粒子滤波器采样分布的无监督学习

Fernando Ga ma、Nicolas Zilberstein、Martin Sevilla、Richard G. Baraniuk 和 Santiago Segarra

arXiv:2302.01174v1 [eess.SP] 2 Feb 2023

摘要——**准确估计非线性动力系统的状态，对其设计、综合和分析至关重要。粒子滤波器是一类估计器，它们通过从采样分布中模拟轨迹，并根据其重要性权重对轨迹进行加权平均来构造。要使粒子滤波器在计算上可行，必须能够通过从采样分布中抽样来模拟轨迹。同时，这些轨迹还需要反映非线性动力系统的实际情况，才能确保所得估计器准确。因此，粒子滤波器的关键在于设计既易于抽样、又能产生准确估计器的采样分布。在这项工作中，我们提出学习采样分布。我们提出了四种利用观测测量值学习采样分布的方法。其中三种是参数化方法，用于学习多元高斯分布的均值和协方差矩阵；每种方法都利用数据的不同特性（一般特性、时间结构或图结构）。第四种方法是一种非参数替代方案，直接学习均匀随机变量的变换。所有四种方法均以无监督方式训练，通过最大化状态可能产生观测测量值的似然来实现。我们的计算实验表明，与设计得到的最小退化采样分布相比，学习得到的采样分布表现更佳。**

索引词—**机器学习、无监督学习、粒子滤波、神经网络、图神经网络**

I. 引言

非线性动力系统是科学与工程领域众多问题的模型。例如，由于材料具有天然的磁滞特性，非线性动力系统被用于描述包含铁磁电感器的电路 [2]。它们一直是控制理论 [3]中广受欢迎的工具，在航天器系统[4],的控制器设计与综合、电动汽车[5], 的能耗管理、风电系统 [6],的纹波抑制，乃至程序化广告 [7]的实时竞价中都发挥着关键作用。

由于非线性动力系统具有重要的实际意义，相关研究历史悠久 [8]。解的存在性与唯一性、对初始条件的依赖性、系统的稳定性以及扰动分析等主题长期以来一直是该领域的研究重点 [9]。近期的研究成果涉及耗散性及其与稳定性的联系 [10],辨识[11],和振荡 [12]。

在本文中，我们专注于估计系统的状态[13], [14]。非线性动力系统的综合、设计或分析中几乎任何需要作出的决策，都必须依赖于对系统状态的充分了解。对系统的不准确建模，或无法访问状态——而只能测量状态的某个函数——是估计任务面临的主要障碍。

人们已经开发出许多估计器，通过对系统作出不同假设来达到不同程度的精度保证。例如，假设线性动力学并带有高斯噪声，会得到线性最小二乘估计器[15]。另一个例子是假设模型是非线性的，但其转移概率的条件性遵循马尔可夫性质 [16]。在这种情况下，通常可以得到最大后验估计。然而，这些方法要么过度简化了模型，要么由于所涉及的高维积分而变得计算上难以处理。

粒子滤波已成为一种算法工具，能够以较高的计算效率估计状态 [17]–[19]。从本质上说，粒子滤波包括模拟感兴趣系统的合理轨迹，然后对这些轨迹进行加权平均，以获得准确的估计器 [20]。粒子滤波面临的挑战在于设计一种采样分布，既能生成逼真的轨迹，又易于从中采样 [21], [22]。

粒子滤波器利用大数定律，在模拟足够多粒子的情况下，为估计器的准确性以及其向状态真实值收敛提供一定保证。然而，这些结果往往依赖于使用特定的采样分布，而这些分布可能只在有限的场景中具备较高的计算效率 [23]。此外，粒子滤波器还会受到权重退化的影响，即只有少数模拟轨迹具有意义，这会严重影响最终估计器的准确性 [24]。因此，大多数粒子滤波研究都围绕采样分布的适当设计展开 [25], [26]。然而，在这项工作中，我们利用现代深度神经网络技术，从观测测量值中学习采样分布，而无需获取真实轨迹。

深度神经网络由一系列模块级联而成，每个模块都会先进行线性变换，再应用一个通常为非线性的激活函数 [27]。这些模块称为层，级联层的数量决定了神经网络的深度。具体的矩阵

本研究部分由美国国家科学基金会资助，项目编号为 CCF-2008555。F. Gama 曾就职于美国得克萨斯州休斯敦 77005 的莱斯大学电气与计算机工程系。N. Zilberstein、M. Sevilla、R. Baraniuk 和 S. Segarra 任职于美国得克萨斯州休斯敦 77005 的莱斯大学电气与计算机工程系。电子邮箱：fgama@ieee.org,{nzilberstein,msevilla,richb,segarra}@rice.edu。部分研究结果已发表于 [1]。

每层线性变换所使用的数值通常由梯度下降算法（或其变体）确定，以尽量最小化观测数据上的某个损失函数。确定线性变换实际取值的过程称为训练 [28]。

在这项工作中，我们提出了四种不同的深度神经网络框架，用于学习粒子滤波器的采样分布。其中三种是参数化的——学习高斯分布的均值和协方差矩阵；另一种是非参数化的——学习对均匀随机变量的任意变换。这些框架自然会得到易于采样的分布（多元正态分布或均匀分布）。我们以无监督方式训练这些深度神经网络。这意味着我们只需获得一条测量值轨迹，而无需知道状态的真实值。通过学习能够在给定模型下最大化观测轨迹似然的深度神经网络参数，我们可以得到一个能够模拟出良好轨迹的采样分布。简而言之，学习采样分布通常比设计采样分布更容易，同时也能带来更大的灵活性和适应性。

许多研究提出利用学习来改进粒子滤波。通常，学习主要用于估计模型，或将变量变换到更适合采样的空间 [29]。近期，有研究提出将条件归一化流用作提议分布的参数化形式 [30]。循环神经网络（RNN）也曾用于学习多元正态采样分布的均值以及粒子权重 [31]。最重要的是，在所有这些情况下，神经网络都是通过监督学习进行训练的。这需要获得系统的真实轨迹，而这些轨迹通常无法获取；此外，这也无法保证测试时观测到的轨迹足够相似，从而确保泛化。我们通过提出一种基于无监督学习的可训练粒子滤波器，解决了这一根本性缺陷。

在第 II 节中，我们回顾粒子滤波的基础知识并介绍相关记号。在第 III 节中，我们介绍采样分布的无监督学习框架。

- 首先，我们假设采样分布为多元正态分布，并使用全连接神经网络学习随时间变化的均值和协方差矩阵（第 III-A 节）。
- 其次，我们考虑使用循环神经网络（RNN）架构来学习均值和协方差矩阵（第 III-B 节）。循环神经网络擅长跟踪轨迹的历史值，因此有可能使分布从位于更久远过去的样本中学习。
- 第三，我们考虑利用数据结构的架构。具体而言，我们考虑图神经网络（GNN），这类架构专门用于处理基于图的数据（第 III-C 节）。当处理大型分布式非线性动力系统时，图神经网络尤其有用，因为系统各组件之间的连接较为稀疏。
- 第四，我们考虑一种非参数方法（第 III-D 节）。更具体地说，我们从均匀分布中采样，并使用深度神经网络学习均匀分布与表示状态轨迹的随机变量之间的任意非线性变换。

我们通过解释如何利用最大化模型的似然进行无监督学习来结束第 III 节（第 III-E 节）。在第 IV 节中，我们运行了一系列模拟示例，以展示所学习采样分布相对于所设计基线的性能。我们考虑了线性高斯（第 IV-A 节）、非线性高斯（第 IV-B 节）、线性非高斯（第 IV-C 节）以及非线性非高斯（第 IV-D 节）动力系统。总体而言，我们观察到，所学习的采样分布比所设计的最小退化采样分布表现更好 [17]。最后，我们在第 V 节得出结论。

II. 粒子滤波

考虑一个由状态序列 $\{\mathbf{x}_t\}_{t\geq 0}$ 描述的动力系统，其中 $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^N$ 对所有 $t \in \mathbb{N}_0$ 均成立。不同时间点的状态转移满足马尔可夫性质，因此可由以下转移分布完全刻画：

$$\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1} \sim p(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) \tag{1}$$

对所有 $t \geq 1$ 均成立。初始状态服从以下分布：

$$\mathbf{x}_0 \sim p(\mathbf{x}_0). \tag{2}$$

这些状态被视为不可观测。相反，可获取的是测量序列 $\{\mathbf{y}_t\}_{t\geq 0}$，其中 $\mathbf{y}_t \in \mathbb{R}^M$ 对所有$t \in \mathbb{N}_0$ 均成立。给定当前状态值，测量值服从以下分布：

$$\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t \sim p(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t) \tag{3}$$

对所有 $t \geq 0$ 均成立。这三个分布 (1)–(3) 被视为已知。

目标是估计一个依赖于系统真实状态 $\mathbf{z}_t$ $\mathbf{x}_{0:t} = \{\mathbf{x}_0, \ldots, \mathbf{x}_t\}$ 的目标量。我们将其记为 $\mathbf{z}_t = \mathbf{f}_t(\mathbf{x}_{0:t})$，其中 $\mathbf{f}_t$ 是某个（可能随时间变化的）映射。为了根据观测值序列$\mathbf{y}_{0:t} = \{\mathbf{y}_0, \ldots, \mathbf{y}_t\}$估计 $\mathbf{z}_t$，我们使用条件期望构造估计器 $\tilde{\mathbf{z}}_t$，如下所示：

$$\tilde{\mathbf{z}}_t = \mathbb{E}\big[\mathbf{z}_t|\mathbf{y}_{0:t}\big] = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathsf{f}_t(\mathbf{x}_{0:t})\mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})\, d\mathbf{x}_{0:t}. \tag{4}$$

根据贝叶斯定理，给定测量值的状态轨迹后验分布$\mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$可递归地写为

$$\mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t}) = \mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t-1}|\mathbf{y}_{0:t-1})\frac{\mathsf{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)\mathsf{p}(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})}{\mathsf{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{y}_{0:t-1})}. \tag{5}$$

注意，更新规则的分子，即 $\mathsf{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)\mathsf{p}(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})$，可根据 (1)–(3) 直接计算。分母 $\mathsf{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{y}_{0:t-1})$ 也可根据 (1)–(3) 计算：对时间$\mathbf{x}_t$ 和$\mathbf{x}_{t-1}$ 的所有可能状态进行边缘化，并使用递归中的前一步$\mathbf{p}(\mathbf{x}_{0:t-1}|\mathbf{y}_{0:t-1})$。因此，由于所有分布均已知，从技术上讲，应该可以计算

条件期望估计量 (4)。然而，这涉及通常难以处理的高维积分。因此，(4) 通常无法在实践中使用。

可以利用大数定律提出一种实用的估计器：独立地获取 K 样本 $\{\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t}\}_{k=1}^K$，使其同分布于 $\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t} \sim \mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$，然后对这些样本取平均。不过需要注意的是，即使我们能够获得后验分布 $\mathsf{p}(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$，也可能仍然无法从中进行采样。

粒子滤波包括从另一分布 $\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t} \sim \pi(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$ 中采样 $\{\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t}\}_k$，并将估计值计算为

$$\hat{\mathbf{z}}_t = \sum_{k=1}^{K} \hat{w}_t^{(k)} \mathsf{f}_t\big(\mathbf{x}_{0:t}^{(k)}\big)\ ,\ \hat{w}_t^{(k)} = \frac{\tilde{w}_t^{(k)}}{\sum_{k'=1}^{K} \tilde{w}_t^{(k')}}, \tag{6}$$

