arXiv:2603.15631v1 [physics.soc-ph] 25 Feb 2026

从描述到设计：自动工程化具有理想涌现属性的复杂系统

Thomas F. Varley[1] 和 Josh Bongard[1,2]

[1]佛蒙特复杂系统研究所，佛蒙特大学，美国佛蒙特州伯灵顿[2]佛蒙特大学计算机科学系，美国佛蒙特州伯灵顿

2026年3月18日

摘要

复杂系统研究产生了大量不同的描述性统计指标，科学家可以利用这些指标描述复杂系统所具有的各种涌现模式。然而，从第一性原理出发，设计出呈现这些模式的系统要困难得多，因为复杂性的一个典型特征是，宏观尺度涌现属性往往难以从微观尺度特征预测。在此，我们提出一种通用的基于优化的流程，通过将描述性统计重新用作损失函数，并让梯度下降优化器负责设计相关的微观尺度特征及其相互作用，从而自动化这一艰巨的涌现特征工程问题。我们以耦合振荡器的 Kuramoto系统为测试平台，展示了该方法能够可靠地生成具有非平凡全局属性的系统，包括高阶协同信息、多吸引子亚稳态，以及模块和整合信息等中尺度结构。我们进一步表明，该流程还能够考虑并适应对系统属性的约束，例如连接成本或拓扑限制。这项工作推动复杂系统科学向前迈进，使其从一个主要以描述和 *post-hoc* 讲述为基础的领域，朝着能够工程化设计具有理想涌现中尺度和宏观尺度属性的现实世界系统的方向发展。

1 引言

现代科学的基本目标之一，是严谨地描述自然世界中观察到的模式。现代科学最早期的著作便展现出人们对模式识别的浓厚兴趣，从中世纪阿拉伯学者伊本·海赛姆关于光学的研究，到开普勒和哥白尼带来的革命性天文学洞见。几个世纪以来，最初以定性方式描述的模式逐渐被形式化为数学模型，试图凝练自然世界的基本因果结构。随着计算机的出现，以及网络科学、混沌理论、计算机科学和统计物理学等新的严谨形式化领域的兴起，能够在数据中形式化定义并识别的模式种类大幅扩展，规模之惊人前所未有。从事复杂网络和复杂系统研究的科学家，已经开发出数量庞大的描述性统计指标，可用于刻画复杂系统中的结构与功能模式。Networkx [1], igraph [2], graph-tool 等程序库

[3], 以及脑连接工具箱 [4]提供了数百种不同的度量，可用于结构连接网络和统计连接网络。除了网络统计指标之外，JIDT [5], Ripser [6], 和 HyperNetX [7] 等软件包还提供了用于描述信息论特征、拓扑特征和超图特征的度量。

在物理学和化学等领域，将自然界中的模式形式化为确定性模型，是现代工程能力发展的关键。众所周知，NASA 的工程师运用牛顿运动定律，让人类安全抵达月球并返回。标准有机化学模型（以图的形式，从几何角度表示碳原子倾向于形成四个共价键这一特性）推动了有机合成领域的革命性进步，促成了数百万种新化合物的发现，其中一些后来成为挽救生命的药物。在生物学、神经科学和气候科学等其他科学领域，运用形式统计学描述系统的能力，迄今尚未带来类似的精细控制突破。

为什么会这样？什 么让神经科学与火箭科学不同 ？

一种可能的解释是，这两个领域描述的是两类根本不同的系统。控制论学者、早期复杂性理论家 Warren Weaver 提出了一种如今已成为经典的系统分类法 [8]。第一类是简单系统，由少量元素构成，这些元素以很大程度上确定性的方式相互作用。低维度与可预测的相互作用相结合，使这类系统非常适合建立具有解析解的模型，因此也易于控制。经典物理学和化学就是我们已经深入理解、足以进行工程应用的简单系统。第二类是无组织复杂系统。这类系统包含大量元素，但元素之间的相互作用微不足道，因此可以通过粗粒化舍弃微观尺度细节，并将宏观尺度视为本身可用解析方法处理的“简单系统”。统计力学和热力学是基于对此类系统的研究而发展起来的高效物理学分支。最后，也是最有趣的一类，是“有组织复杂系统”。这类系统包含大量元素，且元素之间以非平凡的方式相互作用（因此有别于无组织复杂系统）。它们是真正的复杂系统，维度过高、因果关系过于密集，难以采用可解析求解的模型或简化的粗粒化方法，并且在每个尺度上都呈现有趣的性质。生物学几乎所有方面，从细胞生物学到神经科学再到生态学，都是由这些有组织复杂系统构成的；而这些系统也最难以设计和控制。

任何试图工程化有组织复杂系统的人都会面临一个根本问题：通常，我们最希望控制的特征是“涌现”的宏观尺度特征，而我们一般只能在微观尺度上进行干预。神经科学就是这一问题的绝佳例证：该领域已经建立起一套成熟的语言，用以描述与临床相关问题相联系的全局大脑状态变化（例如，抑郁症患者丘脑 [9] 与默认模式网络连接 [10]的变化），但却无法直接操控这些信息流模式，因为它们是数十亿个相互作用的神经元所涌现出的特征。因此，神经科医生和精神科医生通常只能诉诸更为粗放的手段，例如使用 SS/DNRI类药物、迷幻药或其他药物，对神经递质信号传导进行全局调节。总的来说，在复杂系统中自下而上地工程化理想的涌现属性非常困难，甚至难以实现，即便对于简单系统也是如此。要做到这一点，就必须建立一种映射关系，说明微观尺度干预如何沿因果层级向上传播，从而使涌现的宏观尺度特征发生可预测的变化——但正如 Warren Weaver 所指出的，这从定义上说就很困难，因为这是有组织复杂系统的内在本质所决定的。

另一种方法可能是“自上而下”——从一种理想的涌现宏观尺度属性入手，再以某种方式“调节”微观尺度，使该涌现属性成为一种自然的



图1：系统科学中的标准方法：假定系统与观察者彼此独立。观察者从系统中收集数据，然后运用网络科学、统计学、机器学习或其他任何科学领域的技术对这些数据进行分析。这些分析会形成对该系统的描述（或模型），进而可以从中推导出关于原始系统本质的见解。至关重要的是，从系统到描述的流程是严格单向的：观察和描述行为不会对被观察或被描述的对象产生任何影响。

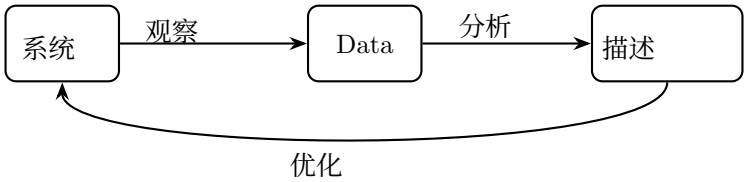


图2：设计方法

吸引子。这种情况自然会出现在某些系统中，例如呈现自组织临界性的系统 [11]。可以说，一些心理治疗方法（尤其是躯体疗法[12], ，或提及某种先天愈合能力概念的方法 [13]）也试图利用神经系统中演化形成的可塑性机制；但总的来说，这并非通往涌现工程一般理论的可行路径，因为它依赖于一种已内置于微观尺度元素中的自组织机制。

在此，我们提出一种用于自顶向下设计具有涌现属性的复杂系统的框架。关键在于，该框架利用现有丰富的描述性统计资源，并将其转化为设计工具。给定一个可微描述性统计量和一个可微系统，如果汇总统计量的计算和系统本身的运算都在单个计算图中通过可微操作完成，就可以将汇总统计量的梯度沿着数据分析流程和生成过程一路反向传播，直至定义系统本身的参数。这不同于汇总统计量通常采用的“标准”流程，在这种流程中，描述过程在因果关系上是“单向的”：观察系统、收集数据，而由此得到的汇总/描述/模型不会对源系统产生影响（见图1）。通过将数据分析的结果反馈至生成过程（见图2），我们构建了一个闭环，以此统一描述与设计，使我们能够将几乎任何宏观尺度汇总统计量转化为支架，引导梯度下降优化器找到微观尺度的参数配置，而无需通过人在回路工程来设计微观尺度配置。

