arXiv:2304.02536v2 [nlin.AO] 4 Nov 2023

从单条轨迹推断非线性分数阶扩散过程

Johannes A. Kassel[1], [*]、**Benjamin Walter**[2], [†]和 **Holger Kantz**[1]

[1] 马克斯·普朗克复杂系统物理研究所，N¨othnitzer Straße 38，01187 德累斯顿，德国[2] 数学系，伦敦帝国学院，Queen's Gate 180 号，SW7 2AZ 伦敦，英国

电子邮箱：[*]jkassel@pks.mpg.de，[†]b.walter@imperial.ac.uk

摘要。我们提出一种方法，可从单条轨迹推断由乘性分数高斯噪声驱动的非线性随机模型中任意的空间依赖漂移和扩散。我们的方法称为分数阶 Onsager-Machlup 优化（fOMo），通过最小化根据观测时间序列构造的场论作用量，引入最大似然估计量。我们使用具有强非线性的人造数据，在广泛的赫斯特指数范围内成功检验了 fOMo，并将其应用于一组日平均气温数据。我们还强调，忽略非马尔可夫性会造成显著的系统性估计误差，这凸显了在研究现实世界中具有长程（反）相关性的系统时，采用非线性分数阶推断方法的必要性。

关键词：统计推断、分数布朗运动、非平衡统计力学、最大似然估计、单轨迹测量、时间序列分析、反常扩散

投稿至：*New J. Phys.*

1. 引言

由许多自由度构成的复杂系统，其动态行为给解析描述带来了重大挑战，且往往难以凭借物理直觉理解。通常，测量只能获取少数缓慢演化的自由度，而这些自由度会发生随机涨落，这表明系统中存在隐含相互作用。如果系统由层级自相似子系统构成，其分形性质可能会体现在无尺度相关的，即分数阶涨落中，并导致系统显著偏离马尔可夫性 [1]。呈现分数阶相关性的重要系统包括气候 [2–6]，DNA [7, 8]，细胞运动 [9, 10]，和大脑[11, 12]。

近期对这类过程的研究主要聚焦于基于机器学习的预测；尽管这类方法功能强大，[13]，但往往缺乏可解释性 [14] 或

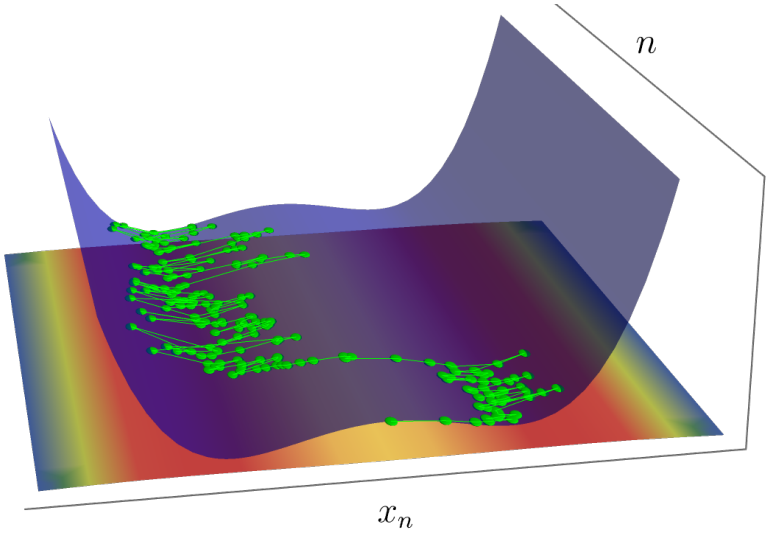

图 1. 由方程（1）给出的随机差分方程描述了过程 x_n 的随机演化，该过程受非线性漂移 $f(x) = -V'(x)$（$V(x)$ 显示为蓝色阴影）和非齐次扩散 $g(x)$（彩虹色地面）。该过程由乘性分数阶驱动噪声 $g(x)\Delta\xi^H$驱动。我们提出一种算法，该算法可推断出 $f(x)$ $g(x)$从单条有限轨迹（绿点）。

在真实世界场景中的稳健性 [15, 16]。为了对这类分数阶过程建立分析性且直观的理解，统计推断——即根据实验数据推断假设随机模型的参数——有助于提升结果的清晰度与可解释性。近期的推断方法分别聚焦于线性分数阶 [17–21]，过程或非线性非分数阶过程 [22–33]。然而，当非线性动力学与分数阶涨落同时出现时，两者复杂的相互作用会产生许多纯非线性模型或纯分数阶模型中并不存在的涌现特征。因此，若要研究这些现象学上更丰富的情形，就需要更通用的统计推断方法。本文提出一种针对完全非线性分数阶时间序列模型的估计方法，可利用单条轨迹恢复随空间变化的漂移和扩散参数。因此，该方法适用于只能获得单个实现的情形 [34, 35]。在开发这一估计方法时，我们借鉴了场论 Onsager-Machlup 形式主义 [36–39] 并将其推广至任意相关的过程，尤其是分数阶过程。我们使用合成数据和真实世界数据对该方法进行了基准测试；结果表明，该方法能够以极高的精度重建非线性参数和统计量。我们还进一步表明，忽略分数阶相关性会导致系统性错误的参数推断。

2. 分数阶过程

我们讨论一种用于描述非线性时间序列的随机模型，该模型由分数阶噪声驱动，并由*Itˆo*型随机差分方程描述

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t + g(x_n)\Delta\xi^H_{n+1} \ , \tag{1}$$

其中 $f(x)$ $g(x)$分别表示维度为 $[f] =[x]/[$时间$]$, $[g] = [x]/[$时间$]^H$的空间依赖漂移项和扩散项。该过程如图1所示。方程（1）是由分数阶噪声驱动的随机微分方程的一级离散化（欧拉-丸山格式） [40]。其中， Δt表示离散化的时间步长，$\Delta\xi^H_n$是离散化的分数阶高斯噪声（fGN）， [41, 42], 由其相关矩阵定义

$$C_{mn} = \left\langle \Delta\xi^H_m \Delta\xi^H_n \right\rangle = (\Delta t)^{2H} \left(|n-m+1|^{2H} + |n-m-1|^{2H} - 2\,|n-m|^{2H} \right) \ . \tag{2}$$

选择 $H = \frac{1}{2}$ 时，噪声 $\Delta\xi^H_n$是离散标准高斯白噪声。对于 $H > \frac{1}{2}$ ($H < \frac{1}{2}$)，增量 $\Delta\xi^H_n$呈正（负）相关。

3. 推断方法

我们提出一种算法，给定一条在 Δt 处采样的测量轨迹 $\vec{x} = \{x_0, x_1, \ldots, x_N\}$，即可推断式（1）中引入的函数参数 $f(x)$ $g(x)$。我们认为，$f(x)$ 和 $g(x)$ 只会引入短程相关性，而这些相关性在平稳过程中会呈指数衰减。因此，我们预期，式（1）中相关函数的渐近标度仅由 H 和 Δt 决定，与 $f(x)$ $g(x)$ 无关。我们假设赫斯特参数已使用成熟方法（例如， [43–46]）预先估计。

核心思路是寻找函数 f 和 g，使观测轨迹 $\vec{x}$的对数似然 $\ln\ P[\vec{x}|f,g]$ 最大化。似然通过测量噪声实现 $\Delta\vec{\xi}^H = \{\Delta\xi^H_1, ..., \Delta\xi^H_N\}$的似然得到；该噪声实现与 f和 g共同生成测量结果 $\vec{x}$。通过对式（1）求逆即可得到该噪声实现，

$$\left(\Delta\vec{\xi}^H\left(\vec{x}\right)\right)_n = \frac{x_n - x_{n-1} - f(x_{n-1})\Delta t}{g(x_{n-1})} \ . \tag{3}$$

测得 $\vec{x}$ 的概率，随后可通过对 $\mathbb{R}^N$进行标准的变量替换，由 $P_\xi[\Delta\xi^H]$（噪声实现的概率分布）得到，

$$P[\vec{x}|f,g] = P_\xi\left[\Delta\vec{\xi}^H\left(\vec{x}\right)\right] \left| \frac{\partial\Delta\vec{\xi}^H}{\partial\vec{x}} \right| , \tag{4}$$

其中，非线性变换（方程 3）会产生一个雅可比行列式，用于计入从 $\prod_n \mathrm{d}\Delta\xi^H_n$到 $\prod_n \mathrm{d}x_n$ [47]的测度变化。

