

从稀疏识别到弱形式：数据驱动建模方法初探

关于两篇文献阅读、学习与复现的结果的汇报

杨舒云

2025 年 10 月 29 日

动力学控制与地面模拟研究室

内容大纲

文献 [1]: Data-driven modeling of multi-stable origami structures:Extracting the global governing equation and exploring the complex dynamics

文献 [2]: Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems

1. 背景
2. SINDy: Sparse Identification of Nonlinear Dynamics
3. 基于 B 样条 + Galerkin 方法与子集选择的系统辨识方法
4. 增强型 SINDy: 基于弱形式封装的抗噪稀疏识别
5. 总结

1. 背景

从参数估计视角看最小二乘

最直接的假设是，目标值 y 可以通过特征的线性组合来近似。我们的模型 $h_{\theta}(\mathbf{x})$ 定义为：

$$h_{\theta}(\mathbf{x}) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\theta}$$

最小二乘法采用均方误差作为损失函数。对于整个数据集，其总误差为所有样本的残差平方和：

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^m (h_{\theta}(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}\|_2^2$$

学习的过程，即是寻找一组最优参数 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ ，使得损失函数 $J(\boldsymbol{\theta})$ 最小化：

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

最小二乘法的几何诠释——列空间上的正交投影

求解不存在的巨型方程组 $Ax = b$, 实际应用中常出现这类不相容问题, 尽管不会出现如此巨大的系数矩阵。当方程组的解不存在但又需要求解时, 最好的方法是寻找 x , 使得 Ax 尽可能地接近 b 。

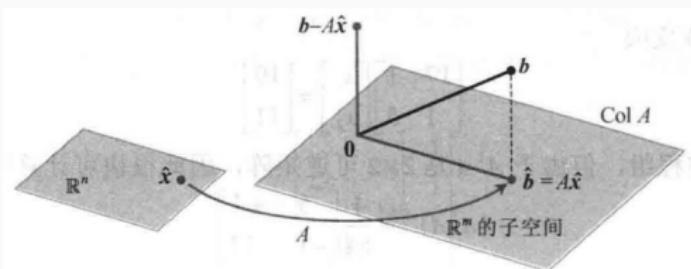


图 1: 最小二乘法的几何诠释——列空间上的正交投影

考虑 Ax 作为 b 的一个近似。 b 和 Ax 之间的距离越小, $\|b - Ax\|$ 近似程度越好。一般的最小二乘问题就是找出使 $\|b - Ax\|$ 尽量小的 x 。

1.1 视为回归问题的建模问题 1

让我们以一个经典的单自由度非线性振子为例，其动力学方程为：

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + k_1x + k_3x^3 = f(t)$$

已知随时间变化的系统状态测量值 $x(t)$ ，以及外部输入 $f(t)$ ，辨识出未知的物理参数 $\{m, c, k_1, k_3\}$ 。

我们将 $f(t)$ 视为“目标”，将其他项视为“特征”：

$$f(t_i) = m\ddot{x}(t_i) + c\dot{x}(t_i) + k_1x(t_i) + k_3x(t_i)^3$$

待辨识参数 θ : 这是我们希望通过回归求解的未知物理参数向量。

$$\theta = \begin{bmatrix} m \\ c \\ k_1 \\ k_3 \end{bmatrix}$$

1.1 视为回归问题的建模问题 2

特征库 \mathbf{X} : 这是由系统在所有 m 个采样时刻的状态及其函数组成的矩阵。每一列代表一个“候选模型”或“特征”，每一行代表一个时间快照。

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \ddot{x}(t_1) & \dot{x}(t_1) & x(t_1) & x^3(t_1) \\ \ddot{x}(t_2) & \dot{x}(t_2) & x(t_2) & x^3(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \ddot{x}(t_m) & \dot{x}(t_m) & x(t_m) & x^3(t_m) \end{bmatrix}$$

观测目标 \mathbf{y} : 这是我们在每个时刻测量的外部激励力向量。

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} f(t_1) \\ f(t_2) \\ \vdots \\ f(t_m) \end{bmatrix}$$

1.1 视为回归问题的建模问题 3

- **非线性**：即使物理系统是非线性的（因为包含 x^3 项），我们依然可以将其转化为一个在待求参数上是线性的回归问题。这是数据驱动建模的一项基本思想。
- 这个例子的前提是我们预先知道方程中应该包含 $\ddot{x}, \dot{x}, x, x^3$ 这四项。但如果面对一个未知的复杂系统，我们如何确定应该包含哪些候选函数项呢？
- **稀疏辨识**：我们能否构建一个包含所有可能的非线性项（如 $x, x^2, x^3, \sin(x), \dots$ ）的超大特征矩阵 \mathbf{X} ，然后让算法自动地从中挑选出那些真正起作用的项（即系数不为零的项）？

