

# 基于自然梯度提升的空间物体轨道状态预测误差不确定性估计方法

陈慕羿<sup>1,2</sup>, 王大玲<sup>1†</sup>, 冯 时<sup>1</sup>, 张一飞<sup>1</sup>

(1. 东北大学 计算机科学与工程学院, 沈阳 110819; 2. 沈阳理工大学 自动化与电气工程学院, 沈阳 110159)

**摘要:** 针对空间监视环境中基于动力学模型的轨道状态预测方法精度不够、而基于机器学习的误差补偿模型可靠性不足的问题, 以及 SSA 应用中对不确定性建模的需求, 将轨道状态预测误差估计问题重新表述为概率预测问题, 提出了一种对物理模型的轨道状态预测误差进行建模的方法, 该方法将轨道状态变量误差的概率分布参数作为梯度提升算法的学习目标, 以量化轨道状态误差估计中的不确定性. 由于参数所对应的概率分布函数位于黎曼空间, 利用基于 Fisher 信息矩阵的自然梯度代替标准梯度, 推导了自然梯度的计算公式, 给出了状态预测误差的条件概率分布. 实验结果表明, 与仅采用物理动力学方法的状态预测相比, 采用本文所述的机器学习误差估计方法后, 轨道状态各分量的均方根误差至少降低了约 60%, 同时, 与其他常用不确定性估计方法相比, 本文方法可以得到更好的负对数似然值. 因此, 本文方法能够有效估计状态预测误差的不确定性, 提高将机器学习方法用于空间态势感知任务时的可靠性.

**关键词:** 空间态势感知; 不确定性; 机器学习; 自然梯度; Fisher 信息矩阵; 梯度提升

中图分类号: V448.21

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2021.0720

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



## Uncertainty Estimation Approach in Orbital Prediction Error of Space Objects Based on Natural Gradient Boosting

CHEN Mu-yi<sup>1,2</sup>, WANG Da-ling<sup>1†</sup>, FENG Shi<sup>1</sup>, ZHANG Yi-fei<sup>1</sup>

(1. College of Computer Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China; 2. School of Automation and Electrical Engineering, Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, China)

**Abstract:** In view of the insufficient accuracy of the orbital state prediction method based on the physical model in the space surveillance environment, and the insufficient reliability of the error compensation model based on machine learning, as well as the demand for uncertainty modeling in the SSA application, we reformulated orbital state prediction error estimation problem as a probability prediction problem, and proposed a method of using a gradient boosting machine to model the orbital state prediction error distribution. In order to quantify the uncertainty in the state error estimation, the parameters of the conditional distribution of the orbital state error is treated as targets for the gradient boosting algorithm. Since the probability distribution function corresponding to the parameter is located in the Riemann space, the natural gradient based on the Fisher information matrix is used instead of the standard gradient, and the formula of the natural gradient is deduced. As a result, conditional distribution of state prediction error can be calculated. Experiments show that compared with the state prediction method that only uses the physical dynamics, The root mean square error of each component of the orbital state is reduced by at least about 60%. At the same time, compared with other commonly used uncertainty estimation methods, our method can achieve a better negative log likelihood. Therefore, our method can effectively estimate the distribution of state prediction errors, and improve the reliability of using machine learning methods for space situational awareness tasks.

**Keywords:** space situational awareness; uncertainty; machine learning; natural gradient; Fisher information matrix; gradient boosting

收稿日期: 2021-04-25; 修回日期: 2021-08-23.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61772122,61872074). 国家重点研发课题(2018YFB1004702). 辽宁省教育厅科学研究项目(LG201932).

†通讯作者. E-mail: wangdaling@cse.neu.edu.cn.

## 0 引言

低地球轨道 (Low earth orbit, LEO) 是一个拥挤的地方, 目前, 除了已编目的两万余颗小行星、彗星等近地天体外, 还有成千上万的人造空间物体 (anthropogenic space objects, ASO) 在地球周围飞驰, 且它们的数量还会与日俱增. 这些物体绕地球高速旋转, 如果与卫星相撞, 即使是最微小的碎片也会对卫星造成灾难性的损害. 因此, 需要知道这些物体的位置并尽可能采取措施, 以尽量避免碰撞.

空间态势感知 (Space Situational Awareness, SSA) 主要研究近地空间环境中的轨道对象 (如侦察监视情报卫星、预警探测卫星、导航定位卫星、空间碎片、战略导弹、反导导弹等目标), 对其进行搜索跟踪、测轨编目、识别评估等. 空间态势感知的核心问题是推断 ASO 的当前状态, 并预测它们未来的状态. 许多 SSA 应用中, 例如跟踪、数据关联、相交分析、碰撞概率、传感器资源管理和异常检测等, 除了单一的状态预测值, 还需要尽可能精确地估计空间物体轨道状态的不确定性, 以便做出决策.

目前, 主要的轨道预测方法是基于物理动力学模型的, 利用扩展卡尔曼滤波等方法进行不确定性传播和量测更新<sup>[1]</sup>. 但是基于物理的方法要求对物体轨道、物体运行环境、操纵意图等信息具有精确的了解, 而这在现实中往往是不可能做到的. 首先, 轨道的测量来自具有噪声的地基雷达系统, 且测量间隔时间长; 其次, 我们对于大气密度等知识的了解是有限的; 卫星拥有者也不愿分享他们的机动计划. 以上因素都限制了物理模型的预测精度.

为了进一步提高预测精度, 需要对物理模型的预测误差进行建模. 依靠数据驱动的机器学习模型擅长从数据中寻找规律, 对于非线性问题具有很大优势, 只要有足够多的数据, 机器学习算法就可以学到潜在的规律. 因此, 可以利用机器学习模型, 对物理模型的预测误差加以校正, 提高预测精度. 近年来, 国内外均开展了将机器学习与轨道预测技术相结合的研究, 文献<sup>[2-3]</sup>利用提升树、支持向量机、神经网络等模型对空间物体的轨道预测误差进行补偿和改进. 2020年10月, IBM与德克萨斯大学奥斯汀分校合作, 发布了太空态势感知 (SSA) 开源项目<sup>[4]</sup>, 旨在利用机器学习模型改进轨道预测, 以便更准确的预测 ASO 的未来位置.

