

Koopman Theory-Based Missing Value Imputation Model for Nonlinear Dynamical Systems

Koopman 이론 기반 비선형 동적 시스템에 대한 결측값 보간 모델

Yu Min Hwang · Sangjun Park · Hyunyoung Lee · Seok-Kap Ko

황유민[†] · 박상준* · 이현용* · 고석갑*

Abstract

In this paper, we propose a novel deep learning model based on Koopman theory to learn the partial differential equations (PDEs) inherent in data observed from nonlinear dynamical systems for missing data imputation. Since nonlinear PDEs such as the Navier-Stokes equations in fields like fluid dynamics and quantum mechanics still lack solutions, this paper addresses the long-term prediction problem of nonlinear dynamical systems by leveraging the Koopman Autoencoder (KAE) model. To improve the long-term prediction performance of KAE on nonlinear systems, we propose a multi-input-based KAE model that utilizes high temporal resolution multi-input data instead of lowering the temporal resolution of the model prediction. We validated the effectiveness of the proposed method through MSE, MAPE, and SMAPE metrics on three nonlinear dynamical system datasets—Navier-Stokes (smoke), Navier-Stokes (viscous flow), and Shallow-Water, showing significant improvement over baseline models.

Key Words

Koopman theory, Missing value imputation, Nonlinear dynamical systems, Data prediction

1. 서론

최근 연구에서 사용 가능한 관측 데이터에서 시공간 의존성을 활용하여 결측값 문제를 해결하기 위해 시공간 데이터 보간 모델이 다양한 관점에서 연구되고 있다[1-2]. 자기 회귀 이동 평균(ARMA) [3], 기대 최대화 알고리즘(EM) [4-5], k-최근접 이웃(KNN) [6]과 같은 고전적인 기계 학습 방법이 보간 문제를 해결하기 위해 제안되었으나, 이러한 방법들은 대규모 데이터베이스에서 발견되는 복잡하고 다양한 공간적 및 시간적 특성을 학습하기에 한계가 있다. 딥러닝의 발전과 함께, 다층 퍼셉트론(MLP), 순환 신경망(RNN), 그래프 신경망(GNN), 확산 확률 모델(DPM) [7]이 개선된 접근법으로 연구되었으나 이러한 방법들 또한 부정확한 과거 데이터의 패턴학습으로 인해 결측값을 추론할 때 오류 축적 문제[8]를 겪게 되었다. 하지만 일반적인 특징 추출 및 학습 역할을 하는 딥러닝 모델 또한 본 논문에서 다루고자 하는 비선형 동적 시스템으로부터 관측된 데이터에 내재된 편미분 방정식(partial differential equations; PDEs)을 학습하여 미래의 물리 현상을 장기적으로 예측하는 문제에 대해서 적용되기에

한계가 있다[8-9].

유체 역학, 양자 역학 등에서 Navier-Stokes 방정식과 같은 비선형 편미분 방정식을 푸는 해를 자연과학과 공학에서 여전히 갖지 못하고 있다. PDE를 풀기위한 고전적인 수치 해석기인 유한 요소법과 유한 차분법을 비롯해서 신경망 기반 해석기인 physics-informed neural networks(PINN)[10-11] 모델이 연구되었지만, 이는 governing equation이 알려진 문제에 대해서 적용이 가능하고 본 논문에서 다루고자 하는 PDE가 알려지지 않고 데이터셋에 내재된 PDE를 학습하는 경우에는 적용에 한계가 있을 수 있다.

최근 주목받는 비선형 시스템의 물리 예측 방법 중 하나인 Koopman 이론[12]은 비선형 동적 시스템을 선형 및 무한 차원으로 표현함으로써 시스템 진화의 이해, 지배 모드 추출, 데이터 기반 분석 등 복잡한 시스템의 동역학과 행동을 분석하는 강력한 수학적 도구로 제안되었다. 인공지능망 기술이 진화함에 따라 Koopman 이론을 인공지능망 오토인코더와 결합하여 Koopman Autoencoder (KAE)를 개발하여 물리 예측에 활용하는 연구 사례가 보고되고 있다 [13]. KAE를 활용하여 미래에 대한 물리 예측을 수행할 때 KAE 내에서 예측하고자 하는 시간까지 Koopman operator를

[†] Corresponding Author : Honam Research Center, Electronics and Telecommunications Research Institute, Gwangju, Republic of Korea.

E-mail : yumin@etri.re.kr

<https://orcid.org/0000-0003-4659-8178>

*Honam Research Center, Electronics and Telecommunications Research Institute,

Gwangju, Republic of Korea.