由于$\vec{\xi}$是离散分数高斯噪声，其概率分布是一个N维高斯分布。我们将该分布写成场论形式：

$$P_\xi = \left((2\pi)^N \det[C]\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\mathcal{A}[\Delta\xi^H]\right) \tag{5}$$

其中， $\mathcal{A}$ 是自由作用量

$$\mathcal{A}[\Delta\xi^H] = \frac{1}{2}\left(\Delta\vec{\xi}^H\right)^T C^{-1}\Delta\vec{\xi}^H \ , \tag{6}$$

且 C^{-1} 是方程（2）中给出的相关矩阵的矩阵逆 [48]。这里，非对角相关矩阵精确地计入了该过程的全部记忆效应。

行列式 $\left|\partial\Delta\vec{\xi}^H/\partial\vec{x}\right|$ 本身很容易计算，因为 $\partial\Delta\xi_n^H/\partial x_m$ 是下三角矩阵，对于 $m > n$ 所有元素均为零（见方程（3））。因此，行列式由对角元素的乘积给出，

$$\partial\Delta\xi_n^H/\partial x_n = g(x_{n-1})^{-1} . \tag{7}$$

由此得到测量的对数似然

$$\ln P[\vec{x}|f,g] = -\frac{1}{2}\sum_{m,n=1}^{N}\frac{x_m - x_{m-1} - f(x_{m-1})\Delta t}{g(x_{m-1})}C^{-1}_{m,n}\frac{x_n - x_{n-1} - f(x_{n-1})\Delta t}{g(x_{n-1})} - \sum_{n=0}^{N-1}\ln|g(x_n)| , \tag{8}$$

其中我们省略了与 f 或 g无关的附加归一化常数。

在场论文献中，方程（8）形式的表达式对于对角相关矩阵 C是众所周知的，对应于具有$H = \frac{1}{2}$的不相关噪声，它们被称为昂萨格–马赫卢普作用量 [36–39]。这些已被广泛研究以表征特定参数化随机过程的“最可能路径” [37, 49–53]。在本文中，我们采取相反方向，使用昂萨格–马赫卢普理论来确定哪些参数使观测路径最可能。这意味着我们此后将方程（8）中的项解释为路径作用量 $\mathcal{S}[f,g|\vec{x}] = -\ln P[\vec{x}|f,g]$，其参数为 f和 g，而路径 x现在反过来作为参数化。这样做时，我们将已建立的（马尔可夫）最大似然估计量 [28, 32, 54] 与昂萨格–马赫卢普形式主义联系起来。我们将这些结果推广到分数阶驱动过程，因此将基于最大化方程（8）的估计方法称为分数阶 *Onsager-Machlup* 优化（fOMo）。

为了估计使观测 $\vec{x}$的似然达到最大值的最优参数 f 和 g，需要针对某个固定的观测 $\vec{x}$，求路径作用量 $\mathcal{S}[f,g|\vec{x}] = -\ln P[\vec{x}|f,g]$ 的最小值。为此，需要对 f 和 g 进行某种有限维参数化；引入一组适当的基函数$\chi_p(x)$ $\chi'_{p'}(x)$后，可将 $f(x) = \sum_{p=1}^{P} f_p\chi_p(x)$ $g(x) = \sum_{p'=1}^{P'} g_p\chi_{p'}(x)$改写为某个有限的 P， P'（选取的值远小于 N）。随后，在参数化的有限系数 f_p， $g_{p'}$ 上进行优化。适当的基函数包括多项式或不相交区间的示性函数。

求参数化路径作用量的极小值

$$\mathcal{S}[\{f_p\},\{g_{p'}\}] = \mathcal{S}\left[\sum_{p=1}^{P} f_p\chi(p), \sum_{p'=1}^{P'} g_p\chi_{p'}(x)\right] \tag{9}$$

在 $\{f_p\}$， $\{g_{p'}\}$，仍需讨论任意解的唯一性。正如附录 A 中的推导所示，在漂移参数或扩散参数中任一组参数保持不变时，作用量都存在唯一的全局最小值。

漂移参数 $\{f_p\}$ 或扩散参数 $\{g_p\}$，同时保持另一组参数不变。然而，当考虑参数 $\{f_p\}\{g_{p'}\}$ 均完全自由的路径作用量时，情况则有所不同。一方面，作用量是光滑的、具有全局下界，并且沿 $f_p\, g_p$ 方向保持部分凸性，因为 $\partial^2\mathcal{S}/(\partial_{f_p}\partial_{f_q}) > 0\,\partial^2\mathcal{S}/(\partial_{g_p}\partial_{g_q}) > 0$ （见附录 A），因此可以保证存在最小值，并排除存在多个彼此孤立的局部最小值的可能性。另一方面， $\mathcal{S}$ 取得最小值的点集在假设上可能构成一个子流形，因此 $f\, g$ 的最优选择可能并不唯一。不过，这种退化源于物理上的模糊性：对于特定的观测时间序列 $\vec{x}$，在数学上可以同时改变漂移和扩散，而不改变 $\vec{x}$ 的路径概率。因此，与一次观测 $\vec{x}$ 同样相容的可能 $\{f_p, g_{p'}\}$ 集合可能并不唯一。

在 8 式中求解 f 和 g 的最优值，通常需要采用数值方法。不过，在某些情况下，$\mathcal{S}$ 的最优值可以通过解析方法求得。下一节将讨论这些特殊情况。

4. 精确结果

该估计方法对应于寻找使 $-\ln P[\vec{x}|f,g]$ 最小化的构型 $f(x)$ $g(x)$。若将 $\mathcal{S}[f,g|\vec{x}] = -\ln P[\vec{x}|f,g]$ 视为 $f(x)$ $g(x)$ 中的场论作用量，其由本质上具有随机性的测量 $\vec{x}$ 参数化，因而是随机的（“无序的”），那么 fOMo 就是求 $\mathcal{S}$ 的最小值，同时满足 $\delta\mathcal{S}/\delta f \equiv \delta\mathcal{S}/\delta g \equiv 0$。

若 g 固定但不一定为常数，则可以通过解析方法求得 f 的最小值。我们引入经验传播子

$$[G(g)]_{m,n} = \frac{C^{-1}_{m,n}}{g(x_{m-1})g(x_{n-1})}\,, \tag{10}$$

以及经验速度 $v_n = (x_n - x_{n-1})/\Delta t$。将这些代入方程（8），作用量可写为

$$\mathcal{S} = \frac{(\Delta t)^2}{2}\sum_{m,n=1}^{N}\left(f(x_{m-1}) - v_m\right) G_{m,n}(g)\left(f(x_{n-1}) - v_n\right), \tag{11}$$

省略 f无关项。这个双线性作用量对应于 [48] 中 $f(x)$的高斯场论，其均值为 $\langle f(x_{n-1})\rangle = v(x_n)$，具有非局域相关涨落，遵循 $\langle f(x_{m-1})f(x_{n-1})\rangle - v_m v_n = (G^{-1})_{m,\,n}$。

以多项式形式参数化 f， $f(x) = \sum_{\ell=0}^{L-1} f_\ell x^\ell$对于某个 $L < N$，最优系数 f_ℓ 可通过将多项式拟设代入方程（11）并令 $\partial\mathcal{S}/\partial f_\ell = 0$求得。由此得到的作用量在 f_ℓ 中类似于 L受限谐势中的全耦合谐振子哈密顿量，因此只有一个与估计值相对应的最优构型 f_ℓ；附录 B中的计算表明，该最小值为 $f_\ell = (H^{-1}\vec{j})_\ell$，其中我们引入了

$$H_{\ell,k} = \sum_{m,n} x^\ell_{m-1} G_{m,n} x^k_{n-1} \qquad \text{and} \qquad j_\ell = \sum_{m,n} G_{m,n} v_n x^\ell_{m-1}\,. \tag{12}$$

对于任意非均匀固定扩散，该估计都是精确的 $g(x)$；此外，当 f 为线性且 g 为常数时，该估计会进一步简化（离散化的分数阶奥恩斯坦-乌伦贝克过程，见附录 C）。

类似地，我们考虑 $f(x)$ 为一般但固定的情形。引入经验噪声相关

$$[D(f)]_{m,n} = (f(x_{m-1}) - v_m)\, C^{-1}_{m,n}\, (f(x_{n-1}) - v_n) \tag{13}$$

连同逆场 $\psi_n = (g(x_{n-1}))^{-1}$，$\mathcal{S}$ 可写为

$$\mathcal{S} = \frac{(\Delta t)^2}{2} \sum_{m,n=1}^{N} \psi_m D_{m,n}(f) \psi_n - \sum_{n=1}^{N} \ln |\psi_n| \,. \tag{14}$$

