arXiv:2303.02699v1 [math.DS] 5 Mar 2023

端口哈密顿系统学习中的表达能力与结构保持

Juan-Pablo Ortega 和 Daiying Yin

新加坡南洋理工大学数学科学部，Juan-Pablo.Ortega@ntu.edu.sg 和 yind0004@e.ntu.edu.sg

摘要。 本文提出了一种定义良好的参数化方案，适用于可通过保结构监督学习处理的单输入单输出（SISO）线性端口-哈密顿系统。该方案基于这类系统的可控可观标准形哈密顿表示，揭示了控制理论中的经典概念与机器学习背景下的关键性质（如结构保持和表达能力）之间的基本联系。本文的结果表明，与这些系统相关的估计问题可以采用相应的参数化方案；至少在典范情形下，该方案能够实现唯一辨识。此外，研究证明，复现系统动力学所需的参数复杂度仅为 $\mathcal{O}(n)$，而非这些系统的标准参数化方案所暗示的 $\mathcal{O}(n^2)$。

关键词： 线性端口哈密顿系统、机器学习、结构保持算法、系统理论、物理信息机器学习。

1 引言

近年来，得益于算法学的重大进步和计算能力的快速提升，机器学习取得了长足发展。在物理学和工程学领域，机器学习被寄予厚望，有望在预测和求解与物理动力系统相关的方程方面发挥重要作用。然而，对于力学或光学等与物理学相关的问题，自然应将我们基于物理学第一性原理对系统已有的先验知识融入学习算法。这些知识可能包括运动定律的特定形式、守恒定律、对称不变性，以及其他潜在的几何结构和变分结构。早在机器学习兴起之前，人们就已充分利用这一关于构造保结构格式的认识，并在数值积分领域取得了显著成效 [2], [8], [7], [9]。该领域的许多例子表明，未能维持特定守恒定律可能会导致物理上不一致的解。将这一思想引入机器学习领域，催生了一个统称为基于物理学的机器学习的新领域（见 [11], [16], [6] 及其中的参考文献）。

本文提出的方法与上述参考文献中的方法有两点不同。首先，这些方法旨在学习哈密顿系统的状态演化，而我们的方法则着重于学习端口哈密顿系统的输入输出动力学，同时不考虑物理状态空间。正如后文将要介绍的，这些系统具有潜在的狄拉克结构，该结构描述了众多具有外部输入的物理系统的几何特性 [12] ，并将哈密顿系统观测量的动力学作为一种特例纳入其中。这与现有文献中的研究成果有显著区别：这些研究大多针对自治哈密顿系统，并假设可以访问整个相空间，而不仅仅是其中的观测量。其次，我们不考虑只能估计近似误差的一般非线性系统，而是将仅限于线性系统作为第一步研究对象。对于这类系统，我们能够获得标准形下的显式表示，从而提出一种可证明具有最小参数空间（在典范情形下）的保结构学习范式。

本文的贡献主要基于控制理论中的经典技术、凯莱-哈密顿定理和辛线性代数，使我们能够定义正规形可控且可观哈密顿表示这一概念。我们的主要结果（定理2）表明，存在系统态射，使得任意线性端口哈密顿系统都能以正规形式表示为同维数正规形可控哈密顿表示的像。显然，由于原始端口哈密顿系统与新的线性系统通过系统态射相连，后者输入/输出关系的像就是前者的输入/输出关系。具体而言，可以利用新系统学习并复现原始端口哈密顿系统的输入/输出动力学（针对初始条件的一个子空间），而且这种学习范式从构造上就是保结构的。类似地，在同一结果中，我们还引入了另一类系统态射，它们将任意线性端口哈密顿系统与某个同维数的正规形可观哈密顿表示相连。因此，对于任意初始条件，都可以利用该可观哈密顿表示复现原始端口哈密顿系统的输入/输出关系。

可控表示与可观测表示彼此密切相关；对于典范端口哈密顿系统，两种系统态射都是同构。然而，为了学习可能并非典范的一般端口哈密顿系统，我们揭示了保结构性质 与表达能力之间存在权衡。这些结果确立了控制理论中的经典概念（如可控性和可观测性）与机器学习中的概念（如结构保持和表达能力）之间的紧密联系。