<https://orcid.org/0000-0003-2931-7020>

<https://orcid.org/0000-0002-0615-4241>

<https://orcid.org/0000-0001-9218-7236>

Received : Aug. 30, 2024 Revised : Oct. 10, 2024 Accepted : Oct. 14, 2024

다중으로 적용하여 물리 예측을 진행해야 하는데, Koopman operator를 적용할 때마다 예측 오차가 누적되어 장기 예측이 제한되는 문제가 발생한다.

이러한 장기 예측이 제한되는 문제를 저감하기 위해 [14]에서는 인코더와 Koopman 오퍼레이터간 temporal consistency를 획득할 수 있는 새로운 손실 함수와 모델 구조(Prediction-consistent KAE)를 제안하였다. [15]에서는 인코더-오퍼레이터-디코더간 backward dynamics와 forward dynamics를 일치시켜 모델의 예측 성능을 개선할 수 있는 새로운 손실함수를 제안하였다. [16]에서 또한 KAE의 예측 손실을 완화하기 위해 singular value decomposition를 활용하여 Koopman 행렬의 eigenvalue를 단위 원에 가깝게 조정하는 손실 함수를 제안하였다. 하지만 앞서 기술한 KAE모델의 예측 성능을 개선하는 다양한 방법론이 제안되었음에도 불구하고, 장기 예측을 위해 Koopman operator를 필수불가결하게 중첩으로 적용하여 적용된 횟수만큼 누적되고 증가하는 오차 매커니즘을 완화하는 방법은 연구되지 않았다.

본 논문에서는 비선형 동적 시스템으로부터 관측된 데이터셋 중 장기적으로 손실되거나 대규모로 결측된 데이터를 예측 및 보간하는 문제를 KAE를 이용하여 해결하는 것을 과제로 한다. 이를 해결하기 위해 앞서 기술한 KAE의 단점인 물리 예측 시간이 증가할수록 예측 오차가 누적되는 문제를 완화하기 위해 저시간 해상도 다중 입력 기반 KAE를 제안한다. 비선형 시스템에 대해 KAE의 장기 예측 성능을 개선하기 위해 모델에 내재된 단위 시간 스텝의 크기를 증가시켜 예측 데이터의 시간 해상도를 낮추는 대신, 높은 시간 해상도의 다중 입력 데이터를 활용하는 다중 입력 기반의 KAE 모델의 구조도를 제안하고 성능을 분석한다. 제안한 KAE의 시간해상도를 저하시켜 데이터를 예측하는 방법은 Koopman 오퍼레이터를 적용하는 횟수 자체를 저감시켜 누적되는 오차를 저감하는 원리에 기초하므로, 본 논문에서 해결하고자하는 과제인 장기 예측 문제를 효과적으로 완화할 수 있다.

실험에 사용된 세 가지 비선형 동적 시스템으로부터 관측된 데이터셋 Navier-Stokes(smoke), Navier-Stokes(viscous flow), Shallow-Water에 대해서 제안한 모델과 베이스라인 모델의 장기 예측 성능을 MSE, MAPE, SMAPE 지표로 분석한 결과 제안한 모델의 예측 성능이 효과적으로 향상된 것을 확인한다.

2. Koopman 이론 기반 데이터 보간 모델

2.1 문제 정의 및 모델 훈련

본 논문에서는 비선형 동적 시스템으로부터 관측된 데이터셋 중 손실되거나 결측된 데이터를 장기 예측하여 보간하는 문제를 KAE 모델을 활용하여 해결하고자 한다. 비선형시스템 $F(\cdot)$ 와 이산시간 데이터 x_k 는 시간 k 에 대해서 $x_{k+1} = F(x_k)$ 만족한다고 가정한다.

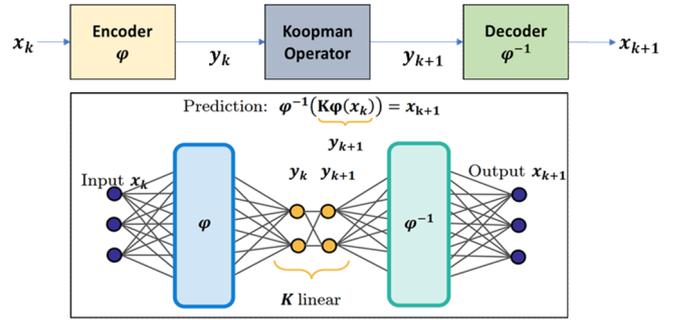


그림 1 Koopman 이론 기반 오토인코더의 구조도
Fig. 1 Structure diagram of the Koopman theory-based autoencoder

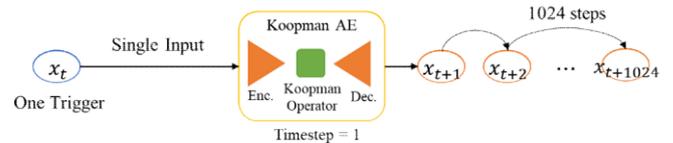


그림 2 KAE 모델의 데이터 예측(입력 x_t 는 시간 윈도우를 갖는 데이터)
Fig. 2 Data prediction of the KAE Model (The input x_t is a time windowing data)