1.2 来自文献的“实际”问题

由此提出了用于测试本次各种算法的一个问题（来自文献 [1]）：

- 通过设置真实参数为 $m = 1, c = 0.3, k_1 = -1, k_3 = 1$, 然后进行 **仿真** 来得到用于测试的“干净实验数据”。
- 实际数据总是被噪声污染的，所有这里的数据加入了信噪比 (SNR) 为 40 dB 的高斯白噪声，得到“**带噪声实验数据**”。
- 我们既不知道方程右侧包含哪些项，也不知道这些项前面的系数。我们拥有的，仅仅是实验测量数据——离散时间点上的系统状态 $x(t_i)$ 和外部激励 $f(t_i)$ ，用来在一个巨大的模型库中寻 **找一个简洁、具有物理解释性的表达**。
- 数值微分会急剧放大噪声，导致特征矩阵被严重污染，最终使得参数辨识结果出现巨大偏差甚至完全失效。如何开发一种 **抗噪声的辨识框架**？

注意：由于文献 [1] 没有公开它的数据集，我没法使用它基于真实折纸结构实验的数据来验证算法（遗憾）。

2. SINDy: Sparse Identification of Nonlinear Dynamics

2.1 SINDy 的基本假设和算法实现 1

SINDy 的基石在于一个关键假设：尽管动力学行为可能极其复杂（如混沌），但其底层的控制微分方程在一个足够丰富的候选函数库中是稀疏的。这意味着，决定系统演化的关键物理项其实只有少数几个。

动力系统的辨识问题被转化为了一个线性系统：

$$\dot{\mathbf{X}} = \Theta(\mathbf{X})\Xi$$

其中， $\Xi = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n]$ 是一个待求解的系数矩阵。该矩阵的每一列 ξ_k 对应于状态变量 \dot{x}_k 的控制方程。由于稀疏性假设，我们期望 Ξ 矩阵中的绝大多数元素都为零。

SINDy 的巧妙之处在于，它将复杂的非线性动力学“**方程发现**”问题，转化为了一个高维的、但解是稀疏的线性回归问题。

关键：稀疏回归 → 筛选出主导项；再做一次参数估计 → 主导项系数。

2.1 SINDy 的基本假设和算法实现 2

例如，对于杜芬振子辨识问题，如果我们将激励力 $f(t)$ 视为输入 $u(t)$ ，即 $u(t) = 13 \sin(1.2t)$ 。

辨识目标： $\ddot{x} = g(x, \dot{x}, u)$

左侧向量：数值计算得到的加速度 \ddot{x} 。

增广库 Θ ：包含 x, \dot{x}, x^3, u 等候选列。

SINDy-c 的预期结果：在求解 $\ddot{x} \approx \Theta \xi$ 后，我们期望得到的稀疏系数向量 ξ 在对应于 \dot{x}, x, x^3, u 的位置有显著的非零值，从而重构出方程：

$$\ddot{x} = -\frac{c}{m}\dot{x} - \frac{k_1}{m}x - \frac{k_3}{m}x^3 + \frac{1}{m}u(t)$$

这就成功地将外部输入分离出来，并辨识了系统的其他部分。

2.2 如何求解稀疏系数?

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator):

$$\min_{\xi_k} \underbrace{\|\dot{\mathbf{X}}_k - \Theta \xi_k\|_2^2}_{\text{误差项/拟合优度}} + \underbrace{\lambda \|\xi_k\|_1}_{L1 \text{ 正则化项/稀疏性惩罚}}$$

- 序列阈值最小二乘法 (STLSQ):

$$\min_{\xi_k} \|\dot{\mathbf{X}}_k - \Theta \xi_k\|_2^2 + \alpha \|\xi_k\|_2^2$$

