利用哈密顿高斯过程高效学习能量守恒动力学

Magnus Ross *magnus.ross@postgrad.manchester.ac.uk*
曼彻斯特大学

Markus Heinonen *markus.o.heinonen@aalto.fi*
阿尔托大学

arXiv:2303.01925v1 [stat.ML] 3 Mar 2023

摘要

哈密顿力学是自然科学的基石之一。近年来，人们对直接从轨迹数据中以自由形式学习哈密顿系统表现出浓厚兴趣。以往的方法解决了如何从大量短时、低噪声轨迹中学习的问题，但如何从少量长时含噪轨迹中学习，同时考虑模型不确定性，尚未得到探讨。本文提出了一种用于哈密顿系统的高斯过程模型，采用高效的解耦参数化，并引入一种能量守恒射击法，可从短时和长时轨迹中进行稳健推断。我们展示了该方法在多种数据场景下学习哈密顿系统的效果。

1 引言

哈密顿力学是最重要的动力系统类别之一，用于描述从电磁学到行星运动等广泛的自然现象（Salmon，1988年；Taylor，2005年）。本文考虑由哈密顿量 哈密顿量 $\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}) \in \mathbb{R}$ 定义的时不变系统，其中位置 $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^D$ 和动量$\mathbf{p}(t) \in \mathbb{R}^D$ 随时间 $t \in \mathbb{R}_+$变化；哈密顿量可视为系统构型的总能量。哈密顿系统的演化规则由哈密顿方程定义

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}, \qquad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}. \tag{1}$$

我们研究如何仅根据观测到的系统轨迹学习任意形式的哈密顿量$\mathcal{H}(\cdot)$。传统的机理方法需要手动推导目标系统的哈密顿量$\mathcal{H}$ 及其演化方程，并可能根据数据估计系统系数（Seinfeld，1970年；Hernandez & Poznyak，2020 年）。然而，对于许多系统，哈密顿量要么未知，要么过于复杂，无法从第一性原理推导得出（Schmidt & Lipson，2009年；Battaglia et al., 2018）。近年来，人们提出了许多利用神经网络学习哈密顿系统的数据驱动方法（Greydanus et al., 2019；Cranmer et al., 2020；Zhong 等人，2019；Finzi et al., 2020）。这些方法返回点解，无法刻画解的不确定性，而在数据有限时，这一点至关重要。

贝叶斯方法（如高斯过程（GP））可用于为动力系统的导数函数设定先验分布，从而结合观测值计算系统动力学的后验分布（Ridderbusch 等人，2021 年；Hegde 等人，2022年）。本文为哈密顿量设定高斯过程先验，并直接根据含噪轨迹数据推断其后验分布，如图1所示。我们提出了一种守恒能量的变分多重射击方案，可高效地对长轨迹进行推断。由于梯度消失或梯度爆炸问题，长轨迹通常会给动力学模型带来挑战（Ribeiro 等人，2020 年；Metz 等人，2021 年）。近期有两项研究提出了同样旨在直接从轨迹数据学习哈密顿量的高斯过程模型：辛谱高斯过程

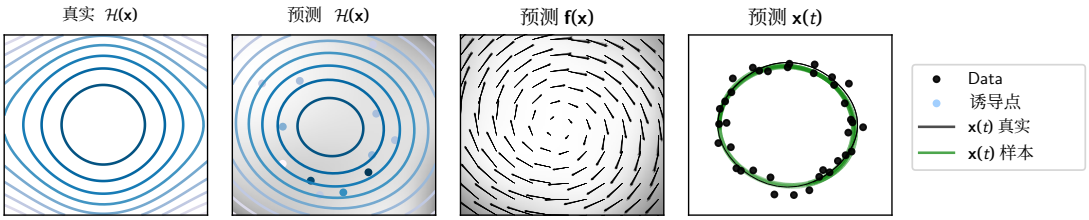


图1：**所提出的模型**。我们在哈密顿量$\mathcal{H}(\mathbf{x})$上放置高斯过程先验，并利用一组位于$\mathcal{H}$上的诱导点，将函数样本通过哈密顿方程映射为系统导数$\mathbf{f}(\mathbf{x})$样本，再应用常微分方程求解器，得到样本轨迹$\mathbf{x}(t)$。阴影表示模型不确定性。

（SSGP）在傅里叶域中学习系统（Tanaka 等人，2022年），而保结构高斯过程（SPGP）则将模型嵌入数值辛积分器中（Ensinger 等人，2022年）。这两种模型都试图通过启发式方法，从完整数据中的短子序列进行学习，以规避轨迹长度带来的问题；但我们发现，这种方法对具有复杂行为的系统效果不佳。

在这项工作中，我们针对哈密顿系统的高斯过程模型，在推断方法和实验评估两方面提出了多项贡献。概括如下：

- 我们提出了一种由诱导变量参数化的哈密顿高斯过程，可高效地进行函数采样。
- 我们将 Hegde 等人（2022）的变分多重射击法应用于能量守恒哈密顿系统，从而大幅加快优化并提升性能。
- 我们进行了广泛的实验评估，发现所提出的方法在多种设置下表现出色，同时讨论了基于高斯过程的方法存在局限性的领域。

2 哈密顿力学入门

我们考虑一个定义在由正则位置$\mathbf{q} \in \mathbb{R}^D$（例如坐标或角度）及其对应的正则动量$\mathbf{p} \in \mathbb{R}^D$构成的 $2D$ 维相空间上的哈密顿动力系统。该系统由哈密顿能量函数$\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}\ t) \in \mathbb{R}$表征（Thornton & Marion，2004年）。本文将讨论范围限定在常见的时间不变哈密顿量情形，即$\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p}\ t) := \mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})$；此时，哈密顿能量沿系统轨迹守恒。系统随时间的演化由一组耦合的一阶微分方程描述，这组方程称为哈密顿方程，

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}, \qquad \dot{\mathbf{p}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}. \tag{2}$$

哈密顿方程的结构确保各种运动常数沿系统轨迹守恒。其中最重要的运动常数是系统的能量，但还可能包括线动量、角动量及其他量。能量守恒可表示为

$$\dot{\mathcal{H}} = \frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}\dot{\mathbf{p}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}} = 0. \tag{3}$$

By 利用哈密顿方程，我们得到一个包含 $2D$ 个一阶微分方程的系统 ，

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} \\ -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2D} \tag{4}$$

其中，我们将 $\mathbf{q}$ 和$\mathbf{p}$ 拼接成 $2D$ 维相空间状态向量 $\mathbf{x}$，而 $\mathbf{f}$： $\mathbb{R}^{2D} \mapsto \mathbb{R}^{2D}$ 是系统时间微分。通过前向积分，我们得到系统轨迹

$$\mathbf{x}(t) := \mathbf{x}(t; \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0 + \int_0^t \mathbf{f}(\mathbf{x}(\tau))d\tau, \tag{5}$$

其中，$\mathbf{x}(t)$ 表示系统在时间 t 的状态，$\mathbf{x}_0$ 表示系统的初始状态， $\tau \in [0, t]$ 是积分时间变量。通常，对于机械系统，哈密顿量是通过确定各组成部分的动能和势能来求得的，这些能量构成总能量 $\mathcal{H}$。对于更复杂的系统，这一过程会愈发困难。在本研究中，我们旨在省去这一过程，直接从轨迹数据中学习哈密顿量，而不对其函数形式作任何假设。

3 哈密顿量高斯过程

为了推断系统的哈密顿量，我们假设它遵循高斯过程（GP）先验（综述参见 Williams & Rasmussen（2006年））

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(0, k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')), \tag{6}$$

它对一种 能量曲面上的分布进行建模，其均值为零 $\mathbb{E}[\mathcal{H}(\mathbf{x})] = 0$ ，协方差经过核化 ，

$$\mathrm{cov}[\mathcal{H}(\mathbf{x}), \mathcal{H}(\mathbf{x}')] = k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \qquad k_{\mathcal{H}} : \mathbb{R}^{2D} \times \mathbb{R}^{2D} \mapsto \mathbb{R}. \tag{7}$$

在高斯过程中，概率 函数在任意有限个评估点上的取值服从多元高斯分布

$$(\mathcal{H}(\mathbf{x}_1), \ldots, \mathcal{H}(\mathbf{x}_N)) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, k_{\mathcal{H}}(\mathbf{X}, \mathbf{X})), \tag{8}$$

其中 $k_{\mathcal{H}}\mathbf{X}$，$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 是一个正定核矩阵，其元素为 $[k_{\mathcal{H}}\mathbf{X}$，$\mathbf{X}]_{ij} = k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}_i$，$\mathbf{x}_j)$。为了在使用哈密顿量的高斯过程表示时进行推断，我们采用 Hegde 等人（2022）所述的方法，该方法能够对导数函数由高斯过程建模的常微分方程系统进行推断。这是可行的，因为对哈密顿量设定高斯过程先验意味着对导数函数也隐含着高斯过程先验，正如我们将在下一节中看到的那样。

3.1 时间导数

给定 $\mathcal{H}$ 的先验，为了计算用于推断和采样的轨迹，需要定义系统的时间导数 $\dot{\mathbf{x}}$。公式（4）可改写为（Rath 等人，2021）：

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathcal{L}\mathcal{H}(\mathbf{x}), \quad \text{with} \quad \mathcal{L} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Poisson tensor}} \nabla_{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \partial_p \\ -\partial_q \end{pmatrix}. \tag{9}$$

高斯过程在应用线性算子后仍为高斯过程（Williams & Rasmussen，2006年；Agrell，2019），因此哈密顿量及其向量场服从零均值联合高斯过程

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \sim \mathcal{GP}\left(0, \begin{pmatrix} k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') & \mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ \mathbf{k}_{\mathbf{f}\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') & K_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \end{pmatrix}\right), \tag{10}$$

由哈密顿方程诱导的协方差，

$$\mathrm{cov}\left[\mathcal{H}(\mathbf{x}), \mathbf{f}(\mathbf{x}')\right] = \mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{pmatrix} \partial_p \\ -\partial_q \end{pmatrix} k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \qquad \in \mathbb{R}^{2D \times 1} \tag{11}$$

$$\mathrm{cov}\left[\mathbf{f}(\mathbf{x}), \mathbf{f}(\mathbf{x}')\right] = K_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{pmatrix} \partial_{pp}^2 & -\partial_{pq}^2 \\ -\partial_{qp}^2 & \partial_{qq}^2 \end{pmatrix} k_{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \qquad \in \mathbb{R}^{2D \times 2D}. \tag{12}$$

3.2 诱导点

为了实现可处理的推断和采样，我们引入一组诱导点（Snelson 与 Ghahramani，2006年），以获得无限联合高斯过程（$\mathcal{H}$，$\mathbf{f}$）的有限参数化表示。我们在相空间位置$\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_M) \in \mathbb{R}^{M\times 2D}$处，利用编码能量伪观测值 $u = \mathcal{H}(\mathbf{z})$ 的 M 诱导能量$\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_M) \in \mathbb{R}^M$对哈密顿量进行条件化。基于这些伪观测值条件化后的向量场仍然是一个高斯过程，

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})\big|\big(\mathcal{H}(\mathbf{Z}) = \mathbf{u}\big) \sim \mathcal{GP}\Big(\underbrace{\mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{x},\mathbf{Z})k_{\mathcal{H}}(\mathbf{Z},\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{u}}_{\text{mean}}, \underbrace{K_{\mathbf{f}}(\mathbf{x},\mathbf{x}') - \mathbf{k}_{\mathbf{f}\mathcal{H}}(\mathbf{x},\mathbf{Z})k_{\mathcal{H}}(\mathbf{Z},\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{Z},\mathbf{x}')}_{\text{covariance}}\Big), \tag{13}$$

其中，集合输入指的是在这些点上展开相应函数。通过改变诱导参数（$\mathbf{u}$，$\mathbf{Z}$），我们可以近似表示任意哈密顿量及其唯一的向量场，随后对其进行前向积分，以获得模拟轨迹解。在后续章节中，这些参数是需要学习的主要变量。我们的方法与 Hegde 等人（2022）不同：我们将诱导点置于哈密顿量上，而非导数函数上。因此，我们需要一组标量诱导点，而不是向量值的 $2D$ 维诱导点。

3.3 采样

为了模拟轨迹 $\mathbf{x}(0)\ldots,\mathbf{x}(T)$，我们必须能够从高斯过程（13）中采样一个持久的导数函数或向量场 $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f} \sim \mathcal{GP}$，并沿轨迹 $\mathbf{x}(t)$ 对其求值。从高斯过程中采样函数的标准方法基于核矩阵分解；对于 N 个求值点，其复杂度为 $\mathcal{O}(N^3)$，难以承受。我们遵循 Hegde 等人（2022），通过采用“解耦”参数化（Wilson 等人，2020），从哈密顿量而非导数函数中进行采样，从而绕过这一问题，

$$\mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{Z}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{S} w_i\phi_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{M}\nu_j k(\mathbf{x},\mathbf{z}_j), \tag{14}$$