물리 모델은 그림 1과 같이 Koopman Autoencoder(KAE)를 가르킨다. KAE는 encoder ϕ , Koopman operator κ , decoder ϕ^{-1} 로 모두 인공신경망을 기반으로 구성된다. Encoder와 decoder는 $\phi^{-1}(\phi(x_k))=x_k$ 를 만족하도록 설계 및 훈련되며, Koopman theory[12]에 따르면 encoder는 상태공간의 데이터를 무한차원의 가관측공간으로 공간 맵핑을 수행해야 하지만 현실적으로는 유한차원의 공간으로 맵핑한다. Koopman operator는 사전정의된 단위 시간 스텝 만큼 물리 현상을 전개(forwarding)하는 역할을 수행하며 이는 수식 (1)과 같이 가관측공간에서 수행된다.

$$\begin{aligned} \kappa\phi(x_k) &= \phi(x_{k+1}) = \phi(F(x_k)), \\ \phi^{-1}(\kappa\phi(x_k)) &= x_{k+1}. \end{aligned} \quad (1)$$

수식 (1)이 의미하는 바는 가관측공간으로 표현된 비선형시스템의 데이터를 Koopman operator를 통해 선형 관계로 표현할 수 있다는 것이다. 요약하면, Koopman 연산자는 무한 차원의 임의의 힐버트 공간으로 맵핑된 관측데이터의 비선형 시스템을 전역적이고 체계적인 선형 표현으로 제공하는 기능을 한다. 물리 현상을 추론하고 해석하기 위해, 표현된 Koopman 연산자와 오토인코더를 활용하여 동역학 특성과 물리 법칙을 학습할 수 있다.

모델 학습을 위한 손실 함수는 복원과 예측으로 구성되고, 다음의 수식을 만족하여 모델 학습시 손실 최소화가 이루어진다.

$$L_{rect} = \sum_k \|\phi^{-1}(\phi(x_k)) - x_k\|_2^2, \quad (2)$$

$$L_{pred} = \sum_n \sum_k \|\phi^{-1}(\kappa^n \phi(x_k)) - x_{k+n}\|_2^2, \quad (3)$$

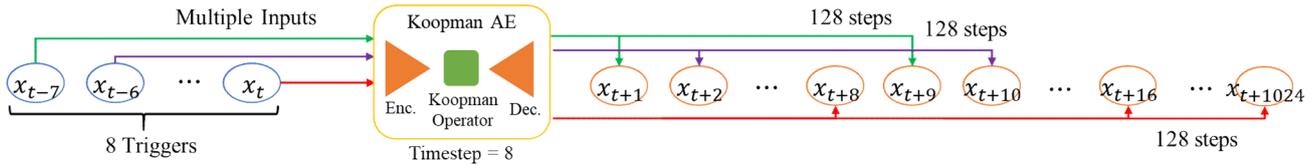


그림 3 다중 입력 기반의 KAE 모델의 동작 구조도

Fig. 3 Operational Diagram of the Multi-Input Based KAE Model

여기서 수식 (2)는 오토인코더에서 인코더 맵핑에 대한 디코더 복원(reconstruction) 능력을 부여하기 위한 손실함수이며, 수식 (3)은 Koopman operator에 대한 미래 예측 능력을 부여하기 위한 손실함수이다. n 은 단위 시간 스텝에 대한 적용된 Koopman operator κ 의 횟수이며 $n=1$ 의 경우 모델에 데이터 x_k 를 입력하면 출력은 x_{k+1} 로 이루어진다. 위 손실함수에 대해서 손실 최소화가 이루어지면, 임베딩된 데이터 복원과 미래 데이터 예측 기능이 동시에 모델에 학습되어 이 후 데이터 보간에 활용될 수 있다.

2.2 다중 입력 기반 데이터 예측 및 보간

KAE 기반의 물리 모델을 활용하여 물리 예측을 실시한다. 그림 2에서는 기존의 물리 예측을 수행하는 방법을 도시하고 있으며, 단일 입력 x_k 를 KAE에 입력하면 예측된 x_{k+n} 값을 산출할 수 있다. 여기서 n 은 단위 시간 스텝에 대한 적용된 Koopman operator의 횟수이며 1인 경우 x_{k+1} 로 출력된다. Koopman operator가 다중으로 적용되는 경우는 다음 수식 (3)과 같이 표현될 수 있다.

$$\phi^{-1}(\kappa^n \phi(x_k)) = x_{k+n}. \quad (4)$$

수식 (3)에서 Koopman operator κ 를 적용할 때 마다 예측 오차가 발생할 수 있으며, 다중으로 적용하여 먼 미래의 예측을 시도하면 그 오차가 계속해서 누적되어 실제값과 예측값이 차이를 보이고, 예측 정확성이 열화될 수 있다.