该作用量类似于正半轴上一个完全相互作用的 N 体哈密顿量；位置 ψ_n 处的“粒子”彼此通过二次项耦合，并受到谐约束，其作用范围为 $\psi_n \to \infty$，因为 $D_{nn} > 0$；同时，它们受到对数发散势的排斥而远离原点，从而形成满足自洽关系的稳定极小值

$$(\Delta t)^2 \hat{\psi}_n \sum_m D_{m,n} \hat{\psi}_m = 1 \tag{15}$$

对所有 n。若 $g \equiv g_0$ 假设为常数（加性噪声），则立即得到 $\hat{g}_0^2 = (\Delta t)^2 \sum_{m,n} D_{m,n}$。若进一步 $H = \frac{1}{2}$，$D_{m,n}$ 为对角矩阵，则方程（14）类似于 N 对数谐振势中的非相互作用粒子 [55]。对 g_0 的估计由此恢复了著名的马尔可夫结果 [54]

$$\hat{g}_0^2 = \sum_n \left(f(x_{n-1})\Delta t - (x_n - x_{n-1})\right)^2 \,. \tag{16}$$

5. 噪声过程的叠加

该方法很容易推广到受到不同额外高斯噪声源影响的过程，例如，这些噪声源可以模拟过程与热浴之间额外的耦合。我们考虑对 x_n进行推广，该分数阶过程在方程（1）中引入，具体做法是令

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t + g(x_n)\Delta \xi^H_{n+1} + \eta_{n+1} \,, \tag{17}$$

其中，η_n 是一个额外的独立高斯噪声项，其相关函数为$K_{m,n} = \eta_m \eta_n$。重复构造分数阶昂萨格-马赫卢普作用量时的前述步骤，对新的随机方程关于 x_n 求逆，得到

$$\left[\Delta \vec{\xi}^H(\vec{x})\right]_n = (x_n - x_{n-1} - f(x_{n-1})\Delta t - \eta_n)/g(x_n) \,, \tag{18}$$

将其代入自由作用量 $\mathcal{A}[\Delta \xi^H]$（参见公式（3、8））。这一变换不会改变雅可比行列式，$\sum_n |(g(x_n))|^{-1}$。相反，在给定特定 $\vec{x}$的条件下，$\vec{\eta}$的路径似然（公式（8））会增加一些如下形式的项

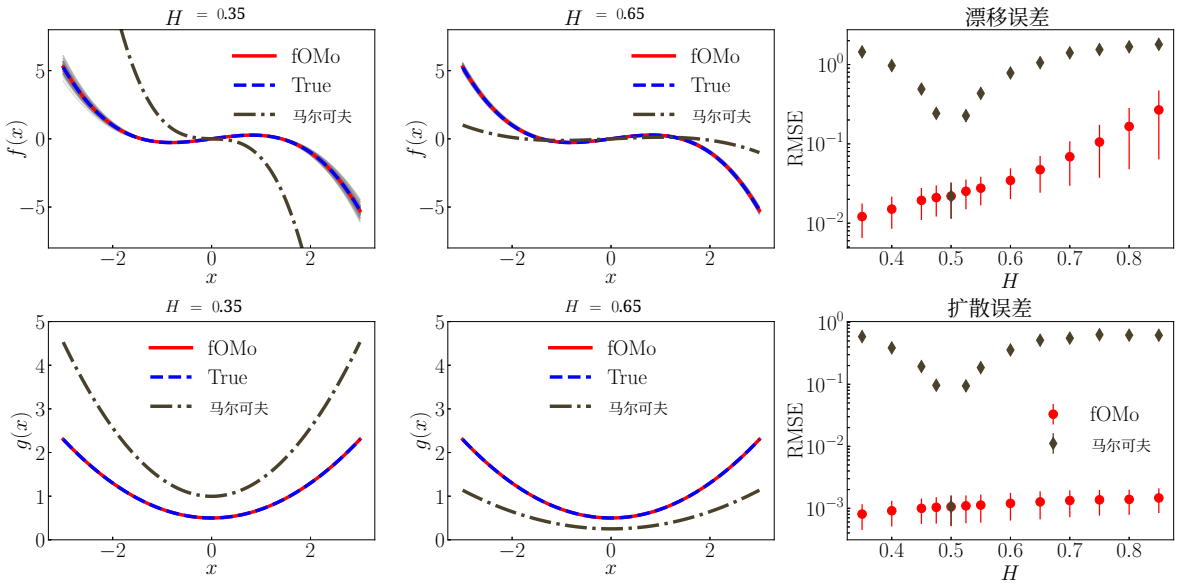

图 2. 与马尔可夫估计相比，fOMo 推断能够正确恢复漂移和扩散。系综研究包含 100 条轨迹，其中 $N = 10^6$，$\Delta t = 10^{-2}$，随机初始条件和平衡时间 $T_{\mathrm{eq}} = 10^4$ [56]。（左上和中上图）通过 fOMo（红色）和马尔可夫最小二乘拟合（棕色）估计反相关（$H = 0.35$）和长程相关（$H = 0.65$）动力学的漂移（左上和中上图）与扩散（左下和中下图）。所有系综成员推断出的漂移和扩散以浅灰色绘出，仅在左上图中可见。（右上图）fOMo（红色）和马尔可夫估计（棕色）的漂移重构误差 $f(x)$。（右下图）扩散的重构误差 $g(x)$。均方根误差使用经验不变密度计算（见正文）。

$\sum_n \eta_n a_n - \frac{1}{2}\sum_{m,n}\eta_m G_{m,n}\eta_n$，其中简记为 $a_n = \sum_m G_{m,n}(f(x_{m-1}) - v_m)\,\Delta t$。接下来需要对额外的噪声分布取平均

$$P_\eta[\vec{\eta}] = \left((2\pi)^N \det K\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-1/2\sum_{m,n}\eta_m (K^{-1})_{mn}\eta_n\right) . \tag{19}$$

对 $\prod_n \mathrm{d}\eta_n$ 进行高斯积分，可得修正作用量为

$$\widetilde{\mathcal{S}} = -\ln \overline{P\,[\vec{x}|f,g]} = -\ln \int D[\vec{\eta}]P[\vec{x}|f,g,\vec{\eta}]P_\eta[\vec{\eta}] \tag{20}$$

$$= \frac{(\Delta t)^2}{2}\sum_{m,n=1}^{N}(f(x_{m-1}) - v_m)\,\widetilde{G}_{m,n}\,(f(x_{m-1}) - v_m) + \sum_{n=0}^{N-1}\ln|g_n|\,, \tag{21}$$

其中省略了与 f、g无关的项；与方程（8）不同，我们将~经验传播子替换为 $G = [G^{-1} + K]^{-1}$。

6. 快速求逆

为了数值计算方程（8）给出的对数似然，必须对相关矩阵 C 求逆。这一操作的计算复杂度为 $\mathcal{O}(N^3)$

内存需求为 $\mathcal{O}(N^2)$ 量级，因此即使对于中等长度的时间序列（$N \sim 10^4$），计算成本也高得难以承受。我们利用相关矩阵的托普利茨结构来解决这一问题；由于该过程是平稳的，C_{mn}仅取决于 $|m-n|$，因此可以高效求逆 [57]。这样一来，计算复杂度降至 $\mathcal{O}(N^2$，内存需求降至 $\mathcal{O}(N)$（详见 附录 D），使 fOMo 即使面对较长的时间序列（$N \sim 10^6$）也能实现计算处理。这种快速求逆方法还可推广到其他平稳驱动过程，例如截断分数阶噪声 [58–60]。

7. 合成数据

我们已成功使用多种非线性模型测试 fOMo，下面展示一个具有代表性的示例。我们考虑由方程（1）定义的模型系统，其中选择 $f(x) = -0.25x^3 + 0.5x$，对应于双阱势，以及非均匀扩散 $g(x) = 0.2x^2 + 0.5$，这意味着远离原点处会出现较大的随机波动。我们假设赫斯特指数已确定，并使用 fOMo（方程（8））推断 f 和 g。为突出噪声相关性的重要性，我们将这一估计与另一种 fOMo 估计进行比较：在后者中，我们错误地固定$H = \frac{1}{2}$，因此 C^{-1} 为对角矩阵，实际上得到的是马尔可夫最大似然估计（见 _[54]）。漂移（$L = 3$）和扩散（$L = 2$）均采用多项式基函数。对于由 100 条轨迹组成的系综（详情见图2），我们同时推断漂移项和扩散项，并计算所推断项的均方根误差（RMSE） f，$\hat{}g$。推断误差根据该过程的经验不变测度加权

$$\mathrm{RMSE}(\hat{f}) = \left[\sum_{n=1}^{N} \left(\hat{f}(x_n) - f(x_n)\right)^2 / N\right]^{\frac{1}{2}}, \tag{22}$$