但是, 目前基于机器学习的轨道预测方面的研究都只考虑了对状态误差向量的单点估计值, 无法给出关于预测不确定性的任何信息. 然而, 量化不确

定性在现实环境中尤为关键, 好的不确定性估计可以表示关于模型可靠性和随机误差等方面的信息. 具体地说, 首先, 机器学习模型由于较难解释、容易过拟合等原因, 其可靠性和泛化能力不如物理模型, 虽然在大部分时候可以给出相当准确的结果, 但是少数时候, 也会得出误差很大的结果, 而这对于要求高可靠性的太空监视任务来说, 是难以接受的, 因此, 需要对其输出结果的可靠性做出量化估计, 以便更好的做出决策. 其次, 许多空间监视应用需要获得关于状态估计的不确定性信息<sup>[1,5]</sup>, 只利用单一点估计值, 无法计算事件发生的概率, 例如“两个 ASO 在未来一段时间内发生碰撞的概率”等问题. 最后, 利用单个点估计值, 也无法与传统滤波技术相结合进行后续的量测更新. 因此, 当将机器学习模型应用于空间监视任务时, 迫切需要以概率分布的形式给出关于模型输出的不确定性估计.

在机器学习领域, 目前对于不确定性的研究主要分为基于贝叶斯的方法和非贝叶斯方法<sup>[6]</sup>. 类似混合密度网络的概率神经网络捕获给定输入时, 输出所包含的内蕴随机不确定性. 贝叶斯神经网络通过学习参数的后验分布, 来量化网络参数的认知不确定性, 例如深度学习中的蒙特卡罗丢弃方法 (Monte-Carlo dropout)<sup>[7]</sup> 在训练与推断阶段, 均对模型参数进行丢弃, 进行推断时要求随机进行多次丢弃, 并将多个输出结果进行集成, 缺点是预测阶段计算量较大, 而且只能量化模型的认知不确定性. 非贝叶斯方法通常利用自助法或集成方法来训练多个概率神经网络, NgBoost 模型<sup>[8]</sup> 将梯度提升方法与自然梯度相结合, 但是只研究了一元正态分布的情况. 文献<sup>[9]</sup> 研究了基于能量模型的概率回归问题, 但能量模型训练难度较大. 高斯过程 (Gaussian Processes, GP)<sup>[10]</sup> 是一种可以给出概率预测的非参数贝叶斯方法, 但通常用于低维和小样本的回归问题, 计算复杂度高, 模型的训练速度慢. 在不确定性量化方面, 文献<sup>[11]</sup> 研究了时变系统的不确定性量化方法.

为了量化轨道状态误差估计中的不确定性, 本文将基于机器学习的 ASO 状态误差估计问题重新表述为概率预测问题, 提出了一种估计轨道预测误差的不确定性的新方法. 利用机器学习中的梯度提升算法, 在多元正态分布的状态误差假设下, 将轨道状态变量误差的概率分布参数作为梯度提升算法的学习目标, 从而给出轨道预测误差的概率分布. 训练优化时, 由于参数所确定的概率分布位于黎曼空间而非欧氏空间, 而黎曼空间中的最速下降方向由自

然梯度给出, 本文利用基于 Fisher 信息矩阵的自然梯度代替标准梯度, 推导了自然梯度的计算公式, 从而给出了状态误差向量的概率预测. 本文所提出的方法便于与传统滤波算法中的量测更新部分相结合, 可代替传统滤波算法中仅基于物理模型的状态转移与不确定性传播步骤, 当新的测量值到来时, 可结合量测更新方法, 给出轨道状态的后验分布, 提高系统精度, 更好的支持后续任务做出基于概率的决策.

## 1 基于机器学习模型的轨道预测误差估计

本文工作是在 IBM 的太空监视开源项目的基础之上进行的, 其主要思想是将物理模型与机器学习模型相结合, 利用基于物理的动力学模型进行轨道预测, 而机器学习模型则利用大量观测数据, 采用基于梯度提升<sup>[12]</sup>的 XGBoost<sup>[13]</sup>方法对物理模型的预测误差进行学习, 从而调整物理模型的预测, 提高预测精度.

考虑到非球形重力场等扰动, 物体运动状态的轨道动力学模型由常微分方程给出:

$$f(s, t) = \ddot{r} = -\mu_{\oplus} \frac{r}{\|r\|^3} + a_{per} + \Gamma \quad (1)$$

其中,  $s \in R^6$  表示 ASO 的状态,  $s = [r, v]^T$ ,  $r$  和  $v$  分别是惯性直角坐标系中的位置和速度.  $\mu_{\oplus}$  是重力常数,  $\|\cdot\|$  表示向量的欧几里得范数.  $a_{per}$  是由诸如非球体重力与大气压力等因素引起的扰动加速度, 最后一项是推力加速度向量.

对于一个给定的初始条件  $s_0 = s(t_0)$ , 方程的解可以被记为:  $s(t) = \phi(t; s_0, t_0)$ .

为了对动力学模型的预测误差进行补偿, 利用 XGBoost 构建梯度提升树 (Gradient boosting decision tree, GBDT), 估计物理模型的轨道预测误差. 梯度提升是一项监督学习技术, 主要思想是将多个弱学习器组合成一个加性的集合. 训练时, 模型采用串行学习方式, 下一个学习器的训练目标是当前学习器集合对于最终训练目标的残差, 然后, 将其输出用学习率进行加权, 并加入到当前集合中. 梯度提升是一种广泛使用的机器学习算法, 可在包含异构特征、复杂依存关系和嘈杂数据的任务上取得良好的效果, 对于回归问题也具有很好的效果, XGBoost 是一种基于梯度提升的方法, 采用了多项优化技术, 高效而灵活.

