

数据驱动的复杂系统 建模与调控

报告人：朱群喜

单位：复旦大学·智能复杂体系基础理论与关键技术实验室

2024年09月05日



汇报提纲

1

个人简介

2

科研工作

3

总结展望

仅供学习使用

集智俱乐部读书会专用



汇报提纲

1

个人简介

2

科研工作

3

总结展望

仅供学习使用

集智俱乐部读书会专用



个人简介

朱群喜

青年研究员

博士生导师

单位: 复旦大学·智能复杂体系实验室

地址: 上海市杨浦区邯郸路220号

邮件: qxzhu@fudan.edu.cn

网页: qunxizhu.cn



致力于复杂系统和机器学习前沿的理论与方法研究, 在复杂系统建模、重构、预测和智能调控以及复杂系统驱动的机器学习领域做出了一系列工作, 相关成果以第一或通讯作者在综合性、控制、数学、物理、人工智能等顶级/一流学术刊物发表文章20余篇, 包括综合性领域期刊 **Nature Communications**和**Research**, 非线性期刊**CHAOS (Editor's Pick)**, 物理期刊**Physical Review Research/E**, 自动化控制理论期刊(**IEEE TAC, SIAM-CON, SCL**), 人工智能顶会(**ICML, ICLR, NeurIPS, AAAI**)等。研究成果得到同行大家的关注和引用 (Edward Ott, Jürgen Kurths、曹进德、桂卫华等院士, Google Research, UC Berkeley、牛津大学、剑桥大学和麻省理工等知名教授专家团队), 以及国际知名学术/科技网站的报道(Phys.org, techxplore.com)。

教育背景及工作经历

2024.07 至今	复旦大学 智能复杂体系实验室	青年研究员
2021.07- 2024.06	复旦大学 智能复杂体系实验室	博士后 合作导师: 林伟
2020.09- 2021.02	微软亚洲研究院 人工智能组	实习生 合作导师: 李东胜
2019.01- 2019.12	哈佛医学院 麻省总院	联合培养博士生 合作导师: 葛天
2016.09- 2021.06	复旦大学 数学科学学院	博士 导师: 林伟

研究领域

复杂系统和人工智能交叉理论与方法

Math for AI
(神经微分方程、储备池计算、数理知识嵌入机器学习等)

AI for Science
(物理、控制、计算生物等)



汇报提纲

集智俱乐部读书会专用

1

仅供学习使用

2

科研工作

3

未来规划



研究方向

数据驱动的复杂系统建模与调控

复杂系统研究基本科学问题

(二) 建模

Research 2023,
CHAOS 2023,
IJBC 2023,
CHAOS 2019

支撑研究

Math for AI
AI for Physics/ Cybernetics

机理与智能融合

(一) 机器学习

Nature Communications 2024,
PRResearch, Letter 2024,
ICML 2024a, ICML 2024b,
AAAI 2022, ICLR 2021