论文中的结果指出，与这些系统相关的估计问题的参数化至少在典范情形下可实现唯一辨识，并证明，

复现动力学所需的参数复杂度仅为 $\mathcal{O}(n)$，而非标准参数化所暗示的 $\mathcal{O}(n^2)$。我们将概述一些结果，这些结果指出可用群胚／群轨道空间来刻画唯一识别问题；相关内容将在后续论文中详细研究。

2 预备知识

状态空间系统与态射。连续时间状态空间系统由以下两个方程给出

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{z}} = F(\mathbf{z}, u), \\ y = h(\mathbf{z}), \end{cases} \tag{1}$$

其中 $u \in \mathcal{U}$ 是输入，$\mathbf{z} \in \mathcal{Z}$ 是内部状态，$y \in \mathcal{Y}$ 是输出，$F : \mathcal{Z} \times \mathcal{U} \to \mathcal{Z}$ 称为状态映射，$h : \mathcal{Z} \to \mathcal{Y}$ 称为读出映射或输出映射。第一个方程称为状态方程，而第二个通常称为观测方程。状态空间系统有时用三元组 $(\mathcal{Z}, F, h)$ 表示。式 (1) 的解（在存在且唯一时）给出输入/输出映射或滤波器 $U_{F,h} \colon C^1(I,\mathcal{U}) \times \mathcal{Z} \longrightarrow C^1(I,\mathcal{Y})$，其构造方式保证了因果性和时不变性。滤波器 $U_{F,h}$ 将每一对 $(\mathbf{u}\ z_0) \in C^1(I,\mathcal{U}) \times \mathcal{Z}$ 映射为非自治微分方程 (1) 的解 $U_{F,h}(\mathbf{u}\ z_0) \in C^1(I,\mathcal{Y})$。不同的状态空间系统可能产生相同的输入/输出系统。这就是我们所说的辨识问题，它与下一个定义有关（见 [3]）。

定义 1。如果映射 $f : \mathcal{Z}_1 \to \mathcal{Z}_2$ 满足以下两个性质，则称其为连续时间状态空间系统 $(\mathcal{Z}_1, F_1, h_1)$ 与 $(\mathcal{Z}_2, F_2, h_2)$ 之间的系统态射：

(i) 系统等变性：$f(F_1(\mathbf{z}_1, u)) = F_2(f(\mathbf{z}_1)\ u)$，对所有 $\mathbf{z}_1 \in \mathcal{Z}_1$ 和 $u \in \mathcal{U}$ 均成立。
(ii) 读出不变性：$h_1(\mathbf{z}_1) = h_2(f(\mathbf{z}_1))$ 对所有 $\mathbf{z}_1 \in \mathcal{Z}_1$ 均成立。

一个基本但非常重要的事实是，若 $f : \mathcal{Z}_1 \to \mathcal{Z}_2$ 是 $(\mathcal{Z}_1, F_1, h_1)$ 与 $(\mathcal{Z}_2, F_2, h_2)$ 之间的线性系统等变映射（在此情形下，$\mathcal{Z}_1$ 和 $\mathcal{Z}_2$ 是向量空间），那么，对于与 F_1 相关联、初始条件为 $\mathbf{z}_1^0 \in \mathcal{Z}$、输入为 $\mathbf{u} \in C^1(I,\mathcal{U})$ 的状态方程的任意解 $\mathbf{z}_1 \in C^1(I, \mathcal{Z}_1)$，其像 $f \circ \mathbf{z}_1 \in C^1(I, \mathcal{Z}_2)$ 是与 F_2 相关联的状态空间系统的一个解，且具有相同的输入和初始条件 $f(\mathbf{z}_1^0) \in \mathcal{Z}_2$。这意味着

$$U_{F_2,h_2} \circ \left(\mathbb{I}_{C^1(I,\mathcal{U})} \times f\right) = U_{F_1,h_1}. \tag{2}$$

这一事实带来一个重要后果：一般而言，输入/输出系统无法被唯一确定，因为所有通过映射 f 系统同构的状态空间系统都会产生相同的输入/输出映射，而其初始条件则根据式（2）通过映射 f 相关联。

哈密顿系统与端口哈密顿系统。由哈密顿函数 哈密顿系统() 确定，其微分方程为

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbb{J}\frac{\partial H}{\partial \mathbf{z}}, \tag{3}$$

