arXiv:2302.10779v1 [cs.LG] 3 Feb 2023

用于混沌预测与重构的物理信息长短期记忆*

Elise Özalp[1], Georgios Margazoglou[1], 和 Luca Magri[1,2]

[1] 航空系，伦敦帝国理工学院，伦敦，SW7 2AZ，英国[2] 艾伦·图灵研究所，伦敦，NW1 2DB，英国 l.magri@imperial.ac.uk

摘要。我们提出物理信息长短期记忆网络（PI-LSTM），用于重构和预测混沌系统中未测量变量的演化。训练过程受到正则化项的约束，该项会惩罚违反系统控制方程的解。我们以 Lorenz-96模型这一典型的混沌动力系统为例，针对不同数量的待重构变量展示该网络。首先，我们展示PI-LSTM架构，并说明如何对微分方程施加约束，这在长短期记忆网络中是一项并不简单的任务。其次，我们通过数值评估 PI-LSTM 的长期自主演化，以研究其遍历性质。我们表明，该网络能够正确预测未测量变量的统计特性，而不施加物理约束则无法做到这一点。第三，我们计算网络的李雅普诺夫指数，以推断混沌系统的关键稳定性特征。在重构任务中，与仅依赖数据的训练相比，加入物理信息损失在定性上改善了网络的动力学行为。李雅普诺夫指数的一致性进一步量化了这一改善。本研究为非线性系统的状态重构和动力学学习开辟了新的可能性。

关键词： 长短期记忆 · 混沌 · 状态重构。

1 引言

混沌动力学存在于气象学、化学、经济学和工程学等多个领域。其产生源于对初始条件的指数敏感性，这使得长期、精确的时间预测十分困难。在许多工程应用中，我们只能获得系统状态的部分信息，例如，由于计算成本高昂，或实验室实验中传感器数量有限，未测量变量没有可用数据。对可获得的观测结果进行预测，并重构未测量变量，是理解和预测动力系统行为的关键。

* 本研究得到ERC起始资助项目PhyCo 949388的支持。

神经网络是强大的表达工具，能够从数据中提取模式；训练完成后，它们可以快速、高效地进行预测。循环神经网络（RNN）和长短期记忆网络（LSTM）适用于时间序列和动力学演化，在推断具有多尺度、混沌或湍流行为的动力系统方面展现出良好性能 [13]。将神经网络与支配性物理方程的知识相结合，催生了物理信息神经网络这一领域 [6,11]。更具体地说，采用储备池计算机的物理信息循环神经网络已成功用于短期重构未测量变量 [1,10]。

本文提出一种物理信息长短期记忆网络（PI-LSTM），用于预测观测变量，同时推断混沌系统中的未测量变量。我们通过分析长短期记忆网络的自主长期演化，并统计重构变量的特征，来评估预测质量。刻画混沌的关键量是李雅普诺夫指数（LEs），它们能够揭示吸引子的维数和切空间。本文从一个针对典型混沌动力系统训练的长短期记忆网络中提取李雅普诺夫指数。对于状态重构，我们表明，有必要在长短期记忆网络中嵌入先验知识；本研究中的先验知识以微分方程的形式给出。

本文结构安排如下。第 2 节简要介绍混沌系统的李雅普诺夫指数以及未测量变量的问题设置。第 3 节提出物理信息长短期记忆网络（PI-LSTM）。第 4 节讨论 Lorenz-96 系统的研究结果。最后，第 5 节总结本文工作并提出未来研究方向。