模型的训练数据由  $N$  个样本组成, 记为:  $\{x_i, y_i\}_{i=1}^N$ , 输入特征  $x \in R^{13}$  为:

$$x = (\Delta t, r_x^0, r_y^0, r_z^0, v_x^0, v_y^0, v_z^0, r_x^p, r_y^p, r_z^p, v_x^p, v_y^p, v_z^p)$$

其中,  $\Delta t$  表示相对于预测起始时刻  $t_0$  的时间间隔,  $r_x, r_y, r_z$  分别表示位置向量  $r$  的三维坐

标,  $v_x, v_y, v_z$  分别表示速度向量  $v$  的三维坐标, 上标 0 对应于预测起始时刻  $t_0$  的值, 上标  $p$  表示  $t_0 + \Delta t$  时刻的物理模型预测值. 目标输出为 6 维轨道状态误差向量  $y$ , 即机器学习模型对于  $t_0 + \Delta t$  时刻的物理预测误差的估计值:  $y = (e_x^r, e_y^r, e_z^r, e_x^v, e_y^v, e_z^v) \in R^6$ , 其中, 上标  $r$  和  $v$  分别表示位置和速度.

将物理模型与机器学习模型相结合, ASO 轨道状态预测过程可表示为:

$$\begin{cases} c_k = \phi_{k-1}(s_{k-1}, \Delta t) \\ e_k = g(s_{k-1}, c_k, \Delta t) \\ \hat{s}_k = c_k + e_k \end{cases} \quad (2)$$

其中,  $\phi$  为轨道动力学方程的解,  $s_{k-1}$  为  $k-1$  时刻的轨道状态,  $c_k$  为基于轨道动力学模型的状态预测值,  $c_k = (r_x, r_y, r_z, v_x, v_y, v_z) \in R^6$ , 包括  $x, y, z$  方向的位置分量和速度分量,  $g$  为机器学习模型,  $e_k$  为机器学习模型所估计的状态预测误差,  $\hat{s}_k$  为将物理模型与机器学习模型相结合得到的状态估计值.

## 2 不确定性估计模型建立与算法设计

前述基于 XGBoost 的回归模型只能给出状态预测的点估计值, 无法给出关于预测不确定性的信息. 但是, 无论是出于空间监视应用本身的需求, 还是由于机器学习模型的不可靠性, 都需要给出预测值的概率分布, 以代替单点估计值. 除此以外, 为了将其集成到滤波系统中, 与量测更新相结合, 也需要以协方差矩阵表示的不确定性. 具体的, 对于每个输入  $x_i$  需要得到状态误差向量  $y_i$  的条件概率分布:  $p(y_i|x_i)$ , 而不是仅仅给出单个类似  $E(y_i|x_i)$  的点估计值.

为了给出对状态误差向量的不确定性估计, 本文将轨道状态误差估计问题重新建模为概率回归问题, 假定状态误差  $y_i$  遵循以参数  $\theta_i$  表示的多元正态分布:  $p_{\theta_i}(y_i|x_i) = \mathcal{N}(\mu_i, \Sigma_i)$ , 将该条件分布的参数作为梯度提升算法的目标, 从而给出对于轨道状态误差的概率预测.

在正态分布的假设下, 需要估计协方差矩阵. 由于协方差矩阵是正定对称的, 因此, 6 维状态误差向量的协方差矩阵只包含 21 个独立参数. 为了保证模型输出满足正定对称性, 这里不直接预测协方差矩阵的各个分量, 而是将精度矩阵 (即协方差矩阵的逆矩阵) 进行 Cholesky 分解,  $\Lambda = \Sigma^{-1} = LL^T$ ,  $L$  为下三角矩阵, 模型只需估计  $L$  的非零元素, 进而计算出协方差矩阵. 可以看出, 精度矩阵一定是对称的. 为了保证它也是正定的, 只需约束  $L$  的对角项为严格的正值即可, 因此, 对于  $L$  的对角元素  $l_{ii}$ , 可以使模型估计其对数  $\log(l_{ii})$ .

将多元正态分布的参数记为:  $\theta = (\mu^T, \gamma^T)^T$ , 并令  $p_\theta(y|x) = \mathcal{N}(\mu(x), \Sigma(\gamma(x)))$ . 其中,  $\mu \in R^6, \gamma \in R^{21}, \Sigma, \Lambda, L \in R^{6 \times 6}$ . 若将  $L$  中的非零元素记为  $l_{ij}$ , 与协方差部分相关的模型输出记为  $z_{ij}$ , 则有:  $l_{ii} = \exp(z_{ii}), l_{ij} = z_{ij}$ . 为计算方便, 将  $z_{ij}$  记为向量形式:  $\gamma = (\gamma_i)^T = (z_{11}, z_{21}, z_{22}, z_{31}, \dots, z_{66})^T$ .

## 2.1 概率分布空间中的优化

对于一般的机器学习问题, 为了从观测数据中学习, 需要定义一个损失函数, 将预测值与观察数据进行比较. 对于概率预测问题, 需要定义一个“评分规则”(Scoring rule)<sup>[14]</sup>, 用于比较模型估计的概率分布与观测数据, 来衡量概率预测的精度, 为训练算法设定优化目标.

本文采用负对数似然作为评分规则, 假定  $P$  为预测分布,  $Q$  为真实分布,  $y$  为从  $Q$  中采样得到的一个样本值, 则评分规则可定义为:  $S(P_\theta, y) = S(\theta, y) = -\log(P_\theta(y))$ . 在此基础上, 可定义期望分数:  $\bar{S}(P_\theta) = E_{Q(y)}[S(P_\theta, y)]$ . 概率分布函数构成一个黎曼空间, 空间中的每个点对应一个概率分布, 每种适当的评分规则都诱导出一种散度, 散度对于不同参数化保持不变, 可以作为该空间中的局部距离度量, 定义为:  $D_S(Q||P) = \bar{S}(P) - \bar{S}(Q)$ , 这个值是非负的. 当采用负对数似然作为评分规则时, 所诱导出的散度即为 Kullback-Leibler 散度 (KL 散度):

$$D_S(P, Q) = D_{KL}(Q||P) \quad (3)$$

在机器学习中, 一般采用梯度下降方法对目标函数进行优化, 求出目标函数相对于参数的负梯度, 将其视为最速下降方向. 这里参数的变化是采用标准欧式距离来衡量的. 即:

$$\frac{-\nabla h}{\|\nabla h\|} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \arg \min_{d: \|d\| \leq \varepsilon} h(\theta + d) \quad (4)$$

可以看出, 这里的“最速下降”梯度非常依赖于参数空间的欧式几何结构. 但是, 与基于机器学习的常规预测问题不同的是, 这里的模型输出是概率分布的参数, 而非单个预测值. 若在参数空间中进行梯度下降, 存在两个问题: (1) 参数空间中, 两个参数之间的欧氏距离无法与这些参数所表示的概率分布之间的距离相对应, 不能很好表示概率分布空间的几何结构. (2) 梯度方向取决于所选择的参数化方式. 对于不同的参数选择, 参数空间中的“最速下降”方向在概率分布空间中对应的方向是不同的, 参数的选择对模型的训练具有很大影响.

