を保存 😊

A : 安定 & 対称 (安定な無向グラフ) [Ishizaki et al. IEEE TAC (2014)]

⇒ $\begin{cases} PAP^T : \text{安定 \& 対称} \\ \text{誤差評価 (可制御性グラミアンなど)} \end{cases}$

不安定な有向グラフに適用できる？





クラスタ低次元化と非負システム

【補題】

$$A + A^T \preceq 0 \implies PAP^T + (PAP^T)^T = P(A + A^T)P^T \preceq 0.$$

✓ 直交射影に基づく準負定性(半安定性)の保存

【補題】

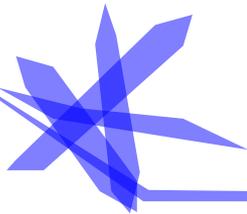
$VA + A^T V \preceq 0$ を満たす $V \succ 0$ に対して分解 $V = V_c^T V_c$ を考える。
このとき、 $\tilde{A} := V_c A V_c^{-1}$ について $\tilde{A} + \tilde{A}^T \preceq 0$ が成り立つ。

✓ “準負定化”する座標変換が存在

非負システム！

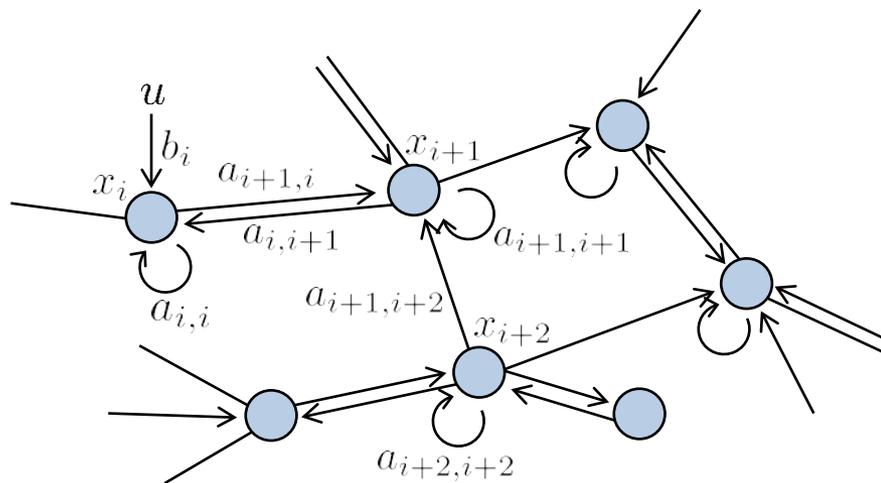
V_c が対角行列ならば $\tilde{A} = V_c A V_c^{-1}$ はネットワーク構造を保存





半安定非負システムのクラスタ低次元化問題

非負システム $\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$ $\left\{ \begin{array}{l} A \in \mathbb{R}^{n \times n} : \text{ Metzler, 半安定} \\ B \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{n \times m} \end{array} \right.$



✓ 非負性: $x(t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n, \forall u(t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m$

- 熱拡散システム (温度)
- コンパートメントシステム (濃度)
- マルコフ連鎖 (確率)

【問題】 $G(s) = (sI_n - A)^{-1}B, \hat{G}(s) = P^T(sI_{\hat{n}} - PAP^T)^{-1}PB$ に対して $G(s) - \hat{G}(s)$ が安定かつ $\|G(s) - \hat{G}(s)\|_{\mathcal{H}_2} \leq \epsilon$ を満たす $\hat{\Sigma}$ を求めよ.



発表の流れ

- ▶ 研究背景
 - ▶ 一般的なモデル低次元化
 - ▶ 非負システムのクラスタ低次元化問題
- ▶ 誤差システムの安定性
 - ▶ フロベニウス固有ベクトル
 - ▶ 対角リアプノフ関数
- ▶ 近似誤差解析
 - ▶ クラスタの可約性
 - ▶ 可制御性グラミアン
- ▶ 数値例
 - ▶ 化学マスター方程式



フロベニウス固有値・固有ベクトル

フロベニウス固有値・固有ベクトル

本発表では $\lambda_F = 0$

A : メツラー \Rightarrow $\left\{ \begin{array}{l} \text{実部最大の固有値 } \lambda_F \text{ は実数} \\ \text{その左右の固有ベクトル } v_L, v_R \text{ の要素は非負} \end{array} \right.$

【補題】 A が既約(強連結)ならば v_L, v_R の要素はすべて正である。
さらに, $D := \text{diag}(v_L)\text{diag}^{-1}(v_R)$ について $DA + A^T D \preceq 0$.

