

数据驱动的 复杂动态系统建模

SHUJU QUDONG DE
FUZA DONGTAI
XITONG JIANMO

向馗 著



国防工业出版社

National Defense Industry Press

数据驱动的复杂动态系统建模

向 馥 著

国防工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目(CIP)数据

数据驱动的复杂动态系统建模/向旭著. —北京:国防工业出版社,2013.8

ISBN 978-7-118-08878-6

I. ①数... II. ①向. III. ①动态系统—系统建模—高等学校—教学参考资料 IV. ①N94

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 166569 号

※

国防工业出版社 出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京嘉恒彩色印刷责任有限公司

新华书店经售

*

开本 710×960 1/16 印张 10¼ 字数 178 千字

2013 年 8 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2500 册 定价 89.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

序 言

建模的事情由来已久,或为分析,或为控制,相关专著教材不胜数。对于线性定常系统,现有方法已基本满足需要;但对于更复杂的系统,还缺乏有效方法。目前,工程实际系统的机理越来越复杂,而观测获得的数据量也越来越大,发展数据驱动的建模方法尤为迫切和重要。数据驱动建模是有明确目标导向的探索,与专注于数据的挖掘方法、以及专注于目标(预测、优化等)的智能方法均有所不同。这正是本书内容的新颖性和撰写的必要性所在。

建模是一项重视人为参与的启发式工作,孤立的创新思路固然能解决某个具体问题,整体而言,还需依托坚实的理论基础,方能持久繁荣成为体系。在如今智能方法风行的情况下,作者能够回归于统计这一传统学科,用大半篇幅阐述其中与建模相关的前沿动态和最新成果,难能可贵。复杂系统千变万化,要想寻到普适的原理和方法,非常困难。若立足于数据本身,还是有一些基本的技术手段,值得每个从业者关注。本书介绍的理论与方法,都具有很强的横向扩展能力,对于自动化及其相关的工程学科,都具有很强的借鉴意义。

纵观本书,虽然形式上比较散,各个章节关联性不大,但是其内在的线索清晰——立足于数据、着眼于动态。细看起来,包括3方面问题:如何借用人工智能方法建立动态模型;如何借用稀疏性约束克服维数的困扰;如何借用函数型数据描述动态特性。

用人工智能方法理解动态系统,此前受关注较多,但人工智能本身的发展,离解析复杂动态尚有差距。书中提到的方法,用于识别和诊断是合适的,要想嵌入到控制系统中,则存在分辨率的问题。维数诅咒渗透在各个层面,通过变量选择,可获得拨云见日之效果。将稀疏性约束与主元分析结合,使后者成为一个更加强有力的降维工具。传统的统计方法缺乏对时间性的连续刻画能力,函数型数据分析的出现,弥补了这一缺憾。尽管函数型数据依然沿用了大量多元统计方法,但“相位”独立于“幅度”而存在,引发了一系列

值得探究的新方向。

本书的作者系我晚年指导的博士,近年来一直潜心于面向系统控制的建模方法研究,其工程背景决定了本书的写作风格。本书着重阐述了与工程应用密切相关的基本概念和理论结论,而对于数学推导的细节则只用极少篇幅。通俗地讲,着重“是什么”、“怎么样”,即概念是什么,方法是什么,能够解决什么样的问题,怎么解决,略过“为什么”,对于这些概念和方法的缘由、证明暂不求甚解,留待亲身实践以后再做了解不迟。如此一来,既能帮助急需实用的读者快速定位到适合的方法,也使一些专门兴趣的读者能够顺利转移到更深入的理论层面。

对于希望深入掌握动态系统建模与应用的读者,本书是值得一读的;对于受困于某个建模问题的工程技术人员,也不妨翻阅本书作为参考;对于工程科学领域的本科和研究生,可选择其中某些部分阅读,开拓视野。