其中，$\mathbb{J} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{I}_n \\ -\mathbb{I}_n & 0 \end{bmatrix}$ 是所谓的典范辛矩阵。线性哈密顿系统由二次哈密顿函数 $H(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\mathbf{z}^T Q\mathbf{z}$ 确定，其中 $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{2n}$，而 $Q \in \mathbb{M}_{2n}$ 是一个方阵，不失一般性，可假设其为对称矩阵。在这种情况下，哈密顿方程 (3) 化简为 $\dot{\mathbf{z}} = \mathbb{J}Q\mathbf{z}$。

端口哈密顿系统（见 [12]）是状态空间系统，将自治哈密顿系统推广到如下情形：外部信号或输入以时变方式控制哈密顿系统的动态行为。输入-状态-输出端口哈密顿系统族具有显式形式（见 [12]）：

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = [J(\mathbf{x}) - R(\mathbf{x})]\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})u, \\ y = g^T(\mathbf{x})\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}), \end{cases} \tag{4}$$

其中，(u, y) 是输入-输出对（分别对应控制端口和输出共轭端口），$J(\mathbf{x})$ 是斜对称互联结构，$R(\mathbf{x})$ 是对称正定耗散矩阵。我们的研究针对线性标准形端口哈密顿系统，即斜对称矩阵J 为常数，且等于典范辛矩阵 $\mathbb{J}$；哈密顿矩阵 Q 为对称正定矩阵；能量耗散矩阵为 $R = 0$。在这种情况下，(4) 具有如下形式：

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{z}} = \mathbb{J}Q\mathbf{z} + \mathbf{B}u, \\ y = \mathbf{B}^T Q\mathbf{z}, \end{cases} \tag{5}$$

其中 $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{2n}$, $u, y \in \mathbb{R}$，而 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{2n}$ 同时指定输入和输出层面的互连结构。在下文中，我们用符号PH_n表示可写成式 (5) 的状态空间系统族，并将该集合中的元素称为标准形端口哈密顿系统。所有这些系统都具有解的存在唯一性，因此确定了一个输入/输出系统族，记为 $\mathcal{PH}_n$。根据定义，PH_n 中的系统完全由数对 $(Q, \mathbf{B})$ 确定，因此我们定义参数空间

$$\Theta_{PH_n} := \left\{(Q, \mathbf{B}) | 0 < Q \in \mathbb{M}_{2n}, Q = Q^T, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{2n}\right\}.$$

令 $\theta_{PH_n}\colon \Theta_{PH_n} \to PH_n$ 表示将参数 $(Q, \mathbf{B}) \in \Theta_{PH_n}$ 映射为相应端口哈密顿状态空间系统 (5) 的映射。我们强调，Θ_{PH_n} 中的两个不同元素可以确定 $\mathcal{PH}_n$中相同的输入/输出系统；换言之，参数集 Θ_{PH_n} 不能唯一确定 $\mathcal{PH}_n$中的元素。

Williamson 标准形。 以下经典结果可见于[14], [15], [4], [1]。

定理 1。 设 $M \in \mathbb{M}_{2n}$ 为正定实对称矩阵。则
(i) 存在一个辛矩阵 $S \in Sp(2n,\ \mathbb{R})$，使得 $M = S^T \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} S$，其中 $D = \mathrm{diag}(\mathbf{d})$ 是一个 n维的、具有正元素的对角矩阵，且$\mathbf{d} = (d_1,\ ...,\ d_n)^T$。

(ii) 数值 $d_1,\ ...,\ d_n$ 除重排序外，与用于将 M对角化的辛矩阵 S 的选择无关。

我们使用记号 $D = \mathrm{diag(d)}$ 表示 D 是一个对角矩阵，其对角元素由向量 $\mathbf{d} = (d_1,\ ...,\ d_n)^T$给出。上述定理中的元素 d_i 称为 M的辛特征值 。

3 可控与可观哈密顿系统

定义 2。 给定 $\mathbf{d} = (d_1,\ .....,\ d_n)^T \in \mathbb{R}^n$，其中 $d_i > 0$，且 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{2n}$，如果一个 $2n$ 维线性状态空间系统具有如下形式，则称其为可控哈密顿（分别为可观哈密顿）表示

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{s}} = g_1^{ctr}(\mathbf{d}) \cdot \mathbf{s} + (0, 0, \cdots, 0, 1)^T \cdot u, \\ y = g_2^{ctr}(\mathbf{d}, \mathbf{v}) \cdot \mathbf{s}, \end{cases} \left(resp.,\ \begin{cases} \dot{\mathbf{s}} = g_1^{obs}(\mathbf{d}) \cdot \mathbf{s} + g_2^{obs}(\mathbf{d}, \mathbf{v}) \cdot u, \\ y = (0, 0, \cdots, 0, 1) \cdot \mathbf{s}, \end{cases} \right) \tag{6}$$