(三) 调控

PRE 2024 ICML 2024c,
ICLR 2023, NeurIPS 2022,
TAC 2021, TAC 2019,
SCL 2019, SICON 2018

复杂系统技术支持

复杂系统理论驱动

集智俱乐部读书专用, 仅供学习使用



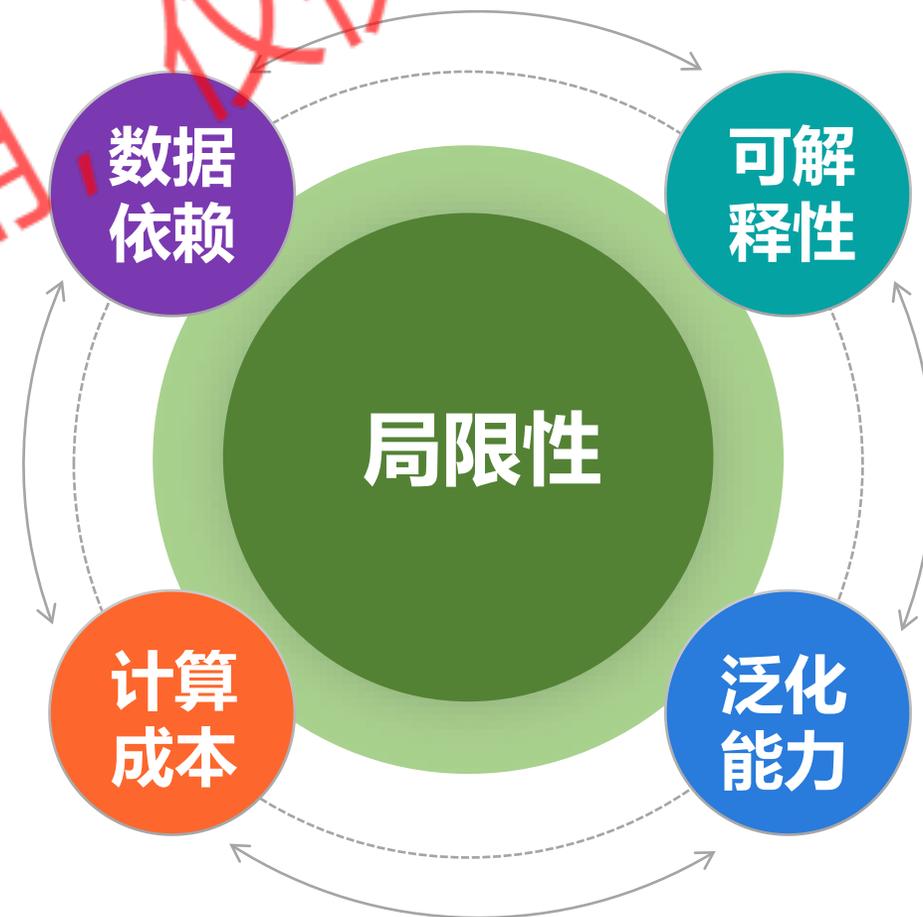
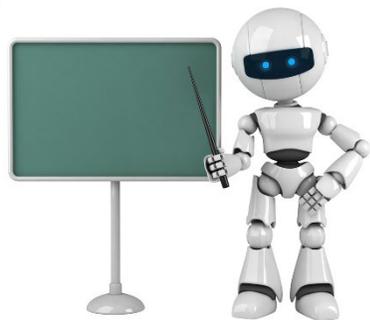
代表性成果（一）复杂系统驱动的新型机器学习框架设计

背景

科学问题： 如何设计机理与智能融合的复杂系统驱动的新型机器学习框架？



机器学习



集智俱乐部读

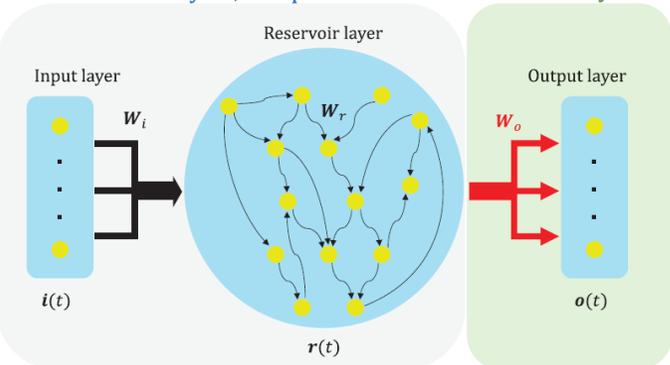


代表性成果 (一) 复杂系统驱动的新型机器学习框架设计

背景

科学问题：如何设计机理与智能融合的复杂系统驱动的新型机器学习框架？

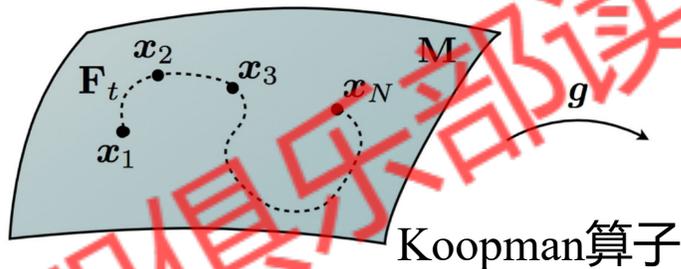
Predetermined layers, independent of tasks Trained layer



Reservoir Computing

Pathak et al., PRL 2018
Zhu et al., Chaos 2019

忽略高维复杂
系统耦合结构

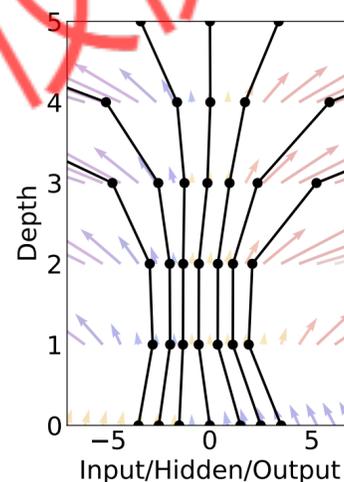


Koopman算子

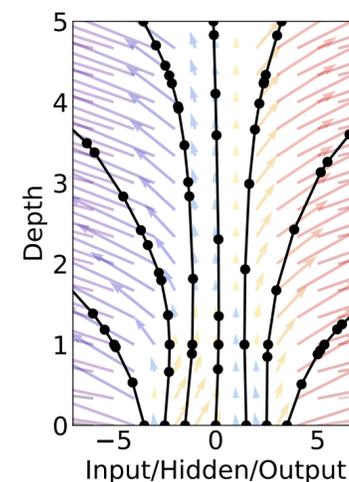
Brunton et al., PloS one 2016
Brunton et al., SIAM Review 2022