设定一个阈值 λ 。所有绝对值小于 λ 的系数被认为是噪声或不重要的项，直接强制设为零。

For each $\xi_{k,j}$, if $|\xi_{k,j}| < \lambda$, set $\xi_{k,j} = 0$

精炼拟合与迭代。

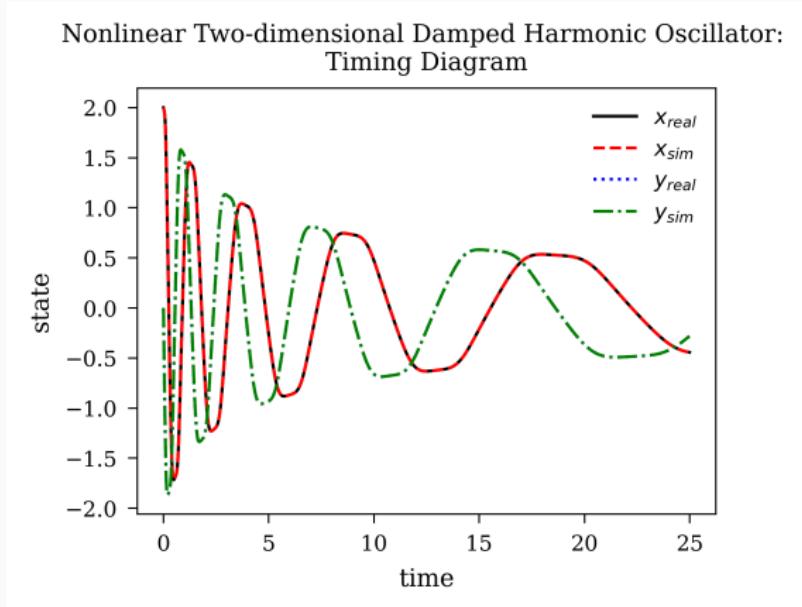
2.3 原型 LASSO 方法的实现与结果

- 我的方法：SG 导数估计、 x 与 x^3 列正交化、尺度标准化、TimeSeriesSplit、LASSO、引入一点点 Ridge、.....
- 真实参数： $m = 1, c = 0.3, k_1 = -1, k_3 = 1$
- 文献 [1] 结果：Moreover, the identified parameters
 $m = 1.0005, c = 0.2978, k_1 = -1.003$, and $k_3 = 0.9995$
also agree well with the true model.
- 我的结果（为什么这么差）：
 $m = 1.03668, c = 0.300564, k_1 = -0.622939, k_3 = 0.997456$
- 模型性能： $R^2 = 0.988566$

没有实现真正的稀疏——系数泄露到了更高次项里。（是 LASSO 的问题吗？）

2.4 关于 SINDy 的进一步讨论（复现文献 [2] 里的结果）

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1 & 2 \\ -2 & -0.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^3 \\ y^3 \end{bmatrix}$$



2.4 关于 SINDy 的进一步讨论 (复现文献 [2] 里的结果)

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x), \\ \dot{y} = x(\rho - z) - y, \\ \dot{z} = xy - \beta z, \end{cases} \quad \sigma = 10, \rho = 28, \beta = \frac{8}{3}.$$

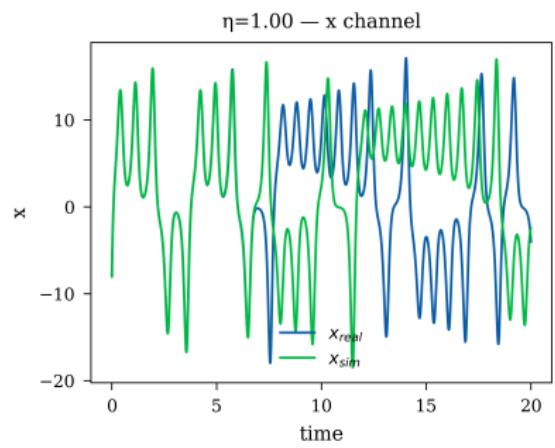
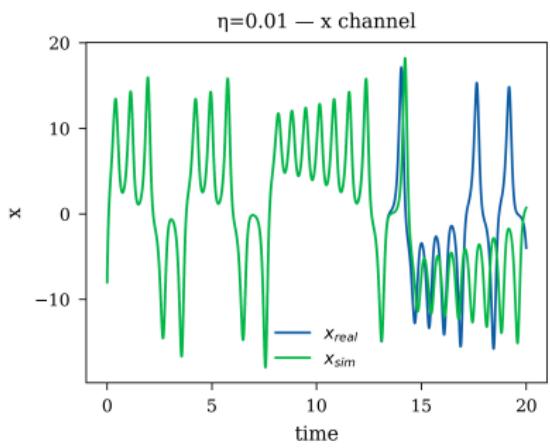
$$(x_0, y_0, z_0) = (-8, 8, 27)$$