并且对 g也有类似的结论。

值得注意的是，对于$H > \frac{1}{2}$（$H < \frac{1}{2}$），马尔可夫模型低估（高估）了漂移项和扩散项，而 fOMo 则以极高的精度正确恢复了真实的输入函数（图2）。噪声过程的（反）相关性会使该过程不变密度的宽度变宽（变窄），这也解释了为何当 $H = 0.35$（图2（左上图））时，fOMo 样本与集合平均之间会出现明显偏差。在我们的示例中，对于 $H = 0.35$，马尔可夫建模无法恢复相应势能的双阱形状。当偏离 $H = \frac{1}{2}$ 的程度较小时，马尔可夫建模的推断误差会急剧增大，这凸显了考虑分数阶相关性的必要性。

我们研究有限尺寸误差标度随轨迹长度的变化 N，并发现漂移误差标度的均方根误差$\sim 1/\sqrt{N}$在 $H = \frac{1}{2}$时为，均方根误差 $\sim N^{\alpha}$在 $\alpha \sim H^2$时为 $H \neq \frac{1}{2}$；而扩散误差标度未呈现明确趋势（见附录 E）。

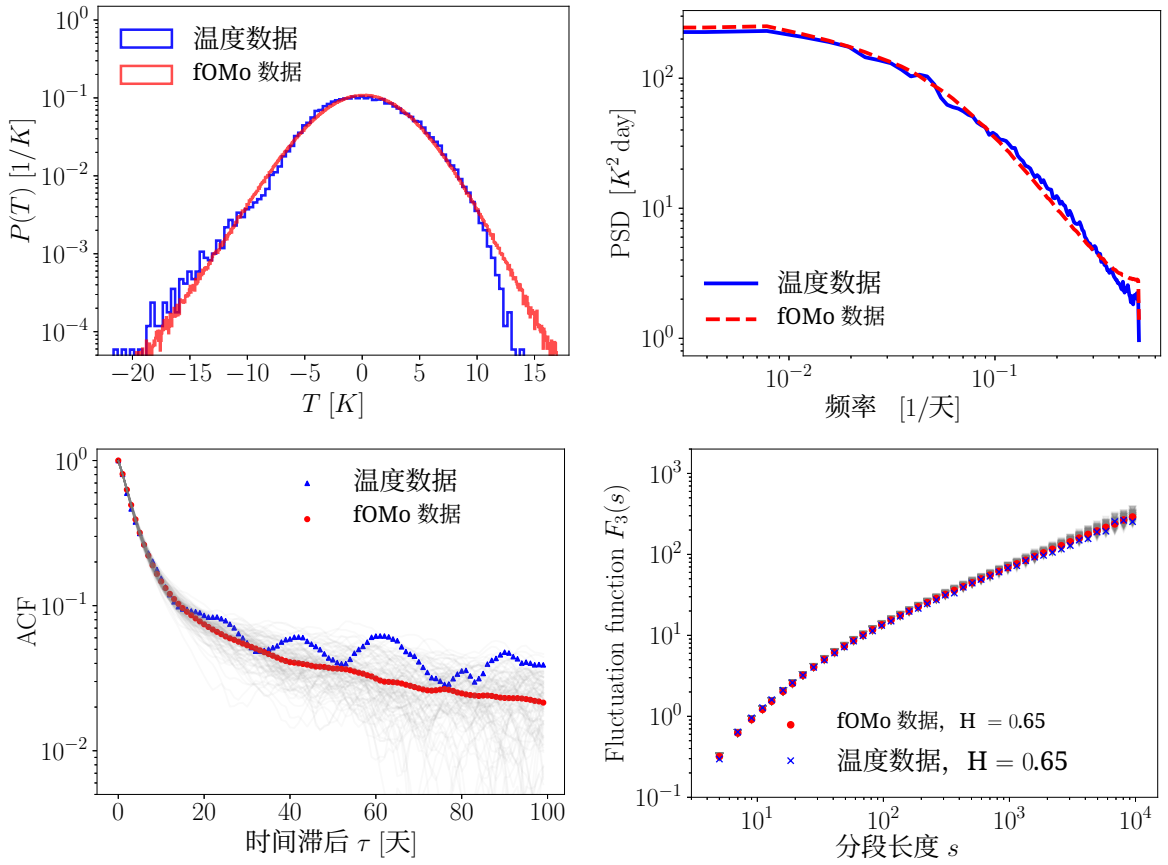

图 3. 利用 fOMo 从波茨坦日平均气温异常数据推断出的随机分数阶非线性模型，与原始数据进行比较。半透明灰线表示 100 条模型数据轨迹的统计量，红线表示模型数据的集合平均（标注为 fOMo 数据），蓝线表示原始数据的统计量。左上：边缘分布直方图。右上：功率谱密度（PSD）。左下：自相关函数（ACF）。右下：DFA3波动函数。

8. 温度数据

我们将 fOMo 应用于德国波茨坦特勒格拉芬山气象站记录的日平均温度数据。该时间序列包含从 ECAD项目 [61, 62]下载的连续 130 年温度测量数据。通过傅里叶级数去除季节周期后，我们得到温度异常 T，这是一条近似平稳的时间序列。温度异常具有长程相关性[3, 4]，单分形 [63] ，并已通过由分数高斯噪声驱动的过阻尼模型 [64–66] 加以描述。我们使用三次多项式去趋势波动分析（DFA3）确定赫斯特指数 [43, 44] ，并使用估计得到的赫斯特指数 $H \approx 0.65$ [64]构建相关矩阵，采样时间为 $\Delta t = 1\mathrm{d}$。在该模型中， f 可解释为大气响应函数，单位为 $[f] = K/\text{天}$，其随机波动 g的测量单位为 $[g] = K/\text{天}^H$ [65]。我们对漂移项采用三次和二次多项式试探形式，并

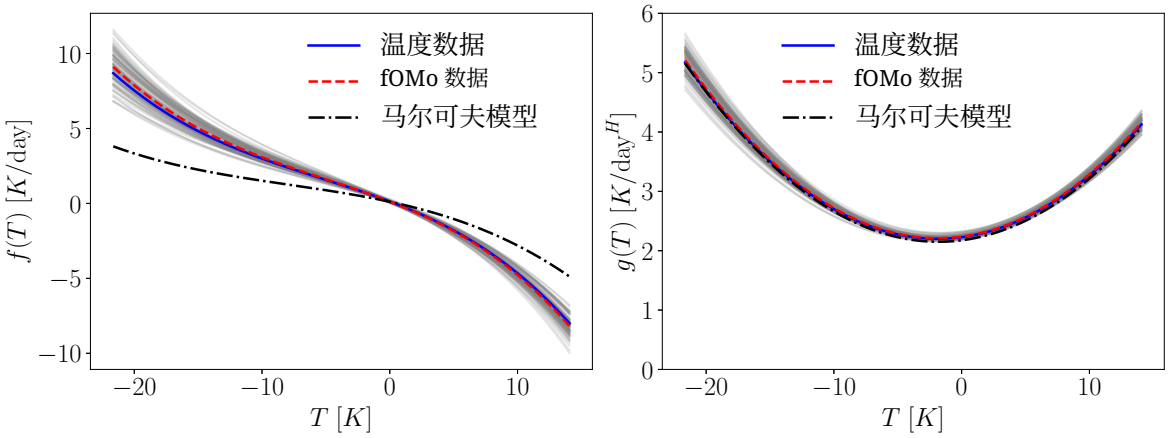

图 4. 波茨坦日平均气温异常的漂移项和扩散项估计。蓝线表示基于原始数据的 fOMo 估计，深橄榄色线表示基于原始数据的马尔可夫估计。半透明线表示基于模型数据得到的 100 个 fOMo 估计；模型数据由公式（1）以及推断出的漂移项和扩散项（蓝线）生成。红线表示灰色半透明线的集合平均。红线与蓝线高度吻合，表明该估计量不存在偏差。