因此, 本文采用自然梯度<sup>[15-18]</sup>进行优化. 其主要优点是: (1) 自然梯度对应着概率分布空间中的最速

下降方向; (2) 自然梯度不依赖于参数化, 当采用不同参数来表示概率分布时, 虽然不同参数空间中的最速下降方向依然是用参数空间坐标表示的, 但是在概率分布空间中对应对应的方向. 即自然梯度不依赖于所选取的参数坐标系. (3) 进行概率预测时, 算法中包含矩阵分解、求逆等运算, 采用自然梯度可以使得训练过程更稳定和高效, 可以更好避免训练过程中的数值不稳定、梯度消失等现象.

**定义 1** Fisher 信息矩阵 (Fisher information matrix, FIM)<sup>[15]</sup>: 对于以  $\theta = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N]^T$  为参数的概率密度函数  $p(x|\theta), p(x|\theta)$  相对于  $\theta$  的 Fisher 信息矩阵定义为:

$$\mathcal{I}(\theta) = E[\nabla \log p(x|\theta) \nabla \log p(x|\theta)^T] \quad (5)$$

Fisher 信息矩阵为  $N \times N$  半正定矩阵. 当满足某些正则性条件时, 也可写成如下形式, 其中,  $E$  表示期望,  $H_f$  表示  $f$  的 Hessian 矩阵:

$$\mathcal{I}(\theta) = -E[H_{\log p(x|\theta)}] \quad (6)$$

对于与参数无关的 KL 散度, 考虑其泰勒展开式, 可得到 KL 散度与 Fisher 信息矩阵的关系:

$$D_{KL}(P_{\theta_0+d}||P_{\theta_0}) = \frac{1}{2} d^T \mathcal{I}(\theta_0) d + O(d^3) \quad (7)$$

因此, Fisher 信息矩阵即为 KL 散度的局部二次逼近, 它将参数空间的欧式几何距离  $d$  与概率分布空间的几何 (局部距离由 KL 散度定义) 联系起来, 给出了二者的局部平移之间的近似变换关系. 事实上, KL 散度在黎曼空间上诱导出一个黎曼度量, 即 Fisher 信息矩阵.

Arnold 等人<sup>[17]</sup>证明了:

$$-\sqrt{2} \frac{\tilde{\nabla} h}{\|\nabla h\|_{\mathcal{I}(\theta)}^{-1}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \arg \min_{d: D_{KL}(P_{\theta+d}||P_\theta) \leq \varepsilon^2} h(\theta + d) \quad (8)$$

这里:  $\tilde{\nabla} h$  定义如下, 称为自然梯度<sup>[18]</sup>:

$$\tilde{\nabla} h = \mathcal{I}(\theta)^{-1} \nabla h \quad (9)$$

可以看出, 当采用 KL 散度作为概率分布的邻域的距离度量时, 负的自然梯度代表了概率分布空间中的最速下降方向.  $\mathcal{I}(\theta)$  和  $\tilde{\nabla} h$  都是用参数空间中的标准基定义的, 其表示依赖于参数化, 但是 KL 散度是不依赖于参数化的, 因此, 由  $\tilde{\nabla} h$  定义的概率分布空间中的方向是与参数选取无关的.

为了更深入考察基于自然梯度的优化, 分别采用标准梯度与自然梯度, 对从标准分布  $\mathcal{N}(0, 1)$  中采样的随机数据点进行拟合, 图 1、图 2 分别为负对数似然的标准梯度流和自然梯度流, 虚线为等高线, 带有箭头的黑色细实线为梯度流. 4 个黑色圆点代表不

同的初始值, 黑色粗实线是与 4 个初始值对应的梯度流. 可以看出, 相同坐标处的等高线都是相同的, 但由于采用了不同种类的梯度, 梯度流是不同的. 总的来说, 自然梯度除了利用一阶梯度信息, 还利用了二阶 Hessian 矩阵所提供的信息, 相当于引入了梯度变化趋势的信息, 对应的梯度流倾向于快速收敛到均值, 之后进一步拟合方差. 而标准梯度近似垂直于等高线, 常会出现“锯齿”现象, 对均值的拟合较慢, 从而也影响了方差的估计, 使得总体收敛速度较慢.

