

基于机器学习由暂态数据预测系统的演化

王江峰¹, 陈银霞^{2a}, 祁月盈^{2b}, 姚成贵^{2b}

(1.浙江师范大学 数学学院, 浙江 金华 312000; 2.嘉兴大学 a.教务处; b.数据科学学院, 浙江 嘉兴 314000)

摘要:如何通过少量的暂态数据去预测系统的长时间的动力学行为, 是一个重要问题. 对 Stuart-Landau 系统、布鲁塞尔振子以及 Belousov-Zhabotinsky 系统的稳态数据进行采集, 并输入到储备池神经网络里进行训练; 然后基于 3 个系统采集的少量的暂态数据, 利用已经训练好的神经网络模型, 能够对其在不同参数下长时间的动力学行为进行精准地预测. 研究结果有利于加深对复杂系统如何对外来的变化或扰动做出反应的理解.

关键词:储备池神经网络; 动力学行为; Stuart-Landau 系统; 布鲁塞尔振子; BZ 反应系统

中图分类号: O415.6; N93; O244

文献标志码: A

文章编号: 1000-2367(2024)06-0113-06

暂态动力学是复杂系统的一种暂时性行为, 指的是系统在达到稳定状态或平衡状态之前的表现, 除此之外, 也表征为系统对短暂刺激的响应. 如: 一个受到突然扰动的弹簧系统, 其在恢复到静止状态之前的阻尼振荡就是暂态行为^[1-2]. 暂态动力学在现实世界中普遍存在. 例如, 当人受到惊吓时, 通常会在几秒内恢复平静^[3]. 当成年人感染细菌或病毒时, 通常也会在几天内恢复健康^[4]. 大量研究表明, 研究暂态动力学在理解系统如何在应对扰动做出反应方面起着关键作用. 例如, 在工程领域中, 设计能够有效应对突变的系统, 掌握暂态动力学对其至关重要^[5]. 在结构工程中, 分析暂态动力学有助于预测建筑物对地震或暴风雨的反应^[6]. 在生物学中, 研究暂态动力学有助于理解生物体如何对刺激或环境的变化做出反应^[7]. 在经济学中, 市场在外部冲击或政策变化后的波动可以表征为暂态动力学^[8]. 然而在这些系统中, 控制系统的演化方程并不知道. 如何从少量的时间序列中推断系统的动力学方程, 或通过暂态动力学预测系统的长时间演化, 对于研究暂态动力学至关重要.

储备池神经网络, 一种回声状态网络(echo state network, ESN), 因其在预测复杂动力系统方面的显著能力而备受关注^[9-10]. 与传统的循环神经网络不同, 储备池神经网络是一个固定、随机生成的具有稀疏连接的循环神经网络. 这种独特的架构赋予了储备池神经网络在建模和预测动力系统方面的卓越能力. 越来越多的研究证明了这种网络的有效性. 研究表明, 储备池在准确预测低维混沌系统^[11-12]、动力学相变^[13-14]以及混沌系统的同步^[15-16]方面表现出色.

本文旨在基于少量的暂态时间序列, 使用储备池计算技术预测长时间的动力学行为. 具体为, 1. 当系统处于稳态时, 以其演化的时间序列数据作为训练数据, 输入储备池神经网络进行训练; 2. 采集暂态的时间序列数据; 3. 输入到已经训练好的储备池神经网络; 4. 基于暂态数据对系统进行长时间演化的预测.

1 参数感知的储备池神经网络

储备池神经网络的工作原理可以简要描述如下, 储备池神经网络主要由 3 个部分组成: 输入层、储备池层

收稿日期: 2024-03-20; 修回日期: 2024-04-16.

基金项目: 国家自然科学基金(11675112); 浙江省自然科学基金(LY24A050003).

作者简介: 王江峰(1998-), 男, 河南信阳人, 浙江师范大学硕士研究生, 研究方向为储备池计算.

通信作者: 陈银霞, E-mail: yinxiachen@zjxu.edu.cn.

引用本文: 王江峰, 陈银霞, 祁月盈, 等. 基于机器学习由暂态数据预测系统的演化[J]. 河南师范大学学报(自然科学版), 2024, 52(6): 113-118. (Wang Jiangfeng, Chen Yinxi, Qi Yueying, et al. Predicting the evolution of systems based on a transient data with machine learning[J]. Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition), 2024, 52(6): 113-118. DOI: 10.16366/j.cnki.1000-2367.2024.03.20.0001.)

