

數

理

人

文

近期數學家 and DeepMind 之間的兩次合作展現了機器學習在幫助研究人員產生新的數學猜想方面的潛力。

機器學習成爲數學合作者

作者：休斯頓 - 愛德華 (Kelsey Houston-Edwards) 譯者：王夏聲

作者簡介

休斯頓 - 愛德華是一位自由數學和科學作家，也是網路節目 PBS Infinite Series 的前主持人。讀者可以在 <https://www.kelseyhoustonedwards.com> 找到更多她的文章。



(Señor Salme · Quanta 雜誌)

數學家們經常一起合作以尋找對於一個難題的洞見。這合作似乎是一種需要獨特的人性化順其自然的協作過程。但是在兩個新的研究結果中，人類合作者的角色已經部份被機器所取代。兩篇論文已經於2021年11月底完成，並在最近《自然》(Nature) 一篇文章中進行了概括摘要。

論文中一篇的共同作者之一澳洲雪梨大學的數學家威廉森 (Geordie Williamson) 說：「我喜歡數學的地方在於它的直觀性和創造性，〔機器學習〕模

型以一種我以前未曾從電腦中感受到的方式支援這一點。」

DeepMind 是 Google 母公司 Alphabet 的另一個致力於開發先進的人工智慧系統的子公司。有兩組數學家團隊分別與 DeepMind 合作。

牛津大學的尤海司 (András Juhász) 和拉肯比 (Marc Lackenby) 教導 DeepMind 的機器學習模型在稱爲「紐結」(knot) 的幾何物件中尋找模式。這些模型檢測到了尤海司和拉肯比精心設計以彌合



Quanta Magazine 是西蒙斯基金會 (Simons Foundation) 出版但編輯獨立之網路科普雜誌 (<http://www.quantamagazine.org/>)，希望能提高數學、物理與生命科學前沿研究進展的公眾能見度。本文譯自：

<https://www.quantamagazine.org/deepmind-machine-learning-becomes-a-mathematical-collaborator-20220215/>

本刊感謝 Quanta magazine 與主編 Thomas Lin 同意翻譯轉載，翻譯之文責由本刊自負。

數學家長期以來推測紐結理論中應該相關的兩個領域之間的聯繫。在另一項研究中，威廉森使用機器學習來完善一個連接圖和多項式的老猜想。

多年以來，電腦一直在幫助數學研究。作為證明的助手以確保證明中的邏輯步驟真正有效；以及作為可以處理消化大量數據尋找猜想反例的強力工具。

新的研究成果代表了一種人機協作的不同形式。它顯示透過選擇性的將機器學習納入研究的生成階段，數學家可以發現在沒有電腦幫助下可能很難找到的線索。

北卡羅來納州立大學的薩茲達諾維奇（Radmila Sazdanovic）評論道：「這項研究最令人驚艷的地方——它確實是一個重大突破——是所有部分都整合起來了，而且這群人並肩作戰。這是一次真正的跨領域合作。」

然而，一些觀察家認為，這種合作對數學研究的進行方式並沒有太大的改變。雖然電腦為數學家指引了一系列可能的關係，但數學家自己需要確認這些關係是值得探索的。

「所有的辛勤工作都是由人類數學家完成的。」紐約大學的資訊科學家厄內斯特·戴維斯（Ernest Davis）在一封電子郵件中寫道。



澳洲雪梨大學的數學家威廉森幫助 DeepMind 確認出非常適合機器學習的數學問題。（威廉森授權）

數據裡的模式

機器學習從輸入預測輸出：餵給模型健全的數據，它將作出診斷；給它看一張動物的圖片，它會回答這個物種的名字。這通常是使用一種稱為「監督式學習」（supervised learning）的機器學習方法來完成的，在這種方法中，研究人員本質上是通過給電腦提供許多例子來教電腦進行預測。

例如，假設您想教一個機器學習模型來識別圖像中是否包含貓或狗。研究人員首先餵給模型每種動物的許多例子。基於這些訓練數據，電腦構建了一個極其複雜的數學函數，它本質上是一台進行預測的機器。一旦建立了預測功能，研究人員就會向模型展示一張新圖像，它會以圖像是貓或狗的機率做出回應。

為了讓監督式學習成爲一種有用的研究工具，數學家們必須找到正確的問題讓 DeepMind 解決。他們需要涉及有大量訓練數據可用的數學物件的問題——這是許多數學研究難以符合的準則。他們還需要找到一種方法來利用 DeepMind 察覺隱藏連

