

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики
Российской академии наук»
(ИПФ РАН)

**НАУЧНЫЙ ДОКЛАД ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ
ПОДГОТОВЛЕННОЙ НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ
(ДИССЕРТАЦИИ)**

**«Реконструкция динамических систем по распределенным временным
рядам: развитие общих методов и приложение к исследованию климата»**

Аспирант:

Селезнев Алексей Федорович

Научный руководитель:

Мухин Д.Н.

кандидат физико-математических наук
зав. лаб. 243 отд. 240 ИПФ РАН

Направление подготовки:

03.06.01 – физика и астрономия

Направленность (профиль) подготовки:

01.04.03 – радиофизика

Форма обучения: очная

Нижний Новгород

2020

Актуальность работы. Задачи построения математических моделей различных явлений и процессов, происходящих в природе, возникают во многих областях современной науки. При решении этих задач исследуемый процесс часто рассматривается как динамическая система (ДС), т.е. предполагается, что его состояние в данный момент времени может быть определено как совокупность некоторых параметров (координат), и существует закон, определяющий эволюцию состояния с течением времени. Таким образом, построение модели исследуемого процесса сводится к реконструкции ДС, которая подразумевает введение пространства координат, однозначно определяющих ее состояние (фазовое пространство), и задание оператора эволюции [47]. Широко распространенным подходом к реконструкции ДС является построение их моделей в виде уравнений «из первых принципов», которые формулируются на основе известных физических законов¹. Альтернативным подходом является так называемое эмпирическое моделирование ДС на основе наблюдаемых данных. В общем случае при таком подходе *не предполагается наличие какой-либо информации об устройстве исследуемой системы*, которая рассматривается как «черный ящик». В ситуации, когда уравнения, лежащие в основе исследуемой ДС, неизвестны, либо не могут быть эффективно применены², эмпирические методы моделирования выходят на первый план.

Возможность реконструкции ДС напрямую по производимому ей сигналу была осознана в начале 80-х годов прошлого века. В 1981 году вышла знаменитая статья Такенса [44], где были доказаны теоремы из которых следовала возможность построения топологически эквивалентной «копии» фазового пространства ДС по производимому ей скалярному временному ряду методом координат с задержками, причем количество таких координат $d = 2s + 1$, где s - размерность фазового пространства ДС. Это стимулировало большое количество работ по эмпирической реконструкции фазовых портретов ДС, оценке различных характеристик их аттракторов и т.д. (см., например, главу 9 в [47] и цитируемую там литературу). Первые попытки реконструкции уравнений ДС по наблюдаемому скалярному временному ряду были предприняты в [9, 10]. К настоящему времени проведено большое число работ по разработке и приложениям различных подходов к реконструкции уравнений динамики системы по наблюдаемым временным рядам (см., например, работы [1, 16, 37, 38, 45]). Были созданы и успешно применены методы, эффективные для систем, принадлежащих различным частным классам: систем с известным оператором эволюции и скрытыми перемен-

¹Уравнения движения среды, отдельных частиц, силовых полей, переноса излучения, химической кинетики, тепло и массопереноса и пр.

²Такая ситуация характерна для большинства живых систем, климата, экономических систем и т.д.

ными [2, 3, 15, 32, 46], неавтономных систем [4, 29, 30, 40], систем с запаздыванием [36], ансамблей связанных систем, в том числе, с запаздыванием (см., например, [41, 43]), с разреженными матрицами связей [5, 18, 26], нейроосцилляторов [33, 42] и др. В целом, стоит отметить, что задача реконструкции ДС по наблюдаемым временным рядам является некорректной обратной задачей и не существует единого подхода к решению этой задачи в общем случае.

Настоящая научно-квалификационная работа (диссертация) направлена на разработку методов эмпирической реконструкции ДС в наиболее общей ситуации, характерной, в частности, для геофизических систем: высокая размерность наблюдаемых данных, отсутствие информации как о размерности оператора эволюции, лежащего в основе данных, так и об уравнениях динамики, наличие медленных изменений (трендов) параметров системы на временных масштабах больших, чем длина ряда, которые могут приводить к качественным изменениям наблюдаемого поведения – сменам динамических режимов. Например, такая ситуация возникает при эмпирическом моделировании климатической динамики: пространственно распределенные данные представляют собой многомасштабный процесс, протекающий на фоне глобальных трендов (температуры, углекислого газа и др.). В такой ситуации первый необходимый шаг построения эмпирической модели – реконструкция фазового пространства – становится нетривиальным по причине огромной размерности наблюдаемых временных рядов. Так, в случае анализа климатических данных размерность временного ряда равна произведению числа узлов пространственной сетки на Земном шаре, в которых производится измерение, и числа измеряемых характеристик; обычно эта величина достигает десятков и сотен тысяч. Поэтому в данной ситуации чрезвычайно важной является задача эффективного уменьшения (редукции) размерности наблюдаемых данных с целью выделения относительно небольшого числа переменных, содержащих информацию о ключевых свойствах наблюдаемой динамики. Как правило процедура редукции заключается в том, что исходные данные высокой размерности проецируются на многообразие (часто называемое «главным многообразием» [14]) существенно меньшей размерности, динамика на котором определяется процессами на тех пространственно-временных масштабах, которые наиболее хорошо представлены в наблюдаемом временном ряде. Дальнейшее построение оператора эволюции происходит в получаемом в ходе редукции низкоразмерном пространстве главных компонент (ГК) временного ряда.

Для построения главных многообразий в настоящее время широко используются методы, основанные на различных линейных преобразованиях данных [6, 13, 20, 22, 34, 35]. Их существенным недостатком является то, что они не могут адекватно учесть наличие нелинейных зависимостей в исследуемой системе и, сле-

довательно, оказываются недостаточно эффективными для редукции размерности при наличии сильных нелинейных связей между временными рядами в различных пространственных точках. В этой связи в последнее время активно развиваются различные методы нелинейной редукции данных [7, 12, 24].

Резюмируя вышесказанное можно заключить, что успех в решении задачи реконструкции ДС по пространственно распределенным временным рядам определяется, во-первых, корректным выбором пространства фазовых переменных, полученных в процессе редукции наблюдаемых высокоразмерных данных, и, во-вторых, оптимальной параметризацией оператора эволюции, действующего в этом пространстве. При этом важно отметить, что в большинство существующих на сегодняшний день методов редукции данных не закладывается какой-либо информации о возможной динамической природе этих данных. Например в широко используемом методе главных компонент [22] последовательные по времени точки на получаемом в ходе редукции главном линейном многообразии рассматриваются как независимые наблюдения. Ясно, что если в основе данных лежит ДС, то новые переменные, получаемые в ходе такой редукции, могут некорректно отражать причинно-следственные связи, имеющиеся в системе и, следовательно, будут плохо пригодными для дальнейшего построения оператора эволюции.

В настоящей диссертационной работе развивается оригинальный подход к реконструкции ДС по пространственно распределенным данным, сочетающий нелинейную редукцию размерности наблюдаемых данных и построение нелинейного оператора эволюции в рамках единой эмпирической модели. Получаемые при таком подходе новые переменные образуют фазовое пространство для имеющейся в данных детерминированной составляющей, последовательные точки в котором связаны оператором эволюции. Конкретно, предлагается стохастическая эмпирическая модель на основе многослойной рекуррентной искусственной нейронной сети (ИНС) с оригинальной структурой. Обучение ИНС происходит в рамках байесова формализма решения обратных задач.