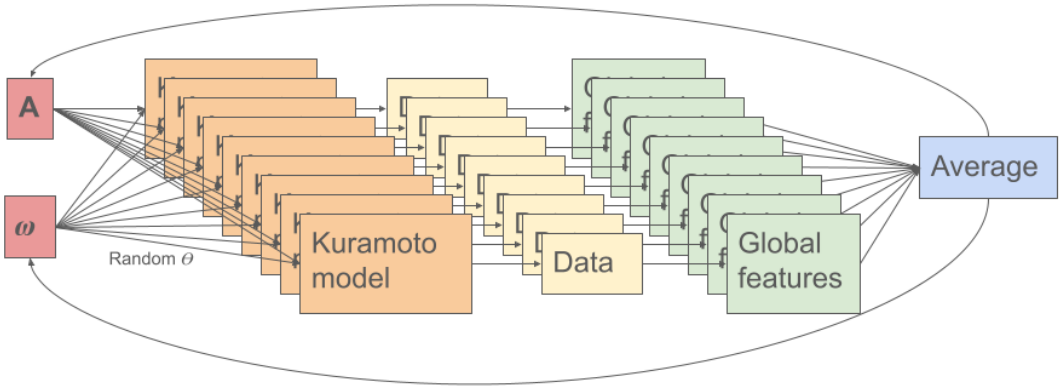


图3：**Kuramoto模型的批量优化**。生成一批Kuramoto模型，并以共同的连接矩阵**A**和固有频率 ω 作为参数，同时为每个振荡器初始化随机相位。让模型运行并收集相位时间序列，再分析其全局特征（例如亚稳态、双重总相关等）。对这些特征取平均值，并将损失反向传播至定义这些系统的初始参数。

2 方法

2.1 Kuramototoy模型

在本分析中，我们使用了经典的Kuramoto模型 [14]。对于一组 N 个振荡器，其中每个振荡器都有一个固有频率 ω_i，并通过布线矩阵 **A**相互耦合，振荡器 i 在时间 t 的相位变化为：

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \mathbf{A}_{ij} \sin(\theta_i - \theta_j) \tag{1}$$

该模型有两组自由参数：由**A** 表示的振荡器间耦合，以及由 ω 表示的各个振荡器的固有频率——优化最终会调整这些参数，以产生理想的动力学行为。

2.2 优化流程

在优化的每一步中，都会初始化八个相互独立的 Kuramoto模型，每个模型包含 $N = 100$个振荡器，并使用相同的耦合矩阵 **A**、由 ω给定的相同固有频率，以及从区间$[0, 2\pi)$上的均匀分布中随机抽取的初始频率。初始耦合矩阵为稠密矩阵（除非另有说明），权重则从尺度参数为 0.01 的指数分布中选取。每个 Kuramoto模型运行 $T = 3000$个时间步（$dt = 0.05$）。对于信息论量，在每个时间步记录每个振荡器相位的正弦值，从而为每个模型生成由正弦曲线构成的多维时间序列。亚稳态是在原始相位上计算的。随后对时间序列进行 Z分数标准化，并计算协方差矩阵，所有操作均通过同一个 Torch内核中的可微分操作完成。根据这些时间序列和协方差矩阵，可以计算大量

函数描述性统计量，随后使用 Adam优化器 [15]通过系统反向传播。在多目标优化中，损失函数要么构造为线性组合（如 Φ^{WMS} 和模块度），要么交替进行训练轮次：偶数轮次优化一个函数，奇数轮次优化另一个函数。所有操作均在 Torch [16]环境中完成。针对批次中的八个实例分别计算目标汇总统计量，再将结果取平均，并通过反向传播更新 $\mathbf{A}$ 和 ω。通过采用随机初始相位进行批处理，可以增强对扰动的鲁棒性，并避免优化器陷入局部极小值附近。可视化请参见图3。优化使用 Adam估计器 [15], 进行，学习率为 10^{-2}，共训练 600 轮。

2.3 “涌现”的可微度量。

基于梯度的优化要求流程中的每一步，从最初的生成动力学到汇总统计量的推断，都必须是完全可微的。这对可进行优化的系统和特征都提出了约束。在本文中，我们主要（但并非完全）关注“涌现”特征的信息论定义。信息论已成为描述复杂系统中高阶依赖关系的一种通用语，因为它提供了一种自然的形式化语言，用于讨论“整体”与“部分”之间的关系 [17]。对于有兴趣将涌现概念形式化的理论学家而言，信息论一直是广受欢迎的基础（参见 [18,19, 20]）。此外，对于实值变量（例如振荡器时间序列），可以使用高斯信息估计器以完全可微的方式估计信息论量。这些估计器依赖于协方差矩阵和相关矩阵，而这些矩阵也可以在可微内核中计算。对于随机变量 $\mathbf{X} = \{X_1, \ldots, X_N\}$，高斯多元熵具有以下闭式估计器：

$$H(\mathbf{X}) = \frac{N}{2}\ln(2\pi\mathrm{e}) + \frac{1}{2}\ln(|\mathbf{\Sigma_X}|) \tag{2}$$

其中 $|\mathbf{\Sigma_X}|$ 是$\mathbf{X}$的协方差矩阵的行列式。由此，我们还可以计算所有常见依赖关系信息论度量的可微估计量，例如条件熵：

$$H(\mathbf{X}|\mathbf{Y}) = H(\mathbf{X},\mathbf{Y}) - H(\mathbf{Y}) \tag{3}$$

互信息：

$$\begin{aligned} I(\mathbf{X};\mathbf{Y}) &= H(\mathbf{X}) + H(\mathbf{Y}) - H(\mathbf{X},\mathbf{Y}) && (4)\\ &= H(\mathbf{X}) - \big(H(\mathbf{X}|\mathbf{Y}) + H(\mathbf{Y}|\mathbf{X})\big) && (5)\\ &= \frac{1}{2}\ln\left(\frac{|\mathbf{\Sigma_X}||\mathbf{\Sigma_Y}|}{|\mathbf{\Sigma_{XY}}|}\right) && (6) \end{aligned}$$

依此类推。

此处我们重点关注一类信息论度量，它们通常被认为能够捕捉全局多元信息结构的不同特征 [21]。其中最早提出的是总相关 [22], ，它通过比较真实的联合统计量与最大熵先验，量化系统上的全局约束：

$$TC(\mathbf{X}) = \left(\sum_{i=1}^{N} H(X_i)\right) - H(\mathbf{X}) \tag{7}$$

$$= -\frac{1}{2}\ln(\mathbf{R}) \tag{8}$$

其中$\mathbf{R}$ 是标准化协方差矩阵（也称为皮尔逊相关矩阵） .

总相关是式 4 中双变量互信息的多变量推广。在完全同步的情况下，总相关达到最大值；在全局独立的情况下，则达到最小值。第二种度量——双重总相关 [23, 24] ——是式 5 的推广：

$$DTC(\mathbf{X}) = H(\mathbf{X}) - \sum_{i=1}^{N} H(X_i|\mathbf{X}^{-i}) \tag{9}$$

与总相关不同，在全局独立和全局同步这两种情况下，双重总相关都较低；当系统整体具有很高的熵，但该熵由许多元素的联合状态共同“共享”时，双重总相关则达到峰值。

总相关和双重总相关共同揭示了两种不同“类型”的涌现信息结构。总相关是“冗余”的启发式度量（信息被复制到多个单独元素中，只需观察其中任意一个就能获知这些信息）；而双重总相关是“协同”的启发式度量（信息编码在多个元素的联合状态中，无法通过任何“部分”单独揭示）[25]。二者之差定义了 O信息 [21]：

$$O(\mathbf{X}) = TC(\mathbf{X}) - DTC(\mathbf{X}). \tag{10}$$

如果 $O(\mathbf{X}) > 0$，那么 $\mathbf{X}$ 的统计结构由冗余交互主导；而如果 $O(\mathbf{X}) < 0$，那么 $\mathbf{X}$ 则由协同交互主导。先前针对离散布尔网络进行优化的工作表明，针对正或负 O 信息进行演化会产生在动力学和计算性质上截然不同的系统 [26], ，这使其成为探索可能涌现属性空间的一种颇具吸引力的损失函数。