其中，$w_i \sim \mathrm{N}(0,1)$ 是 S 傅里叶基函数 $\phi_i(\mathbf{x}) = \cos(\boldsymbol{\alpha}_i^\top\mathbf{x} + \beta_i)$ 的随机权重，其频率 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 从 k 的谱密度中采样得到，且 $\beta_i \sim U(0, 2\pi)$（Rahimi & Recht，2007）；$\boldsymbol{\nu} = k(\mathrm{Z},\mathrm{Z})^{-1}(\mathrm{u} - \boldsymbol{\Phi}\mathrm{w})$，其中 $\boldsymbol{\Phi} = \phi(\mathrm{Z}) \in \mathbb{R}^{M\times S}$表示在诱导输入上对基函数求值。我们用 $\tilde{\mathrm{w}} = \{\mathrm{w}, \boldsymbol{\alpha}, \beta\}$ 表示所有与傅里叶相关的参数。通过对 $\tilde{\mathrm{w}}$ 进行采样并将其固定，我们可以得到一个确定性函数样本，并可在任意位置对其求值。最后，我们将能量曲面 H 转换为导数向量场：$\mathrm{f}_{\tilde{\mathrm{w}},\mathrm{u},\mathrm{Z}}(\mathrm{x}) = \mathrm{LH}_{\tilde{\mathrm{w}},\mathrm{u},\mathrm{Z}}(\mathrm{x})$，从而可以通过数值积分进行轨迹展开。

3.4 概率模型

我们的目标是根据真实系统轨迹的一个或多个含噪实现推断 $\mathcal{H}$，这些轨迹的长度和时间间隔不受限制且可以不规则，每条轨迹的未知初始条件也各不相同。我们针对单条观测轨迹给出简化记法（多条轨迹的推导见附录 A.3）。

将轨迹观测记为$\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1,\ldots\mathbf{y}_N)^T \in \mathbb{R}^{N\times 2D}$，其中$\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_{\mathrm{true}}(t_i) + \boldsymbol{\epsilon}_i \in \mathbb{R}^{2D}$是系统在时间 $t_i \in (t_1,\ldots,t_N)$ i 时的第 i 个噪声状态，N是观测到的时间步数。我们首先假设诱导能量和初始状态$\mathbf{x}_0$,服从高斯先验

$$p(\mathbf{u}) = \mathcal{N}(\mathbf{u}|\mathbf{0}, k(\mathbf{Z},\mathbf{Z})) \tag{15}$$
$$p(\mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_0|\mathbf{0}, \mathbf{I}), \tag{16}$$

其中 $k(\mathbf{Z}, \mathbf{Z}) \in \mathbb{R}^{M\times M}$是诱导状态的协方差矩阵，$[k(\mathbf{Z}, \mathbf{Z})]_{i,\,j} = k_{\mathcal{H}}(\mathbf{z}_i, \mathbf{z}j)$。我们遵循稀疏高斯过程中的惯例，将诱导位置 $\mathbf{Z}$ 视为仅进行优化的超参数，而不是推断其后验分布（Hensman 等人，2015a）（深入讨论请参见 Hensman 等人（2015b）；Rossi 等人（2021 年））。为简洁起见，下面的概率模型表示中省略所有超参数。

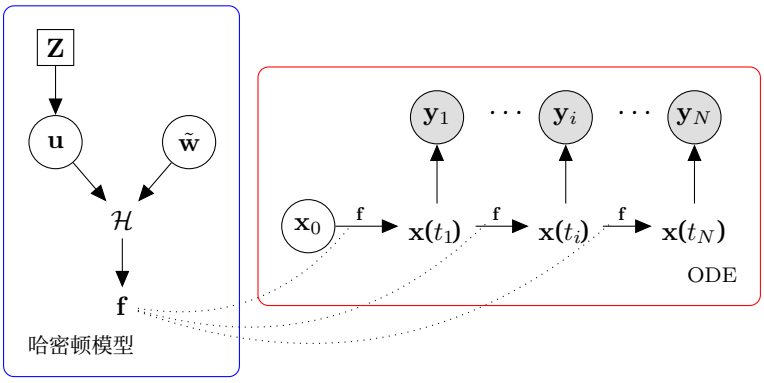


图 2：模型（蓝色）和常微分方程系统（红色）的板式图。我们用阴影节点表示观测值 $\{\mathbf{y}_i\}$，用白色节点表示随机变量 ($\tilde{\mathbf{w}}$、$\mathbf{u}$、$\mathbf{x}_0$)，用矩形表示超参数 ($\mathbf{Z}$)，用无形状节点表示函数($\mathcal{H}$、$\mathbf{f}$、$\mathbf{x}$)。两侧包含相同的 $\mathbf{f}$。

联合分布　　关于数据 $\mathbf{Y}$的分布，采样参数 $\tilde{\mathbf{w}}$、能量变量 $\mathbf{u}$ 和初始状态 $\mathbf{x}_0$ 是

$$p(\mathbf{Y}, \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) = p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)p(\tilde{\mathbf{w}})p(\mathbf{u})p(\mathbf{x}_0) \tag{17}$$

$$= \prod_{i=1}^{N} \Big[p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)\Big] p(\tilde{\mathbf{w}})p(\mathbf{u})p(\mathbf{x}_0), \tag{18}$$

其中似然为

$$p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) = \mathcal{N}\Big(\mathbf{y}_i\big|\mathbf{x}(t), \sigma_{\text{obs}}^2 I\Big), \qquad \mathbf{x}(t) := \mathbf{x}_{\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{x}_0}(t) \tag{19}$$

其中，我们首先根据公式 (14) 计算哈密顿量 $\mathcal{H}$，然后根据公式 (4) 计算其导数 $\mathbf{f}$，最后根据公式 (5) 向前积分 $\mathbf{x}_0 \overset{\mathbf{f}}{\mapsto} \mathbf{x}(t)$。这里的联合分布形式与 Hegde 等人（2022）相呼应。我们的目标是推断难以处理的后验分布

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0|\mathbf{Y}) = \int p(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0|\mathbf{Y}, \tilde{\mathbf{w}})p(\tilde{\mathbf{w}})d\tilde{\mathbf{w}}, \tag{20}$$

关于初始状态 $\mathbf{x}_0$ 和诱导变量 $\mathbf{u}$，其中我们假设可处理的采样变量 $\tilde{\mathbf{w}}$已被边缘化。图 2 以图形形式展示了模型中各变量之间的依赖结构。我们采用变分推断来近似后验分布。

3.5 变分推断

我们遵循 Hegde 等人（2022年）的做法，采用随机变分推断框架（Hoffman 等人，2013年；Hensman 等人，2013年）来推断公式（20）的后验分布。我们假设采用因子化后验近似

$$q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) = q(\mathbf{u})q(\mathbf{x}_0) \tag{21}$$

$$q(\mathbf{u}) = \mathcal{N}(\mathbf{u}|\mathbf{m}, \mathbf{Q}) \tag{22}$$

$$q(\mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_0|\mathbf{m}_0, \mathbf{Q}_0), \tag{23}$$

具有变分自由参数 $\theta = (\mathbf{m}、\mathbf{Q}、\mathbf{m}_0, \mathbf{Q}_0)$。变分推断旨在求取 $\arg\min_\theta \text{KL}\left[q_\theta(\mathbf{u}、\mathbf{x}_0) \,||\, p(\mathbf{u}、\mathbf{x}_0|\mathbf{Y})\right]$，即近似后验分布$q$ 与真实后验分布之间的 Kullback-Leibler 散度，这等价于最大化证据下界（Blei 等人，2017 年）

$$\mathcal{F}(\theta, \mathbf{Z}) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{u})q(\mathbf{x}_0)p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\sum_{i=1}^{N} \log p\big(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0\big)\right] - \text{KL}\left[q(\mathbf{u})||p(\mathbf{u})\right] - \text{KL}\left[q(\mathbf{x}_0)||p(\mathbf{x}_0)\right]. \tag{24}$$

期望对诱导能量$\mathbf{u}$、初始状态 $\mathbf{x}_0$ 估计值以及由 $\tilde{\mathbf{w}}$确定的傅里叶函数采样进行积分。似然需要对轨迹 $\mathbf{x}_{\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{x}_0}(t)$ 进行数值求解。期望通过蒙特卡罗方法取平均，而 KL 项具有闭式解。通过关于 θ 和 $\mathbf{Z}$的梯度上升来最大化该下界。详见附录 A.1。

4 能量守恒射击法并行化

对于长序列而言，实际优化变分下界（24）颇具挑战，原因在于存在不稳定梯度问题（Ribeiro 等人，2020 年；Metz 等人，2021 年）。对于较长的轨迹，早期时刻的微小扰动可能在后续不断累积，进而在较晚时刻产生巨大影响，导致下界的梯度消失或爆炸（Haber 与 Ruthotto，2017 年）。尽管这一问题主要是在神经网络的背景下进行讨论的（Kim 等人，2021 年；Choromanski 等人，2020 年），Hegde 等人（2022）提出了一种针对高斯过程常微分方程的概率射击法解决方案。射击法是一种常微分方程优化技术，其中将“长”解 $\mathbf{x}(0) \mapsto \mathbf{x}(T)$ 拆分为连续的线段 $[\mathbf{x}(t_l),\mathbf{x}(t_{l+1}))$，并行求解这些线段，同时确保相邻线段相匹配（Hemker，1974 年；Bock 与 Plitt，1984 年）（综述参见 Diehl 与 Gros（2020 年））。

4.1 能量守恒射击模型

我们将 Hegde 等人（2022）的射击法公式改编到哈密顿高斯过程常微分方程中，以稳定梯度并支持在更长序列上进行学习。我们首先为系统增添一组 $L < N$射击变量 $\mathbf{S} = \{\mathbf{s}_l\}_{l=0}^{L} \in \mathbb{R}^{L\times 2D}$，表示系统在时刻 $t_l \in \{t_l\}_{l=0}^{L}$的状态，并将连续状态解 $\mathbf{x}(t;\mathbf{x}_0)$ 划分为 L 个不同的分段，各分段从初始状态 $\mathbf{s}_l$ 出发，其分段解为

$$\mathbf{x}(t;\mathbf{s}_l) = \mathbf{s}_l + \int_{t_l}^{t_{l+1}} \mathbf{f}(\mathbf{x}(\tau))d\tau, \qquad \text{for } t \in [t_l, t_{l+1}]. \tag{25}$$

也就是说，要计算特定时刻 t的解，我们需要找到它所属的区间 $[t_l, t_{l+1}]$，并从 $\mathbf{s}_l$开始求解。由于每个分段的非线性解映射较简单，这种划分能带来更稳定的梯度（Diehl 与 Gros，2020）。此外，各分段可以并行求解。射击法的关键问题是确保在分段边界 t_l处满足连续性$\mathbf{x}(t_l; s_{l-1}) = \mathbf{s}_l$，否则组合后的解将不连续。

我们使用误差模型对此进行表述

$$\mathbf{s}_l = \mathbf{x}(t_l;\mathbf{s}_{l-1}) + \boldsymbol{\xi}_l, \qquad \boldsymbol{\xi}_l \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_\xi^2 I) \tag{26}$$

其中，$\boldsymbol{\xi}_l \in \mathbb{R}^{2D}$ 是位置和动量的段间容差。为保持能量守恒，我们还引入能量容差 χ，以编码各段之间允许的能量变化，

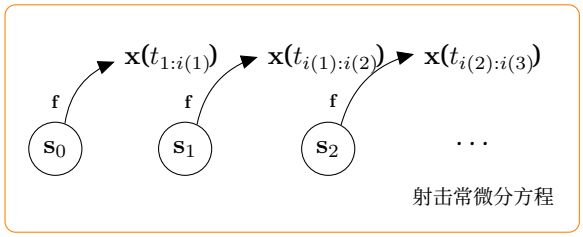


图 3：射击系统。

$$\mathcal{H}(\mathbf{s}_l) = \mathcal{H}\big(\mathbf{x}(t_l;\mathbf{s}_{l-1})\big) + \chi_l, \qquad \chi_l \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\chi^2). \tag{27}$$

这些约束共同导出了一个乘积先验

$$p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1}, \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}) = \mathcal{N}\big(\mathbf{s}_l|\mathbf{x}(t_i;\mathbf{s}_{l-1})\ \sigma_\xi^2\mathbf{I}\big)\mathcal{N}\left(\mathcal{H}(\mathbf{s}_l)|\mathcal{H}\big(\mathbf{x}(t_i;\mathbf{s}_{l-1})\big), \sigma_\chi^2\right), \qquad \mathcal{H}(\cdot) := \mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u}}(\cdot) \tag{28}$$

其中，$\mathcal{H}$ 是以 $\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}$ 为条件的哈密顿函数，而 $\mathbf{x}(t_l;\mathbf{s}_{l-1})$ 通过方程 (4) 和 (5) 依赖于 $\mathcal{LH}$。我们对初始状态设置高斯先验，$p(\mathbf{s}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{s}_0|\mathbf{0}, \mathbf{I})$。令 $\mathbf{s}^{l(i)}$ 表示时间 t_i 之前的最后一个射击变量。射击增强模型的联合分布为

$$p(\mathbf{Y}, \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{S}) = \underbrace{\left[\prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{s}_{l(i)})\right]}_{\text{shooting likelihood}} \underbrace{\left[\prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1}, \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u})\right]}_{\text{tolerance prior}} p(\tilde{\mathbf{w}})p(\mathbf{u})p(\mathbf{s}_0). \tag{29}$$