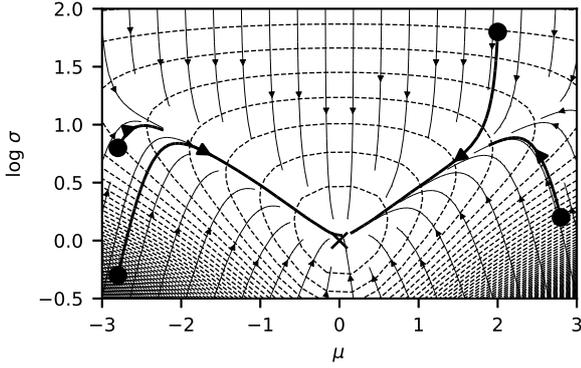


图 1 负对数似然的标准梯度流

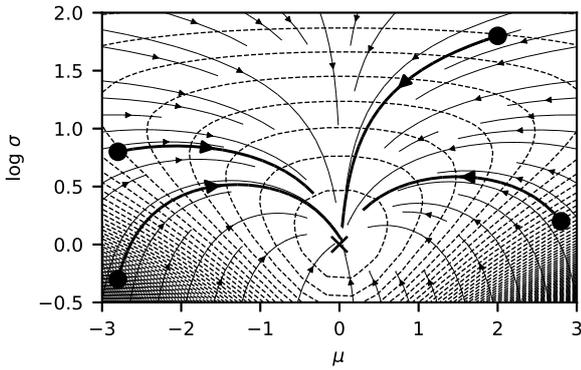


图 2 负对数似然的自然梯度流

## 2.2 自然梯度计算公式推导

为了得到状态误差向量的概率估计, 需要计算负对数似然评分规则对于分布参数  $\theta = (\mu, \gamma)$  的自然梯度. 根据 (9) 式, 负对数似然评分标准对于参数  $\theta$  的标准梯度  $\nabla h$  容易求出, 这里推导  $P_\theta(y|x)$  对于参数  $\theta$  的 Fisher 信息矩阵  $\mathcal{I}(\theta)$ .

由 (6) 式可知, Fisher 信息矩阵可写为:  $\mathcal{I}(\mu, \gamma) = -\mathbb{E}_{p(y|x)}[H_{\log p(y|x)}]$ . 其中:

$$p(y|x) = \mathcal{N}(\mu(x), \Sigma(\gamma(x))) \quad (10)$$

由于目标是求出  $p(y|x)$  对于参数  $(\mu, \gamma)$  的自然梯度, 为简洁起见, 下面省略  $x$ . 令:

$$U(y|\mu, \gamma) = \log p(y|x) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma(\gamma)| - \frac{1}{2} (y - \mu)^T (\Sigma(\gamma))^{-1} (y - \mu) + C \quad (11)$$

将  $U$  对于  $\theta$  的一阶偏导记为  $U^{(1)}$ , 则:

$$U^{(1)} = (U_\mu^T, U_\gamma^T)^T$$

$$U_\mu = \frac{\partial U}{\partial \mu} = \Sigma^{-1} (y - \mu) \quad (12)$$

记:  $\Sigma_i = \frac{\partial \Sigma}{\partial \gamma_i}, \Sigma^i = \frac{\partial \Sigma^{-1}}{\partial \gamma_i} = -\Sigma^{-1} \Sigma_i \Sigma^{-1}, w = y - \mu$ , 则:

$$(U_\gamma)_i = -\frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1} \Sigma_i) - \frac{1}{2} w^T \Sigma^i w \quad (13)$$

将  $U$  的二阶偏导矩阵 (Hessian) 记为  $U^{(2)}$ :

$$U^{(2)} = H_{\log p(y|x)} = \begin{bmatrix} U_{\mu\mu} & U_{\mu\gamma} \\ U_{\mu\gamma}^T & U_{\gamma\gamma} \end{bmatrix}$$

其中:

$$U_{\mu\mu} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left( \frac{\partial U}{\partial \mu} \right) = -\Sigma^{-1} \quad (14)$$

$U_{\mu\gamma}$  的第  $i$  列为:

$$(U_{\mu\gamma})_i = \frac{\partial}{\partial \gamma_i} \left( \frac{\partial U}{\partial \mu} \right) = \frac{\partial \Sigma^{-1}}{\partial \gamma_i} (y - \mu) = \Sigma^i (y - \mu) \quad (15)$$

由于  $\partial_j (\text{tr}(\Sigma^{-1} \Sigma_i)) = \text{tr}(\Sigma^{-1} \Sigma_{ij} + \Sigma^j \Sigma_i), U_{\gamma\gamma}$  的第  $(i, j)$  个元素为:

$$(U_{\gamma\gamma})_{ij} = -\frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1} \Sigma_{ij} + \Sigma^i \Sigma_j) - \frac{1}{2} w^T \Sigma^{ij} w \quad (16)$$

其中:  $\Sigma_{ij} = \partial^2 \Sigma / \partial \gamma_i \partial \gamma_j, \Sigma^{ij} = \partial^2 \Sigma^{-1} / \partial \gamma_i \partial \gamma_j$ .

由 (14)-(16) 式, 可以求出 Hessian 矩阵, 下面对其求负期望:

由  $\mathbb{E}(w) = 0$ , 可知:  $\mathbb{E}_{p(y|x)}[U_{\mu\gamma}] = \mathbf{0}$ , 因此:

$$\mathcal{I}(\mu, \gamma) = -\mathbb{E}_{p(y|x)}[U^{(2)}] = \text{diag}(\mathcal{I}(\mu), \mathcal{I}(\gamma)) \quad (17)$$

其中:

$$\mathcal{I}(\mu) = -\mathbb{E}[U_{\mu\mu}] = \Sigma^{-1} \quad (18)$$

由:

$$\Sigma^{ij} = \Sigma^{-1} (\Sigma_i \Sigma^{-1} \Sigma_j + \Sigma_j \Sigma^{-1} \Sigma_i - \Sigma_{ij}) \Sigma^{-1} \quad (19)$$

可知:

$$\mathcal{I}(\gamma)_{ij} = -\mathbb{E}[(U_{\gamma\gamma})_{ij}] = \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1} \Sigma_i \Sigma^{-1} \Sigma_j) = \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma \Sigma^i \Sigma \Sigma^j) \quad (20)$$

利用:

$$\Sigma^i = \frac{\partial \Sigma^{-1}}{\partial \gamma_i} = \frac{\partial (L L^T)}{\partial \gamma_i} = \left( \frac{\partial L}{\partial \gamma_i} \right) L^T + L \left( \frac{\partial L}{\partial \gamma_i} \right)^T \quad (21)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \gamma_i} = \frac{\partial L}{\partial z_{mn}} = \left[ \frac{\partial l_{jk}}{\partial z_{mn}} \right] = \begin{cases} \delta_{jm} \delta_{kn} l_{mm} & m = n \\ \delta_{jm} \delta_{kn} & m \neq n \end{cases} \quad (22)$$

由此可求出 Fisher 信息矩阵.