其中，归一化权重 $\hat{w}_t^{(k)}$ 由未归一化权重集合 $\{\tilde{w}_t^{(k)}\}_k$ 计算得到，每个未归一化权重均表示为 $\tilde{w}_t^{(k)} = \mathsf{p}(\mathbf{y}_{0:t}|\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{t}:)\ \mathsf{p}(\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{t}:)/\pi(\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{t}:|\mathbf{y}_{0:t})$。要使式（6）中的估计可处理，必须能够以计算可行的方式从 $\pi(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$ 中进行采样。如果不对采样分布 $\pi(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$施加进一步限制，则该粒子滤波方法称为贝叶斯重要性采样，该分布 π 称为重要性函数，而这些权重称为重要性权重 [32]。样本 $\{\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t}\}_k$ 通常被称为粒子或轨迹。

为了进一步提高粒子滤波的计算可行性，采样分布 π 通常被限制为如下形式

$$\pi(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t}) = \pi(\mathbf{x}_0|\mathbf{y}_0) \prod_{\tau=1}^{t} \pi(\mathbf{x}_\tau|\mathbf{x}_{0:\tau-1}, \mathbf{y}_{0:\tau}). \tag{7}$$

这意味着，$\pi(\mathbf{x}_{0:t}|\mathbf{y}_{0:t})$ 可以随时间递归计算。然后，对于每个时间 t，只需对 $\mathbf{x}_t^{(k)} \sim \pi(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t-1}, \mathbf{y}_{0:t})$ 进行采样。未归一化权重也可以按照以下方式递归计算

$$\tilde{w}_t^{(k)} = \tilde{w}_{t-1}^{(k)} \frac{\mathsf{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t^{(k)})\mathsf{p}(\mathbf{x}_t^{(k)}|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)})}{\pi(\mathbf{x}_t^{(k)}|\mathbf{x}_{0:t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_{0:t})}. \tag{8}$$

采用形式为 (7) 的采样分布进行粒子滤波，通常称为序贯重要性采样 [20]。

虽然在计算上较为方便，但采用如 (7) 所示的采样分布会导致粒子滤波遭受权重退化。这意味着，若将观测值 $\mathbf{y}_{0:t}$ 视为随机变量，权重的无条件方差会随时间 [33] 增大。实际影响是，随着时间推移，只有一个粒子承载全部权重，其余粒子则变得无足轻重。这会影响估计器 (6) 的质量，因为它实际上依赖于单条轨迹。若采样分布选择为满足以下条件，则在给定 $\mathbf{x}_0^{(k)}{}_{:t-1}$ 和 $\mathbf{y}_{0:t}$的条件下，权重的方差可以最小化： [34]

$$\pi(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{0:t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_{0:t}) = \mathsf{p}(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t). \tag{9}$$

在这种情况下，未归一化的权重更新变为 $\tilde{w}_t^{(k)} = \mathsf{p}(\mathbf{y}\mathbf{x})$。然而，从 $\tilde{w}_{t-1}^{(k)}\ \ t|\ {}_{t-1}^{(k)}\ \ t|\ {}_{t-1}^{(k)}\ \ t$ $\mathsf{p}(\mathbf{x}\mathbf{x},\mathbf{y})$ 中采样通常是难以实现的。

权重退化可以通过 [cf.(9)] 降低，但无法完全避免。因此，通常使用重采样来减轻其对估计器 (6) 的影响。简而言之，重采样是根据轨迹的权重随机抽取轨迹，从而赋予权重较大的轨迹更高的重要性。更具体地说，权重退化程度通过以下方式衡量：

$$\hat{K}_t^{\text{eff}} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{K} (\hat{w}_t^{(k)})^2}, \tag{10}$$

它是衡量对估计器有实际贡献的粒子数的一个替代指标。如果有效粒子数低于某个阈值 $\hat{K}^{\text{thres}}$，则会根据一种为选择轨迹 k赋予概率 $\tilde{w}_t^{(k)}$ 的分布，对轨迹进行重采样。经过 K 次采样后，将得到一组新的 K 条轨迹（其中一些可能会重复），并将所有粒子的权重重置为 $1/K$ 。显然，重采样会影响粒子的独立同分布假设，因此许多理论结果（如收敛性）将不再成立 [35]。

粒子滤波器是一种计算简单的非线性系统估计器，已展现出显著的成功。然而，要获得良好的结果，必须仔细设计采样分布 π，使其既易于采样，又能产生良好的估计器 (6)。已有许多设计方法被提出 [21]。接下来，我们不再对其进行设计，而是提出并讨论几种架构，以无监督方式从数据中学习采样分布。

III. 采样分布的无监督学习

为粒子滤波器设计一种优良的采样分布，使其既易于采样，又能取得令人满意的性能，是一个颇具挑战的问题。接下来，我们提出利用测量序列$\{\mathbf{y}_t\}_{t\geq 0}$ 来学习 合适的采样分布。首先，我们用多元正态分布对采样分布进行参数化，并通过算法展开从数据中学习均值和协方差矩阵（第III-A节）。其次，我们使用循环神经网络（RNN），学习一种能够跟踪轨迹过去取值的隐藏状态（第III-B节）。第三，我们使用图神经网络，利用数据的数据结构来提升模型的可扩展性（第III-C节）。第四，我们学习一种由多层感知机组成的任意变换（第III-D节）。最后，我们讨论如何仅利用可用的测量序列，以无监督方式学习这些采样分布（第III-E节）。第IV节给出了在各种不同场景下的仿真结果。

A. 多元正态参数化

一种容易进行采样的分布是多元正态分布。因此，我们选择使用该分布来参数化采样分布 π。多元正态分布完全由

均值向量和协方差矩阵决定。由于采样分布 π 必须依赖截至当前时间 t 的轨迹 $\{\mathbf{x}_\tau^{(k)}\}_{\tau=0}^{t-1}$ 和测量值 $\{\mathbf{y}_\tau\}_{\tau=0}^{t}$，我们提出学习这些变量与多元正态分布的均值和协方差矩阵之间的映射。

具体而言，我们考虑全连接神经网络（也称为多层感知机；MLP），该网络受（9）启发，以前一状态 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 和当前测量值 $\mathbf{y}_t$ 作为输入，并输出它们的多元正态分布的均值和协方差矩阵。即，

$$\mathbf{x}_t^{(k)} \sim \pi(\mathbf{x}_t^{(k)}|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t) = \mathcal{N}\big(\boldsymbol{\mu}_t, \boldsymbol{\Sigma}_t\big), \tag{11}$$

均值向量为

$$\boldsymbol{\mu}_t = \boldsymbol{\mu}_t\big(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t\big) \tag{12}$$

协方差矩阵为

$$\boldsymbol{\Sigma}_t = \boldsymbol{\Sigma}\big(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t\big). \tag{13}$$

式（12）和（13）中的等式均用于表示：均值向量和协方差矩阵实际上取决于第 k 条轨迹在时间 t 的状态前一值 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 以及测量值$\mathbf{y}_t$。

$\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$、$\mathbf{y}_t$ 与时间 t 的均值 $\boldsymbol{\mu}_t$ 之间的映射由全连接神经网络 NN_t^μ 给出

$$\boldsymbol{\mu}_t\big(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t\big) = \mathsf{NN}_t^\mu\big(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t\big). \tag{14}$$

这是一个由多个模块级联而成的结构，每个模块都执行一个由矩阵 $\mathbf{W}_{t,\ell}^\mu$ 和偏置向量 $\mathbf{b}_{t,\ell}^\mu$表征的仿射变换（针对模块 ℓ），随后应用激活函数 $\rho : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，并将其逐元素作用于仿射变换[28,Ch. 6]的输出。该过程可以简洁地写为

$$\mathsf{NN}_t^\mu\big(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t\big) = \mathbf{z}_{t,L}^\mu \text{ with } \mathbf{z}_{t,\ell}^\mu = \rho\big(\mathbf{W}_{t,\ell}^\mu \mathbf{z}_{t,\ell-1}^\mu + \mathbf{b}_{t,\ell}^\mu\big) \tag{15}$$

对于 L 个模块，使得 $\ell = 1, \ldots, L$。本质上，每个模块（先执行仿射变换，再应用激活函数）都作用于前一个模块的输出，从而形成级联。第一个模块的输入 $\mathbf{z}_{t,0}^\mu$ 由前一状态与当前测量值 $[(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)})^\mathsf{T}, \mathbf{y}_t^\mathsf{T}]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{N+M}$ 拼接而成。这意味着，第一个仿射变换中的矩阵 $\mathbf{W}_{t,1}^\mu$ 的大小为 $F_1 \times (M+N)$，其中 F_1 的值称为模块 1 输出端的（隐藏）特征数。我们还有 $\mathbf{b}_{t,1}^\mu \in \mathbb{R}^{F_1}$。一般而言，$\mathbf{W}_{t,\ell}^\mu \in \mathbb{R}^{F_\ell \times F_{\ell-1}}$ 和 $\mathbf{b}_\ell \in \mathbb{R}^{F_\ell}$，因此每个模块都会将 $F_{\ell-1}$ 个输入特征变换为 F_ℓ 个输出特征。多层感知机的输出是最后一层的输出 $\mathbf{z}_{t,L}^\mu \in \mathbb{R}^{F_L}$。请注意，由于该输出表示均值 $\mathbf{z}_{t,L}^\mu = \boldsymbol{\mu}_t$ 的值，因此必须满足 $F_L = N$，它是采样状态 $\mathbf{x}_t^{(k)}$ 的大小。激活函数ρ：$\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 逐元素作用于每个仿射变换的输出，因此不会改变维度。

在机器学习中，构成每个模块仿射变换的矩阵和向量集合 $\boldsymbol{\Theta}_t^\mu = \{\mathbf{W}_{t,\ell}^\mu, \mathbf{b}_{t,\ell}^\mu\}_{\ell=1}^L$ 称为全连接神经网络的参数。这些参数通常通过求解优化问题 [28, 第 8] 章，从数据中学习得到。参见第III-E节了解更多详情。模块的数量 L以及每个模块输出端的特征数量 F_ℓ $\ell = 1, \ldots\ldots, L-1$ 属于设计选择，称为超参数。虽然存在选择超参数的方法 [36], , 但通常通过实验来确定。激活函数 ρ 也属于设计选择，通常是非线性函数，例如修正线性单元 $\rho(x) = \mathrm{ReLU}(x) = \max\{x, 0\}$，或双曲正切函数$\rho(x) = \tanh(x)$。

我们指出，在 (15) 中，我们选择使用一个不同的全连接神经网络，将前一状态值 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 和测量值$\mathbf{y}_t$ 映射到目标均值 $\boldsymbol{\mu}_t$，每个时刻对应一个网络，如下标 t所示。这种方法称为算法展开 [37]。

选择全连接神经网络来参数化从前一状态值 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 和当前测量值 $\mathbf{y}_t$ 到目标均值 $\boldsymbol{\mu}_t = \mathsf{NN}_t^\mu(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t)$ 的映射，主要有两个原因。从理论角度来看，只要特征数量足够多，全连接神经网络就能以任意精度逼近任何博雷尔可测函数。这称为通用逼近定理 [38], [39]。从实践角度来看，由于神经网络的可学习参数位于架构的线性运算中，而不在线性运算之外的非线性部分，因此使用基于梯度的方法训练神经网络相对容易。这使得优化问题更容易求解 [28,第 8] 章

为了将前一状态和当前测量值映射到协方差矩阵，我们提出先利用全连接神经网络学习数据的表示，再据此构建基于距离的核。更具体地说，

$$\boldsymbol{\Sigma}_t = \mathbf{C}\ \mathsf{K}(\mathbf{z}_t)\ \mathbf{C}^\mathsf{T} \tag{16}$$