2.3.1 信息论度量的线性组合

信息论方法在描述涌现特征方面的一个显著优势在于，这些度量可以组合——我们能够从较简单的部分构建更复杂的模式。在这里，我们使用了“整体减去求和”整合信息的一个修改版本 [27]„ 它衡量的是系统的两个分区$\mathbf{X}_\alpha$和$\mathbf{X}^\beta$ 之间存在的、无法归约为各个分区间耦合的依赖关系程度：

$$\Phi^{WMS}(\mathbf{X}_\alpha, \mathbf{X}_\beta) = I(\mathbf{X}_\alpha; \mathbf{X}_\beta) - \sum_{\substack{i\in|\alpha|\\ j\in|\beta|}} I(X_{\alpha_i}; X_{\beta_j}) \tag{11}$$

与 O信息一样，该度量可以为正，也可以为负。 Φ^{WMS}的正值表明，分区之间的全局互信息大于涵盖这些分区的所有成对互信息之和。顾名思义，它衡量的是“整体”比“各部分之和”大多少。

2.3.2 涌现的其他指标

为了评估我们的方法的普适性，我们还尝试了几种非信息论的涌现度量。我们根据振荡器时间序列计算了 Kuramoto序参量的方差。对于 t 中的每个时间 T，我们计算的序参量为：

$$r(t) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \mathrm{e}^{i\theta_k(t)}. \tag{12}$$

序参量的表现与总相关相似：当所有振荡器同步时达到最大值，在完全独立时达到最小值 [28]。然而，与总相关不同，它是在每个时刻计算的 t，从而形成一组瞬时值的时间序列。该序列的方差反映了整体“亚稳态”的程度[29], 。亚稳态是另一种全局涌现属性，如冗余或协同；不过，它描述的不是部分/整体依赖关系的统计结构，而是系统在弱吸引子构成的景观中游移的程度。

$$\psi(\mathbf{X}) = \mathrm{Var}(r(t)) \tag{13}$$

我们还探讨了两种衡量全局结构的基于图的指标。第一种是模块度[30], ，它描述了这样一种模式：网络分裂为若干“模块”，模块内部连接紧密，而模块之间的连接稀疏。损失函数基于二值块对角矩阵 $\mathbf{M}$，其中模块内连接定义为 1，模块间连接定义为 0。

$$Q(\mathbf{X}, \mathbf{M}) = \left\langle \mathrm{Corr}(X_i, X_j)^2 \right\rangle_{\mathbf{M}_{ij}=1} - \left\langle \mathrm{Corr}(X_i, X_j)^2 \right\rangle_{\mathbf{M}_{ij}=0} \tag{14}$$

由于 Corr(X_i, X_j)^2 受 [0,1]，限制，且成对互信息可以根据 $I(X_1; X_2) = -\ln(1 -$ Corr(X_1, X_2)^2)$/2$ 计算，因此，最大化 $Q(\mathbf{X}, \mathbf{M})$ 可在最大化模块内互信息的同时，最小化模块间互信息。我们的目标结构包含四个大小相同的模块，每个模块含有 25 个振荡器。

最后，我们可以计算连接矩阵 $\mathbf{A}$ 本身的一些基本汇总统计量。其中一项度量是从初始化矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{init}}$ 到优化后的矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{optim}}$ 时边权重总成本的变化：

$$\Delta C(\mathbf{A}) = \left(\sum_{i,j} \mathbf{A}_{ij}^{\mathrm{init}} \right) - \left(\sum_{ij} \mathbf{A}_{ij}^{\mathrm{optim}} \right) \tag{15}$$

综合来看，这些度量构成了全局结构可能度量的代表性样本，涵盖功能性度量（信息论度量）、动力学度量（Kuramoto序参量）和结构性度量（图论度量）。尽管这并非完整的度量集合，但它们很好地展示了这一通用框架的能力。

3 结果

为了检验我们的流程是否一致且可复现，对于每项实验，我们都优化了 100 个 Kuramoto模型，这些模型采用不同的随机初始化$\mathbf{A}$ 矩阵和固有频率

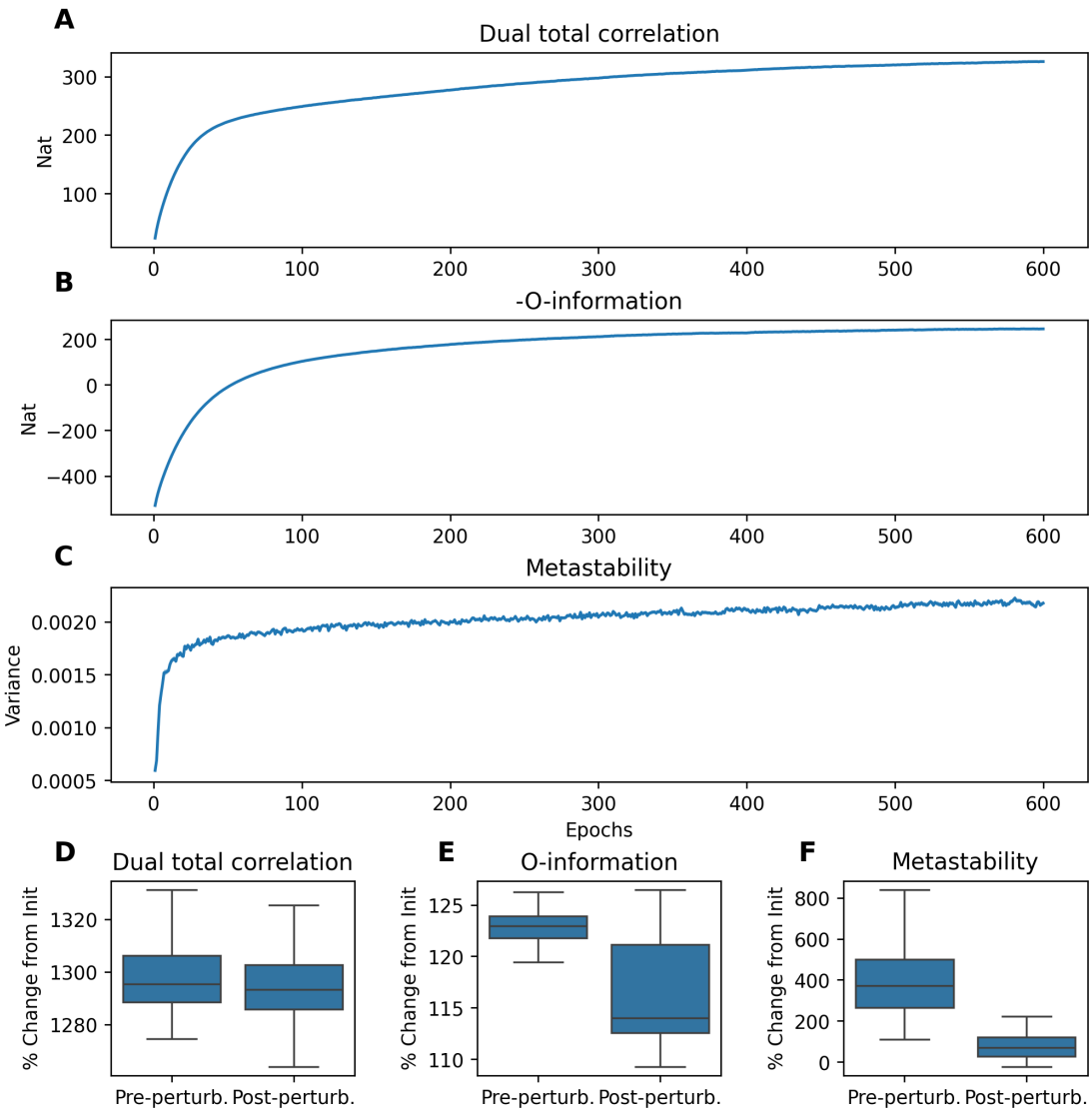


图 4：**优化全局特征**。**A:** 构建高全局双重总相关的 100 个 Kuramoto模型的优化曲线。**B:** 构建高负 O 信息（表示全局协同主导）的 100 个 Kuramoto模型的优化曲线。**C:**构建高亚稳态（Kuramoto序参量的方差）的 100 个模型的优化曲线。**D:** 扰动前后双重总相关相对于初始值的百分比变化。**E:** 扰动前后负 O 信息相对于初始值的百分比变化。请注意，虽然扰动确实降低了 O 信息，但扰动后的系统仍比初始条件显著更具协同主导性。**C:** 扰动前后亚稳态相对于初始值的百分比变化。亚稳态度量最为脆弱，不过扰动后的数值平均仍是初始值的两倍。