扩散项，并分别采用 fOMo 和马尔可夫最大似然估计（$H = \frac{1}{2}$，见上文）。由于 f 和 g 对于真实世界数据而言并非先验已知，因此我们无法像上述对合成数据那样进行误差分析。不过，我们可以将模型数据与原始数据进行比较，并检验模型的一致性。为此，我们使用方程（1）以及通过 fOMo 获得的 f 和 g 的参数，生成一组模型时间序列。随后，我们比较原始数据的统计量与模型数据系综的统计量。此外，我们从合成模型数据系综中推断漂移和扩散参数，并将其与原始数据得到的漂移和扩散进行比较。对于无偏方法，推断得到的漂移项和扩散项的均值应与原始数据的漂移和扩散估计值一致。推断得到的漂移项和扩散项在系综中的离散程度，进而可估计有限样本导致的推断误差，并提示估计结果的可靠性。如图3所示，温度数据与合成模型数据非常吻合。此外，该模型具有一致性，因为从模型数据推断得到的漂移和扩散的均值与原始数据的漂移和扩散估计值一致（见图4）。与 fOMo 推断出的力项相比，马尔可夫模型显著低估了确定性力项，而 fOMo 会将长程相关性纳入考虑。与双阱势的情形不同，马尔可夫扩散估计与 fOMo 估计吻合良好。这是由于 f近似线性。本文忽略了赫斯特指数的估计误差。不过，我们提出以下流程，利用近期发表的一种用于吸引子维数估计中识别标度区间的操作性方法 [67]，该方法也可用于获得误差棒

通过去趋势波动分析（DFA）估计的赫斯特指数 [68]。首先，确定赫斯特指数的下误差棒和上误差棒对应的取值，然后使用这些取值进行 fOMo 分析。由此得到的漂移项和扩散项参数可作为误差估计。

9. 结论

通过对 Onsager-Machlup 形式体系进行分数阶推广，我们创建了一种估计方法，能够从单条轨迹中推断由乘性分数噪声驱动的完全非线性模型的函数参数。将该算法应用于合成数据和真实数据后，即使在赫斯特值深入非马尔可夫区间的情况下，我们也能获得出色的估计；在此区间，忽略涨落的（反）相关性会导致严重的系统误差。该方法为建模真实世界中不可忽略其分形性质的复杂系统提供了必要工具，并揭示了时间序列分析与具有分数阶相关性的多体系统统计物理之间耐人寻味的联系。

致谢

JAK 感谢 SISSA 的热情接待，感谢 StefanoBo 提供有益的讨论，并感谢 SteffenPeters 提供 IT 支持。

BW 感谢 MPIPKS 的热情接待。

BW 感谢帝国理工学院 Borland 研究奖学金以及 MIUR PRIN 项目“非平衡系统和输运现象的粗粒化描述（CO-NEST）”n. 201798CZL 的资助。BW 还感谢 SISSA 的支持（本工作的部分内容在此完成）以及 INFN。

参考文献

[1] Metzler R, Jeon J H, Cherstvy A G 和 Barkai E 2014 《物理化学化学物理》 **16**(44) 24128–24164 URL http://dx.doi.org/10.1039/C4CP03465A[2] Hurst H E 1951《美国土木工程师学会会刊》**116** 770[3] Bunde A, Havlin S, Koscielny-Bunde E 和 Schellnhuber H J 2001 《物理学 *A*：统计力学及其应用》**302** 255–267 ISSN 0378-4371 URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437101004691[4] Eichner J F, Koscielny-Bunde E, Bunde A, Havlin S 和 Schellnhuber H J 2003 *Phys. Rev. E* **68**(4) 046133 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.68.046133[5] Bunde A, Eichner J F, Kantelhardt JW 和 Havlin S 2005 《物理评论快报》**94**(4) 048701 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.048701

[6] Kantelhardt J W, Koscielny-Bunde E, Rybski D, Braun P, Bunde A 和 Havlin S 2006 《地球物理研究杂志：大气》 111 URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2005JD005881[7] Voss R F 1992 《物理评论快报》 68 3805[8] Chatzidimitriou-Dreismann C 和 Larhammar D 1993 《自然》 361 212–213[9] H¨ofling F 和 Franosch T 2013 《物理学进展报告》 76 046602 ISSN 0034-4885 URL https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/76/4/046602[10] Wan K Y 和 Goldstein R E 2014 《物理评论快报》 113(23) 238103 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.238103[11] Palva J M, Zhigalov A, Hirvonen J, Korhonen O, Linkenkaer-Hansen 和 Palva S 2013 《美国国家科学院院刊》 110 3585–3590[12] Teka W, Marinov T M 和 Santamaria F 2014 《公共科学图书馆·计算生物学》 10 e1003526 ISSN 1553-7358 URL https://dx.plos.org/10.1371/journal.pcbi.1003526[13] Mu˜noz Gil G, Volpe G, Garcia-March M A, Aghion E, Argun A, Hong C B, Bland T, Bo S, Conejero J A, Firbas N, Garibo i Orts O, Gentili A, Huang Z, Jeon J H, Kabbech H, Kim Y, Kowalek P, Krapf D, Loch-Olszewska H, Lomholt M A, Masson J B, Meyer P G, Park S, Requena B, Smal I, Song T, Szwabi´nski J, Thapa S, Verdier H, Volpe G, Widera A, Lewenstein M, Metzler R 和 Manzo C 2021 《自然·通讯》 12 6253 ISSN 2041-1723 URL https://doi.org/10.1038/s41467-021-26320-w[14] Bzdok D, Altman N 和 Krzywinski M 2018 《自然·方法》 15 233–234 ISSN 1548- 7105 URL https://doi.org/10.1038/nmeth.4642[15] Carleo G, Cirac I, Cranmer K, Daudet L, Schuld M, Tishby N, Vogt-Maranto L 和 Zdeborov´a L 2019 《现代物理评论》 91(4) 045002 URL https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.045002[16] Cichos F, Gustavsson K, Mehlig B 和 Volpe G 2020 《自然·机器智能》 2 94–103 ISSN 2522-5839 URL https://doi.org/10.1038/s42256-020-0146-9[17] Rao B P 2011 分数阶扩散过程的统计推断（奇切斯特，英国：约翰·威立父子出版公司）URL https://www.wiley.com/en-gb/Statistical+Inference+for+Fractional+Diffusion+Processes-p-9780470975763[18] Burnecki K 和 Weron A 2014 《统计力学杂志：理论与实验》 2014 P10036[19] Graves T, Gramacy R B, Franzke C L 和 Watkins N W 2015 《非线性过程地球物理学》 22 679–700[20] Kubilius K, Mishura Y 和 Ralchenko K 2017 分数阶扩散模型中的参数估计（尚，瑞士：施普林格）URL https://doi.org/10.1007/978-3-319-71030-3[21] Thapa S, Lomholt M A, Krog J, Cherstvy A G 和 Metzler R 2018 《物理化学化学物理》 20(46) 29018–29037 URL http://dx.doi.org/10.1039/C8CP04043E[22]Siegert S, Friedrich R 和 Peinke J 1998 《物理快报 A》 243 275 – 280 ISSN 0375-9601 URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960198002837

[23]Ragwitz M 和 Kantz H 2001 Phys. Rev. Lett. 87(25) 254501 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.254501[24]B¨ottcher F、Peinke J、Kleinhans D、Friedrich R、Lind P G 和 Haase M 2006 Phys. Rev. Lett. 97(9) 090603 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.090603[25] Beheiry M E、Dahan M 和 Masson J B 2015 《自然·方法》12 594–595 ISSN 1548-7105 URL https://doi.org/10.1038/nmeth.3441[26]Gouasmi A、Parish E J 和 Duraisamy K 2017 英国皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学 473 20170385（预印本 https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.2017.0385）URLhttps://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.2017.0385[27] Lehle B 和 Peinke J 2018 Phys. Rev. E 97(1) 012113 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.012113[28]P´erez Garc´ıa L、Donlucas P´erez J、Volpe G、V Arzola A 和 Volpe G 2018 《自然·通讯》9 5166 ISSN 2041-1723 URL https://doi.org/10.1038/s41467-018-07437-x[29] Tabar R 2019 复杂非线性动力系统的分析与基于数据的重建 第730卷（尚，瑞士：施普林格）URL https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-18472-8 [30] Br¨uckner D B、Ronceray P 和 Broedersz C P 2020 Phys. Rev. Lett. 125(5) 058103 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.058103[31] Frishman A 和 Ronceray P 2020 Phys. Rev. X 10(2) 021009 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.10.021009[32] Ferretti F、Chard`es V、Mora T、Walczak A M 和 Giardina I 2020 Phys. Rev. X 10(3) 031018 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.10.031018[33]Willers C 和 Kamps O 2021 欧洲物理学杂志B辑 94 149 ISSN 1434-6036 URL https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-021-00149-0[34] Weiss M 2013 Phys. Rev. E 88 010101 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.010101 [35] Saelens W、Cannoodt R、Todorov H 和 Saeys Y 2019 自然·生物技术 37 547–554 ISSN 1546-1696 URL https://www.nature.com/articles/s41587-019-0071-9 [36] Onsager L 和 Machlup S 1953 Phys. Rev. 91(6) 1505–1512 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.91.1505[37] D¨urr D 和 Bach A 1978 数学物理通讯 60 153–170 ISSN 1432-0916 URL https://doi.org/10.1007/BF01609446[38] T¨auber U C 2014 临界动力学（剑桥，英国：剑桥大学出版社）[39] Cugliandolo L F 和 Lecomte V 2017 物理学杂志A：数学与理论 50 345001 URLhttps://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/aa7dd6