其中 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 是一个可从数据中学习的矩阵，而 $\mathsf{K}(\mathbf{z}_t) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 是一个基于距离的核矩阵，例如

$$[\mathsf{K}(\mathbf{z}_t)]_{ij} = \exp\big(-([\mathbf{z}_t]_i - [\mathbf{z}_t]_j)^2\big) \tag{17}$$

对于通过神经网络得到的表示$\mathbf{z}_t$，其形式如下：

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{z}(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t) = \mathsf{NN}^\Sigma(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t). \tag{18}$$

基本上，我们首先将前一状态 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 和当前测量值 $\mathbf{y}_t$ 变换为表示向量 $\mathbf{z}_t \in \mathbb{R}^N$，如式 (18) 所示。然后，我们按照式 (17) 计算基于距离的核矩阵 $\mathsf{K}(\mathbf{z}_t) \in \mathbb{R}^{N \times N}$。最后，我们学习矩阵$\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times N}$，以考虑式 (16) 所述方差分量可能发生的方向变化和旋转。总体而言，所得协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_t$ 可保证为半正定矩阵。

请注意，由于用于构建表示$\mathbf{z}_t$ 的神经网络(18)的输入会随时间变化，因此协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_t$ 在每个时间点都不同。然而，所有时间点使用的学习架构都相同。需要从数据中学习的参数集合包括神经网络(18)每一层的矩阵$\mathbf{W}_\ell^\Sigma \in \mathbb{R}^{F_\ell \times F_{\ell-1}}$ 和偏置向量$\mathbf{b}_\ell^\Sigma \in \mathbb{R}^{F_\ell}$，以及

式(16)中的矩阵$\mathbf{C}$。因此，可学习参数集合$\boldsymbol{\Theta}^{\Sigma}=\{\{\mathbf{W}_{\ell}^{\Sigma},\mathbf{b}_{\ell}^{\Sigma}\}_{\ell=1}^{L},\mathbf{C}\}$在所有时间点都相同。为完整起见，我们指出，与式(15)类似，神经网络(18)的输入是前一状态与当前测量值$\mathbf{z}_{t,0}^{\Sigma}=[(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)})^{\mathsf{T}},\mathbf{y}_{t}^{\mathsf{T}}]^{\mathsf{T}}$的拼接，因此$F_0=N+M$。同样，式(18)中的表示是取自最后一层的输出$\mathbf{z}_t=\mathbf{z}_{t,L}^{\Sigma}$，因此$F_L=N$。将学习协方差矩阵的架构设为不随时间变化，是为了避免参数数量随时间和状态维度的平方（通过可学习矩阵$\mathbf{C}$）成比例增长。这与学习均值的架构不同，后者的参数数量随时间和状态维度成比例增长，而非随其平方增长。

B. 循环神经网络

使用多元正态分布对采样分布π进行参数化后，便于进行采样。按照第 III-A 节所述学习均值和协方差矩阵时，仅考虑了当前测量值和状态的前一时刻值。虽然最小退化采样分布（9）对此有所提示，但纳入不止一个即时过去时刻的过去信息可能会有所帮助。为避免维度不断增加，我们采用循环神经网络（RNN）[28, 第 10], [40] 章。

循环神经网络是为从序列数据中学习而设计的机器学习架构。给定一个输入序列，它们会学习一种称为隐藏状态的内部表示。我们希望该隐藏状态能够捕获序列中与当前任务相关的过去信息。更具体地说，给定输入序列（在我们的情况下为$\{[(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)})^{\mathsf{T}},\mathbf{y}_t^{\mathsf{T}}]^{\mathsf{T}}\}_t$），会计算出一系列内部状态$\{\mathbf{z}_t\}_t$，其中$\mathbf{z}_t\in\mathbb{R}^H$的计算方式为

$$\mathbf{z}_t=\rho\Big(\mathbf{A}\mathbf{z}_{t-1}+\mathbf{B}\begin{bmatrix}\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}\\ \mathbf{y}_t\end{bmatrix}\Big). \tag{19}$$

矩阵$\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{H\times H}$和$\mathbf{B}\in\mathbb{R}^{H\times(M+N)}$是从数据中学习得到的参数。请注意，这些矩阵对所有时间点都相同，因此与第 III-A 节中的方法不同，需要学习的参数数量不取决于序列的长度。

随后，可以在每个时刻对隐藏状态进行仿射变换，从而学习多元正态分布的均值

$$\boldsymbol{\mu}_t=\mathbf{W}_{\mathsf{RNN}}^{\mu}\mathbf{z}_t+\mathbf{b}_{\mathsf{RNN}}^{\mu}, \tag{20}$$

其中$\mathbf{W}^{\mu}{}_{\mathsf{RNN}}\in\mathbb{R}^{N\times H}$和$\mathbf{b}^{\mu}{}_{\mathsf{RNN}}\in\mathbb{R}^{N}$是可学习参数。对于协方差矩阵，我们计算隐藏状态经仿射变换后所得结果的核 [参见（16）]

$$\boldsymbol{\Sigma}_t=\mathbf{C}\ \mathsf{K}(\mathbf{W}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma}\mathbf{z}_t+\mathbf{b}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma})\ \mathbf{C}^{\mathsf{T}}, \tag{21}$$

其中$\mathbf{W}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma}\in\mathbb{R}^{N\times H}$、$\mathbf{b}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma}\in\mathbb{R}^{N}$和$\mathbf{C}\in\mathbb{R}^{N\times N}$均为可学习参数。

循环神经网络的可学习参数集合为$\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{RNN}}=\{\mathbf{A}$、$\mathbf{B}$、$\mathbf{C}$、$\mathbf{W}^{\mu}{}_{\text{循环神经网络}}$,$\mathbf{b}^{\mu}{}_{\text{循环神经网络}}$,$\mathbf{W}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma}$、$\mathbf{b}_{\mathsf{RNN}}^{\Sigma}\}$。请注意，该集合与时间无关，因此能够扩展到任意长的序列。关于过去状态和测量值的信息由隐藏状态序列$\{\mathbf{z}_t\}$表示。因此，通过式（19）–（21）学习均值和协方差，有望利用所提出的第 III-A 节方法无法直接获取的信息，尽管这些信息是以压缩形式表示的。

如（19）所示，隐藏状态的计算可能无法捕捉长期依赖关系 [41], [42]。为此，我们实际上采用长短期记忆网络（LSTM）架构。这些架构加入了一系列门控策略，以便控制当前信息相对于输入序列过去值的流入。不过，由于 LSTM 是循环神经网络的一种特定实现，隐藏状态的计算在概念上与（19）相似。关于 LSTM 特定门控机制的详细信息，见 [43], [44]。另一种可选架构是门控循环单元（GRU），其说明见 [45], [46]。最后，我们还想指出，与单层循环神经网络相比，采用深层循环神经网络可以增强隐藏状态的表达能力。均值向量和协方差矩阵也同样如此，其中（20）和（21）中的仿射变换可以替换为全连接神经网络。

C. 利用数据结构：图神经网络

用于将前一状态和当前测量值映射到多元正态分布的均值向量和协方差矩阵的全连接神经网络架构（第 III-A 节），学习从$(N+M)$维向量到N维向量的仿射变换。循环神经网络架构（第 III-B 节）映射相同维度，但通过学习隐藏状态来记录测量值序列和模拟轨迹的历史值，从而利用时间结构。这两种架构中的可学习参数数量取决于状态N的规模以及测量值M的规模。通常，状态或测量值可能具有额外结构，能够进一步约束可学习参数的数量，使其不受N或M影响，从而提升可扩展性。

其中一个特殊情形是图神经网络（GNN） [47]–[49]。图神经网络将输入视为图信号 [50]–[52]。给定一个图支撑$\mathcal{G}=(\mathcal{V},\mathcal{E})$，其中$\mathcal{V}$是由$N$个节点组成的集合，$\mathcal{E}\subseteq\mathcal{V}\times\mathcal{V}$是边的集合，图信号为每个节点$n=1,\ldots,N$关联一个$F$维向量$\mathbf{x}_n\in\mathbb{R}^F$。$N$个$F$维向量可汇集为矩阵$\mathbf{X}\in\mathbb{R}^{N\times F}$，其中每一行由向量$\mathbf{x}_n^{\mathsf{T}}$给出。图信号可用于对分布式系统[53]、电网 [54]、通信网络 [55], 、脑活动 [56], 、自主智能体团队 [57],以及其他许多场景中产生的测量值进行建模 [58]。

为了利用底层图结构，我们需要一种操作，仅当测量值之间由一条边连接时，才将它们关联起来。为此，设$\mathbf{S}\in\mathbb{R}^{N\times N}$为图的矩阵表示，即满足：当$(j,i)\notin\mathcal{E}$ for $i\neq j$时，$[\mathbf{S}]_{ij}=0$。文献中最常用的图矩阵表示包括邻接矩阵 [50]、拉普拉斯矩阵 [51], [58]、随机游走矩阵 [59], 及其归一化对应矩阵。于是，我们可以定义

图卷积滤波器 [60] 是输入图信号$\mathbf{X}$ 上的线性操作，其输出通过对图矩阵表示$\mathbf{S}$构造 D阶多项式来计算

$$\mathbf{Y} = \mathsf{W}(\mathbf{X};\mathbf{S}) = \sum_{d=0}^{D} \mathbf{S}^d \mathbf{X} \mathbf{W}_d. \tag{22}$$

式（22）中的操作$\mathbf{S}^d\mathbf{X}$ 通过与一跳邻居进行 d 次连续交换，收集位于每个节点d跳邻域中的信息。将$\mathbf{S}^d\mathbf{X}$ 与滤波器系数$\mathbf{W}_d \in \mathbb{R}^{F\times G}$ 相乘，可以确定分配给每个 d跳邻域信息的权重。请注意，输出是一个图信号$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N\times G}$，由每个节点处的$G$维向量$\mathbf{y}_n \in \mathbb{R}^G$组成。滤波器系数集合（$D+1$）$\{\mathbf{W}_k\}_{d=0}^{D}$包含 FG（$D+1$）个参数，这些参数可以从数据中学习。

GNN是全连接神经网络的一种特例，其中仿射变换被图卷积滤波器（22）取代。因此，均值向量可以学习为 $\boldsymbol{\mu}_t = \boldsymbol{\mu}_t(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t) = \mathsf{GNN}_t^{\mu}(\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{y}_t;\mathbf{S}) = \mathbf{Z}_{t,L}^{\mu}$ 其中

$$\mathbf{Z}_{t,\ell}^{\mu} = \rho\big(\mathsf{W}_{t,\ell}^{\mu}(\mathbf{Z}_{t,\ell-1}^{\mu};\mathbf{S}) + \mathbf{B}_{t,\ell}^{\mu}\big). \tag{23}$$