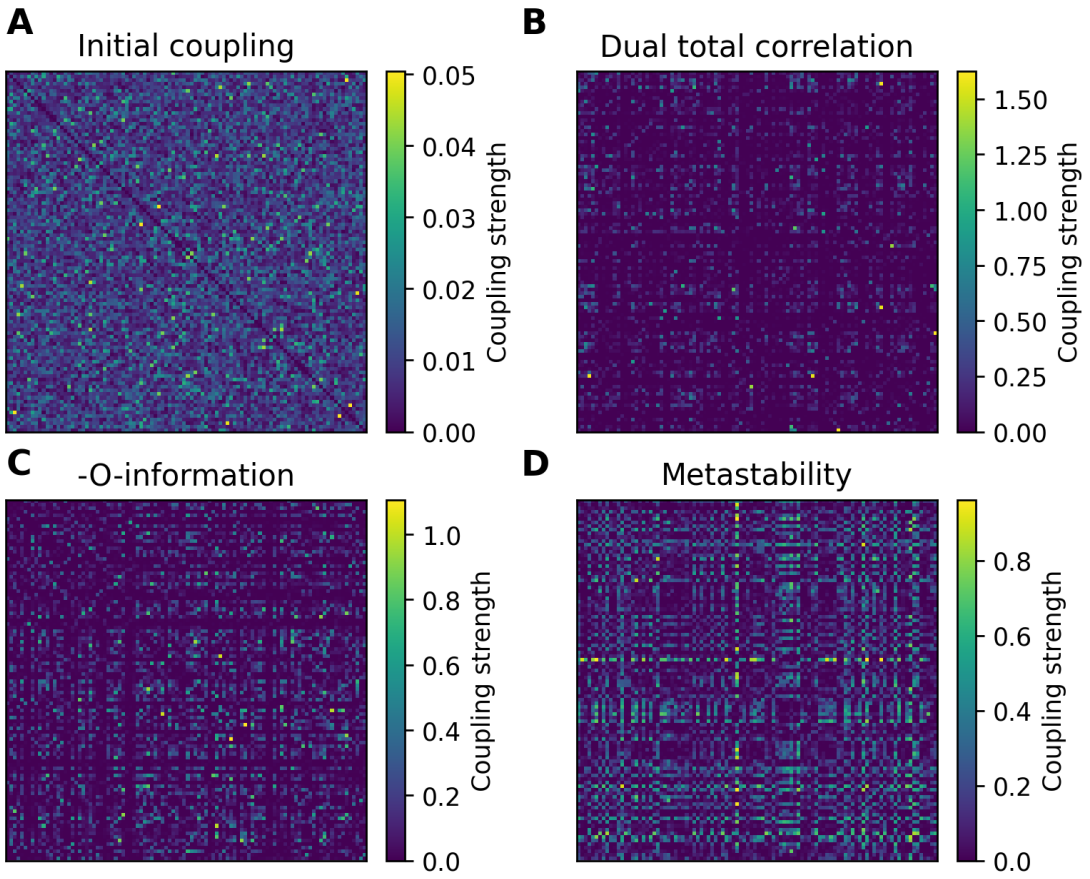


图 5：**优化后的耦合矩阵**。**A：**初始耦合强度从尺度参数为 0.01 的指数分布中随机抽取，以产生嘈杂但微弱的耦合。**B：**针对双重总相关进行优化后，表现最佳的系统的耦合矩阵。注意稀疏性的增加：数量更少但强度大得多的边驱动着振荡器之间的耦合。**C：**负 O 信息表现最佳时的耦合矩阵。**D：**针对亚稳态进行优化的系统中，表现最佳的耦合矩阵。在所有系统中，都清楚地涌现出了“结构”，但这种结构显然并无信息价值，也不是人类工程师能够轻易从第一性原理出发设计出来的。

（ω）。每个系统包含 100 个振荡器。我们对耦合矩阵 **A** 和固有振荡频率 ω 进行优化，成功生成了呈现多种涌现属性的系统。此外，在 100 次重复实验中，我们发现结果具有高度一致性，表明系统具有稳健性。双重总相关显著增加，平均初始值为 18.85 ± 0.18 纳特，最终值为 293.57 ± 2（Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D $= 192$）。同样，我们成功生成了以协同为主导的系统：O信息从初始的 -541.48 ± -0.38 纳特（表明系统具有很强的冗余性）变为最终的 162.0 ± 0.4 纳特（Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D$= 199$）。随机初始化的系统通常一开始就已达到最大总相关（对应于最大同步/冗余），这并不令人意外，因为Kuramoto模型天生倾向于趋向同步状态。我们在亚稳态度量 ψ方面也取得了类似的成功。平均而言， psi 的初始值为0.001 ± 0.003，优化后增至 0.00363 ± 0.00182 （Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D $= 1.99$。

3.1 优化后的特征通常对扰动具有鲁棒性

批次处理的主要目的是创建这样的系统：其目标涌现属性不会取决于某一组特定的初始条件（对于 Kuramoto模型而言，即相位）。为检验演化后的系统是否具有鲁棒性，我们针对给定的损失函数运行优化，保存每个振荡器的最终相位，并通过添加从均值为零、方差为一的正态分布中采样的相位偏移来扰动这些相位。随后，我们将扰动后的相位用作新 Kuramoto模型的初始值，并采用优化后的 **A** 矩阵和 ω 频率。在我们测试的三种指标（双重总相关、O信息和亚稳态）中，我们发现优化后的特征通常具有鲁棒性，但鲁棒程度因特征而异。双重总相关最具鲁棒性：优化后的平均表现为 303.746 ± 2.401 纳特，而扰动后的平均表现为 303.109 ± 3.391 纳特——这是一个在技术上显著的下降（Wilcoxon检验 $p = 0.017$，Cohen's D $= 0.2$），但仍表明其具有显著的鲁棒性。负 O 信息对扰动更敏感，扰动使表现从 146.597 ± 9.734纳特降至 103.615 ± 31.364纳特（Wilcoxon检验 $p < 10^{-13}$，Cohen's D $= 1.84$）；然而，扰动后的系统仍以协同为主导，且显著高于随机初始条件下的表现（-641.152 ± 0.4 纳特，Wilcoxon检验 $p < 10^{-18}$，Cohen's D $=$ -33.4）。最后，亚稳态的鲁棒性最低。扰动前，Kuramoto序参量的平均方差为 0.0026 ± 0.0001；扰动后，该值降至 0.001 ± 0.0001 ——下降显著（Wilcoxon检验 $p < 10^{-18}$，Cohen's D $=$-13）。然而，即使经历了如此大幅的下降，所得系统仍比随机初始化的系统具有更高的亚稳态（后者的亚稳态为 0.0006 ± 0.0002，Wilcoxon检验 $p < 10^{-16}$，Cohen's D $= 2$）。

总体而言，这些结果表明，基于梯度的设计流程能够生成对扰动具有鲁棒性的系统——它们并非总是围绕某种极其脆弱的构型结晶，一经测试便会分崩离析。未来的一项研究方向是探究，为何某些特征（如双重总相关）具有很强的鲁棒性，而另一些特征（如亚稳态）却显然更为脆弱。

3.2 中尺度结构设计

迄今为止，我们关注的是"涌现"的全局标量度量（例如 O信息和信息协同）。然而，复杂系统的一个标志是在多个尺度上涌现。形式化无标度结构概念的方式多种多样：这里我们展示其中两种（分别基于成对依赖关系和真正的高阶相互作用）