缺乏数学物理
理论保证

Residual Network



ODE Network



Neural ODEs: $\frac{dh(t)}{dt} = f(h(t), t, \theta)$

Chen et al., NeurIPS 2018
Dupont et al., NeurIPS 2019

神经ODEs不是
万有逼近器



代表性成果（一）复杂系统驱动的新型机器学习框架设计

科学问题

科学问题：如何设计机理与智能融合的复杂系统驱动的新型机器学习框架？

难点

I **忽略**系统耦合结构

II **缺乏**数学物理理论保证

III **表示**能力存在**不足**

解决方案

I **嵌入**高阶网络拓扑

II **嵌入**数学物理知识

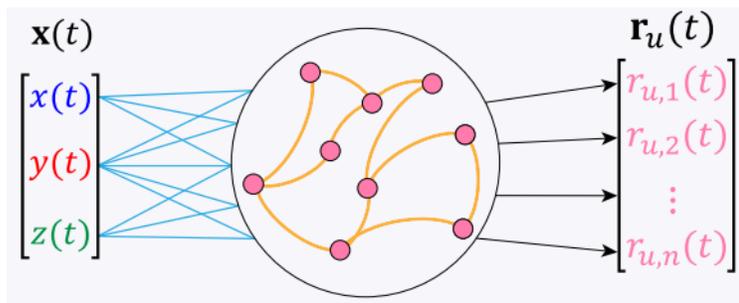
III **嵌入**无限维动力学

机理-智能
深度融合

集智俱乐部读书会专用

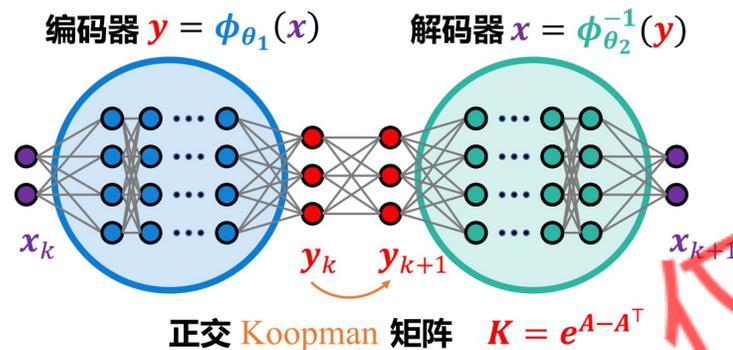
代表性成果 (一) 复杂系统驱动的新型机器学习框架设计

创新性成果



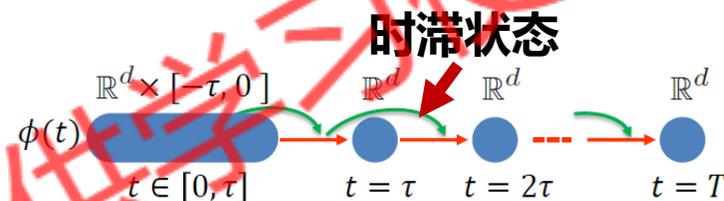
高阶格兰杰储备池计算

Nat. Commun. 2024 (通讯)



神经Koopman算子

PRR 2024 (通讯)
ICML 2024 (a, b) (一作/通讯, 通讯)



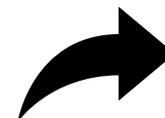
$$\dot{h}(t) = f(h(t), h(t - \tau), \theta)$$

神经时滞微分方程

AAAI 2022 (一作/通讯)
ICLR 2021 (一作/通讯)

