Continuous & Discrete：Two sides of the same
—— 面向智能、量子与计算交叉融合的数学*

邵嗣烘

- **我们是谁？我们想干什么？**

  我们是一群对“维度灾难”和“NP 难”着迷的人。我们想干的事情就是克服维度灾难和 NP 难。它们是我们当前以及以后很长一段时间内在（人工）智能科学、量子科学和科学计算的探索中所需面对的最难跨越的屏障。

- **什么是维度灾难？**

  设想一下，你想求解一个定义在 6 维空间中的问题，若在每个维度上撒 100 个网格点，用双精度表示，那么存一次它的解需要 $100^6 \times 8/1024^3 \approx 7450$ G 的存储空间，这就是维度灾难的体现。具体来说，维度灾难指的是计算成本随着维度指数增长。迄今为止还没有一种普适的方法能够一劳永逸地克服这个灾难。

- **我们是要回答 $P = NP$?**

  当然，这是所有数学人的梦，属于飘在天上的几个基本问题。但是怕吓到你（我自己），我们还是低调点，说：我们希望设计高效的求解 NP 难问题的算法，如果在这个过程中能加深对这个问题的理解那就再好不过了。

- **一个“难”就够难了，为啥还要同时去搞这两个“难”呢?**

  哎，别提了，谁也不想同时招惹它们。我们是在设计相空间内量子力学基本方程——Wigner 方程的数值算法时发现维度灾难可转化成 NP 难。这个转化带来的直接好处就是：前者的指数墙让传统的基于网格的数值方法“不能”算，而后者有近似算法，至少“能”算了。也就是说，表面上我们惹的是维度灾难，实际上我们解的是 NP 难问题。

- **啥方法有这么神奇的转化效果?**

  对了，这个问题问得好，目前我们也只清楚一种叫做“随机粒子方法”(SPM：Stochastic Particle Method) 能行。它的核心思想是：通过粒子的随机产生、随机湮灭和随机游动实现高维问题的高效自适应计算。为了保证计算精度和结果可靠，粒子的“生”、“灭”、“动”背后是一套精准的随机决策过程。“生”出足够多的粒子保证精度，“灭”去冗余的粒子保证效率，粒子随解而“动”，三者相辅相成、互为补充才能形成有效的高维自适应算法。借用网格的话来说就是：粒子随机产生对应于加密网格，随机湮灭对应于粗化网格，而随机游动对应于移动网格。

- **那么到底咋转化的呢?**

  这主要涉及到随机粒子方法中“灭”过程了，具体的话就得说点数学了。

  给定一个带正负一权的经验符号测度

$$\mu = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{P}\delta_{x_i} - \sum_{i=1}^{M}\delta_{y_i}\right), \tag{1}$$

*为了读起来轻松，我们略去所有的文献引用，用词尽量通俗易懂，有任何不严格之处、不同的意见以及想指教一二都请直接找作者聊。邮件：sihong@pku.edu.cn，办公室：理科二号楼 2515。本招人广告长期有效。

若同时从正负粒子中剔除 N_A 个粒子得到新的测度

$$\nu = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{P-N_A}\delta_{\tilde{x}_i} - \sum_{i=1}^{M-N_A}\delta_{\tilde{y}_i}\right), \tag{2}$$

对于给定的测试函数 $f(x)$，希望可以控制粒子消去前后的弱形式下的误差

$$\mathcal{E}(f) = \int f(\mathrm{d}\mu - \mathrm{d}\nu)。 \tag{3}$$

上述湮灭过程就涉及到一个基本问题：哪些范围内或哪些群类的粒子将被湮灭？统计中常用的直方图统计（histogram statistics）采用类似于质点网格方法的策略，落在同一个单元（cell）中的粒子被湮灭，但这种依赖单元的方式到不了高维。我们选择的路径是结合数论中的组合算法和现代机器学习决策树的思想提出了 SPADE（Sequential-clustering Particle Annihilation via Discrepancy Estimation）算法，其中维度灾难就变成了 NP 难，因为其中关键的偏差估计的计算是 NP 难的，需要快速有效的近似算法。我们是真希望这把“铲子”有机会在维度灾难上撬开一个口子，但它肯定还需要不断的加强和打磨。比如考虑尝试与随机森林 算法深度结合，充分利用聚类自身的随机性和确定性的对立统一，借助于分布式存储和异构并行技术，在高性能计算平台上实现超大规模粒子的随机湮灭。

♣ 猜猜：上述描述中哪里会出现维度呢？

- **嗯...... 不对！我们平时的课上好像不怎么碰到不在 $\mathbb{R}^3$ 中的问题啊？**

  这个吧，那就只能直话直说了：课上教你的所有方法基本上在你目前的水平上也只能用来求解至多 $\mathbb{R}^3$ 中的问题了。也就是说，不是没有高维问题，是因为工具所限导致只能解低维问题。一些自然形成的常见且重要的微分方程呈现出很高的维度，如相空间内动理学（kinetic）方程（经典的 Boltzmann 方程和量子的 Wigner 方程），金融数学中的 Black-Scholes 模型以及整个计算量子力学等。

  借用 Dirac 大神的 1929 年说的话就是：“The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble”。现在看来，其中的“too complicated to be soluble”说的就是维度灾难。