在本书出版之际,谨为之作序,寄望于作者能够百尺竿头,更进一步。

本书的写作和出版受国家自然科学基金项目 No. 61101022 资助。

蒋静坪

2013 年 3 月

目 录

第 1 章 计算与动态	1
1.1 复杂系统	1
1.1.1 传统流派	1
1.1.2 涌现	3
1.2 计算与动态之争	8
1.2.1 从进化论、认知到控制	8
1.2.2 计算与动态的区别	12
1.2.3 计算力学与 ε 机	14
参考文献	18
第 2 章 符号化建模	20
2.1 符号推理与重构	20
2.1.1 模式发现	20
2.1.2 因果态分割重构	24
2.1.3 一个例子	27
2.2 时间序列的符号化	31
2.2.1 符号化评价	31
2.2.2 符号化方法	35
2.2.3 性能比较	37
2.3 异常检测算法	44
2.3.1 结构向量模型	44
2.3.2 提取结构向量	46
2.3.3 异常测度	49
2.3.4 D - Markov 机	51
2.4 两个实例	53
2.4.1 Duffing 振子	53
2.4.2 曲轴疲劳断裂	56

2.4.3 性能比较	59
参考文献	64
第3章 稀疏化建模	66
3.1 稀疏性与稀疏罚	66
3.1.1 稀疏性	66
3.1.2 稀疏罚 Lasso	69
3.1.3 lasso 的变种	71
3.2 主元分析	77
3.2.1 历史与背景	77
3.2.2 理论与方法	80
3.2.3 核主元分析	83
3.3 稀疏主元分析	86
3.3.1 基本框架	86
3.3.2 转化为凸问题	88
3.3.3 求解方法	90
3.4 实例——T 波交替幅度量化	92
3.4.1 T 波交替	92
3.4.2 幅度量化	95
3.4.3 结果讨论	97
参考文献	100
第4章 函数化建模	106
4.1 函数型数据	106
4.1.1 关于曲线的统计学	106
4.1.2 平滑——从采样点到曲线	110
4.2 函数型数据的配准	114
4.2.1 向参考曲线看齐	114
4.2.2 如果没有参考曲线	117
4.2.3 分离幅度与相位	120
4.3 函数型主元分析	124
4.3.1 一个基本的框架——多元统计	124
4.3.2 一些细微的差异——样本结构	127
4.3.3 一种全新的视角——微分流形	131

4.3.4 量化幅度和相位变异	133
4.4 函数型主元回归	138
4.4.1 线性回归的框架	138
4.4.2 基于主元的回归	140
4.4.3 时间序列回归	144
4.4.4 引入稀疏性	147
参考文献	150
后记	154

第1章 计算与动态

自从牛顿力学和相对论以来,复杂性的研究再一次吸引了几乎所有科学工作者的目光,但是复杂究竟意味着什么,却是见仁见智,模糊不清。

复杂性的研究几乎可以涵盖所有的学科,越来越多的人从复杂性研究寻找解决问题的方法,但是,过渡泛化复杂性概念是危险的。本节所说的复杂系统主要是指有复杂涌现行为的系统,而不是仅仅具有多个单元,处理起来很麻烦的系统。

复杂系统本身究竟是依赖于计算推理、还是动态演化,是一个根本性问题。进化论、认知科学以及控制论中存在的争论或对立,看似毫不相关,实际上,它们都可以归结为计算和动态之间的冲突。

调和这种矛盾冲突,需要新的理论框架,这并不容易。如何让这种高屋建瓴的研究,根植于实际系统,改进传统建模的理念和思路,同样是一种挑战。

1.1 复杂系统

1.1.1 传统流派

过去 50 年间,复杂性研究出现了百花齐放的局面,本节只是挑选了一些有代表性的工作做简单介绍。由于复杂性研究还远没到下结论的时候,许多学术观点随着时间的推移不断起起落落,用正确或错误去评价任何复杂性学说都为时尚早。本节只是简单回顾一下它们的主要思想。