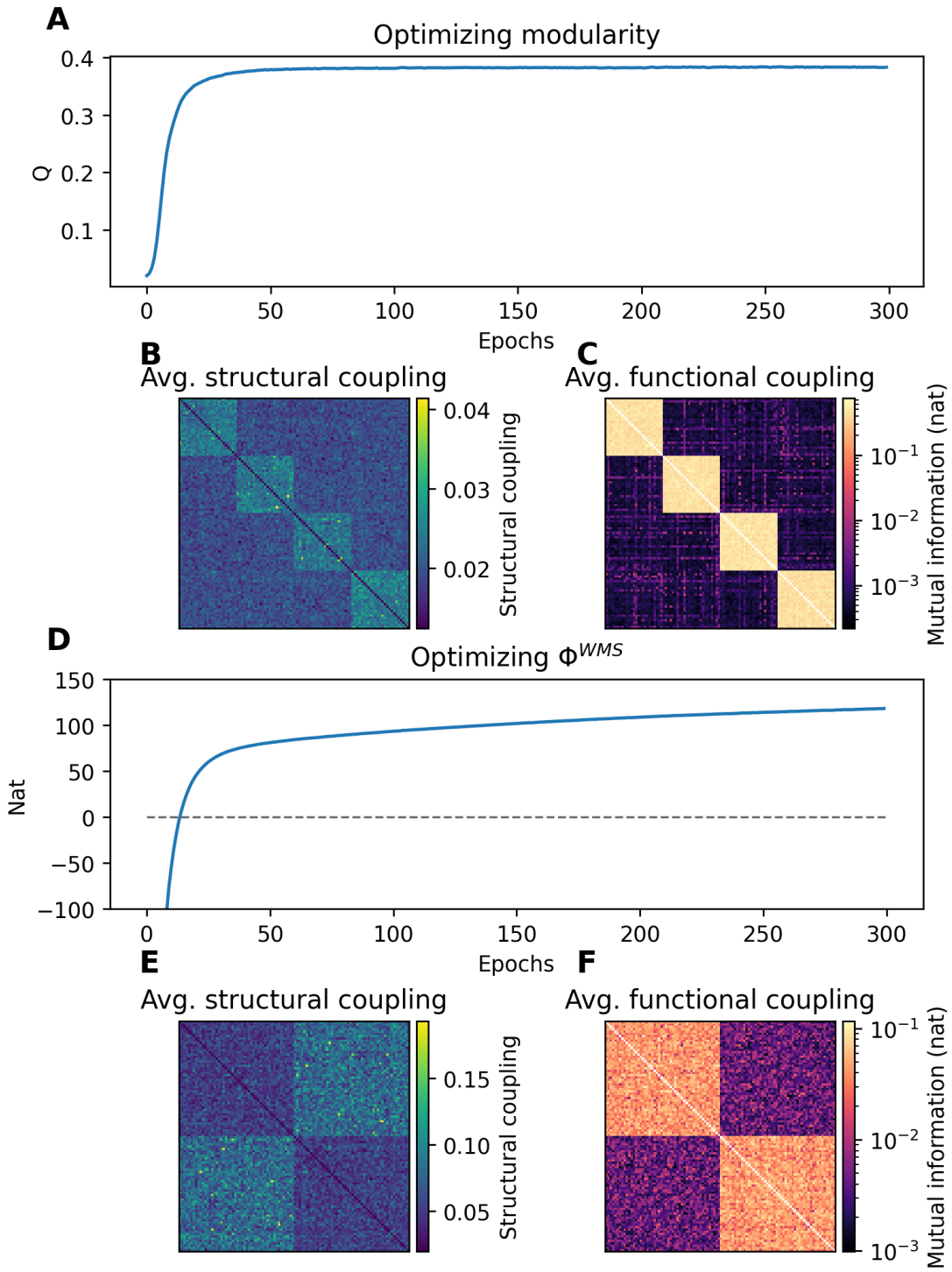


图6：**优化中尺度结构**。**A：**100个Kuramoto系统构建包含四个模块的高度模块化结构时的优化曲线。**B：**平均最优耦合：注意，该模式与B面板相反——此处最强的结构耦合发生在模块内元素之间，而模块间耦合则有所减弱。**C**平均互信息（功能耦合），显示了该系统强烈的模块化结构。[11]**D：**100个Kuramoto系统构建高度结构时的优化曲线。纵轴经过截断，以突出显示最终值显著为正，尽管其初始配置强烈为负。**E：**平均最优耦合：注意，非对角线上的分区间边平均具有更高的耦合强度。**F：**振荡器之间的平均互信息矩阵（功能耦合）。正如预期，尽管分区间边具有更强的结构耦合，其依赖关系却较弱。

适用于自动化设计。

3.2.1 模块度

对网络中模块化结构的研究（即由节点组成的集合，其中节点之间的连接比它们与其他模块中节点的连接更紧密）是网络科学和复杂系统的核心领域之一 [30]。在此，我们采用一种经典网络模块度的近似形式，该形式经过构造，可在我们的梯度下降框架中高效优化（见公式 14）。我们对 100 个网络逐一进行优化，使其具有 4 个大小相等的模块，每个模块包含 25 个振荡器。

优化后的系统的模块度（0.383 ± 0.036）显著高于初始化系统（0.02 ± 0.004，Wilcoxon检验 $p < 10^{-18}$，Cohen's D $= 13.98$）。可视化结果见图6A。目视检查表明，优化振荡器之间的功能相关性（图 6C）也影响了结构连接模式（图 6B）；模块内功能连接的增强，也伴随着模块内结构连接的增强。

3.2.2 整体减去总和的整合信息

模块度采用纯粹的成对方法来描述中尺度结构：模块完全根据紧密耦合的元素对的密度来定义。另一种方法是寻找元素组之间的高阶依赖关系：是否存在一些振荡器集合，它们共同共享的信息无法通过考察低阶子集获得 [27]。为了检验我们的流程能否构建协同中尺度结构，我们优化了 100 个 Kuramoto模型，每个模型包含 100 个振荡器，使其呈现较高的 Φ^{WMS} （见式 11，其中前 50 个振荡器构成第一个分区，后 50 个构成互补分区）。正如预期，优化器设计出的系统的 Φ^{WMS} 显著高于初始条件下的值（130.58 ± 6.41 纳特，相比之下，初始条件下为 -1627.8 ± 13.54 纳特；Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D $= 165.16$）。可视化结果见图 6D。有趣的是，尽管分区之间的平均互信息较低（符合预期，见图 6F），但分区之间的实际机械耦合却更高，这表明需要某种主动整合才能使统计依赖关系保持在较低水平。可视化结果见图 6E。这与上文观察到的成对模块度模式相反：在该模式中，模块内的结构耦合强于模块间的结构耦合。

耦合强度在介观结构中的分布呈现出看似相反的趋势，从而产生不同的功能依赖关系，这凸显了自动化设计的价值。这并不显然是构建此类系统的自然方式，而且查阅文献也找不到明确的解释，说明为何会如此。未来的工程师不太可能不经长期努力和研究就发现这一点——但我们的方法能在几分钟内自动收敛到这一结果。

3.3 无约束结构的设计。

无论在自然系统还是人工系统中，物理基底通常都不具有不受约束的自由度。相反，系统可采用何种构型往往受到几何、能量或实际条件的限制。我们可以通过两种方式探索这些权衡。第一种是将某种成本函数作为次级目标施加，从而限制优化器可探索的构型空间（例如，对边质量施加惩罚）。这类似于将维持大脑白质纤维束的热量能耗纳入考量：纤维束需要能量来维持，并会产生选择压力，促使系统尽量减少不必要的布线；我们可以通过最小化一个以总边质量为基础的次级损失函数来对此建模。第二种方法是事先“封锁”某些构型，规定绝不允许出现特定模式。继续以大脑作类比，