在此，每一层的图卷积滤波器 $\mathsf{W}_{t,\ell}^{\mu}$ 的阶数为 $D_{t,\ell}$，可将 $F_{t,\ell-1}$ 维输入图信号映射为 $F_{t,\ell}$ 维输出图信号。因此，每个图滤波器由一组 $(D_{t,\ell}+1)$ 滤波器系数 $\{\mathsf{W}_{t,\ell,d}^{\mu}\}_{d=0}^{D_t}$，$^{\ell}$ 表征，其中 $\mathsf{W}_{t,\ell,d}^{\mu} \in \mathbb{R}^{F_{t,\ell-1}\times F_{t,\ell}}$。偏置矩阵 $\mathsf{B}_{t,\ell} \in \mathbb{R}^{N\times F_{t,\ell}}$ 实际上计算为 $\mathsf{B}_{t,\ell} = [b_{t,\ell,1}\mathbf{1}_N, \ldots, b_{t,\ell,F_{t,\ell}}\mathbf{1}_N]$，其中第 f 列为 $b_{t,\ell,f}\mathbf{1}_N$，$\mathbf{1}_N \in \mathbb{R}^N$为全 1 向量，$b_{t,\ell,f}$为可学习系数，适用于 $f=1$、...、$F_{t,\ell}$。GNN 的输入表示为 $\mathsf{Z}_{t,0}^{\mu} = [\mathsf{x}_{t-1}^{(k)}$、$\mathsf{A}_t^{\mu}\mathsf{y}_t] \in \mathbb{R}^{N\times 2}$，因此 $F_0 = 2$。矩阵 $\mathsf{A}_t^{\mu} \in \mathbb{R}^{N\times M}$用于适配测量值与状态可能存在的不同维度。GNN 输出端的特征数量为 $F_{t,L} = 1$，因此 $\mathsf{Z}_{t,L}^{\mu} \in \mathbb{R}^{N\times F_{t,L}}$成为一个 N 维向量，并用作多元正态分布 $\mathsf{z}_{t,L}^{\mu} = \boldsymbol{\mu}_t$的均值向量。最后，我们注意到，用于学习均值向量的基于图神经网络的架构的可学习参数集合为 $\boldsymbol{\Theta}_t^{\mu,\mathsf{GNN}} = \{\{\mathsf{W}_{t,\ell,d}^{\mu}\}_{d=0}^{D_t}, \{b_{t,\ell,f}^{\mu}\}_{f=1}^{F_t}\}_{\ell=1}^{L}$。这意味着，对于每个时间 t，共有 $\sum_{\ell=1}^{L}(F_{t,\ell}F_{t,\ell-1}(D_{t,\ell}+1)+F_{t,\ell})$ 个可学习参数；该数量由设计选择决定，与测量值 N 的大小无关。因此，优化景观的维度也与 N 无关，从而具备可扩展性。

为了学习协方差矩阵，我们采用与 (16)–(18) 中相同的方案，但将 (18) 替换为图神经网络。于是，第一层的输入与用于学习均值向量的基于图神经网络的架构的输入类似，只是可能具有不同的适配矩阵 $\mathbf{A}^{\Sigma} \in \mathbb{R}^{M\times N}$，即 $\mathbf{Z}_{t,0}^{\Sigma} = [\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}, \mathbf{A}^{\Sigma}\mathbf{y}_t] \in \mathbb{R}^{N\times 2}$，因此 $F_0 = 2$。输出 $\mathbf{Z}_{t,L}^{\Sigma} \in \mathbb{R}^{N\times F_L}$ 被设为向量 $\mathbf{z}_{t,L}^{\Sigma}$，即 $F_L = 1$，随后被输入 (17)，再输入 (16)。图神经网络与 (18) 中的全连接神经网络一样，与时间无关。因此，可学习参数集合为$\boldsymbol{\Theta}^{\Sigma,\mathsf{GNN}} = \{\{\mathbf{W}_{\ell,d}^{\mu}\}_{d=0,}^{D_\ell}\{b_{\ell,f}^{\mu}\}_{f=1}^{F_\ell}\}_{\ell=1}^{L}$。然而需要注意的是，由于 (16) 中的矩阵 $\mathbf{C}$ 大小为 $N\times N$，因此协方差矩阵所需的可学习参数总数取决于 N。此外，矩阵 $\{\{\mathbf{A}_t^{\mu}\}, \mathbf{A}^{\Sigma}\}$ 既可以通过学习获得，也可以进行设计，以反映测量值上的某种拓扑结构。需要注意的是，如果这些矩阵通过学习获得，那么可学习参数的数量将取决于 N，从而可能阻碍可扩展性。

图神经网络利用了这样一个假设：测量值呈现出基于图的结构。它们是天然分布式的架构，这意味着图中的每个节点都可以独立计算其输出，只需与附近的邻居通信即可。它们在图数据上的泛化能力也更强，因为它们具有置换等变性，并且对图支撑的形变具有稳定性 [61], [62]。关于图神经网络的研究文献浩如烟海，其中图卷积滤波器 (22) 可以替换为非卷积滤波器 [63]，或者逐点激活函数可以替换为基于图的激活函数 [64]。此外，人们还开发了图循环神经网络来处理图信号序列 [65]。需要强调的关键概念是，如果测量值呈现出某些数据结构，那么考虑利用这些结构的学习架构可能会很方便 [28,第 9] 章。

D. 任意变换

前几节讨论的所有学习方法都将采样分布参数化为多元正态分布。随后，它们分别以不同方式学习均值向量和协方差矩阵，并考虑数据的不同方面。本节中，我们考虑对均匀分布进行任意变换，以提高可实现采样分布的表达能力。

概率论中的一个著名结果指出，给定随机变量$\mathbf{x}$的累积分布函数 F_X，则随机变量$\mathbf{u} = \mathsf{F}_X(\mathbf{x})$ 服从均匀分布 [66]。因此，将 F_X^{-1} 定义为 F_X的广义逆，我们就可以通过从均匀$\mathbf{u}$ 中抽取样本，并将这些样本经由 F_X^{-1} 变换，获得任意随机变量$\mathbf{x}$ 的样本。然而，计算 F_X^{-1} 通常是不可行的。

我们提出学习一种变换 $\boldsymbol{\Psi}_t : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$，使其在每个时间 t将均匀随机变量$\mathbf{u}$ 映射为样本$\mathbf{x}_t^{(k)}$。为此，我们通过神经网络对 $\boldsymbol{\Psi}_t$ 进行参数化。为了纳入过去状态和当前测量值的信息，我们考虑以下架构

$$\mathbf{x}_t^{(k)} = \boldsymbol{\Psi}_t(\mathbf{u};\mathbf{x}_{t-1}^{(k)},\mathbf{y}_t) = \mathsf{NN}_t^{\boldsymbol{\Psi}}\big(\rho\big(\mathbf{A}_t^{\boldsymbol{\Psi}}\mathbf{u} + \mathbf{B}_t^{\boldsymbol{\Psi}}\mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{C}_t^{\boldsymbol{\Psi}}\mathbf{y}_t\big)\big) \tag{24}$$

其中$\mathbf{u} \sim \mathcal{U}([0,1]^N)$、$\mathbf{A}_t^{\boldsymbol{\Psi}} \in \mathbb{R}^{N\times N}$、$\mathbf{B}_t^{\boldsymbol{\Psi}} \in \mathbb{R}^{N\times N}$和$\mathbf{C}_t^{\boldsymbol{\Psi}} \in \mathbb{R}^{N\times M}$。

轨迹 [（参见式 (24)）] 中的每个采样状态 $\mathbf{x}_t^{(k)}$ 都服从某个概率分布 $\pi_t^{\boldsymbol{\Psi}}(\mathbf{x}_t^{(k)} \mid \mathbf{x}_{t-1}^{(k-1)}, \mathbf{y}_t) \sim \pi_t^{\boldsymbol{\Psi}}(\mathbf{x},\mathbf{y})$。为了能够计算与每条轨迹 [（参见式 (8)）]相关联的权重，需要一种评估其取值的方法。注意到 $\boldsymbol{\Psi}_t$ 是连续的，且由于 $\mathbf{u}$ 是连续随机变量，因此 $\mathbf{x}_t^{(k)}$ 也是连续的，因而可以用一个

连续概率密度函数（pdf）来表征。若Ψ_t可逆，则该 pdf 可按如下方式计算

$$\pi_t^{\Psi}(\mathbf{x}_t^{(k)}|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)},\mathbf{y}_t)=\left|\det\left(\mathbf{J}_{\Psi_t^{-1}}(\mathbf{x}_t^{(k-1)})\right)\right| \tag{25}$$

因为 $\mathrm{f}_X(\Psi_t^{-1}(\mathbf{x}_t^{(k)}))=1$，且其中 $\mathbf{J}_{\Psi_t^{-1}}\in\mathbb{R}^{N\times N}$ 是 Ψ_t^{-1} 的雅可比矩阵。通过注意到以下事实，可以计算该雅可比矩阵：

$$\Psi^{-1}(\mathbf{x}_t^{(k)})=(\mathbf{A}_t^{\Psi})^{-1}\big(\mathbf{z}_{t,0}^{\Psi}-\mathbf{B}_t^{\Psi}\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}-\mathbf{C}_t^{\Psi}\mathbf{y}_t\big) \tag{26}$$

with

$$\mathbf{z}_{t,\ell-1}^{\Psi}=(\mathbf{W}_{t,\ell}^{\Psi})^{-1}\rho^{-1}(\mathbf{z}_{t,\ell}^{\Psi}-\mathbf{b}_{t,\ell}^{\Psi}) \tag{27}$$

对于 $\ell=1$、.....、L 神经网络 NN_t^{Ψ}中的层数，其中 $(\mathbf{W}_{t,\ell}^{\Psi},\mathbf{b}_{t,\ell}^{\Psi})$ 是第 ℓ 层仿射变换的参数。注意，$\mathbf{z}_{t,L}^{\Psi}=\mathbf{x}_t^{(k)}$。换言之，$\Psi^{-1}$ 具有类似神经网络的结构，因此其雅可比矩阵可以通过类似反向传播的算法计算 [67]。

虽然我们从决定使用 Ψ 学习 F_X^{-1} 时起，就假设它是可逆的，但神经网络不一定可逆，因此我们需要在设计中确保这一点。最简单的方法是为所有 ℓ 选择方阵 $\mathbf{W}_{\ell}^{\Psi}$，从而对所有 ℓ 都有 $\mathrm{F}_{\ell}=N$。这限制了设计者控制神经网络表征能力的能力。需要注意的是，方阵并不一定能保证可逆性。因此，一种近似计算逆矩阵的方法是添加一个较小的单位矩阵，这在岭回归估计器中很常见 [68]。此外，激活函数必须可逆，双曲正切满足这一条件，而 ReLU 则不满足。更具体的解决方案可在归一化流领域找到 [69]–[71]。

每个时刻 t 的可学习参数集合为 $\boldsymbol{\Theta}_t^{\Psi}=\{\{\mathbf{W}_{t,\ell}^{\Psi},\mathbf{b}_{t,\ell}^{\Psi}\}_{\ell=1}^{L},\mathbf{A}_t^{\Psi},\mathbf{B}_t^{\Psi},\mathbf{C}_t^{\Psi}\}$。请注意，在式（24）中，我们选择为每个时刻 t学习一个不同的神经网络。这使可学习参数的数量成为 t的函数，因此随着轨迹变长，需要更多数据。另一种做法是为所有 t固定使用同一个神经网络，并利用 $\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}$ 和 $\mathbf{y}_t$ 来跟踪系统随时间发生的变化。

E. 模型的似然

目前为止介绍的所有架构均由一组参数决定。在训练阶段，通过计算梯度下降步长来优化某个目标函数 [28, Ch. 8]，并迭代更新这些参数。我们通过最大化模型的似然来训练这些架构。这形成了一种无监督模式，因为训练只需要测量序列 $\{\mathbf{y}_t\}$。

所研究的非线性动力系统模型由转移分布 $\mathrm{p}(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})$ 和观测分布 $\mathrm{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)$ 描述，且二者均视为已知。因此，我们通过最大化模型的似然，以无监督的方式学习采样分布 π

$$\max_{\boldsymbol{\Theta}}\sum_{k=1}^{K}\mathrm{p}\big(\mathbf{x}_t^{(k)}[\boldsymbol{\Theta}]\big|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)}[\boldsymbol{\Theta}]\big)\mathrm{p}\big(\mathbf{y}_t\big|\mathbf{x}_t^{(k)}[\boldsymbol{\Theta}]\big). \tag{28}$$