### 2.3 基于自然梯度提升的状态预测误差不确定性估计方法

基于自然梯度提升的状态预测误差不确定性估计方法如图 3 所示, 采用第 1 节所述的训练数据  $\{x_i, y_i\}_{i=1}^N$ , 从数据中学习分布参数时, 利用梯度提升方法, 在欧式空间中进行训练和预测, 采用决策树作为弱学习器, 组成了基于梯度提升树 GBDT 的学习框架. 若总迭代次数用  $M$  表示, 第  $m$  个迭代后的预测输出记为:  $\theta_i^{(m)} = ((\mu_i^{(m)})^T, (\gamma_i^{(m)})^T)^T$ , 其中  $\mu_i^{(m)}$  为 6 维状态误差向量的期望,  $\gamma_i^{(m)}$  为  $6 \times 6$  精度矩阵的 Cholesky 分解中的下三角矩阵中的非零元素组成的列向量. 分布参数的初始值对于所有样本都是相同的, 通过样本均值与经验协方差矩阵求得,  $\theta^{(0)} = \arg \min_{\theta} \sum_{i=1}^N S(\theta, y_i)$ , 对应着所有样本数据的最大似然参数估计. 第  $m$  个弱学习器的训练数据, 即需要拟合的目标值为:  $\{x_i, g_i^{(m)}\}_{i=1}^N$ , 利用弱学习器拟合无约束的最速下降方向, 学习到的函数可表示为  $f^{(m)} = (f_{\mu}^{(m)}, f_{\gamma}^{(m)})$ . 比例因子  $\rho^{(m)}$  是通过线搜索计算得到的:  $\rho^{(m)} = \arg \min_{\rho} \sum_{i=1}^N S(\theta_i^{(m-1)} - \rho \cdot f^{(m)}(x_i), y_i)$ , 为了提高性能, 利用学习率  $\eta$  实现正则化. 当第  $m$  个弱学习器训练完毕后, 预测值可利用所有  $m$  个已训练完毕的弱学习器进行计算:  $\theta_i^{(m)} = \theta_i^{(m-1)} - \eta(\rho^{(m)} \cdot f^{(m)}(x_i))$ .

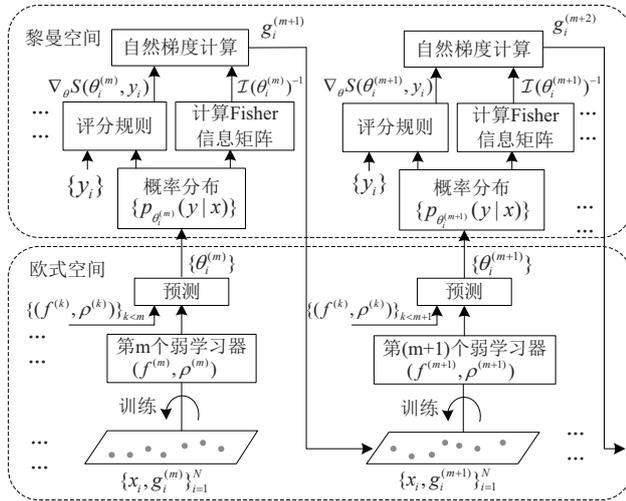


图 3 基于自然梯度提升方法的状态误差分布估计

自然梯度  $g_i^{(m)}$  的计算是在概率分布空间中进行的,  $g_i^{(m)} = \mathcal{I}(\theta_i^{(m-1)})^{-1} \nabla_{\theta} S(\theta_i^{(m-1)}, y_i)$ , 包括评分规则对于参数的标准梯度计算, Fisher 信息矩阵计算两个步骤, 如 2.2 节所述.

训练完毕后, 将得到  $M$  组比例因子与弱学习器  $\{\rho^{(m)}, f^{(m)}\}_{m=1}^M$ . 利用模型进行预测时, 对于每个输入  $x_i$ , 预测输出可计算如下:  $\theta_i(x_i) = \theta^{(0)} -$

$$\eta \sum_{m=1}^M \rho^{(m)} \cdot f^{(m)}(x_i).$$

求出条件分布  $p_{\theta_i(x_i)}(\hat{y}_i|x_i)$  的参数  $\theta_i(x_i) = (\mu_i^T(x_i), \gamma_i^T(x_i))^T$  后, 就可以计算出正态分布的均值与协方差矩阵, 从而得到状态误差向量的概率分布.

本文所提出的状态误差估计方法可以单独使用, 也可以与传统滤波方法相结合, 作为状态预测部分, 以便与量测方程相结合, 进行量测更新. 例如, 当采用扩展卡尔曼滤波器时, 状态预测部分可以表示为:

$$\begin{cases} c_k = \phi_{k-1}(\hat{s}_{k-1}^+) \\ e_k, Q_k = h(\hat{s}_{k-1}^+, c_k, \Delta t) \\ \hat{s}_k^- = c_k + e_k \\ \Phi_{k-1} = \frac{\partial \phi_{k-1}}{\partial s} \Big|_{s_{k-1}^+} \\ P_k^- = \Phi_{k-1} P_{k-1}^+ \Phi_{k-1}^T + Q_k \end{cases} \quad (23)$$