其中 $g_1^{ctr}(\mathbf{d}) \in \mathbb{M}_{2n}$ 和 $g_2^{ctr}(\mathbf{d},\ \mathbf{v}) \in \mathbb{M}_{1,\ 2n}$ （分别地，$g_1^{obs}(\mathbf{d}) \in \mathbb{M}_{2n}$ 和$g_2^{obs}(\mathbf{d},\ \mathbf{v}) \in \mathbb{R}^{2n}$）按如下方式构造:
(i) 给定 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$，令 $\{a_0, a_1, \ldots, a_{2n-1}\}$ 为使 $\lambda^{2n} + \sum_{i=0}^{2n-1} a_i \cdot \lambda^i = (\lambda^2 + d_1^2)(\lambda^2 + d_2^2)..... (\lambda^2 + d_n^2)$ 成为关于 λ的两个多项式之间等式的实系数。约定令 $a_{2n} = 1$ 。注意， a_i 中下标为奇数的项 i均为零。定义如下:

$$g_1^{ctr}(\mathbf{d}) := \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \\ -a_0 & -a_1 & -a_2 & \ldots & -a_{2n-1} \end{bmatrix}_{2n \times 2n},$$

（分别为， $g_1^{obs}(\mathbf{d}) = g_1^{ctr}(\mathbf{d})^\top$） 。
(ii) 给定$\mathbf{d}$ 和$\mathbf{v}$，则

$$g_2^{ctr}(\mathbf{d}, \mathbf{v}) := \begin{bmatrix} 0 & c_{2n-1} & 0 & c_{2n-3} & \ldots & 0 & c_1 \end{bmatrix}, \quad (resp.,\ g_2^{obs}(\mathbf{d}, \mathbf{v}) = g_2^{ctr}(\mathbf{d}, \mathbf{v})^\top)$$

其中

$$c_{2k+1} = \mathbf{v}^T \begin{bmatrix} F_k & 0 \\ 0 & F_k \end{bmatrix} \mathbf{v},$$

对于 $k=0$、.....、$n-1$，以及

$$F_k = \begin{bmatrix} f_1 & & & \\ & f_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & f_{n-1} \\ & & & & f_n \end{bmatrix}$$

$$with\ f_l = d_l \cdot \sum_{\substack{j_1,\ldots,j_k \neq l \\ 1\leq j_1<\cdots<j_k\leq n}} \left(d_{j_1} d_{j_2} \cdots d_{j_k}\right)^2,\ l=1,\ldots,n.$$

我们用 CH_n（分别用 OH_n）表示所有形如 *(6)* 的系统的集合，并称其为可控哈密顿（分别为可观哈密顿）表示。符号 $\mathcal{CH}_n$（分别为 $\mathcal{OH}_n$）表示由 CH_n（分别为 OH_n）中的状态空间系统所诱导的输入/输出系统集合。我们强调，CH_n 和 OH_n 中的元素都可以用集合进行参数化

$$\Theta_{CH_n} = \Theta_{OH_n} := \left\{(\mathbf{d},\mathbf{v}) | d_i > 0, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{2n}\right\}.$$

映射 $\theta_{CH_n}: \Theta_{CH_n} \to CH_n$ 和 $\theta_{OH_n}: \Theta_{OH_n} \to OH_n$ 将每个参数映射到相应的状态空间系统。注意，CH_n（分别为 OH_n）中形如 (6) 的元素是 [13] 意义下的典范可控（分别为可观）形式，因此它们是可控（分别为可观）的。我们的主要结果建立了端口哈密顿系统与上述定义的可控（分别为可观）哈密顿表示之间的关系，后续将利用这一关系讨论 PH_n 建模中的结构保持与表达能力。

定理2。**（i）**对于每个 $S \in Sp(2n, \mathbb{R})$，都存在一个映射

$$\begin{aligned} \varphi_S: \quad CH_n \quad &\longrightarrow \quad PH_n \\ \theta_{CH_n}(\mathbf{d},\mathbf{v}) &\longmapsto \theta_{PH_n}\left(S^T \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} S, S^{-1}\mathbf{v}\right), \end{aligned}$$

