



上海大学未来技术学院  
SCHOOL OF FUTURE TECHNOLOGY, SHANGHAI UNIVERSITY

上海大学人工智能研究院  
INSTITUTE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE, SHANGHAI UNIVERSITY

# 人工智能导论

## ——第6课：人工智能在科学发现的应用 (AI for Science)

叶林奇

未来技术学院 (人工智能研究院)

2023冬季学期

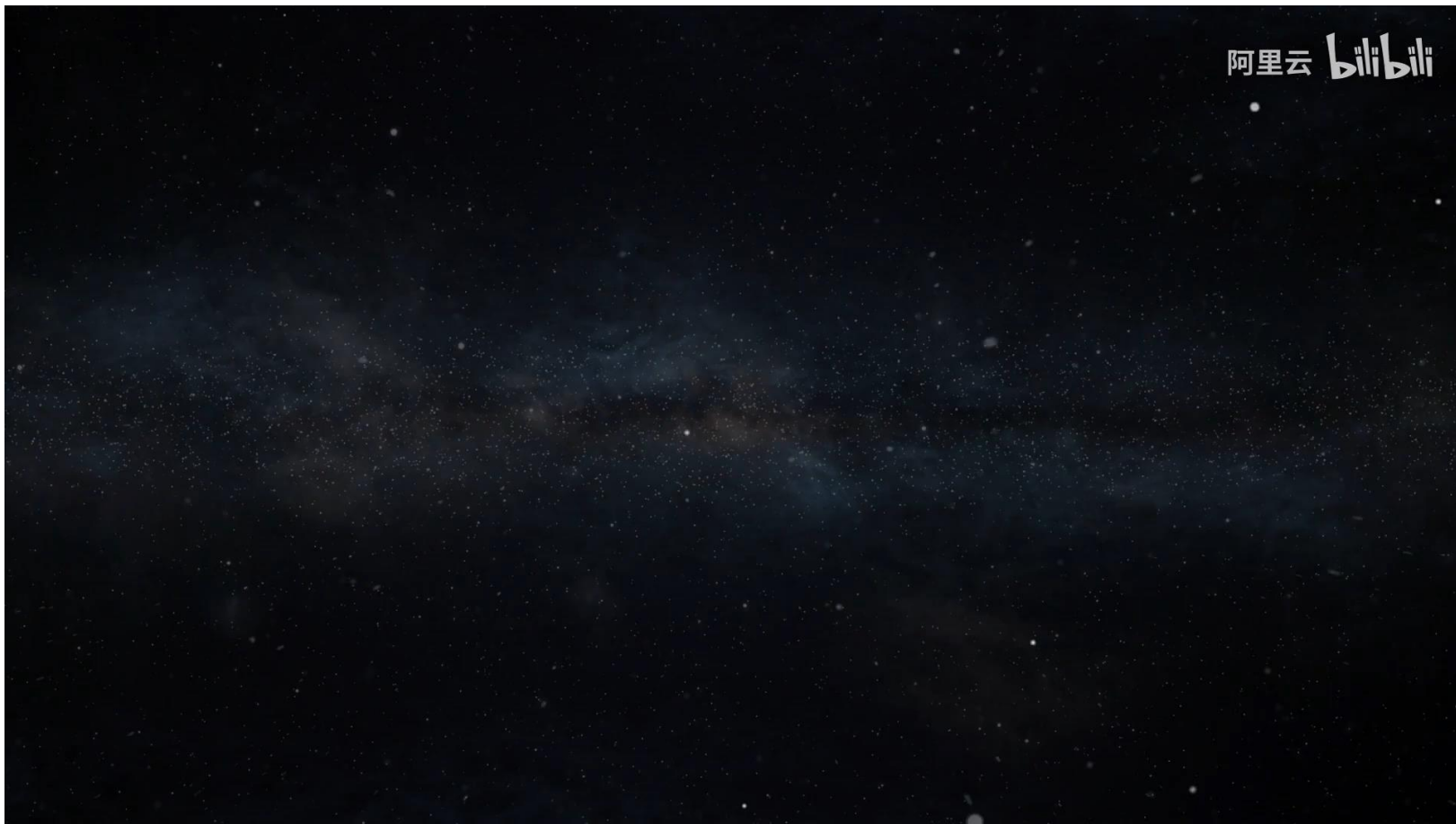




AI for Science

科研变迁百年,科学如何进化?

阿里云 bilibili





## AI for Science Vision: 2020 $\Rightarrow$ 2030

- AI will enable us to attack **new problems**
- AI becomes **equal partners** to modeling and simulation and data analysis
- AI will **enable experimentalists to harness the power of Exascale** computing
- AI will power **automated laboratories** and change the nature of experimental science
- AI will need **new computing architectures, new software environments, new policies** and create **new user communities** and new ways of dissemination
- AI **will improve how DOE laboratories operate** and how work is done