繫的強大能力，同時還要克服它作為合作者的重大局限性。通常，機器學習就像一個黑盒子，要依據由人類無法破譯的規則中從輸入產生輸出。

「電腦可以看到非常不尋常的事物，但也很難非常有效的解釋，」DeepMind

的研究員亞歷克斯·戴維斯（Alex Davies）說道。

數學家們並不僅僅是要讓 DeepMind 輸出正確的答案。為了讓領域有真正的進展，他們還需要知道為什麼連繫成立——這是電腦無法提供的步驟。

不變量的橋接

2018 年，威廉森和 DeepMind 的首席執行長兼共同創辦人哈薩比斯（Demis Hassabis）同時當選為英國皇家學會（一個以傑出科學家為會員所組成的組織）的會員。在入會典禮的茶會期間，他們發現了共同的興趣。

「我曾思考過機器學習能如何幫助數學，而他則對這想了很多，」威廉森說。「我們只是互相交流了一些想法。」

他們決定，以一個稱為紐結理論的數學分支領域作為人機協作的理想試驗場。它涉及稱為紐結的數學物件，您可以將其視為纏繞的繩圈。紐結理論適合機器學習的要求，因為它具有豐富的數據——有數百萬個相對簡單的紐結——並且因為紐結的許多性質可以使用現有軟體輕鬆計算。



牛津大學的尤海司和同僚拉肯比剔除了些機器學習生成的線索，以確定用於在不同的紐結不變量之間進行轉換的公式。（尤海司授權）

威廉森建議 DeepMind 與著名的紐結理論家拉肯比聯繫，以找到要解決的特定問題。

尤海司和拉肯比了解機器學習的優勢和劣勢。基於這些原因，他們希望運用它來找到不同類型的不變量之間的新聯繫。這些不變量是用來區分紐結的性質。

當不剪斷它們又無法解開它們，使得它們看起來彼此相似時，兩個紐結被認為是不同的。不變量是紐結的內在性質，在解開過程中不會改變，因此稱為「不變量」。因此，如果兩個紐結對於一個不變量具有不同的值的時候，則它們永遠無法操弄解開成為對方。

源自於它們如何描述紐結，有許多不同類型的紐結不變量。有些是比較幾何性的、有些是代數性的、而有些是組合性的。然而，數學家幾乎無法證明來自不同領域的不變量之間的關係。他們通常不知道不同的不變量是否事實上只是從多個角度刻畫了紐結的相同性質。

尤海司和拉肯比發現機器學習很有機會能發現不同類別的不變量之間的聯繫。從這些聯繫中，他們可以更深入的了解紐結不變量的性質。

符號差的驗證

爲了追蹤尤海司和拉肯比的問題，DeepMind 的研究人員開發了一個超過 200 萬紐結的數據集。對於每個紐結，他們計算了不同的不變量。然後他們使用機器學習來搜索將不變量聯繫在一起的模式。電腦辨識了很多，但其中大多數對數學家來說並不是特別有趣。

「我們看到了很多已知或已知不正確的模式，」拉肯比說。「作爲數學家，我們淘汰了很多機器學習傳送給我們的東西。」

與尤海司和拉肯比不同，機器學習系統不瞭解背後的數學理論。輸入數據是根據紐結不變量計算的，但電腦只能看到數字列表。

「就機器學習系統而言，這些可能是麥當勞各種食品的銷售記錄，」戴維斯說道。

最終，這兩位數學家決定嘗試教電腦，僅基於有關紐結的幾何不變量的信息，輸出一個重要的代數不變量，稱爲紐結的「符號差」（signature）。

在尤海司和拉肯比確認問題後，DeepMind 的研究人員開始構建特定的機器學習演算法。他們訓練計算機將 30 種紐結的幾何不變量作爲輸入並輸出紐結的符號差。它運行的很順利，經過幾週的工作，DeepMind 可以準確預測大多數紐結的符號差。

接下來，研究人員需要找出模型是如何做出這些預測的。爲此，DeepMind 的團隊轉向了一種稱爲「顯著性分析」（saliency analysis）的技術，該技術可用於梳理出眾多輸入值中的哪一個對產生輸出