✓ $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} : \tilde{A} + \tilde{A}^T \preceq 0$ 、メツラー、ネットワーク構造保存

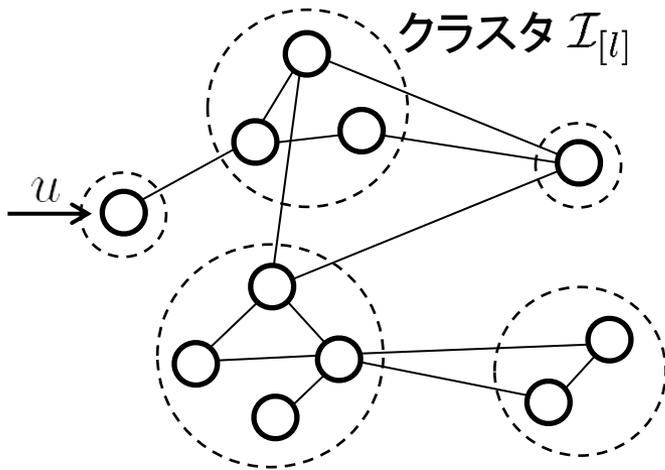
【補題】 \tilde{A} のフロベニウス固有ベクトルは $\tilde{v}_L^T = \tilde{v}_R$ を満たす。

一般性を失わず, $A + A^T \preceq 0$, $v_F := v_L^T = v_R$ を仮定できる



誤差システムが安定となる集約化重み

$$\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$$



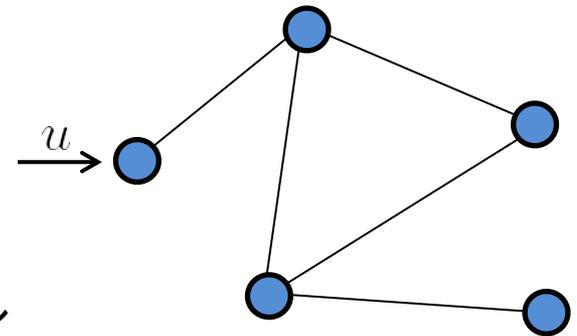
$$P = \begin{bmatrix} p_{[1]} & & \\ & \ddots & \\ & & p_{[\hat{n}]} \end{bmatrix}$$

直交射影近似



$p_{[l]}$: 集約重みベクトル

$$\hat{\Sigma} : \begin{cases} \dot{\xi} = PAP^T\xi + PBu \\ \hat{x} = P^T\xi \end{cases}$$



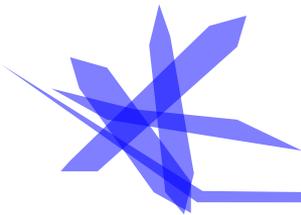
ベクトル $p \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ により $p_{[l]} = \frac{p_{\mathcal{I}_{[l]}}}{\|p_{\mathcal{I}_{[l]}}\|}$ $p_{\mathcal{I}_{[l]}}$: p の $\mathcal{I}_{[l]}$ に対応したサブベクトル

【定理】

任意の $\{\mathcal{I}_{[l]}\}_{l \in \mathcal{L}}$ に対して $G(s) - \hat{G}(s)$ が安定 $\Leftrightarrow p = v_F^T$