4.2 变分射击推断

后验分布 $p(\mathbf{u},\mathbf{S}|\mathbf{Y})$ 的推断同样难以处理。我们定义变分后验近似$q(\mathbf{u},\mathbf{S}) = q(\mathbf{u})\prod_{l=0}^{L} q(\mathbf{s}_l)$，并在射击状态上采用独立高斯分布 $q(\mathbf{s}_l) = \mathcal{N}(\mathbf{s}_l|\mathbf{a}_l,\Sigma_l)$。由此得到新的证据下界

$$\mathcal{F}(\theta,\mathbf{Z}) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{u})p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_{l(i)})}\left[\log p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)})\right] + \sum_{l=1}^{L}\mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_l)q(\mathbf{s}_{l-1})}\left[\log p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u})\right]\right] \tag{30}$$
$$-\sum_{l=1}^{L}\mathbb{H}[q(\mathbf{s}_l)] - \mathrm{KL}[q(\mathbf{s}_0)\,||\,p(\mathbf{s}_0)] - \mathrm{KL}[q(\mathbf{u})\,||\,p(\mathbf{u})],$$

其中 $\theta = (\mathbf{m},\ \mathbf{Q},\ \{\mathbf{a}_l,\ \Sigma_l\})$。第一个期望项是每个观测的"短"似然，仅根据先前的射击状态求解。第二项确保射击区段之间的匹配质量。其余各项则对模型进行正则化。此界与 Hegde 等人（2022）提出的界相似，但将诱导点置于哈密顿量上，而非导数函数上，并为射击状态加入了一个额外的基于能量的匹配项。详情请参阅附录 A.2。

5 相关工作

在方法上，我们的工作以 Hegde 等人（2022）为基础；他们提出使用高斯过程，通过变分多重射击学习非哈密顿常微分方程，从而高效地推断长轨迹。我们进一步在系统和射击方法中引入哈密顿结构，以控制能量守恒。

哈密顿高斯过程。与我们最相近的现有工作是 Tanaka 等人（2022）同期发表的辛谱高斯过程（SSGP）模型，以及 Ensinger 等人（2022）提出的保结构高斯过程（SPGP）模型；二者都在哈密顿函数 $\mathcal{H}$ 上设置了高斯过程先验。SSGP 模型与我们密切相关，但推断方法有所不同。该模型使用标准随机傅里叶特征进行采样，这会导致方差枯竭和不佳的不确定性表示（Wilson 等人，2020），并在随机傅里叶特征权重上设置变分分布，而不是使用诱导能量。SPGP 提出将哈密顿高斯过程专门嵌入辛积分器中，以确保数值体积保持。两种模型都不支持初始状态估计，也不使用射击近似，而是采用启发式小批量处理轨迹的子序列。

基于高斯过程的哈密顿映射。许多研究旨在根据初始和终止条件学习哈密顿流映射$\mathbf{x}(t_{\text{init}}) \mapsto \mathbf{x}(t_{\text{final}})$或相关映射。这些方法通常需要大量低噪声轨迹（几十条或几百条）。Rath 等人（2021）使用高斯过程学习哈密顿系统的流映射，为不可分系统提供一种隐式学习方案，并为可分系统提供一种更高效的显式方案。
Offen 和 Ober-Blöbaum（2022）提出了一种称为影子辛积分（SSI）的方法，该方法能够补偿正向数值积分产生的误差，从而更准确地保持辛结构。Bertalan 等（2019）直接在相空间中学习哈密顿量，这需要利用一阶差分近似坐标的时间导数，从而引入额外误差，尤其是在处理含噪数据时。

哈密顿神经网络。人们对使用神经网络（NN）学习哈密顿动力学表现出了浓厚兴趣。Greydanus 等人（2019）提出了哈密顿神经网络（HNN），通过基于哈密顿方程的辅助损失来训练神经网络预测动力学。
HNN 的原始形式需要计算坐标的时间导数，无法直接从轨迹数据中学习。Zhong 等人（2019）提出了一个 HNN 版本，使用常微分方程求解器计算轨迹展开，因此能够直接从轨迹中学习，同时还纳入了控制信号。
Finzi 等人（2020）针对机械系统提出了受约束哈密顿神经网络，其中系统的结构被编码为约束，并在笛卡尔坐标中学习哈密顿量。Gruver 等人（2021）研究了哈密顿神经网络和拉格朗日神经网络中归纳偏置的影响，并发现对于真实系统，不具备能量守恒特性的基线模型往往表现更好。

6 实验

本节将对我们的方法在多种哈密顿系统上的表现进行实验评估。我们实现该模型的代码可在 `https://github.com/magnusross/hgp` 获取。

6.1 实验设置

任务。除一个用于说明的初始示例外，我们研究两项不同的任务：

- **任务1：轨迹预测**。在此任务中，向模型提供一条长度为 T、初始条件未知的含噪轨迹。模型利用 $[0, T]$ 时间间隔学习系统，并需要向前预测该轨迹 $[T, 2T]$。

- **任务2：初始条件外推**。在此任务中，向模型提供 K 条长度固定、来自不同未知初始条件的含噪轨迹。评估模型根据一组新的无噪初始条件预测轨迹的能力。

大多数以往关于学习哈密顿量的研究都涉及任务2的各种变体，例如 Tanaka 等人（2022）；Rath 等人（2021）。Ensinger 等人（2022）和 Hegde 等人（2022）等研究提供了任务1的实验，但此前没有研究对这两项任务进行联合评估。对于两项任务，我们均报告轨迹和哈密顿能量的均方根误差（RMSE），以及平均负对数似然（MNLL）。每项实验均采用不同的初始条件重复进行10次。由于所有模型的结果波动都很大，我们在所有表格和图表中报告中位数和四分位距。附录C列出了均值和标准误表格。

系统。我们在三个真实的哈密顿系统上评估模型：固定摆（FP）、弹簧摆（SP）（Lynch，2000）以及 Henon-Heiles（HH）系统（Henon & Heiles，1964）。FP 是一个二维系统，具有可预测的周期动力学，可作为简单的测试案例。SP 和 HH 均为四维系统，表现出更复杂的混沌动力学。系统定义如下：

$$
\begin{aligned}
&\text{(fixed pendulum)} && \mathcal{H}_{\mathrm{FP}}(q,p) = mgr(1-\cos q) + \frac{1}{2mr^2}p^2 \\
&\text{(spring pendulum)} && \mathcal{H}_{\mathrm{SP}}(q_1,q_2,p_1,p_2) = \frac{1}{2m}\left(p_1^2 + \frac{p_2^2}{(q_1+r)^2}\right) + \frac{1}{2}kq_1^2 - mgr\cos q_2 \\
&\text{(Henon-Heiles)} && \mathcal{H}_{\mathrm{HH}}(q_1,q_2,p_1,p_2) = \frac{1}{2}\left(q_1^2+q_2^2+p_1^2+p_2^2\right) + \mu\left(q_2q_1^2 - \frac{1}{3}q_2^3\right),
\end{aligned}
$$

其中 m 是摆质量，r 是其静止长度，g 是重力场强度，k 是弹簧常数，μ 是一个控制 HH 势能大小的参数。有关各系统的更多详情，请参见附录 B.1。除非另有说明，我们为每项任务的训练数据添加高斯噪声，其方差设为信号方差的 5%。在每次实验中，我们从系统的相空间中抽取不同的初始条件，为每次重复生成数据；对于所测试的每个模型，使用相同的数据。

我们的 HGP 设置。对于任务1，我们使用 $M = 48$ 个诱导点；对于任务2，则使用 $M = 128$ 个。全程使用 $S = 256$ 个基函数，并采用 Adam 优化器（Kingma & Ba，2015）以学习率 $3e^{-3}$进行 2500 次迭代优化。训练期间，我们使用模型中的单个样本来估计难以解析的期望；进行预测时，则使用 32 个样本。除非另有说明，我们采用射击近似，每 4 个数据点使用一个射击状态，即 $L = \lfloor N/4 \rfloor$。我们使用`torchdiffeq` 软件包（Chen，2018）及隐式 `dopri5` 求解器。有关 HGP 和所有基线模型设置的更多细节，请参见附录 B.3。

哈密顿量感知初始化。我们通过对变分参数和模型超参数进行梯度上升，来优化方程（24）和（30）中的界限。这个优化问题

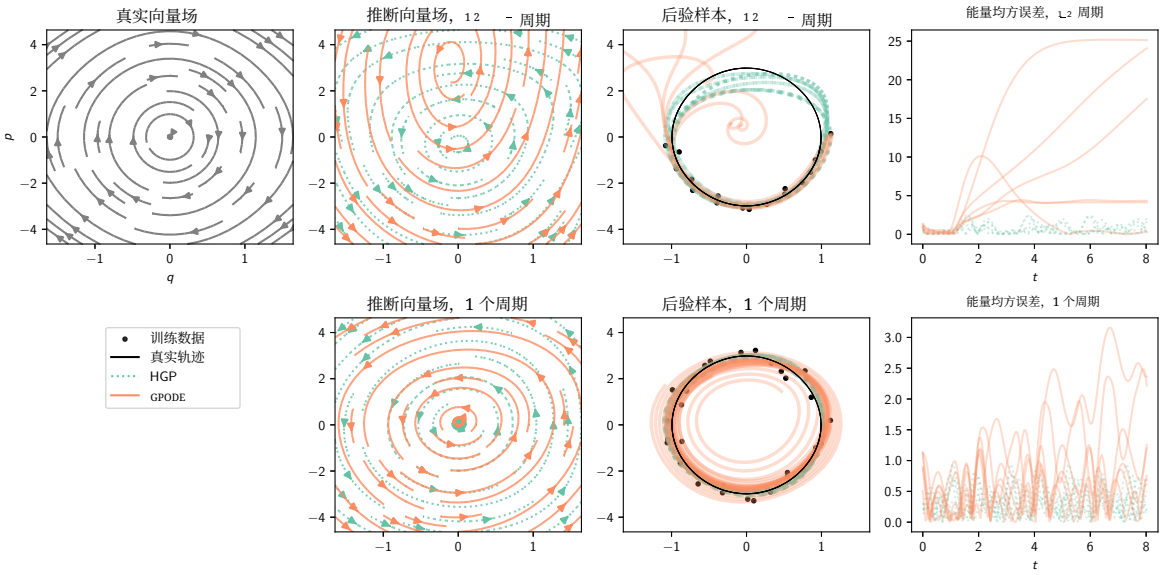


图4： **HGP 能够准确地对保持能量的哈密顿量建模**。上排：真实摆系统（FP），以及 HGP（橙色）和非哈密顿 GPODE 基线（绿色）基于半个周期数据学习得到的向量场，随后是样本轨迹及沿轨迹的预测能量误差。下排：基于完整周期的估计结果。基线能够拟合向量场，但无法捕捉能量。

颇具挑战，因此良好的初始化尤为重要，特别是对于哈密顿高斯过程的变分参数。注意到导数函数 $\mathbf{f}$ 和$\mathcal{H}$联合构成一个高斯过程，因此我们可以据此获得良好的初始化。利用轨迹数据的近似数值导数，我们可以构造一些关于$\mathbf{f}$的数据，再根据方程（10）至（12）对其进行条件化，从而估计哈密顿量的均值函数。我们将此估计值用作变分均值$\mathbf{m}$的初始值。详情见附录 B.2。

神经网络基线。 我们将结果与两种神经网络模型进行比较：标准的（非哈密顿）神经常微分方程（NODE）（Chen 等人，2018），其时间导数由神经网络表示为$\mathbf{f}_{\theta}(\mathbf{x})$；以及一种 HNN，它基于 Zhong 等人（2019）的非结构化 SymODEN 模型，并使用神经网络表示哈密顿量$\mathcal{H}_{\theta}(\mathbf{x})$。由于梯度消失或爆炸，这两种方法在原始轨迹上训练时表现不佳。为进行公平比较，我们在数据上使用固定长度的滑动窗口，将轨迹拆分为较短的子轨迹，并将这些子轨迹组成训练数据批次。

高斯过程基线。 为了评估我们的哈密顿先验的效果，我们将其与 Hegde 等人（2022）提出的非哈密顿射击法 GPODE 基线进行比较。在适用的情况下，我们采用与 HGP模型相同的超参数设置和初始化。对于诱导变量分布均值的初始化，我们遵循 Hegde 等人（2022）所述的相同流程。由于 SPGP 的作者没有公开发布代码，也不愿在收到请求后提供实现，因此我们无法给出 SPGP（Ensinger 等人，2022）的结果。SSGP 有公开代码，但不支持具有 $D > 1$ 的系统。为了进行一些比较，我们重新实现了模型之间的一个关键差异点——子序列训练方法，并测试其性能。我们还在附录 C.3 中比较了 SSGP 在玩具 FP系统上的表现。

