

· 科技评述:封面文章评述 ·

## AI 促进数学理论研究新范式： 关于复杂系统的一些思考

高庆\* 吕金虎

北京航空航天大学 自动化科学与电气工程学院,北京 100191

**[摘要]** 2021年12月,DeepMind团队在*Nature*上发表文章 Advancing Mathematics by Guiding Human Intuition with AI,使用人工智能(AI)来辅助数学理论研究中依赖人类直觉和创造力的核心部分,并成功地在扭结理论和组合表示论中识别出此前未知的关系。本文首先对这一重要成果做了简要的技术解读,阐述了该成果如何通过辅助数学家直觉来解决重大数学科学问题。然后给出了该技术框架对解决复杂系统模式挖掘的一些启示与展望。

**[关键词]** 人工智能;数学理论;复杂系统

通过总结与归纳数学对象特征间的相互关系,并利用这些联系形成数学猜想,是纯数学研究的基本方式之一。在人工智能领域,我们把这种特定对象共同的关联规律称为模式(Pattern)。在数学研究中,识别有趣模式的任务主要依赖于人类数学家的直觉,著名的例子是印度裔数学家斯里尼瓦瑟·拉马努金(Srinivasa Ramanujan)在数论领域的杰出工作。这位天才数学家将自己的见解描述为深刻的直觉,是他在睡梦中得到智慧女神的启示写下来的。

寻找模式在数学领域极为重要。自上世纪60年代始,数学家使用计算机生成数据以帮助发现新的模式。这一新的研究方式称为实验数学,其著名的成果包括“千禧年大奖难题”之一的贝赫和斯维纳通-戴尔猜想(Birch and Swinnerton-Dyer Conjecture)。虽然计算机长期以来一直被用来为实验数学生成数据,数学家的深刻洞察力与直觉依旧是识别和发现模式的根本途径。然而,人类大脑有限的带宽和存储能力,使得这一研究方式止步于高维、大规模或复杂的数学对象,制约了数学理论的发展。

DeepMind的研究成果<sup>[1]</sup>为数学模式的识别和发



**高庆** 北京航空航天大学自动化科学与电气工程学院教授、博士生导师,德国“洪堡学者”。主要研究领域为控制理论与人工智能,在IEEE汇刊以及*Automatica*等控制科学与工程顶级期刊或会议上发表文章60余篇,出版Springer专著一本。曾获得中国控制会议第21届“关肇直”奖、中国科学院院长特别奖,中国科学院优秀博士学位论文以及香港城市大学杰出研究学位论文。



**吕金虎** 北京航空航天大学教授,国家杰出青年科学基金获得者,IEEE Fellow,中国自动化学会会士。任全国科技创新领军人才联盟理事长、中国指挥与控制学会副理事长、中国自动化学会常务理事、中国科学院青年创新促进会第四届理事长等。长期从事智能系统与协同控制、工业互联网等研究,主持国家自然科学基金创

新研究群体、国家重点研发计划和工业互联网创新发展工程等项目。曾获3项国家自然科学基金二等奖(2项排名第一,1项排名第二)、全国创新争先奖、何梁何利科学与技术进步奖等。现任国际著名期刊IEEE TII(Q1)共同主编、第43届IEEE工业电子学会年会共同主席。

现提供了一种全新的路径。此前,以色列理工学院利用人工智能和计算机自动化技术,提出了一种命名为“拉马努金机”的“数学猜想生成器”<sup>[2]</sup>,专门解

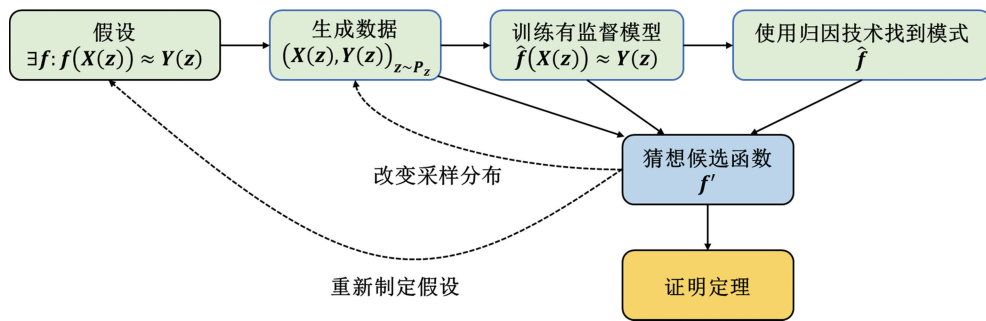


图1 机器学习指引数学猜想

决的连分数表示问题。DeepMind 团队则提出了一种基于机器学习的更为通用的技术框架,用于识别和发现数学对象之间的潜在模式和关联,并利用这些观察进一步指导直觉思维和提出猜想,发现了拓扑学的一个新定理和一个表示论的新猜想。本文对这一重要研究成果进行了简要的技术解读,并阐述了此项成果给复杂系统模式预测研究的启示。