フロベニウス固有ベクトルに基づく集約化重み



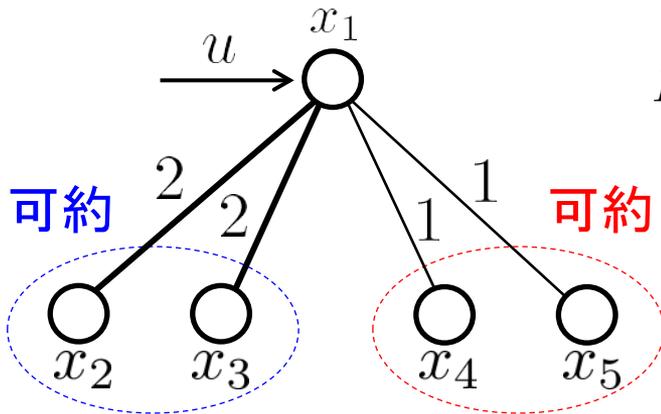


発表の流れ

- ▶ 研究背景
 - ▶ 一般的なモデル低次元化
 - ▶ 非負システムのクラスタ低次元化問題
- ▶ 誤差システムの安定性
 - ▶ フロベニウス固有ベクトル
 - ▶ 対角リアプノフ関数
- ▶ 近似誤差解析
 - ▶ クラスタの可約性
 - ▶ 可制御性グラミアン
- ▶ 数値例
 - ▶ 化学マスター方程式

可約なクラスタとその集約化

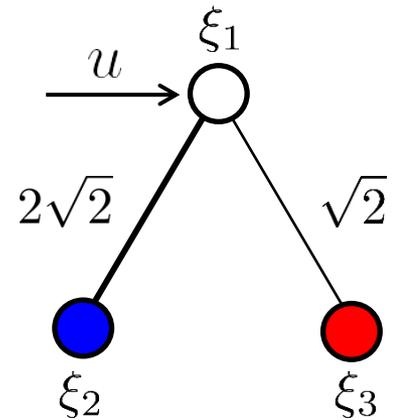
$$\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$$



$$P = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix}$$

$$p = v_F^T = \mathbf{1}_n^T$$

$$\hat{\Sigma} : \begin{cases} \dot{\xi} = PAP^T \xi + PBu \\ \hat{x} = P^T \xi \end{cases}$$



$$A = \begin{bmatrix} -6 & 2 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

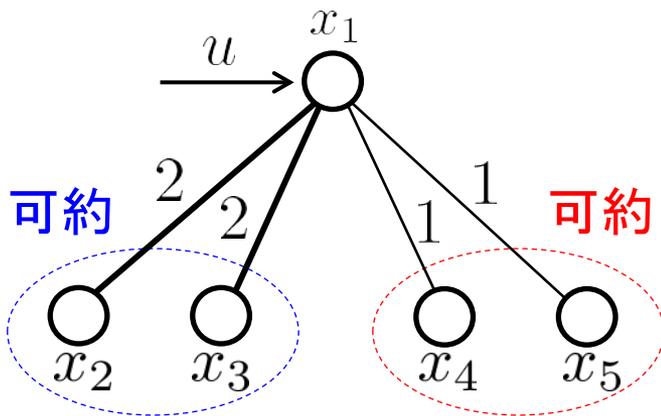
$$PAP^T = \begin{bmatrix} -6 & 2\sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} & -2 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad PB = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$x_2(t) = x_3(t), \quad x_4(t) = x_5(t), \quad \forall u(t)$$

厳密な低次元化 $G(s) = \hat{G}(s)$

可約なクラスタとその集約化

$$\Sigma : \dot{x} = Ax + Bu$$



$$A = \begin{bmatrix} -6 & 2 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$x_2(t) = x_3(t), \quad x_4(t) = x_5(t), \quad \forall u(t)$$

(射影された)可制御性グラミアン

$$\Phi = \int_0^\infty e^{At} \bar{V} B (e^{At} \bar{V} B)^T dt$$

✓ $\bar{V} : \ker v_F$ への直交射影行列

コレスキー分解 $\Phi = \Phi_c^T \Phi_c$

$$\Phi_c = \begin{bmatrix} 0.20 & -0.05 & 0.02 & 0.00 \\ -0.03 & 0.04 & -0.02 & 0.00 \\ -0.03 & 0.04 & -0.02 & 0.00 \\ -0.07 & -0.01 & 0.01 & 0.00 \\ -0.07 & -0.01 & 0.01 & 0.00 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \text{同じ} \\ \text{同じ} \\ \end{matrix}$$

【補題】 $\mathcal{I}_{[l]}$ が可約 \Leftrightarrow

$$v_i \text{row}_i[\Phi_c] = v_j \text{row}_j[\Phi_c], \quad \forall i, j \in \mathcal{I}_{[l]}$$