본 논문에서는 이러한 누적 오차를 저감하기 위한 방법으로 그림 3과 같은 구조를 제안한다. 그림 3에서는 KAE에 다중의 초기 입력값을 입력할 수 있는 구조를 가진다. 그림 3에서 다중의 초기 입력값은 시간 스텝(시간 해상도) 1을 갖는 8개의 값으로 제시되어 있으며 KAE 모델의 시간스텝은 8로 정의되었다. 그림 2에서 KAE의 시간스텝은 1로 정의되어 있으며, 이는 Koopman operator κ 가 적용될 때마다 사전정의된 시간스텝 만큼 미래를 예측하는 시간 이동이 1 step 만큼 발생한다. 그림 3에서의 KAE는 시간스텝이 8로 사전 정의되어 학습된 모델이며, Koopman operator κ 가 적용되면 미래를 예측하는 시간 이동이 8 step 만큼 적용되는 구조이다.

제안하는 장기예측 방법의 핵심은, Koopman Autoencoder를 활용해 미래의 특정 시간에 대한 물리량을 예측할 때, 시간 해상도가 서로 다른 두 KAE가 동일한 물리 특성을 학습했다면, 낮은 시간 해상도를 갖는 KAE가 높은 시간

해상도를 갖는 KAE보다 예측 오류가 작을 수 있다는 것이다. 이는 두 KAE 모델의 은닉층 구성과 파라미터 환경이 동일함에도 불구하고, 낮은 시간 해상도를 갖는 KAE가 적은 시간 스텝으로 미래 시점에 빠르게 도달할 수 있기 때문이며, 두 모델이 학습해야 할 물리특성 또는 정보량이 동일하기 때문이다. 이러한 특성을 활용하여 본 논문에서 다중 입력 기반의 고시간 해상도 장거리 예측 KAE 모델을 제안한다.

그림 3에서는 그림 2와 같이 비선형시스템의 데이터 x_{k+1024} 까지 미래 예측을 시도하는 동일한 목표를 갖고있다. 그림 2에서는 데이터 x_{k+1024} 를 예측하기 위해 Koopman operator κ 를 1024번 적용하여야 하지만, 제안방법인 그림 3에서는 128번만 적용하면 목표 미래 시점의 데이터인 x_{k+1024} 를 예측할 수 있다. 이러한 방법으로 Koopman operator κ 를 더 적은 횟수로 적용하여 Koopman operator를 적용함에 따라 발생하는 예측 오차를 저감하는 동시에 동일한 미래 시점의 데이터 예측을 시도하고자 한다. 제안 방법을 요약하면, KAE 모델의 시간 해상도를 낮게 조정하여 모델 학습하고 조정된 시간 해상도에 대응하여 고시간 해상도의 다중 입력을 실시하는 것이다.

3. 모의실험

본 장에서는 제안한 KAE 기반 보간 모델의 성능 분석을 위해 세 가지 비선형 시스템으로부터 관측된 데이터셋에 대해 내재된 PDE를 학습하고, 모델의 Mean Square Error(MSE), Mean Absolute Percentage Error (MAPE)와 Symmetric MAPE(SMAPE) 성능을 확인한다. 비선형 물리 데이터셋에 대해서 시간에 따른 동역학 전개를 관장하는 governing equation을 학습하는 것을 모델 학습의 주요한 목적으로 하며, 데이터 보간은 모델의 데이터 예측 기능을 활용하여 수행한다. 데이터 보간 시나리오는 1,024 시간 스텝의 대규모 block missing이 발생하는 경우에 대해서 이를 보간 및 예측하는 성능을 확인한다.

제안 모델의 예측 성능을 비교하기 위해서 베이스라인 모델을 설정하고 학습하였다. 베이스라인 모델과 제안 모델의 은닉층 구성은 완전히 동일하며 학습 파라미터 수 또한 약 20만개로 동일하다. 두 모델의 인코더, Koopman 연산자, 디코더 모두 multilayer perceptron으로 동일하게 구성되었다. 베이스라인 모델의 시간 스텝은 1초, 제안 모델의 시간 스텝은 8초로 설정되었으며, 제안 모델이 8배 만큼 빠르게 동역학 전개가 가능하도록 학습 데이터의 시간 스텝 또한

각각 1초, 8초로 설정하였다. 베이스라인 모델은 단일 입력으로 1024초까지의 예측을 수행하며, 제안 모델 또한 다중 입력으로 1024초까지의 예측을 수행한다. 다중 입력은 2장에서 설명한 것과 같이, 1초의 시간 스텝을 갖는 8개의 입력으로 구성되어, 각각의 입력은 128 시간스텝만큼 예측 결과를 생성하여 총 1024개의 출력으로 시간순에 맞게 정렬되어 결합된다.