Основной целью диссертации является развитие эффективного и максимально общего подхода к реконструкции ДС по многомерным пространственно распределенным данным. Для достижения этой цели в диссертации были поставлены и решены следующие задачи: (1) разработка структуры эмпирической модели, сочетающей редукцию наблюдаемых данных с целью выделения главных многообразий, лежащих в основе данных, и реконструкцию оператора эволюции на этих многообразиях; (2) разработка алгоритма выбора модели оптимальной сложности по имеющимся данным наблюдений; (3) проверка работоспособности разрабатываемого подхода на модельных примерах; (4) применение разработанной модели для реконструкции главных мод

изменчивости и прогноза качественного поведения высокоразмерных хаотических ДС – моделей атмосферной динамики.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что в ней разработана новая форма эмпирической модели на основе рекуррентной ИНС с оригинальной структурой, а также метод ее обучения на основе байесова подхода. Разработанная модель позволяет находить как главные нелинейные многообразия, лежащие в основе наблюдаемых многомерных данных, так и нелинейную модель оператора эволюции на этих многообразиях. Модель была успешно применена как для реконструкции мод низкочастотной изменчивости в данных трехуровневой квазигеострофической модели атмосферы по относительно коротким временным рядам, так и для прогноза качественного поведения системы Лоренца-96 – феноменологической модели атмосферы – по слабо нестационарному многомерному временному ряду.

Практическая ценность диссертационной работы состоит в том, что разработанные в ней методы реконструкции не требуют наличия большого объема априорной информации об устройстве исследуемой системы (например, знания лежащих в ее основе уравнений, размерности фазового пространства и т.д.). Предложенная в работе эмпирическая модель основана на рекуррентной ИНС, которая имеет адаптивную структуру и обладает универсальными аппроксимационными свойствами. Развитый в работе байесов подход к обучению и оптимизации структуры эмпирической модели позволяет выбирать модель оптимальной сложности, которая максимально адекватно соответствует имеющимся данным. Разработанные в диссертации методы реконструкции могут быть применены для реконструкции сложных систем в различных областях современной науки.

Апробация представленных в работе результатов. Основные результаты работы докладывались на семинарах и конкурсах молодых ученых ИПФ РАН, а также на международных и российских научных конференциях: Всероссийской конференции, посвященной 100-летию М. А. Петросянца «М.А.Петросянец и отечественная метеорология» (Москва, 2019), Всероссийской конференции молодых ученых «Состав атмосферы. Атмосферное электричество. Климатические процессы» (2016, 2017), Всероссийской научной школе «Нелинейные волны» (Нижний Новгород, 2016, 2018), международных конференциях «Topical problems of nonlinear wave physics» (Нижний Новгород, 2017), «Frontiers of nonlinear physics» (Нижний Новгород, 2016, 2019), «European Geosciences Union General Assembly» (2016, 2018, 2019), «American Geophysical Union Fall Meeting» (2017), «Science of the future» (2016), «Fourth International Conference on Earth System Modelling» (2017), «JpGU-AGU Joint Meeting» (2017), «Dynamics Days» (2017), «IUGG Conference on mathematical geophysics» (2018).

По теме диссертации опубликована 31 работа, в том числе 3 статьи в рецензируемых

научных журналах из списка ВАК [A1–A3], 4 свидетельства о регистрации программы для ЭВМ [A4–A7], 2 работы в сборниках трудов конференций [A8, A9] и 22 тезисов и абстрактов.

Личный вклад автора. Все приведенные в диссертации результаты получены либо лично автором, либо при его непосредственном участии.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, двух глав, заключения, списка публикаций по теме диссертации и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации 79 страниц, включая 15 рисунков и список литературы из 120 наименований.

Во **введении** приведен обзор текущего состояния исследований по проблематике диссертации, сформулированы цели работы, вклад автора в полученные результаты, приведены данные об их апробации.

В **первой главе** диссертационной работы предлагается новая форма эмпирической стохастической модели, обеспечивающая совместную реконструкцию фазовых переменных и оператора эволюции ДС по многомерным наблюдаемым временным рядам, на основе многослойной рекуррентной ИНС с оригинальной структурой. Формулируется байесов подход к обучению и оптимизации сложности предложенной модели, обсуждается численный алгоритм его реализации.

В **разделе 1.1** кратко формулируются задачи, решаемые в главе.

В **разделе 1.2** приводятся общие соображения, исходя из которых происходит построение предлагаемой в диссертации эмпирической модели по наблюдаемому временному ряду данных $\mathbf{X} = (\mathbf{x}(1), \dots, \mathbf{x}(N))$, представляющему собой набор векторов $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$, каждый из которых содержит измерения некоторой физической величины в D точках на пространственной сетке в один из N эквидистантных моментов времени t_1, \dots, t_N . При построении динамической модели по данным \mathbf{X} предполагается: (1) временной ряд \mathbf{X} порожден ДС; (2) существует главное многообразие размерности $d < D$, динамика системы на котором определяется процессами на тех пространственно-временных масштабах, которые наиболее хорошо представлены в имеющихся данных \mathbf{X} ; (3) главное многообразие является фазовым пространством некой подсистемы исследуемой высокоразмерной ДС; (4) изменчивость мелкомасштабных процессов можно описать стохастическим образом. Таким образом, главная гипотеза о наблюдаемых данных \mathbf{X} состоит в том, что при учете их конечной длины и конечного шага измерений, основная часть наблюдаемой изменчивости определяется низкоразмерной ДС (подсистемой высокоразмерной ДС, которая производит данные), в то время как остальные процессы (подсистемы) могут рассматриваться как шум.

В соответствии с озвученными предположениями, эмпирическая модель состоит из двух основных частей - детерминированной части, описывающей динамику низ-

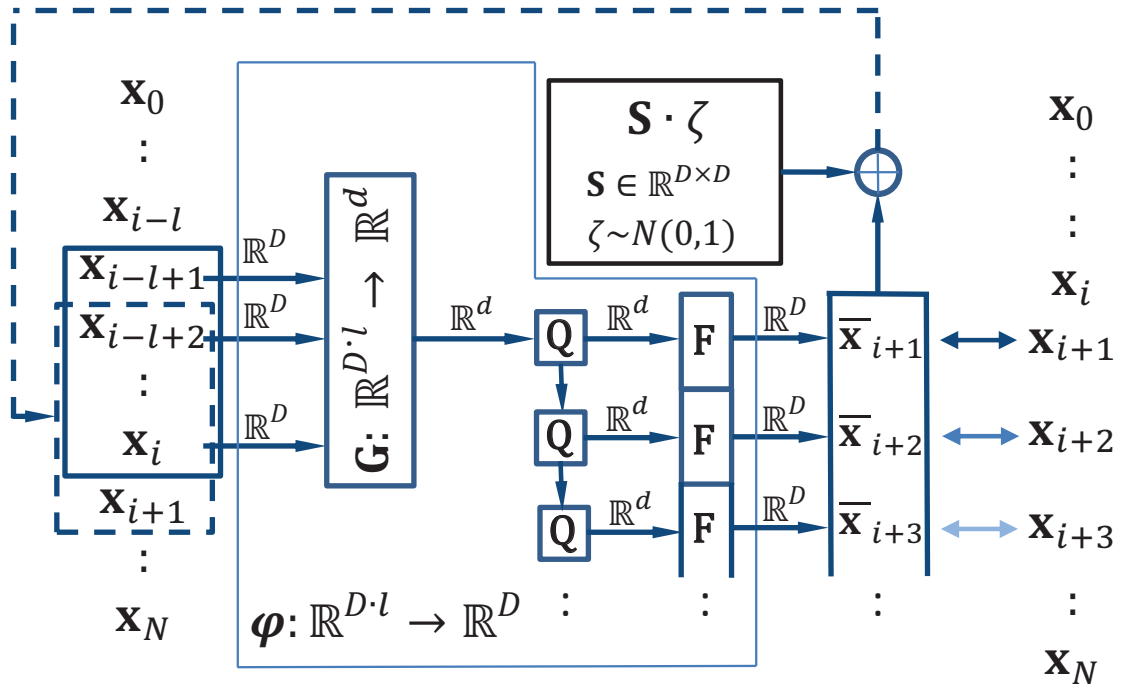


Рис. 1: Блок-схема эмпирической модели. Слева направо: вектор данных $\mathbf{x}_{i-l+1}, \mathbf{x}_{i-l+2}, \dots, \mathbf{x}_i$ подается на вход детерминированной части модели φ , которая, за счет итерирования внутреннего оператора эволюции \mathbf{Q} , производит прогнозируемые значения $\bar{\mathbf{x}}_{i+1}, \bar{\mathbf{x}}_{i+2}, \dots$. При обучении модели прогнозируемые значения сопоставляются с соответствующими векторами данных $\mathbf{x}_{i+1}, \mathbf{x}_{i+2}, \dots$.