[40]Pipiras V 和 Taqqu M S 2017 长程依赖性与自相似性 剑桥统计与概率数学丛书（剑桥大学出版社）[41] Mandelbrot B B 和 Van Ness J W 1968 SIAM Rev. 10 422–437[42] Mandelbrot B B 和 Wallis J R 1969 Water Resour. Res 5 321–340 [43] Peng C K、Buldyrev S V、Havlin S、Simons M、Stanley H E 和 Goldberger A L 1994 Phys. Rev. E 49(2) 1685–1689 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.49.1685[44] H¨oll M、Kiyono K 和 Kantz H 2019 Phys. Rev. E 99(3) 033305 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.99.033305[45] Abry P 和 Veitch D 1998 IEEE Trans. Inf. Theory 44 2–15[46] Bo S、Schmidt F、Eichhorn R 和 Volpe G 2019 Phys. Rev. E 100(1) 010102 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.100.010102[47] Devore J L、Berk K N 和 Carlton M A 2021 现代数理统计及其应用 第3版 Springer统计学教材（尚，瑞士：施普林格）ISBN 9781461403906,1461403901[48]Zinn-Justin J 2002 量子场论与临界现象（牛津大学出版社）ISBN 978-0-19-850923-3 URL https://academic.oup.com/book/11638[49] Horsthemke W 和 Bach A 1975 Z Physik B 22 189–192[50] Adib A B 2008 J. Phys. Chem. B 112 5910–5916[51] Kappler J 和 Adhikari R 2020 Phys. Rev. Res. 2(2) 023407 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.023407[52] Gladrow J、Keyser U F、Adhikari R 和 Kappler J 2021 Phys. Rev. X 11(3) 031022 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.11.031022[53] Kieninger S 和 Keller B G 2021 J. Chem. Phys. 154 094102[53] Kleinhans D 2012 Phys. Rev. E 85(2) 026705 URL [54] https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.026705 Ryabov A、Dierl M、Chvosta P、Einax M 和 Maass P 2013 J. Phys. A: Math. Theor. 46 075002 ISSN 1751-8121[55] Davies R B 和 Harte D S 1987 Biometrika 74 95–101 ISSN 0006-3444 URL[56] https://doi.org/10.1093/biomet/74.1.95Lv X G 和 Huang T Z 2007 Appl. Math. Lett. 20 1189–1193 ISSN 0893-9659 URL[57] https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0893965907000535 Meerschaert M M 和 Sabzikar F 2013 Stat. Probab. Lett 83 2269–2275 ISSN 0167- 7152[58] Liemert A、Sandev T 和 Kantz H 2017 Phys. A: Stat. Mech. Appl. 466 356–369

[60] Molina-Garcia D, Sandev T, Safdari H, Pagnini G, Chechkin A and Metzler R 2018 New J. Phys. 20 103027 URL https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/aae4b2/meta[61] Klein Tank A M G, Wijngaard J B, K¨onnen G P, B¨ohm R, Demar´ee G, Gocheva A, Mileta M, Pashiardis S, Hejkrlik L, Kern-Hansen C, Heino R, Bessemoulin P, M¨uller-Westermeier G, Tzanakou M, Szalai S, P´alsd´ottir T, Fitzgerald D, Rubin S, Capaldo M, Maugeri M, Leitass A, Bukantis A, Aberfeld R, van Engelen A F V, Forland E, Mietus M, Coelho F, Mares C, Razuvaev V, Nieplova E, Cegnar T, Antonio L´opez J, Dahlstr¨om B, Moberg A, Kirchhofer W, Ceylan A, Pachaliuk O, Alexander L V and Petrovic P 2002 Int. J. Climatol. 22 1441–1453 URLhttps://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/joc.773 [62] Besselaar E J M V D, Tank A M G K, Schrier G V D, Abass M S, Baddour O, Engelen A F V, Freire A, Hechler P, Laksono B I, Iqbal, Jilderda R, Foamouhoue A K, Kattenberg A, Leander R, G¨uingla R M, Mhanda A S, Nieto J J, Sunaryo, Suwondo A, Swarinoto Y S and Verver G 2015 Bull Am Meteorol Soc 96 16–21 ISSN 00030007, 15200477 URL http://www.jstor.org/stable/26219458[63] Bunde A and Ludescher J 2017 气候中的长期记忆：检测、极端事件与趋势显著性（剑桥大学出版社）第318–339页[64]Massah M and Kantz H 2016 Geophys. Res. Lett. 43 9243–9249 URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2016GL069555[65] Kir´aly A and J´anosi I M 2002 Phys. Rev. E 65(5) 051102 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.65.051102[66]Kassel J A and Kantz H 2022 Phys. Rev. Research 4(1) 013206 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.4.013206[67] Deshmukh V, Bradley E, Garland J and Meiss J D 2021 Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science 31 123102 URL https://doi.org/10.1063/5.0069365[68] Phillips E T, H¨oll M, Kantz H and Zhou Y 2023 Phys. Rev. E 108(3) 034301 URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.108.034301[69] Polotzek K 2021 非高斯长程相关数据的建模与分析——极值理论和有效样本量，以及在降水数据中的应用，博士论文，德累斯顿工业大学，德累斯顿[70] Massah M, Aghion E, Kassel J A and Kantz H 2023 准备中

附录 A. 漂移参数或扩散参数的凸性

本节将进一步详细说明方程（8）的最优解的唯一性，并表明，对 $\mathcal{S}$ 在 f 或 g 中的优化具有唯一性。由于 $\mathcal{S}$关于 g不是凸函数，我们采用一种技巧，证明 $\mathcal{S}$ 实际上关于 f 和

$$\psi(x) = \frac{1}{g(x)}. \tag{A.1}$$

As

$$\frac{\delta S}{\delta g} = \underbrace{\frac{\delta \psi}{\delta g}}_{\neq 0} \frac{\delta S}{\delta \psi} \tag{A.2}$$

由此可知，只需研究 ψ 中的最优解；并且，由于我们在全文中均假设 $g(x) > 0$，因此 ψ 中的这一唯一解也定义了 g 的唯一解。

现在考虑的作用量为

$$\mathcal{S}[f,\psi] = \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{m,n} \psi(x_{m-1})(v_m - f(x_{m-1}))C^{-1}_{m,n}(v_n - f(x_{n-1}))\psi(x_{n-1}) - \sum_n \ln|\psi(x_{n-1})|. \tag{A.3}$$

我们首先对 $f(x)$ 和 $\psi(x)$ 采用一般参数化形式，选取一组一般的基函数 $\chi_p(x)$，用于 $p = 1$、..... P、 $q = 1$、..... Q，从而写成

$$f(x) = \sum_{p=1}^{P} f_p \chi_p(x) \qquad \psi(x) = \sum_{q=1}^{Q} \psi_q \chi_q(x). \tag{A.4}$$

这些基函数的合适选择包括多项式（$\chi_p(x) = x^p$）或不相交区间的示性函数。唯一的要求是，方程（A.4）中的分解在系数 $\{f_p\}$，$\{\psi_q\}$ 中是唯一的。随后，对数似然的优化（方程（8））就在这些系数上进行，

$$\mathcal{S}[\{f_p\},\{\psi_q\}] = \tag{A.5}$$

$$\frac{\Delta t^2}{2} \sum_{m,n=1}^{N} \left(\sum_q \psi_q \chi_q(x_{m-1})\right)\left(v_m - \sum_p f_p \chi_p(x_{m-1})\right) C^{-1}_{m,n} \left(v_n - \sum_{p'} f_{p'} \chi_{p'}(x_{n-1})\right)\left(\sum_{q'} \psi_{q'} \chi_{q'}(x_{n-1})\right)$$

$$- \sum_{n=0}^{N-1} \ln \left|\sum_q \psi_q \chi_q(x_n)\right|, \tag{A.6}$$

因此，这是一个有限维优化问题。

接下来需要证明 $\mathcal{S}$ 关于 $\{f_p\}$或 $\{\psi_q\}$是凸的。我们将 $\mathcal{S}$ 视为双线性部分和对数部分之和，并定义 $\mathcal{S}_{\log} = -\sum_{n=0}^{N-1} \ln \left|\sum_q \psi_q \chi_q(x_n)\right|$。