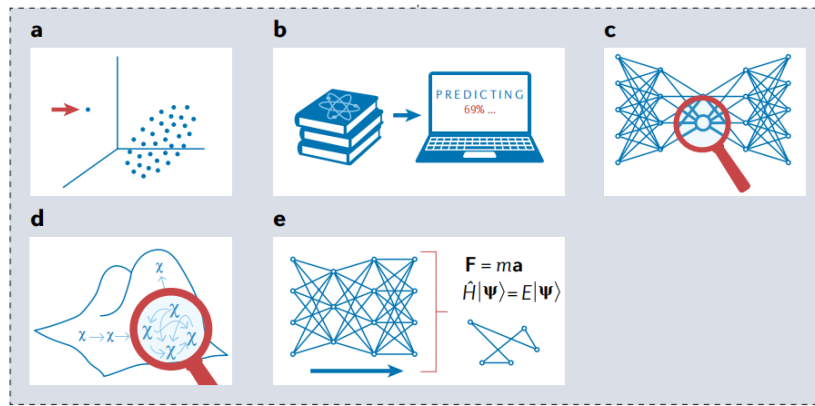
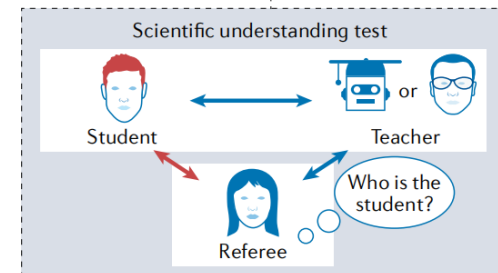
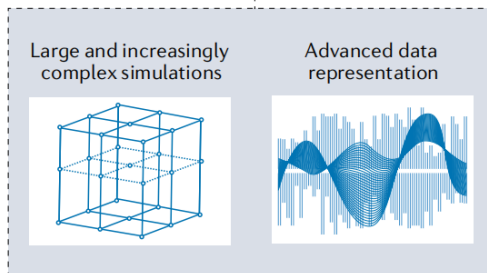
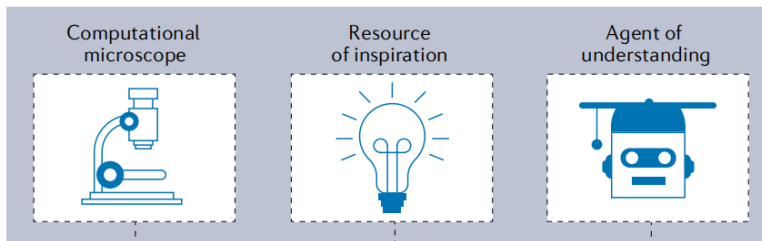
# AI for Science

Krenn, Mario, et al. "On scientific understanding with artificial intelligence." *Nature Reviews Physics* 4.12 (2022): 761-769.

## AI for Science的三个维度:

- 首先，人工智能可以作为工具揭示物理系统的属性，然后人类将这些洞察力提升到科学理解。
- 第二，人工智能可以作为新概念和想法的灵感来源，随后被人类科学家理解和概括。
- 第三，人工智能可以充当理解的媒介。人工智能达到了新的科学见解，而且重要的是，可以将其理解传递给人类研究人员。

### Three dimensions of computer-assisted scientific understanding

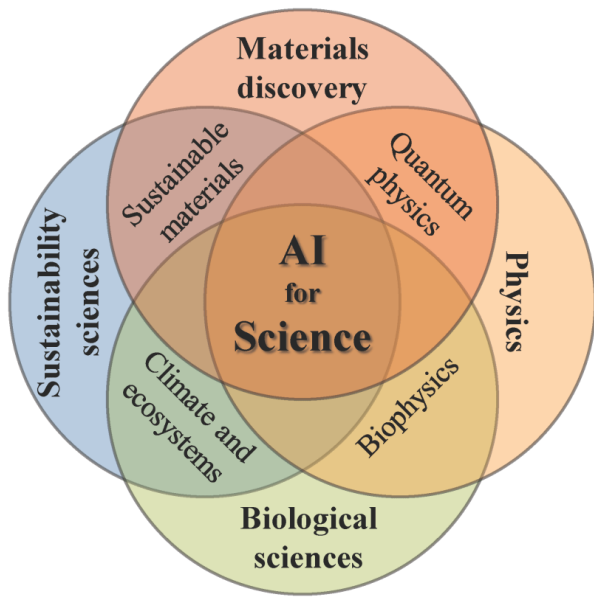




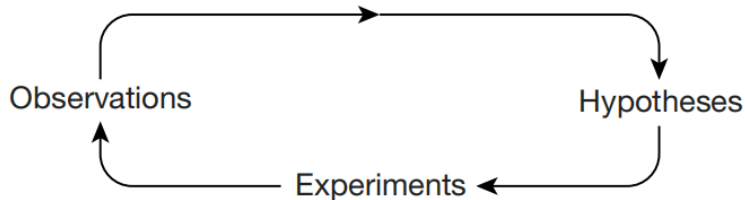


# AI for Science

Wang, Hanchen, et al.  
"Scientific discovery in  
the age of artificial  
intelligence." *Nature* 620.  
7972 (2023): 47-60.



## AI for science



Weather forecasting



Battery design optimization



Magnetic control of nuclear fusion reactors



Planning chemical synthesis pathway



Neural solvers of differential equations



Hydropower station location planning



Synthetic electronic health record generation



Rare event selection in particle collisions



Language modelling for biomedical sequences



High-throughput virtual screening



Navigation in the hypothesis space



Super-resolution 3D live-cell imaging



Symbolic regression

# 提纲

---

一、AI for 生命科学

二、AI for 材料科学

三、AI for 数学

四、AI for 核聚变&天气预报

五、AI for 机器人设计



上海大学  
SHANGHAI UNIVERSITY



2020  
AlphaFold

Article

## Improved protein structure prediction using potentials from deep learning

<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1923-7>

Received: 2 April 2019

Accepted: 10 December 2019

Published online: 15 January 2020

Andrew W. Senior<sup>1,4\*</sup>, Richard Evans<sup>1,4</sup>, John Jumper<sup>1,4</sup>, James Kirkpatrick<sup>1,4</sup>, Laurent Sifre<sup>1,4</sup>, Tim Green<sup>1</sup>, Chongli Qin<sup>1</sup>, Augustin Židek<sup>1</sup>, Alexander W. R. Nelson<sup>1</sup>, Alex Bridgland<sup>1</sup>, Hugo Penedones<sup>1</sup>, Stig Petersen<sup>1</sup>, Karen Simonyan<sup>1</sup>, Steve Crossan<sup>1</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup>, David T. Jones<sup>2,3</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1</sup>