коразмерной ДС и стохастической части, определяющей вклад процессов с малым временем автокорреляции, которые плохо разрешены в наблюдаемых данных. Детерминированная часть модели представляет собой дискретное отображение, являющееся комбинацией трех функций:

1. Проекция исходных высокоразмерных данных на низкоразмерное главное многообразие:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(i) &= \mathbf{G}(\mathbf{z}(i)), \quad \mathbf{G} : \mathbb{R}^{D \times l} \rightarrow \mathbb{R}^d \\ \mathbf{z}(i) &= (\mathbf{x}(i-l+1), \dots, \mathbf{x}(i)). \end{aligned} \quad (1)$$

2. Оператор эволюции на главном многообразии:

$$\mathbf{p}^i(i+k) = \mathbf{Q}^k(\mathbf{p}(i)), \quad \mathbf{Q} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad k \geq 1, \quad (2)$$

где $\mathbf{p}^i(i+k)$ прогнозируемые значения состояний на многообразии в момент времени $i+k$ с начального состояния $\mathbf{p}(i)$, k -число применений оператора эволюции.

3. Обратное отображение из пространства состояний на главном многообразии в пространство данных, обеспечивающее прогнозируемые значения $\bar{\mathbf{x}}$ векторов \mathbf{x} :

$$\bar{\mathbf{x}}^i(i+k) = \mathbf{F}(\mathbf{p}^i(i+k)), \quad \mathbf{F} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^D. \quad (3)$$

Далее, для удобства детерминированная часть модели обозначается функцией φ , которая объединяет функции (1),(2),(3).

Функции (1)-(3) представляются в виде трехслойных перцептронов, которые являются универсальными аппроксиматорами произвольных нелинейных зависимостей [11]. С учетом выбранной параметризации, детерминированная часть модели представляет собой ИНС с несколькими скрытыми слоями нейронов. При этом второй слой нейронов, определяющий оператор эволюции (2), является рекуррентным, поскольку выходной сигнал данного слоя подается не только на вход следующего слоя (3), но и на его собственный вход. Глубина рекуррентного слоя определяется числом применений внутреннего оператора эволюции (2) при обучении модели (см. рис. 1).

Стохастическая часть модели параметризуется в соответствии с идеями, выдвинутыми в работах [31, A2] и представляет собой произведение треугольной $D \times D$ матрицы \mathbf{S} и D - мерного вектора $\boldsymbol{\xi}$, компоненты которого в каждый момент времени представляет собой реализации независимых Гауссовых случайных процессов с нулевыми средними и единичной дисперсией. Блок-схема модели представлена на рис. 1.

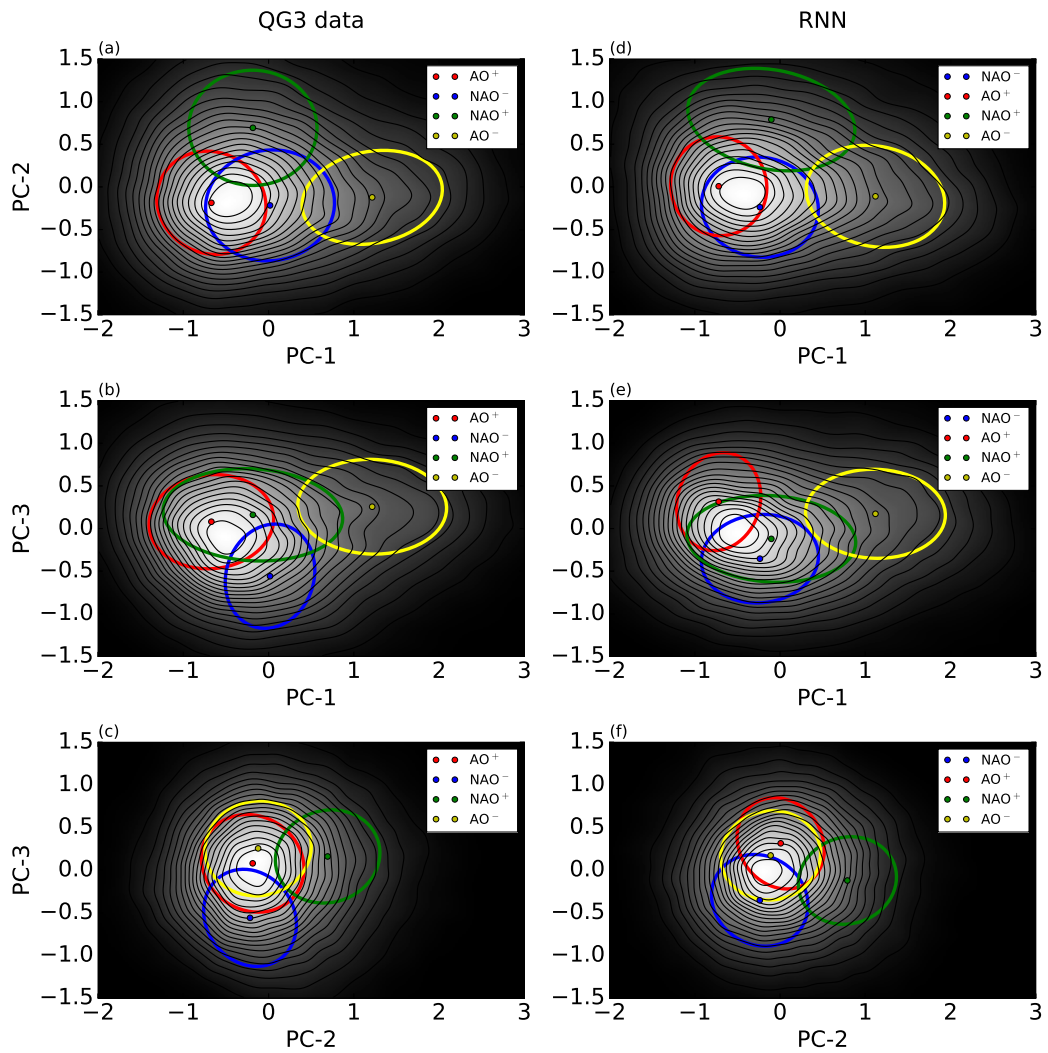


Рис. 2: Плотности вероятности (ПВ), рассчитанные в двумерных проекциях четырехмерного пространства ведущих ГК поля функции тока системы QG3 на уровне 500 гПа (длина данных 100 000 дней): (a) плоскость ГК-1 и ГК-2, (b) плоскость ГК-1 и ГК-3, (c) плоскость ГК-2 и ГК-3; (d)-(f) аналогичные ПВ, рассчитанные по временным рядам той же протяженности, сгенерированным оптимальной эмпирической моделью. Во всех случаях ГК нормированы на среднеквадратичное отклонение ГК-1. Для расчета ПВ используется метод ядерной оценки плотности [39]. Цветные точки соответствуют центроидам кластеров, полученных при кластеризации четырехмерных данных методом смеси гауссовых распределений. Цветными эллипсами показаны двумерные проекции эллипсоидов рассеивания для каждого кластера. Названия кластеров выбраны исходя из соответствующих пространственных распределений на рис. 3-4.

