

智能、量子与计算讨论班

邵嗣烘

(邮件: sihong@pku.edu.cn, 办公室: 理科二号楼 2515)

现在如火如荼的人工智能研究始于上世纪图灵、冯诺伊曼等在“机器能否像人一样思考”以及“人脑是怎么工作”这两个基本问题上的探索。尽管彼时的探索未给出明确的答案,但由此所产生的计算机、神经网络等却实实在在地重新定义了我们的生活方式。从计算机诞生迄今的几十年间,我们在神经(脑)科学、计算能力和量子器件等几个方面的积累让我们有机会重启图灵和冯诺伊曼的探索之旅,在回答上述两个基本问题上做出我们这代数学人的贡献,由此期望产生影响下一代的概念或产品。主要的动因是:(1)大脑的浅层结构可以看到;(2)计算机有足够大运算力,有机会验证提出的定律;(3)可以用实验的纳米级的器件模拟神经元,可以实验室内搭一个物理大脑。注意这里的神经元是我们人类理解的神经元。假想:冯诺依曼活在当下,有机会再研究这个问题,会选择做什么?本门课程就是在这样的大背景下开设的,是“面向智能的数学”的重要部分,将系统地整理神经科学、量子科学以及科学计算方面的成果,以整体的数学的视角来重新思考上述两个基本问题。也就是说,我们想从图灵和冯诺伊曼停下来的地方开始,“从源头说起”,深入探讨智能的数理基础。课程的讨论内容不但涉及计算数学、量子力学和脑科学的学科间“外交叉”,希望为理解意识和智能提供数学模型和算法支持,而且还有计算数学和基础数学的学科“内交叉”,将利用纯粹观点为数值方法的设计和模型分析提供新角度。

人类智能的物质基础是由约 1000 亿个神经元组成的脑神经网络,但该网络如何产生智能一直以来都是悬而未决的终极问题。最近实验技术的进步让我们有望得

到全脑神经元的高清图,进而为我们探寻上述终极问题提供了数据基础和实验技术。一旦到了神经元的微观尺度,量子力学行为就不能忽略,然而它对人脑意识的形成是否有帮助?如果有帮助,那么它扮演着什么角色呢?自量子力学诞生至今,人们在探索终极答案的过程中对这个问题也一直争论不休。我们可以从两个方面去看这个争论。首先构成脑神经元的碳、氢、氧、氮等原子和自然界中的毫无区别,它们遵从量子力学毫无疑问;其次如果神经元之间的联系是经典的,那么现在的互联网规模已经可以和脑神经网络相当,但这种基于经典连接的网络并没有出现智能。然而,所有这些争论都只停留在设想学说阶段,并无直接的实验证据,主要困难是量子态不好测量(因为海森堡测不准关系:无法准确测量位置或动量)。这是本课程关心的一个核心科学问题。我们希望由内至外,从第一原理的物理定律来演绎。量子化学有系统办法,从第一原理出发得到宏观的性质,但直接运用到神经网络上有困难:神经有网络结构。为了应对像脑神经网络这样的超大规模,如果用到的数学工具太传统,没有太多新的数学进来,会被维度灾难甚至 NP 难问题主导。实际使用的算法将需要结合图割技术和分枝随机游走等策略,为此需要发展网络或图上的数学。

作为计算数学的主要研究方向,微分方程数值解在近 100 年的发展中取得了巨大的成功,汇成了三大类数值方法:50 年代的差分方法,60 年代的有限元方法和 70 年代的谱方法。这三类方法的收敛性都依赖于解的正则性,而且要达到最优的收敛阶往往需要精心调配网格。当试图用基于网格的方法去求解高维微分方程时就会遇到所谓的维度灾难(curse of dimensionality)。当数据科学和人工智能的热潮涌来时,情况变得更糟糕,因为可能再也没有微分方程可解了,而是需要直

接去面对数据，正则性可能无从谈起，高维度更是与生俱来。本课程也将讨论我们小组在面对上述困境时做的尝试。我们将从 NP 难的图割问题出发说说如何从连续的观点去看离散的问题（包括发展组合问题的临界点理论和求解 NP 难问题的谱方法等），之后以高维相空间内的多体量子动力学模拟为例谈谈如何用随机的观点去看确定的问题进而产生求解高维问题的分枝随机游走算法。其中，我们将展示符号问题（sign problem）的维度灾难（即方差随维度增加指数增长），而符号问题本质上又是 NP 难的。于是，在 P 和 NP 关系不清楚的当下，我们只能试图去寻找缓解符号问题的策略，包括使用各种组合数学技术和现代分类决策思想等。也就是说我们想去寻找第四类可能的数值方法来突破困境。

具体而言，我们将在如下四个方面开展研讨：

- (1) 量子多体问题的数学理论和随机算法；
- (2) 组合问题的数学理论和新型高效算法；
- (3) 第四类数值方法的候选——随机粒子；
- (4) 量子行为对意识形成的数值模拟探索。