6.2 玩具任务

作为对哈密顿先验作用的初步测试，我们在FP系统上分别使用半个周期和一个完整周期的数据训练HGP和GPODE，且不采用射击法。图4展示了推断的向量场、

后验轨迹样本以及这些轨迹中的能量误差。我们看到，当使用半个周期的训练数据时，即使远离观测值，HGP仍能生成合理的轨迹和适当的向量场估计，而GPODE则无法做到这一点，并且生成的样本存在较大的能量违背。使用完整周期的数据时，两个模型都能很好地拟合数据，但GPODE仍然存在较高的能量违背。这一玩具任务展示了HGP凭借其哈密顿归纳偏置，仅用相对少量的数据就能学习准确动力学的能力。

6.3 任务1：轨迹预测

	状态均方根误差（↓）			状态平均负对数似然（↓）			能量均方根误差（↓）		
方法	FP	HH	SP	FP	HH	SP	FP	HH	SP
NODE	**0.12** (0.12)	0.42 (0.25)	1.13 (0.82)	-	-	-	**0.30** (0.28)	0.02 (0.01)	1.02 (0.41)
HNN	0.20 (0.16)	1.56 (0.26)	1.41 (0.30)	-	-	-	**0.34** (0.33)	0.04 (0.10)	1.12 (0.25)
GPODE	0.23 (0.26)	0.54 (0.71)	0.91 (0.36)	-0.03 (1.21)	1.20 (4.19)	2.77 (2.77)	**0.38** (0.34)	0.02 (0.02)	**0.78** (0.50)
HGP	0.18 (0.19)	**0.32** (0.30)	**0.64** (0.50)	**-0.21** (0.67)	**0.31** (1.89)	**1.39** (2.20)	**0.25** (0.42)	**0.01** (0.01)	**0.81** (0.36)

表1：各系统在轨迹预测任务中不同方法的性能比较。

表1比较了 HGP 与各系统在预测任务中的基线方法的性能。对于 HH、FP 和 SP 系统，我们分别使用长度为 40、8 和 16 秒的训练轨迹。[1] 对于更复杂的系统（SP、HH），HGP 表现出色，尤其是与相应的 GP 基线 GPODE 相比，在点预测和不确定性量化方面显著更优。对于简单的 FP 系统，NODE 的结果与 HGP 相近；而对于 SP 和 HH 系统，HGP 的性能最佳。在本实验及后续实验中，我们发现 NODE 的表现意外地优于 HNN；第7节将讨论这一问题。表1还展示了能量均方根误差，该误差通过将真实哈密顿量应用于预测轨迹计算得出，结果表明 HGP 能够很好地恢复守恒能量的动力学。图5展示了测试时段内累积的误差。附录C给出了各系统一条示例轨迹的模型预测图。[2] 这些动画很有启发性，因为它们表明，高斯过程模型不仅具有出色的预测性能，而且生成的轨迹也比神经网络模型更符合物理规律。

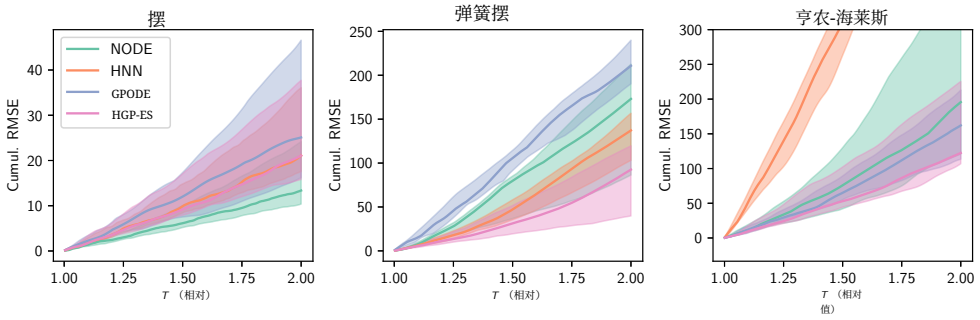
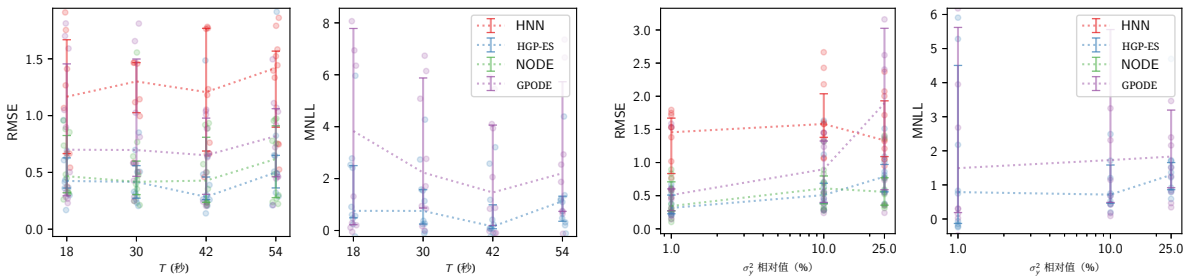


图5：**对于复杂系统，采用能量射击的 HGP 具有最低的累积轨迹误差。** 预测任务中各系统在测试时段 $[T, 2T]$ 内的累积误差。横轴表示相对于训练周期开始时刻的时间。

轨迹长度的影响。图6a展示了在HH系统上，增加轨迹长度对任务1中模型性能的影响。随着轨迹长度增加，各模型的逐点预测性能大致保持不变；对于最长的轨迹，性能略有下降，

[1]为公平比较，我们希望为每个系统提供覆盖相似相空间范围的轨迹长度；时间不同则反映了各系统的不同性质。[2]轨迹动画见 `https://magnusross.github.io/HamiltonianGPs/`。



(a) 轨迹长度　　(b) 相对噪声方差

图6： **HGP 的性能对观测长度和噪声具有稳健性**。 分析 HH 系统的数据对任务1的影响。

这是由于优化问题的难度所致。相较于基线模型，HGP在各种轨迹长度下均始终表现出良好的性能。

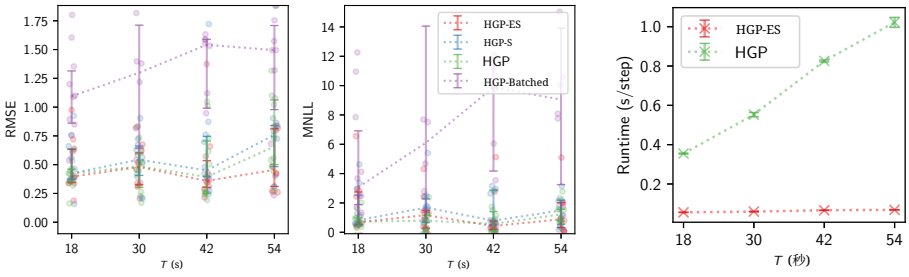
噪声的影响。 图6b展示了噪声增加对性能的影响，横轴表示噪声方差占总信号方差的百分比。结果表明，就均方根误差而言，NODE 和 HGP 对噪声增加总体上具有较强的鲁棒性，尽管性能有所下降；GPODE 的性能下降则更为严重。

初始化	均方根误差 (↓)	平均负对数似然 (↓)
随机	1.03 (0.06)	1.49 (0.09)
哈密顿量	**0.36** (0.19)	**0.42** (0.83)

表2：诱导初始化的影响。

初始化的影响。 表2展示了第6.1节讨论的哈密顿量感知初始化方案的影响。我们在HH系统的任务1上运行了HGP，分别采用随机初始化的诱导均值和我们提出的初始化方法。随机初始化的模型无法很好地拟合数据，并且生成的解在外推时表现不佳。

比较推断方案。图 7a 比较了在不同轨迹长度下，针对 HH系统任务1采用不同推断方法的结果。我们比较了以下 HGP：能量守恒射击（HGP-ES）、不添加额外能量约束的标准射击（HGP-S）、不采用射击法（ HGP），以及将子序列组成批次后进行推断的方法（HGP-Batched）。采用 HGP-Batched模型的目的是模拟 SSGP 和 SPGP 所用的推断方法，详情请参见附录 B.3。结果表明，对于各种轨迹长度，HGP-ES 的性能均为最佳或与最佳相当；并且随着轨迹长度增加，其相较于其他方法的



（a）模型性能　　（b）运行时间

图7：**能量射击推断在不同轨迹长度下均表现最佳，同时将长轨迹的推断速度提升了15倍**。任务1在HH系统上的推断方法比较：图7a展示了不同轨迹长度下的性能变化，图7b比较了在不同轨迹长度下，使用射击法和标准方法计算证据下界所需的时间。

性能优势进一步提升。对于所有轨迹长度，HGP-Batched 方法的表现都较差，且轨迹越长，性能越差。图 7b 展示了射击模型和非射击模型在不同轨迹长度下，单次计算证据下界所需运行时间的差异。对于最长（54s）的轨迹，射击近似可实现 $15\times$ 加速比；对于最短（18s）的轨迹，则可实现 $6.5\times$ 加速比，同时在均方根误差和平均负对数似然方面与标准 HGP 相当或更优。

6.4 任务2：初始条件外推

	状态均方根误差（↓）			状态平均负对数似然（↓）			能量均方根误差（↓）		
方法	FP	HH	SP	FP	HH	SP	FP	HH	SP
NODE	**0.48** (0.15)	**1.15** (0.19)	**0.92** (0.38)	-	-	-	**0.26** (0.06)	**0.03** (0.00)	**1.35** (0.31)
HNN	0.91 (0.47)	**1.35** (0.18)	1.13 (0.26)	-	-	-	**0.25** (0.15)	0.05 (0.03)	**0.96** (1.79)
GPODE	2.41 (2.28)	3.58 (0.79)	3.53 (1.14)	7.11 (8.22)	19.11 (10.51)	11.48 (10.73)	6.17 (10.30)	1.52 (0.95)	$1.9 \times 10^7 (2.5 \times 10^7)$
HGP	1.41 (0.46)	**1.30** (0.28)	1.29 (0.59)	**4.68** (2.95)	**7.60** (3.03)	**6.13** (0.81)	0.55 (0.60)	**0.03 (0.01)**	3.32 (8.86)

表3：不同方法在初始条件外推任务中的性能比较，使用 $K = 8$ 条轨迹。

表3展示了任务2中各模型在各个系统上的结果。对于此任务，每个模型都获得了一组 $K = 8$ 条含噪轨迹；HH、FP 和 SP 系统的轨迹长度分别为 12、4 和 6 秒，初始条件从相空间中随机采样。测试集由按照相同方法从相空间中采样的 25 条轨迹组成，其长度是训练轨迹的三倍。就状态均方根误差而言，表现最佳的模型是 NODE；对于最简单的系统（FP），它给出的预测显著优于 HGP，而对于更复杂的系统，其预测也略胜一筹。HGP 在所有指标上的表现都优于 GPODE，这再次体现了能量守恒先验的优势。就能量均方根误差而言，HNN 和 NODE 表现最佳，HGP 稍逊一筹，而 GPODE 的表现较差。

轨迹数量 图8展示了随着训练轨迹 K 数量增加，各模型在任务2的HH系统上的性能。可以看到，对于所有 K，HGP在两项指标上的表现都优于GPODE；但当 K较大时，神经网络模型的点预测更优。我们认为，基于高斯过程的模型在任务2中的相对表现较差，可能是先验选择所致，我们将在第7节中讨论这一点。

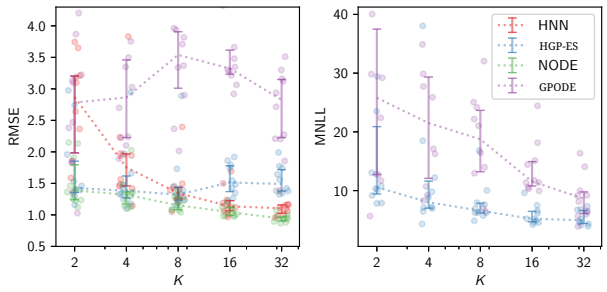


图8：**对于所有 K，HGP的表现都优于GPODE；但当 K较大时，神经网络表现最佳。**

7 讨论与局限性

HNN与NODE的性能。 我们发现，在任务1和任务2中，HNN模型的表现都显著差于NODE，这出乎意料，也与文献中的以往结果不同。对此我们提出两种可能的解释，而且这两种因素可能都起了作用。首先，我们使用的数据噪声更大，并且采用了比以往研究更长、采样更稀疏的轨迹。此外，为了确保不同方法之间的比较公平，我们学习哈密顿量$_{\boldsymbol{\theta}}$(x)，从而不对哈密顿量的形式施加限制。对于机械系统，哈密顿量可以用势能和动能表示，并可分别使用神经网络来表示这两项。Zhong 等人（2019）发现，以这种方式学习力学哈密顿量能够提升性能。我们认为，可以对我们的框架进行改造，使用HGP分别学习势能项和动能项；这是我们希望在未来工作中探索的方向。