3.1 데이터셋

본 논문에서는 세 가지 유형의 비선형 시스템 (NAVIER-STOKES(smoke)[13], NAVIER-STOKES (viscous flow)[9], SHALLOW WATER[13])으로부터 관측된 이미지 데이터셋을 모의실험에 활용하였다. 학습 및 평가에 활용된 2차원 이미지 데이터의 크기는 64x64, 입력 데이터의 시간 윈도우는 10, 출력 데이터의 시간 윈도우는 40, 베이스라인 모델의 평가 데이터의 시간 윈도우는 1024, 제안 모델의 평가 데이터의 시간 윈도우는 128로 설정되었다. 세 가지 데이터셋에 대한 훈련 데이터 1080개, 검증 데이터 120개, 평가 데이터 120개의 이미지 세트를 생성하였다. 베이스라인 모델 학습을 위한 시간 스텝 T는 1, 제안 모델 학습을 위한 시간 스텝 T는 8로 설정되었다.

3.1.1 NAVIER-STOKES(smoke)

이 데이터셋에서는 유체(공기) 내에서 스칼라 장(연기 농도)의 전파를 모델링한다. 모델링은 Navier-Stokes 방정식과 Boussinesq 부력 항을 결합하고, 스칼라 장의 전파를 모델링하기 위해 수송 방정식을 결합하여 수행된다[13]. 이 방정식으로 모델링된 시스템의 상태는 스칼라 장 $c(t,x,y)$, x 방향 속도 $u(t,x,y)$, y 방향 속도 $v(t,x,y)$, 그리고 압력 $p(t,x,y)$ 로 구성되며, 초기 상태 (c_0, u_0, v_0, p_0) 에 대해 시간 구간 $[0, T]$ 에서 공간 영역 64x64에 대해 PDE를 풀어 데이터셋을 생성할 수 있다. Navier-Stokes 방정식과 수송 방정식은 다음과 같이 정의된다[13]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \tag{6}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + c, \tag{7}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right), \tag{8}$$

여기서 ν 는 0.002로 설정되었다.

3.1.2 NAVIER-STOKES-viscous flow

수학적으로, 비압축성 2차원 Navier-Stokes 방정식의

와도(vorticity) 형태는 다음과 같이 정의된다[9]:

$$\partial_t \omega + \mathbf{u} \cdot \nabla \omega = \nu \nabla^2 \omega + \nabla \times \mathbf{f}, \tag{9}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{10}$$

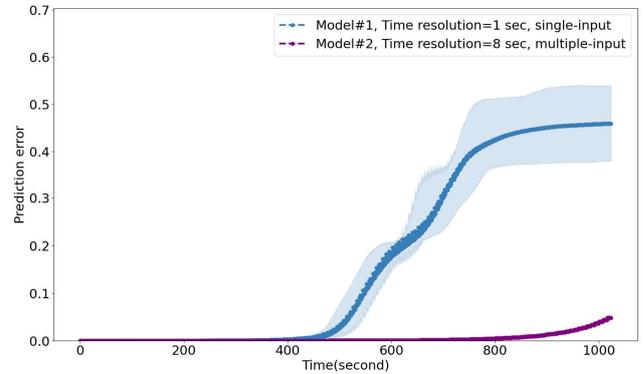


그림 4 Navier-Stokes(smoke) 데이터셋에 대한 제안 모델과 베이스라인 모델의 데이터 보간 성능

Fig. 4 Imputation performance of the proposed model and the baseline model on the Navier-Stokes(smoke) dataset

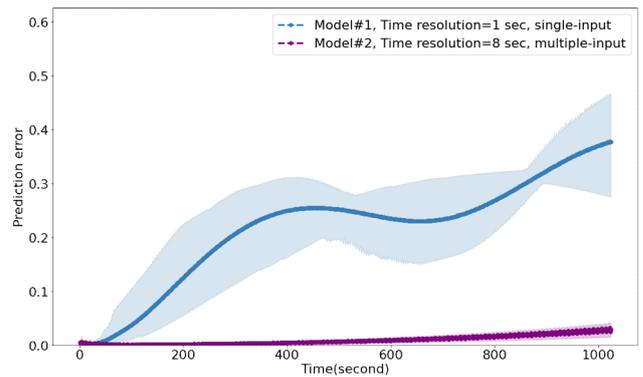


그림 5 Navier-Stokes(viscous flow) 데이터셋에 대한 제안 모델과 베이스라인 모델의 데이터 보간 성능

Fig. 5 Imputation performance of the proposed model and the baseline model on the Navier-Stokes(viscous flow) dataset