值有最大的影響。他們稍微改變了每個輸入的值，一次一個，並檢查了哪個變更對輸出值的影響最顯著。

如果設計了一種演算法來預測圖像是否顯示貓，則執行顯著性分析的研究人員將圖像的細微部分模糊化，然後檢查電腦是否仍能識別出貓來。

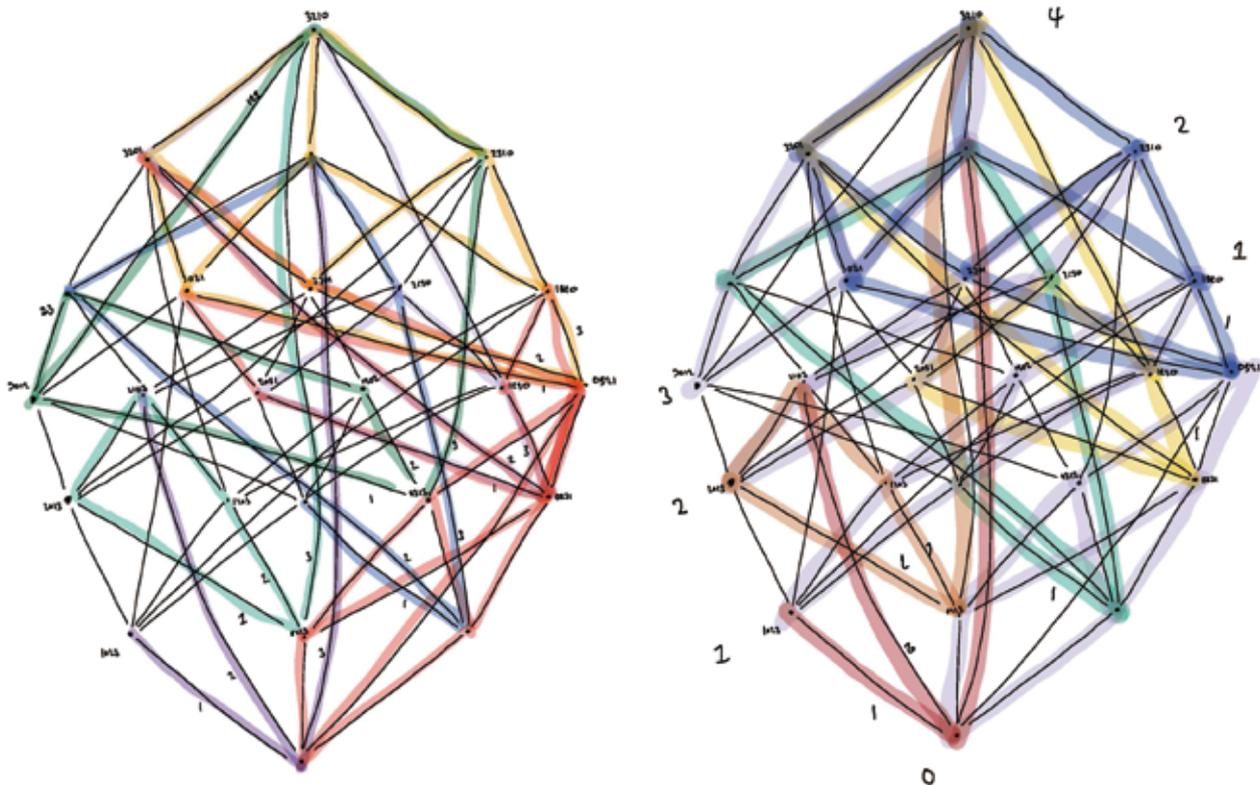
例如，他們可能會發現圖像角落中的像素不比那些構成貓耳朵的像素重要。

當研究人員對數據應用顯著性分析時，他們觀察到 30 個幾何不變量中的 3 個對於模型如何進行預測似乎特別重要。所有這 3 個不變量都測量「尖點」（cusp）的特徵，尖點是一個包裹著紐結的空心管，就像電纜周圍的橡膠塗層一樣。

基於這些信息，尤海司和拉肯比構建了一個公式，將紐結的符號差與這 3 個幾何不變量聯繫起來。該公式還使用了另一個常見的不變量，即分拆掉一個紐結的球體的體積。當他們在特定的紐結上測試這個公式時，它似乎有效，但這還不足以建立一個新的數學定理。數學家們正在尋找一個他們可以證明總是有效的精確陳述——這更難。

「只是它不太行得通，」拉肯比說。

尤海司和拉肯比通過多年研究類似問題建立起來的直覺告訴他們，這個公式仍然缺少一些東西。他們意識到他們需要引入另一個稱爲「單射半徑」（injectivity radius）的幾何不變量，它粗略的測量與紐結相關的某些曲線的長度。這是利用數學家訓練有素的直覺的一個步驟，但它是經由他們能夠從



數學家們和 DeepMind 使用機器學習來搜索將布魯哈特圖轉換為多項式的公式。(威廉森提供)

DeepMind 模型識別的許多未經編輯的聯繫中收集到的特定洞見來實現的。

以色列特拉維夫大學的華格納 (Adam Wagner) 說道：「好消息是〔機器學習模型〕擁有與人類完全不同的優勢和劣勢。」

修改成功了。通過將有關單射半徑的信息與 DeepMind 挑選出的 3 個幾何不變量相結合，尤海司和拉肯比創建了一個用於計算紐結的符號差的萬無一失公式。最終結果具有真正合作的精神。