2 混沌动力系统

我们考虑一个非线性自治动力系统

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{y}(t) = f(\boldsymbol{y}(t)), \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{y}(t) \in \mathbb{R}^N$ 是物理系统的状态向量，$f\colon \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ 是一个光滑的非线性函数。如果无穷接近的轨迹以指数速率发散，则动力系统（1）是混沌的。这种行为可通过李雅普诺夫指数（LEs）量化，它们衡量轨迹在相空间中的平均伸展速率。李雅普诺夫指数 $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_N$ 揭示了吸引子的混沌性及其几何特征。混沌动力系统至少有一个正的李雅普诺夫指数。在混沌系统中，李雅普诺夫时间$\tau_\lambda = \frac{1}{\lambda_1}$ 定义了两条邻近轨迹发生分离的特征时间尺度，可用于估计系统的可预测性时限。数值计算李雅普诺夫指数时，可在参考点附近对动力系统方程进行线性化，定义切空间，并根据相应的雅可比矩阵 [2]，通过格拉姆–施密特正交化过程提取李雅普诺夫指数。

2.1 状态重构

令 $\boldsymbol{y}(t) = [\boldsymbol{x}(t); \boldsymbol{\xi}(t)]$ 为混沌动力系统的状态，其中 $\boldsymbol{x}(t) \in \mathbb{R}^{N_x}$ 是观测变量，$\boldsymbol{\xi}(t) \in \mathbb{R}^{N_\xi}$ 是未测量变量，且$N = N_x + N_\xi$。具体而言，假设在时刻 $t_i = i\Delta t$ 测得 $\boldsymbol{x}(t_i)$，其中 $i = 0, \ldots N_t$，且时间步恒定为 Δt。基于这些观测，我们希望使用物理信息长短期记忆网络（PI-LSTM）预测完整状态 $\boldsymbol{y}(t_i) = [\boldsymbol{x}(t_i)\ \boldsymbol{\xi}(t_i)]$,，同时遵循控制方程（1）。

3 物理信息长短期记忆网络

当完整观测可用时，长短期记忆网络已成功应用于动力系统的时间预测 [12, 13]。其特点是具有单元状态 $\boldsymbol{c}_{i+1} \in \mathbb{R}^{N_h}$ 和隐藏状态 $\boldsymbol{h}_{i+1} \in \mathbb{R}^{N_h}$，并且二者会在每个时间步更新。在部分观测的情况下，状态使用观测变量 $\boldsymbol{x}(t_i)$ 更新如下

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{i}_{i+1} &= \sigma\left(\boldsymbol{W}^i[\boldsymbol{x}(t_i); \boldsymbol{h}_i] + \boldsymbol{b}^i\right), & \tilde{\boldsymbol{c}}_{i+1} &= \tanh\left(\boldsymbol{W}^g[\boldsymbol{x}(t_i); \boldsymbol{h}_i] + \boldsymbol{b}^g\right), \\
\boldsymbol{f}_{i+1} &= \sigma\left(\boldsymbol{W}^f[\boldsymbol{x}(t_i); \boldsymbol{h}_i] + \boldsymbol{b}^f\right), & \boldsymbol{c}_{i+1} &= \sigma\left(\boldsymbol{f}_{i+1} * \boldsymbol{c}_i + \boldsymbol{i}_{i+1} * \tilde{\boldsymbol{c}}_{i+1}\right), \\
\boldsymbol{o}_{i+1} &= \sigma\left(\boldsymbol{W}^o[\boldsymbol{x}(t_i); \boldsymbol{h}_i] + \boldsymbol{b}^o\right), & \boldsymbol{h}_{i+1} &= \tanh\left(\boldsymbol{c}_{i+1}\right) * \boldsymbol{o}_{i+1},
\end{aligned}
$$

其中 $\boldsymbol{i}_{i+1}$，$\boldsymbol{f}_{i+1}$，$\boldsymbol{o}_{i+1} \in \mathbb{R}^{N_h}$ 分别是输入门、遗忘门和输出门。矩阵$\boldsymbol{W}^i$，$\boldsymbol{W}^f$，$\boldsymbol{W}^o$，$\boldsymbol{W}^g \in \mathbb{R}^{N_h \times (N_x + N_h)}$ 是相应的权重矩阵，而$\boldsymbol{b}^i$，$\boldsymbol{b}^f$，$\boldsymbol{b}^o$，$\boldsymbol{b}^g \in \mathbb{R}^{N_h}$ 是偏置。完整预测 $\tilde{\boldsymbol{y}}(t_{i+1}) = [\tilde{\boldsymbol{x}}(t_{i+1})\ \tilde{\boldsymbol{\xi}}(t_{i+1})]$通过将隐藏状态 $\boldsymbol{h}_{i+1}$ 与全连接层拼接得到