In the noisy case:

$$\dot{x}_{\text{meas}} = \dot{x} + \eta, \quad x_{\text{meas}} = x + \eta,$$

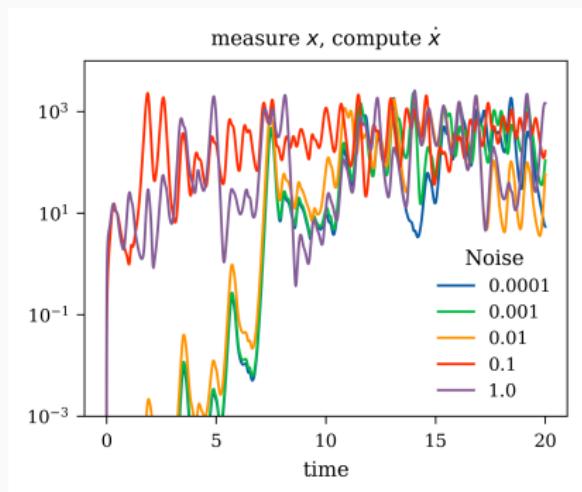
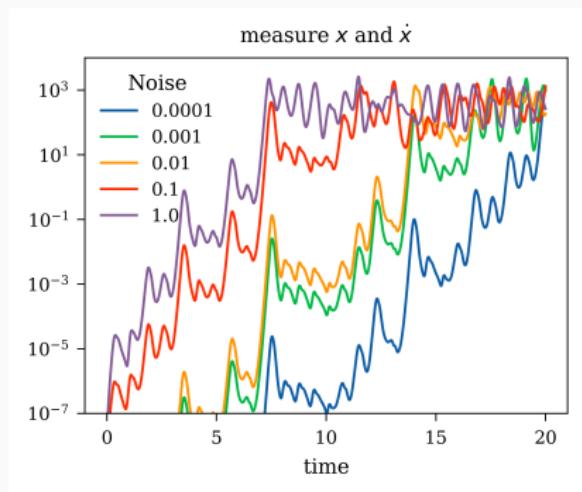
where different noise levels η are added either to the derivatives or to the states. Derivatives from noisy states are computed using a centered difference scheme.

2.4 关于 SINDy 的进一步讨论（复现文献 [2] 里的结果）



2.4 关于 SINDy 的进一步讨论（复现文献 [2] 里的结果）

$$\dot{x}_{\text{meas}} = \dot{x}_{\text{meas}}, \quad x_{\text{meas}} = x + \eta,$$