创新性成果

- 构建基于高阶网络与格兰杰因果的储备池计算框架
- 构建数学物理先验知识嵌入的神经Koopman算子
- 构建无限维动力学理论启发的神经时滞微分方程



Math for AI

新型机器学习框架

科学意义

实现精准的动力学预测；揭示物理系统守恒定律；证明模型万有逼近能力。形成特色机器学习模型，为多学科领域交叉研究提供技术支撑与理论依据

拓展空间

定量刻画不确定性的机器学习框架；随机复杂系统演化预测

科学问题： 如何设计有效算法来识别复杂系统的临界点与不稳定周期轨道？

临界点/突变

nature

Explore content | About the journal | Publish with us

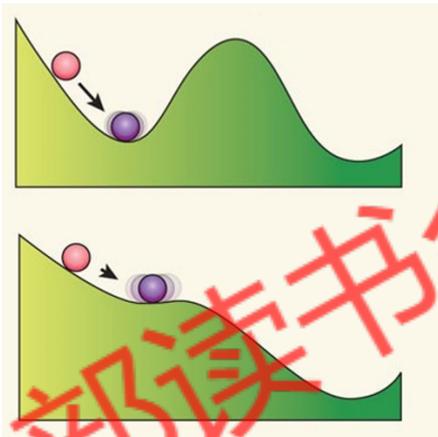
nature > news & views > article

News & Views | Published: 22 September 2010

Complex systems

Foreseeing tipping points

Theory suggests that the risk of critical transitions in complex systems can be revealed by generic indicators. A lab study of extinction in plankton populations provides experimental support for that principle. See Letter [p.456](#)



通用指标检测临界现象；然而复杂系统运行机理不清楚且缺乏动力学刻画
《自然》，2010

不稳定周期轨道 (UPO)

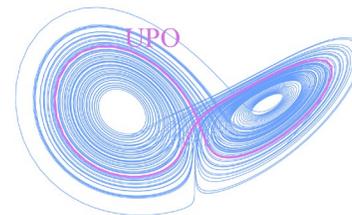
Milestone

Controlling chaos

Edward Ott, Celso Grebogi, and James A. Yorke
Phys. Rev. Lett. **64**, 1196 – Published 12 March 1990; Erratum Phys. Rev. Lett. **64**, 2837 (1990)

An article within the collection: [Letters from the Past - A PRL Retrospective](#)

The periodic orbits are dense in the attractor [i.e., periodic orbits pass through any neighborhood (however small) of any point on the attractor]. For discussions of the relation of ergodic properties of an attractor to its dense set of unstable periodic orbits, see, for example, C. Grebogi, E. Ott, and J. A. Yorke, Phys. Rev. A **37**, 1711 (1988); **36**, 3522 (1987); D. Auerbach *et al.*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2387 (1987); H. Hata *et al.*, Prog. Theor. Phys. **78**, 511 (1987); A. Katok, Publ. Math. IHES **51**, 137 (1980); R. Bowen, Trans. Am. Math. Soc. **154**, 377 (1971).