$$
\begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{x}}(t_{i+1}) \\ \tilde{\boldsymbol{\xi}}(t_{i+1}) \end{bmatrix} = \boldsymbol{W}^{dense} \boldsymbol{h}_{i+1} + \boldsymbol{b}^{dense},
$$

其中 $\boldsymbol{W}^{dense} \in \mathbb{R}^{(N_x + N_\xi) \times N_h}$ 和 $\boldsymbol{b}^{dense} \in \mathbb{R}^{N_x + N_\xi}$。

长短期记忆网络是任意连续目标函数 [3, 4] 的通用逼近器；然而在实际应用中，网络的性能取决于训练阶段计算出的参数，例如权重和偏置。为了训练权重和偏置，我们通过均方误差在观测数据上定义数据驱动损失函数 $\mathcal{L}_{dd} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} (\boldsymbol{x}(t_i) - \tilde{\boldsymbol{x}}(t_i))^2$。为约束网络对未测量动态的拟合，我们添加一个惩罚项

$$
\mathcal{L}_{pi} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \left(\frac{d}{dt} \tilde{\boldsymbol{y}}(t_i) - f(\tilde{\boldsymbol{y}}(t_i)) \right)^2.
$$

该损失函数对网络的训练进行正则化，使其提供满足式（1）控制方程的预测结果（误差在数值容差范围内）。为简单起见，时间导数 $\frac{d}{dt}\tilde{\boldsymbol{y}}$ 采用向前差分格式计算

$$
\frac{d}{dt} \tilde{\boldsymbol{y}}(t_i) \approx \frac{\tilde{\boldsymbol{y}}(t_{i+1}) - \tilde{\boldsymbol{y}}(t_i)}{\Delta t}.
$$

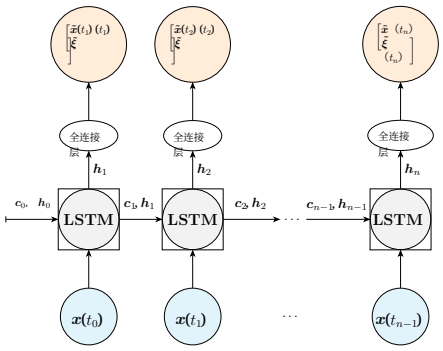

图1：开环配置。

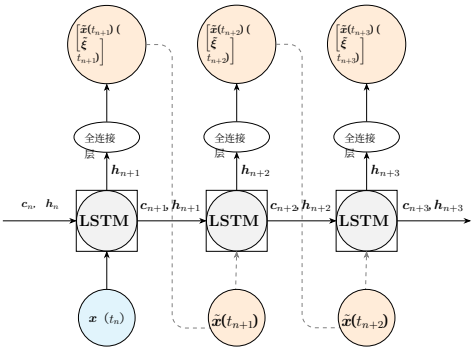

图2：闭环配置。

（或者，也可以采用高阶格式计算时间导数。）将数据驱动损失与加权后的物理信息损失相结合，可得到总损失函数

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{dd} + \alpha_{pi}\mathcal{L}_{pi}, \quad \alpha_{pi} \in \mathbb{R}^{+}, \tag{2}$$

其中，α_{pi} 是一个惩罚超参数。如果 $\alpha_{pi} = 0$，则网络不受控制方程约束，这种情况称为“数据驱动长短期记忆网络”。

通过使用 Adam优化器 [5]最小化损失函数 $\mathcal{L}$ 来优化权重和偏置。采用早停以避免过拟合。在训练和验证期间，网络处于开环配置，如图1所示。训练完成后，使用固定的权重和偏置在测试数据上评估网络，此时网络以闭环配置运行，如图2所示。在这种模式下，网络预测观测变量和未测量变量，同时将观测变量作为下一时间步的输入，使长短期记忆网络能够自主演化。这实际上定义了一个动力系统，并使得对长短期记忆网络进行稳定性分析成为可能。