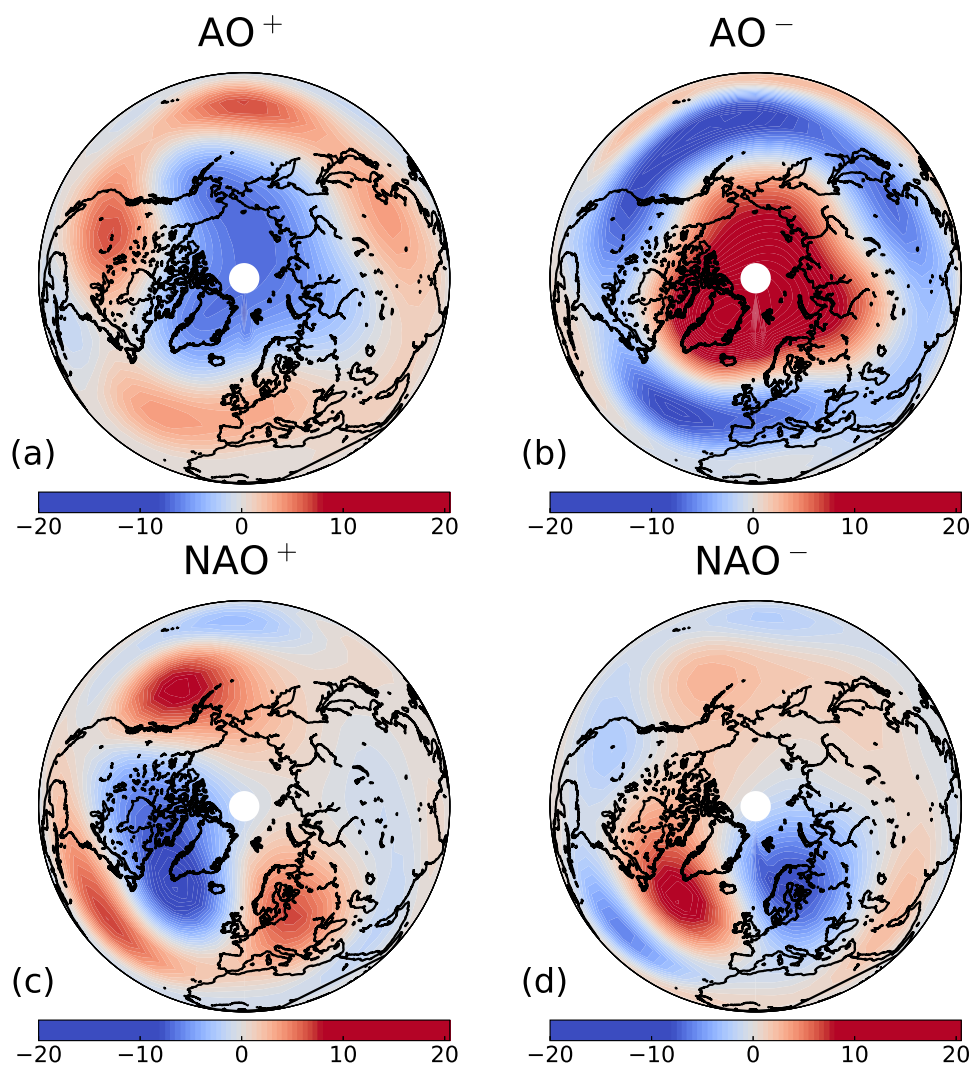


Рис. 3: Пространственные распределения аномалий (отклонений от среднего значения) функции тока, соответствующие центроидам кластеров, найденным по данным модели QG3: (a) AO^+ , (b) AO^- , (c) NAO^+ and PNA^- , (d) NAO^- . Знаки + и - обозначают положительную и отрицательную фазы соответствующей моды низкочастотной изменчивости. Единицы измерения: $10^6 \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$.

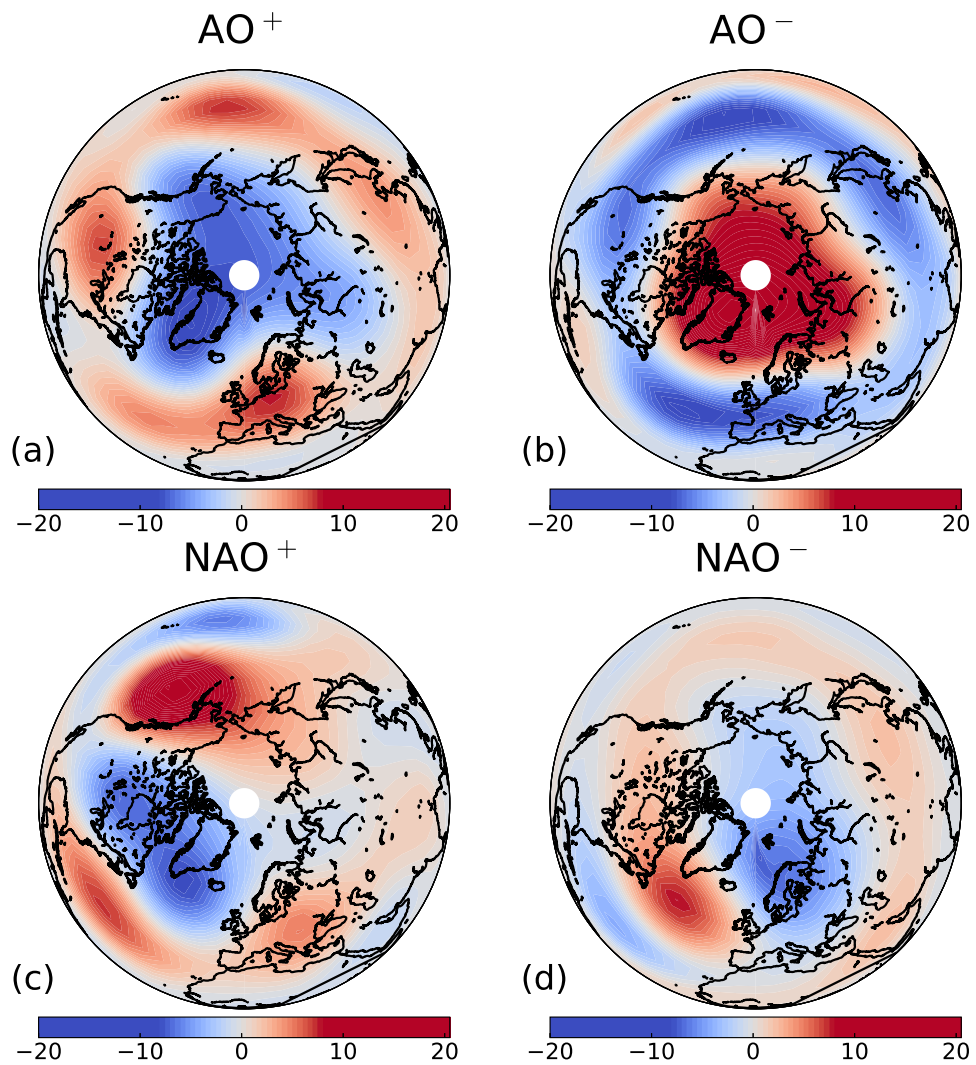


Рис. 4: То же, что на рис. 2, но на основе данных, сгенерированных оптимальной эмпирической моделью.