通过符号 $\mathbf{x}_t^{(k)}[\boldsymbol{\Theta}]$，我们明确表示每个样本都通过学习得到的采样分布 $\boldsymbol{\Theta}$ 依赖于可学习参数 $\boldsymbol{\Theta}$。通过更新参数 $\boldsymbol{\Theta}$ 以最大化式（28），我们尝试生成符合系统动力学的合理样本。例如，如果某个采样值 $\mathbf{x}_t^{(k)}$ 根据分布 $\mathrm{p}(\mathbf{y}_t|\mathbf{x}_t)$ 的规定，不符合测量值$\mathbf{y}_t$的实际情况，那么参数 $\boldsymbol{\Theta}$ 就会随之更新，进而降低采样到此类 $\mathbf{x}_t^{(k)}$ 的概率。这样，我们就可以仅利用关于系统动力学和测量值 $\mathbf{y}_t$ 的知识来训练这些架构，而无需掌握状态 $\mathbf{x}_t$ 的真实信息，这相当于采用无监督训练机制。

参数通常通过基于随机梯度上升的某种迭代算法进行更新 [72]–[73]。我们注意到，目标不一定是优化该函数，而是学会解决当前任务。因此，通常会执行固定次数的迭代，而不是根据目标函数的值遵循某种停止准则。很多时候，最大化对数似然可能更为方便，尤其是当系统动力学的分布属于指数参数族时。最后，我们指出，由于$\mathbf{x}_t^{(k)}$ 实际上是从我们想要学习的分布 π 中抽取的样本，因此我们使用重参数化技巧来估计随机梯度上升算法所需的梯度 [74]。

IV. 数值实验

考虑如下给出的一个动力系统

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_t&=\phi(\mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1})+\mathbf{v}_t,\\ \mathbf{y}_t&=\mathbf{C}\mathbf{x}_t+\mathbf{w}_t,\end{aligned} \tag{29}$$

其中，$\mathbf{x}_t\in\mathbb{R}^N$ 为状态，$\mathbf{y}_t\in\mathbb{R}^M$ 为测量值，$\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{N\times N}$ 为状态转移矩阵，$\mathbf{C}\in\mathbb{R}^{M\times N}$为测量矩阵。函数 $\phi:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}^N$可能是非线性的（取决于仿真场景）。状态噪声 $\mathbf{v}_t\in\mathbb{R}^{N\times N}$ 的均值为 $\mathbb{E}[\mathbf{v}_t]=\mathbf{0}$，协方差矩阵为 $\mathbb{E}[\mathbf{v}_t\mathbf{v}_t^{\mathsf{T}}]=\sigma_v^2\mathbf{I}_N\in\mathbb{R}^{N\times N}$，对所有 t均成立。测量噪声 $\mathbf{w}_t\in\mathbb{R}^M$也同理，其中 $\mathbb{E}[\mathbf{w}_t]=\mathbf{0}$，且$\mathbb{E}[\mathbf{w}_t\mathbf{w}_t^{\mathsf{T}}]=\sigma_w^2\mathbf{I}_N\in\mathbb{R}^{M\times M}$，对所有 t均成立。对于满足 $t\neq t'$的任意一对 t、t'，噪声向量相互独立；并且，序列 $\{\mathbf{v}_t\}_{t\geq 0}$ 中的所有随机向量都与序列 $\{\mathbf{w}_t\}_{t\geq 0}$中的随机向量相互独立。

在此情境下，我们假设可以获得一系列 t 测量值 $\{\mathbf{y}_t\}_{t=0,\dots,T}$，并希望估计时刻 t状态的值$\mathbf{x}_t$，因此目标量变为$\mathbf{z}_t=\mathrm{f}_t(\mathbf{x}_{0:t})=\mathbf{x}_t$。基线估计器由 $\tilde{\mathbf{z}}_t$ 给出，如式（4）所示。接下来，在采用第 III 节讨论的不同采样分布 $\pi(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_0^{(k)},\mathbf{x}_{1:t-1},\mathbf{y}_{0:t})$ 的情况下，我们将按照式（6）使用粒子滤波得到估计值$\hat{\mathbf{z}}_t$。

基线采样分布是使退化程度最小的分布，即 $\pi(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{0\,t-1}^{(k)},\mathbf{y}_{0:t})=\mathrm{p}(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}^{(k)},\mathbf{y}_t)$。对于 (29) 中的动力系统，当

噪声分布 $\mathbf{v}_t$ 和 $\mathbf{w}_t$ 均为高斯分布时，可通过闭式解计算该采样分布，详见 [17]。

在以下所有仿真中，我们设定 $M = N - 2$，矩阵 $\mathbf{A}$ 由随机几何图的加权邻接矩阵生成。权重根据距离通过高斯核计算，即节点 i与节点 j 之间的权重为 $\exp(-\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2)$，其中 $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^2$ 是节点 i 在 $[0,1]$ 平面上的坐标。我们构建加权 3近邻图，并对邻接矩阵进行归一化，使其谱范数为 1。测量矩阵由 $\mathbf{C} = \left[\mathbf{I}_{M\times M}\ \mathbf{I}_{M\times(N-M)}\right]$ 得到，其中$\mathbf{I}^{P\times Q}$ 是一个 $P \times Q$ 矩阵，满足 $[\mathbf{I}]_{ii} = 1$ 和 $[\mathbf{I}]_{ij} = 0$对所有 $i \neq j$均成立，并经过归一化使其谱范数为 1。此类动力系统是图中扩散过程的典型特征，包括谣言传播、热扩散和图滤波 [75]。

初始状态 $\mathbf{x}_0$ 服从均值为 $\mathbb{E}[\mathbf{x}_0] = \boldsymbol{\mu}^0 = \mathbf{1}_N$、协方差矩阵为 $\mathbb{E}[(\mathbf{x}_0 - \boldsymbol{\mu}^0)(\mathbf{x}_0 - \boldsymbol{\mu}^0)^{\mathsf{T}}] = \mathbf{I}_N$ 的多元高斯分布。在此设置下，我们将状态噪声信噪比定义为 $10\log_{10}(\|\boldsymbol{\mu}_0\|^2/\sigma_v^2)$，测量噪声信噪比的定义与此类似。在仿真中，我们取信噪比为 5dB，并固定 σ_v^2 和 σ_w^2 的值。

我们通过抽取 K 个粒子来构造粒子滤波估计，并在 K_t^{eff} 小于 $\hat{} K^{\text{thres}} = K/3$ 时进行重采样。为考虑粒子滤波估计生成过程中的随机性，我们将该过程重复 100 次。也就是说，我们抽取 K 个粒子，构造估计值，再抽取K 个粒子，构造另一个估计值，如此重复 100 次。随后对这些估计值取平均，得到一个能够反映粒子滤波器固有随机性的单一粒子滤波估计。

对于利用全连接神经网络学习多元分布均值和协方差矩阵的可学习采样分布，我们采用 4 层；如第 III-A 节所述，第一层的输入大小为 $N + M$，最后一层的输出大小为 N。第 1、2 和 3 层的输出隐藏单元数分别设为 256、512 和 1，024。均值神经网络和协方差神经网络采用相同的超参数（请注意，超参数相同，但实际学习到的参数会有所不同）。对于循环神经网络模型（第 III-B 节），隐藏状态的大小设为 $H = 1024$。对于图神经网络（第 III-C 节），我们将图矩阵描述设为 $\mathbf{S} = \mathbf{A}$ 状态转移矩阵，并采用 4 层，其维度为 $F_{t,\,1} = 256$,$F_{t,\,2} = 512$, $F_{t,\,3} = 1024$ 和 $F_{t,\,4} = 1$，适用于所有 t。所有涉及的滤波器的邻域交换次数均设为 $D = 3$。最后，对于第 III-D 节所述能够学习任意分布（即非多元正态分布参数）的可学习采样分布，我们采用 9 层（请记住，隐藏单元数由矩阵必须为方阵这一要求确定）。在所有可学习架构中，激活函数均设为双曲正切。

为了训练这些可学习采样分布，我们可以使用一组 t 测量值 $\{\mathbf{y}_t\}_t$，并按照第 III-E 节所述，寻找使模型似然最大化的参数。为此，我们使用一种优化算法，称为 Adam [73]，它是一种基于动量的随机梯度下降变体。我们将学习率设为 0.001，遗忘因子设为 0.9 和 0.999。我们执行 200 个训练步数，每一步都使用全部数据（也称为 200 轮次）。为考虑系统动力学的随机性（生成状态转移矩阵$\mathbf{A}$时）以及生成的测量值 $\{\mathbf{y}_t\}$ 的随机性，我们将整个学习和测试过程重复 20 次。我们报告每个粒子滤波估计的性能中位数及相应的标准差。

在接下来的仿真中，我们探究具有可学习采样分布的粒子滤波器的性能如何随状态维度 N（回想一下，测量维度设为 $M = N - 2$）、轨迹长度 T、粒子数 K、噪声分布和非线性函数 ϕ 而变化。

A. 线性高斯动力系统

首先，我们考虑一个线性动力系统，其中 ϕ 是恒等函数

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_t &= \mathbf{A}\mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{v}_t,\\ \mathbf{y}_t &= \mathbf{C}\mathbf{x}_t + \mathbf{w}_t,\end{aligned} \tag{30}$$

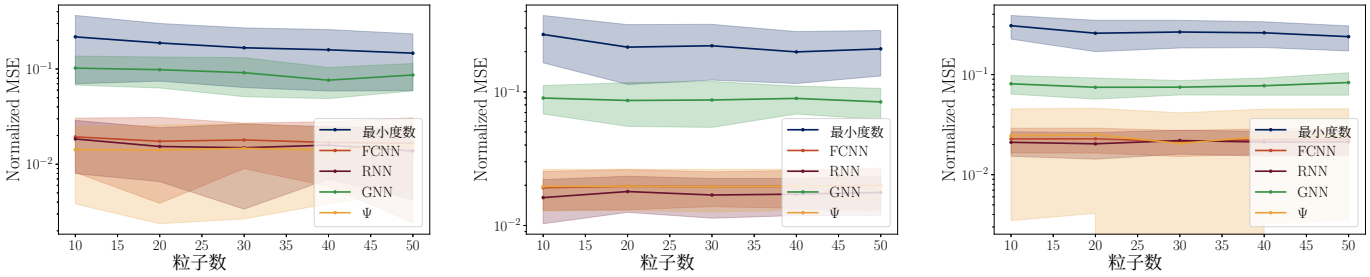
并且还假设状态噪声和测量噪声均服从多元高斯分布。在这种情况下，我们可以通过闭式解计算真实值估计器 $\mathbb{E}[\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{0:t}]$，因为 $\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{0:t}$ 也是一个多元高斯随机变量。

我们考虑三种不同的状态维度，即 $N = 10$、 $N = 25$ 和 $N = 50$。图 1 展示了粒子滤波器估计器与真实值之间的归一化均方误差随集合 $K \in \{10, 20, 30, 40, 50\}$ 中粒子数变化的情况。所有情况下，我们都将轨迹长度设为 $T = 12$。

对于所有状态维度，我们观察到，学习得到的采样分布明显优于设计的最小退化采样分布。我们注意到，使用全连接神经网络（第 III-A 节）、循环神经网络（第 III-B 节）或任意学习得到的线性变换，性能并无显著差异。有趣的是，任意线性变换 Ψ 的性能与全连接神经网络和循环神经网络相当，尽管其所需参数数量明显更少。区别之一是，任意线性变换 Ψ 的方差较高，尤其是在 $N = 50$ 较大的情况下。基于图循环神经网络的采样分布仍优于设计的最小退化采样分布，但明显不如其他可学习分布。我们认为，这可能是由于过拟合造成的，因为在图滤波层中，已经以矩阵$\mathbf{A}$ $\mathbf{S}$ 的形式纳入了底层图的信息。

接下来，我们将状态维度固定为 $N = 10$，测量值数量固定为 $M = 8$，粒子数固定为 $K = 10$，并模拟采用可学习分布的粒子滤波器的性能随 $T \in \{12, 16, 20, 24, 28\}$ 变化的情况。

结果如图 2 所示。我们再次注意到，采用学习得到的采样分布的粒子滤波器优于采用



(a) $N = 10$, $M = 8$ (b) $N = 25$, $M = 23$ (c) $N = 50$, $M = 48$

图 1. 线性高斯动力系统 作为粒子数 K的函数。(a)–(c) 中，我们改变状态维度 N 和测量维度 M。所有从数据中学习得到的采样分布 都显著优于所设计的最小退化采样分布基线 .