以及输出层,如图 1 所示.对于输入层,选择 D_{in} 维的 $\mathbf{u}(t)$ 作为输入向量,是指定系统在特定参数 β 下生成的时间序列. $\mathbf{u}(t)$ 通过矩阵 $\mathbf{W}_{in} \in \mathbf{R}^{D_r \times D_{in} + 1}$ 导入储备池网络,即 $\mathbf{v} = \mathbf{W}_{in} \times [b_{in}; \mathbf{u}]$,其中矩阵 \mathbf{W}_{in} 的元素从 $[-\sigma, \sigma]$ 中随机均匀产生,一旦 \mathbf{W}_{in} 矩阵构建完成,它将一直保持不变.对于参数感知的储备池网络,将控制参数统一放入输入向量 $\mathbf{u}(t)$.储备池神经网络由 D_r 个节点组成,用 $\mathbf{r}(t)$ 表示节点的状态, $\mathbf{r}(t)$ 的更新方程如下,

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = (1 - \alpha)\mathbf{r}(t) + \alpha \tanh(\mathbf{W}_{in} \times \begin{bmatrix} b_{in} \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} + \mathbf{W} \times \mathbf{r}(t)), \quad (1)$$

其中, α 是泄漏率, $\alpha \in (0, 1]$, $b_{in} = 1$, Δt 是更新时间步长, $\mathbf{W} \in \mathbf{R}^{D_r \times D_r}$ 是储备池神经网络中节点之间的连接权重矩阵.矩阵 \mathbf{W} 为一个稀疏的随机 Erdos-Renyi 矩阵:矩阵的每个元素以概率 p 在 $[-1, 1]$ 随机采样,然后,它被再次缩放以使其谱半径等于 λ . $\mathbf{r}(t)$ 的初始条件从 $[-1, 1]$ 中随机选择.为了避免节点的初始状态对训练过程的影响,将抛掉储备池网络的暂态.对于输出层,使用线性叠加来构造输出

$$\mathbf{y}_{out}(t) = \mathbf{W}_{out} \times [1; \mathbf{u}; \mathbf{r}], \quad (2)$$

$\mathbf{y}_{out}(t) \in \mathbf{R}^{D_{out}}$, $\mathbf{W}_{out} \in \mathbf{R}^{D_{out} \times (D_{in} + D_r + 1)}$ 是输出层的权重矩阵,要通过训练获得.对于储备池神经网络,只有 \mathbf{W}_{out} 需要训练,而储备池神经网络的其他参数在构建过程中保持不变.相对于其他神经网络,所需训练的参数大大减少,这是储备池神经网络的特点.输出矩阵 \mathbf{W}_{out} 可以通过计算损失函数的最小值来获得^[17], 有

$$\mathbf{W}_{out} = \mathbf{U}\mathbf{X}'(\mathbf{X}\mathbf{X}' + \eta\mathbf{I})^{-1}, \quad (3)$$

其中, $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{(D_{in} + D_r + 1) \times T}$ 是状态矩阵,其第 k 列是 $[1; \mathbf{u}; \mathbf{r}]$, $\mathbf{U} \in \mathbf{R}^{D_{out} \times T}$ 是 1 个矩阵,其第 k 列是 $\mathbf{u}(t)$, \mathbf{I} 是单位矩阵, η 是避免过拟合的正则化系数.使用 MatLab 软件中的优化器(optimizer)对超参数 D_{in} , D_{out} , D_r , σ , α , λ , η 进行优化.