OGY方法实现UPO镇定；然而UPO需要事先给定且对数据要求严苛
《物理评论快报》，1990



代表性成果 (二) 数据驱动复杂系统建模

科学问题

科学问题：如何设计有效算法来识别复杂系统的临界点与不稳定周期轨道？

难点

I 高维、非线性、噪声

II 不稳定周期轨道不可观测

III 观测数据完全、稠密

解决方案

I 提取动力学表征

II 融合机理-智能

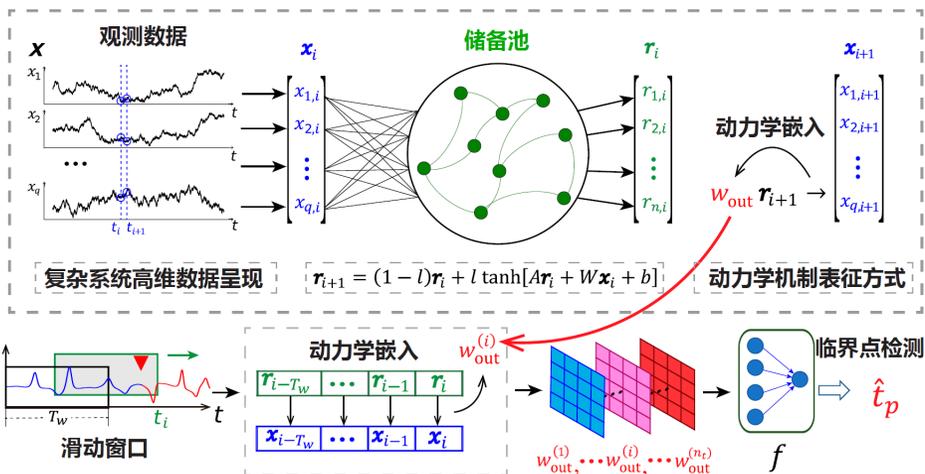
III 部分观测、稀疏

数据驱动
算法框架

集智俱乐部读书会专用

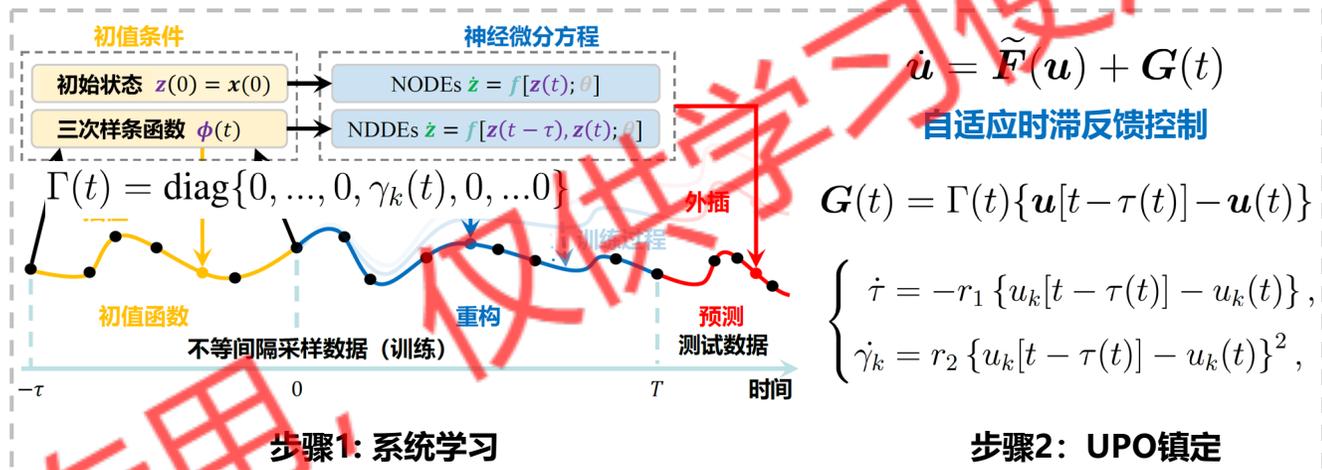
代表性成果 (二) 数据驱动复杂系统建模

创新性成果



临界点识别算法框架

Research 2023 (通讯)

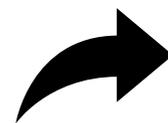


UPO识别算法框架

CHAOS 2023 (一作/通讯), CHAOS 2019(一作)

创新性成果

- 构建基于动力学表征的复杂系统临界点识别方法
- 构建基于机理智能融合的复杂系统UPO识别方法



AI for Physics

科学意义

形成的特色识别方法，为研究更为一般的复杂系统的临界点和UPO识别提供技术支撑

拓展空间

设计基于随机微分方程理论方法的随机复杂系统的临界点识别方法



代表性成果 (三) 复杂系统智能控制理论与算法设计

背景

科学问题: 如何利用随机噪音设计智能控制器以及相应的控制理论与算法?

IEEE TRANSACTIONS ON AUTOMATIC CONTROL, VOL. 53, NO. 3, APRIL 2008

IEEE TAC, 2008

Stabilization and Destabilization of Nonlinear Differential Equations by Noise

John A. D. Appleby, Xuerong Mao, and Alexandra Rodkina

Abstract—This paper considers the stabilization and destabilization by a Brownian noise perturbation that preserves the equilibrium of the ordinary differential equation $x'(t) = f(x(t))$. In an extension of earlier work, we lift the restriction that f obeys a global linear bound, and show that when f is locally Lipschitz, a function g can always be found so that the noise perturbation $g(X(t)) dB(t)$ either stabilizes an unstable equilibrium, or desta-

- 理论上证明可以设计**随机噪音**来控制任意非线性系统
- 设计具有**稳定性保证的神经网络控制器**和**Lyapunov函数**

NeurIPS Proceedings

Neural Lyapunov Control

Part of *Advances in Neural Information Processing Systems 32 (NeurIPS 2019)*

Authors

Ya-Chien Chang, Nima Roohi, Sicun Gao

We propose new methods for learning control policies and neural network Lyapunov functions for nonlinear control problems, with provable guarantee of stability. The framework consists of a learner that attempts to find the control and Lyapunov