比利时 Brussels 学派著名的统计物理学家 Prigogine 于 1969 年提出了耗散结构理论^[1](Dissipative Structure)。耗散结构理论可概括为:一个远离平衡态的非线性的开放系统,通过不断地与外界交换物质和能量,在系统内部某个参量的变化达到一定的阈值时,通过涨落,系统可能发生突变即非平衡相变,由原来的混沌无序状态转变为一种在时间上、空间上或功能上的有序状态。这种在远离平衡的非线性区形成的新的稳定的宏观有序结构,由于需要不断与外界交换物质或能量才能维持,因此称之为“耗散结构”。一般认为,耗散结构理论包含 5 个基本概念:远离平衡态、非线性、开放系统、涨落、突变。

德国 Stuttgart 大学物理学家 Haken 在 1970 年提出协同学^[2] (Synergetics)。它有一个基本的出发点——“很多子系统的合作受相同原理支配而与子系统特性无关”。协同学认为,系统内部各个子系统在外参量驱动下相互作用,以自组织的方式在宏观上形成空间、时间或功能上的有序结构。系统的状态由一组状态参量来描述,这些参量随时间变化的快慢不相同。其中,缓慢变化的参量决定了系统的宏观行为,表征了系统的有序程度,称为序参量。其他变化快的参量都由序参量支配,称为支配原理,它是协同学的基本原理。序参量随时间变化的非线性方程称为演化方程,是协同学的基本方程。

法国数学家 Thom 在 1972 年正式提出了突变理论^[3] (Catastrophe Theory)。突变理论主要试图从数学的角度来讨论微分动力学系统中形态发生跳跃变化的普遍理论,并将它应用到生物学中。它主要的出发点是分叉理论和奇异性理论。Thom 讨论的是光滑的微分动力学系统中稳定平衡态的分叉问题,但是,一个动力学系统中,除了平衡态之外,还可能有振荡、概周期运动、混沌(当时还没有混沌的概念)等形态,同时,自然界的系统不一定和数学上的微分动力学系统吻合,所以,突变理论实际上只在一定的条件下适用。由于实际系统往往无法检验它们的数学机制,所以 Thom 建议“通过对一种过程发生的宏观检验和对其奇异性的局部和全局分析,我们可以试图重建支配它的动力学(模型)”^[4]。

混沌的研究在过去一个世纪经历了一个非常漫长的过程^[5]。混沌最早源于 Poincare 的工作,1890 年,他在讨论三体问题时得出了双重渐近解,这便是混沌最早的雏形。1963 年, Lorenz 发表了题为“确定性非周期流”的论文,标志着混沌时代的到来。1976 年, May 在研究 Logistic 方程时发现了混沌分叉现象。1976 年, Feigenbaum 发现了混沌现象中存在普适性,随后他用重整化群方法进行了解析计算。1979 年, California 大学 Santa Cruz 分校的动力学系统研究小组——Shaw、Farmer、Packard、Crutchfield,把信息论的观点引入到混沌研究中,他们发明了一套方法,适合从数据序列中重新构造相平面,观察系统的吸引子。2005 年,德国 Max - Planck 研究所的 Stania^[6] 在一种新的光电效应实验中观察到了量子世界的混沌行为,这一发现进一步推动混沌理论的发展。

混沌从数学世界中走出来已经有 40 余年的历史,但一直缺乏统一的定义^[5]。Cornell 大学的数学家 Holmes 的提法是:某些(通常是低维的)动力学系统的复杂的、非周期的、有吸引力的轨道。中国物理学家郝柏林的提法是:一种非周期的有序。Brookhaven 国家实验室的应用数学家 Stewart 的提法是:在一个简单决定论系统中存在表现随机性的周期行为。Yale 大学的理论物理学家 Jensen 的提法是:决定论和非线性动力学系统中无规则和非预期的行为。Santa Fe 研究所的物理学家 Crutchfield 的提法是:具有正的有限度熵的动力学。