由此可得， $\mathcal{S}_{\log}$ 的海森矩阵为

$$[\partial^2 \mathcal{S}_{\log}]_{p,q} = \frac{\partial^2}{\partial \psi_p \psi_q}\left(-\sum_{n=0}^{N-1} \ln \left|\sum_{p'} \psi_{p'} \chi_{p'}(x_n)\right|\right) = \sum_n \frac{\chi_p(x_n)\chi_q(x_n)}{\left(\sum_{p'} \psi_{p'} \chi_{p'}(x_n)\right)^2}. \tag{A.7}$$

因此，对于任意向量 w_1，..... w_q，可得

$$\sum_{p,q} w_p[\partial^2 \mathcal{S}_{\log}]_{p,q} w_q = \sum_n \frac{\left(\sum_p \chi_p(x_n) w_p\right)^2}{\left(\sum_{p'} \psi_{p'} \chi_{p'}(x_n)\right)^2} > 0, \tag{A.8}$$

因此，海森矩阵为正定矩阵，且 $\mathcal{S}_{\log}$ 是凸的。

接下来，我们考察 $\mathcal{S}$ 的双线性项，并研究 $\mathcal{S}_{\text{bil}}$ 在漂移参数或扩散参数下海森矩阵的 $P \times P$（或 $Q \times Q$）维对角子块。我们得到

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial f_p \partial f_q} = \Delta t^2 \sum_{m,n} \chi_p(x_{m-1}) \left(\sum_{p'} \psi_{p'} \chi_{p'}(x_{m-1})\right) C^{-1}_{m,n} \left(\sum_{q'} \psi_{q'} \chi'_q(x_{n-1})\right) \chi_q(x_{n-1}), \tag{A.9}$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \psi_p \partial \psi_q} = \Delta t^2 \sum_{m,n} \chi_p(x_{m-1}) \left[\left(v_m - \sum_p f_p \chi_p(x_{m-1})\right) C^{-1}_{m,n} \left(v_n - \sum_q f_q \chi_q(x_{n-1})\right)\right] \chi_q(x_{n-1}). \tag{A.10}$$

现在，我们考虑任意向量 w_k，其中漂移对应 $k = 1, ..., P$，扩散对应 $k = 1, ..., Q$，并计算

$$\sum_{p,q=1}^{P} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial f_p \partial f_q} w_q \quad \text{and} \quad \sum_{p,q=1}^{Q} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \psi_p \partial \psi_q} w_q \,. \tag{A.11}$$

第一项对应于

$$\sum_{p,q=1}^{P} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial f_p \partial f_q} w_q = \tag{A.12}$$

$$\Delta t^2 \sum_{m,n} \left(\sum_p w_p \chi_p(x_{m-1})\right) \left(\sum_{p'} \psi_{p'} \chi_{p'}(x_{m-1})\right) C^{-1}_{m,n} \left(\sum_{q'} \psi_{q'} \chi'_q(x_{n-1})\right) \left(\sum_q w_q \chi_q(x_{n-1})\right). \tag{A.13}$$

引入

$$W^-_n = \sum_p w_p \chi_p(x_{n-1}) \tag{A.14}$$

$$\Psi_n \ = \sum_{q'} \psi_{q'} \chi'_q(x_{n-1}) = \psi(x_{n-1}), \tag{A.15}$$

这表明

$$\sum_{p,q=1}^{P} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial f_p \partial f_q} w_q = \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{m,n} W^-_m \Psi_m C^{-1}_{m,n} \Psi_n W^-_n. \tag{A.16}$$

由于 C^{-1} 是高斯相关矩阵的逆矩阵，因此它是正定矩阵，所以

$$\sum_{p,q=1}^{P} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial f_p \partial f_q} w_q > 0 \tag{A.17}$$

对于所有 w 的取值。因此， $\mathcal{S}$ 在 f_p 中是凸的。

为了研究 ψ 中的凸性，我们计算第二项，其为

$$\sum_{q,q'=1}^{Q} w_q \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \psi_q \partial \psi_{q'}} w_{q'} = \tag{A.18}$$

$$\Delta t^2 \sum_{m,n} \left(\sum_q w_q \chi_q(x_{m-1}) \right) \left(v_m - \sum_p f_p \chi_p(x_{m-1}) \right) C^{-1}_{m,n} \left(v_n - \sum_{p'} f_{p'} \chi_{p'}(x_{n-1}) \right) \left(\sum_{q'} w_{q'} \chi_{q'}(x_{n-1}) \right). \tag{A.19}$$

进一步引入

$$W^+_n = \sum_q w_q \chi_q(x_{n-1}) \tag{A.20}$$

$$V_n \quad = v_n - \sum_p f_p \chi_p(x_{n-1}), \tag{A.21}$$

这可写为

$$\sum_{p,q=1}^{Q} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \psi_p \partial \psi_q} w_q = \Delta t^2 \sum_{m,n} W^+_m V_m C^{-1}_{m,n} W^+_n V_n. \tag{A.22}$$

再次， C^{-1} 的正定性意味着

$$\sum_{p,q=1}^{Q} w_p \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \psi_p \partial \psi_q} w_q > 0 \tag{A.23}$$

对于所有 w 的取值，因此 $\mathcal{S}$ 关于 Ψ是凸的。

由于对数似然在 $\{f_p\}$， $\{\psi_p\}$ 中的两个海森矩阵均为正定，因此对数似然在这两个子空间中均为凸函数，并且在每个子空间中都存在一个全局最小值。

附录 B. 固定扩散下的最优漂移估计

我们进一步详述了在极小解 $\hat{}\delta S/\delta f \equiv 0$ 在 $g(x)$ 固定时给出的解析解，参见方程（11）。

由方程（3，8）出发，完整作用量为

$$\mathcal{S}[f, g|\vec{x}] = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \frac{(f(x_{m-1})\Delta t - (x_m - x_{m-1}))}{g(x_m)} C^{-1}_{m,n} \frac{(f(x_{n-1})\Delta t - (x_n - x_{n-1}))}{g(x_n)}. \tag{B.1}$$

由于我们不对 $g(x)$ 进行变分，因此将非均匀扩散率吸收到分数阶相关矩阵的逆中（参见方程（2））， 并引入有效传播子

$$G_{m,n} = \frac{C^{-1}_{m,n}}{g(x_{m-1}) g(x_{n-1})}. \tag{B.2}$$

进一步引入 $v_n = (x_n - x_{n-1})/\Delta t$，即可得到方程（11）中的表达式。

严格来说，这个作用量由“经验力” $f(x_{n-1}) = v_n$ 最小化。然而，为了有效地对 x_n的涨落取平均，一个低维

表示 f 更为合适。我们选择多项式表示，即 $f(x)=\sum_{\ell=0}^{L-1} f_\ell x^\ell$，其中 $L \ll N$。将这一试探形式代入方程（B.1），可得

$$\mathcal{S}[f,g|\vec{x}] = \frac{(\Delta t)^2}{2}\sum_{\ell,k}\sum_{m,n}\left(f_\ell x_{m-1}^\ell - v_m\right) G_{m,n}\left(f_k x_{n-1}^k - v_n\right) \tag{B.3}$$

$$= \frac{(\Delta t)^2}{2}\left\{\sum_{\ell,k} f_\ell f_k\left(\sum_{m,n} x_{m-1}^\ell G_{m,n} x_{n-1}^l\right) - 2\sum_\ell f_\ell\left(\sum_{m,n} x_{m-1}^\ell G(g)_{m,n}(x_n - x_{n-1})\right)\right\} + \ldots, \tag{B.4}$$

其中我们忽略了与 f 无关的项。确定

$$H_{\ell,k} = \sum_{m,n} x_{m-1}^\ell G(g)_{m,n} x_{n-1}^k \tag{B.5}$$

$$J_\ell \quad = \sum_{m,n} x_{m-1}^\ell G(g)_{m,n}(x_n - x_{n-1}), \tag{B.6}$$

最优点 $\nabla_{\hat{f}}\mathcal{S} = 0$ 意味着 $(\Delta t)^2\left\{H\hat{f} - J\right\} = 0$，因此 $\hat{f} = H^{-1}J$，如正文所述。