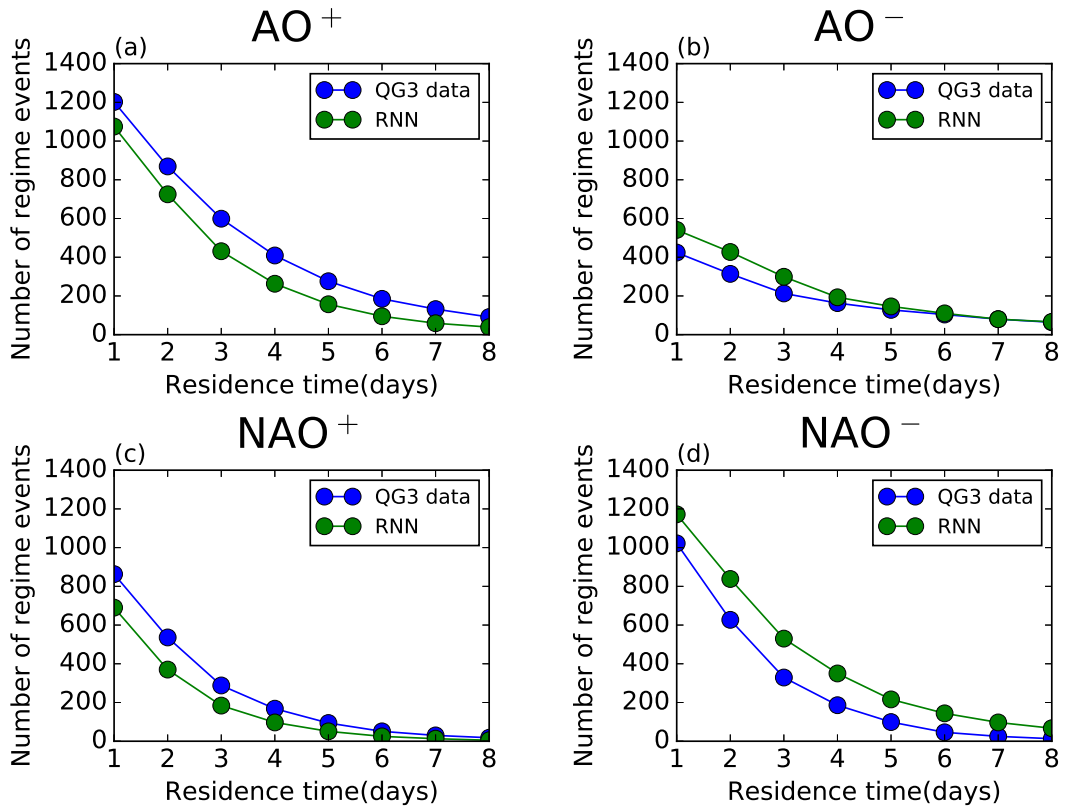


Рис. 5: Зависимости числа попаданий фазовой траектории в окрестность рекуррентного состояния от времени ее пребывания в этой окрестности, рассчитанные в пространстве четырех ведущих ГК модели QG3 (синие кривые) и оптимальной эмпирической модели (зеленые кривые) для четырех рекуррентных состояний. Время пребывания фазовой траектории в окрестности данного состояния(кластера) определяется как число последовательных состояний(дней) системы лежащих в пределах соответствующего кластера эллипсоида рассеивания [23, 28].

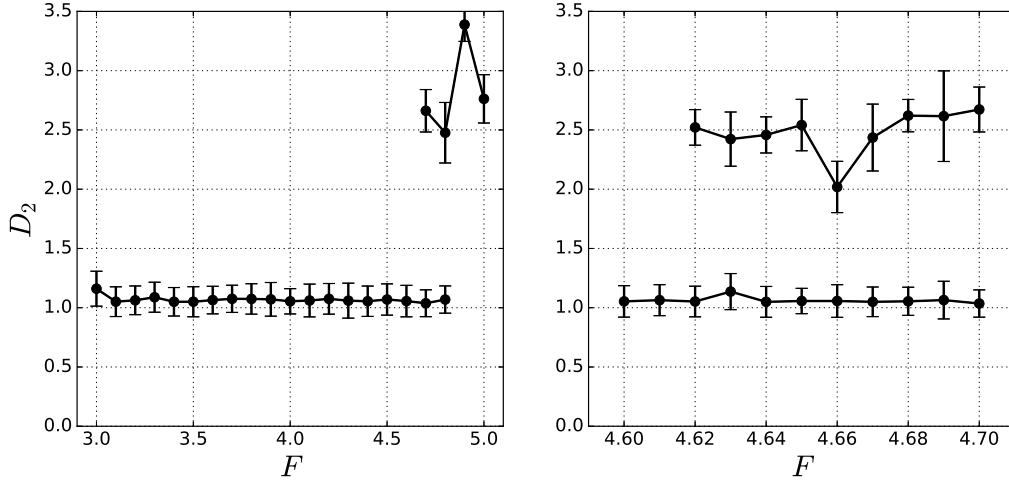


Рис. 6: Корреляционная размерность аттрактора системы Лоренца в зависимости от управляющего параметра F . Слева для F от 3 до 5 с шагом 0.1, справа – для F от 4.6 до 4.7 с шагом 0.01. Доверительный интервал 2σ .

В разделе 1.3 Формулируется байесов подход к обучению и оптимизации сложности предложенной модели, обсуждается численный алгоритм его реализации. На основании данного подхода выводятся функции стоимости, называемая байесовой обоснованностью модели H_i с данными структурными параметрами, выражение для которой может быть получено путем интегрирования так называемой функции правдоподобия $P(\mathbf{X}|\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}, H_i)$ по априорной вероятностной мере $P_{pr}(\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}|H_i)d\boldsymbol{\mu}_\varphi d\mathbf{s}$, введенной в пространстве параметров модели³ [48]:

$$P(\mathbf{X}|H_i) = \int P(\mathbf{X}|\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}, H_i) \cdot P_{pr}(\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}|H_i)d\boldsymbol{\mu}_\varphi d\mathbf{s}. \quad (4)$$

Максимизация обоснованности (4) с одной стороны отсекает слишком простые модели H_i , которые плохо соответствуют наблюдаемым данным, а с другой – слишком сложные, или переобученные модели и, тем самым, позволяет получить модель, которая наиболее адекватно усваивает информацию о системе по имеющейся выборке данных.