Article

## Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>

Received: 11 May 2021

Accepted: 12 July 2021

Published online: 15 July 2021

Open access

Check for updates

John Jumper<sup>1,4</sup>, Richard Evans<sup>1,4</sup>, Alexander Pritzel<sup>1,4</sup>, Tim Green<sup>1,4</sup>, Michael Figurnov<sup>1,4</sup>, Olaf Ronneberger<sup>1,4</sup>, Kathryn Tunyasuvunakool<sup>1,4</sup>, Russ Bates<sup>1,4</sup>, Augustin Židek<sup>1,4</sup>, Anna Potapenko<sup>1,4</sup>, Alex Bridgland<sup>1,4</sup>, Clemens Meyer<sup>1,4</sup>, Simon A. A. Kohl<sup>1,4</sup>, Andrew J. Ballard<sup>1,4</sup>, Andrew Cowie<sup>1,4</sup>, Bernardino Romera-Paredes<sup>1,4</sup>, Stanislav Nikolov<sup>1,4</sup>, Rishub Jain<sup>1,4</sup>, Jonas Adler<sup>1</sup>, Trevor Back<sup>1</sup>, Stig Petersen<sup>1</sup>, David Reiman<sup>1</sup>, Ellen Clancy<sup>1</sup>, Michal Zielinski<sup>1</sup>, Martin Steinegger<sup>2,3</sup>, Michalina Pacholska<sup>1</sup>, Tamas Berghammer<sup>1</sup>, Sebastian Bodenstein<sup>1</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Oriol Vinyals<sup>1</sup>, Andrew W. Senior<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1,4</sup>

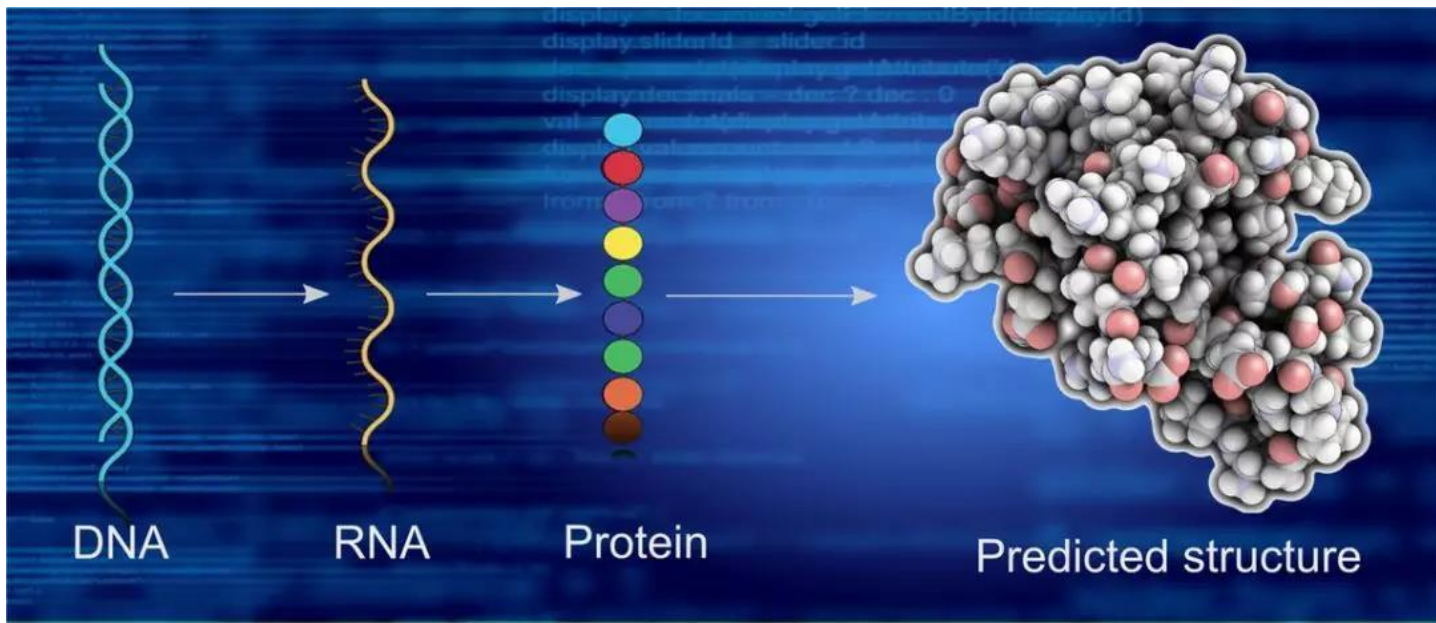
2021  
AlphaFold 2



## AI for 生命科学

氨基酸链扭转、弯曲构成不同的蛋白质，因此，具有数百个氨基酸的蛋白质可能呈现出数量惊人的不同结构，比如， $10^{300}$ 次方个。

获得蛋白质序列是相对廉价的，可以直接通过质谱法（每个样本100美元）或间接通过 DNA 基因组 / 外显子组测序（每个序列100-1000美元）来实现。与之相反的是，发现蛋白质三维结构的实验要昂贵得多（每个结构10万到100万美元），这需要通过X射线晶体学或者核磁共振完成的。







## AI for 生命科学

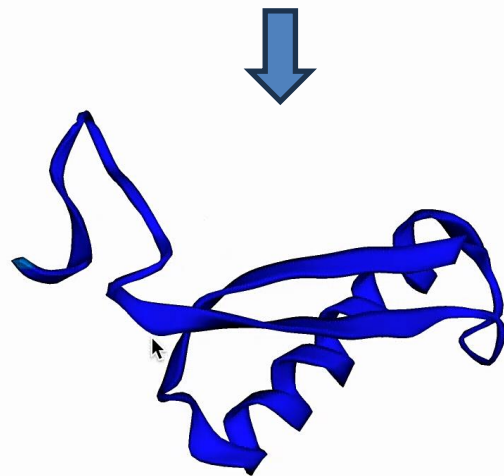
AlphaFold解决的问题是蛋白质折叠问题，可以抽象成如下：

输入：Alpha Fold的输入是一个氨基酸序列，每一个位置的元素代表了链上的一个氨基酸单元（一共可以有21种氨基酸单元），一个典型的输入如下

PIAQIHILEGRSDEQKETLIREVSEAIRSLDAPLTSVRVIITEMAKGHFGIGGELASK

这个输入代表是一个包含59个氨基酸的链

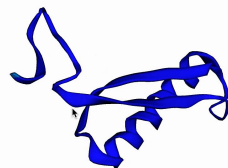
输出：在接收到这个单一序列的输入之后，AlphaFold需要使用算法，预测这一个氨基酸链条会如何折叠，所以输出的是一个拓扑结构，上面这段氨基酸输入经过AlphaFold模型运算之后输出的氨基酸拓扑结构可视化如下：