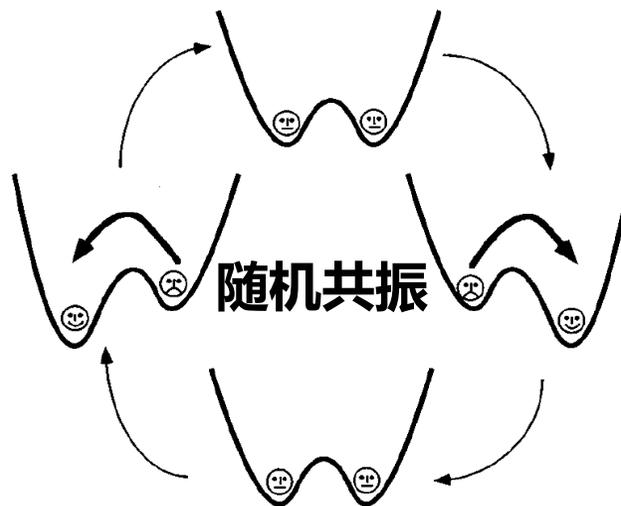
NeurIPS 2019

REVIEWS OF MODERN PHYSICS

Recent Accepted Authors Referees Search Press

Stochastic resonance

Luca Gammarotoni, Peter Hänggi, Peter Jung, and Fabio Marchesoni
Rev. Mod. Phys. **70**, 223 – Published 1 January 1998



$$\dot{x}(t) = -V'(x) + A_0 \cos(\Omega t + \varphi) + \xi(t)$$

$$V(x) = -\frac{a}{2} x^2 + \frac{b}{4} x^4$$

双稳态
势函数

↑
加性
噪音



代表性成果 (三) 复杂系统智能控制理论与算法设计

科学问题

科学问题: 如何利用随机噪音设计智能控制器以及相应的控制理论与算法?

