

АНАЛИЗ ДАННЫХ В НАУКЕ И ТЕХНИКЕ

Машинное обучение, динамические
системы и управление

Стивен Л. Брантон · Дж. Натан Куц



DMK
ИЗДАТЕЛЬСТВО

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

Copyright Original English language edition published by Cambridge University Press is part of the University of Cambridge. Russian language edition copyright © 2021 by DMK Press. All rights reserved.

Все права защищены. Любая часть этой книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами без письменного разрешения владельцев авторских прав.

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

© Steven L. Brunton and J. Nathan Kutz, 2019
© Оформление, издание, перевод,
ДМК Пресс, 2021

Содержание

От издательства	13
Об авторах	14
Предисловие	15
Общепотребительные методы оптимизации, уравнения, символы и акронимы	20

Часть I. Понижение размерности и преобразования

31

Глава 1. Сингулярное разложение (SVD)	32
1.1. Общие сведения	33
Определение SVD	34
Вычисление SVD	35
Историческая справка	36
Использование в этой книге и предположения о подготовке читателей	37
1.2. Аппроксимация матриц	37
Усечение	38
Пример: сжатие изображения	38
1.3. Математические свойства и манипуляции	41
Интерпретация с привлечением доминирующих корреляций	41
Метод моментальных снимков	43
Геометрическая интерпретация	43
Инвариантность SVD относительно унитарных преобразований	45
Левые унитарные преобразования	46
Правые унитарные преобразования	46
1.4. Псевдообращение, метод наименьших квадратов и регрессия	47
Одномерная линейная регрессия	49
Полилинейная регрессия	51
Предостережение	53
1.5. Метод главных компонент (PCA)	53
Вычисление	54
Пример: данные с гауссовым шумом	55
Пример: данные о раке яичников	57
1.6. Пример: «собственные лица»	58
1.7. Отсечение и выравнивание	64
Оптимальный жесткий порог отсечения	64
Важность выравнивания данных	68

1.8. Рандомизированное сингулярное разложение	71
Рандомизированная линейная алгебра	71
Рандомизированный алгоритм SVD	72
Пример рандомизированного SVD	75
1.9. Тензорные разложения и N -мерные массивы данных	76
Рекомендуемая литература	81

Глава 2. Преобразование Фурье

и вейвлет-преобразование	82
2.1. Ряд Фурье и преобразование Фурье.....	83
Скалярные произведения функций и векторов	83
Ряд Фурье	84
Преобразование Фурье	89
2.2. Дискретное преобразование Фурье (ДПФ) и быстрое преобразование Фурье (БПФ)	92
Дискретное преобразование Фурье	93
Быстрое преобразование Фурье.....	95
Пример БПФ: фильтрация шума.....	96
Пример БПФ: спектральные производные	98
2.3. Преобразование дифференциальных уравнений в частных производных	100
Уравнение теплопроводности.....	101
Одностороннее волновое уравнение	103
Уравнение Бюргера	105
2.4. Преобразование Габора и спектрограмма.....	107
Дискретное преобразование Габора	108
Пример: сигнал с квадратичной частотной модуляцией	108
Пример: «Патетическая соната» Бетховена	110
Принцип неопределенности	112
2.5. Вейвлеты и многомасштабный анализ.....	113
Дискретное вейвлет-преобразование.....	115
2.6. Двумерные преобразования и обработка сигналов.....	116
Двумерное преобразование Фурье для изображений	116
Двумерное вейвлет-преобразование изображений	119
Рекомендуемая литература	122

Глава 3. Разреженность и сжатие измерений.....

3.1. Разреженность и сжатие	124
Пример: сжатие изображения.....	125
Почему сигналы допускают сжатие: просторность пространства изображений	127
3.2. Сжатое измерение	128
Заявление об отказе от ответственности	132
Другие формулировки	133
3.3. Примеры сжатых измерений.....	133
Норма ℓ_1 и разреженные решения недоопределенной системы	134

Восстановление звукового сигнала по разреженным измерениям	135
3.4. Геометрия сжатия	137
Свойство ограниченной изометрии (RIP)	139
Некогерентность и матрицы измерений.....	139
Плохие измерения	140
3.5. Разреженная регрессия.....	140
Отбрасывание выбросов и робастность	141
Отбор признаков и LASSO-регрессия	142
3.6. Разреженное представление.....	146
3.7. Робастный метод главных компонент (RPCA).....	151
3.8. Разреженное размещение датчиков.....	153
Разреженное размещение датчиков для реконструкции	154
Разреженная классификация	158
Рекомендуемая литература	159

Часть II. МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ И АНАЛИЗ ДАННЫХ

160

Глава 4. Регрессия и выбор модели.....