拉肯比說：「這絕對是包含了來自於 DeepMind 機器學習的專家們與我們的反覆交流過程。」

將圖轉換成多項式

建基於紐結理論項目的動能，DeepMind 在 2020 年初回頭找威廉森，看看他是否想在他的表現理論 (representation theory) 領域中測試類似的過程。

表現理論是數學的一個分支，它尋找將數學的基本元素（如對稱性）組合起來以製作更複雜的物件的方法。

在這個領域中，卡茲丹／魯斯蒂格多項式 (Kazhdan-Lusztig polynomial) 尤為重要。它們基於重新組合物件的方式，稱為「置換」 (permutation) —— 例如通過交換列表中兩個物件的順序。每個卡茲丹／魯斯蒂格多項式是由一對置換構成，並編碼有關它們關係的信息。它們也很神秘，通常很難計算它們的係數。

有鑑於此，數學家試圖根據更容易使用的物件，稱為「布魯哈特圖」 (Burhat graph)，來理解卡茲丹／魯斯蒂格多項式。布魯哈特圖上的每個頂點代表特定數量物件的置換，邊連接代表兩個只差在兩元素互換的置換的頂點。

在 1980 年代，卡茲丹 (George Lusztig) 和岱爾 (Matthew Dyer) 各自獨立預測布魯哈特圖和卡茲

丹／魯斯蒂格多項式之間應該存在關係。因為多項式更基本，而且圖形更易於計算，這關係將很有用。

而且，就像通過使用另一個來預測一個紐結不變量的問題一樣，這個問題非常適合 DeepMind 的能力。DeepMind 團隊首先在近 20,000 個配對的布魯哈特圖和卡茲丹／魯斯蒂格多項式上訓練模型。

很快的，它就能時常從布魯哈特圖預測正確的卡茲丹／魯斯蒂格多項式。但要寫下從布魯哈特圖到卡茲丹／魯斯蒂格多項式的訣竅，威廉森需要知道電腦是如何做出預測的。

一個公式，如果你能證明它！

這裡，DeepMind 研究人員再次求助於顯著性分技術。布魯哈特圖很大，但電腦的預測主要基於少量的邊。代表交換遙遠數字（如 1 和 9）的邊對於預測來說是比連接翻轉附近數字（如 4 和 5）的邊更重要。這是威廉森當時必須詳細闡述的提示。

「亞歷克斯·戴維斯告訴我，無論出於何種原因，這些邊都比其他邊更重要，」威廉森說。「現在就該我採取行動了，我盯著這些看了幾個月。」

威廉森最終設計了 10 個左右的公式，用於將布魯哈特圖轉換為卡茲丹／魯斯蒂格多項式。DeepMind 團隊將它們與數百萬個布魯哈特圖示例進行了對比。對於威廉森的前幾個公式，DeepMind 團隊很快找到了行不通的例子——公式不適用的地方。

但最終威廉森找到了一個似乎很可能成立的公式。它涉及將布魯哈特圖分解成類似於立方體的部分，並使用這些信息來計算相關的多項式。此後，

DeepMind 研究人員已經在數百萬個例子上驗證了該公式。現在由威廉森和其他數學家來證明這個方法總是成立的。

運用電腦檢查反例是數學研究的標準部分。但是最近的合作使電腦以一種新的方式變得有用。對於數據量大的問題，機器學習可以，就像同僚隨意提出建議一樣，幫助指引數學家朝著新的方向發展。∞

本文出處

Quanta Magazine January 9, 2020。

譯者簡介

王夏聲是陽明交通大學應用數學系副教授。

延伸閱讀

► 威廉森著，〈數學發現需要直覺和創造力——現在人工智能提供了一點幫助〉（Mathematical discoveries take intuition and creativity – and now a little help from AIs）

<https://theconversation.com/mathematical-discoveries-take-intuition-and-creativity-and-now-a-little-help-from-ai-172900>

這是威廉森教授在 2021 年 12 月 21 日為網路科學雜誌《對話》（**THE CONVERSATION**）所撰寫的關於此次他與 DeepMind 合作的文章，讀者可參照本文閱讀。

► 哈奈特（Kevin Hartnett）著，〈改變數學的「無用」觀點〉（The ‘Useless’ Perspective That Transformed Mathematics）

<https://www.quantamagazine.org/the-useless-perspective-that-transformed-mathematics-20200609/>

這篇文章以通俗易懂的介紹與描述表現理論。

► 亞歷克斯·戴維斯等著，〈運用 AI 引導人類直覺來推展數學〉（“Advancing mathematics by guiding human intuition with AI”, *Nature* 600, 70 ~ 74 (2021).）

<https://www.nature.com/articles/s41586-021-04086-x>

這篇文章是本文所述內容在《自然》上更為詳細的概述介紹，讀者可參照閱讀。