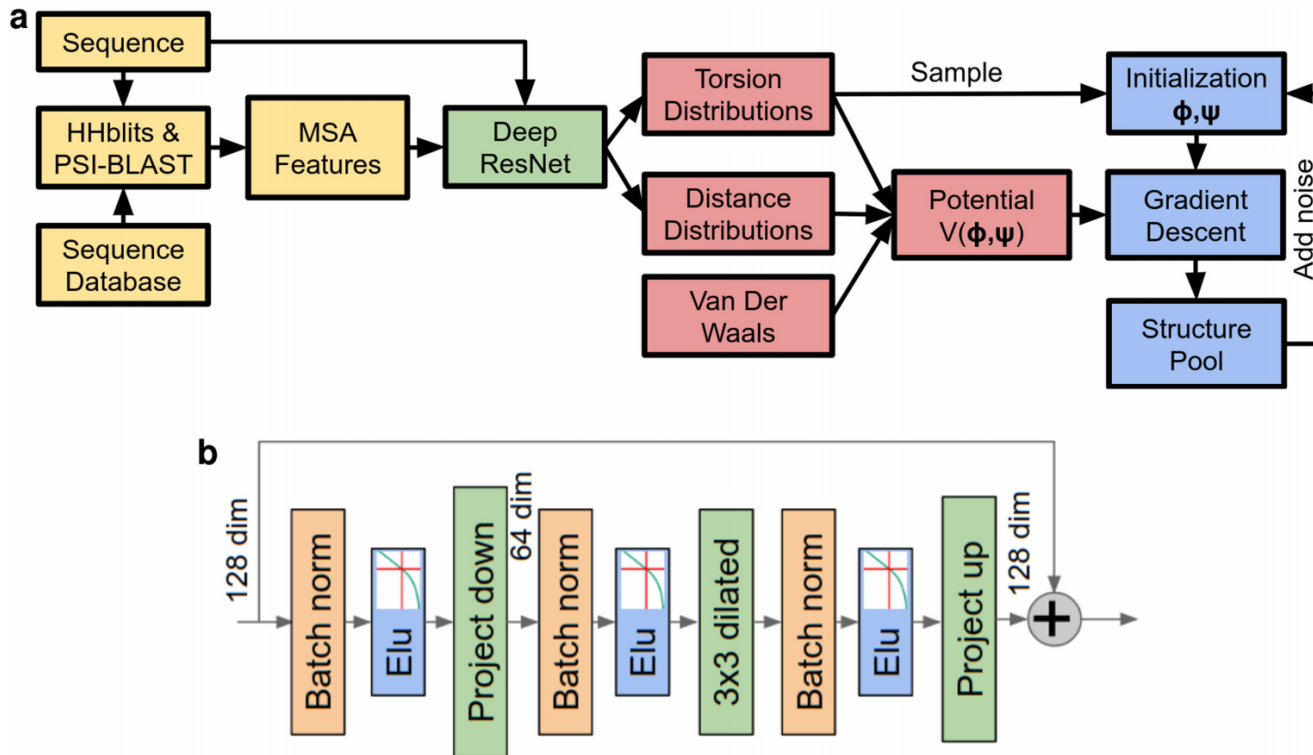
当然而这个拓扑结构本身肯定不能作为输出，作为输出肯定需要是结构化的数据。准确的说，输出的数据是每一个氨基酸单元和其下一个氨基酸单元在空间中的夹角，由于是三维空间，所以说明一个方位需要2维数据， $(\varphi, \psi)$ ，所以AlphaFold的模型的输出就是一组数量和输入对应的夹角对：

$(\varphi_1, \psi_1), (\varphi_2, \psi_2), (\varphi_3, \psi_3), (\varphi_4, \psi_4), \dots$



如果输入的是k个氨基酸，那么输出的就是k-1个夹角对，比如上文中输入是59个氨基酸组成的氨基酸链，那么就应该输出58个夹角对。

问题大概就是这样一个问题，输入输出都有明确的定义。在现代生物学中，这是一个价值极大的问题，解决了这个问题，就能更高效的进行药物研发，进行生物化学药品的成分效用分析。



**Extended Data Fig. 1 | Schematics of the folding system and neural network.**

**a**, The overall folding system. Feature extraction stages (constructing the MSA using sequence database search and computing MSA-based features) are shown in yellow; the structure-prediction neural network in green; potential construction in red; and structure realization in blue. **b**, The layers used in one

block of the deep residual convolutional network. The dilated convolution is applied to activations of reduced dimension. The output of the block is added to the representation from the previous layer. The bypass connections of the residual network enable gradients to pass back through the network undiminished, permitting the training of very deep networks.