满足 $D = \mathrm{diag}(\mathbf{d})$，使得可控哈密顿系统 $\theta_{CH_n}(\mathbf{d},\ \mathbf{v}) \in CH_n$ 与端口哈密顿像 $\varphi_S(\theta_{CH_n}(\mathbf{d},\ \mathbf{v})) \in PH_n$ 通过线性系统态射 $f_S^{(\mathbf{d},\mathbf{v})}: \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$ 相连。

(ii) 给定一个端口哈密顿系统 $\theta_{PH_n}(Q, B) \in PH_n$，存在一个显式的线性系统态射 $f^{(Q,\mathbf{B})}: \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$，连接 $\theta_{PH_n}(Q, B) \in PH_n$ 的状态空间与一个可观哈密顿系统 $\theta_{OH_n}(d, v) \in OH_n$ 的状态空间，其中 $(d, v) \in \Theta_{OH_n}$ 由 Q 的 *Williamson* 标准形分解确定，而该分解由 $S \in Sp(2n, \mathbb{R})$ 确定；也就是说，$Q = S^T \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} S$，$D = diag(d)$，且 $v = S \cdot B$。

可控性、可观测性与可逆性。第(i) 部分中的线性系统态射 $f_S^{(\mathbf{d},\mathbf{v})}$：$\mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}$ 由矩阵 L实现，也就是说，$\mathbf{z} = f_S^{(\mathbf{d},\mathbf{v})}(\mathbf{s}) = L\mathbf{s}$，并且一旦确定了 (d, v)，就可以显式计算 L。此外，L 可通过初等列运算转换为 $\varphi_S(\theta_{CH_n}$(d, v)) $\in PH_n$的可控性矩阵。因此，L可逆这一条件，也就是 CH_n 和 PH_n 中的两个系统通过 φ_S 连接且彼此同构，等价于 $\varphi_S(\theta_{CH_n}$(d, v)) 的可控性矩阵满秩；无论选择哪一个 $S \in Sp(2n, \mathbb{R})$，结论都成立。这又等价于 $\varphi_S(\theta_{CH_n}$(d, v)) 为典范，因为在线性端口哈密顿范畴中，可控性与可观测性这两个概念密切相关。事实上，可以证明（见 [10]），若一个无耗散的线性端口哈密顿系统可控且 $\det(Q) \neq 0$，则它也可观测。反过来，若它可观测，则 $\det(Q) \neq 0$，且它也可控。按照系统理论中的惯例，若一个处于标准形的线性端口哈密顿系统既可控又可观测，我们就称其为典范。鉴于我们刚才回顾的结果，定义 PH_n 时所包含的条件 $\det(Q) \neq 0$ 意味着在此情境下，可控性或可观测性中的任一者都等价于系统为典范。因此，接下来我们只讨论可控性。

CH_n 中的系统通过构造处于可控典范形，因此始终是可控的。如果我们希望学习的图像系统 $\varphi_S(\theta_{CH_n}$(d, v)) 是可控的（或等价地，是可观测的），那么根据前面的论证，L 必然是一个可逆矩阵，这意味着 θ_{CH_n}(d, v) 和 $\varphi_S(\theta_{CH_n}$(d, v)) 根据构造必然是同构系统。因此，在这种情况下，θ_{CH_n}(d, v) 不仅是可控的，而且也是可观测的。

在保结构系统学习中的应用。作为前述结果的推论，我们可以使用可控哈密顿系统，以高效且保结构的方式学习端口哈密顿系统。实际上，给定一个端口哈密顿系统的实现，可以使用适当的损失函数估计θ_{CH_n}(d, v) $\in CH_n$。可控哈密顿表示比原始的端口哈密顿表示更具优势，原因有二：

(i) 可控哈密顿表示的模型复杂度仅为 $\mathcal{O}(n)$ 量级，而原始端口哈密顿表示的复杂度则为 $\mathcal{O}(n^2)$ 量级。(ii) 该学习方案自动具备保结构性质。事实上，一旦针对某个实现估计出系统 θ_{CH_n}(d, v) $\in CH_n$，我们便证明存在一族线性态射，其中每个态射都连接 θ_{CH_n}(d, v) 的状态空间与某个 $\theta_{PH_n}(Q, B) \in PH_n$，使得 (6) 的任意解自动成为 PH_n 中某个系统的解。因此，即使参数 *(d, v)* 存在估计误差，其解也对应于一个端口哈密顿系统。因此，该学习方案保留了这一结构。