Выражение для правдоподобия модели $P(\mathbf{X}|\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}, H_i)$ выводится исходя из предположения о том, что лишь ограниченные сегменты фазовой траектории внутреннего оператора эволюции (2) длины w хорошо отслеживают фазовую траекторию системы на главном многообразии. При этом параметр w ограничивает также и глубину ре-

³В вектор $\boldsymbol{\mu}_\varphi$ собраны параметры детерминированной части модели; в вектор \mathbf{s} собраны параметры $s_{11}, s_{21}, s_{22}, \dots, s_{DD}$ треугольной матрицы \mathbf{S} стохастической части модели

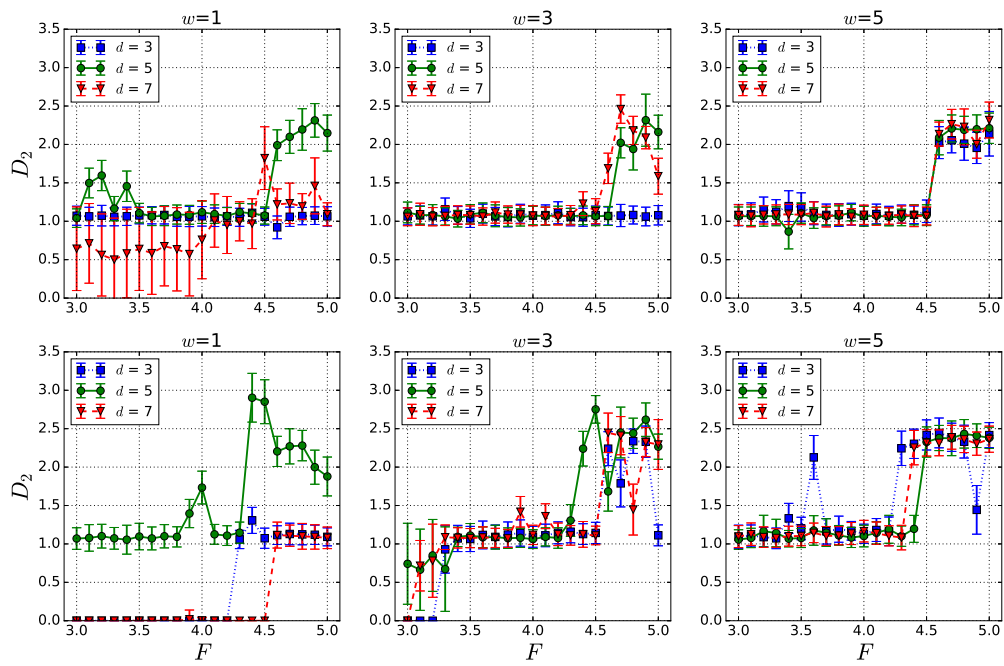


Рис. 7: Корреляционная размерность аттракторов эмпирической модели при различных значениях ее структурных параметров в зависимости от параметра F . Доверительный интервал 2σ .

куррентного слоя ИНС, которая определяет детерминированную часть эмпирической модели.

$$P(\mathbf{X}|\boldsymbol{\mu}_\varphi, \mathbf{s}, H_i) = \prod_{n=0}^{K-1} \left[\prod_{i=1}^w \frac{1}{(2\pi)^{D/2} \cdot |\mathbf{S}\mathbf{S}^T|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{h}(i+n)^T (\mathbf{S}\mathbf{S}^T)^{-1} \mathbf{h}(i+n)\right) \right], \quad (5)$$

$$\mathbf{h}(i+n) = \mathbf{x}(l+i+n \cdot w) - \boldsymbol{\varphi}^{(i)}(\mathbf{z}(l+n \cdot w)).$$

Здесь K – число сегментов длины w на которые делится наблюдаемая выборка данных.

Величина сегмента w является важным структурным параметром эмпирической модели. Она определяет интервал времени на котором модель может отслеживать динамическую связь между состояниями ДС на главном многообразии. Величина w ограничивается тремя факторами. Первый из них связан с проблемой затухающих градиентов [21] и приводит к тому, что вычисление правдоподобия сильно усложняется при достаточно больших w . Два других фактора являются более фундаментальными. В случае хаотического поведения ДС на главном многообразии величина w ограничивается величиной, обратно пропорциональной старшему ляпуновскому показателю ДС. Наконец, в ситуации, когда шумовые процессы оказывают сильное влияние на динамику системы на главном многообразии, величина w ограничена значением $w = 1$.

В конце раздела подробно обсуждается алгоритм вычисления интеграла (4) с учетом правдоподобия (5).

В **разделе 1.4** эффективность развиваемого подхода демонстрируется на примерах, моделирующих ситуацию, когда сигнал низкоразмерной ДС (регулярной и хаотической) зашифрован в многомерных данных с помощью нелинейного преобразования с добавлением шума. Показывается, что в этом случае оптимальная размерность главного многообразия, лежащего в основе многомерных данных, совпадает с размерностью фазового пространства базовой низкоразмерной системы. При этом эмпирическая модель в форме рекуррентной ИНС корректно воспроизводит как динамику системы в пространстве данных, так и свойства ее низкоразмерного аттрактора.

Вторая глава диссертации посвящена приложению разработанных методов для реконструкции высокоразмерных хаотических ДС – моделей атмосферной динамики.

В **разделе 2.1** кратко описывается общая структура главы.

В начале **раздела 2.2** подробно обсуждается метод предварительной линейной редукции данных, измеряемых на географической пространственной сетке, с помощью метода главных компонент. Основная часть раздела посвящена решению

задачи эмпирического моделирования низкочастотной изменчивости в трехуровневой квазигеострофической модели атмосферы средних широт (QG3). Эта модель была предложена в работе [27] в качестве упрощенной модели для исследования динамики атмосферы и состоит из уравнений для потенциального вихря на трех уровнях по высоте, соответствующих давлениям 200-, 500- и 800 гПа. Она воспроизводит изменчивость атмосферы в широком спектре временных масштабов и достаточно реалистичную климатологию характеристик зимнего сезона в Северном полушарии, и, в этом отношении, сопоставима с глобальными моделями общей циркуляции. В работах [8, 19, 23] было обнаружено, что низкочастотная изменчивость в динамике системы QG3 (которая проявляется на временных масштабах от одной недели и более) связана с так называемыми «рекуррентными состояниями» в ее фазовом пространстве, называемыми также режимами погоды (англ. weather regimes). Эти состояния могут ассоциироваться с различными нелинейными структурами в фазовом пространстве, такими как неустойчивые состояния равновесия [19] или неустойчивые периодические орбиты [17]. Демонстрируется, что эмпирическая модель в форме рекуррентной ИНС, предложенная в первой главе диссертации способна корректно воспроизвести рекуррентные состояния модели QG3, соответствующие известным модам атмосферной изменчивости в Северном полушарии, а также статистику времен пребывания фазовой траектории системы QG3 в каждой из этих областей.

Раздел 2.3 посвящен исследованию возможностей эмпирического прогноза качественного поведения высокоразмерных хаотических систем на примере системы Лоренца-96 – феноменологической модели атмосферы, предложенной Эдвардом Лоренцем [25] для изучения фундаментальных вопросов, касающихся предсказуемости динамики атмосферы и прогнозирования погоды. Предлагается обобщение предложенной эмпирической модели в форме рекуррентной ИНС на случай реконструкции слабонеавтономных ДС. Приведены основные сведения о системе Лоренца-96. Демонстрируется способность модифицированной эмпирической модели к прогнозу изменений динамических режимов в системе Лоренца-96 с медленно меняющимся управляющим параметром. В данном случае изменение динамического режима системы Лоренца ассоциируется с изменением корреляционной размерности ее аттрактора: резкое изменение размерности является индикатором изменения динамического режима.

В **заключении** сформулированы результаты диссертационной работы, которые являются также и **положениями, выносимыми на защиту**:

1. Разработана новая форма эмпирической модели, предназначенная для глобальной реконструкции неизвестных динамических систем (ДС) по многомерным данным, основанная на многослойной рекуррентной искусственной нейронной сети (ИНС) и

позволяющая реконструировать как главное многообразие, лежащее в основе наблюдаемых данных, так и оператор эволюции на этом многообразии. Предложен способ обучения и оптимизации структуры эмпирической модели на основе вероятностного байесова подхода, который позволяет определить: (1) оптимальную размерность и степень нелинейности главного многообразия; (2) оптимальную степень нелинейности соответствующего оператора эволюции; (3) степень детерминированности реконструируемой ДС на рассматриваемых временных масштабах.