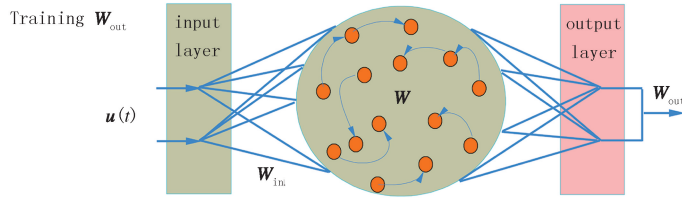


图1 储备池神经网络示意图

Fig.1 The schematic diagram for reservoir computing neural network

2 预测结果

2.1 Sturat-Landau 系统

第一个要测试的系统是 Sturat-Landau 系统^[18],其动力学方程如下

$$\frac{dZ}{dt} = (a + i\omega - |Z|^2)Z, \quad (4)$$

其中, z 是复变量, ω 是本征频率, a 是控制参数.由非线性稳定性分析可知,当 $a < 0$ 时,系统处于稳态,即 $Z = 0$;当 $a > 0$ 时,系统通过 Hopf 分岔进入周期态,且有周期解 $Z = e^{(a+i\omega)t}$.为了从此系统中获得训练数据和测试数据,用 4 阶 Runge-Kutta 算法对方程(4)进行数值解,时间步长 $\Delta t = 0.01$.在对此系统进行预测,对于储备池神经网络中的参数选择如下: $D_{in} = 3$, $D_{out} = 3$, $D_r = 1\ 000$, $\sigma = 1.95$, $\alpha = 0.26$, $\lambda = 0.7$, $\eta = 9.5 \times 10^{-5}$.

为了验证参数感知的储备池神经网络的强大预测能力,首先使用方程(4)生成训练数据,其中 a 分别取 -0.3 , -0.2 和 -0.1 .在这些参数配置下,Sturat-Landau 系统处于稳态.对于 $a = -0.3$, -0.2 , 采集长度为 2 000 的时间序列数据;而对于 $a = -0.1$, 采集长度为 1 500 的时间序列数据.如图 2 所示,将这 3 个采样状态的时间序列合并成一个 5 500 个点的训练数据集.在训练阶段,通过使用输入数据训练输出矩阵 \mathbf{W}_{out} ,即方程(3).

在预测阶段,基于特定参数下采样的暂态时间序列通过机器学习预测系统的行为.对于前面 3 个参数,

通过方程(4),每个参数采集20个点的时间序列.在预测阶段,把这20个点的时间序列当成 $\mathbf{u}(t)$,输入到储备池神经网络,即方程(1).随后,基于已经训练好的 \mathbf{W}_{out} ,通过方程(2)计算得到输出向量 $\mathbf{y}_{\text{out}}(t)$,同时将方程(1)中的控制参数 a 设置为采样参数之一.图2展示了预测结果和模型结果(方程(1))的对比.储备池神经网络在所有情况下都准确预测了系统的动力学行为.