附录 C. 分数阶奥恩斯坦-乌伦贝克过程的 fOMo 估计

在线性漂移和常数扩散这一特殊情形下，方程（1）还原为分数阶奥恩斯坦-乌伦贝克过程的欧拉-丸山离散化，即

$$x_{n+1} - x_n = -f x_n \Delta t + g\Delta\xi_{n+1}^H. \tag{C.1}$$

相应地，将 $f(x)=fx, g(x)=g$，分数阶奥恩萨格-马赫卢普作用量（方程（8））可化简为二元函数

$$\mathcal{S}[f,g] = \frac{(\Delta t)^2}{2g^2}\sum_{m,n}(f - v_m)\, C_{m,n}^{-1}\,(f - v_n) + \ln|g|. \tag{C.2}$$

f 中的最小值与 g无关，且由下式给出

$$\hat{f} = \frac{\sum_{m,n} C_{m,n}^{-1} v_n}{\sum_{m,n} C_{m,n}^{-1}}, \tag{C.3}$$

这将 [28] 从白噪声推广到由具有任意相关性的高斯噪声驱动的过程。在 g 中的最小值由下式给出

$$\hat{g}^2 = (\Delta t)^2\sum_{m,n}\left(\hat{f} - v_m\right) C_{m,n}^{-1}\left(\hat{f} - v_n\right) \ . \tag{C.4}$$

附录 D. 关于数值计算的说明

本节将详细阐述如何计算公式（8）给出的随机作用量。对于平稳过程，自协方差函数仅取决于两个时刻之间的差值。因此，协方差矩阵 C_{ij} 是一个

$(N-1)\times(N-1)$ 对称托普利兹矩阵，其中 N 是时间序列的长度，即$C_{ij} = (\Delta t)^{2H} \times \left(|i-j+1|^{2H} + |i-j-1|^{2H} - 2\,|i-j|^{2H}\right) =: C(|i-j|\Delta t)$，其中$i$，$j \in \{1, \ldots, N-1\}$。利用这一性质，我们计算逆相关矩阵（传播子）。托普利兹矩阵的逆可表示为 [57]

$$C^{-1} = T_1 U_1 + T_2 U_2\,, \tag{D.1}$$

其中， T_1 和 T_2 是托普利兹矩阵， U_1和 U_2 是具有托普利茨结构的上三角矩阵：

$$T_1 = \begin{pmatrix} y_1 & y_n & \ldots & y_2 \\ y_2 & y_1 & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & y_n \\ y_n & \ldots & y_2 & y_1 \end{pmatrix}, \quad U_1 = \begin{pmatrix} 1 & -x_n & \ldots & -x_2 \\ & 1 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -x_n \\ & & & 1 \end{pmatrix} \tag{D.2}$$

$$T_2 = \begin{pmatrix} x_1 & x_n & \ldots & x_2 \\ x_2 & x_1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & x_n \\ x_n & \ldots & x_2 & x_1 \end{pmatrix}, \quad U_2 = \begin{pmatrix} 0 & y_n & \ldots & y_2 \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & y_n \\ & & & 0 \end{pmatrix}. \tag{D.3}$$

向量 x 和 y 是线性方程组的解

$$Cx = h\,, \tag{D.4}$$

$$Cy = e_1\,, \tag{D.5}$$

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad h = \begin{pmatrix} 0 \\ C((N-1)\Delta t) - C(\Delta t) \\ \vdots \\ C(2\Delta t) - C((N-2)\Delta t) \\ C(\Delta t) - C((N-1)\Delta t) \end{pmatrix}. \tag{D.6}$$

矩阵 T和 U 完全由 x 和 y确定。因此，计算过程中只需保存这两个向量。我们通过 x 和 y 分别求解线性方程组方程（ D.4 ）和方程（ D.5 ），使用 Levinson-Durbin 算法，其复杂度为 $\mathcal{O}(N^2$。因此，该操作可写为

$$\mathcal{S}[\vec{x}|f,g] = \frac{(\Delta t)^2}{2} \sum_{m,n=1}^{N} \frac{(f_{m-1} - v_m)}{g_{m-1}} \left(T_1 U_1 + T_2 U_2\right)_{mn} \frac{(f_{n-1} - v_n)}{g_{n-1}} + \sum_{n=0}^{N-1} \ln|g_n| \tag{D.7}$$

这些操作都是重复的托普利兹矩阵乘法。在优化 f和 g的过程中， C^{-1} 保持不变。因此，整个优化过程中我们只需计算托普利兹矩阵乘法。

附录 E. 合成数据的有限尺寸误差标度

我们研究了由模型生成的合成数据的有限尺寸误差标度如何随轨迹长度 N 变化（见正文）

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t(-0.25\,x_n^3 + 0.5\,x_n) + (0.2\,x_n^2 + 0.5)\Delta\xi_{n+1}^H\,, \tag{E.1}$$

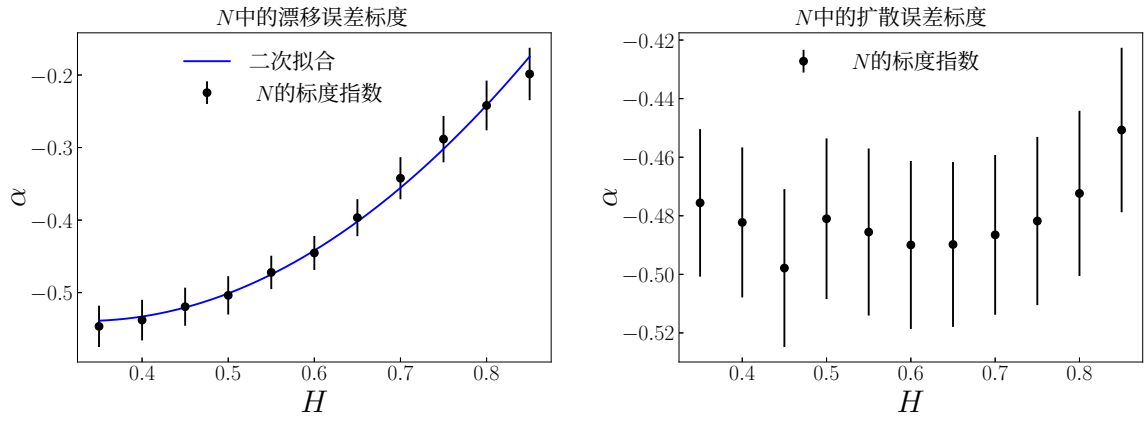

图 E1. 具有双阱势和二次扩散项的玩具模型。误差随轨迹长度 N 的变化，作为赫斯特指数 H的函数。

其中 $\Delta t = 0.01$。对于固定的赫斯特指数和包含 100 条轨迹的系综，我们对 N中均方根误差的渐近标度拟合幂律，直至 $N = 2\times10^6$。根据中心极限定理，我们发现，对于漂移和扩散，当 $\sim 1/\sqrt{N}$ 时，若 $H = \frac{1}{2}$，均方根误差为 $H \neq \frac{1}{2}$。然而，我们观察到，当 $\sim N^{\alpha}$ 时，漂移的推断误差按 $\alpha \sim H^2$标度，而扩散误差标度没有明显趋势。对于其他玩具模型（例如单稳态势），我们也观察到定性上类似的误差标度。对于相关高斯随机变量的样本均值，也观察到偏离中心极限定理的相关数据标度行为。其标准差按 $\sigma_{\mu_N} \sim N^{H-1}$ [69, 70]标度。因此，样本均值的收敛速度取决于相关性的强度；当 $H < \frac{1}{2}$ 时也可能更快，我们同样观察到了这一点。

附录 F. 波茨坦温度数据

在正文中，我们通过重构一个随机模型来展示 fOMo，该模型基于德国波茨坦的波茨坦特勒格拉芬山气象站记录的日平均气温异常。此处，我们详细说明这一过程。我们通过减去季节周期来获得温度异常。正文中指出，由此得到的时间序列近似平稳。事实上，时间序列中还存在慢模态变化以及变暖趋势。不过，这些因素仅轻微破坏了时间序列的平稳性。因此，除季节性外，我们不再从数据中减去其他趋势。此外，由于测量误差相对于动力学而言足够小，我们在分析中忽略了这些误差。