整个AlphaFold算法大致分为几个部分

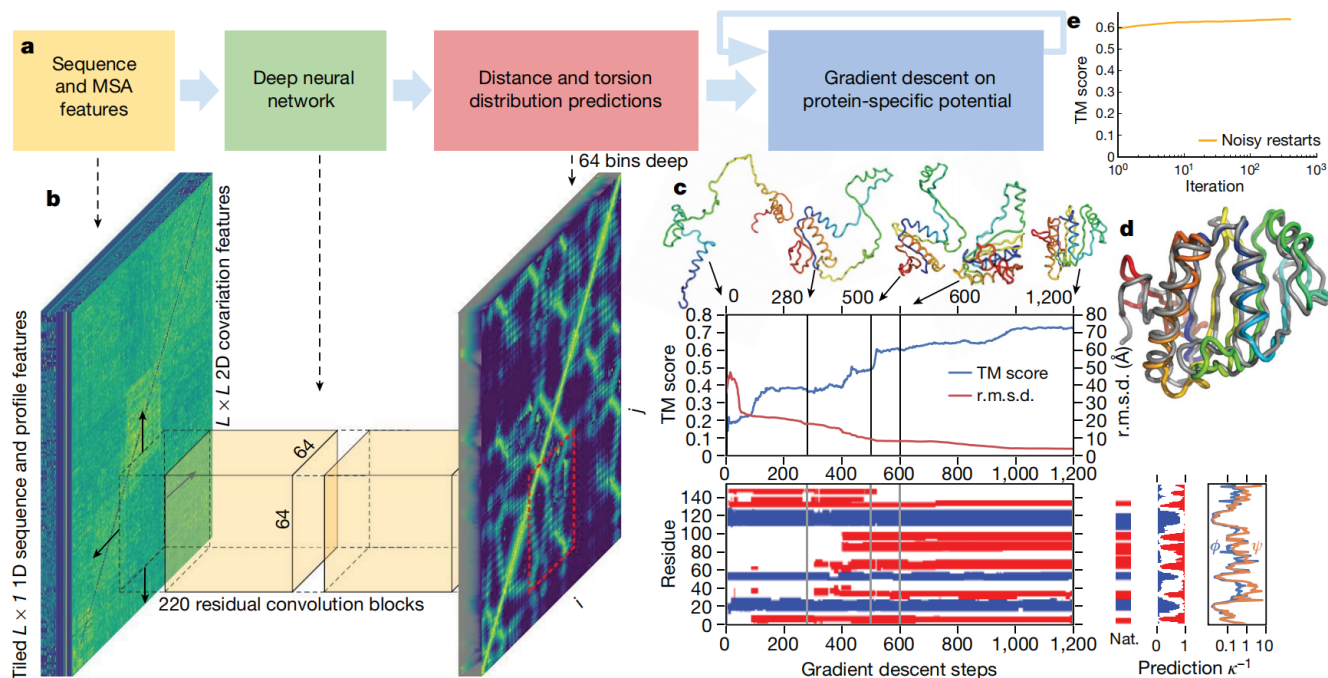
(1) 序列和MSA特征抽取，可以理解为机器学习中最常见的特征构造部分，把氨基酸链的输入转换到特征空间

(2) 深度神经网络结构预测，主要工作是用根据(1)中的抽取的特征预测输出氨基酸链的一些性质，比如氨基酸之间两两的**距离分布**，氨基酸链的**夹角分布**（注意，这里不是直接预测结构，而是预测距离和夹角的分布，同时注意，这里预测的都是分布，而不是直接预测夹角/距离，这是算法的很重要的细节，在下文会提到）

(3) **potential construction**，其任务是根据(2)中神经网络预测的性质，构造一个评估函数，来评估诸多可能的解的合理程度

(4) 结构生成，这里使用了(3)中构建的评估函数，使用(3)中的预测夹角分布初始化一个解，然后使用评估函数评估它，并且使用梯度下降法优化这个解，直到解收敛。





**Fig. 2 | The folding process illustrated for CASP13 target T0986s2.** CASP target T0986s2,  $L=155$ , PDB: 6N9V. **a**, Steps of structure prediction. **b**, The neural network predicts the entire  $L \times L$  distogram based on MSA features, accumulating separate predictions for  $64 \times 64$ -residue regions. **c**, One iteration of gradient descent (1,200 steps) is shown, with the TM score and root mean square deviation (r.m.s.d.) plotted against step number with five snapshots of the structure. The secondary structure (from SST<sup>33</sup>) is also shown (helix in blue, strand in red) along with the native secondary structure (Nat.), the secondary

structure prediction probabilities of the network and the uncertainty in torsion angle predictions (as  $\kappa^{-1}$  of the von Mises distributions fitted to the predictions for  $\varphi$  and  $\psi$ ). While each step of gradient descent greedily lowers the potential, large global conformation changes are effected, resulting in a well-packed chain. **d**, The final first submission overlaid on the native structure (in grey). **e**, The average (across the test set,  $n=377$ ) TM score of the lowest-potential structure against the number of repeats of gradient descent per target (log scale).



AlphaFold中运用的很多手段都是非常精妙的，可以说deepmind中的研究员对深度学习和生物都有着非常深刻的认识和理解（当然这是废话）。

### 1.对专家知识的融合

AlphaFold对专家知识的融合做的是极好的，AlphaFold中的专家只是主要体现在两方面：输入的特征构造和potential construction时的专家项。首先是输入时尽可能多的结合领域知识构建输入特征，并且拿到了不小的收益（10%甚至更多），然后在potential construction阶段将专家知识（氨基酸链的物理特性）归结到范德华项中，令人非常印象深刻。

### 2.对蛋白质折叠问题的建模方式

由于氨基酸折叠问题过于复杂，直接预测氨基酸如何折叠太难，于是Deepmind先预测了氨基酸折叠后的一些性质，将这些性质转化为可微的约束，然后在这种预测出来的约束下求解，这一套思路可以用在很多其他非常复杂，难以直接预测的问题上面。

### 3.对梯度下降法的深入理解

梯度下降法本身非常适合用于求解生成模块的问题，但是其也有本质缺陷：梯度下降法求出的解很有可能只是局部最优解。Deepmind非常敏锐的发现了这一点并且通过类似进化/退火算法加以解决，非常有趣。