先验的适用性。 HGP 在任务2上的性能有些令人失望，尤其是对于较大的 K，相较于 NODE 更是如此。我们认为，这种影响部分可归因于我们对高斯过程先验的选择。

我们使用了平稳高斯过程先验，而对于大多数哈密顿系统而言，这种先验可能并非最优，因为这类系统通常是非平稳的。非平稳性假设可能导致模型在新的相空间点上泛化能力较差，这是因为高斯过程先验在这些位置会回归到零均值函数，而神经网络模型则不会出现这种情况。提高高斯过程先验适用性的一种方法，是使用专门设计的核函数来表示系统中的对称性（Ridderbusch 等人，2021 年），或进行核结构学习（Kim 和 Teh，2018 年）。另一种方法是扩展我们的框架，转而使用深度高斯过程先验来表示$\mathcal{H}$（Damianou 和 Lawrence，2013 年）。深度高斯过程擅长对复杂的非平稳函数进行建模，因此非常适合这一任务。采用 Salimbeni 和 Deisenroth（2017 年）提出的随机变分推断方案，可以相对直接地将深度高斯过程集成到我们的框架中；作为未来工作的一部分开展这项研究将很有意义。

控制。通过融入哈密顿归纳偏置，本文方法在改进贝叶斯在线学习（Deisenroth & Rasmussen, 2011）或基于策略的强化学习（Yildiz 等人，2021）方面具有巨大潜力。这需要将模型扩展到具有外力的哈密顿系统，从而放宽能量守恒假设。

8 结论

本文提出了一种高斯过程模型，可根据轨迹观测学习哈密顿动力系统。我们提出了一种结合诱导点与傅里叶基的参数化方法，并引入了一种新颖的能量守恒射击法，以便从长时间数据中可靠地进行推断。实验表明，该方法在各种学习设置下均表现出色且稳定。

致谢

我们感谢 Pashupati Hegde 与我们进行了有益的交流并给予建议，尤其感谢他帮助编写 GPODE 的代码。我们还要感谢 Mauricio Álvarez 和 Tom McDonald 对本文早期草稿提出的意见。MR 通过 ELLIS 网络对阿尔托大学的访问研究获得了本项目的支持。计算工作使用了阿尔托大学 Science-IT 项目提供的资源。本研究获得了芬兰科学院的支持（334600 号资助）。

参考文献

Christian Agrell. 带线性算子不等式约束的高斯过程。《机器学习研究杂志》，20(135):1–36，2019。

Peter Battaglia, Jessica Hamrick, Victor Bapst, Alvaro Sanchez, Vinicius Zambaldi, Mateusz Malinowski, Andrea Tacchetti, David Raposo, Adam Santoro, Ryan Faulkner, Caglar Gulcehre, Francis Song, Andy Ballard, Justin Gilmer, George E. Dahl, Ashish Vaswani, Kelsey Allen, Charles Nash, Victoria Jayne Langston, Chris Dyer, Nicolas Heess, Daan Wierstra, Pushmeet Kohli, MattBotvinick, Oriol Vinyalsand YujiaLi, andRazvanPascanu. 关系归纳偏置、深度学习与图网络。*arXiv*，2018。

Tom Bertalan, Felix Dietrich, Igor Mezić, and Ioannis G Kevrekidis. 基于数据学习哈密顿系统。《*Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*》，29(12)，2019。

David M Blei、Alp Kucukelbir 和 Jon D McAuliffe。《变分推断：统计学家综述》。《美国统计学会杂志》，112(518):859–877，2017 年。

Hans Georg Bock 和 Karl-Josef Plitt。用于直接求解最优控制问题的多重打靶算法。《*IFAC*会议论文集》，17(2):1603–1608，1984 年。

Ricky T. Q. Chen。torchdiffeq，2018 年。网址：`https://github.com/rtqichen/torchdiffeq`。

Ricky TQ Chen、Yulia Rubanova、Jesse Bettencourt 和 David K Duvenaud。神经常微分方程。载于 *NeurIPS*，2018 年。

Krzysztof M Choromanski、Jared Quincy Davis、Valerii Likhosherstov、Xingyou Song、Jean-Jacques Slotine、Jacob Varley、Honglak Lee、Adrian Weller 和 Vikas Sindhwani。《Ode to an ODE》。发表于*NeurIPS*，2020 年。

Miles Cranmer、Sam Greydanus、Stephan Hoyer、Peter Battaglia、David Spergel 和 Shirley Ho。拉格朗日神经网络。*arXiv*，2020 年。Andreas Damianou 和 Neil D Lawrence。深度高斯过程。发表于*AISTATS*，2013 年。Marc Deisenroth 和 Carl E Rasmussen。PILCO：一种基于模型且数据高效的策略搜索方法。发表于*ICML*，2011 年。Moritz Diehl 和 Sébastien Gros。数值最优控制。弗赖堡大学，2020 年。John R Dormand 和 Peter J Prince。一系列嵌入式龙格–库塔公式。计算与应用数学杂志，6(1):19–26，1980 年。Katharina Ensinger、Friedrich Solowjow、Sebastian Ziesche、Michael Tiemann 和 Sebastian Trimpe。保持结构的高斯过程动力学。发表于*ECML/PKDD*，2022年。Marc Finzi、Ke Alexander Wang 和 Andrew G Wilson。通过显式约束简化哈密顿量和拉格朗日神经网络。发表于*NeurIPS*，2020 年。Samuel Greydanus、Misko Dzamba 和 Jason Yosinski。哈密顿神经网络。发表于*NeurIPS*，2019 年。

Nate Gruver、Marc Finzi、Samuel Stanton 和 Andrew Gordon Wilson 。解构哈密顿神经网络的归纳偏置。发表于 *ICLR*，2021年。

Eldad Haber 和 Lars Ruthotto。深度神经网络的稳定架构。逆问题，34(1)，2017 年。

Charles R. Harris、K. Jarrod Millman、Stéfan J. van der Walt、Ralf Gommers、Pauli Virtanen、David Cournapeau、Eric Wieser、Julian Taylor、Sebastian Berg、Nathaniel J. Smith、Robert Kern、Matti Picus、Stephan Hoyer、Marten H. van Kerkwijk、Matthew Brett、Allan Haldane、Jaime Fernández del Río、Mark Wiebe、Pearu Peterson、Pierre Gérard-Marchant、Kevin Sheppard、Tyler Reddy、Warren Weckesser、Hameer Abbasi、Christoph Gohlke 和 Travis E. Oliphant。使用 NumPy 进行数组编程。*Nature*，585(7825)：357–362，2020 年。

Pashupati Hegde、Cagatay Yildiz、Harri Lähdesmäki、Samuel Kaski 和 Markus Heinonen。《使用高斯过程对贝叶斯常微分方程进行变分多重射击》。载于*UAI*，2022年。PW Hemker。《初值问题中的非线性参数估计》，1974 年。

Michel Henon 和 Carl Heiles 。第三运动积分的适用性：一些数值实验 .
《天文学杂志》，69:73–79，1964年。

James Hensman、Nicolò Fusi 和 Neil D. Lawrence。大数据高斯过程。载于 *UAI*，2013 年。James Hensman、Alexander Matthews 和 Zoubin Ghahramani。可扩展变分高斯过程分类。载于*AISTATS*，2015a 年。James Hensman、Alexander G Matthews、Maurizio Filippone 和 Zoubin Ghahramani。变分稀疏高斯过程的马尔可夫链蒙特卡罗。载于*NeurIPS*，2015b 年。Alejandra Hernandez 和 Alexander S Poznyak。哈密顿系统的非线性参数估计：将识别视为稳定化。《自动化与远程控制》，81(9):1611–1626，2020 年。Matthew D Hoffman、David M Blei、Chong Wang 和 John Paisley。随机变分推断。《机器学习研究杂志》，14(5)，2013 年。Hyunjik Kim 和 Yee Whye Teh。扩展自动统计学家：利用高斯过程实现可扩展的结构发现。载于*AISTATS*，2018 年。Suyong Kim、Weiqi Ji、Sili Deng、Yingbo Ma 和 Christopher Rackauckas。刚性神经常微分方程。《Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science》，31(9)，2021 年。Diederik P. Kingma 和 Jimmy Ba。Adam：一种随机优化方法。载于*ICLR*，2015 年。Peter Lynch。摆动弹簧：一个大气平衡的简单模型，2000 年。Luke Metz、C Daniel Freeman、Samuel S Schoenholz 和 Tal Kachman。梯度并非你所需的一切。*arXiv*，2021 年。

C. Offen和 Ober-Blöbaum。学习得到的哈密顿系统的辛积分。《*Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*》，32(1)，2022年。

Adam Paszke、Sam Gross、Francisco Massa、Adam Lerer、James Bradbury、Gregory Chanan、Trevor Killeen、Zeming Lin、Natalia Gimelshein、Luca Antiga、Alban Desmaison、Andreas Kopf、Edward Yang、Zachary DeVito、Martin Raison、Alykhan Tejani、Sasank Chilamkurthy、Benoit Steiner、Lu Fang、Junjie Bai 和 Soumith Chintala。《PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库》。载于 *NeurIPS*，2019年。

Ali Rahimi 和 Benjamin Recht。用于大规模核机的随机特征。发表于*NeurIPS*，2007.

Katharina Rath、Christopher G. Albert、Bernd Bischl 和 Udo von Toussaint。哈密顿系统中映射的辛高斯过程回归。《*Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*》，31(5)，2021 年。

Antônio H Ribeiro、Koen Tiels、Jack Umenberger、Thomas B Schön 和 Luis A Aguirre。关于非线性系统辨识的平滑性。《*Automatica*》，121，2020 年。

Steffen Ridderbusch、Christian Offen、Sina Ober-Blöbaum 和 Paul Goulart。利用高斯过程学习具有定性结构的常微分方程模型。发表于*IEEE*决策与控制会议，第 2896–2896 页，2021 年。

Simone Rossi、Markus Heinonen、Edwin Bonilla、Zheyang Shen 和 Maurizio Filippone。重新审视稀疏高斯过程：诱导变量近似的贝叶斯方法。发表于*AISTATS*，2021 年。

Hugh Salimbeni 和 Marc Peter Deisenroth。用于深度高斯过程的双重随机变分推断。载于 *NeurIPS*，2017 年。

Rick Salmon。哈密顿流体力学。《流体力学年度评论》，20(1)：225–256，1988年。

Michael Schmidt 和 Hod Lipson。《科学》，324(5)，2009年。从实验数据中提炼自由形式的自然定律。

John H Seinfeld。非线性估计理论。《工业与工程化学》，62(1):32–42，1970年。

Edward Snelson 和 Zoubin Ghahramani。使用伪输入的稀疏高斯过程。发表于*NeurIPS*，2006年。

Yusuke Tanaka、Tomoharu Iwata 和 Naonori Ueda。辛谱高斯过程：从含噪稀疏数据中学习哈密顿量。发表于*NeurIPS*，2022年。

John R Taylor。《style id='1'>经典力学。University Science Books，2005年。

S.T. Thornton 和 J.B. Marion。粒子与系统的经典动力学。Brooks/Cole，2004.

Christopher KI Williams 和 Carl Edward Rasmussen。面向机器学习的高斯过程。MIT出版社，马萨诸塞州剑桥，2006年。

James Wilson、Viacheslav Borovitskiy、Alexander Terenin、Peter Mostowsky 和 Marc Deisenroth。《高效地从高斯过程后验中采样函数》。发表于*ICML*，2020 年。

Cagatay Yildiz、Markus Heinonen 和 Harri Lähdesmäki。《连续时间基于模型的强化学习》。发表于*ICML*，2021 年。

Yaofeng Desmond Zhong、Biswadip Dey 和 Amit Chakraborty。《辛ODE-Net：通过控制学习哈密顿动力学》。发表于*ICLR*，2019年。

A 变分下界推导

A.1 标准界推导

我们希望最小化 KL 散度 $\arg\min_\theta \mathrm{KL}\left[q_\theta(\mathbf{u},\ \mathbf{x}_0)\ ||\, p(\mathbf{u},\ \mathbf{x}_0|\mathbf{Y})\right]$，这相当于最大化证据下界 $\log\ p(\mathbf{Y})\ \geq \mathcal{F}(\theta,\ \mathbf{Z})$，其中

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\theta, \mathbf{Z}) &= \iint q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log \frac{p(\mathbf{Y}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)}{q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0)} d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0 && (31)\\
&= \iint q(\ \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log p(\mathbf{Y}|\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \frac{p(\mathbf{u})}{q(\mathbf{u})} \frac{p(\mathbf{x}_0)}{q(\mathbf{x}_0)} d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0 && (32)\\
&= \underbrace{\iint q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log p(\mathbf{Y}|\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0}_{\mathcal{F}_\mathbf{Y}} + \underbrace{\int q(\mathbf{u}) \log \frac{p(\mathbf{u})}{q(\mathbf{u})} d\mathbf{u}}_{\mathcal{F}_\mathbf{u}} + \underbrace{\int q(\mathbf{x}_0) \log \frac{p(\mathbf{x}_0)}{q(\mathbf{x}_0)} d\mathbf{u}}_{\mathcal{F}_{\mathbf{x}_0}}. && (33)
\end{aligned}$$