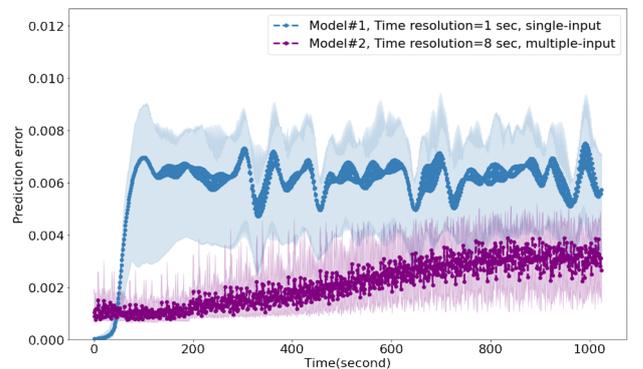


그림 6 Shallow Water 데이터셋에 대한 제안 모델과 베이스라인 모델의 데이터 보간 성능

Fig. 6 Imputation performance of the proposed model and the baseline model on the Shallow Water dataset

여기서 ω 는 와도의 스칼라 장을 나타내고, u 는 속도의 벡터

장을 정의하며, f 는 시간에 독립적인 강제 항을 나타낸다.

표 1 다중입력 Koopman Autoencoder의 데이터 보간(prediction) 성능

Table 1 Performance of data prediction for the Koopman Autoencoder

Dataset			Navier-Stokes(smoke)	Navier-Stokes (viscous flow)	Shallow Water
Single-Input (baseline)	dt=1s	MAPE	69.80	-	43.05
		SMAPE	72.85	11.85	82.45
		MSE	0.170	0.215	0.005
Multiple-Input (proposed)	dt=8s	MAPE	95.80	-	63.49
		SMAPE	95.55	78.75	89.70
		MSE	0.004	0.002	0.002

표 2 다중입력 Koopman Autoencoder의 데이터 복원(reconstruction) 성능

Table 2 Performance of data reconstruction for the Koopman Autoencoder

Dataset			Navier-Stokes(smoke)	Navier-Stokes (viscous flow)	Shallow Water
Single-Input (baseline)	dt=1s	MSE	0.0042	0.00011	0.00041
Multiple-Input (proposed)	dt=8s	MSE	4.9e-5	0.00015	0.00035

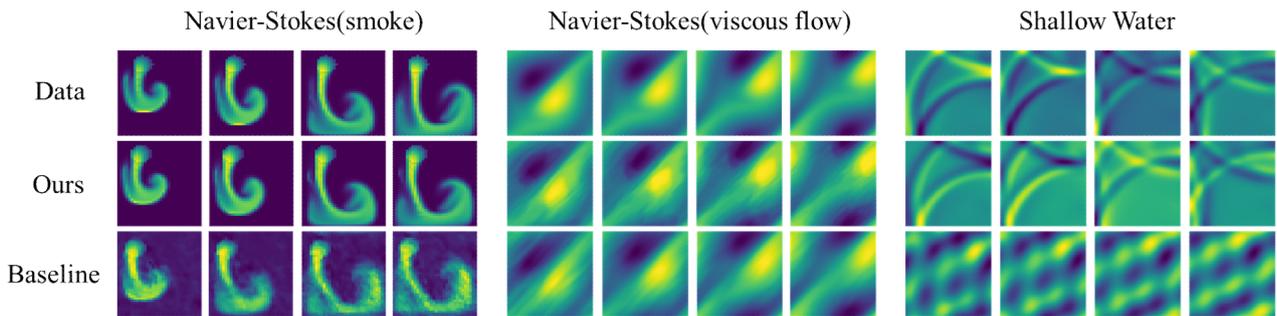


그림 7 제안 모델과 베이스라인 모델의 데이터 예측 비교

Fig. 7 Comparison of the prediction of the proposed model and the baseline model

점성 계수는 $\nu=10^{-3}$ 으로 설정되어 와도 ω 을 관측하여 데이터셋을 구성하였다.

3.1.3 SHALLOW WATER

Shallow Water 방정식은 얇은 수조 내에서 물의 거동을 시뮬레이션하는 편미분방정식(PDE) 체계다. Navier-Stokes 방정식을 적분한 버전으로, 수조나 이와 유사한 환경에서 물결, 조류, 쓰나미, 해안 흐름의 전파 등 동역학을 모델링하며 이를 예측하는 데 사용된다. 이 방정식이 모델링하는 시스템 상태는 파고 $h(t,x,y)$, x 방향 속도 $u(t,x,y)$, 그리고 y 방향 속도 $v(t,x,y)$ 로 구성된다. Shallow Water 방정식은 다음과 같이 정의된다:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \tag{11}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial x} = 0, \tag{12}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial y} = 0, \tag{13}$$

여기서 g 는 중력 계수이며, 파고 $h(t,x,y)$ 만을 관측하여 데이터셋을 구성하였다[13].