法国数学家 Mandelbrot 在 1973 年首次提出分形 (Fractals) 的概念^[7]。分形有两个重要特点: 自相似性和标度不变性。尽管分形图形是不规则的, 但在不同尺度上, 分形图形的规则性是相同的。在欧氏空间中, 人们习惯于整数的维数, 分形理论把维数视为分数, 这种维数是物理学家在研究混沌吸引子时需要引入的重要概念。分形与混沌的关系极其紧密, 它们经常被放在一起解释, 1991 年创刊的国际刊物《Chaos, Solitons and Fractals》就把它们放在一起讨论。

德国生物学家 Eigen 在 1971 年提出了超循环理论^[8] (Hypercycle)。超循环学说认为, 化学反应循环可以分为不同的等级, 简单、低级的反应循环可组成复杂、高级的大循环系统。这种大循环在生物体内普遍存在, 由于分子演化中的自我复制作用, 组成了超级循环系统。这个超循环系统可以通过遗传、变异和选择而实现最优化, 它可以被纳入到达尔文的演化模式中。在分子水平上, 没有复制作用发生, 但选择的作用可以改变群体基因, 进而推动物种演化。

1990 年, 钱学森院士以及其他一些中国学者, 从系统科学的观点出发, 分析了自然界和人类社会中的一些极其复杂的事物, 总结提炼出复杂巨系统的概念, 开辟了开放的复杂巨系统这个新的科学领域^[9]。开放复杂巨系统的主要性质可以概括为: 开放性、复杂性、进化与涌现性、层次性、巨量性。开放复杂巨系统研究的出发点和目标都是要解决实际问题, 正如钱学森院士所说: “人认识问题只能从具体问题入手, 从解决一个个开放的复杂巨系统问题开始”。在面对现实问题时, 人们所能够做的就是实事求是地寻求有很大局限性的, 又有实际效果的解。

1.1.2 涌现

涌现 (Emergent) 的研究是目前复杂性研究中的热门领域。究竟什么是涌现, 众说纷纭, 而且多数是描述性的, 这里不一一列举。《牛津英语词典》^[10] 对 “emergent” 一词给出了两个解释。

(1) 形容词, 出人意料的发生或出现。

(2) 名词, 由一些因素组合产生的效果, 它不能看作单个效果的和 (an effect produced by a combination of causes but unable to be seen as the sum of their individual effects)。

对于涌现的研究, 大致可以分为两个阶段, 早期的涌现进化论和现代的复杂性研究^[11]。20 世纪 20 年代, 西方的哲学和宗教领域兴起了涌现进化论的思潮。代表性著作主要有英国心理学家 Morgan 的《涌现进化论》、英国哲学家 Alexander 的《空间、时间和神性》、英国思想家 Whitehead 的《过程与实在》。Whitehead 晚年旅居 Harvard 大学, 他的思想对现代复杂性研究影响很大。

“涌现”就像蒙娜丽莎的微笑一样,每个人面对它都有不同的感受。目前,在涌现的研究上最具特色的要数 Santa Fe 研究所。本文无力探究涌现的深刻含义,只想在此首先介绍 Santa Fe 研究所的概况,以及它具有代表性的研究成果。这些颇具特色的研究,也许可以加深人们对涌现的理解。

从 20 世纪 60 年代开始,世界各地陆续出现了许多复杂性研究的学说。经过 20 年的争论,科学家们最终发现,尽管短时间内很难找到一个统一的复杂性理论,但不同学科都面临同样的问题——涌现。因此,打破学科界限,积极开展跨学科的研究成为必要。1984 年,3 个诺贝尔奖得主,理论物理学家 Gell - Mann、凝聚态物理学家 Anderson、经济学家 Arrow 积极倡导成立了 Santa Fe 研究所。Santa Fe 研究所的成立,标志着现代复杂性研究进入了一个新的历程。美国作家 Waldrop^[12] 专门为 Santa Fe 研究所写了一本传记,里面充满了具有传奇色彩的故事,很多人都是从这本书开始认识复杂性研究的。