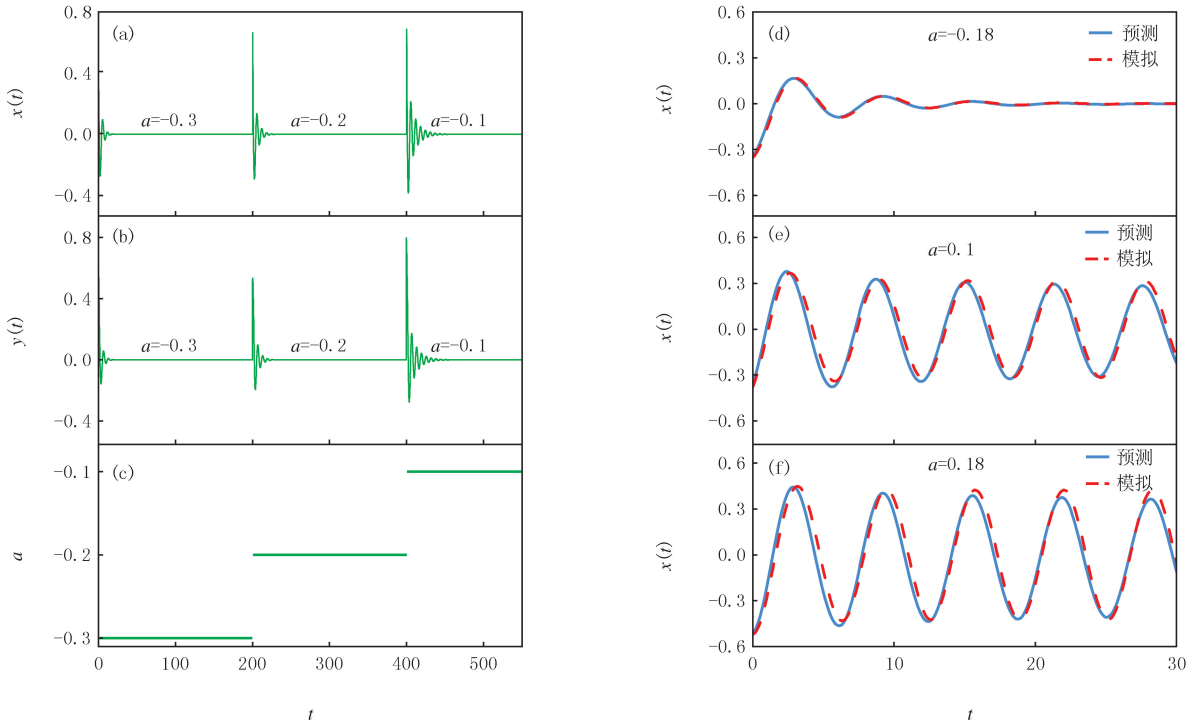


图2 不同 a 值下的训练数据(a-c)及神经网络的预测结果(d-f)

Fig.2 Training data at different values of a (a-c),and the results predicted by the neural network(d-f)

2.2 布鲁塞尔振子

为了再次测试储备池神经网络的学习和预测能力,对布鲁塞尔振子(Bruscelator)进行测试.Brusselator用来模拟自催化反应,其非线性微分方程^[19]

$$\frac{dx}{dt} = a - (b+1)x + x^2y, \frac{dy}{dt} = bx - x^2y, \quad (5)$$

其中, a, b 为控制参数.当 $b > 1 + a^2$,Brusselator发生Hopf分岔,系统由稳态进入到周期态,如图3(a)所示.首先使用方程(5)生成训练数据,其中, b 分别取1.7、1.8和1.9,生成的训练数据,见图3.图4展示了稳态和周期的预测.在预测阶段,同样基于采样特定参数下暂态时间序列通过机器学习预测系统的行为.对于6个不同的参数,通过方程(5),分别生成78个点的暂态时间序列.同样,把这78个点的时间序列当成 $\mathbf{u}(t)$ 输入到储备池神经网络进行预测,即方程(1),基于储备池神经网络中的参数 $D_{\text{in}}=3, D_{\text{out}}=3, D_r=1\ 080, \sigma=2.0, \alpha=0.119, \lambda=0.85, \eta=2.2 \times 10^{-5}$ 训练 \mathbf{W}_{out} ,再通过方程(2)计算得到的输出向量 $\mathbf{y}_{\text{out}}(t)$,同时将方程(1)中的控制参数设置为采样参数之一.储备池神经网络都准确预测了布鲁塞尔振子系统的动力学行为.

2.3 Belousov-Zhabotinsky 反应动力系统

Belousov-Zhabotinsky(BZ)反应,是非平衡热力学的经典例子^[20],其动力学方程为

$$\frac{dx}{dt} = a - x - \frac{4xy}{1+x^2}, \frac{dy}{dt} = bx(1 - \frac{y}{1+x^2}), \quad (6)$$

其中, a, b 为控制参数.当 $a=10$,BZ反应系统随着参数 b 的减少系统也发生Hopf分岔,系统由稳态进入到周期态.使用方程(6)生成训练数据,见附录图S1.训练数据输入到储备池神经网络,基于参数 $D_{\text{in}}=3, D_{\text{out}}=3, D_r=1\ 100, \sigma=2.0, \alpha=0.12, \lambda=0.24, \eta=2.0 \times 10^{-5}$ 训练 \mathbf{W}_{out} .