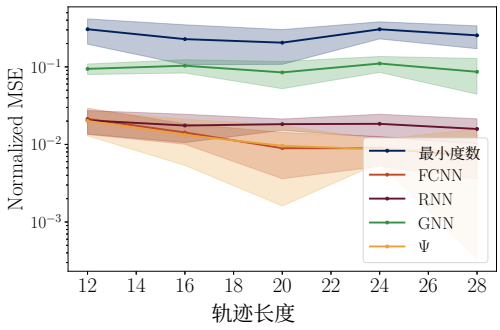


图 2。线性高斯动力系统随轨迹长度 T 的变化。

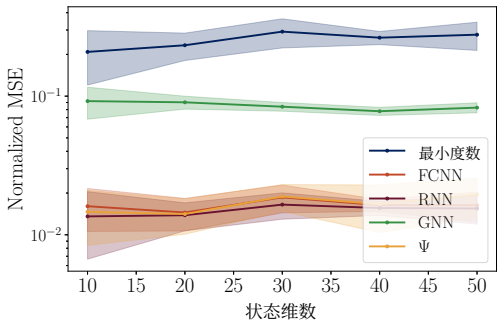


图 3。线性高斯动力系统随状态维度 N 的变化。

经过设计的最小退化采样分布，而图神经网络的表现则逊于其他三种方案。我们注意到，循环神经网络的性能似乎与轨迹长度无关，这可能是因为循环神经网络的参数按照设计与时间无关。与此同时，全连接神经网络和任意线性变换 Ψ的性能会随着轨迹长度增加而提升，这可能是因为为每个时刻学习一组不同的参数能够提高表达能力。无论如何，这三种架构的性能相当。

最后，我们将轨迹长度固定为 $T = 12$ ，粒子数固定为 $K = 10$ ，并针对 $N \in \{10, 20, 30, 40, 50\}$，模拟状态维度变化时的情况（回顾一下，对于每种情况， $M = N - 2$）。

图 3 所示的结果表现出与先前实验相似的行为：所有学习得到的分布都优于设计的最小退化分布，而图神经网络的表现则不如其他方法。在这种情况下，性能似乎与状态 N 的维度无关，三种方法（全连接神经网络、循环神经网络和任意变换Ψ）的表现都相近。

B. 非线性高斯动力系统

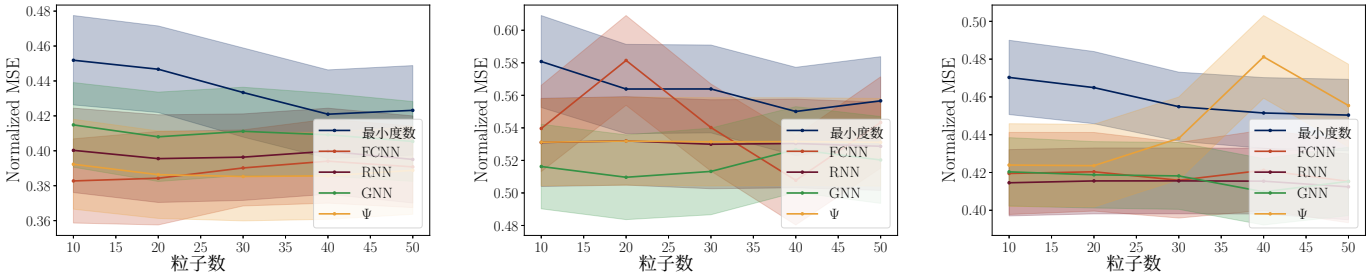
接下来，我们考虑一个非线性动力系统，其中将 ϕ 设为绝对值。状态噪声和测量噪声的分布仍为高斯分布。在此情形下，真实值 $\mathbb{E}[\mathbf{x}_t|\mathbf{y}_{0:t}]$ 已无法以闭式形式计算。在这种情况下，我们使用 $\mathbf{x}_t$ 的模拟值作为真实值进行性能比较，即图中所示结果报告了不同方法与估计的真实值 $\mathbf{x}_t$ 之间的归一化均方误差。

对于此情况，我们固定 $N = 10$、 $M = 8$ 和 $T = 12$，并将仿真结果表示为粒子数 $K \in \{10, 20, 30, 40, 50\}$ 的函数。结果如图 4 所示。

首先可以观察到，尽管总体而言，学习得到的采样分布优于所设计的最小退化采样分布，但现在两者之间的差距明显更小。此外，FCNN 或任意线性变换 Ψ 等学习得到的分布，其性能随粒子数 K 变化时略显不稳定：有时与最小退化粒子滤波器相当，有时则略逊一筹。这可能是由于模型复杂性增加，以及如果没有适当的正则化，这些通用架构难以充分捕捉信息。事实上，正则化的影响（即选择能够反映某种结构的操作，例如时间结构中的 RNN，或图结构中的 GNN）显而易见：GNN 的性能（相对而言）现在明显更好，并且 GNN 和 RNN 都随 K 呈现出稳定的表现。

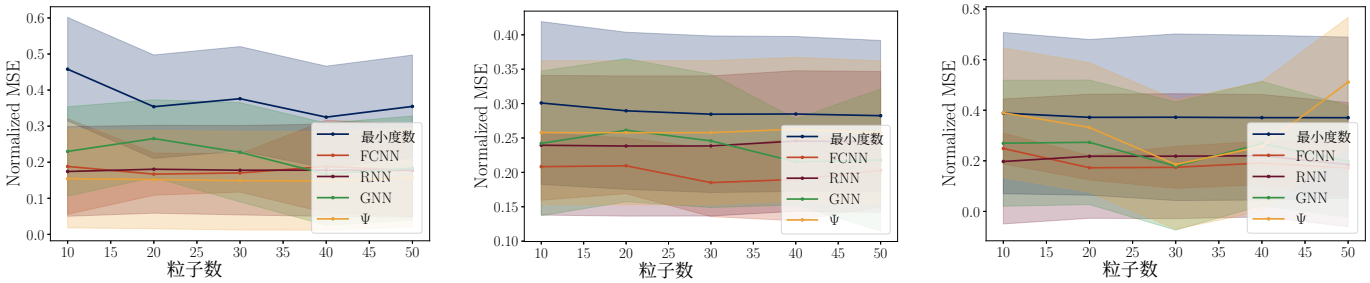
C. 线性非高斯动力系统

对于第三次仿真，我们考虑一个线性动力系统（30），但其状态噪声和测量噪声均为非高斯噪声。同样，我们固定 $N = 10$、 $M = 8$ 和 $T = 12$，并展示仿真结果随粒子数量的变化



(a) $N = 10, M = 8$ (b) $N = 25, M = 23$ (c) $N = 50, M = 48$

图 4. 非线性高斯动力系统随粒子数 K的变化。(a)–(c) 改变状态维度 N 和测量维度 M。总体而言，学习得到的分布优于最小退化分布，但与图 1 相比，两者的相对差距现在较小。此外，对于某些分布（如全连接神经网络或任意变换 Ψ），在某些 K取值下，其性能与最小退化相当（甚至可能更差）。



(a) $N = 10, M = 8$ (b) $N = 25, M = 23$ (c) $N = 50, M = 48$

图5. 线性非高斯动力系统中，性能随粒子数 K的变化。(a)–(c) 我们改变状态维度 N 和测量维度 M。随着系统维度 N 增大，任意分布 Ψ 的性能逐渐接近最小退化方案。

$K \in \{10, 20, 30, 40, 50\}$。指数噪声的结果见图5，均匀噪声的结果见图6。在这两种情况下，均值和协方差矩阵仍取本节开头所述的值，但噪声样本是从相应的分布中抽取的。

与第 IV-B 节相同，学习得到的采样分布优于设计得到的最小退化方案，但优势小于线性高斯情形（第 IV-A 节）中的差距。我们注意到，与非线性高斯情形（第 IV-B 节）相比，FCNN 现在表现得稳定得多，这表明系统的线性特性对 FCNN 性能的影响比噪声分布更重要。此处，任意线性变换Ψ的性能波动相当大，因此不太可靠。正则化技术或许有助于避免这种不稳定行为。最后，我们注意到，RNN 的表现最为一致，也最为稳定。

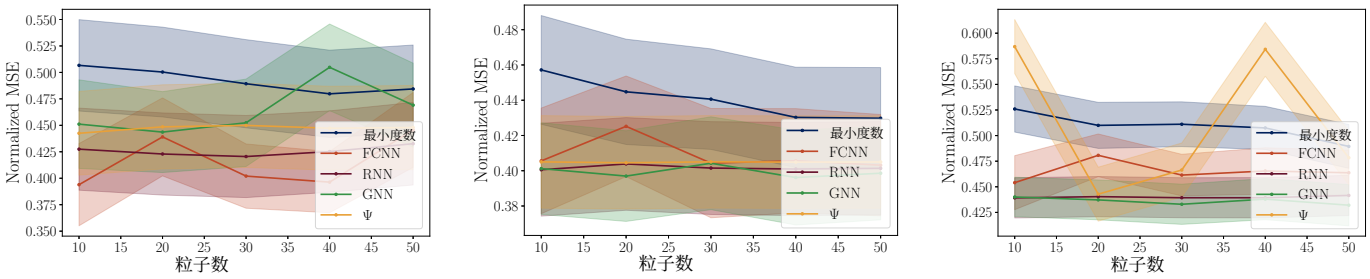
D. 非线性非高斯动力系统

我们考虑一种常用于描述流行病动态的数学模型：SIR模型。它由一组常微分方程 [76] 描述，为了满足我们的目的，可以通过欧拉方法将其离散化。采用大小为 Δ 的时间步长后，离散系统可表示为

$$\begin{aligned} S_{t+1} &= -\beta S_t I_t \Delta + S_t \\ I_{t+1} &= (\beta S_t I_t - \gamma I_t)\,\Delta + I_t \\ R_{t+1} &= \gamma I_t \Delta + R_t \end{aligned} \tag{31}$$

其中，S_t 表示时间 t的易感者数量，I_t 表示时间 t的感染者数量，而 R_t 表示截至时间 t已从系统中移除的人数（无论是因死亡还是康复）。假定模型的参数 β、γ和 Δ 已知。系统的状态由$\mathbf{x}_t = [S_t, I_t, R_t]^\mathsf{T}$给出。请注意，式（31）中描述的系统可以视为框架（29）中的非线性函数 ϕ 。