目前,Santa Fe 研究所的研究主要集中的 6 个方面:认知神经科学(Cognitive Neuroscience)、物理和生物学系统中的计算(Computation In Physical And Biological Systems)、经济和社会的相互作用(Economic And Social Interactions)、进化动力学(Evolutionary Dynamics)、网络动力学(Network Dynamics)、系统鲁棒性(Robustness)。Santa Fe 研究所虽然影响很大,但它只有约 50 个常驻人员。除了少数工作人员以外,其余主要包括:全职研究员(Research Faculty)、博士后、访问学者,除了全职研究员变动较少以外,其余人员的流动非常大。Santa Fe 研究所最大的特色在于它大约有 60 多名外围研究成员(External Faculty)。这些人分布在世界各地的大学和研究所,他们都是各个领域的佼佼者,而且对跨学科的研究感兴趣。虽然他们都经过一个正式的任命程序,但他们与 Santa Fe 研究所之间仅限于学术思想的交流,是一种松散的合作关系。正是这些人的工作,使 Santa Fe 研究所不断焕发出勃勃生机。Santa Fe 研究所松散性使它不像一个现代意义的科学研究所,更像一个文艺复兴时期的民间学术组织,它的成功值得每个科学工作者反思。

Santa Fe 研究所另一个成功之处在于它的开放性。从 2000 年开始,Santa Fe 研究所每年都会出资举办复杂系统的夏令营。除了每年都在 Santa Fe 本地举办以外,2001 年、2002 年在匈牙利的 Budapest 举办了两届,2004 年、2005 年在中国青岛和北京举办了两届。2006 年 7 ~ 8 月将继续在北京举办。从 1989 年开始,Santa Fe 研究所每年大约有 50 篇左右高水平的工作文档(Working Papers)在它的网站上免费提供下载。这些文档都是 Santa Fe 研究所的研究人员正在进行的工作,作为期刊文章发表也许还不成熟,但它们已经是一些阶段性的成果。这些文档基本都是各个领域最前沿的成果,免费的馈赠使全世界无数人

从中受益。这里的部分研究最初就来自于 Santa Fe 研究所在 2002 年的两篇工作文档。

Santa Fe 研究所虽然历史很短,但它已经成为全美最好的五大研究所之一。Santa Fe 研究所松散的组织策略和开放的研究态度,使它有可能成为继德国的 Göttingen、美国的 Princeton 之后世界上第三个科学中心。

由于本文的研究偏向工程方向,所以主要介绍了 Santa Fe 研究所中物理学、计算机方面的工作,对它们在生物、化学、经济、社会等方面的工作都略去不谈。在 Santa Fe 研究所中,很多研究都和特定的人联系在一起,因此下文把他们联合起来介绍。

Gell Mann 是 20 世纪极富盛名的理论物理学家之一。他因为成功预言夸克的存在而获得 1969 年的诺贝尔物理奖,同时他也是 Santa Fe 研究所最早的创立者之一。Gell Mann 是现代复杂性研究的领军人物,他的《夸克与美洲豹》是一部复杂性方面提纲挈领的著作,下面将介绍 Gell Mann 眼中的简单与复杂性。

Gell Mann 认为复杂性是自然基本定律和偶然性相互作用的结果^[13]。支配基本粒子的定律是简单的,主宰所有粒子与力的统一量子场——超弦理论,以及宇宙膨胀开始时的初始条件都是简单的。量子力学是基本定律,它只能给出各种可能的宇宙粗粒化历史的存在概率。正是由于粗粒化,使得概率具有确定的定义,它也允许对自然进行一种近似经典的、决定论的描述。那些偏离经典规律的描述会导致历史的分支,不同分支存在的概率不同。所有可能的粗粒化历史构成了一个分支树,从这个意义上说,量子力学的不确定性远远超出了 Heisenberg 不确定原理的范围,而且,这种不确定性会在非线性系统中通过混沌现象被进一步放大。人类所看到的世界相当于一个半经典领域的世界,由于仪器水平的限制,人们得到的是一个更加粗糙的形式,这进一步增加了现实世界的偶然性。