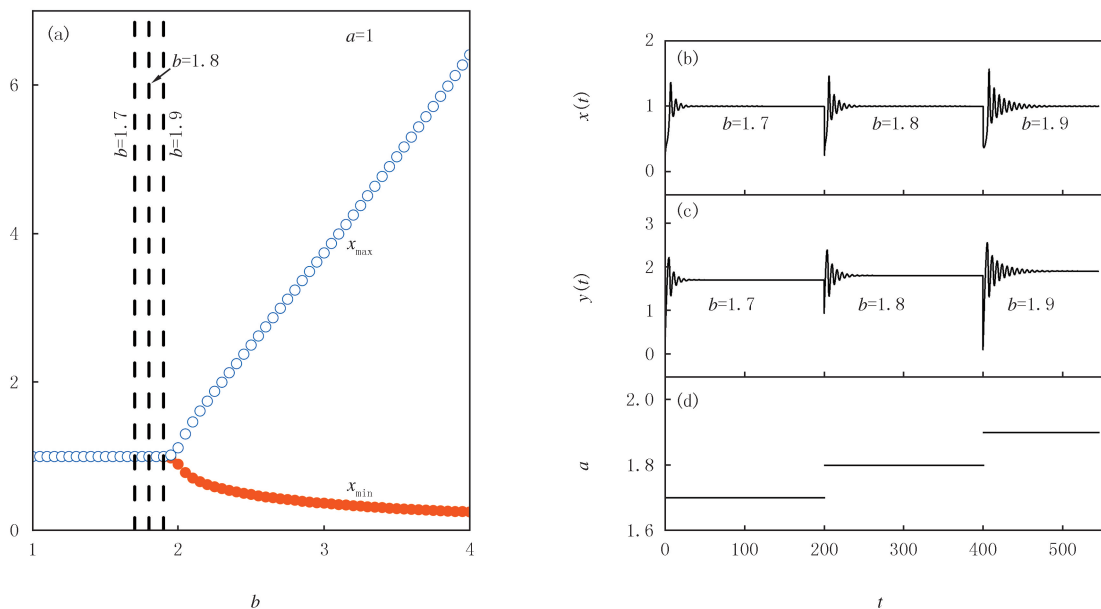


图3 方程(5)的分岔图(a)及训练数据(b-d)
Fig.3 Bifurcation diagram of Eq. (5) (a) and training data(b-d)

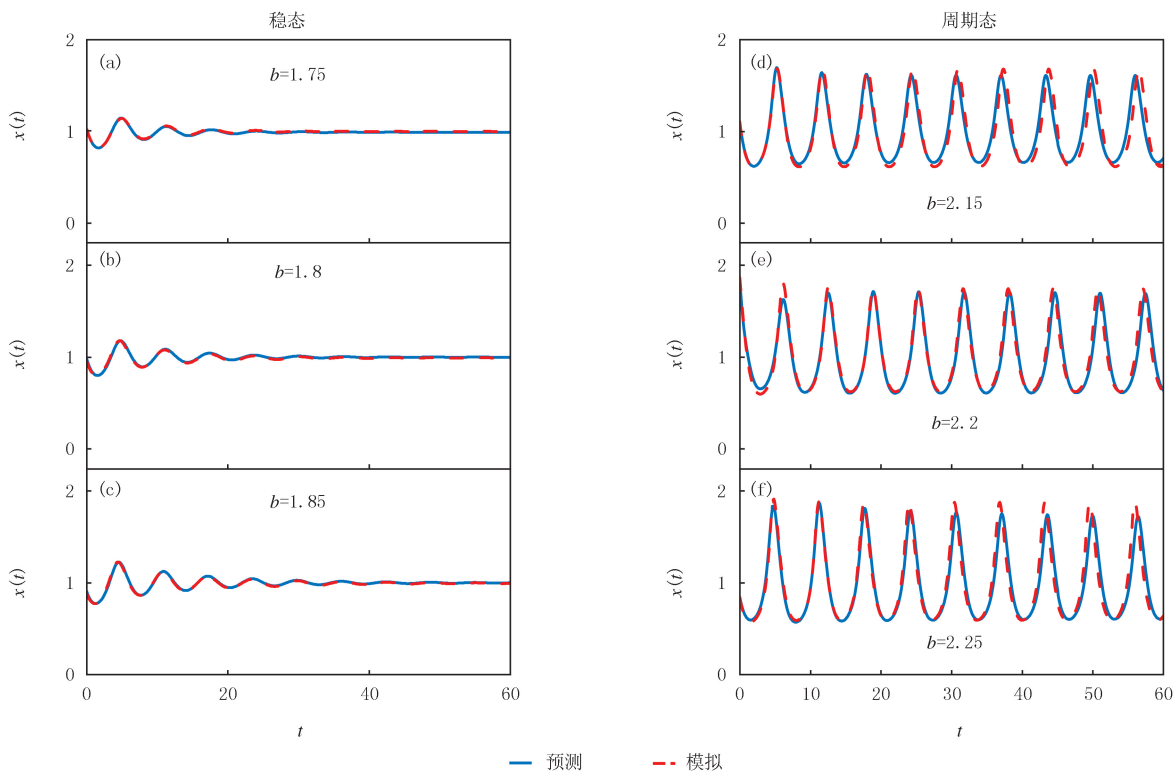


图4 不同 b 值方程(5)的暂态时间序列及利用储备神经网络预测的系统长时间演变
Fig.4 The transient time seirise of Eq. (5) and the results predicted by the neural network at different b