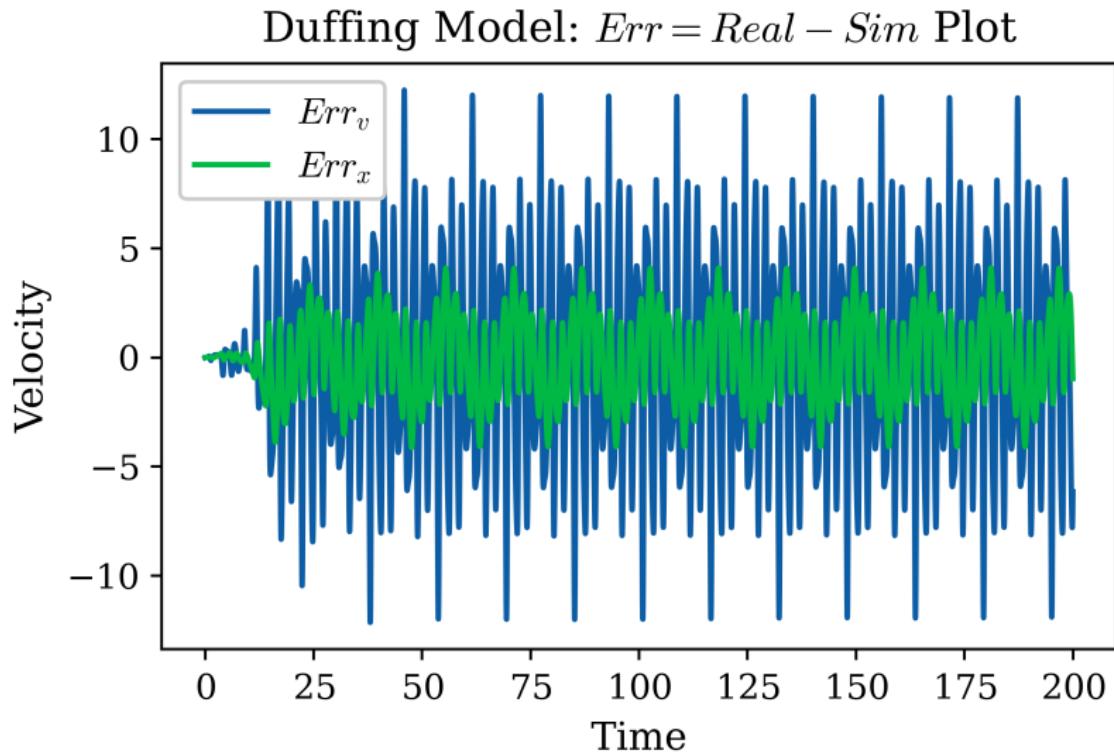


2.5 原型 SINDy 方法的辨识结果

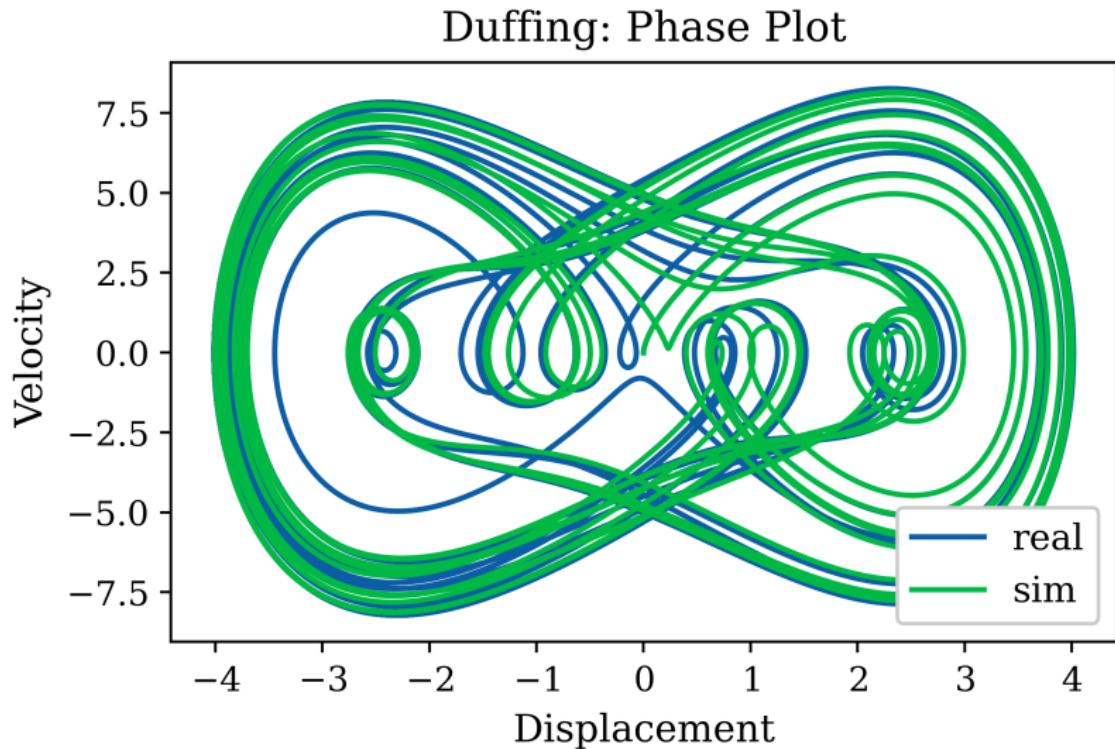
- 真实参数: $m = 1, c = 0.3, k_1 = -1, k_3 = 1$
- 文献 [1] 结果: **Moreover, the identified parameters $m = 1.0005, c = 0.2978, k_1 = -1.003$, and $k_3 = 0.9995$ also agree well with the true model.**
- 我的结果:
 $m = 1.003019, c = 0.299903, k_1 = -0.897487, k_3 = 0.987940$
- 模型性能: Model Score = 0.928190

可以发现，同样发生了系数泄露（也许不是 LASSO 的问题）。

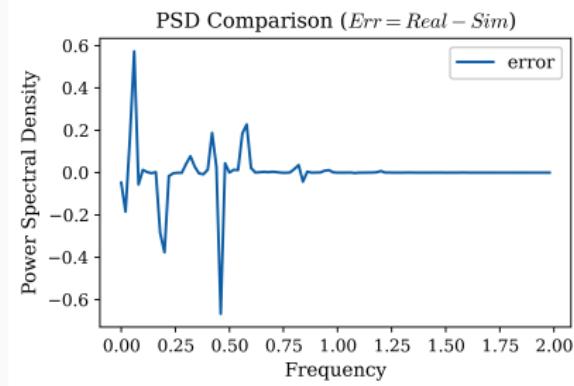
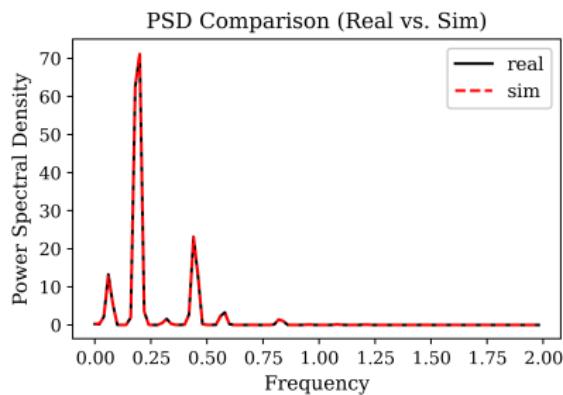
2.5 原型 SINDy 方法的辨识结果