先前的研究表明，当使用回声状态网络和门控循环单元从混沌系统中学习并预测完整状态时，网络的李雅普诺夫指数与动力系统的李雅普诺夫指数相符 [8,9,13]（在数值容差范围内），从而能够深入了解网络的行为。因此，我们分析了所提出的物理信息长短期记忆网络的李雅普诺夫指数。

4 Lorenz-96模型的状态重构和李雅普诺夫指数

Lorenz-96模型是一组耦合常微分方程，用于描述中纬度大气的大尺度行为，以及标量大气量 [7] 的传输。动力系统 (1) 的显式 Lorenz-96公式为

$$\frac{d}{dt}y_i(t) = (y_{i+1}(t) - y_{i-2}(t))\, y_{i-1}(t) - y_i(t) + F, \quad i = 1, \ldots, N, \tag{3}$$

其中，F 为外部强迫。假设 $y_{-1}(t) = y_{N-1}(t)$、$y_0(t) = y_N(t)$，且 $y_{N+1}(t) = y_1(t)$。状态 $\boldsymbol{y}(t) \in \mathbb{R}^N$ 描述了一个纬圈上 N 个扇区中的大气量。本研究中，我们设定 $F = 8$ 和 $N = 10$，此时系统呈现混沌，并具有三个正李雅普诺夫指数。数值解和参考李雅普诺夫指数均采用一阶欧拉格式计算，时间步为 $\Delta t = 0.01$。最大李雅普诺夫指数为$\lambda_1 \approx 1.59$。训练集由 $N_t = 20000$ 个点组成，相当于$125\tau_\lambda$。我们采用超参数调优来优化关键网络参数。具体而言，隐藏状态和单元状态的维数 N_h 从 $\{20, 50, 100\}$ 中选取，物理信息损失 α_{pi} 的权重则以 10 的幂次从 10^{-9} 变化至 1。

我们采用物理信息长短期记忆网络，在三个测试案例中重构未测量变量：分别重构 (i) $N_\xi = 1$、(ii) $N_\xi = 3$ 和 (iii) $N_\xi = 5$ 未测量变量。我们展示了具有以下参数的网络：(i) $N_h = 100$，$\alpha_{pi} = 0.01$、(ii)$N_h = 100$，$\alpha_{pi} = 0.01$ 和 (iii) $N_h = 50$，$\alpha_{pi} = 0.001$。我们选择测试案例 (i) 和 (ii) 来突出物理信息长短期记忆网络的能力，并选择 (iii) 来展示网络在信息进一步受限时的表现。（我们指出，在完整状态可用时，数据驱动长短期记忆网络和物理信息长短期记忆网络在学习长期统计特性和李雅普诺夫指数方面表现同样出色。）重构基于闭环模式下自主的 $1000\tau_\lambda$ 长轨迹。