附录图 S2 展示参数感知储备池神经网络对 BZ 反应系统动力学行为的预测能力.与 Brusselator 系统结果类似,储备池神经网络准确预测 Belousov-Zhabotinsky 反应系统的动力学行为.

3 总结与展望

本文利用储备池神经网络对 Sturat-Landau 系统、Brusselator 系统以及 Belousov-Zhabotinsky 反应动力系统的动力学行为进行预测,通过采集各系统处于稳态时的时间序列数据作为训练数据输入到储备池神经网络进行学习,然后在各个系统中,采集少量的暂态数据,通过此暂态数据可以利用已经训练好的储备池神经网络预测其长时间的动力学行为,不管暂态数据是来自稳态的还是周期态的,都能精准地预测其动力系统的动力学行为。

鉴于暂态动力学在自然界和工程领域非常常见且很重要,这一方法在处理复杂系统的暂态动力学问题上为未来研究暂态动力学提供了新的方向.如:在电力系统中,如何通过暂态数据去预测电力系统是否会振荡,将对维护电力的安全起着非常重要的作用^[21].在未知模型的多体系统中,能否通过暂态数据预测系统的相变点,这对研究多体系统的动力学行为有非常重要的意义^[22].本文展示了通过暂态的时间序列预测的可行性.这为复杂动态系统中无模型预测相变提供了另一种思路。

附录见电子版(DOI:10.16366/j.cnki.1000-2367.2024.03.20.0001).

参 考 文 献

- [1] OTT E. Chaos in dynamical systems[M]. 2nd ed. New York: Cambridge University Press, 2002.
- [2] STROGATZ S H. Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering[M]. Boca Raton: CRC Press, 2002.
- [3] SHEPPES G, SURI G, GROSS J J. Emotion regulation and psychopathology[J]. Annual Review of Clinical Psychology, 2015, 11: 379-405.
- [4] CHEN X Y, LIU S S, GORAYA M U, et al. Host immune response to influenza A virus infection[J]. Frontiers in Immunology, 2018, 9: 320.
- [5] TÉL T, LAI Y C. Chaotic transients in spatially extended systems[J]. Physics Reports, 2008, 460(6): 245-275.
- [6] BOZORGNIA Y, BERTERO V V. Earthquake engineering: from engineering seismology to performance based engineering[M]. New York: CRC Press, 2008.
- [7] HASTINGS A, ABBOTT K C, CUDDINGTON K, et al. Transient phenomena in ecology[J]. Science, 2018, 361(6406): eaat6412.
- [8] YAO C G, SUN J Q, JIN J, et al. The power law statistics of the spiking timing in a neuronal network[J]. Chaos, Solitons & Fractals, 2023, 172: 113598.
- [9] LUKOŠEVIČIUS M. A practical guide to applying echo state networks[M]// Lecture Notes in Computer Science. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012: 659-686.
- [10] LUKOŠEVIČIUS M, JAEGER H. Reservoir computing approaches to recurrent neural network training[J]. Computer Science Review, 2009, 3(3): 127-149.
- [11] SHI L F, WANG H T, WANG S J, et al. Predicting nonsmooth chaotic dynamics by reservoir computing[J]. Physical Review E, 2024, 109: 014214.
- [12] LI X Z, SHENG B, ZHANG M. Predicting the dynamical behaviors for chaotic semiconductor lasers by reservoir computing[J]. Optics Letters, 2022, 47(11): 2822-2825.
- [13] ZIMMERMANN R S, PARLITZ U. Observing spatio-temporal dynamics of excitable media using reservoir computing[J]. Chaos, 2018, 28(4): 043118.
- [14] NI Q, TANG M, LIU Y, et al. Machine learning dynamical phase transitions in complex networks[J]. Physical Review E, 2019, 100: 052312.
- [15] XIAO R, KONG L W, SUN Z K, et al. Predicting amplitude death with machine learning[J]. Physical Review E, 2021, 104: 014205.
- [15] CHEN X L, WENG T F, YANG H J. Synchronization of spatiotemporal chaos and reservoir computing via scalar signals[J]. Chaos, Solitons & Fractals, 2023, 169: 113314.
- [17] WENG T F, YANG H J, GU C G, et al. Synchronization of chaotic systems and their machine-learning models[J]. Physical Review E, 2019, 99: 042203.
- [18] 贺苏娟, 邹为. 平均场反馈下全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统的可解集体动力学[J]. 物理学报, 2023, 72(20): 190-199.
HE S J, ZOU W. Solvable collective dynamics of globally coupled Stuart-Landau limit-cycle systems under mean-field feedback[J]. Acta Physica Sinica, 2023, 72(20): 190-199.
- [19] 于晋臣, 李树彬. Bmselator 系统的 Hopf 分岔[J]. 山东科学, 2007, 20: 19-29.