2.5 原型 SINDy 方法的辨识结果



2.5 原型 SINDy 方法的辨识结果



标准 SINDy 的一个关键瓶颈在于其对数值微分的依赖。直接对含噪数据进行微分会不可避免地放大噪声，严重污染特征库，从而导致辨识失败。

3. 基于 B 样条 Galerkin 方法与子集选择的系统辨识方法

3.1 B-样条 + 伽辽金弱形式变换

文献 [1] 提出的一种 B-样条 + 伽辽金弱形式变换的具体方法实现如下：

1. 首先，不直接使用离散的测量数据，而是采用一组 **三次 B 样条基函数** $B_j(t)$ 来连续地、全局地表示位移响应 $x(t)$ 和外部激励 $f(t)$ 。
2. 将系统的动力学方程两边同乘以一个基函数 $B_j(t)$ ，然后在整个时间区间 $[t_1, t_m]$ 上进行积分，得到 **积分形式的方程**。
3. 应用 **分部积分法** 对公式中的导数项进行处理。利用 B 样条基函数在边界点取值为零的特性，可以将微分算子从测量数据 $x(t)$ 转移到光滑的、解析已知的基函数 $B_j(t)$ 上，最终得到 **弱形式方程**。
4. 为了简化表达，定义了一系列 **积分算子**。使用这些算子，弱形式方程被重写为一个对于未知参数 (m, c, θ) 而言的线性系统（最终的矩阵形式 $\Phi \Xi = F$ ）。通过这一系列步骤，原始的微分方程辨识问题，被成功转化为一个不含数据导数的代数方程求解问题。

3.1 B-样条 + 伽辽金弱形式变换

公式与细节：

1. 基函数拟合: $f(t) = \sum_{j=1}^p a_j B_j(t)$, $x(t) = \sum_{j=1}^p b_j B_j(t)$;

2. 伽辽金弱解方程:

$$\int_{t_1}^{t_m} B_j(t)[\dot{x}(t)m + \dot{x}(t)c + k(x(t))]dt = \int_{t_1}^{t_m} B_j(t)f(t)dt$$

3. 分部积分:

$$\int_{t_1}^{t_m} \ddot{B}_j(t)x(t)dtm - \int_{t_1}^{t_m} \dot{B}_j(t)x(t)dtc + \int_{t_1}^{t_m} B_j(t)k(x(t))dt = \\ \int_{t_1}^{t_m} B_j(t)f(t)dt$$

4. 积分算子:

$$A_j(g(t)) = \int_{t_1}^{t_m} \ddot{B}_j(t)g(t)dt$$

$$B_j(g(t)) = \int_{t_1}^{t_m} \dot{B}_j(t)g(t)dt$$

$$C_j(g(t)) = \int_{t_1}^{t_m} B_j(t)g(t)dt$$

3.2 Sequential Subset Selection

文献 [1] 提出的 SSS 方法具体实现：

1. 对各候选特征进行 **参量评估** : $\theta_{ik} = \frac{\varphi_i^\top f_k}{\varphi_i^\top \varphi_i}$;
2. 对各候选特征进行 **性能评估** : $e_{ik} = \frac{\theta_{ik}^2 \varphi_i^\top \varphi_i}{f_k^\top f_k}$, 再选出最大的 e_I 项;
3. **格拉姆-施密特正交化** : $v_i = \varphi_i - \frac{\varphi_i^\top \varphi_i}{\varphi_i^\top \varphi_i} \varphi_i$;
4. **迭代** : 持续这个过程, 直到误差低于某个预设的阈值, 或者选够了预定数量的项为止。

3.3 复现结果

- 真实参数: $m = 1, c = 0.3, k_1 = -1, k_3 = 1$
- 文献 [1] 结果: Moreover, the identified parameters
 $m = 1.0005, c = 0.2978, k_1 = -1.003$, and $k_3 = 0.9995$
also agree well with the true model.
- 对文献 [1] 结果的复现:
 $m = 0.99993, c = 0.29970, k_1 = -1.0006, k_3 = 0.99986$
- 模型性能: $R^2 = 0.999985$
- 改变真实参数:
 $m = 1.09994, c = 0.50014, k_1 = -1.9983, k_3 = 1.199659$