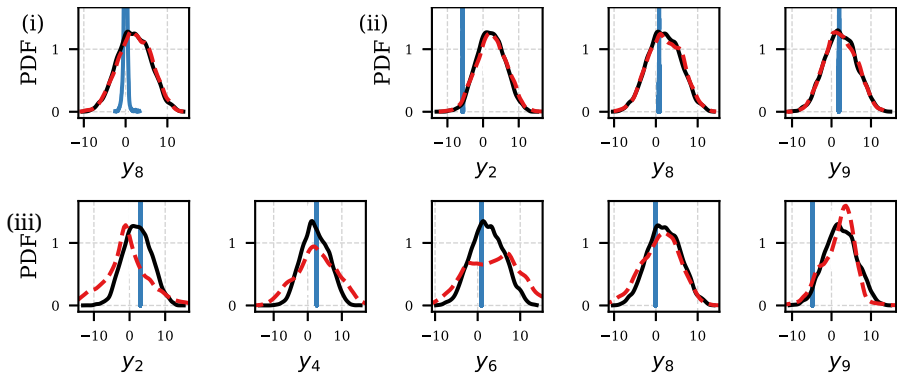

图3：未测量变量的统计重构。比较闭环配置下沿一条 $1000\tau_\lambda$ 轨迹的未测量变量（i）$N_\xi = 1$、（ii）$N_\xi = 3$、（iii）$N_\xi = 5$ 的目标（黑色实线）、物理信息长短期记忆网络（红色虚线）和数据驱动长短期记忆网络（蓝色实线）的概率密度函数（PDF）。

图 3 展示了重构变量的统计特征，这些变量在训练过程中未曾出现，其演化是基于网络的自主演化。数据驱动长短期记忆网络未能重现该解，尤其是对应的类 δ 分布（蓝色）表明系统处于不动点。在测试案例 (i) 和 (ii) 中，物理信息长短期记忆网络准确重现了动力系统的长期行为。在每个时间步，它都能成功地从部分输入外推至完整状态。

案例 (iii) 表明，随着未测量观测值数量增加，重构的复杂度也随之增加，而重构的准确性则有所下降。然而，与数据驱动长短期记忆网络相比，物理信息长短期记忆网络对目标的统计重构准确得多。物理信息长短期记忆网络能够很好地预测观测变量（此处未展示），这表明，融入底层物理规律的知识有助于准确预测完整状态的长期演化。

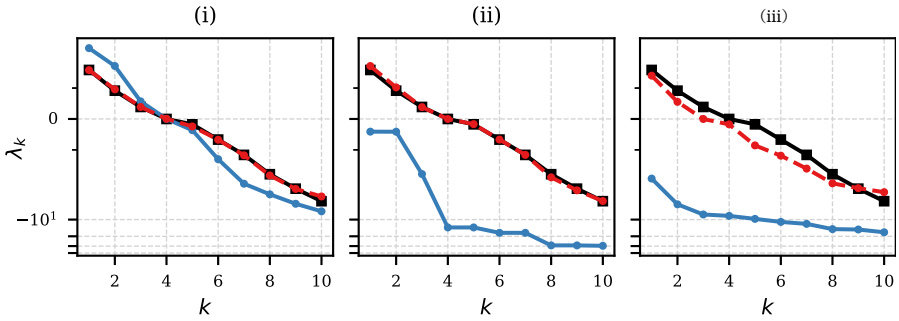

图4：目标值（黑色方块）、PI-LSTM（红色圆点）和数据驱动长短期记忆网络（蓝色圆点）在 (i) $N_\xi = 1$、(ii) $N_\xi = 3$ 和 (iii) $N_\xi = 5$ 个未测量变量情况下的李雅普诺夫指数比较。所有纵轴均采用对数尺度。

图4中，我们比较了三个测试案例中的参考李雅普诺夫指数（黑色方块）与从数据驱动长短期记忆网络（蓝色圆圈）和PI-LSTM（红色圆圈）中提取的李雅普诺夫指数。通过重建未测量变量，这些网络有效地重建了切空间，而切空间的性质体现在李雅普诺夫指数中。在所有情况下，数据驱动长短期记忆网络的李雅普诺夫指数都明显偏离参考值；可用观测越少，与目标值的差异就越大。对于测试案例 (i) 和 (ii)，PI-LSTM 能够高精度地再现目标李雅普诺夫指数，在 λ_1 中的误差分别为 0.28% 和 8%。当进一步减少观测数量，如案例 (iii) 所示，PI-LSTM 的李雅普诺夫指数精度受信息不足的限制，在 λ_1 中误差为 11.6%。图4还显示，在数据驱动长短期记忆网络的案例 (ii) 和 (iii) 中，主导李雅普诺夫指数为负值（$\lambda_1 < 0$），导致得到完全错误的解（不动点解）。这意味着，在 (ii) 和 (iii) 中，数据驱动长短期记忆网络未表现出混沌动力学，而PI-LSTM则再现了混沌行为。