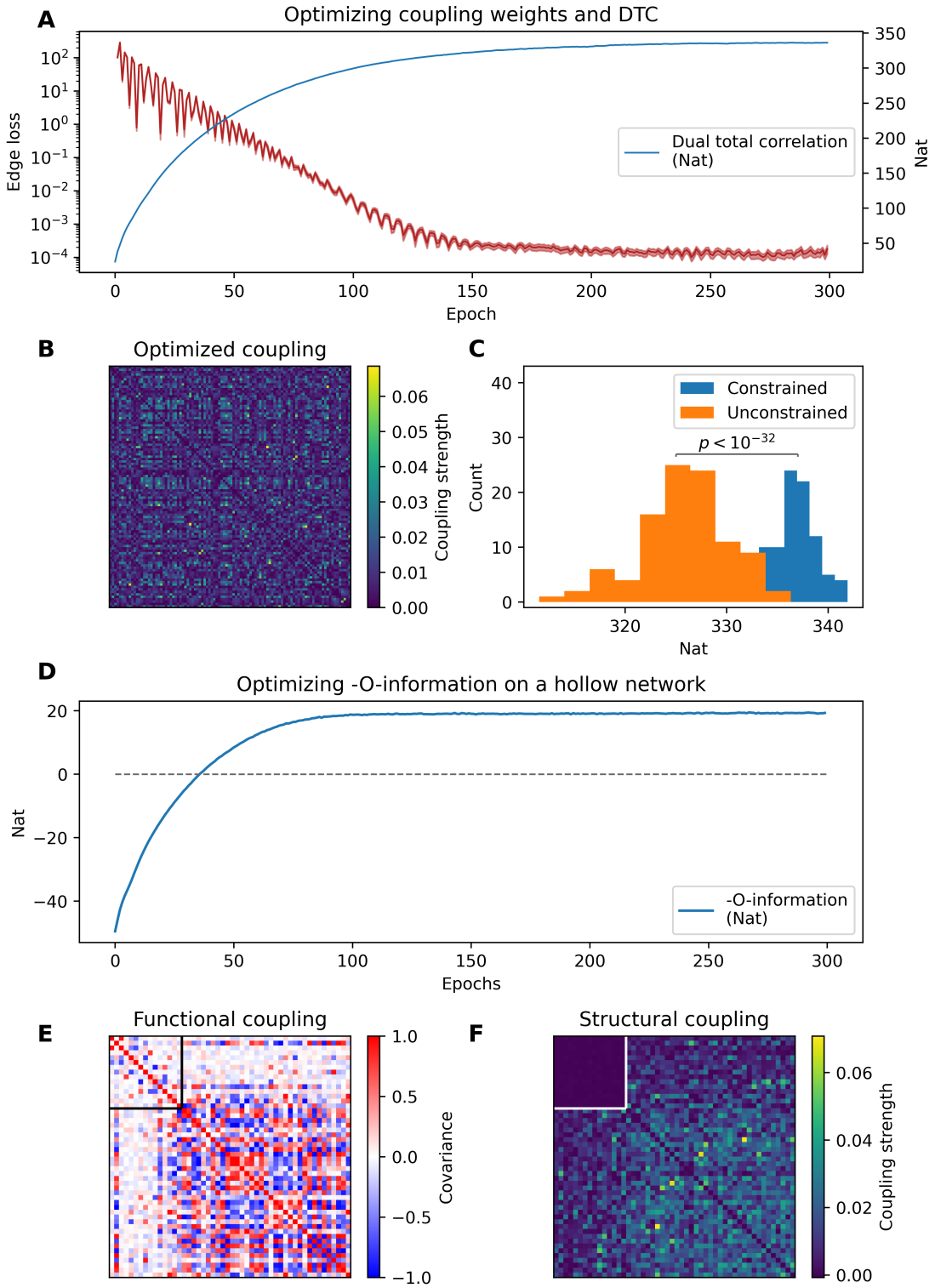


图7：**多目标结构-功能优化**。**A：**对100个Kuramoto系统的双重总相关（蓝色曲线，右侧y轴）和边质量损失（与随机初始化矩阵的总边质量之差，红色，左侧y轴）进行同步优化后的平均结果。误差范围为 ±2 均值标准误（SEM）（由于范围很窄，图中不可见）。**B：**一个初始耦合矩阵示例。**C：**表现最佳的系统经过最终优化后的耦合矩阵。请注意，边权重的尺度与初始化矩阵相同，并与图5B形成对比。**C：**在边质量约束下优化的100个Kuramoto系统（蓝色）与未受约束优化的系统（橙色）的双重总相关直方图。未受约束优化的系统最终信息密度显著低于受约束优化的系统。

这类似于脑室：由于大脑内部存在大型中空空间，某些直接的白质连接根本不可能形成。下面我们将展示这两种限制的成功示例。

3.3.1 多目标优化与结构成本函数

在直接进行双总相关优化时，系统的总边质量通常会显著增加（边质量从初始值 0.0099 ± 0.0001 增加到最终值 0.06 ± 0.004，Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D $= 17.94$）。为了检验我们的流程在功能优化中处理物理约束的能力，我们同时进行了100次多目标优化，旨在尽可能提高系统的双重总相关，同时让平均边质量尽可能接近初始条件。结果可视化见图7A。在100次重复实验中，我们发现这些系统仍能显著提高双重总相关，同时尽可能减少边质量。令人惊讶的是，Mann-Whitney U检验发现，在物理约束下优化的系统，其双重总相关略高于（但在统计学上显著高于）允许无约束优化的系统（336.68 ± 2.46）（325.68 ± 4.33, $U = 120$, $p < 10^{-33}$，Cohen's D $= 3.00$）。结果可视化见图7C。这些结果表明，在构建Kuramoto模型等高维系统时，我们基于梯度的方法能够兼顾结构与功能问题之间的直接相互作用。

3.3.2 受拓扑约束的优化

为探究拓扑约束的影响，我们在一个由100个振荡器组成的受约束网络上运行了100次优化。我们选取了15个振荡器，并移除了它们之间的任何结构耦合，同时始终不允许梯度优化器"生长"出新的耦合，从而维持一个空腔（见图7F）。随后，我们使用优化器设计了一个系统，使这15个元素（构成空腔的外壳）具有最大的负 O 信息（即协同主导动力学）。由于空腔的存在，这些振荡器无法彼此直接交互，因此外壳中任意两个振荡器之间的协调都必须至少由一个中介振荡器进行调节。

我们发现，尽管节点彼此断连，优化器仍能够生成具有显著协同的系统，其数值从初始的 -49.498 ± 0.472 纳特上升至最终的 19.323 ± 0.798，Wilcoxon检验 $p < 10^{-17}$，Cohen's D $= 104.46$)。可视化结果见图7D。重要的是，这些由断连振荡器组成的协同集合仍表现出相关、反相关和低相关依赖关系的结构化混合（见图7E），表明借助中介结构，断连振荡器之间仍可能实现复杂的协调。

4 讨论

本文展示了如何利用基于梯度的优化流程，自动设计具有指定涌现属性的复杂系统。通过将描述性汇总统计量重新表述为损失函数，我们便能利用过去几十年间开发的大量此类度量。我们采用了高层次的方法，展示了各种可能的应用，包括优化全局属性、中尺度模式以及约束条件下的设计。这让有志成为涌现工程师的人得以大致了解各种可能的方向，但我们并未深入探讨其中任何一种。例如，可以进一步探索许多不同的涌现信息论度量，

对此进行研究 [18, 31, 20, 19]。同样，我们也没有探讨如何使用传递熵 [32, 33]或信息率 [34, 35, 36] 等度量来优化具有时间指向性的信息“流”（我们推测，针对高斯过程的可微信息率估计器应该是可行的）。由于许多“涌现”度量都取决于这样一种概念：系统的过去状态揭示了有关其未来状态的预测信息 [37], ，因此，优化时间延迟特征将是下一步的重要工作。