✓ $v_i : v_F$ の第 i 要素

定量的なクラスタの可約性と誤差解析

【定義】

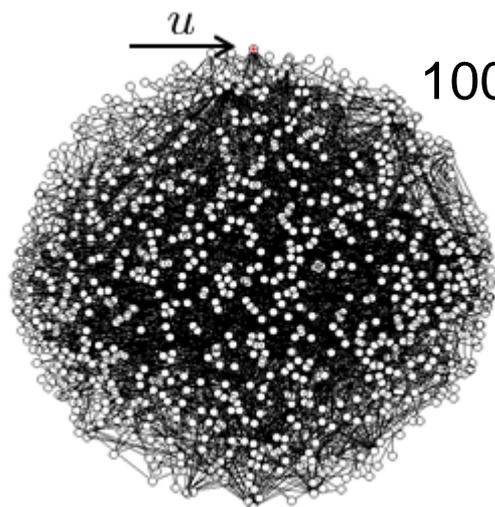
$\|v_{i\text{row}_i}[\Phi_c] - v_{j\text{row}_j}[\Phi_c]\| \leq \theta, \forall i, j \in \mathcal{I}_{[l]}$, のとき $\mathcal{I}_{[l]}$ は θ 可約と呼ぶ.

【定理】 すべてのクラスタが θ 可約であるならば, $\hat{\Sigma}$ は

$$\|G(s) - \hat{G}(s)\|_{\mathcal{H}_2} \leq \gamma \sqrt{\sum_{l=1}^{\hat{n}} |\mathcal{I}_{[l]}| (|\mathcal{I}_{[l]}| - 1) \theta}$$

精度を規定する
パラメータ

を満たす半安定な非負システムである.



1000ノード

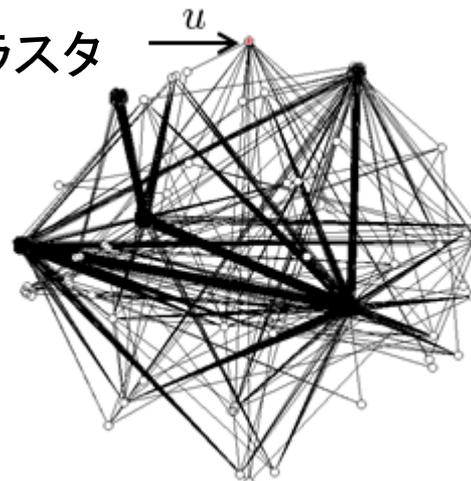
クラスタ低次元化



$$\theta = 1.5$$

(誤差5%程度)

47クラスタ



不可欠なクラスタ
構造を抽出!



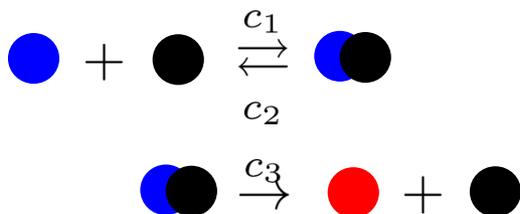


発表の流れ

- ▶ 研究背景
 - ▶ 一般的なモデル低次元化
 - ▶ 非負システムのクラスタ低次元化問題
- ▶ 誤差システムの安定性
 - ▶ フロベニウス固有ベクトル
 - ▶ 対角リアプノフ関数
- ▶ 近似誤差解析
 - ▶ クラスタの可約性
 - ▶ 可制御性グラミアン
- ▶ 数値例
 - ▶ 化学マスター方程式