难点

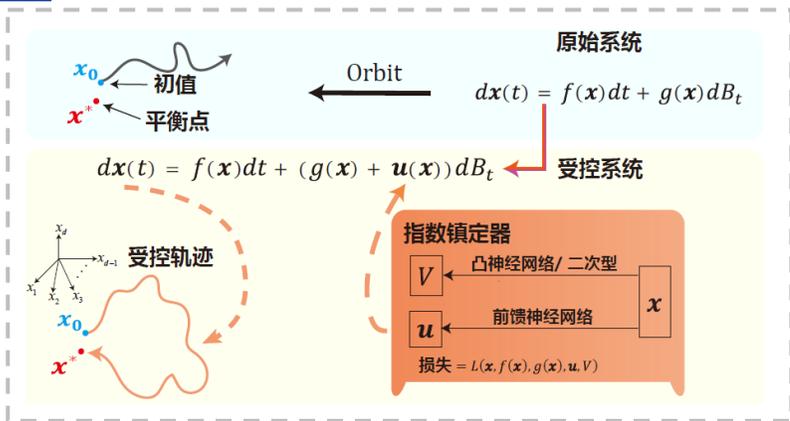
I 系统具有**高维、非线性、不确定性**等特性

II 需人为设计控制器和构造辅助函数

智能控制
理论算法

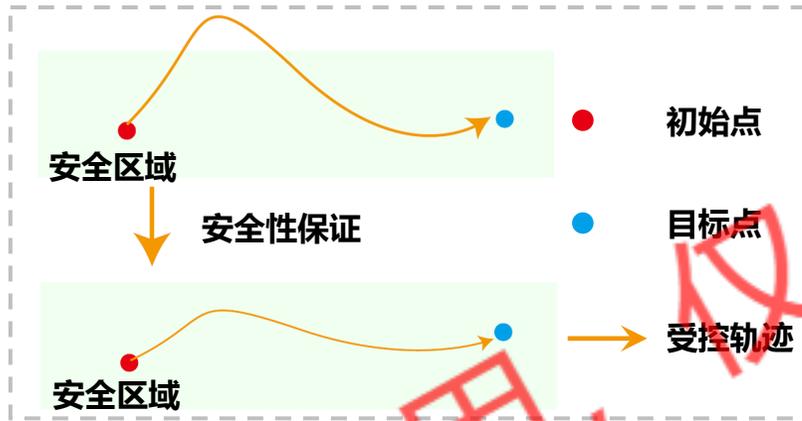
解决方案

基于传统随机控制与神经网络控制理论方法, 设计**随机版本的神经控制器**



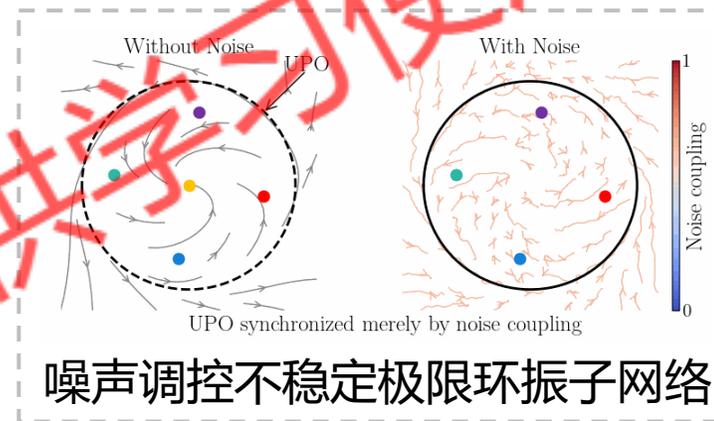
神经随机控制

ICML 2024c, NeurIPS 2022 (通讯)



安全性神经控制

ICLR 2023 (通讯)

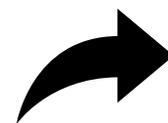


噪声实现同步

PRE 2024 (通讯)

创新性成果

- 提出基于随机镇定理论的神经随机控制理论算法
- 提出具有安全性保证的神经随机控制理论算法



AI for Cybernetics!

科学意义

为深入研究复杂系统调控提供**理论基础**与**技术支撑**；有助于**发现**新的辅助函数（传统方法需依赖于数学家人为设计）并**证明**新的随机镇定理论

拓展空间

设计**无模型**的神经随机控制；应用于**无人系统集群控制**场景



学术成果影响

DRew: Dynamically Rewired Message Passing with Delay

Benjamin Gutteridge, Xiaowen Dong, Michael M. Bronstein, Francesco Di Giovanni Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning, PMLR 2021:12252-12267, 2023.

information flow by tuning the delay parameter ν . Our use of delay is loosely inspired by delay differential equations (DDEs), which have also inspired architectures which leverage delay in the wider deep learning space (Anumasa & PK, 2021; Zhu et al., 2021; 2022) based on neural ordi-



牛津大学DeepMind人工智能推特图机器学习负责人Michael Bronstein教授在2023年的ICML论文中引用了**两篇**我们的工作并指出：*我们引入时滞的想法受到之前利用时滞的深度学习模型启发 (inspired architectures) (Zhu et al., 2021; 2022)*

Neural Laplace: Learning diverse classes of differential equations in the Laplace domain

Samuel I Holt, Zhaozhi Qian, Mihaela van der Schaar Proceedings of the 39th International Conference on Machine Learning, PMLR 162:8811-8832, 2022.

broader classes of DEs. Recently, Zhu et al. (2020) proposes a specialized neural architecture to learn a DDE, but the method is unable to learn the more complex IDE and often suffers from numerical instability. Kidger et al. (2020b) pro-



剑桥大学医学领域AI中心负责人Mihaela van der Schaar教授在2022年的ICML论文中引用了我们的工作并指出：*最近, Zhu et al. (2020) 提出一个专门的神经网络模型架构来学习时滞微分方程 (learn a DDE)*

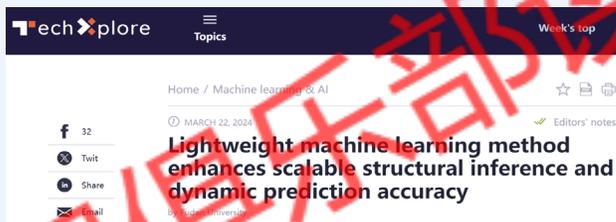


Nima Dehghani @neurovium

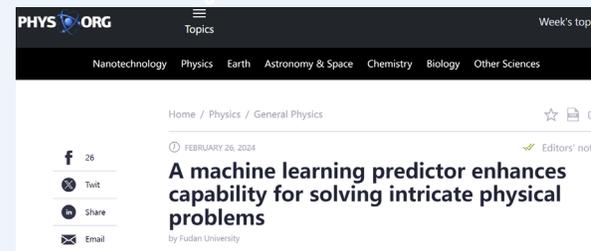
Nice mix of GC and RC for timeseries prediction. I just discussed this paper with colleagues at MIT couple of days ago. The iterative process of using GC to find higher order interactions in a data-driven regime is neat.