## 1 机器学习指引数学直觉

通过研究特定对象的特殊性质并加以总结归纳,是数学研究乃至科学研究的普遍范式。这一研究过程一般会遵循一种循环流程。首先,针对若干相关个例,计算一些性质并分析可能的相关关系;接下来,总结这些关系,直至某种规律出现;最后,利用更复杂的例子验证这些关系,剔除掉无关性质。如果验证中发现规律并不成立,或者规律成立的理由不清晰,则重新定义寻找个例的标准,然后从头开始新的循环。在这一流程中,“总结”这一步没有计算要求,主要基于研究者的直觉。

DeepMind 的工作<sup>[1]</sup>表明,机器学习可以用于辅助研究循环中“总结”的步骤,其技术框架如图1所示。首先,从一类数学对象的性质  $z$  出发,定义两种结构  $X(z)$  和  $Y(z)$  并假设结构间存在某种相关性  $f$ 。然后,通过监督学习训练,使用大数据集就可以逐步逼近理想的关系函数,即所谓数学模式。以几何体中的欧拉公式为例,第一个结构包含多面体的顶点数、边数、表面积和体积,第二个结构是多面体的面数。通过若干次学习训练可得出这二个结构之间的简单线性关系(即欧拉公式),同时剔除掉体积和表面积这两个无关性质。

不同于欧拉公式这类简单的线性关系,复杂对象的结构间关系往往是非线性多变量的,这对关系

函数  $f$  的准确设定提出了一定的要求。DeepMind 此次工作在扭结理论和表象理论中分别使用了上界判定与多项式关系两种情况,识别出两种虽然简单但此前未知的关系结论。我们暂无法确定此项工作是否可以用于更为复杂的情形,但是这一新的研究范式显然是实用且具有创造性的。

## 2 启示与展望—复杂系统的模式挖掘

笔者的研究工作主要针对复杂系统中的非线性动力学与复杂网络等领域。DeepMind 团队的此次重要成果也触发了我们关于复杂系统模式挖掘的深入思考。

2021年诺贝尔物理学奖被授予“对我们理解复杂系统的开创性贡献”,再一次把复杂系统这一重要学术领域带到大众眼前。复杂系统是一类由大量单元相互作用组成的系统<sup>[3]</sup>。由于集体行为具有强非线性(总体不等于个体之和)、系统动态同时包含个体间及系统与环境间的多层级交互等原因,复杂系统整体模式(Pattern)的预测难以通过对子系统分析达成。这一还原论的溃败使得系统理论科学家转向机器学习方法从复杂性中挖掘深刻的模式。

我们对基于机器学习的复杂系统模式挖掘有着信心。原因在于:尽管复杂系统的整体模式难以捕捉,但是多数复杂系统的内蕴规则往往极为有限<sup>[4]</sup>;复杂系统的研究工作已经非常深入和广泛,积累了海量的各类复杂系统的时序数据与相应的模式数据。采用 DeepMind 提出的机器学习方法框架<sup>[1]</sup>,从已有的复杂系统标签数据中提炼传统建模方法难以获得的深刻洞见与简洁假说,很可能为复杂系统的描述、预测与理论发现提供一条全新的路径。

## 参 考 文 献

- [1] Davies A, Veličković P, Buesing L, et al. Advancing mathematics by guiding human intuition with AI. *Nature*, 2021, 600: 70—74.
- [2] Raayoni G, Gottlieb S, Manor Y, et al. Generating conjectures on fundamental constants with the Ramanujan machine. *Nature*, 2021, 590: 67—73.
- [3] Lü J, Yu XH, Chen GR, et al. Complex systems and networks. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [4] Li R, Dong L, Zhang J, et al. Simple spatial scaling rules behind complex cities. *Nature Communications*, 2017, 8: 1841.

## New Paradigm on Mathematical Research Promoted by AI: Thoughts about Complex Systems

Gao Qing\*      Lyu Jinhu

*School of Automation Science and Electrical Engineering, Beihang University, Beijing 100191*

**Abstract** A recent paper “Advancing mathematics by guiding human intuition with AI” published on Nature by DeepMind demonstrated how to use AI to guide pure Math research in the core parts involving human intuition and creativity. Some conjectures in the knot theory and the combination representation theory were proposed, which never exist before. We demonstrate briefly the technical framework proposed in this research work, and demonstrate how it helps guide mathematicians to solve fundamental mathematical problems. Some thoughts on applying the proposed methodology to pattern mining of complex systems are also presented.

**Keywords** artificial intelligence; mathematical theory; complex systems

(责任编辑 姜钧译)

---

\* Corresponding Author, Email:gaoqing@buaa.edu.cn