在本实验中，我们将参数固定为 β =5×10^{-4} 和 $\gamma = 0.04$。我们设置一条包含 200 个样本的轨迹，时间步长为 $\Delta = 0.7$。我们测量 $M = 2$ 个状态，其中I_t 是未测量的状态。更具体地说，式 (29) 中的$\mathbf{C}$ 由一个三阶单位矩阵的第一行和第三行构成。初始条件相互独立地服从指数分布，其均值分别为$\mathbb{E}[S_0] = 997$、$\mathbb{E}[I_0] = 3$ 和 $\mathbb{E}[R_0] = 0$，方差分别为 $\mathrm{Var}(S_0)$ =$\mathrm{Var}(I_0)$ =$\mathrm{Var}(R_0)$ = 500。测量噪声和状态噪声也服从指数分布，其方差分别为 $\mathrm{Var}(\mathbf{w}_t)$ = 2500 和 $\mathrm{Var}(\mathbf{v}_t)$ = 200。粒子数固定为 $K = 300$。神经网络的架构也进行了调整：FCNN 使用 4 个隐藏层（隐藏单元数分别为 512、256、128 和 32）



(a) $N = 10, M = 8$ (b) $N = 25, M = 23$ (c) $N = 50, M = 48$

图 6. 线性指数动力系统随粒子数 K变化的情况。(a) 状态维度为 $N = 10$ 、测量维度为 $M = 8$的系统。(b) 状态维度为 $N = 25$ 、测量维度为 $M = 23$的系统。(c) 状态维度为 $N = 50$ 、测量维度为 $M = 48$的系统。虽然学习得到的分布通常优于最小退化分布，但现在两者之间的差距较小。此外，随着系统维度 N 增大，任意分布 Ψ 的性能变得与最小简并度分布相当。

表 I均方误差：真实状态与估计值之间的均方误差。

	$S(t)$	$I(t)$	$R(t)$
最小度	419.1	1943.3	538.0
FCNN	64.1	136.1	190.8
RNN	453.5	2184.6	426.6
Ψ	339.8	453.0	154.6

RNN 使用 $H = 2048$ ，任意分布使用 10 层 Ψ。本实验未采用基于图神经网络的方法，因为系统动力学中不存在可供利用的图结构。图 7 展示了使用不同方法对未观测状态进行估计的结果。此外，我们也关注学习得到的采样分布在滤除测量状态中的噪声方面的表现。各方法的均方误差见表 I。

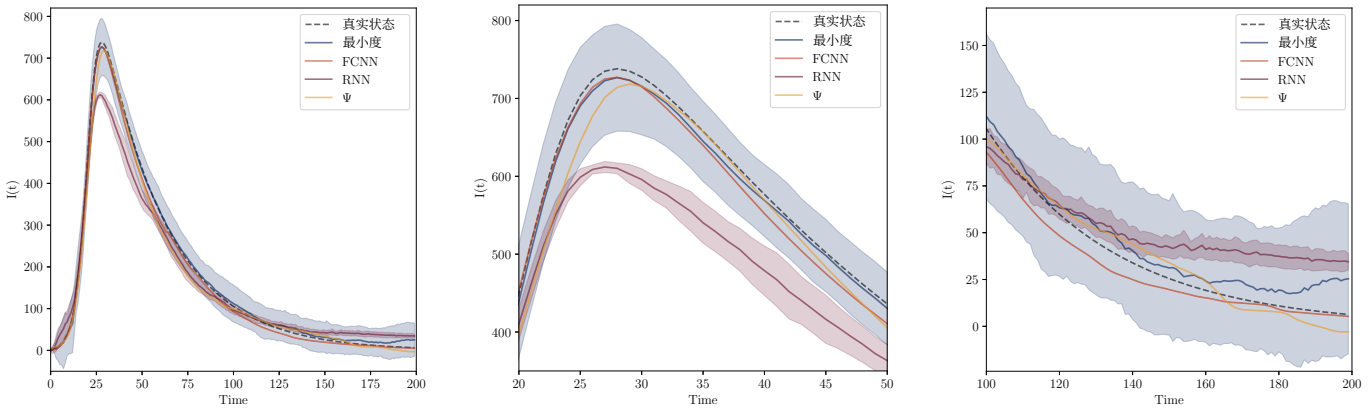
基于全连接神经网络的方法不仅在估计未知状态方面表现最佳，在滤除测量值中的噪声方面也同样如此。该方法的方差和偏差均最低。任意分布 Ψ 也优于最小退化分布，尽管其偏差略高于使用全连接神经网络时的偏差。不过，估计器的方差也相当低。基于循环神经网络的方法无法提供性能可与另外两种所提方法相媲美的采样分布。它的方差不仅高得多（尽管仍低于最小退化情形），偏差也不理想。这一点在图 7b 中清晰可见：其他三种方法都能正确捕捉信号 $I(t)$ 的峰值，而基于循环神经网络的方法却无法做到。

V. 结论

我们提出了四种不同的方法来学习粒子滤波器的采样分布。前三种是参数化方法，它们从多元高斯分布中采样，该分布的均值和协方差矩阵通过不同方式学习得到。首先，我们考虑一般情况，即通过将全连接神经网络应用于当前测量值和先前模拟状态，学习相应的表示，并据此获得均值和协方差矩阵。其次，我们考虑一种能够捕获超越紧邻的先前模拟状态的过去信息的循环神经网络。第三，如果存在额外的数据结构，我们提出可以采用能够利用这些结构的神经网络架构。具体而言，我们假设非线性动态系统可以用分布式系统来解释，并利用图神经网络来挖掘这一结构。第四种也是最后一种方法是非参数方法，我们学习从均匀分布中的样本到状态模拟的任意映射。

我们进行了多次仿真，研究所提方法与旨在最大限度减少粒子退化而设计的采样分布相比的性能。总体而言，学习得到的采样分布通常优于设计的最小退化分布；其中，基于循环神经网络的方法在各种情形下均稳定胜出，并且在问题超参数的大范围变化下性能稳定。不过请注意，对于复杂的非线性系统，其他方法可能给出更好的估计，例如 SIR 系统的情形。全连接神经网络方法和任意分布方法具有更高的灵活性，能够学习出更适合各个时刻的采样分布，从而取得更好的结果。

本文提出了一种初步方法，以无监督方式学习采样分布，而非对其进行设计。本文所述方法仍有许多改进方向。首先，可以考虑更复杂的架构，使其更适用于不同的特定非线性动力系统。其次，可以通过加入丢弃法或惩罚项等正则化技术来改进训练。当系统维度较高时，这些方法可能尤其有用。第三，归一化流是一个值得探索的方向。本文提出的第四种方法是一种非常基础的归一化流。采用更复杂的条件模型来确保神经网络的可逆性，实际上可能提升其表征能力，并产生更复杂的分布。



(a) $t \in [0, 200]$ (b) $t \in [20, 50]$ (c) $t \in [100, 200]$

图 7. 未观测状态 $I(t)$ 及采用所提出方法得到的估计结果。(a) 整个轨迹期间的状态 $I(t)$。(b) 放大状态 $I(t)$，以显示 $t \in [20, 50]$ 所在的时间窗口。(c) 放大状态 $I(t)$，以显示 $t \in [100, 200]$ 所在的时间窗口。基于全连接神经网络的方法和任意分布 Ψ 所取得的性能优于最小简并度。

参考文献

[1] F. Gama、N. Zilberstein、R. G. Baraniuk 和 S. Segarra，“展开粒子：采样分布的无监督学习”，载于 IEEE声学、语音与信号处理国际会议，2022年，页码 5498–5502。[2] S. Kumar 和 R. S. Williams，“教程：铁磁电感器的实验性非线性动力电路分析”，IEEE电路与系统杂志，第 18 卷，第 2 期，页码 28–34，2018 年第二季度。[3] H. K. Khalil，《非线性控制》。英国哈洛：培生，2015年。[4] M. F. Mehrjardi、H. Sanusi、M. A. M. Ali 和 M. Abdullah，“航天器系统的姿态—轨道动力学与控制一体化：现状与未来趋势”，IEEE航空航天与电子系统杂志，第 33 卷，第 7 期，页码 60–71，2018年7月。[5] S. A. Sajadi-Alamdari、H. Voos 和 M. Darouach，“用于电动汽车能量优化管理的生态型高级驾驶辅助系统”，IEEE智能交通系统杂志，第 12 卷，第 4 期，页码 92–709，2020年冬季。[6] S. Mahmodicherati、M. Elbuluk 和 Y. Sozer，“降低风电系统纹波：一种由两个功率控制器构成的混合方法”，IEEE工业应用杂志，第 25 卷，第 2 期，页码 23–35，2019年3月至4月。[7] N. Karlsson，“程序化广告中的反馈控制：实时竞价优化的前沿”，IEEE控制系统杂志，第 40 卷，第 5 期，页码 40–77，2020年10月。[8] A. Isidori，《非线性控制系统》，第 3 版，通信与控制工程丛书。英国伦敦：施普林格，1995年。[9] H. K. Khalil，《非线性系统》，第 3 版。新泽西州萨德尔河上游：普伦蒂斯·霍尔，2002年。[10] D. J. Hill 和 T. Liu，“耗散性、稳定性及其关联：复杂性研究进展”，IEEE控制系统杂志，第 42 卷，第 2 期，页码 88–106，2022年4月。[11] K. Batselier，“用于非线性系统辨识的低秩张量分解：带示例的教程”，IEEE控制系统杂志，第 42 卷，第 1 期，页码 54–74，2022年2月。[12] S. Koshkin 和 V. Jovanovic，“荡起游乐场秋千：用于引发持续振荡的转矩控制”，IEEE控制系统杂志，第 42 卷，第 2 期，页码 18–34，2022年4月。[13] D. Simon，《最优状态估计：卡尔曼、 H_∞与非线性方法》。新泽西州霍博肯：约翰·威立父子公司，2006年。[14] F. Sawo，《空间分布系统的非线性状态与参数估计》，卡尔斯鲁厄智能传感器—执行器系统丛书。德国卡尔斯鲁厄：Universit¨atsverlag Karlsruhe，2009年，第 5 卷。[15] T. Kailath、A. H. Sayed 和 B. Hassibi，《线性估计》，普伦蒂斯·霍尔信息系统科学丛书。新泽西州萨德尔河上游：普伦蒂斯·霍尔，2000年。[16] B. D. O. Anderson 和 J. B. Moore，《最优滤波》，普伦蒂斯·霍尔信息系统科学丛书。新泽西州恩格尔伍德克利夫斯：普伦蒂斯·霍尔，1979年。[17] A. Doucet、S. Godsill 和 C. Andrieu，“贝叶斯滤波的序贯蒙特卡罗采样方法”，统计计算，第 10 卷，第 3 期，页码 197–208，2000年7月。[18] P. M. Djuri´c、J. H. Kotecha、J. Zhang、Y. Huang、T. Ghirmai、M. F. Bugallo 和 J. M´ıguez，“粒子滤波”，IEEE信号处理杂志，第 20 卷，第 5 期，页码 19–38，2003年9月。

