神经网络解 Lorenz63 方程

MG21210021 李庆春

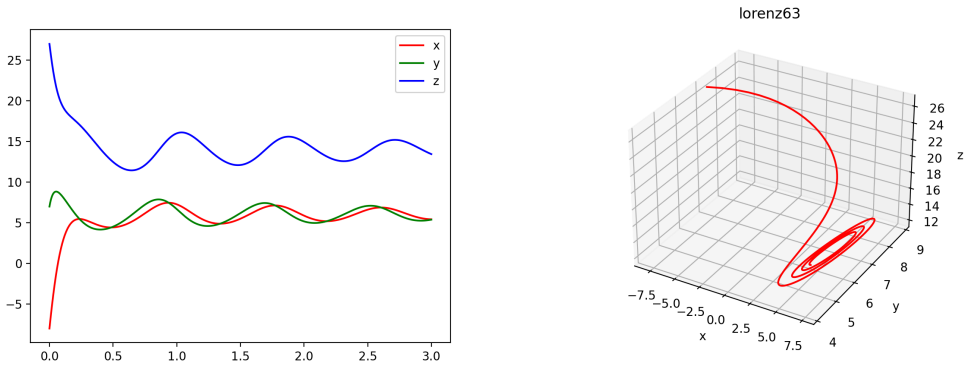
2023 年 3 月 18 日

1 Lorenz63 方程简述

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\ \frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \\ \frac{dz}{dt} = xy - \beta z \end{cases} \tag{1}$$

2 非混沌情形

$\rho = 15, \sigma = 10, \beta = \frac{8}{3}$ 初值：[-8., 7., 27.]，RK 方法的数值解如下图：



(a) lorenz63 二维视图.

(b) lorenz63 三维视图.

图 1: lorenz63-RK

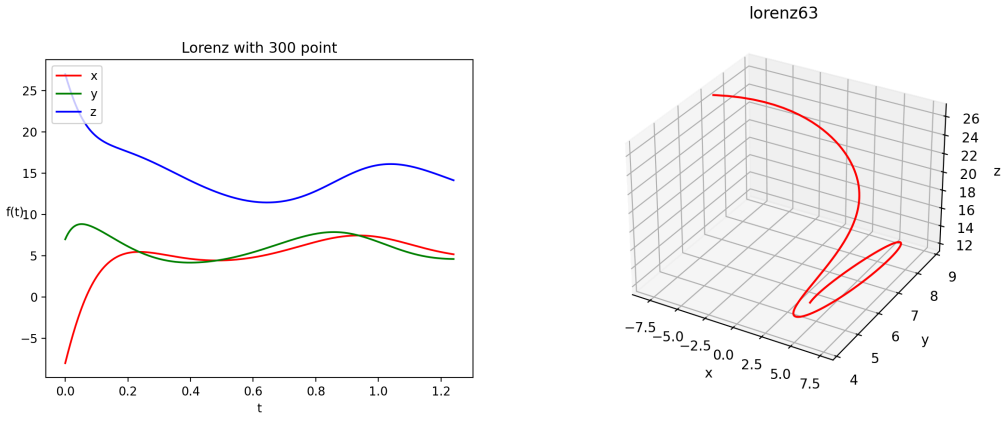
2.1 不带观测的神经网络

损失函数使用均方误差（MSE），网络结构：[1, 32, 32, 3]，初值：[-8, 7, 27]，迭代轮数：500000，对训练数据进行正规化，关键代码如下：

```
scheduler = torch.optim.lr_scheduler.ReduceLROnPlateau(optimizer,
```

```
    min_lr=1e-7, mode='min',factor=0.5,patience=50000,verbose=True)
self.loss_func = nn.MSELoss(reduction='mean')

layers = [1, 32, 32, 3]

total_points = 300
x_lb = torch.tensor(0.)
x_ub = torch.tensor(1.24)

rho = torch.tensor(15.0)
sigma = torch.tensor(10.0)
beta = torch.tensor(8.0 / 3.0)

x_train_bc = torch.tensor([[0.]])
y_train_bc = torch.tensor([[-8., 7., 27.]])

epochs = 500000
```