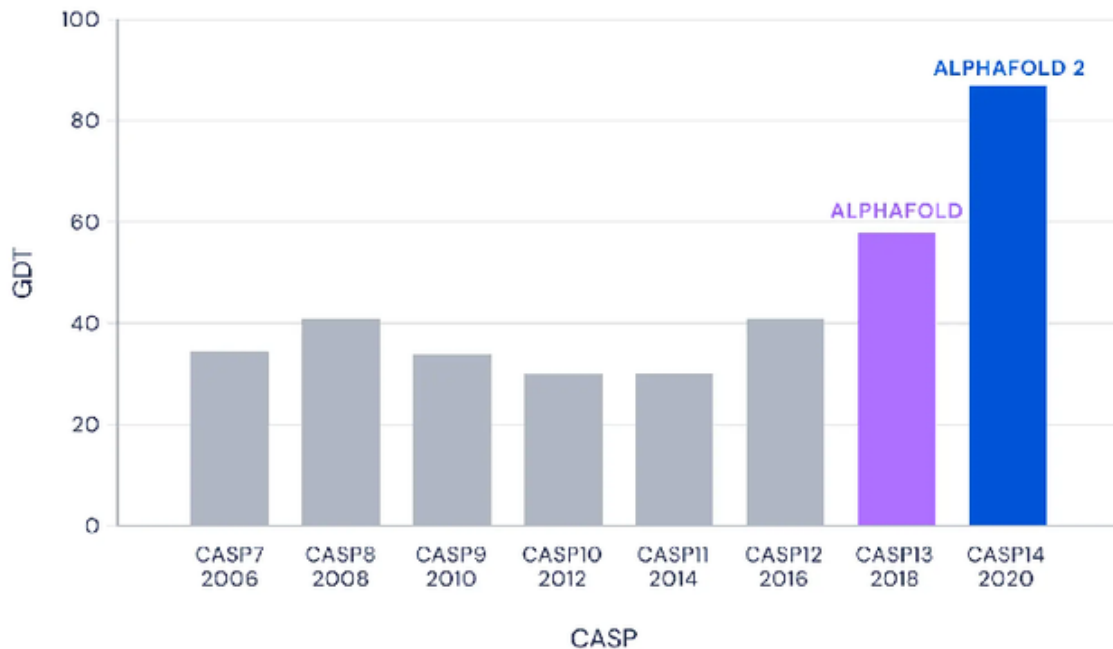


2018年，人工智能也正式参与到了蛋白质三维结构的预测中。AlphaFold在98名参赛队伍中排名第一，其预测的43种蛋白质中有25种蛋白质的结构最准确，而排名第二的团队中只有3种。

AlphaFold虽然拿了第一，但是没有表现出比传统思路以及什么革命性的差异。并且还借鉴了不少学术研究的成果，特别是David Baker教授的Rosetta程序和芝加哥大学徐锦波教授的RaptorX-Contact程序。

用人工智能来预测蛋白质结构的真正突破在于AlphaFold2的问世。AlphaFold2的主要变化是直接训练蛋白质结构的原子坐标，而不是用以往常用的、简化了的原子间距或者接触图。这也使得AlphaFold2在解析蛋白结构的速度上有了进一步的提高。

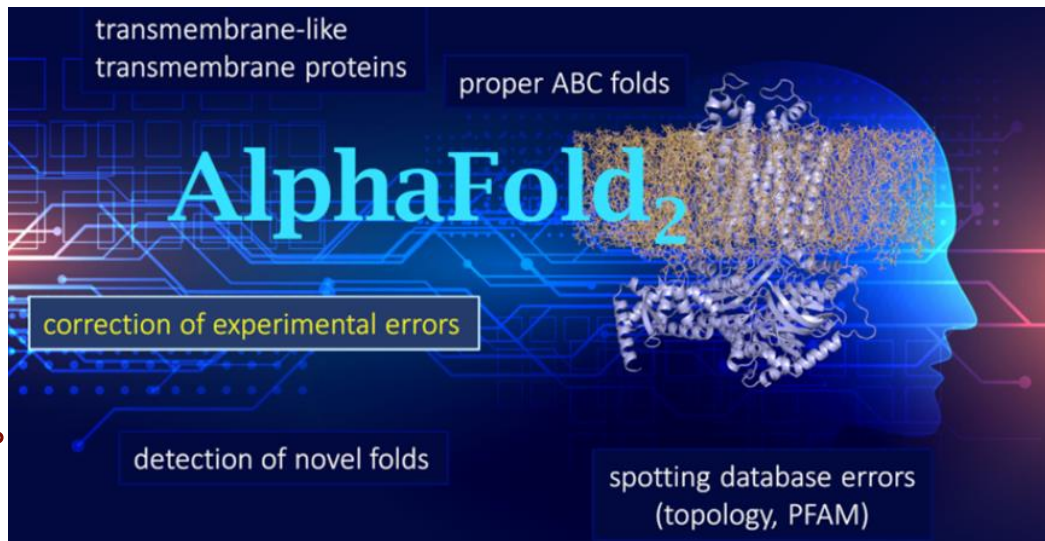
Median Free-Modelling Accuracy





Deepmind在设计AlphaFold2时完全摒弃了上一代AlphaFold的架构，规避了残基间接触或距离的预测，采用了一种全新的端对端模型，直接根据序列预测结构，这一设计不仅能加快预测速度，而且可以有效抑制中间过程中的误差积累。此外，Deepmind没有沿用AlphaFold中的卷积神经网络，而是采用了近年来自然语言处理领域较流行的Transformer架构，这种基于注意力（Attention）机制的模型允许所有氨基酸残基在每一步操作中发生信息交互，能够更好地模拟蛋白质折叠过程中残基间的相互作用。这些算法上的革新都进一步有效提升了预测的准确度。

在AlphaFold2中，Deepmind通过具有高度创新性的深度学习网络架构设计，初步解决了蛋白质结构预测这一困扰人类50年之久的科学难题，也因此入选了MIT Technology Review评选的2022年“全球十大突破性技术”。