適用例: 化学マスター方程式

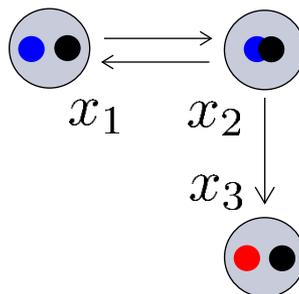
Michaelis-Mentenシステム



$$(c_1 = 1, c_2 = 0.01, c_3 = 3)$$

例) $t = 0$ のとき

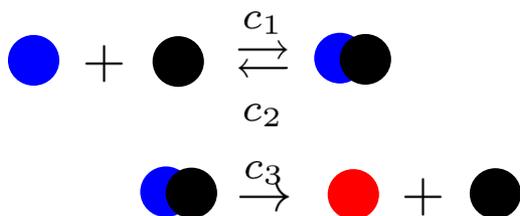
●と●がひとつずつ



$x \in [0, 1]^n$: 各分子個数の実現確率

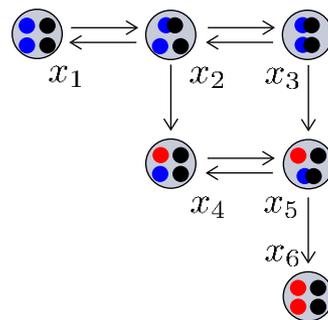
適用例：化学マスター方程式

Michaelis-Mentenシステム



$$(c_1 = 1, c_2 = 0.01, c_3 = 3)$$

例) $t = 0$ のとき
●と●がふたつずつ



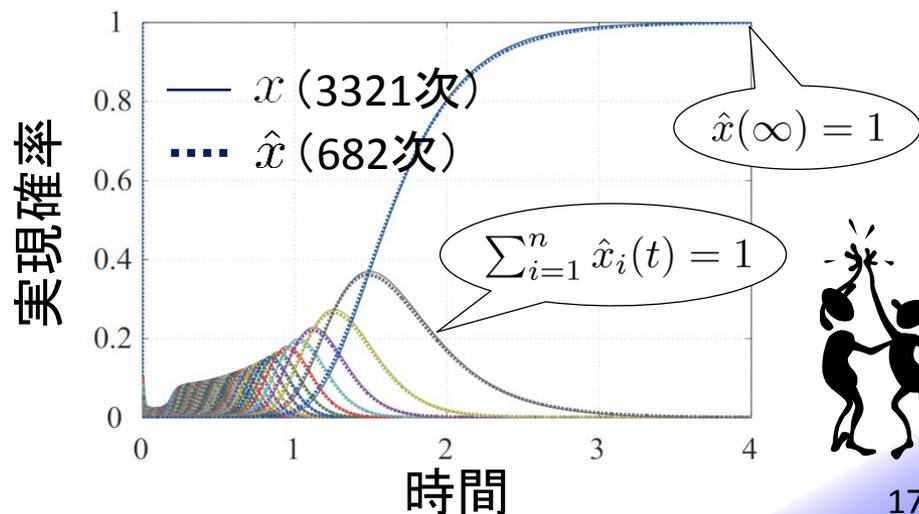
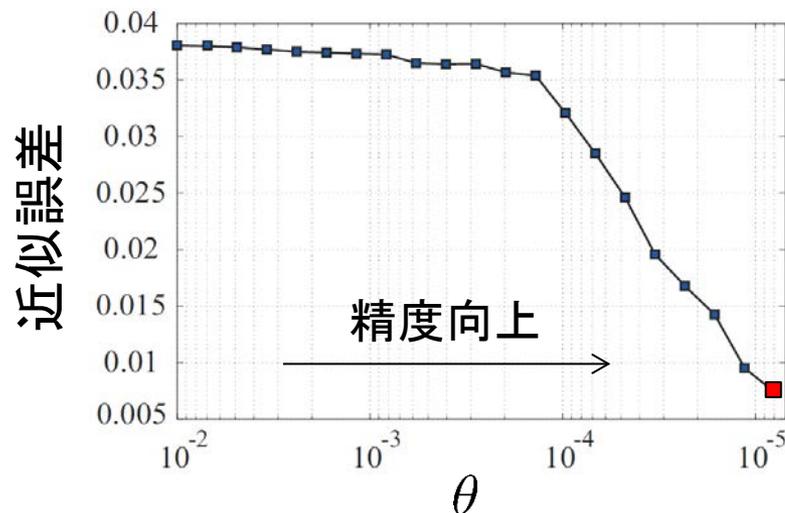
マルコフ連鎖表現

$$\dot{x} = Ax, \quad x(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\checkmark \sum_{i=1}^n x_i(t) = 1, \quad x_n(\infty) = 1$$

$x \in [0, 1]^n$: 各分子個数の実現確率

●と●を80個に設定





おわりに

- ▶ 非負システムのクラスタ低次元化
 - ▶ 誤差システムの安定性
 - ▶ 対角リアプノフ関数
 - ▶ フロベニウス固有ベクトルに基づく集約化重み
 - ▶ クラスタの可約性と近似誤差解析
 - ▶ 可制御性グラミアン
 - ▶ コレスキー因子の行ベクトル
- ▶ 化学反応システムへの応用
 - ▶ 化学マスター方程式による線形な非負システム表現

[Ishizaki et al. Clustered model reduction of positive directed networks, Automatica (2015)]

ご清聴ありがとうございました