通过 Gell Mann 的论述,可以认为“随机”有 3 个不同层次的含义^[13]。

(1) 量子过程固有的纯粹的随机。

(2) 透过粗粒化历史表现出来的一定程度的随机。

(3) 由于观测精度和观测长度的限制,导致的类似随机的情况。

关于什么是“随机”,英国数学家 Stewart 在“否定随机性”一文中也做过类似的阐述^[14]。

Holland 是美国 Michigan 大学计算机教授和心理学教授,他也是早期 Santa Fe 研究所的参与者之一。不过,在加盟 Santa Fe 研究所之前,他已经在复杂自适应系统(Complex Adaptive Systems)领域默默研究了 25 年。在 Gell Mann 所倡导的复杂性中,复杂自适应系统是非常重要的一环,因为适应性很好地解释了涌

现结构之间的相互作用。

Holland 将复杂自适应系统分为 7 个基本点^[15]。

(1) 聚集 (Aggregation), 聚集既是一种简化系统的方法, 又是一种建立模型的手段, 复杂自适应系统中的 agent 通过聚集作用形成高一级的 meta-agent。

(2) 标识 (Tagging), 复杂自适应系统通过标识来操纵对称性, 促进具有选择性的相互作用, 使 meta-agent 得以凸现。

(3) 非线性 (Nonlinear), 非线性相互作用使聚集行为的结果比预期的要复杂得多。

(4) 流 (Flows), 它是指 agent 相互作用的网络上资源的流动, 网络和流都随时间流逝和经验积累而表现出变化的适应性。

(5) 多样性 (Diversity), 它是不同 agent 的聚集行为引发资源的流动, 在非线性的机制的作用下, 复杂自适应系统不断适应的结果。

(6) 内部模型 (Internal Model), 内部模型是实现预知的机制, 它对未来的状态做出隐式的 (Tacit) 或显式 (Overt) 的预测。

(7) 积木 (Building Block), 复杂自适应系统通过自然选择和学习, 寻找那些已被检验过能够再使用的元素, 就能把复杂事物分解。

在这 7 个基本点中, 标识、内部模型、积木属于机制, 聚集、非线性、流、多样性属于特性。Holland 在这些基本点上建立回声 (Echo) 模型, 在计算机上运行回声模型, 就可以观察到复杂自适应系统中机制的作用过程和相应的结果。

Langton 是 Michigan 大学计算机博士, 从 1984 年到 1990 年, 他所有博士论文的工作全部集中在人工生命领域, 他是这个领域的缔造者。在他获得博士学位之前, 世界范围内的人工生命研讨会已经举办了两届。

人工生命的研究建立在元胞自动机 (Cellular Automata) 的基础上。元胞自动机是 Von Neumann 在 20 世纪 40 年代提出来的。所谓元胞自动机, 即: 每一个细胞都是一个简单抽象的自动机, 每个自动机每次处于一种状态, 下一次的状态由它周围自动机的状态和它本身的状态根据某种预先定义的规则转换表确定^[16]。

Langton 的研究发现, 如果把元胞机作为一个动力学系统, 把规则表作为参数, 该系统产生的结果会随参数的变化而显示出某种相变现象。在参数较大时, 元胞机的行为呈现混沌状态。在从有序状态到无序状态并最终过渡到混沌状态的过程中, 元胞自动机产生了极其复杂的行为, Langton 称之为混沌的边缘 (Edge Of Chaos)^[16]。不过混沌的边缘的概念最初是由 Packard 提出的。

在混沌的边缘, 系统就有足够的稳定性来保存信息, 也有足够的流动性来传递信息, 这使系统内部实现自己的计算成为可能。Langton 发现, 混沌的边缘可

以体现在以下不同类型的系统中。

(1) 动力学系统: 秩序→“复杂”→混沌。

(2) 物质: 固体→“相变”→流体。

(3) 计算机: 停止→“不可决定”→不停止。

在这个基础上, Langton 做了一个大胆的假设, 他认为生命或智能可能也处于某种混沌的边缘: 过于稳定→“生命/智能”→过于喧闹^[12]。

自组织临界性(Self-organized Criticality)的概念是丹麦物理学家 Bak 提出来的。他在美国 Brookhaven 国家实验室工作并于 1988 年参与到 Santa Fe 研究所的工作中。Bak 和他的合作者 Tang、Wiesenfeld 在 1986 年研究“电荷密度波”的凝聚态现象时发现了自我组织的临界性。他们很快就认识到这个现象的深远意义并加以推广。