- **啊...... 量子？物理？哎呀，不怎么喜欢呀！对物理不感冒的话怎么办呢？**

  没事啊，上面的公式(1)-(3)就没物理，是非常纯的数学问题吧。事实上，我们还可以去看别的 NP 难问题，比如图（网络）上的优化问题（最大割，最小割等等），因为 NP 难问题之间是“相通”的。只要喜欢数学就行，比如设计些算法啊，证明些定理啥的。

- **啥...... 可能对数学都不怎么感冒。那会写程序？喜欢写程序？喜欢画图吗？**

  喜欢看到计算机按照自己的意志来产生数据，分析数据和展示数据就行啊。何况，现在的计算机也处于转型中，什么超级计算机，什么量子计算机，什么神经形态计算机都在冲击我们的眼球，学会操作这样的机器也是极为重要的事情。可以这么说吧，我们真正能提供的产品就是蕴含精妙算法的程序，而且这样的程序能在各种平台上欢快的运行。比如用量子计算机去求解 NP 难组合优化问题貌似就是个很不错的选择，因为量子计算机本质上是“算不准”的（因为 Heisenberg 测不准原理），这种算不准带来的误差也许本身就非常契合求解 NP 难问题中跳出局部最优。再比如，随机粒子方法中的随机游走完全可以是“量子随机游走”，它更适合于量子计算机上实现，它和经典的随机游走的差异以及如何利用这些差异设计算法，这都是最前沿的课题了。

  扎实的数学基础，清晰的物理图像和高超的编程技术都是我们非常需要的。

- **那么前期都要准备学习点啥课程吗?**

  当然，学的越多越精肯定总是好的。但显然，无论学了多少在真正用的时候都会觉得不够的。既然这样，那还不如先找到一个自己还看得上眼的小问题开始边琢磨边学习。事实上，当你真准备走进“无人区”的时候，无人事先知道应该储备什么知识的，也没有人会真的做多少准备，唯一凭借的就是勇气和决心，可以说是“无知者无畏”。在前进的过程中，遇到困难解决困难，真走不动的时候就只好原地休息了。然而，其中所能看到的“美景”也绝不是在规定的旅游路线上所能遇到的。

  例如，按照现在的理解，求解高维问题上的随机粒子方法是多学科的交叉融合，包括计算数学与概率、组合、统计等数学领域内交叉和计算数学与金融、智能、量子等学科间外交叉。它本身就生动体现了确定与随机、连续与离散的对立统一。

  这就必然要求我们不能有任何学科门户之见，谁也不知道将来到底是哪个学科的哪个知识点会出现神奇的效果。所以呀，有空就多学点理论知识和做点技术储备，尤其是那些你不熟悉、从来没听说过的。

  至于“到底大几开始做研究合适？”这个问题不重要，什么时候开始都是可以的，就看你个人的兴趣和时间安排了。只要能保证一旦开始了就能持续的投入时间和精力，毕竟阶段性有结果对谁来说都是有成就感的。所以，关键在于一开始就选择你喜欢的，至少是愿意花时间琢磨的以及非常清楚动机的课题。

- **听说，深度学习也能用来解高维微分方程，这是真的吗?**

  说实话，目前我也不知道是不是真的，尽管确实有这方面的论文。但至少现在不是非常清楚深度学习到底是怎么克服维度灾难的，或者说深度学习在求解 NP 难问题上到底采用的是什么类型的近似算法。确实也听说，机器学习类的方法也可以用粒子去解释。这个问题还有待于进一步考证，有兴趣的话一起啊。

- **咱们有组会和讨论班吗?**

  啥是组会？我们习惯于在办公室面对面的讨论。对了，我们确实有个讨论班，名称是《智能、量子与计算讨论班》，时间固定在每周五的上午 3-4 节，2021 年春季学期的地点在理教 404。欢迎来听来报告啊！

- **有可以“套瓷”的学长吗?**

  看看下面哪些名字你熟悉，就可以去“套”了，也可以直接找作者“套”，都欢迎啊！

  - 正在我们这开展研究的北大学生有：
    金则宇（2017 级本科生），黄桢（2017 级本科生），董祎婧（2017 级直博生），徐中炜（2018 级本科生），杨川（2018 级硕士生），武夷山（2019 级直博生），苏丽莉（2019 级硕士生），雷正阳（2020 级直博生），熊云丰（2020 年博雅博士后）
  - 已从我们这毕业的北大学生有：
    徐健（2013 年硕士毕业），贠晓帆（2013 年学士毕业），周逸松（2014 年学士毕业），黄得（2015 年学士毕业，2021 年将回来加盟北大数学），张维熹（2015 年学士毕业，2020 年博士毕业，现在在华为香港），徐凯周（2015 年学士毕业），苏肇宁（2015 年学士毕业），赵伟（2017 年学士毕业），杨川（2018 年学士毕业），武夷山（2019 年学士毕业），董睿文（2019 年学士毕业），赵沁宇（2019 年学士毕业），程晨（2019 年学士毕业，现在在斯坦福统计读博），陈珍珠（2019 年博生毕业，现在在九所工作），熊云丰（2020 年博士毕业，北大优秀博士学位论文获得者，现在是北大博雅博士后）