麻省理工大学复杂系统专家Nima Dehghani 教授2024年3月, 在社交媒体上评论我们的工作：*与MIT同事讨论后, 发现通过数据驱动的方式利用格兰杰因果迭代更新高阶结构的过程是简洁的(neat)*



2024年3月, 国际知名科技网站techxplore.com以“*Lightweight machine learning method enhances scalable structural inference and dynamic prediction accuracy*”为题专文推送了我们的工作



2024年2月, 国际知名学术网站Phys.org以“*A machine learning predictor enhances capability for solving intricate physical problems*”为题专文推送了我们的工作



汇报提纲

集智俱乐部读书会专用

1

仅供学习使用

2

科研工作

3

总结展望



总结展望

- 对复杂系统中基本问题的深入分析需要新思路和新技术
——（受复杂系统理论和方法启发的）**机器学习**
- 利用数学科学中已开发和/或正在开发的方法/理论，与机器学习框架相结合，以挖掘现实世界中的问题和数据集
—— **系统重构、预测和控制**

复杂系统



机器学习



智能复杂体系基础理论与关键技术实验室

- 复旦大学智能复杂体系基础理论与关键技术实验室正式成立于**2018年6月**，是复旦大学实体化运行的**二级校内科研机构**。实验室依托复旦大学社、文、理、医、工五大学科门类综合交叉的优势，借助复旦大学开展交叉融合研究研发的优良传统，着力聚焦于“综合新一代智能计算、网络空间与物理环境的多维智能复杂体系”，强调新型算法研发、高效虚拟计算空间与物理环境无缝整合与自主动态演进。对现有各类智能复杂体系的整合、智能适应、扩展落地提供核心算法与技术保证。
- **2023年9月14日**，教育部正式批准“**复杂系统科学与工程**”一级学科博士学位授权点。该学位点依托复旦大学智能复杂体系基础理论与关键技术实验室（院系代码为089）建设与开展研究生招生工作。“复杂系统科学与工程”专业代码为079901，下设三个招生方向：01复杂系统理论（含应用数学）、02复杂系统建模与调控（含生物医学工程）、03复杂系统科学与工程。



交叉门类下设一级学科架构



一级学科

I

复杂系统理论

II

复杂系统建模与调控

III

复杂系统工程与应用

二级学科

集智俱乐部读书会专用，仅供学习使用



实验室主任：林伟



上海数学中心

复旦大学数学科学学院
教授、博士生导师

复旦大学教务处处长

复旦大学智能复杂体系基础
理论与关键技术实验室主任

上海市人工智能实验室
领军科学家

研究领域

应用数学、复杂性科学、计算系统生物学、人工智能等领域的数学理论及交叉应用

学术成果

在国内外顶级期刊上发表学术论文**100余篇**

包括：PNAS, PRL, Nature Physics, Nature Communications, IEEE 汇刊, SIAM 汇刊, AAAI, ICLR, NeurIPS等

科研项目

主持国家自然科学基金项目 (**10项**)

主持国家科技重点研发项目、上海市市级重大专项课题等 (**20多项**)

荣获奖项

《Research》杂志最佳论文奖 (2022年)

上海市自然科学进步一等奖 (排名第2, 2021年)

国家杰出青年基金资助 (2019年)

连续入选Elsevier中国高被引学者榜单

社会任职

IEEE Senior Member, CHAOS 编辑咨询委员会委员, Research 副编辑

CSIAM 数学生命科学专业委员会副主任委员

上海市非线性科学研究会第七届秘书长

宝钢优秀教师奖 (2022年)

世界华人数学家联盟最佳论文奖 (2019年)

上海市五一劳动奖章 (科创类, 2019年)



仅供学习使用



中国工业与应用数学学会年会@CSIAM

TM50: 数据驱动的复杂系统建模与调控-10月26-27日, 江苏南京

组织者: **朱群喜** (复旦大学)、**李樵风** (浙江大学)

熊诗颖 (浙江大学)

基于涡旋演化的流体力学模拟与预测方法

吴泰霖 (西湖大学)

生成模型用于复杂系统控制

曹文祺 (北京大学)

基于低秩随机过程理论的复杂系统降维重构

刘佩 (清华大学)

复杂电力信息物理耦合系统的建模与优化

孟旭辉 (华中科技大学)

Deep learning for multi-fidelity data assimilation with uncertainty quantification

许志钦 (上海交通大学)

探索调节神经网络记忆和推理复杂数据的因素

赖志路 (香港科技大学广州)

一种用于微分方程识别问题的全自适应方法

古祥 (西安交通大学)

动态系统建模的人工智能方法

@集智俱乐部·复杂系统自动建模读书会第二季



WeChat



Website



谢谢!

2024年09月05日

集智俱乐部读书会专用, 仅供学习使用