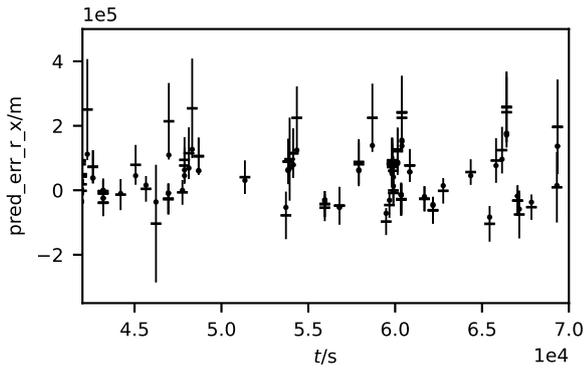
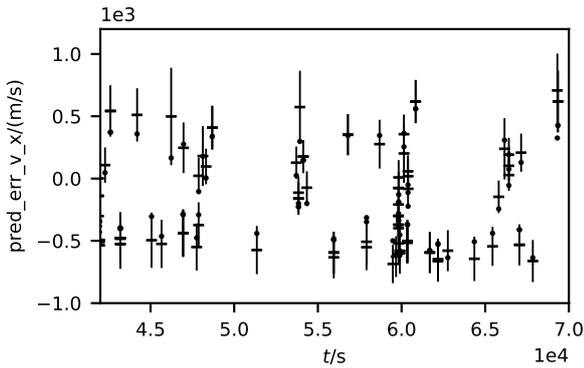
其中,  $\phi$  为轨道动力学方程的解,  $\hat{s}_{k-1}^+$  为  $k-1$  时刻的轨道状态估计值,  $c_k$  为基于轨道动力学模型的轨道状态预测,  $c_k = (r_x, r_y, r_z, v_x, v_y, v_z) \in R^6$  为 6 维状态分量, 包括  $x, y, z$  方向的位置分量和速度分量,  $h$  为机器学习模型,  $e_k, Q_k$  为机器学习模型所估计的状态预测误差向量的期望与协方差矩阵,  $\hat{s}_k^-$  为将物理模型与机器学习模型相结合得到的轨道状态估计值,  $P_k^-$  为递推预测步骤的估计误差协方差矩阵.

### 3 实验研究

ASO 的轨道数据是利用 spack-track.org 网站和 API, 从美国战略司令部 (United States Strategic Command, USSTRATCOM) 获得的. 数据为两行轨道根数 (two-line element set, TLE), 系统对 TLE 数据进行分析, 计算位置和速度组成的轨道状态向量. 采用 Cowell 公式的二体模型作为物理模型, 来建模地球对 ASO 轨道的扰动. 训练集是基于 30 天内的 ASO 轨道数据构建的, 包含 30 万个数据点, 预测时间窗为 3 天, 决策树的最大深度为 3, 学习率为 0.1. 测试是对于不包含在训练集内的另外 30 个 ASO 在 30 天内的数据进行的.

#### 3.1 ASO 状态误差分量的预测分布

图 4-5 分别给出了状态误差分量  $e_x^r, e_x^v$  的预测区间, 其中, 横坐标为时间间隔 (由于输入为包含  $t$  在内的 13 维向量, 不同数据点可能对应相同的预测起始时刻  $t$ , 因此为了更好的可视化, 横坐标设置为: 预测起始时刻 + 数据点索引), 纵坐标为状态误差向量的相应分量的预测结果. 图中的圆点为真实观测值 (忽略测量误差), “-” 为利用本文方法得到的预测值, 竖线为 95% 预测区间.

图4  $error_r_x$  的真实值与 95% 预测区间图5  $error_v_x$  的真实值与 95% 预测区间

可以看出, 绝大多数圆点表示的真实值均位于预测值的 95% 预测区间以内, 表明模型对于各状态误差分量的方差估计可以反映出真实的不确定性, 满足后续任务对可靠性和不确定性表征的需求。

表1 本文方法与其它方法的均方根误差 (RMSE) 与负对数似然 (NLL) 性能对比

状态分量	本文方法	DRF	MC dropout	GAMLSS	XGBoost	RF	ElasticNet	物理模型	标准梯度	同方差
RMSE( $r_x/m$ )	71537.04	73275.29	28111.94	259300.70	20306.08	64922.75	250612.78	176595.42	176138.20	71537.04
RMSE( $r_y/m$ )	59729.71	88542.74	33609.14	311004.27	21027.45	72203.75	276618.77	185335.92	201963.26	59729.71
RMSE( $r_z/m$ )	44960.61	160115.28	106097.60	332026.41	12562.94	73646.30	448530.25	1213209.13	728268.34	44960.61
RMSE( $v_x/(m/s)$ )	182.24	249.36	146.19	462.29	50.36	222.63	485.76	919.26	921.92	182.24
RMSE( $v_y/(m/s)$ )	168.42	153.17	130.66	453.47	51.99	199.52	502.81	787.19	786.84	168.42
RMSE( $v_z/(m/s)$ )	17.48	42.50	25.77	100.87	9.39	78.27	158.23	150.51	146.60	17.48
NLL	51.6512	56.1116	109.1826	119.39	-	-	-	-	68.5292	60.4455

### 3.3 与物理动力学方法的对比

对于前述 ASO 轨道数据集, 将利用机器学习方法与仅采用物理动力学方法得到的状态预测误差进行了对比, 实验结果如表 1 所示。

实验结果表明: 采用本文所述的机器学习方法进行轨道状态误差估计后, 轨道状态预测的 6 个分量的均方根误差分别降低了约 59.49%, 67.77%, 96.29%, 80.18%, 78.60%, 88.39%。另外, 仅采用物理动力学方法时, 只能得到轨道状态的单点预测值, 无法给出关于预测结果的不确定性估计, 而采用本文方法, 可以在提高预测精度的同时,

### 3.2 与常用机器学习方法的对比

与常用机器学习算法的对比如表 1 所示, 这里选取了 6 种常用的、具有代表性的算法。其中, XGBoost、随机森林 (random forest, RF)、ElasticNet 为点估计方法, 无法给出概率预测。实验设置如下: 对于前述 ASO 轨道数据集, 随机选取 10% 的样本作为测试集, 用 90% 数据进行训练。其中, 随机森林、分布随机森林 (Distributional Random Forests, DRF) 的最大树深度为 15, MC Dropout 采用 3 层全连接神经网络, 隐藏单元数为 200, 利用网格搜索确定 dropout 等超参数的值。XGBoost 的最大树深度为 3。

由表 1 可见, 相对于其他不确定性估计方法, 本文方法具有最低的 NLL 值, 表明本文方法给出的估计优于其他方法。为了评估点估计的精度, 将本文方法所预测的状态误差向量的期望与其他方法进行了对比。其中, XGBoost 给出了更低的均方根误差 (root mean square error, RMSE), 这是由于 XGBoost 也是建立在 GBDT 基础上的, 但针对算法和系统均作了高度优化, 且 XGBoost 模型采用的损失函数本身就是基于均方误差损失 MSE 的, 无法给出任何关于预测结果的不确定性信息。而本文方法为了得到概率预测, 采用了似然函数作为损失函数。同样, MC dropout 的优化目标也是基于 MSE 的, 因此大部分时候可以给出较为准确的点估计值。但 MC dropout 对于不确定性的估计效果不够理想。