启示: 弱形式对辨识精度提升有不错的效果。

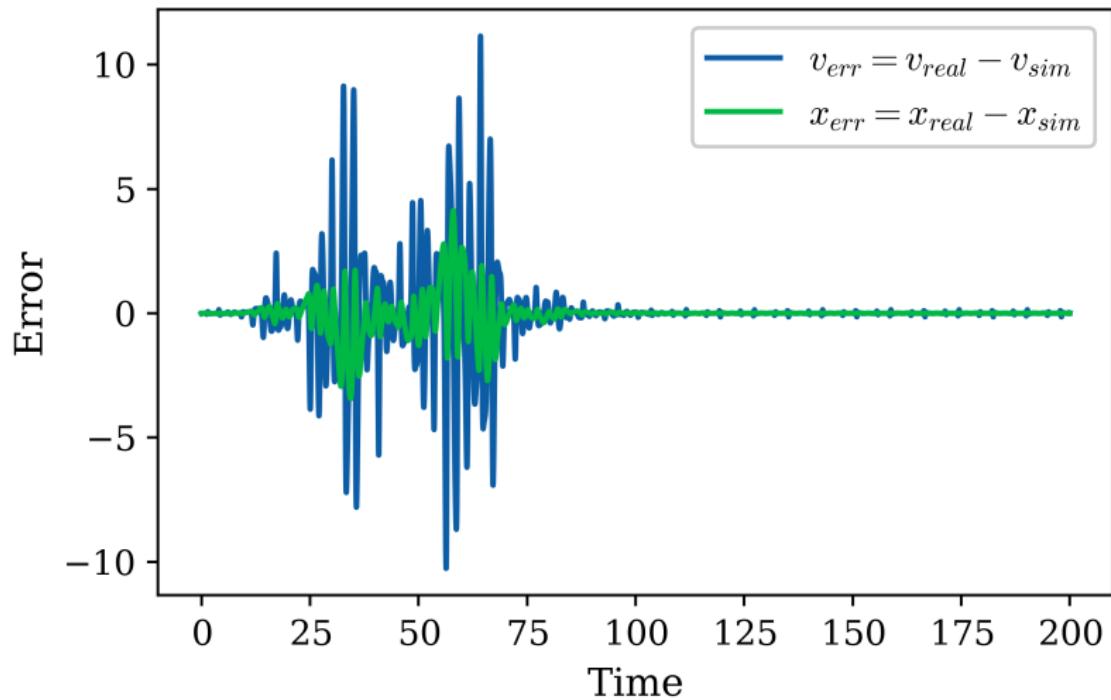
4. 增强型 SINDy：基于弱形式封装的 抗噪稀疏识别

4.1 方法：弱形式增强 LASSO

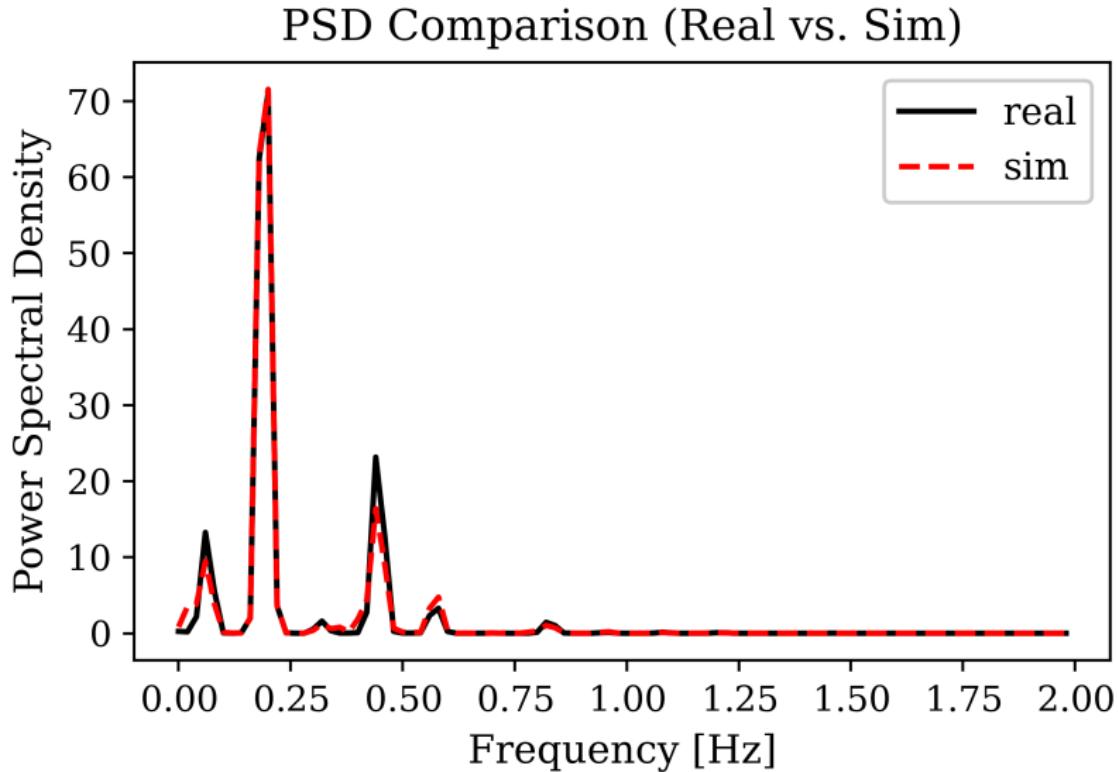
- 真实参数: $m = 1, c = 0.3, k_1 = -1, k_3 = 1$
- 文献 [1] 结果: Moreover, the identified parameters
 $m = 1.0005, c = 0.2978, k_1 = -1.003$, and $k_3 = 0.9995$
also agree well with the true model.
- 我的结果:
 $m = 0.9986, c = 0.300049, k_1 = -1.0006, k_3 = 0.999694$