3.2 보간 성능 분석

그림 4, 5, 6에서 베이스라인 모델과 제안 모델의 보간 성능을 세 가지 데이터셋에 대해서 각각 도시하였다. 그림에서 모델#1은 베이스라인, 모델#2은 제안 모델을 가리키며, x축은 1초 간격의 시간 스텝으로 1024초까지 예측된 1024개의 데이터에 대해서 실제 데이터와의 차이인 MSE 값을 y축에 나타내었다. 그림 4-6에서 전반적으로 시간이 흐름에 따라 MSE 오차가 증가하는 추세가 보이며, 이는 쿠프만 연산자를 반복해서 적용함에 따라 발생한다고 볼 수 있다.

제안 모델의 오차는 베이스라인 모델의 오차보다 전반적으로 낮은 추세를 확인할 수 있으며, 이는 장기 예측 오차를 저감하기 위해 본 논문에서 제안한 저시간 해상도 데이터를 학습해서 Koopman operator 적용 횟수를 저감시킨

효과로 볼 수 있다. 베이스라인 모델이 Koopman 연산자를 1024번 적용하여 1024초까지의 예측 결과를 얻어내는 것과 대비하여 제안 모델은 128번만 Koopman 연산자를 반복적용하여 1024초까지 예측 결과를 얻어내기 때문에 누적 오차가 적게 발생한다고 해석할 수 있다. 이러한 오차 저감 효과를 얻기 위해서는, 각기 다른 시간해상도의 데이터셋에 내재되어 학습해야 할 다이나믹스 정보량이 유사해야 하는 조건이 필요하며, 완전히 동일한 두 모델이 그 다이나믹스를 학습할 수 있는 가정이 필요하다. 즉, 본 실험에서 시간 스텝을 1초와 8초로 설정하였는데, 1초와 3600초 등으로 설정한다면, 동일한 모델이 데이터셋의 다이나믹스를 학습하기 어려울 수 있다. 또한 Shallow Water 2차원 이미지 데이터셋은 수직 방향의 흐름이나 깊이에 따른 속도 변화 등의 상황과 특징은 반영되지 않아, 실제 물리 현상을 예측하기 위해 깊이, 속도 등의 부가적 차원 데이터를 활용할 필요가 있다.

표 1과 표 2에서는 두 모델의 데이터 보간 성능과 데이터 복원 성능을 도시하였다. 데이터 보간 성능은 세 가지 데이터셋에서 모두 제안 모델의 MAPE, SMAPE, MSE 성능이 모두 개선되어 우수함을 보이고 있다. 데이터 복원 성능에 대해서는 데이터셋들에 대해서 일관적인 성능 개선을 보이지 않고 있으며, 제안 모델의 학습 방법이 예측에 관해서만 개선 효과가 있음을 알 수 있다.

그림 7에서는 세 가지 데이터셋에 대해서 육안으로 확인할 수 있는 두 모델의 데이터 예측 결과에 대한 비교이다. 그림 4-6에서 예측 결과의 오차가 제안 모델이 적어서 우수한 것을 고려하였을 때, 베이스라인 모델의 결과보다 제안 모델의 결과 이미지가 참값에 더 유사하게 예측이 이루어졌다고 볼 수 있다.

4. 결론

본 논문에서는 비선형 시스템에서의 장기 데이터 예측을 수행하기 위해 Koopman 오토인코더 기반 딥러닝 모델의 학습 방법을 제안하였다. 모의 실험 결과에 의하면, 데이터 예측 성능을 향상하기 위해 제안한 시간 스텝의 크기를 증대하여 데이터의 시간 해상도를 저감하는 방법이 Koopman 오퍼레이터의 반복 적용에 따른 누적 오차를 저감하는 효과가 있음을 비선형 데이터셋 3종을 통해 검증하였다. 또한 제안 방법은 데이터의 시간 해상도를 저감하는 방법을 기초로 하므로, 모델의 크기와 복잡도를 증가시키지 않고 예측 오차를 저감할 수 있으므로 실용성 측면에서 개선되었다고 볼 수 있다. 본 논문에서 제안한 비선형 동적 시스템을 장기 예측하는 방법은 물리 가상 시뮬레이션을 구현해서 미래의 물리 현상을 예측하는 분야, 비선형 시스템에 대한 이상진단을 수행하는 분야 등에 활용될 수 있다.