系统学习与表达能力。 系统在 PH_n 中的可控性与相应表示在 CH_n中的表达能力之间存在重要联系。事实上，如果 PH_n中形式为 (5) 的系统是可控的（即 $f_S^{(\mathbf{d},\mathbf{v})}$ 可逆），那么它在 CH_n 中经由映射 φ_S 得到的原像能够再现 (5) 的所有可能解，这意味着基于 CH_n中系统的学习方案具有完全的表达能力。然而，如果 $\theta_{PH_n}(Q, \mathrm{B}) \in PH_n$不可控（即 $f_S^{(\mathbf{d},\mathbf{v})}$ 不可逆），则无法保证其具有完全的表达能力。一般而言， $\theta_{PH_n}(Q, \mathrm{B}) \in \mathcal{PH}_n$这类系统的可控性越强， $f_{(\mathbf{d},\mathbf{v})S}$ 的秩就越高，相应的可控哈密顿表示也就越具表达能力。

另一方面，我们已经证明，对于每个 $\theta_{PH_n}(Q, \mathrm{B}) \in PH_n$，在 $\theta_{PH_n}(Q, \mathrm{B}) \in PH_n$ 的状态空间与某个 $\theta_{OH_n}(\mathrm{d}, \mathrm{v})$ 之间存在一个线性态射，使得式 (5) 的任意解自动也是 OH_n 中某个系统的解。因此，无论原始端口哈密顿系统是否可控，只要学习到正确的参数 $(\mathrm{d}, \mathrm{v}) \in \Theta_{OH_n}$，就总能由 OH_n 中的一个元素再现其解。因此，这一学习方案具有完全的表达能力。

4 端口哈密顿系统的唯一可辨识性

上一节的主定理给出了一种具有最优复杂度的保结构学习方案。然而，它并未解决由本文试图学习的、处于标准形 (5) 的线性端口哈密顿系统所诱导的滤波器族 $\mathcal{PH}_n$ 的唯一可辨识性问题。尽管这一问题将在即将发表的论文中得到详细研究，我们在此提出一些可由定理2推导出的初步结果。

我们回顾一下，在我们的情形中，唯一识别问题源于这样一个事实： PH_n 中彼此系统同构的元素会在 $\mathcal{PH}_n$中诱导出完全相同的输入/输出系统。很容易证明，系统同构会在 PH_n 上诱导出一个等价关系，我们将其记为$\sim_{sys}$。

我们可以期待

$$\mathcal{PH}_n \simeq PH_n/\sim_{sys},$$

这样，商空间 $PH_n/\sim_{sys}$ 就是实现唯一可辨识性的空间。遗憾的是，这仅在我们将范围限制于典范系统时成立；典范系统构成一个开稠密子集。更准确地说，若将 PH_n 中典范端口哈密顿系统的子集记为PH_n^{can}，并将相应的滤波器记为 $\mathcal{PH}_n^{can}$，则有

$$\mathcal{PH}_n^{can} \simeq PH_n^{can}/\sim_{sys} \simeq \Theta_{CH_n}^{can}/(S_n \rtimes \mathbb{T}^n).$$

此外，这个唯一辨识空间可以刻画为半直积群 $S_n \rtimes \mathbb{T}^n$ （S_n 是置换群， $\mathbb{T}^n$ 是 n-环面）在 Θ_{CH_n} 的某个稠密子集 $\Theta_{CH_n}^{can}$ 上的一种作用所对应的轨道空间。

该轨道空间具有自然的光滑结构和全局坐标图，可用于学习问题的数值实现。

一般而言，在存在非典范端口哈密顿系统的情况下， $\mathcal{PH}_n$ 与 $PH_n/\sim_{sys}$ 之间的关系很复杂。在这种情形下， PH_n 中两个不同的元素若是$\sim_{sys}$-等价的，则总会在 $\mathcal{PH}_n$中诱导出相同的滤波器；而 $\mathcal{PH}_n$ 中的一个滤波器可能由 PH_n 中两个并非$\sim_{sys}$-等价的元素实现，因为滤波器只确定典范部分（即最小实现），参见 [5]。换言之，通过取商空间 $PH_n/\sim_{sys}$，我们消除了集合 PH_n中一些产生相同输入输出动力学的冗余，但并未消除所有冗余。接下来，我们将刻画 $PH_n/\sim_{sys}$，同时再次强调，一般而言， $PH_n/\sim_{sys}$与唯一可辨识空间 $\mathcal{PH}_n$ 并不相同。