通过调整区间长度发现，最多可训练出 [0, 1.24] 的结果，误差在 10^{-4} 量级，如下图：



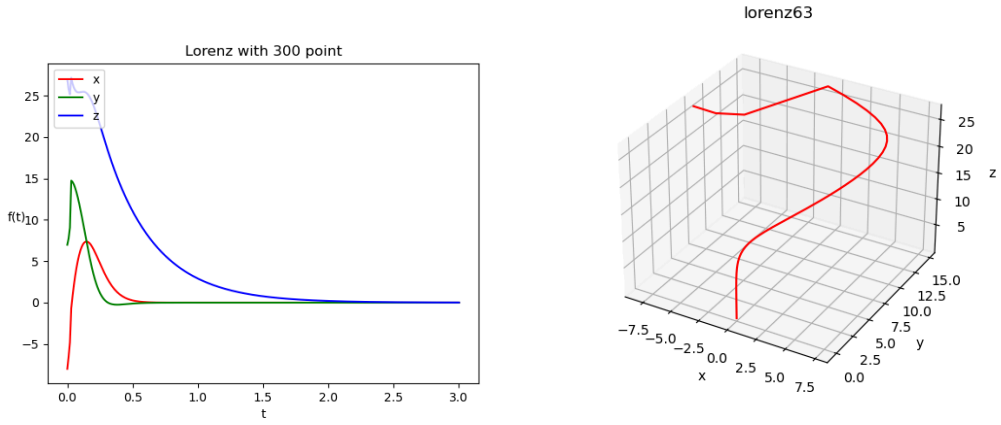
(a) lorenz63 二维视图.　　(b) lorenz63 三维视图.

图 2: lorenz63-DNN

如果区间较大，则训练不出想要的结果，神经网络会趋于零，如下面的图展示的是 [0, 3] 的训练结果：

3 混沌情形

$\rho = 28, \sigma = 10, \beta = \frac{8}{3}$ ，初值 [-4., 7., 15.]，RK 方法的数值解如下图：（暂时没贴）



(a) lorenz63 二维视图.　　(b) lorenz63 三维视图.

图 3: lorenz63-DNN

3.1 整数阶 Lorenz 方程

接下来用神经网络训练，离散步长 h=0.005，区间 [0, 1.5]，观测值如下：

t	x	y	z
0.0000	-4.0000	7.0000	15.0000
0.5000	5.6789	-2.6593	33.0093
1.0000	-12.0143	-17.4640	24.3640
1.500	-1.1838	-1.6864	15.08598

3.2 分数阶 Lorenz 方程

3.2.1 Caputo 导数及数值逼近

Caputo 分数阶导数的定义：

$$ {}_aD_t^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau \qquad (n-1 \le \alpha < n). \tag{2} $$

当 a=0 时，简记为 D^{α}。
分数阶微积分的差商逼近格式可以写成如下统一的形式：

$$ D^{\alpha} f(t_n) \approx h^{-\alpha} \sum_{k=0}^{N} c_{n,k} f_k \tag{3} $$

L1 算法（即 $0 \le \alpha < 1$ ，上式中 N=n）：

$$ c_{n,k} = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \begin{cases} -c_{n-1}, & k = 0; \\ c_{n-k} - c_{n-k-1}, & 1 \le k \le n-1; \\ 1, & k = n; \\ 0, & else. \end{cases} \tag{4} $$

$$(D_t^\alpha f(t_n))_{L1} = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)h^\alpha}\sum_{k=0}^{n-1} c_k(f_{n-k} - f_{n-k-1}) \tag{5}$$

其中，$c_l = (l+1)^{1-\alpha} - l^{1-\alpha}$，fPINN 论文中另一种等价表述如下：

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^\gamma \tilde{u}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t^\gamma} \approx \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)(\Delta t)^\gamma}\\ &\left\{-c_{\lceil \lambda t\rceil -1}\tilde{u}(\boldsymbol{x},0) + c_0\tilde{u}(\boldsymbol{x},t) + \sum_{k=1}^{\lceil \lambda t\rceil -1}(c_{\lceil \lambda t\rceil -k} - c_{\lceil \lambda t\rceil -k-1})\tilde{u}(\boldsymbol{x},k\Delta t)\right\},\\ &0<\gamma<1\end{aligned} \tag{6}$$

时间步长 $\Delta t = t/\lceil \lambda t\rceil \approx 1/\lambda$，$\lceil\cdot\rceil$ 是向上取整函数，表示离散化后的区间数，相当于 L1 算法公式中的 n；常量因子 λ 决定着步长，如 $\lambda = 200$，则意味着把单位 1 长度划分为 200 个小区间。由于计算机在运算时，存在舍入误差，所以 $c_0\tilde{u}(\boldsymbol{x}, n\Delta t)$ 写成 $c_0\tilde{u}(\boldsymbol{x},t)$。

(这里有疑问，t=0 的导数是不是没法计算)