4.2 可视化

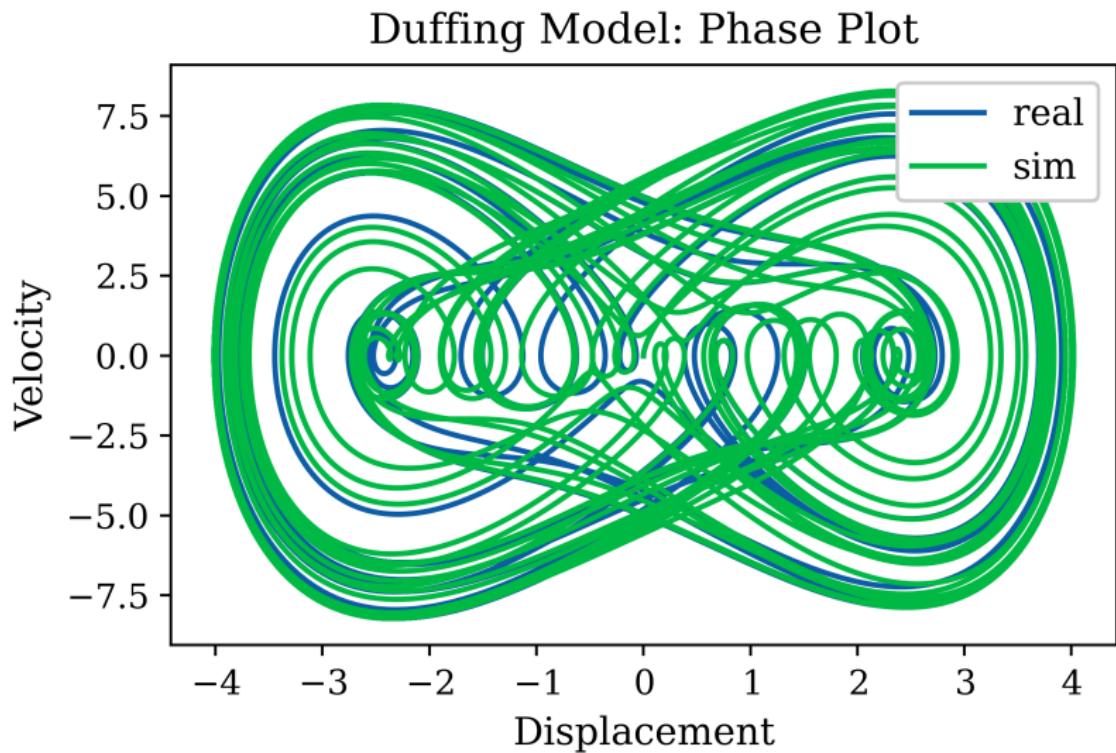
Duffing Model: $error - t$ Plot



4.2 可视化



4.2 可视化



4.3 想法与遗憾

- 既然可以把弱形式用在改进 LASSO 方法上，那么可用于 SINDy 方法的改进上吗？
- 理论上当然可以，而且应该有不错效果；
- 实际上，SINDy 的封装太深邃了，接口与弱形式兼容差！
- 不过，我也不打算再做这个封装了（当前弱式装配本身存在系统性偏差）。

5. 总结

- 结果

- 关于非线性系统稀疏辨识的求解框架：稀疏回归 → 筛选出/发现主导项；再做一次参数估计 → 主导项系数；
- 稀疏回归方法：LASSO、STLSQ 和 SSS；
- 避免数值微分放大噪声：B 样条 + 伽辽金弱式变换；
- 完成这两篇文章计划的复现。

- 反思

- 非线性！线性的有好高的方法。
- 可解释性（发现方程）与精确性（估计参数）的 Trade-off。
- 噪声鲁棒性差。