161

4.1. Классическая аппроксимация кривой	163
Методы наименьших квадратов	163
Линия наименьших квадратов.....	166
Линеаризация данных.....	167
4.2. Нелинейная регрессия и градиентный спуск.....	169
Градиентный спуск	170
Метод переменных направлений	175
4.3. Регрессия и уравнение $Ax = b$: переопределенные и недоопределенные системы.....	176
Переопределенные системы	176
Недоопределенные системы	180
4.4. Оптимизация как краеугольный камень регрессии	183
4.5. Парето-фронт и Lex Parsimoniae	188
Переобучение.....	190
4.6. Выбор модели: перекрестная проверка	191
k -групповая перекрестная проверка.....	195
Перекрестная проверка с контролем по p точкам	197
4.7. Выбор модели: информационный критерий	197
Информационные критерии: AIC и BIC	200
Вычисление AIC и BIC.....	201
Рекомендуемая литература	202

Глава 5. Кластеризация и классификация.....

203

5.1. Выделение признаков и добыча данных	204
5.2. Обучение с учителем и без учителя.....	210
5.3. Обучение без учителя: кластеризация методом k средних	214
5.4. Иерархическая кластеризация без учителя: дендрограмма.....	219

5.5. Смесовые модели и EM-алгоритм.....	223
5.6. Обучение с учителем и линейные дискриминанты.....	227
5.7. Метод опорных векторов (SVM)	233
Линейный SVM	233
Нелинейный SVM.....	235
Ядерные методы в сочетании с SVM.....	236
5.8. Решающие деревья и случайные леса	238
Случайные леса.....	243
5.9. 10 лучших алгоритмов по версии Data Mining 2008.....	244
Алгоритм k средних	244
EM-алгоритм (смесовые модели)	245
Метод опорных векторов (SVM).....	245
CART (Classification and Regression Tree – дерево классификации и регрессии)	245
Метод k ближайших соседей (kNN).....	246
Наивная байесовская классификация.....	246
AdaBoost (ансамблевое обучение с усилением)	246
C4.5 (ансамблевое обучение решающих деревьев).....	247
Алгоритм Apriori	247
PageRank	247
Рекомендуемая литература	248

Глава 6. Нейронные сети и глубокое обучение

6.1. Нейронные сети: однослойные сети	250
Однослойная сеть.....	252
6.2. Многослойные сети и функции активации	255
6.3. Алгоритм обратного распространения	260
6.4. Алгоритм стохастического градиентного спуска	264
6.5. Глубокие сверточные нейронные сети.....	267
Сверточные слои	268
Пулинговые слои	269
Полносвязные слои	269
Прореживание	270
6.6. Нейронные сети для динамических систем	272
6.7. Разнообразие нейронных сетей	277
Перцептрон	277
Сети прямого распространения (FF)	277
Рекуррентная нейронная сеть (RNN)	279
Автокодировщик (AE).....	279
Марковская цепь (MC)	280
Сеть Хопфилда (HN).....	280
Машина Больцмана (BM)	280
Ограниченная машина Больцмана (RBM)	281
Сеть глубокого доверия (DBN).....	281
Глубокая сверточная нейронная сеть (DCNN).....	281
Антисверточная сеть (DN).....	281
Глубокая сверточная сеть обратной графики (DCIGN).....	282

Порождающая состязательная сеть (GAN)	282
Машина неустойчивых состояний (LSM).....	282
Машина экстремального обучения (ELM)	283
Сеть с эхо-состояниями (ESN)	283
Глубокая остаточная сеть (DRN).....	283
Сеть Кохонена (KN)	284
Нейронная машина Тьюринга (NTM).....	284
Рекомендуемая литература	284
Часть III. ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И УПРАВЛЕНИЕ	285
Глава 7. Динамические системы, управляемые данными	286
7.1. Обзор, мотивация и проблемы	287
Динамические системы	287
Цели и проблемы современной теории динамических систем	291
7.2. Разложение по динамическим модам (DMD).....	294
Алгоритм DMD.....	295
Пример и код	300
Расширения, приложения и ограничения.....	300
7.3. Разреженная идентификация нелинейной динамики (SINDy)	308
Нахождение дифференциальных уравнений в частных производных.....	314
Обобщение SINDy на рациональные нелинейности	316
Применение информационного критерия для выбора модели	319
7.4. Теория оператора Купмана	320
Математическая теория оператора Купмана.....	320
Разложение по модам Купмана и конечные представления.....	324
Примеры погружений Купмана	326
Аналитическое разложение собственных функций в ряд	329
История и недавние достижения.....	331
7.5. Управляемый данными анализ Купмана	332
Расширенный DMD	332
Аппроксимация собственных функций Купмана на основе данных	334
Управляемый данными анализ Купмана и запаздывающие координаты	336
Нейронные сети для погружений Купмана.....	340
Рекомендуемая литература	342
Глава 8. Теория линейного управления	344
Типы управления	345
8.1. Управление с замкнутым контуром обратной связи.....	346
Примеры преимуществ управления с обратной связью.....	348
8.2. Линейные стационарные системы	351
Линеаризация нелинейной динамики	351