所以，可先对每个训练点计算出其时间划分，然后拼成一个大向量。

如果不引入观测，训练结果的趋势是趋于 0，不符合预期；

3.2.2 分数阶常微分方程数值解法

（直接法）考虑齐次初值条件的分数阶微分方程：

$$\begin{cases}\frac{\partial^\alpha y(t)}{\partial t^\alpha} = f(t, y(t)), \quad t\in[0,T],\\ y^{(k)}(0) = 0, \quad k = 0,1,\cdots,m-1.\end{cases} \tag{7}$$

则直接应用分数阶导数的一般差商逼近公式得：

$$h^{-\alpha}\sum_{k=0}^{N} c_{n,k}y_k = f(t_n, y_n), \quad n = 0,1,\cdots,[t/h] \tag{8}$$

上式左边为 y 在 t 处的 α 阶导数，注意此时将 [0,t] 分成了 n 份，每份长度为 h，t 对应 t_n，$y(t_n)$ 对应 y_n。则上面方程组可以按下面的方式逐点计算：

$$y_N = \frac{h^\alpha}{c_{n,N}}f(t_n,y_n) - \frac{1}{c_{n,N}}\sum_{k=1}^{N-1} c_{n,k}y_k, \quad n = 1,\cdots,[T/h] \tag{9}$$

其中，N=n(对应到 G1 算法、D 算法、L1 算法、线性多步法) 或 N=n+1（对应到 G2 算法、L2 算法）。上式中，由于 $y_0 = 0$，所以求和项从 k=1 开始，对于一般的 L1 算法，可写成如下形式：

$$\begin{aligned}y_n &= \frac{h^\alpha}{c_{n,n}}f(t_n,y_n) - \frac{1}{c_{n,n}}\sum_{k=0}^{n-1} c_{n,k}y_k, \quad n = 1,\cdots,[T/h]\\ &= \Gamma(2-\alpha)h^\alpha f(t_n,y_n) - \sum_{k=1}^{n-1}(c_{n-k} - c_{n-k-1})y_k + c_{n-1}y_0\\ &= \Gamma(2-\alpha)h^\alpha f(t_n,y_n) - \sum_{k=1}^{n-1}[(n-k+1)^{1-\alpha} - 2(n-k)^{1-\alpha} + (n-k-1)^{1-\alpha}]y_k +\\ &\quad [n^{1-\alpha} - (n-1)^{1-\alpha}]y_0\end{aligned} \tag{10}$$

3.2.3 简单的例子

已知正弦、余弦函数的整数阶微分表达式分别为

$$\frac{d^k}{dt^k}[\sin at] = a^k \sin(at + \frac{k\pi}{2}), \quad \frac{d^k}{dt^k}[\cos at] = a^k \cos(at + \frac{k\pi}{2}) \tag{11}$$

由 Cauchy 积分公式可以证明，对于分数阶的微分方程来说，当 k 为分数时，上述公式仍然成立。所以考虑如下分数阶微分方程：

$$\begin{cases} \frac{d^\alpha u}{dt^\alpha} = \sin(t + \frac{\alpha\pi}{2}), & 0 < \alpha < 1 \\ u(0) = 0 \end{cases} \tag{12}$$

（这里暂时不知道解析解，所以作废）

对于 $f(t) = t^\lambda, \lambda > -1$，n 为大于 α 的最小整数，则其 α 阶 Caputo 导数为：

$$\begin{aligned} D^\alpha t^\lambda &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} \frac{d^n \tau^\lambda}{d\tau^n} d\tau \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} \lambda(\lambda-1)\cdots(\lambda-n+1) t^{\lambda-n} d\tau \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(n-\alpha)\Gamma(\lambda-n+1)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} t^{\lambda-n} d\tau \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(n-\alpha)\Gamma(\lambda-n+1)} t^{\lambda-\alpha} \int_0^1 (1-\tau)^{n-\alpha-1} t^{\lambda-n} d\tau \quad (substitution) \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(n-\alpha)\Gamma(\lambda-n+1)} t^{\lambda-\alpha} B(n-\alpha, \lambda-n+1) \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(n-\alpha)\Gamma(\lambda-n+1)} t^{\lambda-\alpha} \frac{\Gamma(n-\alpha)\Gamma(\lambda-n+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} \\ &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} t^{\lambda-\alpha} \end{aligned} \tag{13}$$

这和 R-L 导数一致，这是由于 $D^n t^\lambda$ 在区间 $[0, +\infty)$ 上连续，且 $D^k f(0) = 0, k = 0, 1, \cdots, n-1$，所以 D^n 和 $D^{-\nu}$ 可交换。