2. Возможности разработанной модели продемонстрированы в ситуации, когда в основе наблюдаемых многомерных данных лежит низкоразмерная детерминированная ДС – регулярная и хаотическая. Показано, что оптимальная эмпирическая модель способна отделить скрытый в данных низкоразмерный детерминированный сигнал от аддитивного белого шума. Главные многообразия данных, получаемые с помощью эмпирической модели, топологически соответствуют аттракторам скрытых ДС. Ключевые свойства аттракторов детерминированных частей оптимальных эмпирических моделей аналогичны соответствующим свойствам аттракторов скрытых в данных ДС.

3. Эмпирическая модель успешно применена в задаче реконструкции низкочастотной изменчивости в трехуровневой квазигеострофической модели атмосферы с естественной орографией (QG3) – хаотической системе с большим числом степеней свободы. Показано, что эмпирическая модель корректно воспроизводит как рекуррентные состояния в фазовом пространстве модели QG3, связанные с ключевыми модами низкочастотной изменчивости атмосферы в Северном полушарии, так и статистику пребывания системы в каждом из этих состояний.

4. Эффективность эмпирической модели успешно продемонстрирована в задаче прогноза качественного поведения феноменологической модели атмосферы – системы Лоренца-96 – по слабо нестационарному временному ряду. Показана способность эмпирической модели реконструировать качественное поведение системы как на наблюдаемом участке, так и за его пределами. Продемонстрирована возможность эмпирической модели для воспроизведения как корреляционных размерностей, так и спектральных характеристик аттракторов системы в широком интервале времен, соответствующем медленному изменению ее управляющего параметра. Показано, что экстраполяция эмпирической модели за пределы интервала обучения позволяет предсказывать бифуркации, связанные с резким изменением размерности аттрактора исследуемой системы.

Список основных публикаций по теме диссертации

- [A1] Селезнев А.Ф., Гаврилов А.С., Мухин Д.Н., Лоскутов Е.М., Фейгин А.М. Моделирование сложных систем по наблюдаемым данным на основе рекуррентных искусственных нейронных сетей // *Известия ВУЗов. Радиофизика*. — 2018. — Vol. 61, no. 12. — Pp. 1005–1021.
- [A2] Gavrillov A.S., Seleznev A.F., Mukhin D.N., Loskutov E.M., Feigin A.M., Kurths J. Linear dynamical modes as new variables for data-driven ENSO forecast // *Climate Dynamics*. — 2019. — feb. — Vol. 52, no. 3-4. — Pp. 2199–2216.
- [A3] Seleznev Aleksei, Mukhin Dmitry, Gavrillov Andrey, Loskutov Evgeny, Feigin Alexander. Bayesian framework for simulation of dynamical systems from multidimensional data using recurrent neural network // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*. — 2019. — Vol. 29, no. 12. — P. 123115.
- [A4] Селезнев А.Ф., Гаврилов А.С., Мухин Д.Н., Лоскутов Е.М. Программа для расчета прогностической модели оператора эволюции в форме комплекснозначной искусственной нейронной сети. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2016661423. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 10 октября 2016 г.
- [A5] Селезнев А.Ф., Гаврилов А.С., Мухин Д.Н., Лоскутов Е.М. Программа для расчета Байесовой обоснованности модели оператора эволюции в форме комплекснозначной искусственной нейронной сети. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2017660391. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 21 сентября 2017 г.
- [A6] Гаврилов А.С., Мухин Д.Н., Лоскутов Е.М., Селезнев А.Ф. Программа для расчета прогностической эмпирической модели оператора эволюции по многомерному временному ряду с учетом его гладкости. Свидетельство о государственной

регистрации программ для ЭВМ №2017660485. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 22 сентября 2017 г.

- [A7] *Селезнев А.Ф.* Программа для расчета эмпирической динамической модели в форме рекуррентной искусственной нейронной сети со специальной структурой. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2019663660. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 22 октября 2019 г.
- [A8] *Seleznev A.F., Gavrilov A.S., Mukhin D.N.* Empirical complex-valued ANN-based model for ENSO forecast // Proceedings: Frontiers of nonlinear physics (FNP-2016). — 2016. — Pp. 184–185.
- [A9] *Фейгин А.М., Гаврилов А.С., Лоскутов Е.М., Мухин Д.Н., Селезнев А.Ф.* Нелинейные динамические моды: метод эмпирической реконструкции сложных систем // <<Нелинейные волны - 2018>>. — Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2019. — Pp. 193–224.

Литература

- [1] *Anishchenko Vadim, Pavlov Alexey, Janson Natalia.* Global Reconstruction in the Presence of a priori Information // *Chaos Solitons & Fractals.* — 1998. — Vol. 9. — Pp. 1267–1278.
- [2] *Baake Ellen, Baake Michael, Bock Hans, M. Briggs K.* Fitting Ordinary Differential Equations to Chaotic Data // *Physical Review A.* — 2000. — Vol. 45.
- [3] *Bezruchko B P, Smirnov Dmitry, Sysoev Ilya.* Identification of chaotic systems with hidden variables (modified Bock’s algorithm) // *Chaos, Solitons & Fractals.* — 2006. — Vol. 29. — Pp. 82–90.
- [4] *Bezruchko Boris P., Smirnov Dmitry A.* Constructing nonautonomous differential equations from experimental time series // *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics.* — 2001. — Vol. 63, no. 1. — Pp. 1–7.
- [5] *Brunton Steven L., Proctor Joshua L., Kutz J. Nathan.* Discovering governing equations from data: Sparse identification of nonlinear dynamical systems. — 2015. — Vol. 113, no. 15. — Pp. 3932–3937.
- [6] *Casdagli Martin, Eubank Stephen, Farmer J. Doyne, Gibson John.* State space reconstruction in the presence of noise // *Physica D: Nonlinear Phenomena.* — 1991. — aug. — Vol. 51, no. 1-3. — Pp. 52–98.
- [7] *Coifman Ronald R., Lafon Stéphane.* Diffusion maps // *Applied and Computational Harmonic Analysis.* — 2006. — Vol. 21, no. 1. — Pp. 5–30.
- [8] *Corti S., Giannini A., Tibaldi S., Molteni F.* Patterns of low-frequency variability in a three-level quasi-geostrophic model // *Climate Dynamics.* — 1997. — Vol. 13, no. 12. — Pp. 883–904.

- [9] *Cremers J., Hubler A.* Construction of Differential Equations from Experimental Data // *Zeitschrift für Naturforschung A.* — 1987. — Vol. 42, no. 8. — Pp. 797 – 802.
- [10] *Crutchfield James P., McNamara Bruce S.* Equations of Motion from a Data Series // *Complex Systems.* — 1987. — Vol. 1.
- [11] *Cybenko George.* Approximations by superpositions of sigmoidal functions // *Approximation Theory and its Applications.* — 1989. — Vol. 9, no. 3. — Pp. 17–28.
- [12] *Gómez A. J., Zhou C. S., Timmermann A., Kurths J.* Nonlinear dimensionality reduction in climate data // *Nonlinear Processes in Geophysics.* — 2004. — sep. — Vol. 11, no. 3. — Pp. 393–398.
- [13] *Ghil M., Allen M. R., Dettinger M. D. et al.* Advanced spectral methods for climatic time series // *Reviews of Geophysics.* — 2002. — feb. — Vol. 40, no. 1. — P. 1003.
- [14] *Gorban Alexander N., Kgl Balzs, Wunsch Donald C., Zinovyev Andrei.* Principal Manifolds for Data Visualization and Dimension Reduction. — 1st edition. — Springer Publishing Company, Incorporated, 2007.
- [15] *Gorodetskyi V., Osadchuk M.* Analytic reconstruction of some dynamical systems // *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics.* — 2013. — Vol. 377, no. 9. — Pp. 703–713.
- [16] *Gouesbet G., Letellier C.* Global vector-field reconstruction by using a multivariate polynomial L2 approximation on nets // *Physical Review E.* — 1994. — Vol. 49, no. 6. — Pp. 4955–4972.
- [17] *Gritsun A.* Statistical characteristics, circulation regimes and unstable periodic orbits of a barotropic atmospheric model // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 2013. — Vol. 371, no. 1991. — P. 20120336.
- [18] *Han Xiao, Shen Zhesi, Wang Wen-Xu, Di Zengru.* Robust Reconstruction of Complex Networks from Sparse Data // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 114, no. 2. — P. 28701.
- [19] *Hannachi A., Iqbal W.* On the Nonlinearity of Winter Northern Hemisphere Atmospheric Variability // *Journal of the Atmospheric Sciences.* — 2019. — Vol. 76, no. 1. — Pp. 333–356.