Неуправляемая линейная система	352
Управляемая линейная система	354
Системы с дискретным временем.....	355
Пример: обратный маятник	356
8.3. Управляемость и наблюдаемость.....	357
Управляемость.....	357
Наблюдаемость.....	359
Критерий управляемости РВН	360
Теорема Кэли–Гамильтона и достижимость.....	361
Грамианы и степень управляемости и наблюдаемости	362
Стабилизируемость и распознаваемость	364
8.4. Оптимальное управление полным состоянием: линейно-квадратичный регулятор (ЛКР)	364
Вывод уравнения Риккати оптимального управления	366
8.5. Оптимальное оценивание полного состояния: фильтр Калмана	369
8.6. Оптимальное управление с использованием датчиков: линейно-квадратичное гауссово управление (ЛКГ).....	372
8.7. Практический пример: обратный маятник на тележке.....	374
Управление маятником на тележке с обратной связью	376
Оценка полного состояния системы маятник–тележка	379
Управление с обратной связью системой маятник–тележка с использованием датчиков	382
8.8. Робастное управление и методы анализа в частотной области.....	384
Методы в частотной области.....	384
Качество управления и передаточная функция контура: чувствительность и дополнительная чувствительность.....	389
Обращение динамики	392
Робастное управление	393
Рекомендуемая литература	396

Глава 9. Сбалансированные модели, пригодные для управления.....

9.1. Упрощение модели и идентификация системы	397
9.2. Сбалансированное упрощение модели.....	399
Цель упрощения модели	399
Замена переменных в системах управления	401
Балансирующие преобразования	403
Сбалансирование усечения	407
Вычисление сбалансированных реализаций.....	408
Пример сбалансированного упрощения модели	413
9.3. Идентификация системы	415
Алгоритм реализации собственной системы	416
Идентификация наблюдателей с помощью фильтра Калмана	419
Комбинация ERA и OKID	423
Рекомендуемая литература	425

Глава 10. Управление на основе данных	426
10.1. Идентификация нелинейной системы для управления.....	427
DMD с управлением	428
Нелинейное управление с помощью оператора Купмана	430
SINDy с управлением	432
Пример управления на основе прогнозирующих моделей (MPC).....	432
10.2. Управление с машинным обучением	436
Обучение с подкреплением	438
Управление с итеративным обучением.....	439
Генетические алгоритмы	439
Генетическое программирование	441
Пример: применение генетического алгоритма для настройки ПИД-регулятора.....	443
10.3. Адаптивное управление с поиском экстремума	448
Простой пример управления с поиском экстремума	452
Пример управления с поиском экстремума в сложной ситуации.....	455
Приложения управления с поиском экстремума	456
Рекомендуемая литература	458
 Часть IV. МОДЕЛИ ПОНИЖЕННОГО ПОРЯДКА	460
Глава 11. Модели пониженного порядка (ROM)	461
11.1. POD для дифференциальных уравнений в частных производных	462
Разложение по модам Фурье	465
Специальные функции и теория Штурма–Лиувилля	466
Понижение размерности	467
11.2. Элементы оптимального базиса: собственное ортогональное разложение	468
Проекция Галеркина на POD-моды.....	470
Пример: гармонический осциллятор	471
11.3. POD и динамика солитонов	475
Упрощение солитона ($N = 1$)	477
Упрощение солитона ($N = 2$)	479
11.4. POD в непрерывной формулировке	480
Квадратурные правила для R: правило трапеций.....	482
Квадратурные правила более высокого порядка	483
POD-моды и квадратурные формулы	485
11.5. POD с симметриями: повороты и сдвиги	486
Сдвиг: распространение волн	486
Поворот: спиральные волны	488
Рекомендуемая литература	492
 Глава 12. Интерполяция для ROM	494
12.1. Неполное POD	494
Разреженные измерения и реконструкция.....	496

Моды гармонического осциллятора	497
12.2. Ошибка и сходимость неполного POD	501
Случайная выборка и сходимость	501
Неполные измерения и качество реконструкции.....	503
12.3. Неполные измерения: минимизация числа обусловленности	504
Замены числа обусловленности.....	510
12.4. Неполные измерения: максимальная дисперсия.....	512
12.5. POD и дискретный эмпирический метод интерполяции (DEIM) ...	517
POD и DEIM	518
DEIM	519
12.6. Реализация алгоритма DEIM.....	521
Алгоритм QDEIM	523
12.7. Машинное обучение ROM.....	524
Выбор POD-моды	525
Пример: обтекание цилиндра.....	527
Рекомендуемая литература	529
Глоссарий.....	531
Список литературы.....	538
Предметный указатель	539