得到关于预测结果的不确定性信息。

### 3.4 与标准梯度的对比实验

对于 ASO 轨道数据集, 将本文方法与基于标准梯度、以及同方差假设下的 RMSE 与 NLL 进行了对比, 如表 1 所示。其中同方差情况下, 对于均值部分采用自然梯度进行优化, 协方差矩阵与输入无关, 采用目标值的边缘分布的经验协方差矩阵。实验结果表明, 采用标准梯度时, 在迭代中容易出现数值问题, 数值稳定性不好, 收敛速度很慢, 难以得到更好的解。而采用自然梯度时, 算法可以快速收敛到均值, 而且具有很好的数值稳定性。

## 4 结论

本文将轨道状态误差估计问题重新表述为概率预测问题, 利用梯度提升方法, 将概率分布参数作为学习目标, 采用自然梯度作为概率分布空间中的最速下降方向, 推导出了自然梯度的计算公式, 给出了关于轨道状态误差的不确定性估计, 即条件概率分布  $P_{\theta}(y|x)$ .

实验结果表明, 与仅采用物理动力学方法的状态预测相比, 采用本文方法进行轨道状态误差估计后, 轨道状态各分量的均方根误差至少降低了约 60%, 同时, 与其他常用不确定性估计方法相比, 本文方法可以得到更好的 NLL 值. 因此, 所提出的方法能够有效估计空间物体轨道状态预测误差的不确定性, 较好的补偿了物理模型的预测误差, 提高了预测精度, 在一定程度上弥补了机器学习模型由于难以解释和泛化能力不足等原因而引入的不可靠性, 可以与传统滤波技术中的量测更新相结合, 也可以支持后续任务进行基于概率的预测、评估和决策.

### 参考文献 (References)

- [1] Luo Y Z, Yang Z. A review of uncertainty propagation in orbital mechanics[J]. Progress in Aerospace Sciences, 2017, 89:23–39.
- [2] Li B, Huang J, Feng Y M, et al. A Machine Learning-Based Approach for Improved Orbit Predictions of LEO Space Debris With Sparse Tracking Data From a Single Station[J]. IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems. 2020, 56(6): 4253–4268.
- [3] Peng H, Bai X, Comparative evaluation of three machine learning algorithms on improving orbit prediction accuracy[J]. Astrodynamics, 2019, 3(4):325–343.
- [4] Spacetechn-ssa: <https://github.com/IBM/spacetechn-ssa>, 2020.10.
- [5] Joshua T H, Jeffrey M A, Navraj S, et al. Beyond covariance realism: a new metric for uncertainty realism[C]. Proc. SPIE 9092, Signal and Data Processing of Small Targets 2014, 90920F.
- [6] Ovadia Y, Fertig E, Ren J, et al. Can you trust your model's uncertainty? evaluating predictive uncertainty under dataset shift[C]. 33rd Conf on Neural Information Processing Systems, Vancouver: NIPS, 2019.
- [7] Gal Y, Ghahramani Z. Dropout As a Bayesian Approximation: Representing Model Uncertainty in Deep Learning[C]. International Conference on Machine Learning. JMLR. 2016: 1050–1059.
- [8] Tony Duan, Anand Avati, Daisy Yi Ding, et al. Ngboost: Natural gradient boosting for probabilistic prediction[C]. Proc. 37th International Conference on Machine Learning. 2020.
- [9] Fredrik K G, Martin D, Goutam B, et al. Energy based models for deep probabilistic regression[C]. Proceedings of the European Conference on Computer Vision. 2020.
- [10] Rasmussen C E, Williams C K I. Gaussian Processes for Machine Learning[M]. Cambridge: The MIT Press, 2005.
- [11] 张保强, 陈梅玲, 孙东阳, 锁斌. 基于概率盒演化的时变系统不确定性量化方法 [J]. 控制与决策, 2020, 35(10): 2459–2465.  
(Zhang B Q, Chen M L, Sun D Y, Suo B. Uncertainty quantification for time-variant system based on probability box evolution[J]. Control and Decision, 2020, 35(10): 2459–2465.)
- [12] Friedman J. H. Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine[J]. The Annals of Statistics, 2001, 29(5):1189–1232.
- [13] Chen T. and Guestrin C. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System[C]. 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2016: 785–794.
- [14] Gneiting T, Raftery A E. Strictly proper scoring rules, prediction, and estimation[J]. Journal of the American Statistical Association, 2007, 102: 359–378.
- [15] James Martens. New insights and perspectives on the natural gradient method[J]. Journal of Machine Learning Research, 2020, 21(146): 1–76.
- [16] Mardia K V, Marshall R J. Maximum likelihood estimation for models of residual covariance in spatial regression[J]. Biometrika. 1984, 71(1): 135–146.
- [17] Arnold L, Auger A, Hansen N, et al. Information-geometric optimization algorithms: A unifying picture via invariance principles[J]. Journal of Machine Learning Research, 2017:1–65.
- [18] Amari S I. Natural gradient works efficiently in learning[J]. Neural Computation, 1998, 10(2): 251–276.

### 作者简介

陈慕羿 (1981–), 女, 讲师, 博士研究生, 从事目标跟踪、机器学习等研究, E-mail: camchenm@163.com;

王大玲 (1962–), 女, 教授, 博士 (博士生导师), 从事社交媒体处理、情感分析等技术研究, E-mail: wangdaling@cse.neu.edu.cn;

冯时 (1981–), 男, 副教授, 博士 (博士生导师), 从事情感分析、对话生成等技术研究, E-mail: fengshi@cse.neu.edu.cn;

张一飞 (1977–), 女, 讲师, 博士, 从事机器学习、多模态数据分析等技术研究, E-mail: zhangyifei@cse.neu.edu.cn.