- [20] *Hannachi A., Jolliffe I. T., Stephenson D. B.* Empirical orthogonal functions and related techniques in atmospheric science: A review // *International Journal of Climatology*. — 2007. — jul. — Vol. 27, no. 9. — Pp. 1119–1152.
- [21] *Hochreiter Sepp.* The Vanishing Gradient Problem During Learning Recurrent Neural Nets and Problem Solutions // *International Journal of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*. — 1998. — Vol. 06, no. 02. — Pp. 107–116.
- [22] *Jolliffe I T.* Principal Component Analysis. Springer Series in Statistics. — 2nd edition. — New York, NY: Springer New York, 1986. — P. 271.
- [23] *Kondrashov D., Ide K., Ghil M.* Weather Regimes and Preferred Transition Paths in a Three-Level Quasigeostrophic Model // *Journal of the Atmospheric Sciences*. — 2004. — Vol. 61, no. 5. — Pp. 568–587.
- [24] *Kramer Mark A.* Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks // *AIChE Journal*. — 1991. — feb. — Vol. 37, no. 2. — Pp. 233–243.
- [25] *Lorenz E N.* Predictability: a problem partly solved // Seminar on Predictability, 4-8 September 1995 / ECMWF. — Vol. 1. — Shinfield Park, Reading: ECMWF, 1995. — Pp. 1–18.
- [26] *Mangan Niall M., Brunton Steven L., Proctor Joshua L., Kutz J. Nathan.* Inferring Biological Networks by Sparse Identification of Nonlinear Dynamics // *IEEE Transactions on Molecular, Biological, and Multi-Scale Communications*. — 2016. — Vol. 2, no. 1. — Pp. 52–63.
- [27] *Marshall John, Molteni Franco.* Toward a Dynamical Understanding of Planetary-Scale Flow Regimes // *Journal of the Atmospheric Sciences*. — 1993. — Vol. 50, no. 12. — Pp. 1792–1818.
- [28] *Mo Kingtse C., Ghil Michael.* Statistics and Dynamics of Persistent Anomalies // *Journal of the Atmospheric Sciences*. — 1987. — Vol. 44, no. 5. — Pp. 877–902.
- [29] *Molkov Y. I., Loskutov E. M., Mukhin D. N., Feigin A. M.* Random dynamical models from time series // *Physical Review E*. — 2012. — mar. — Vol. 85, no. 3. — P. 036216.
- [30] *Molkov Y. I., Mukhin D. N., Loskutov E. M. et al.* Prognosis of qualitative system behavior by noisy, nonstationary, chaotic time series // *Physical Review E*. — 2011. — sep. — Vol. 84, no. 3. — P. 036215.

- [31] *Mukhin Dmitry, Loskutov Evgeny, Mukhina Anna et al.* Predicting Critical Transitions in ENSO Models. Part I: Methodology and Simple Models with Memory // *Journal of Climate*. — 2015. — mar. — Vol. 28, no. 5. — Pp. 1940–1961.
- [32] *Mukhin D. N., Feigin A. M., Loskutov E. M., Molkov Ya I.* Modified Bayesian approach for the reconstruction of dynamical systems from time series // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. — 2006. — mar. — Vol. 73, no. 3. — P. 036211.
- [33] *Pikovskiy A.* Reconstruction of a neural network from a time series of firing rates // *Physical Review E*. — 2016. — Vol. 93, no. 6. — Pp. 1–4.
- [34] *Pires Carlos A. L., Hannachi Abdel.* Independent Subspace Analysis of the Sea Surface Temperature Variability: Non-Gaussian Sources and Sensitivity to Sampling and Dimensionality // *Complexity*. — 2017. — aug. — Vol. 2017. — Pp. 1–23.
- [35] *Pires Carlos A. L., Ribeiro Andreia F. S.* Separation of the atmospheric variability into non-Gaussian multidimensional sources by projection pursuit techniques // *Climate Dynamics*. — 2016. — apr. — Pp. 1–30.
- [36] *Ponomarenko V I, Prokhorov M D.* Extracting information masked by the chaotic signal of a time-delay system // *Phys. Rev. E*. — 2002. — Vol. 66, no. 2. — P. 26215.
- [37] *Schelter Björn, Mader Malenka, Mader Wolfgang et al.* Overarching framework for data-based modelling // *Epl*. — 2014. — Vol. 105, no. 3.
- [38] *Shandilya Srinivas Gorur, Timme Marc.* Inferring network topology from complex dynamics // *New Journal of Physics*. — 2011. — Vol. 13.
- [39] *Silverman B.W.* Density Estimation for Statistics and Data Analysis. Chapman & Hall/CRC Monographs on Statistics & Applied Probability. — Taylor & Francis, 1986.
- [40] *Smirnov D. A., Sysoev I. V., Seleznev E. P., Bezruchko B. P.* Reconstructing nonautonomous system models with discrete spectrum of external action // *Technical Physics Letters*. — 2003. — oct. — Vol. 29, no. 10. — Pp. 824–827.
- [41] *Sysoev I V, Ponomarenko V I, Kulminskiy D D, Prokhorov M D.* Recovery of couplings and parameters of elements in networks of time-delay systems from time series // *Phys. Rev. E*. — 2016. — Vol. 94, no. 5. — P. 52207.
- [42] *Sysoev Ilya V., Ponomarenko Vladimir I., Pikovskiy Arkady.* Reconstruction of coupling architecture of neural field networks from vector time series // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. — 2018. — Pp. 342–351.

- [43] *Sysoev I V, Prokhorov M D, Ponomarenko V I, Bezruchko B P.* Reconstruction of ensembles of coupled time-delay systems from time series // *Phys. Rev. E.* — 2014. — Vol. 89, no. 6. — P. 62911.
- [44] *Takens Floris.* Detecting strange attractors in turbulence // *Dynamical Systems and Turbulence*, Warwick 1980. — Springer Berlin Heidelberg. — Pp. 366–381.
- [45] *Wang Wen Xu, Yang Rui, Lai Ying Cheng et al.* Predicting catastrophes in nonlinear dynamical systems by compressive sensing // *Physical Review Letters.* — 2011. — Vol. 106, no. 15. — Pp. 1–4.
- [46] *Анищенко В.С., Павлов А.Н., Янсон Н.Б.* Реконструкция динамических систем в приложении к решению задачи защиты информации // *ЖТФ.* — 1998. — Vol. 68, no. 12. — P. 1.
- [47] *Анищенко В.С., Вадивасова Т.Е. Астахов В.В.* Нелинейная динамика хаотических и стохастических систем. — Саратов: Изд. Саратовского университета, 1999. — P. 368.
- [48] *Ветров Д.П., Кропотов Д.А.* Байесовские методы машинного обучения. Учебное пособие. — Москва: Изд. Московского университета, 2007.