阐述自组织临界性最生动的例子是沙堆模型。在一个沙堆顶部添加沙粒, 沙堆的斜坡会越来越陡, 当坡度达到某个临界值时, 继续添加的沙粒会使沙堆崩落, 坡度减小, 而且, 崩落的沙粒数量相当精确地服从幂定律^[13]。

Bak 考察了地震、火山、超导体、生态进化等现象, 发现它们都具有共同特征。首先这些系统都从外部获取能量, 具有耗散特性, 其次这些系统都由很多相互作用的部分组成, 具有多层次性。临界状态下这些系统的行为都遵循幂定律^[17]。

由于幂定律被证明在自组织临界态情况下有效, 这使“自组织”成为一个非常通用的词, 表面上看, 它和涌现似乎特别相近。Santa Fe 研究所的科学家正试图弄清楚, 在没有外部作用的情况下, 规则简单的系统是如何“自组织”成复杂结构的。在这个问题上, 计算机往往能帮人们实现过程的模拟, 加快研究的步伐。

网络研究有很长的历史。20 世纪 40 年代 MIT 的神经生物学巨子 McCulloch 发表了“神经活动之逻辑微积分”, 论文宣称大脑可以被模拟成逻辑运行的网络, 这一认识激发了人工智能和认知心理学的诞生^[12], 但神经网络的研究并不顺利, 它一直被 Simon 和 Newell 的逻辑推理方法的成功所掩盖。虽然后来反向传播算法推动了神经网络的工程应用, 但这些与神经网络研究的最初出发点相去甚远。

Kauffman 在 McCulloch 的关照下, 1966 年到 MIT 做研究。Kauffman 认为, 生命本身的秩序纯粹产生于网络结构。他构造的随机布尔 NK 模型^①, 虽然取得了

① NK 模型能简练地生成适应度景观, N 指的是一个物种所包含的基因总数, K 表示这些基因间的互动程度或上位互动数。

一些有意义的结论,但并没有引起足够重视^[12]。

在 20 世纪 80 年代加盟 Santa Fe 研究所之后, Kauffman 重新开始网络研究,他提出了自催化系统的假设。他认为,一个循环的反应圈构成了一个自催化系统,虽然本质上这个系统不具有生命形式,但它具有明显的生命特征,比如发展、繁殖,甚至新陈代谢。自催化过程越过某个临界线后,会形成一个复杂催化反应网络,迅速合成高级化合物^[17]。自催化观点在经济和生态系统中具有很好的适应性。

近年来,量子理论和信息科学结合起来,出现了许多新的概念、原理和方法,“量子信息”作为一门新兴的学科分支应运而生。量子信息包括量子计算机、量子编码、量子密码通信、量子复制、量子隐形传态、量子对策论等^[18]。过去 20 年,人们关注更多的是量子计算的理论本身以及它在物理实现上的困难,对量子计算的数学模型研究较少。Moore 和 Crutchfield 在 1997 年提出了量子自动机的概念,把形式语言和经典自动机理论推广到量子领域。

按照 Moore^[19] 的定义,一个量子有限自动机是一个五元组 (H, s_0, Σ, U, F) , 其中 H 是有限维复 Hilbert 空间; s_0 是初始状态, $s_0 \in H$, 且 $\|s_0\|^2 = 1$; Σ 是有穷输入字母表; 对任意 $x \in \Sigma$, $U(x)$ 是 H 上的酉矩阵^①或酉算子; F 为终结状态, 它是 H 的子空间。如果 $U(x)$ 不是酉的, 则称其为广义量子有限自动机。由 (广义) 量子有限自动机识别的语言为 (广义) 量子正则语言。