证据下界分解为三项,

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_\mathbf{Y} + \mathcal{F}_\mathbf{u} + \mathcal{F}_{\mathbf{x}_0}. \tag{34}$$

后两项是 KL 散度,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_\mathbf{u} &= -\mathrm{KL}[q(\mathbf{u})||p(\mathbf{u})]\\
\mathcal{F}_{\mathbf{x}_0} &= -\mathrm{KL}[q(\mathbf{x}_0)||p(\mathbf{x}_0)],
\end{aligned}$$

由于我们对两个变量都使用高斯先验 p 和变分近似 q，因此可以将其以闭式形式计算。利用以下事实:

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{Y}|\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) &= \int p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) p(\tilde{\mathbf{w}}) d\tilde{\mathbf{w}} && (35)\\
&= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})} \left[p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)\right] && (36)
\end{aligned}$$

我们可以写成

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_\mathbf{Y} &= \iint q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log p(\mathbf{Y}|\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0 && (37)\\
&= \iint q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})} \left[p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0)\right] d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0 && (38)\\
&\geq \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})} \left[\iint q(\mathbf{u}, \mathbf{x}_0) \log p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) d\mathbf{u} d\mathbf{x}_0\right] && (39)\\
&= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})} \mathbb{E}_{q(\mathbf{u}) q(\mathbf{x}_0)} \log p(\mathbf{Y}|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0) && (40)\\
&= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}}) q(\mathbf{u}) q(\mathbf{x}_0)} \sum_{i=1}^{N} \log p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_0), && (41)
\end{aligned}$$

其中我们在第（39）行应用了詹森不等式。我们可以使用蒙特卡罗平均来计算这一项。

A.2 射击界推导

我们希望最小化 KL 散度 $\arg\min_\theta \mathrm{KL}\left[q_\theta(\mathbf{u},\mathbf{S}) \,||\, p(\mathbf{u},\mathbf{S}|\mathbf{Y})\right]$ 这相当于最大化证据下界 $\log\, p(\mathbf{Y}) \geq \mathcal{F}(\theta,\mathbf{Z})$, 其中

$$\mathcal{F}(\theta,\mathbf{Z}) = \iint q(\mathbf{u},\mathbf{S}) \log \frac{p(\mathbf{Y},\mathbf{u},\mathbf{S})}{q(\mathbf{u},\mathbf{S})} d\mathbf{u} d\mathbf{S} \tag{42}$$

$$= \underbrace{\iint q(\mathbf{u},\mathbf{S}) \log \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) \prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u})\right] d\mathbf{u} d\mathbf{S}}_{\mathcal{F}_{\mathbf{Ys}}} \tag{43}$$

$$- \underbrace{\int q(\mathbf{S}) \log \prod_{l=1}^{L} q(\mathbf{s}_l) d\mathbf{S}}_{\mathcal{F}_{\mathbf{s}}} + \underbrace{\int q(\mathbf{s}_0) \log \frac{p(\mathbf{s}_0)}{q(\mathbf{s}_0)} d\mathbf{s}_0}_{\mathcal{F}_{\mathbf{s}_0}} + \underbrace{\int q(\mathbf{u}) \log \frac{p(\mathbf{u})}{q(\mathbf{u})} d\mathbf{u}}_{\mathcal{F}_{\mathbf{u}}}, \tag{44}$$

其中在第二行中我们使用了以下事实:

$$p\left(\mathbf{Y}、\mathbf{u}、\mathbf{S}\right) = \int p\left(\mathbf{Y}、\mathbf{u}、\mathbf{S} \;\tilde{\mathbf{w}}\right) d\,\tilde{\mathbf{w}} \tag{45}$$

$$= \int \prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) \prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u}) p(\tilde{\mathbf{w}}) d\tilde{\mathbf{w}} p(\mathbf{u}) p(\mathbf{s}_0) \tag{46}$$

$$= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) \prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u})\right] p(\mathbf{u}) p(\mathbf{s}_0). \tag{47}$$

界中的后续项为:

$$\mathcal{F}_{\mathbf{s}} = \sum_{l=1}^{L} \mathbb{H}[q(\mathbf{s}_l)] \tag{48}$$

$$\mathcal{F}_{\mathbf{s}_0} = -\,\mathrm{KL}[q(\mathbf{s}_0) \,||\, p(\mathbf{s}_0)] \tag{49}$$

$$\mathcal{F}_{\mathbf{u}} = -\,\mathrm{KL}[q(\mathbf{u}) \,||\, p(\mathbf{u})] \tag{50}$$

其中 $\mathbb{H}$ 表示熵，并且每一项都可以用闭式形式计算，因为我们再次使用了高斯先验p 和变分近似 q。我们可以进一步分解项$\mathcal{F}_{\mathbf{Ys}}$：

$$\mathcal{F}_{\mathbf{Ys}} = \iint q(\mathbf{u},\mathbf{S}) \log \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) \prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u})\right] d\mathbf{u} d\mathbf{S} \tag{51}$$

$$\geq \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\iint q(\mathbf{u},\mathbf{S}) \log \prod_{i=1}^{N} p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) \prod_{l=1}^{L} p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u}) d\mathbf{u} d\mathbf{S}\right] \tag{52}$$

$$= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\sum_{i=1}^{N} \iint q(\mathbf{u},\mathbf{S}) \log p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)}) d\mathbf{u} d\mathbf{s}_{l(i)}\right] \tag{53}$$

$$+ \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})}\left[\sum_{l=1}^{L} \iint \log p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u}) d\mathbf{u} d\mathbf{s}_l d\mathbf{s}_{l-1}\right] \tag{54}$$

$$= \mathbb{E}_{p(\tilde{\mathbf{w}})q(\mathbf{u})}\left[\sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_{l(i)})}\left[\log p(\mathbf{y}_i|\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u},\mathbf{s}_{l(i)})\right] + \sum_{l=1}^{L} \mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_l)q(\mathbf{s}_{l-1})}\left[\log p(\mathbf{s}_l|\mathbf{s}_{l-1},\tilde{\mathbf{w}},\mathbf{u})\right]\right]. \tag{55}$$

其中我们在第 (52) 行应用了詹森不等式。我们可以使用蒙特卡罗平均来计算这一项。综上，界为:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\mathbf{Ys}} + \mathcal{F}_{\mathbf{s}} + \mathcal{F}_{\mathbf{s}_0} + \mathcal{F}_{\mathbf{u}}. \tag{56}$$

A.3 多条轨迹的变分下界

为扩展方程 (24) 和 (30) 给出的界，我们考虑一组 K 轨迹，$\mathbf{Y} = \{\mathbf{Y}_1, \ldots, \mathbf{Y}_K\}$。为便于表示，我们假设每条轨迹具有相同数量的点 N，且观测时间相同 $t_i \in (t_1, \ldots, t_N)$，但这并不构成模型本身的限制。每条轨迹都有不同的初始条件，因此我们旨在推断集合 $\mathbf{X}_0 = \{\mathbf{x}_{1,0}, \ldots, \mathbf{x}_{K,0}\}$。我们假设每个初始状态上的变分后验相互独立，因此

$$q(\mathbf{X}_0) = \prod_{k=1}^{K} q(\mathbf{x}_{k,0}) = \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}(\mathbf{x}_{k,0} | \mathbf{m}_{k,0}, \mathbf{Q}_{k,0}).$$

基于这一因式分解，对于不使用射击近似的标准 HGP模型，我们得到以下下界

$$\mathcal{F}(\theta, \mathbf{Z}) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{u})q(\mathbf{X}_0)p(\tilde{\mathbf{w}})} \left[\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} \log p\big(\mathbf{y}_{k,i} | \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{x}_{k,0}\big) \right] - \mathrm{KL}\left[q(\mathbf{u}) || p(\mathbf{u})\right] - \sum_{k=1}^{K} \mathrm{KL}\left[q(\mathbf{x}_{k,0}) || p(\mathbf{x}_{k,0})\right]. \quad (57)$$

其中 $\theta = (\mathbf{m}, \mathbf{Q}, \{\mathbf{m}_{k,0}, \mathbf{Q}_{k,0}\})$。为了将射击HGP扩展到多条轨迹，我们需要为每条轨迹设置一组射击状态，并旨在推断 $\mathbf{S} = \{\mathbf{S}_1, \ldots, \mathbf{S}_K\}$，其中我们假设每条轨迹具有相同数量的射击状态 L。我们再次假设射击状态上的变分后验是因式分解的，因此

$$q(\mathbf{S}) = \prod_{k=1}^{K} q(\mathbf{S}_k) = \prod_{k=1}^{K} \prod_{l=0}^{L} \mathcal{N}(\mathbf{s}_{k,l} | \mathbf{a}_{k,l}, \Sigma_{k,l}),$$

由此得到下界

$$\mathcal{F}(\theta, \mathbf{Z}) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{u})p(\tilde{\mathbf{w}})} \Big[\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_{k,l(i)})} \left[\log p(\mathbf{y}_i | \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}, \mathbf{s}_{k,l(i)}) \right] \quad (58)$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \sum_{l=0}^{L} \mathbb{E}_{q(\mathbf{s}_{k,l})q(\mathbf{s}_{k,l-1})} \left[\log p(\mathbf{s}_{k,l} | \mathbf{s}_{k,l-1}, \tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{u}) \right] \Big] \quad (59)$$

$$- \sum_{k=1}^{K} \sum_{l=1}^{L} \mathbb{H}[q(\mathbf{s}_{k,l})] - \sum_{k=1}^{K} \mathrm{KL}[q(\mathbf{s}_{k,0}) \,||\, p(\mathbf{s}_{k,0})] - \mathrm{KL}[q(\mathbf{u}) \,||\, p(\mathbf{u})],$$

其中 $\theta = (\mathbf{m}, \mathbf{Q}, \{\mathbf{a}_{k,l}, \Sigma_{k,l}\})$，且 $\mathbf{s}_{k,l(i)}$ 表示轨迹 k在时间 t_i 之前的最后一个射击状态。

A.4 模型复杂度

主要复杂度来自诱导点的采样；由于需要计算协方差矩阵的 Cholesky分解，其复杂度为 $\mathcal{O}(M^3)$。导数函数的评估次数大致与训练周期 T的长度成正比，这意味着对于一个 D 维系统，由于高斯过程的解耦采样相对于输入数量呈线性关系，其复杂度为 $\mathcal{O}(DT)$。对于射击模型，在 T 上的积分可以并行化，从而缩短运行时间。大型系统可能更为复杂，并且需要更多诱导点。因此，相对于诱导点数量的复杂度为我们能够获得良好性能的系统规模提供了某种上限，尽管通常可以使用数千个诱导点，这将对应于非常复杂的哈密顿量。

B 实验

B.1 哈密顿系统

本节进一步介绍实验中使用的系统。对于所有系统，我们都会缩放数据，使训练点的均值为零、方差为单位方差，并在缩放后的数据上计算指标，以便在不同系统之间进行比较。

固定摆 固定摆的哈密顿量描述了无摩擦摆在重力作用下绕单一轴旋转的运动，其中坐标 q 表示摆相对于竖直方向的角度，坐标 p 表示相应的角动量。我们设定 $m = 1$千克、 $r = 1$米和 $g = 9.81$米/秒。我们通过抽取 $p,\ q \sim U(-1,\ 1)$ 来采样初始条件，并舍弃能量为 $E > mgr$ 的初始条件，以避免摆越过支点摆动。我们对训练数据采用 8 赫兹的采样率，对测试数据采用 15 赫兹的采样率。

弹簧摆弹簧摆系统（Lynch，2000）与固定摆类似，但它还将摆杆建模为胡克弹簧，弹簧会在受力时伸长和收缩。在该系统中， q_1 表示摆杆与垂直方向的夹角， q_2 表示摆杆相对于静止位置的伸长量， p_1 和 p_2 分别表示相应的角动量和线动量。我们设定 $m = 1$千克、 $r = 3$米和 $g = 9.81$米/秒，并将弹簧常数设为 $k = 10$牛顿/米。我们将初始条件采样为 $q_1,\ q_2,\ p_1,\ p_2 \sim U(-0.25,\ 0。25)$。训练数据的采样率为 6 赫兹，测试数据的采样率为 10 赫兹。

Henon-Heiles 系统 Henon-Heiles 哈密顿量描述恒星绕星系中心运动的情况，其中 q_1 和 q_2 表示平面内的空间坐标， p_1 和 p_2 表示相应的线动量（Henon & Heiles，1964）。我们设定 $\mu = 0.8$米$^{-1}$。我们先采样 $q_1,\ q_2,\ p_1,\ p_2 \sim U(-1,\ 1)$来获取初始条件，然后剔除满足 $E > \frac{1}{6\mu^2}$的初始条件，以确保轨迹始终处于等值集连通的相空间区域内；也就是说，轨迹在经过较长时间后仍局限于该区域，而不会趋于无穷远（Offen & Ober-Blöbaum，2022）。训练数据的采样率为 4 赫兹，测试数据的采样率为 10 赫兹。