YU J C, LI S B. Hopf bifurcation of Brusselator system[J]. Shandong Science, 2007, 20: 19-29.

[20] 江成瑜. Belousov-Zhabotinskii 反应模型的复杂动态[D]. 北京: 北京化工大学, 2011.

[21] HALEKOTTE L, VANSELOW A, FEUDEL U. Transient chaos enforces uncertainty in the British power grid[J]. Journal of Physics: Complexity, 2021, 2(3): 035015.

[22] MA, PANG, WANG R, et al. Phase transition study meets machine learning[J]. Chinese Physics Letters, 2023, 40(12): 122101.

Predicting the evolution of systems based on a transient data with machine learning

Wang Jiangfeng¹, Chen Yinxia^{2a}, Qi Yueying^{2b}, Yao Chenggui^{2b}

(1. School of Mathematical Sciences, Zhejiang Normal University, Jinhua 312000, China; 2. a. Registrar's Office;

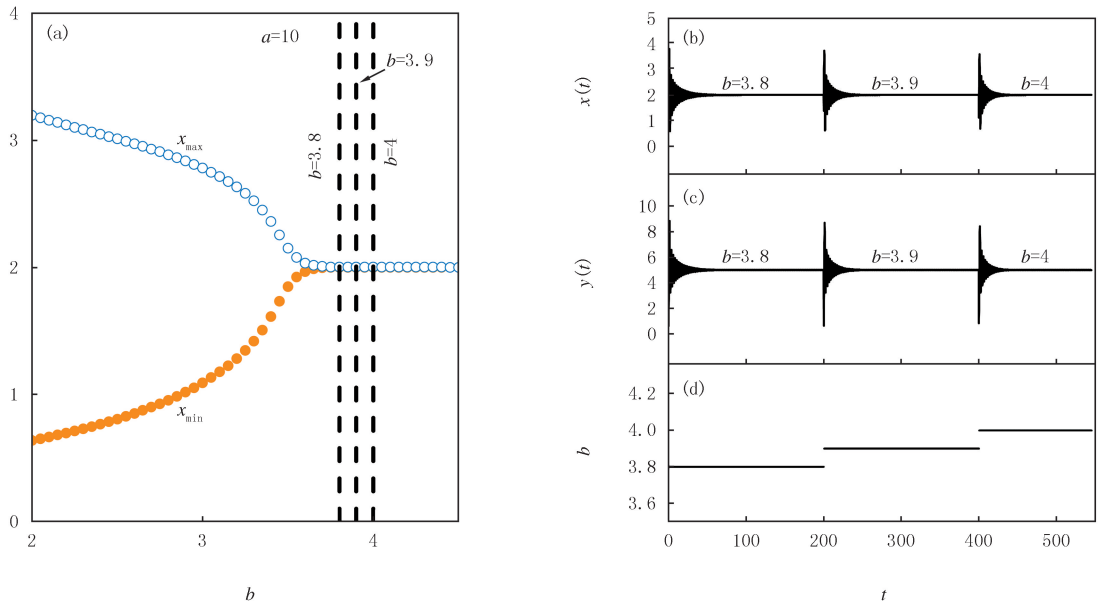
b. College of Data Science, Jiaying University, Jiaying 314000, China)