[19] S. Godsill，《粒子滤波：前25年及其后续发展》，载于第44届IEEE声学、语音与信号处理国际会议。英国布莱顿：IEEE，2019年5月12日至17日，第7760–7764页。[20] M. F. Bugallo、V. Elvira、L. Martino、D. Luengo、J. M´ıguez和P. M. Djuri´c，《自适应重要性采样：过去、现在与未来》，《IEEE信号处理杂志》，第34卷，第4期，第60–79页，2017年7月。[21] V. Elvira和L. Martino，《重要性采样进展》，Wiley StatsRef：《统计学参考在线》，2021年2月17日。 [在线]。可访问：https://doi.org/10 1002 9781118445112 08284 。 / .stat N. Branchini [22] 和V. Elvira，《优化辅助粒子滤波器：通过凸优化调整混合提议分布》，载于第37届人工智能不确定性会议，第161卷。虚拟会议：机器学习研究论文集，2021年5月27日至29日。[23] V. Elvira、J. M´ıguez和P. M. Djuri´c，《通过在线收敛评估方案调整序贯蒙特卡洛方法中的粒子数》，《IEEE信号处理汇刊》，第65卷，第7期，第1781–1794页，2016年12月8日。[24] V. Elvira、L. Martino和C. P. Robert，《重新思考有效样本量》，《国际统计评论》，第90卷，第3期，第525–550页，2022年12月。[25] V. Elvira、L. Martino、M. F. Bugallo和P. Djuri´c，《探索改进辅助粒子滤波器》，载于第26届欧洲信号处理会议。意大利罗马：IEEE，2018年9月3日至7日，第1637–1641页。[26] V. Elvira、L. Martino、M. F. Bugallo和P. Djuri´c，《通过多重重要性采样阐释辅助粒子滤波器》，《IEEE信号处理杂志》，第36卷，第6期，第145–152页，2019年10月30日，讲义。[27] K. P. Murphy，《机器学习：概率视角》，《自适应计算与机器学习》丛书。马萨诸塞州剑桥：麻省理工学院出版社，2012年。[28] I. Goodfellow、Y. Bengio和A. Courville，《深度学习》，《自适应计算与机器学习》丛书。马萨诸塞州剑桥：麻省理工学院出版社，2016年。[29] R. Jonschkowski、D. Rastogi和O. Brock，《可微粒子滤波器：结合算法先验的端到端学习》，载于《机器人科学与系统》2018。宾夕法尼亚州匹兹堡：RSS基金会，2018年6月26日至30日，第1–9页。[30] X. Chen、H. Wen和Y. Li，《通过条件归一化流实现可微粒子滤波器》，载于IEEE信息融合国际会议（FUSION）。IEEE，2021年，第1–6页。[31] X. Ma、P. Karkus、D. Hsu和W. S. Lee，《粒子滤波循环神经网络》，载于第34届AAAI人工智能会议，第34卷（第4期）。纽约州纽约市：人工智能促进协会，2020年2月7日至12日，第5101–5108页。[32] J. Geweke，《使用蒙特卡洛积分对计量经济学模型进行贝叶斯推断》，《计量经济学》，第57卷，第1317–1339页，1989年。[33] A. Kong、J. S. Liu和W. H. Wong，《序贯插补与贝叶斯缺失数据问题》，《美国统计学会杂志》，第89卷，第278–288页，1994年。[34] R. Chen和J. S. Liu，《预测更新方法及其在贝叶斯分类中的应用》，《英国皇家统计学会杂志B辑》，第58卷，415，1996 397页。– 。[35] J. S. Liu，《Metropolis化独立采样，并与拒绝采样和重要性采样进行比较》，《统计计算》，第6卷，第113–119页，1996年。

[36] J. Bergstra、R. Bardenet、Y. Bengio和B. K´egl，《超参数优化算法》，载于第25届神经信息处理系统会议。西班牙格拉纳达：神经信息处理系统基金会，12月12日至17日，2011年，第2546–2554页。[37] V. Monga、Y. Li和Y. C. Eldar，《算法展开：用于信号与图像处理的可解释、高效深度学习》，《IEEE信号处理杂志》，第38卷，第2期，第18–44页，2021年3月。[38] K. Hornik、M. Stinchcombe和H. White，《多层前馈网络是通用逼近器》，《神经网络》，第2卷，第5期，第359–366页，1989年。[39] A. R. Barron，《人工神经网络的逼近与估计界》，《机器学习》，第14卷，第115–133页，1994年。[40] A. Graves，《使用循环神经网络进行监督式序列标注》，《计算智能研究》丛书。德国海德堡：施普林格，2012年，第385卷。[41] Y. Bengio、P. Smard和P. Frasconi，《使用梯度下降学习长期依赖关系十分困难》，《IEEE神经网络汇刊》，第5卷，第2期，第157–166页，1994年3月。[42] R. Pascanu、T. Mikolov和Y. Bengio，《循环神经网络训练的难点》，载于第30届国际机器学习会议，第28卷。美国亚特兰大：机器学习研究论文集，2013年6月16日至21日，第1310–1318页。[43] S. Hochreiter和J. Schmidhuber，《长短期记忆》，《神经计算》，第9卷，第8期，第1735–1780页，1997年11月15日。[44] F. A. Gers、J. Schmidhuber和F. Cummins，《学会遗忘：使用长短期记忆网络进行持续预测》，载于第9届IEEE国际人工神经网络会议，第2卷。英国爱丁堡：IEEE，1999年9月7日至10日，第850–855页。[45] J. Chung、C. Gulcehre、K. Cho和Y. Bengio，《门控反馈循环神经网络》，载于第32届国际机器学习会议，第37卷。法国里尔：机器学习研究论文集，2015年7月6日至11日，第2067–2075页。[46] R. Jozefowicz、W. Zaremba和I. Sutskever，《循环网络架构的实证评估》，载于第32届国际机器学习会议，第37卷。法国里尔：机器学习研究论文集，2015年7月6日至11日，第2342–2350页。[47] F. Gama、A. G. Marques、G. Leus和A. Ribeiro，《用于图上信号的卷积神经网络架构》，《IEEE信号处理汇刊》，第67卷，第4期，第1034–1049页，2018年12月17日。[48] F. Gama、E. Isufi、G. Leus和A. Ribeiro，《图、卷积与神经网络：从图滤波器到图神经网络》，《IEEE信号处理杂志》，第37卷，第6期，第128–138页，2020年11月。[49] L. Ruiz、F. Gama和A. Ribeiro，《图神经网络：架构、稳定性与迁移性》，《IEEE会刊》，第109卷，第5期，第660–682页，2021年5月。[50] A. Sandryhaila和J. M. F. Moura，《图上的离散信号处理》，《IEEE信号处理汇刊》，第61卷，1656，11 7，1644 2013年，第期，第–页。[51] D. I. Shuman、S. K. Narang、P. Frossard、A. Ortega和P. Van- dergheynst，《图信号处理这一新兴领域：将高维数据分析扩展至网络及其他非规则域》，《IEEE信号处理杂志》，第30卷，第3期，第83–98页，2013年5月。[52] A. Sandyhaila和J. M. F. Moura，《图上的离散信号处理：频率分析》，《IEEE信号处理汇刊》，第62卷，第12期，第3042–3054页，2014年4月30日。[53] F. Gama和S. Sojoudi，《基于图神经网络的分布式线性二次控制》,《信号处理》，第196卷，第108506期，第1–14页，2022年7月。[54] D. Owerko、F. Gama和A. Ribeiro，《使用图神经网络进行无监督最优潮流》，arXiv:2210.09277v*1* *[*eess.SY*]*, 17 Oct. 2022 [ ] 2210 09277 。在线。可[55]访问：http://arxiv.org/abs/ 。A. Chowdhury、G. Verma、C. Rao、A. Swami和S. Segarra，《使用图神经网络展开加权最小均方误差以实现高效功率分配》，《IEEE无线通信汇刊》，第20卷，第9期，第6004–6017页，2021年4月13日。[56] J. D. Medaglia、W. Huang、S. Segarra、C. Olm、J. Gee、M. Grossman、A. Ribeiro、C. T. McMillan和D. S. Bassett，《脑网络效率受皮质基底节综合征病理来源的影响》，《神经病学》，第89卷，第13期，第1373–1381页，2017年。[57] F. Gama、Q. Li、E. Tolstaya、A. Prorok和A. Ribeiro，《使用图神经网络和模仿学习合成分散式控制器》，《IEEE信号处理汇刊》，第70卷，第1932–1946页，2022年4月11日。[58] M. M. Bronstein、J. Bruna、Y. LeCun、A. Szlam和P. Vandergheynst，《几何深度学习：超越欧几里得数据》，《IEEE信号处理杂志》，第34卷，第4期，第18–42页，2017年7月。[59] A. Heimowitz 和 Y. C. Eldar，《扩散映射与图信号处理的统一视角》，载于*2017*年国际采样理论与应用会议，爱沙尼亚塔林：IEEE，2017年7月3日至7日，第308–312页。[60] S. Segarra、A. G. Marques 和 A. Ribeiro，《图滤波器设计及其在分布式线性网络算子中的应用》，*IEEE*信号处理汇刊，第65卷，第15期，第4117–4131页，2017年5月11日。[61] F. Gama、J. Bruna 和 A. Ribeiro，《图神经网络的稳定性特性》，*IEEE*信号处理汇刊，第68卷，第5680–5695页，2020年9月25日。[62] T. M. Roddenberry、F. Gama、R. G. Baraniuk 和 S. Segarra，《图信号处理中的局部分布》，*IEEE*信号处理汇刊，第70卷，第5564–5577页，2022年。[63] E. Isufi、F. Gama 和 A. Ribeiro，《EdgeNets：边变化图神经网络》，*IEEE*模式分析与机器智能汇刊，第44卷，第11期，第3862–3877页，2021年9月13日。[64] L. Ruiz、F. Gama、A. G. Marques 和 A. Ribeiro，《面向图神经网络的保持不变性的局部激活函数》，*IEEE*信号处理汇刊，第68卷，第127–141页，2019年11月25日。[65] L. Ruiz、F. Gama 和 A. Ribeiro，《门控图循环神经网络》，*IEEE*信号处理汇刊，第68卷，第6303–6318页，2020年10月26日。[66] R. Durrett，《概率论：理论与例题》，第4版，剑桥统计与概率数学丛书。纽约州纽约市：剑桥大学出版社，2010年。[67] D. E. Rumelhart、G. E. Hinton 和 R. J. Williams，《通过误差反向传播学习表示》，《自然》，第323卷，第6088期，第533–536页，1986年10月。[68] S. M. Kay，《统计信号处理基础：估计理论》，信号处理丛书。新泽西州萨德尔河上游：普伦蒂斯·霍尔，1993年。[69] I. Kobyzev、S. J. D. Prince 和 M. A. Brubaker，《归一化流：当前方法简介与综述》，*IEEE*模式分析与机器智能汇刊，第43卷，第11期，第3964–3979页，2020年5月7日。[70] G. Papamakarios、E. Nalisnick、D. Jimenez Rezende、S. Mohamed 和 B. Lakshminarayanan，《用于概率建模与推断的归一化流》，《机器学习研究期刊》，第22卷，第1–64页，2021年3月。[71] X. Wei、H. van Gorp、L. Gonzalez-Carabarin、D. Freedman、Y. C. Eldar 和 R. J. G. van Sloun，《利用归一化流先验对逆问题进行深度展开》，*IEEE*信号处理汇刊，第70卷，第2962–2971页，2022年6月3日。[72] J. Duchi、E. Hazan 和 Y. Singer，《用于在线学习和随机优化的自适应次梯度方法》，《机器学习研究期刊》，第12卷，第61期，第2121–2159页，2011年7月。[73] D. P. Kingma 和 J. L. Ba，《ADAM：一种随机优化方法》，载于第三届国际学习表征会议，美国加利福尼亚州圣迭戈，2015年5月7日至9日，第1–15页。[74] D. P. Kingma 和 M. Welling，《自编码变分贝叶斯》，载于第二届国际学习表征会议，加拿大艾伯塔省班夫，2014年4月14日至16日，第1–14页。[75] F. Gama、E. Isufi、A. Ribeiro 和 G. Leus，《随机时变图上带限图过程的可控性》，*IEEE*信号处理汇刊，第67卷，第24期，第6440–6454页，2019年11月6日。[76] R. Beckley、C. Weatherspoon、M. Alexander、M. Chandler、A. Johnson 和 G. S. Bhatt，《用微分方程建模流行病》，2013年。