5 结论与未来方向

我们提出物理信息长短期记忆网络（PI-LSTM），通过利用网络的预测计算一阶导数，将控制方程的知识嵌入长短期记忆网络。与没有内部循环连接的物理信息神经网络不同，

PI-LSTM 能捕捉时间动态，同时惩罚违反系统控制方程的预测。我们将 PI-LSTM 用于重构 Lorenz-96 系统的未测量变量；该系统是一个具有三个正李雅普诺夫指数的混沌系统。PI-LSTM 的闭环长期预测能够准确重构多个未测量变量的统计特性。通过计算 PI-LSTM 的李雅普诺夫指数，我们展示了物理信息损失在学习动力学方面的关键作用。这说明，利用物理系统的知识，有助于按照混沌系统的基本特性重构和预测数据。未来的工作将聚焦于利用实验数据重构未测量变量。

参考文献

1. Doan, N., Polifke, W., Magri, L.：《物理信息回声状态网络》。计算科学杂志 **47**，101237（2020）。https://doi.org/10.1016/j.jocs.2020.101237 2. Eckmann, J.P., Ruelle, D.：《混沌与奇异吸引子的遍历理论》。《现代物理评论》**57**，617–656（1985）。https://doi.org/10.1103/RevModPhys.57.617 3. Funahashi, K.I.：《关于通过神经网络近似实现连续映射》。《神经网络》**2**（3），183–192（1989）。https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90003-8 4. Hornik, K., Stinchcombe, M., White, H.：《多层前馈网络是通用逼近器》。《神经网络》**2**（5），359–366（1989）。https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8 5. Kingma, D.P., Ba, J.：《Adam：一种随机优化方法》。载于：第三届学习表征国际会议，ICLR 2015，美国加利福尼亚州圣迭戈，2015年5月7日至9日，会议论文集（2015）。https://doi.org/10.48550/ARXIV.1412.6980 6. Lagaris, I., Likas, A., Fotiadis, D.：《用于求解常微分方程和偏微分方程的人工神经网络》。《IEEE神经网络汇刊》**9**（5），987–1000（1998）。https://doi.org/10.1109/72.712178 7. Lorenz, E.N.：《可预测性：一个部分解决的问题》。载于：可预测性研讨会，1995年9月4日至8日，第1卷，第1–18页。欧洲中期天气预报中心，欣菲尔德公园，雷丁（1996）。https://doi.org/10.1017/CBO9780511617652.004 8. Margazoglou, G., Magri, L.：《基于数据的混沌系统稳定性分析》（2022）。https://doi.org/10.48550/ARXIV.2210.06167 9. Pathak, J., Lu, Z., Hunt, B.R., Girvan, M., Ott, E.：《使用机器学习复现混沌吸引子并根据数据计算李雅普诺夫指数》。《混沌：非线性科学跨学科期刊》**27**（12），121102（2017）。https://doi.org/10.1063/1.5010300 10. Racca, A., Magri, L.：《自动微分物理信息回声状态网络（api-esn）》。载于：国际计算科学会议，第323–329页。施普林格（2021）。https://doi.org/10.48550/ARXIV.2101.00002 11. Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.：《物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架》。《计算物理学杂志》**378**，686–707（2019）。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045

12. Sangiorgio, M., Dercole, F., Guariso, G.：《使用深度神经网络预测含噪混沌系统》。《混沌、孤子与分形》**153**，111570（2021）。https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111570 Vlachas, P., Pathak, J., Hunt, B., Sapsis, T., Girvan, M., Ott, E., Koumoutsakos, P.：《循环神经网络中用于预测复杂时空动力学的反向传播算法和储层计算》。《神经网络》**126**，191–217（2020）。https://doi.org/10.1016/j.neunet.2020.02.016