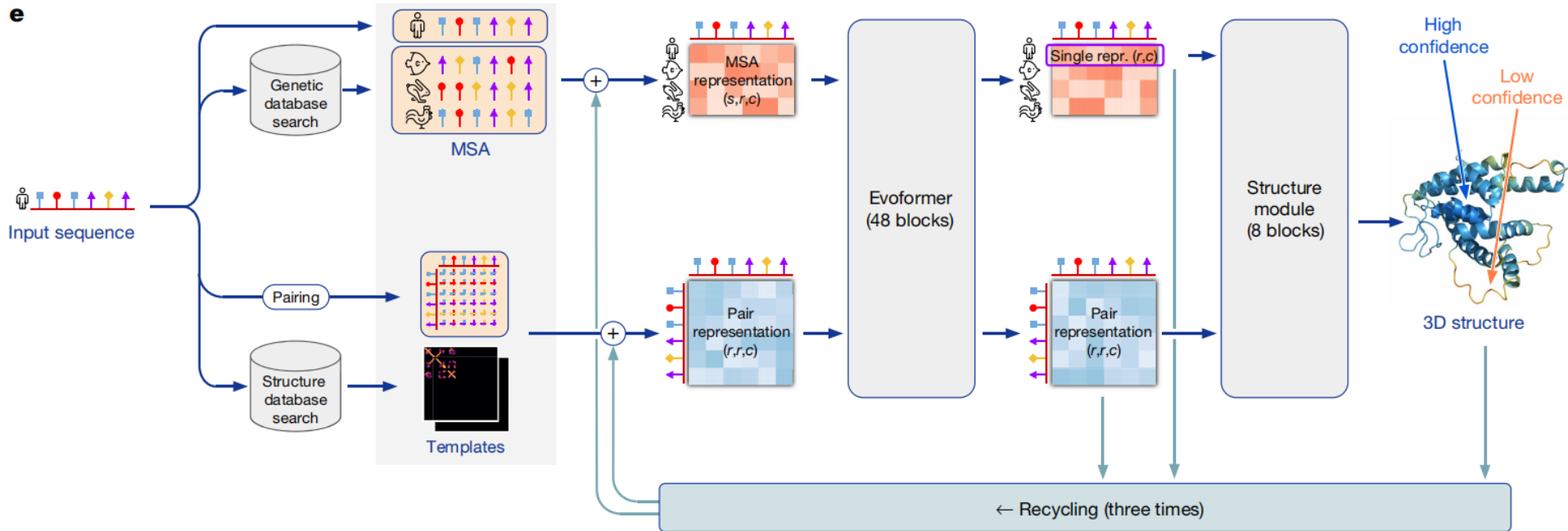






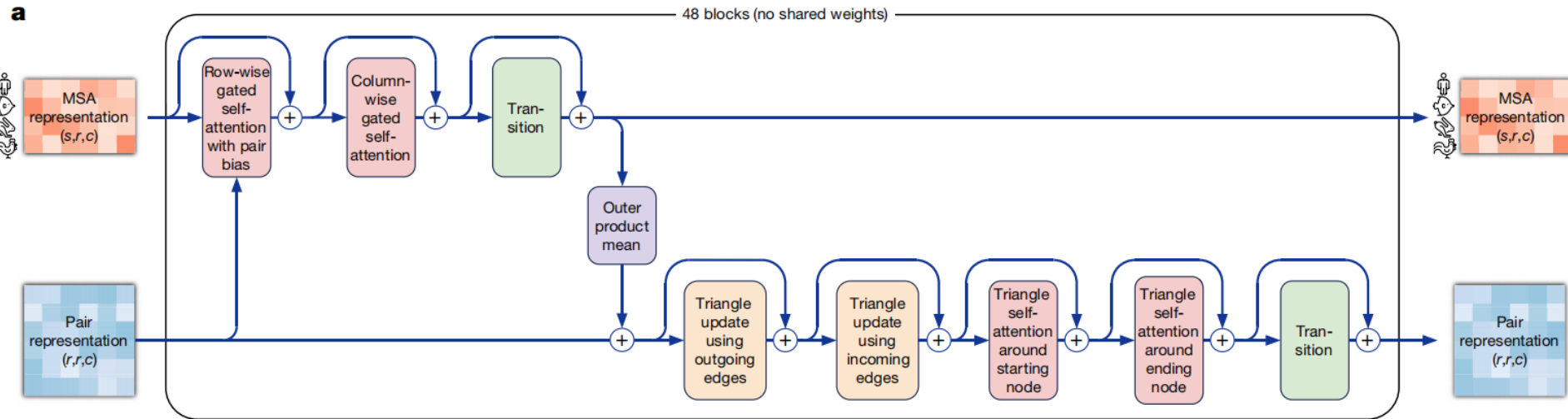
AlphaFold2主要利用多序列比对（MSA），把蛋白质的结构和生物信息整合到了深度学习算法中。