为了使商空间 $PH_n/\sim_{sys}$ 便于处理，最好用参数集 Θ_{PH_n} 来刻画它，或者更理想地，用更简单的 Θ_{CH_n}来刻画。这确实是可行的。更具体地说，可以在 Θ_{CH_n} 上定义一个等价关系$\sim_\star$，使得

$$PH_n/\sim_{sys} \simeq \Theta_{CH_n}/\sim_\star . \tag{7}$$

等价关系 $\sim_\star$ 定义如下： Θ_{CH_n}中的两个对 $(\mathrm{d}_1,\mathrm{v}_1)$ 和 $(\mathrm{d}_2,\mathrm{v}_2)$ 是 $\sim_\star$-等价的，即 $(\mathrm{d}_1,\mathrm{v}_1) \sim_\star (\mathrm{d}_2,\mathrm{v}_2)$，当且仅当存在一个置换矩阵 $P_\sigma \in \mathbb{M}_n$ 和一个可逆矩阵 A，使得对于 $D_i = \mathrm{diag}(\mathrm{d}_i)$、 $i \in \{1,2\}$ 和$P = \begin{bmatrix} P_\sigma & 0 \\ 0 & P_\sigma \end{bmatrix}$，以下条件成立：

$$P \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_1 \end{bmatrix} P^T = \begin{bmatrix} D_2 & 0 \\ 0 & D_2 \end{bmatrix}, \quad A^T \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_1 \end{bmatrix} A\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_1 \end{bmatrix} \mathbf{v}_1,$$

$$A\mathbb{J} \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_1 \end{bmatrix} = \mathbb{J} \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_1 \end{bmatrix} A, \quad \text{and} \quad \mathbf{v}_2 = PA\mathbf{v}_1$$

关于 $PH_n/\sim_{sys}$ 李群胚轨道空间的刻画。按照惯例，群胚用符号 s, t : $\mathcal{G} \rightrightarrows M$ （或简写为 $\mathcal{G} \rightrightarrows M$）表示，其中 s 和 t 分别是源 映射和目标 映射。给定 $m \in M$，包含该点的群胚轨道 为 $\mathcal{O}_m = t\left(s^{-1}(m)\right) \subset M$。与 $\mathcal{G} \rightrightarrows M$相关的轨道空间 记为 $M/\mathcal{G}$。

在本段中，我们说明如何用两个李群胚的轨道来刻画式 (7) 中的商空间。更确切地说，等价类集合 $PH_n/\sim_{sys}$（分别为 $\Theta_{CH_n}/\sim_\star$）是群胚 $\mathcal{G}_n \rightrightarrows PH_n$（分别为 $\mathcal{H}_n \rightrightarrows \Theta_{CH_n}$）的轨道空间 $PH_n/\mathcal{G}_n$（分别为$\Theta_{CH_n}/\mathcal{H}_n$），我们现在来构造这两个群胚。因此，陈述 (7) 等价于说，这两个群胚的轨道空间 $PH_n/\sim_{sys}$ 和 $\Theta_{CH_n}/\mathcal{H}_n$ 相同。

第一个群胚的全空间 $\mathcal{G}_n$ 为

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_n := \{(L,(Q,\mathbf{B}))\,|\, & L \in GL(2n,\mathbb{R}), (Q,\mathbf{B}) \in PH_n \text{ such that} \\ & \mathbb{J}^T L\mathbb{J}QL^{-1} \text{ is symmetric and positive-definite and } B = \mathbb{J}^T L^T \mathbb{J} L\mathbf{B}\}.\end{aligned}$$

目标映射和源映射 α, β: $\mathcal{G}_n \to PH_n$ 定义为 $\alpha(L, (Q, \mathrm{B})) := (\mathbb{J}^T L \mathbb{J} Q L^{-1}, L\mathrm{B})$ 和 $\beta(L, (Q, \mathrm{B})) := (Q, \mathrm{B})$。可以证明，该群胚的轨道空间 $PH_n/\mathcal{G}_n$ 与 $PH_n/\sim_{sys}$重合。