B.2 哈密顿量感知初始化

我们通过计算轨迹数据的数值导数，构造系统导数函数的近似数据。例如，使用一阶差分近似，[3] 我们得到 $\dot{\mathbf{Y}} = (\frac{\mathbf{y}^2 - \mathbf{y}^1}{t_2 - t_1}, \frac{\mathbf{y}^3 - \mathbf{y}^2}{t_3 - t_2}, \ldots, \frac{\mathbf{y}^N - \mathbf{y}^{N-1}}{t_N - t_{N-1}}) \in \mathbb{R}^{N \times 2D}$。我们将 $\dot{\mathbf{Y}}$ 视为导数函数 $\mathbf{f}$ 在输入位置 $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times 2D}$ 处的观测数据。我们希望得到这些数据所隐含的哈密顿量在诱导输入位置 $\mathbf{Z}$处的均值，并用它来初始化诱导变量的变分分布。令 $\mathrm{vec}(\dot{\mathbf{Y}}) \in \mathbb{R}^{2ND}$ 表示展平后的 $\dot{\mathbf{Y}}$，则该均值为

$$\mathbf{m} = \mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{Z}, \mathbf{Y}) \mathbf{K}_{\mathbf{f}}(\mathbf{Y}, \mathbf{Y}) \, \mathrm{vec}(\dot{\mathbf{Y}}) \tag{60}$$

其中，$\mathbf{k}_{\mathcal{H}\mathbf{f}}(\mathbf{Z}, \mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{M \times 2ND}$ 是对每一对输入点计算公式（11）中的协方差所得的矩阵；同理，$\mathbf{K}_{\mathbf{f}}(\mathbf{Y}, \mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{2ND \times 2ND}$ 是公式（12）中的协方差在每一对输入点处的取值。

B.3 模型

本节将进一步介绍模型的设置细节。

HGP 对于 HGP模型，我们使用 ARD核。为优化，我们采用诱导变量 $\mathbf{u}$ 的白化表示。我们针对变分参数 θ 和模型的各种超参数 σ^2_{obs} ——噪声方差、核长度尺度、信号方差以及诱导输入位置——优化变分下界。我们将射击约束方差固定为 $\sigma^2_\xi = 1 \times 10^{-6}$，并将能量约束方差设为 $\sigma^2_\chi = 2.5 \times 10^{-3}$。

GPODE 对于 GPODE，我们尽可能沿用 HGP 的设置。我们遵循 Hegde 等人（2022）的做法，为导数函数的每个分量分别设置相互独立的高斯过程先验，每个先验都采用 ARD核，并使用一组独立的诱导变量。我们针对同一组变分参数和模型超参数优化变分下界。诱导变分均值的初始化过程与 Hegde 等人（2022）所述相同

[3]实际上，我们使用 `gradient`函数，根据 `numpy` 软件包（Harris 等，2020 年）估计导数。

神经网络模型 对于 HNN 和 NODE，我们都使用 3 个隐藏层，每层包含 256 个单元，并采用双曲正切激活函数。为了训练神经网络模型，我们以长度为 6 个样本的窗口在数据上滑动，构造一组子序列；窗口每次移动 1 个样本，覆盖整个训练区间。例如，对于长度为 100 的单条轨迹，我们得到 $100 - 6 = 94$ 个子序列。我们将这些子序列打乱并组成批次。训练时，我们使用神经网络参数化的导数函数，针对批次中的每个子序列进行滚动积分，以第一个值作为初始条件，并根据训练数据优化 L1损失。我们使用 Adam 优化器，学习率为 3×10^{-3}。由于模型是在短子序列上训练的，且未能获知子序列之间需要保持连续，因此容易过拟合，导致在整条长轨迹上积分时表现不佳。为避免这种情况，每 10 个训练轮次，我们都会从训练数据的第一个点开始，对整条轨迹进行积分并计算损失；在经过固定次数的迭代训练后，我们选取整条轨迹损失最低的模型。任务1的实验中，我们使用 16 的批次大小；任务2的实验中，我们使用 32 的批次大小。

HGP-Batched 与 SSGP/SPGP 的关系 为了将我们的能量守恒射击法与 SSGP 和 SPGP 所采用的训练方法进行比较，我们针对 HGP模型重新实现了基于短子序列的训练方法。SSGP 和 SPGP 采用略有不同的方案，但二者都使用了与前一段所述方法类似的方法。通过在数据上滑动固定大小的窗口，从完整的长轨迹中构造短子序列。我们再次将这些子序列打乱并组成批次。在训练过程中，我们展开模型，并计算每个批次中短子序列上的界。这避免了梯度消失/梯度爆炸问题，但意味着我们是在一个相关但不同的任务上优化模型。模型可能在短子轨迹上表现良好，但在完整轨迹上展开时表现不佳。为避免过拟合，我们每经过一定数量的训练轮次，就在完整轨迹上展开模型并计算平均负对数似然（MNLL），然后在固定数量的训练迭代后选择取值最低的模型。对于 HGP-Batched模型，在所有实验中我们使用了长度为 6 的子序列和大小为 16 的批次。此外，我们遵循 Ensinger 等人（2022）的做法，不学习初始条件，而是将每个序列中的第一个数据点用作其初始条件。需要注意的是，Ensinger 等人（2022）使用大小为 1 的批次，并针对所研究的每个问题使用不同的序列长度（10–50）。我们发现，对于我们的实验而言，更大的批次大小和更短的序列长度表现更好。SSGP 的过程略有不同，因为 Tanaka 等人（2022）只考虑任务2，即从多条轨迹中学习。作者没有在完整训练轨迹上展开模型进行验证，而是保留了一组留出轨迹，并利用它们来避免过拟合；当然，这一点不适用于任务1。此外，Tanaka 等人（2022）使用了相当于 1 秒数据的子序列长度，这意味着对于不同的系统，依据采样率的不同，所包含的数据点数量也不同。对于 HGP-Batched模型的实现，我们尝试捕捉 SSGP 和 SPGP 所提出方法的关键组成部分，并且为了尽可能公平地进行比较，选择了在我们的实验中能够提供最佳性能的设置。

辛积分 专为哈密顿系统设计的辛积分器在前向积分过程中能够保持哈密顿量守恒（Ensinger 等人，2022年；Rath 等人，2021 年）。这有助于提高长时间尺度上的积分精度。在我们的实验中，由于 PyTorch 中已有现成的实现，我们选择使用非辛的四五阶龙格–库塔法（Dormand & Prince，1980）。我们的框架不限制求解器的类型；如果有可用的实现，也可以使用辛求解器。需要注意的是，对于采用射击法的 HGP，求解器的选择对训练中学到的解几乎没有影响，因为积分仅在非常短的射击区段内进行，这意味着区段内的能量损失可以忽略不计，因此辛求解器对学习算法几乎没有帮助。

B.4 实现与硬件

所有实验均在一台搭载 M1 Pro 芯片、内存为 32 GB 的 2021 年款 14 英寸 MacBook Pro 笔记本电脑上使用中央处理器运行。我们使用 PyTorch 框架（Paszke 等人，2019）以 Python 实现 HGP 和基线模型。我们的实现基于 Hegde 等人（2022）的实现，该实现可通过`https://github.com/hegdepashupati/gaussian-process-odes`获取。

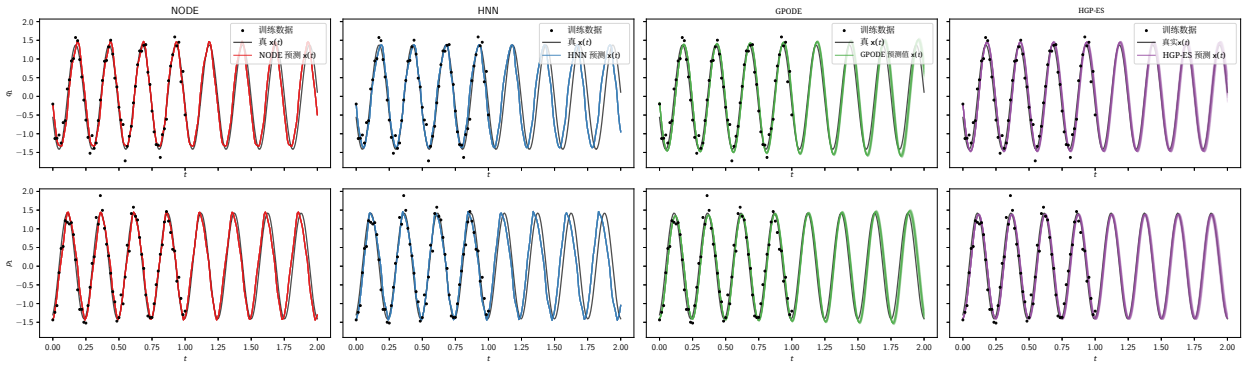


图9：展示单次重复的任务1中 FP系统训练数据、测试数据以及各模型预测的示例轨迹。对于 GPODE 和 HGP，图中显示了模型的32个样本。

C 其他结果

C.1 轨迹图

图 9、10 和 11 分别展示了 FP、SP 和 HH系统的数据及模型预测，对应于表1所示结果的一次重复实验。这些图还以动画形式呈现在补充材料中。请注意，动画展示的是训练周期内无噪声的数据，而非图中所示的含噪数据。

C.2 均值结果表

表4和表5展示了表1和表3的对应内容，但使用的是均值和标准误，而不是正文中所示的中位数和四分位距。

	状态均方根误差 (↓)			状态平均负对数似然 (↓)			能量均方根误差 (↓)		
方法	FP	HH	SP	FP	HH	SP	FP	HH	SP
NODE	0.16 (0.03)	0.48 (0.08)	1.04 (0.19)	-	-	-	0.33 (0.08)	0.02 (0.00)	1.67 (0.72)
HNN	0.38 (0.14)	1.49 (0.11)	1.40 (0.06)	-	-	-	0.39 (0.09)	0.07 (0.02)	1.05 (0.11)
GPODE	0.32 (0.08)	0.65 (0.13)	1.06 (0.22)	0.77 (0.69)	2.86 (1.11)	4.31 (1.54)	0.37 (0.09)	0.02 (0.00)	3.34 (1.78)
HGP	0.23 (0.04)	0.50 (0.11)	0.56 (0.09)	0.04 (0.20)	1.63 (0.89)	1.64 (0.55)	0.31 (0.08)	0.01 (0.00)	0.80 (0.08)

表4：在轨迹预测任务中，各系统上不同方法的性能比较。表中显示的是重复10次的均值和标准误，所用数据与表1相同。

	状态均方根误差 (↓)			状态平均负对数似然 (↓)			能量均方根误差 (↓)		
方法	FP	HH	SP	FP	HH	SP	FP	HH	SP
NODE	0.47 (0.03)	1.18 (0.04)	1.05 (0.13)	-	-	-	0.27 (0.03)	0.03 (0.00)	1.26 (0.18)
HNN	0.88 (0.12)	1.42 (0.12)	1.20 (0.07)	-	-	-	0.43 (0.19)	0.02 (0.01)	1.53 (0.73)
GPODE	2.48 (0.41)	3.50 (0.26)	3.38 (0.27)	8.56 (1.76)	18.38 (2.55)	11.07 (1.89)	4.67 (2.21)	1.42 (0.44)	3.1×10^{7} (3.0×10^{7})
HGP	1.33 (0.13)	1.39 (0.13)	1.49 (0.11)	5.83 (1.23)	7.96 (0.69)	6.15 (0.34)	0.80 (0.41)	0.02 (0.00)	6.06 (2.52)

表5：在初始条件外推任务中，不同方法在 $K = 8$ 条轨迹上的性能比较。表中给出了与表3相同数据上重复 10 次的均值和标准误。

C.3 与 SSGP 的比较

本节将我们的方法与 Tanaka 等人（2022）的 SSGP 模型进行比较。作者提供的 SSGP 实现仅适用于具有 $D = 1$ 的系统，且重新实现并非易事，因此