Abstract: Predicting the dynamic behavior of a system based on transient data from unknown dynamic equations is an important problem. Firstly, we collect steady-state data from the Stuart-Landau system, the Brusselator, and the Belousov-Zhabotinsky system, and put them into a reservoir neural network for training. Then, basing on the transient data collected from the three systems, and using the trained neural network model, we can accurately predict their long-term dynamic behavior under different parameters. The findings of this study play an important role in understanding how systems respond to external changes, disturbances, or inputs, thus highlighting the significance of studying transient dynamics.

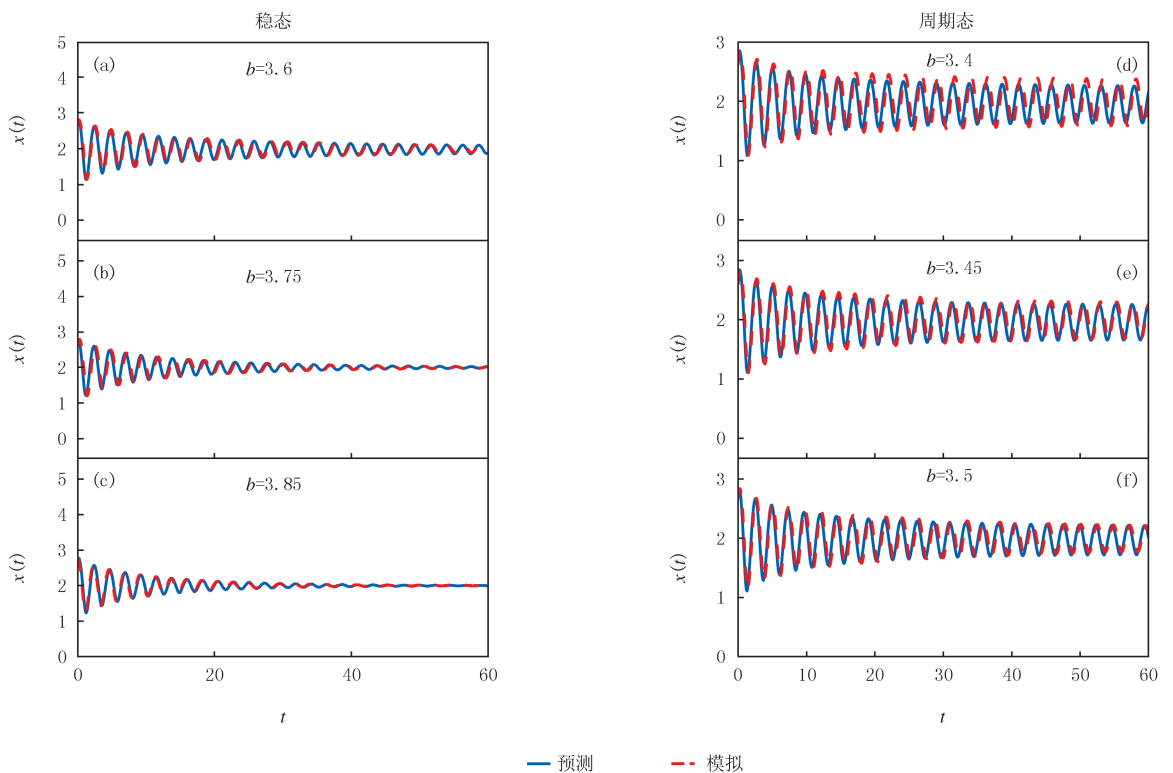
Keywords: reservoir computing neural networks; dynamic behavior; Stuart-Landau system; Brusselator; Belousov-Zhabotinsky reaction system

[责任编辑 杨浦 刘洋]

附录



图S1 方程(6)的分岔图(a)及训练数据(b-d)
Fig.S1 Bifurcation diagram of Eq. (6) (a) and training data(b-d)



图S2 不同 b 值方程(6)的暂态时间序列及利用储备神经网络预测的系统长时间演变
Fig.S2 The transient time seirse of Eq. (6) and the results predicted by the neural network at different b