根据 Moore 的定义, 在国内, 清华大学的邱道文^[20]、中国科学院的郑红^[21]、程伟^[22] 等人对量子自动机做了进一步的研究。目前, 关于量子计算机的理论研究已经远远超过了它在实际技术上的进展。作为一个全新的理念, 它非常值得期待。但是, 关于量子计算中所包含的物理学基本定律, 是否能为传统的科学技术带来有创意的新思路, 是一个非常值得探讨的问题。国内外, 有不少人另辟蹊径, 将量子的机理和特性与计算智能相结合, 取得了明显优于传统智能计算模型的结果, 并把它称之为量子计算智能 (Quantum Computational Intelligence)^[23,24]。

1.2 计算与动态之争

1.2.1 从进化论、认知到控制

进化论是 19 世纪的三大发现之一, 自从进化论诞生以来, 围绕它的争论就

① 若 n 阶复矩阵 U 满足条件 $U^T U = I$, 则称 U 为酉矩阵。

从没停止过。进化论的研究不仅仅是一个生物学的问题,它还牵涉到考古学、物理学等其他学科。进化论的学说很多,在此主要概述其中的两大派别,“灾变论”和“均变论”。

达尔文深受均变论思想的影响,并由此形成了他的渐进演变观点。19 世纪末,出现新达尔文主义^[25]。Mendel、Weismann 等人开展了对基因的研究,揭示了遗传变异的机制,用种质^①、突变、基因的不同组合和自然选择的长期作用来解释生物进化现象,弥补了达尔文主义的主要缺陷。

20 世纪初,出现了现代达尔文主义^[25]。Dobzhansky 等人将达尔文的选择论和新达尔文主义的基因论结合起来,构成了以自然选择学说和群体遗传学说为基础的现代达尔文主义。该学说认为:种群是生物进化的基本单位;基因突变和染色体畸变是生物进化的原始材料;突变、选择和隔离是 3 个基本环节。通常称新达尔文主义和现代达尔文主义为进化论中的选择主义。

灾变论是在 18 世纪末,由古生物学家 Cuvier 提出的。由于达尔文进化论的成功,使均变论在很长时间内统治着整个地质学领域。从 20 世纪中期开始,陆续有证据表明,由于地球环境的突发事件,如行星撞击、火山爆发、太阳耀斑、气候剧变、板块漂移等事件,导致地球在历史上曾发生过 5 次大规模的生物灭绝事件。1980 年,Alvarez 等人提出了“新灾变论”,开辟了地学研究的新思路^[26]。

由于这种生物爆发、灭绝、复苏的演化格局难以用达尔文的渐变理论来解释,因此,古生物学家 Eldredge 和 Gould 提出了点断平衡论^[26](Punctuated Equilibrium)。点断平衡论认为:生物进化中,重要的演化变化与成种事件是同时发生的,并不是通过种系的完全转化而完成的。它强调用合适的地质尺度来衡量成种作用,分支成种事件仅仅是地史上的瞬间事件。在成种过程发生后,物种在数百万年的停滞期中,其形态只发生微小的变化。通常称点断平衡论为进化论中的历史主义。

根据复杂系统研究的“自组织理论”,Kauffman、Fontana 等人提出了新的进化学说^[27]。他们认为生命形成以后的生态系统是复杂的开放系统,这个系统可以在平衡态和非平衡态之间转变。当系统处于非平衡态时,生物的种类和种群会发生巨大的变化,系统会因此跃迁到另一个状态。在状态跃迁的过程中,可能会出现物种大爆发的现象。这种进化论观点被称为结构主义。

选择主义强调的是系统内部的状态,以及它们在一定规则下的相互作用。可以说,Simon 的符号主义和 Holland 的遗传算法都受到了选择主义的影响。例如,可以用符号推理的方法来模拟 Mendel 的豌豆实验,而历史主义和结构主义

① 种质论认为:每一机体由两部分,即种质和体质,也就是现在所称的生殖细胞和体细胞所组成。