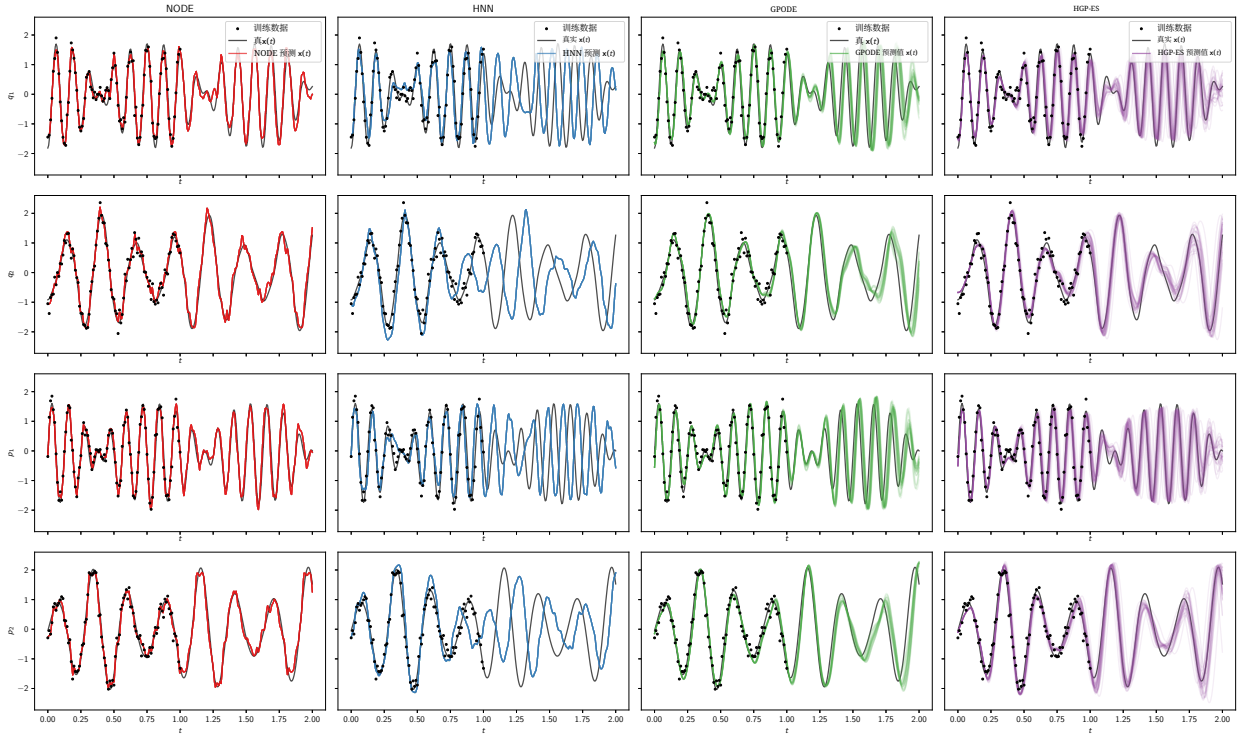


图10：一条示例轨迹，展示了SP系统任务1单次重复实验的训练数据、测试数据以及各模型的模型预测。对于GPODE和HGP，图中展示了模型的32个样本。

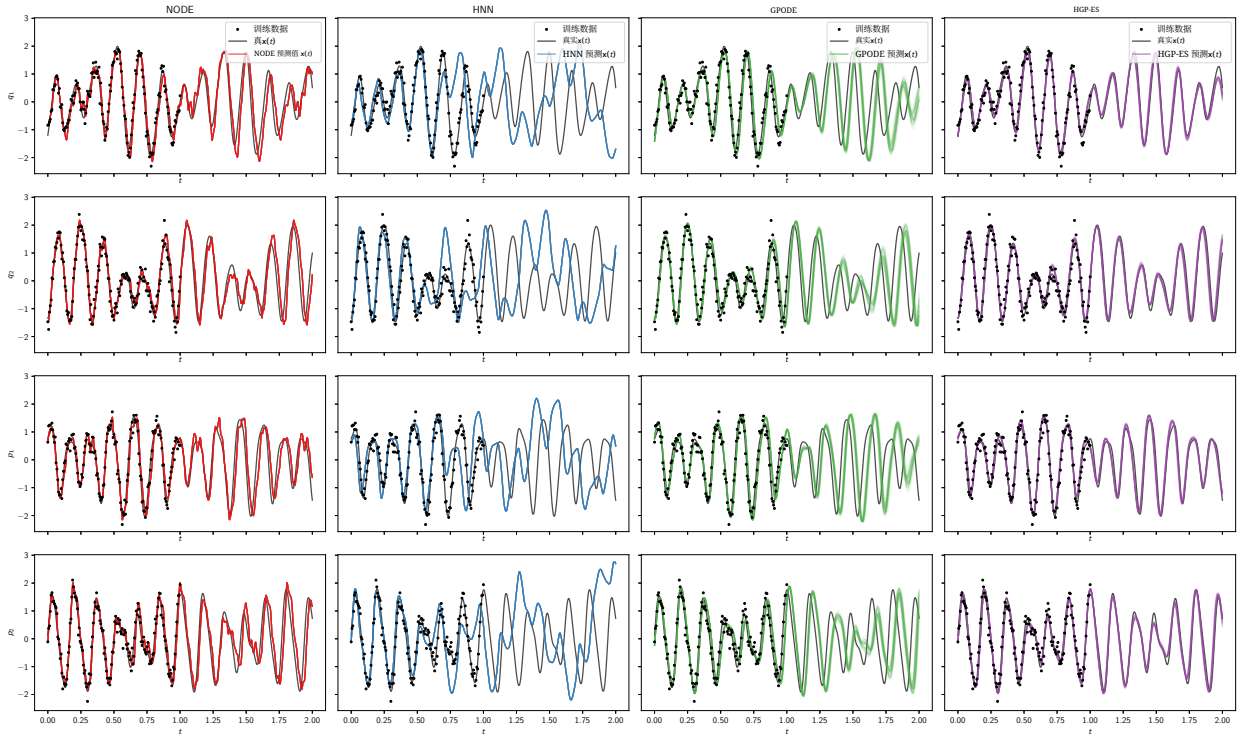


图11：一条示例轨迹，展示了HH系统任务1单次重复实验的训练数据、测试数据以及各模型的模型预测。对于GPODE和HGP，图中展示了模型的32个样本。

我们只能在玩具 FP 系统上进行比较。对于 SSGP，我们始终采用与 Tanaka 等人（2022）相同的设置。

方法	状态均方根误差 (↓)	状态平均负对数似然 (↓)	能量均方根误差 (↓)
NODE	**0.12** (0.12)	-	**0.30** (0.28)
HNN	0.20 (0.16)	-	**0.34** (0.33)
GPODE	0.23 (0.26)	-0.03 (1.21)	**0.38** (0.34)
HGP-ES	0.18 (0.19)	**-0.21** (0.67)	**0.25** (0.42)
SSGP	1.49 (0.39)	1.50 (0.20)	**0.23** (0.32)

表6：性　　能与FP系统轨迹预测任务中的SSGP比较　　.

表6展示了SSGP在任务1上的结果。正如预期，SSGP模型在轨迹预测任务上的表现较差，这与我们在第6.3节讨论的HGP-Batched模型比较中所得的结论一致。就均方根误差和平均负对数似然性能而言，HGP的结果明显更好。在此任务中，表现最佳的模型是NODE，其结果略优于HGP。

方法	状态均方根误差 (↓)	状态平均负对数似然 (↓)	能量均方根误差 (↓)
NODE	**0.48** (0.15)	-	0.26 (0.06)
HNN	0.91 (0.47)	-	0.25 (0.15)
GPODE	2.41 (2.28)	7.11 (8.22)	6.17 (10.30)
HGP-ES	1.41 (0.46)	4.68 (2.95)	0.55 (0.60)
HGP-Batched	**0.54** (0.31)	**0.66** (0.51)	**0.10** (0.03)
SSGP	0.75 (0.50)	0.89 (0.37)	**0.13** (0.03)

表7：FP系统中包含 $K = 8$条轨迹的初始条件外推任务上与SSGP的性能比较。

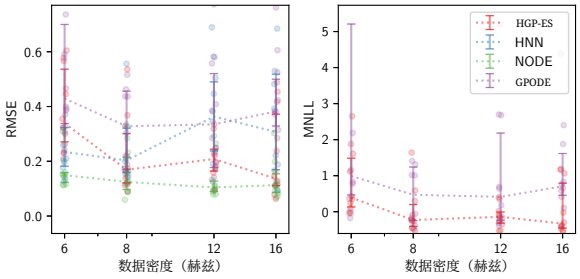
表7展示了SSGP在任务2上的结果。与HGP-ES相比，SSGP模型在任务2上的表现良好，这或许并不令人意外，因为任务2正是SSGP所专注的任务（$D = 1$，多条轨迹）。在状态均方根误差方面，SSGP的表现明显不如NODE，但在能量均方根误差方面结果良好。为了确定SSGP与HGP-ES之间性能差异的原因，我们还运行了采用批处理的HGP模型。我们发现，HGP-Batched在此任务上的性能优于SSGP和HGP-ES。这表明，HGP-ES与SSGP在任务2上的性能差异可归因于采用批处理而非射击推断；这也意味着模型之间的其他差异（通过诱导点而非随机傅里叶特征进行推断、推断初始条件、哈密顿量感知初始化）对性能有积极影响，因为HGP-batched的结果优于SSGP。

总体而言，这些结果表明，对于具有 $D = 1$ 的系统，采用射击法的 HGP 在轨迹预测性能上显著更好，而基于批处理的推断则能更好地从给定的一组初始条件外推到新的初始条件。任务2的结果表明，对于多条轨迹的轨迹外推问题，基于射击法的推断可能并非最优。联合拟合多条轨迹是一个更困难的优化问题，因为诱导点必须有效地分布在更大的相空间区域内。为这一问题加入射击目标会缩小可行解空间，并使优化问题更加困难，从而更难找到好的解。我们计划将这一影响作为未来工作的一部分进一步研究。

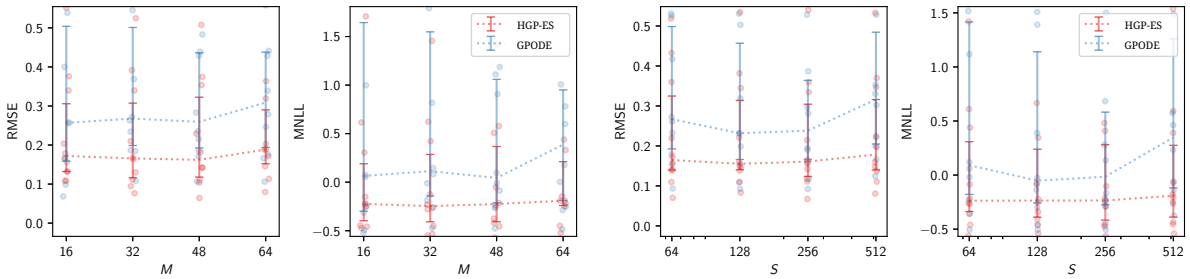
C.4 调查FP性能

在FP系统上，HGP在任务1和任务2上的表现都不如神经网络基线，而在HH和SP系统上则并非如此。为探究这一现象，我们对FP系统开展了扩展实验，以检验HGP的性能是否有所提升。我们改变了（i）数据密度、（ii）诱导点数量以及（iii）随机傅里叶基函数的数量。

任务1的结果如图12所示。可以看出，提高数据密度（12a）使 NODE 和 HGP 的结果略有改善，但似乎对



(a) 数据密度



(b) 诱导点数量

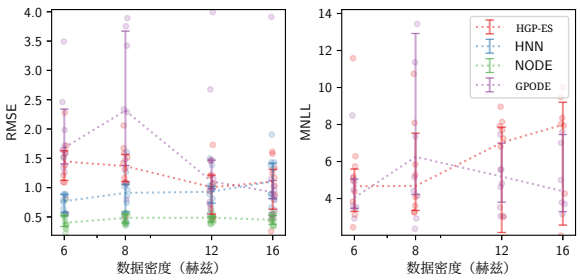
(c) 相对噪声方差

图12：FP系统在任务1上的不同变量对模型性能的影响。

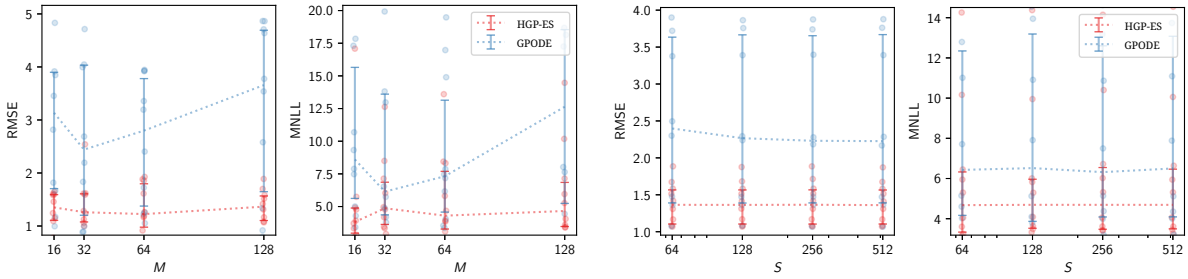
对.....的性能 HNN 和 GPODE 的影响不大。增加诱导点数量（12b）和基函数 s (12c) 不会显著影响 HGP 的性能。

任务2的结果如图13所示。图13a表明，提高任务2的数据密度对基于高斯过程的模型的均方根误差性能有轻微的正面影响，对基于神经网络的模型则没有显著影响。对平均负对数似然性能的影响并不显著。再次增加诱导点数量和基函数数量，对 HGP 的性能没有明显影响。

这些结果并不表明，数据密度、基函数数量或诱导点数量是导致高斯过程模型在任务2上相对性能较差的原因。我们认为，正如 C.3 节所述，在多轨迹推断情况下，射击界并非最优，这导致了任务2上的性能较差。



(a) 数据密度



(b) 诱导点数量

(c) 相对噪声方差

Fig图13：任务2中不同变量对FP系统模型性能的影响 .