另一个值得深入探索的领域，是受约束系统上的优化问题。在这里，我们展示了两种成功的实现方式：一种基于旨在最小化布线成本的辅助代价函数，另一种基于拓扑约束结构网络。然而，成本函数可能非常复杂。例如，如果变量嵌入在空间中，连接成本可能随距离增加，从而引入一个额外参数；也可能呈非线性变化（例如随布线的物理体积变化）。布线成本还可能影响拓扑约束：在这项工作中，我们不言而喻地假定稠密网络是可行的（除非受到明确限制），而且边的权重可以任意小。然而，这对于许多现实系统来说并不合理，因为它们往往趋于稀疏网络，而且边的权重低于某些阈值时常会彻底消失。例如，航空公司可以根据需求安排城市 A 和城市 B 之间的乘客数量，但如果乘客数量降得太低，这趟航班就会被取消——没有航空公司会只载 3 个人从纽约市飞往洛杉矶。这类边存在与否的二元状态很难通过基于梯度的优化处理。未来有必要在方法中纳入某些系统的离散特征，才能使本文所述方法充分发挥作用。

这种方法的一种可能应用，是将其与更常见的任务导向型优化流程相结合。已有研究表明，如果在训练神经网络执行任务的同时，将网络的信息论性质作为辅助函数进行优化，其性能便可以得到提升 [38, 39, 40]。未来的研究将探索哪些动力学性质或信息论性质可以作为更常见学习方法的辅助函数，从而设计出性能更好、效率更高或更易训练的人工智能系统。

最后，这类工作或许能让我们批判性地评估：科学家究竟从发展出如此庞杂的描述性统计中获得了哪些（如果确实获得了任何）洞见。由于高层次的涌现特征通常无法加以干预，它们总是处于分析流程的末端。科学家或许能够证明，例如，协同信息会随着意识丧失 [41], 或婴儿发育过程 [42], 而变化，但由于无法操纵这些特征，任何试图理解它们的努力，本质上都是一种事后叙事。识别大脑中高阶信息流的模式，真的能为我们带来任何根本性且可付诸行动的洞见吗？还是说，我们只是在为了统计学本身而进行某种统计数据的集邮？通过将描述性统计转化为损失函数，并从零开始将其设计进系统，我们可以开始推动复杂系统科学领域从基于相关性和描述性方法的研究，转向更具干预性的研究。如果想知道协同对于系统中的多模态感觉整合是否重要，那就改变协同的程度，看看会发生什么。尽管我们或许永远无法在有生命的生物系统中做到这一点，但仿真技术不断朝着更高细节和更高真实性发展，可能很快就会让我们能够严谨地研究在自然系统中控制涌现所产生的影响。

5 结论

在本文中，我们介绍了一套通用流程，用于利用梯度下降优化自动化设计具有理想涌现属性的高维系统。其核心贡献在于认识到，多年来由各领域科学家发展起来的庞大描述性统计库，可以重新用于构建一组可供优化的损失函数。最终，这项工作旨在帮助复杂性科学领域从一个主要以描述为基础的领域，转向一个更有能力应对工程和控制问题的领域。通过自动化复杂系统设计中的一个关键瓶颈（即将微观尺度特征映射到全局涌现属性的困难），我们希望促进科学与工程多个领域取得新的进展。

代码可用性

作为该项目的一部分，我们为 Infodiff 软件包创建了一个 GitHub 仓库，其中包含基于 Torch 的实现，涵盖多种信息论、图论和动力学特征，可接入优化流程。LINK

致谢

TFV 和 JB 构思了这项研究。TFV 编写了软件、开展了实验、分析了数据，并撰写了论文初稿。JB 在整个过程中提供了反馈和指导。

参考文献

[1] Aric A. Hagberg、Daniel A. Schult 和 Pieter J. Swart。使用 NetworkX 探索网络结构、动力学与功能。载于 Ga¨el Varoquaux、Travis Vaught 和 Jar- rod Millman（编），第七届 *Python* 科学会议论文集，第 11–15 页，美国加利福尼亚州帕萨迪纳，2008年。[2] Gabor Csardi 和 Tamas Nepusz。用于复杂网络研究的 igraph 软件包。*InterJournal*，2006年。[3] Tiago P. Peixoto。graph-tool Python 库。*figshare*，2014年9月。[4] Mikail Rubinov 和 Olaf Sporns。脑连接的复杂网络度量：用途与解读。*NeuroImage*，52(3):1059–1069，2010年9月。期号：3。[5] Joseph T. Lizier。JIDT：研究复杂系统动力学的信息论工具包。*Frontiers in Robotics and AI*，1，2014年。出版方：Frontiers。[6] Christopher Traile、Nathaniel Saul 和 Rann Bar-On。Ripser.py：用于 Python 的轻量级持久同调库。*The Journal of Open Source Software*，3(9):295，2018年9月。期号：9。[7]Brenda Praggastis、Sinan Aksoy、Dustin Arendt、Mark Bonicillo、Cliff Joslyn、Emilie Purvine、Madelyn Shapiro 和 Ji Young Yun。HyperNetX：一个用于将复杂网络数据建模为超图的 Python 软件包，2023年10月。arXiv:2310.11626 [cs]。

[8] W. Weaver。科学与复杂性。美国科学家，36(4):536–544，1948年10月。期号：4。

[9] Selene Gallo、Ahmed El-Gazzar、Paul Zhutovsky、Rajat M. Thomas、Nooshin Javaheripour、Meng Li、Lucie Bartova、Deepti Bathula、Udo Dannlowski、Christopher Davey、Thomas Frodl、Ian Gotlib、Simone Grimm、Dominik Grotegerd、Tim Hahn、Paul J. Hamilton、Ben J. Harrison、Andreas Jansen、Tilo Kircher、Bernhard Meyer、Igor Nenadi´c、Sebastian Olbrich、Elisabeth Paul、Lukas Pezawas、Matthew D. Sacchet、Philipp S¨amann、Gerd Wagner、Henrik Walter、Martin Walter 和 Guido van Wingen。重性抑郁障碍的功能连接特征：两项多中心神经影像学研究的机器学习分析。分子精神病学，28(7):3013–3022，2023年7月。出版商：自然出版集团。

[10] Chao-Gan Yan、Xiao Chen、Le Li、Francisco Xavier Castellanos、Tong-Jian Bai、Qi-Jing Bo、Jun Cao、Guan-Mao Chen、Ning-Xuan Chen、Wei Chen、Chang Cheng、Yu-Qi Cheng、Xi-Long Cui、Jia Duan、Yi-Ru Fang、Qi-Yong Gong、Wen-Bin Guo、Zheng-Hua Hou、Lan Hu、Li Kuang、Feng Li、Kai-Ming Li、Tao Li、Yan-Song Liu、Zhe-Ning Liu、Yi-Cheng Long、Qing-Hua Luo、Hua-Qing Meng、Dai-Hui Peng、Hai-Tang Qiu、Jiang Qiu、Yue-Di Shen、Yu-Shu Shi、Chuan-Yue Wang、Fei Wang、Kai Wang、Li Wang、Xiang Wang、Ying Wang、Xiao-Ping Wu、Xin-Ran Wu、Chun-Ming Xie、Guang-Rong Xie、Hai-Yan Xie、Peng Xie、Xiu-Feng Xu、Hong Yang、Jian Yang、Jia-Shu Yao、Shu-Qiao Yao、Ying-Ying Yin、Yong- Gui Yuan、Ai-Xia Zhang、Hong Zhang、Ke-Rang Zhang、Lei Zhang、Zhi-Jun Zhang、Ru-Bai Zhou、Yi-Ting Zhou、Jun-Juan Zhu、Chao-Jie Zou、Tian-Mei Si、Xi-Nian Zuo、Jing-Ping Zhao 和 Yu-Feng Zang。复发性重性抑郁障碍患者的默认模式网络功能连接降低。美国国家科学院院刊，116(18):9078–9083，2019年4月。出版商：美国国家科学院院刊。

[11] Per Bak 和 Kan Chen。《自组织临界性》。科学美国人，264(1):46–53，1991年。期号：1。

[12] Marie Kuhfuß、Tobias Maldei、Andreas Hetmanek 和 Nicola Baumann。躯体体验疗法的有效性与关键因素——一种以身体为导向的创伤疗法：范围综述。欧洲精神创伤学杂志，12(1):1929023，2021年。