第二个群胚的全空间 $\mathcal{H}_n$ 为

$$\mathcal{H}_n := \Big\{ ((P_\sigma, A), (\mathbf{d}, \mathbf{v})) \mid P_\sigma \in \mathbb{M}_n \text{ is a permutation matrix}, A \in GL(2n, \mathbb{R}), \\ (\mathbf{d}, \mathbf{v}) \in \Theta_{CH_n}, \text{ such that } A^T \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} A\mathbf{v} = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \mathbf{v} \\ \text{and } A\mathbb{J} \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} = \mathbb{J} \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} A, \text{ with } D = \mathrm{diag}(\mathbf{d}) \Big\}.$$

目标映射和源映射 α、β: $\mathcal{H}_n \to \Theta_{CH_n}$ 定义为 $\alpha((P_\sigma, A), (\mathrm{d}, \mathrm{v})) := (\mathrm{d}, \mathrm{v})$ 以及 $\beta((P_\sigma, A), (\mathrm{d}, \mathrm{v})) := (P_\sigma \mathrm{d}\ PA\mathrm{v})$，其中 $P = \begin{bmatrix} P_\sigma & 0 \\ 0 & P_\sigma \end{bmatrix}$。

该群胚的轨道空间 $\Theta_{CH_n}/\mathcal{H}_n$ 与 $\Theta_{CH_n}/\sim_\star$ 重合；此外，正如所希望的，李群胚 $\mathcal{G}_n \rightrightarrows PH_n$ 和 $\mathcal{H}_n \rightrightarrows \Theta_{CH_n}$的轨道空间是同构的。

致谢 作者感谢 Lyudmila Grigoryeva 提供有益的讨论和意见，并感谢瑞士国家科学基金会（资助编号 175801/1）以及南洋理工大学物理与数学科学学院提供的部分经费支持。DY 获得南洋理工大学校长研究生奖学金资助。

参考文献

1. De Gosson, M.A.: 《辛几何与量子力学》，第166卷。施普林格科学与商业媒体（2006）2. Gonzalez, O.: 时间积分与离散哈密顿系统。载于: 《力学: 从理论到计算》，第257–275页。Springer（2000）3. Grigoryeva, L., Ortega, J.P.: 通过规范化对循环网络进行降维。《几何力学杂志》**13**(4), 647–677（2021）。https://doi.org/10 2021028 4 3934. /jgm. . Ikramov, K.D.: 关于正定矩阵的辛特征值。《莫斯科大学计算数学与控制论》**42**, 1–4（2018）。https://doi.org/10 0278641918010041 5 3103. /S . Kalman, R.E.: 线性动力系统的数学描述。《工业与应用数学学会杂志》系列 A: 控制 **1**(2), 152–192（1963 0301010 6 10 1137 0301010, 10 1137 ）。https://doi.org/ . / https://doi.org/ . / . Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., Yang, L.: 物理信息机器学习。《自然评论: 物理》**3**(6), 422–440（2021）7. Leimkuhler, B., Reich, S.: 《哈密顿动力学模拟》。剑桥大学出版社（2004）8. Marsden, J.E., West, M.: 离散力学与变分积分器。《数值学报》**10**, 357–514（2001）。https://doi.org/10.1017/S096249290100006X

9. McLachlan, R.I., Quispel, G.R.W.：常微分方程的几何积分器。《物理学杂志 A：数学与一般》**39**(19), 5251（2006）10. Medianu, S., Lefevre, L., Stefanoiu, D.：线性无损端口控制哈密顿系统的可辨识性。载于：第二届国际系统与计算机科学会议。第56–61页（2013）。https://doi.org/10 6632023 11 1109 2013 . /IcConSCS. . . Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.：物理信息深度学习（第一部分）：非线性偏微分方程的数据驱动解。arXiv预印本 arXiv:1711.10561（2017）12. van der Schaft, A., Jeltsema, D.：端口-哈密顿系统理论：入门概述，第1卷（2014）。https://doi.org/10.1561/2600000002, http://dx.doi.org/10 2600000002 13 1561. / . Sontag, E.：《数学控制理论：确定性有限维系统》。施普林格出版社（1998）。https://doi.org/10.1007/978-3-540-69532-5_16, papers2://publication/uuid/28C81B69-DB6C-433C-91C8-F6761AB37FAB 14. Williamson, J.：关于线性动力系统标准形的代数问题。《美国数学杂志》**58**(1), 141–163（1936）15. Williamson, J.：关于动力学中线性正则变换的标准形。《美国数学杂志》**59**(3), 599–617（1937）16. Wu, J.L., Xiao, H., Paterson, E.：用于改进湍流模型的物理信息机器学习方法：一个综合框架。《物理评论：流体》**3**(7), 74602（2018）