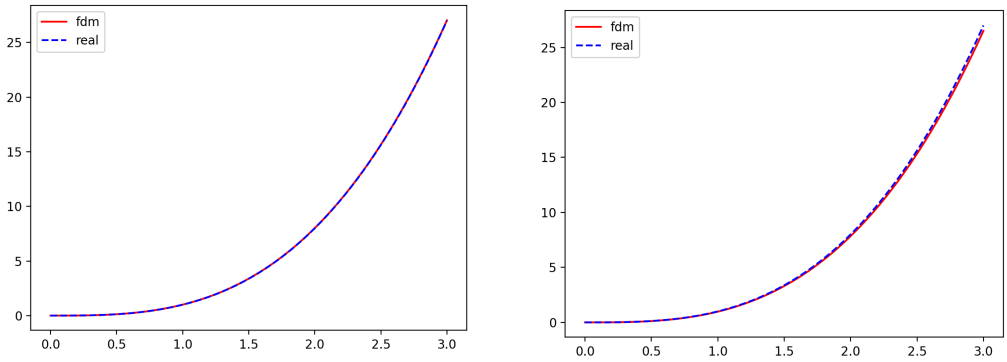
例子：考虑 $y = t^3$，则对应的分数阶微分方程为：

$$\begin{cases} D^\alpha t^3 = \frac{6}{\Gamma(4-\alpha)} t^{3-\alpha} \\ y(0) = 0 \end{cases} \tag{14}$$

写成隐式的：

$$\begin{cases} D^\alpha u = \frac{6u}{\Gamma(4-\alpha)} t^{-\alpha} \\ u(0) = 0.000001 \end{cases} \tag{15}$$

数值计算结果如下：(这里有疑问，时间是不是一定要从 0 开始，变成时发现如果不是 0 作为离散的初始点，则得不到结果)



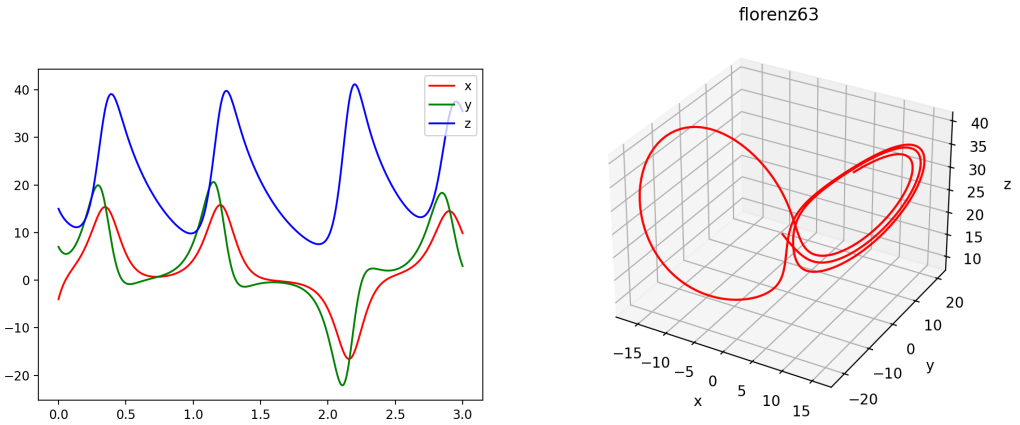
(a) 显示　　(b) 隐式

图 4: ODE-FDM

3.2.4 分数阶 Lorenz63 方程

$$\begin{cases} \frac{d^\alpha x}{dt^\alpha} = \sigma(y-x) \\ \frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} = x(\rho-z)-y \\ \frac{d^\alpha z}{dt^\alpha} = xy-\beta z \end{cases} \tag{16}$$

取 $\alpha = 0.99$，离散步长 h=0.005，区间 [0, 3]，隐式收敛阈值 $\epsilon = 0.001$，初值 [-4., 7., 15.]，数值计算结果如下：



(a) 分数阶 lorenz63-2D　　(b) 分数阶 lorenz63-3D

图 5: lorenz63-FDM

接下来用神经网络训练，先用参数 $\alpha = 0.99$，离散步长 h=0.005，区间 [0, 1.5]，观测值如下：

t	x	y	z
0.0050	-3.4659	6.7226	14.6728
0.2500	10.4394	17.7745	17.9601
0.5000	5.6236	-0.6432	31.2168
0.7500	0.7111	0.8086	15.8068
1.0000	4.2548	7.9222	9.8927
1.2500	13.9364	7.5091	39.7435
1.5000	0.5546	-0.6693	20.8581