[13] Joseph Peill、Miriam Marguilho、David Erritzoe、Tommaso Barba、Kyle T Greenway、Fernando Rosas、Christopher Timmermann 和 Robin Carhart-Harris。迷幻药与“内在疗愈者”：神话还是机制？精神药理学杂志（英国牛津），38(5):417–424，2024年5月。

[14] Yoshiki Kuramoto。耦合非线性振荡器群体的自我同步。载于 Huzihiro Araki 编，《style id='2'>理论物理中的数学问题国际研讨会，第 420–422 页，柏林、海德堡，1975年。施普林格。

[15] Diederik P. Kingma 和 Jimmy Ba。Adam：一种随机优化方法，2017 年 1 月。arXiv:1412.6980 [cs]。

[16] Adam Paszke、Sam Gross、Francisco Massa、Adam Lerer、James Bradbury、Gregory Chanan、Trevor Killeen、Zeming Lin、Natalia Gimelshein、Luca Antiga、Alban Desmaison、Andreas K¨opf、Edward Yang、Zach DeVito、Martin Raison、Alykhan Tejani、Sasank Chilamkurthy、Benoit Steiner、Lu Fang、Junjie Bai 和 Soumith Chintala。《PyTorch：一种命令式风格、高性能的深度学习库》。载于神经信息处理系统第*33*届国际会议论文集，第721号，第8026–8037页。Curran Associates Inc.，美国纽约州雷德胡克，2019年12月。

[17] Thomas F. Varley。《复杂系统科学家的信息论：是什么、为什么以及如何做》。*Physics Reports*，1148：1–55，2025年12月。[18] Fernando E. Rosas、Pedro A. M. Mediano、Henrik J. Jensen、Anil K. Seth、Adam B. Barrett、Robin L. Carhart-Harris 和 Daniel Bor。《调和涌现：一种识别多变量数据中因果涌现的信息论方法》。*PLOS Computational Biology*，16(12)：e1008289，2020年12月。第12期，出版方：公共科学图书馆。[19] Thomas F. Varley 和 Erik Hoel。《涌现即信息转换：一种统一理论》。英国皇家学会哲学汇刊*A*辑：数学、物理与工程科学，380(2227)：20210150，2022年7月。出版方：英国皇家学会。[20] Lionel Barnett 和 Anil K. Seth。《动力学独立性：发现复杂动力系统中的涌现宏观过程》。*arXiv:2106.06511 [nlin]*, 2021年6月。arXiv：2106.06511。[21] Fernando Rosas、Pedro A. M. Mediano、Michael Gastpar 和 Henrik J. Jensen。《通过互信息的多变量扩展量化高阶相互依赖》。*Physical Review E*，100(3)：032305，2019年9月。第3期，arXiv：1902.11239。[22] S. Watanabe。《多变量相关性的信息论分析》。*IBM Journalof Research and Development*，4(1)：66–82，1960年1月。第1期。[23] Te Sun Han。《多变量对称相关性的非负熵度量》。信息与控制，36(2)：133–156，1978年2月。[24] Samer A. Abdallah 和 Mark D. Plumbley。《一种基于预测信息的统计复杂性度量及其在有限自旋系统中的应用》。*Physics Letters A*，376(4)：275–281，2012年1月。[25] Fernando E. Rosas、Aaron J. Gutknecht、Pedro A. M. Mediano 和 Michael Gastpar。《通过熵共轭表征高阶相互依赖》。*Communications Physics*，8(1)：1–11，2025年8月。出版方：自然出版集团。[26] Thomas F. Varley 和 Josh Bongard。《演化高阶协同揭示了复杂系统中稳定性与信息整合能力之间的权衡》。*Chaos: AnInterdisciplinary Journal of Nonlinear Science*，34(6)：063127，2024年6月。[27] David Balduzzi 和 Giulio Tononi。《离散动力系统中的整合信息：研究动机与理论框架》。*PLoS computational biology*，4(6)：e1000091，2008年6月。[28] Maria Pope、Makoto Fukushima、Richard F. Betzel 和 Olaf Sporns。《精细尺度功能连接动力学中高振幅共同波动的模块化起源》。美国国家科学院院刊，118(46)：e2109380118，2021年11月。出版方：美国国家科学院院刊。[29] Fran Hancock、Fernando E. Rosas、Andrea I. Luppi、Mengsen Zhang、Pedro A. M. Mediano、Joana Cabral、Gustavo Deco、Morten L. Kringelbach、Michael Breakspear、J. A. Scott Kelso 和 Federico E. Turkheimer。《亚稳态去神秘化——奠基性过去、务实的当下与充满希望的未来》。*Nature Reviews. Neuroscience*，26(2)：82–100，2025年2月。

[30] M. E. J. Newman。网络中的模块度和社区结构。美国国家科学院院刊，103(23):8577–8582，2006年6月。编号：23。[31] Brennan Klein 和 Erik Hoel。复杂网络中信息性高阶尺度的涌现。*Complexity*，2020:e8932526，2020年。出版商：Hindawi。[32] Lionel Barnett、Adam B. Barrett 和 Anil K. Seth。高斯变量的格兰杰因果关系与传递熵等价。《物理评论快报》，103(23):238701，2009年12月。编号：23。出版商：美国物理学会。[33] Terry Bossomaier、Lionel Barnett、Michael Harr´e 和 Joseph T. Lizier。传递熵导论：复杂系统中的信息流。施普林格，2016年11月。Google 图书 ID：p8eADQAAQBAJ。[34] Luca Faes、Gorana Mijatovic、Yuri Antonacci、Riccardo Pernice、Chiara Bar`a、Laura Sparacino、Marco Sammartino、Alberto Porta、Daniele Marinazzo 和 Sebastiano Stramaglia。随机过程网络中高阶交互的时域与频域评估新框架。*IEEE*《信号处理汇刊》，70:5766–5777，2022年。会议名称：IEEE《信号处理汇刊》。[35] Laura Sparacino、Yuri Antonacci 和 Luca Faes。生理网络中的部分信息率分解。载于*2024*年欧洲心血管振荡研究组第*13*届会议（*ESGCO*），第1–2页，2024年10月。[36] Laura Sparacino、Gorana Mijatovic、Yuri Antonacci、Leonardo Ricci、Daniele Marinazzo、Sebastiano Stramaglia 和 Luca Faes。随机过程网络中的多变量信息率分解。*Physical Review E*，112(4):044313，2025年10月。出版商：美国物理学会。[37]Thomas F. Varley。闪烁的涌现：信息论涌现方法中的局部性问题。*Entropy*，25(1):54，2023年1月。编号：1。出版商：Multidisciplinary Digital Publishing Institute。[38] Caitlin Grasso 和 Josh Bongard。赋能神经元胞自动机。载于 遗传与进化计算会议伴随论文集，GECCO '22，第108–111页，美国纽约州纽约市，2022年7月。计算机协会。[39] Caitlin Grasso 和 Josh Bongard。针对短期赋能的选择加速稳态神经元胞自动机的进化。载于 遗传与进化计算会议论文集，第147–155页，2023年7月。arXiv:2305.15220 [cs, math].[40] Hanna M. Tolle、Andrea I. Luppi、Anil K. Seth 和 Pedro A. M. Mediano。储备池计算机的进化揭示了预测能力与涌现动力学之间的双向耦合，2024年6月。arXiv:2406.19201 [q-bio].[41] Andrea I. Luppi、Pedro A. M. Mediano、Fernando E. Rosas、Judith Allanson、John D. Pickard、Robin L. Carhart-Harris、Guy B. Williams、Michael M. Craig、Paola Finoia、Adrian M. Owen、Lorina Naci、David K. Menon、Daniel Bor 和 Emmanuel A. Stamatakis。通过整合信息分解揭示人类意识的协同工作空间。*eLife*，12，2024年4月。出版商：eLife Sciences Publications Limited。

[42] Thomas F. Varley、Olaf Sporns、Nathan J. Stevenson、Pauliina Yrj¨ol¨a、Martha G. Welch、Michael M. Myers、Sampsa Vanhatalo 和 Anton Tokariev。人类婴儿大脑中协同支架的涌现。*Communications Biology*，8(1):1–13，2025年5月。出版商：自然出版集团。