Acknowledgements

이 논문은 2024년도 정부(산업통상자원부)의 재원으로 한국에너지기술 평가원(KETEP)의 ‘차세대 AC/DC Hybrid 배전 네트워크 기술개발사업’으로 지원을 받아 수행한 연구 과제입니다. (No. 202300281219)

References

- [1] W. Cao, D. Wang, J. Li, H. Zhou, L. Li, and Y. Li, “Brits: Bidirectional recurrent imputation for time series,” *NeurIPS*, vol. 31, 2018.
- [2] A. Cini, I. Marisca, and C. Alippi, “Filling the Gaps: Multivariate time series imputation by graph neural networks,” *Proc. ICLR*, 2022.
- [3] C. F. Ansley, and R. Kohn, “On the estimation of arima models with missing values,” *Proc. Time series analysis of irregularly observed data*. Springer, pp. 9–37, 1984.
- [4] R. H. Shumway, and D. S. Stoffer, “An approach to time series smoothing and forecasting using the EM algorithm,” *Journal of time series analysis*, vol. 3, no. 4, pp. 253–264, 1982.
- [5] F. V. Nelwamondo, S. Mohamed, and T. Marwala, “Missing data: A comparison of neural network and expectation maximization techniques,” *Current Science*, pp. 1514–1521, 2007.
- [6] H. Trevor, T. Robert, and F. Jerome, “The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction,” 2009.
- [7] M. Liu, et al., “PriSTI: A conditional diffusion framework for spatiotemporal imputation,” *arXiv preprint arXiv:2302.09746*, 2023.
- [8] O. Azencot et al., “Forecasting sequential data using consistent koopman autoencoders,” *Int. Conf. Machine Learning (ICML)*, pp. 475–485, 2020.
- [9] R. Wang, Y. Dong, S. O. Arik, and R. Yu, “Koopman neural operator forecaster for time-series with temporal distributional shifts,” *Proc. The Eleventh Int. Conf. Learning Representations (ICLR)*, pp. 1–15, Feb. 2023.
- [10] M. Raissi, P. Perdikaris, and G.E. Karniadakis, “Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations,” *J. Comput. Phys.* vol. 378, pp. 686–707, 2019.
- [11] D. Kochkov, J.A. Smith, A. Alieva, Q. Wang, M.P. Brenner, and S. Hoyer, “Machine learning-accelerated computational fluid dynamics,” *Proc. Natl. Acad. Sci.*, vol. 118, no. 21, 2021.
- [12] B. O. Koopman, “Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space,” *Proc. the National Academy of Sciences*, vol. 17, pp. 315–318, 1931.
- [13] V. Iakovlev, M. Heinonen, and H. Lähdesmäki. “Learning

space-time continuous neural PDEs from partially observed states,” arXiv preprint arXiv:2307.04110, pp. 1-21, 2023.

- [14] I. Nayak, D. Goswami, M. Kumar, and F. Teixeira, “Temporally consistent koopman autoencoders for forecasting dynamical systems,” arXiv preprint arXiv:2403.12335, 2024.
- [15] O. Azencot, N. B. Erichson, V. Lin, and M. Mahoney, “Forecasting sequential data using consistent koopman autoencoders,” Proc. Int. Conf. Mach. Learn., pp. 475-485, 2020.
- [16] J. Choi, S. Krishnan, and J. Park, “Koopman autoencoder via singular value decomposition for data-driven long-term prediction,” arXiv preprint arXiv:2408.11303, 2024.



고석갑(Seok-Kap Ko)

He received the B.S., M.S., and Ph.D. degrees in information telecommunication engineering from Soongsil University, Seoul, South Korea, in 1997, 2002, and 2009, respectively. Since 2008, he has been a Principal Research Engineer with the Electronics and Telecommunications Research Institute (ETRI). His research interests include machine learning for energy management systems.

저자소개



황유민(Yu Min Hwang)

He received the B.S. and Ph.D. degrees from the Department of Wireless Communications Engineering, Kwangwoon University, South Korea, in 2012 and 2018, respectively. He was a Postdoctoral Research Fellow with the Department of Electrical and Computer Engineering, Western University, Canada, from 2019 to 2020. He is currently with the Electronics and Telecommunications Research Institute (ETRI). His research interests include object recognition, object tracking, deep learning, and anomaly detection.



박상준(Sangjun Park)

He received the B.S. degree in computer engineering from Chungnam National University, South Korea, in 2009, and the Ph.D. degree in electrical engineering and computer science from Gwangju Institute of Science and Technology, South Korea, in 2019. Since 2020, he has been working with the Electronics and Telecommunications Research Institute (ETRI). His research interests include information theory, optimization, compressed sensing and deep neural networks.



이현용 (Hyun Yong Lee)

He received the B.S. degree in computer science from Chonnam National University, South Korea, in 2003, and the M.S. and Ph.D. degrees in computer science from Gwangju Institute of Science and Technology, South Korea, in 2005 and 2010, respectively. He is currently a Principal Researcher with the Electronics and Telecommunications Research Institute (ETRI). His research interests include diagnosis, anomaly detection, deep learning, and uncertainty.