它主要包括两个部分：神经网络**EvoFormer**和**结构模块（Structure module）**。



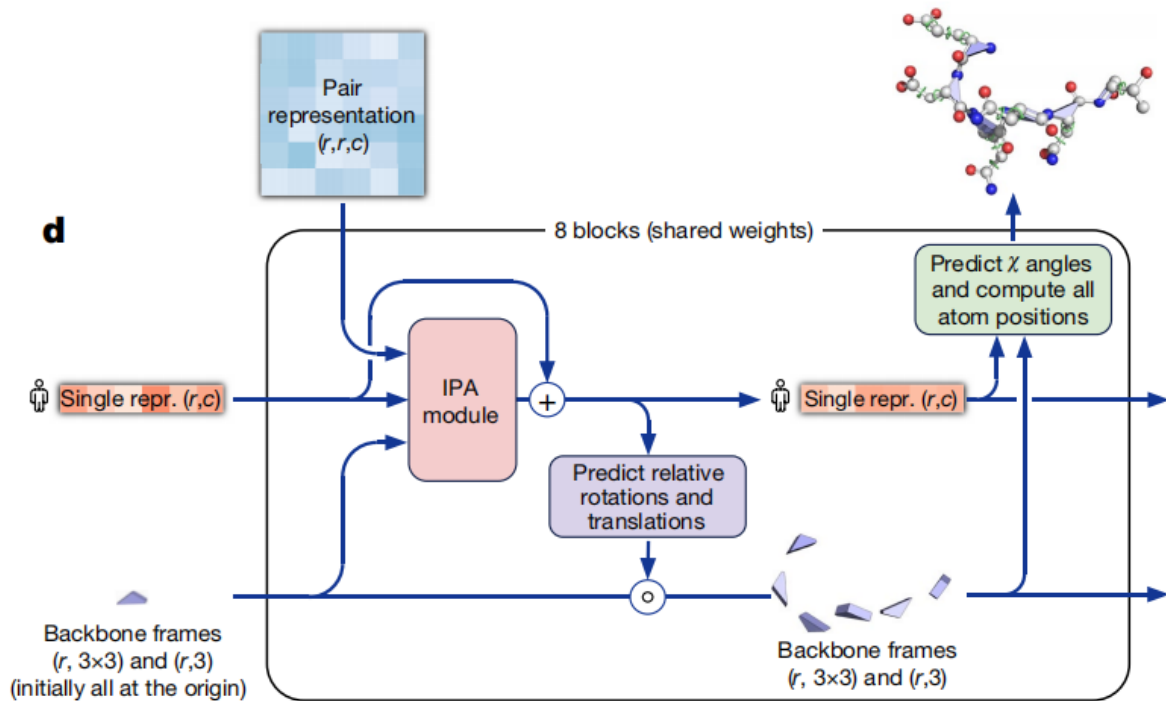


在EvoFormer中，主要是将图网络（Graph networks）和多序列比对（MSA）结合完成结构预测。图网络可以很好表示事物之间的相关性，在这里，它可以将蛋白质的相关信息构建出一个图表，以此表示不同氨基酸之间的距离。研究人员用Attention机制构建出一个特殊的“三重自注意力机制（Triangular self-attention）”，来处理计算氨基酸之间的关系图。





架构的第二部分是一个结构模块 (Structure Module)，它的主要工作是将EvoFormer得到的信息转换为蛋白质的3D结构。

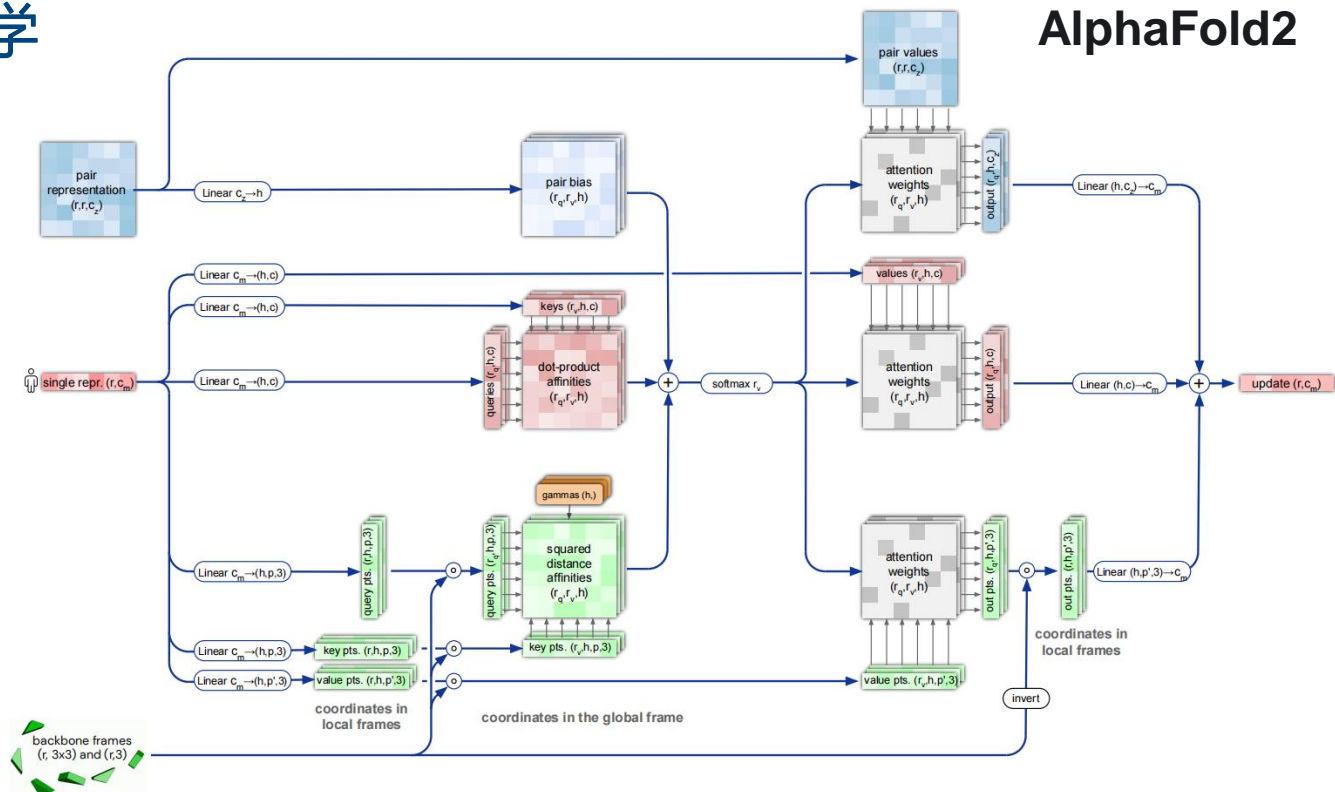




# AI for 生命科学

在这里，研究人员同样使用了 Attention 机制，它可以单独计算蛋白质的各个部分，称为“不变点注意力 (invariant point attention)”机制。

它以某个原子为原点，构建出一个3D参考场，根据预测信息进行旋转和平移，得到一个结构框架。



## AlphaFold2

**Supplementary Figure 8** | Invariant Point Attention Module. (top, blue arrays) modulation by the pair representation. (middle, red arrays) standard attention on abstract features. (bottom, green arrays) Invariant point attention. Dimensions: r: residues, c: channels, h: heads, p: points.

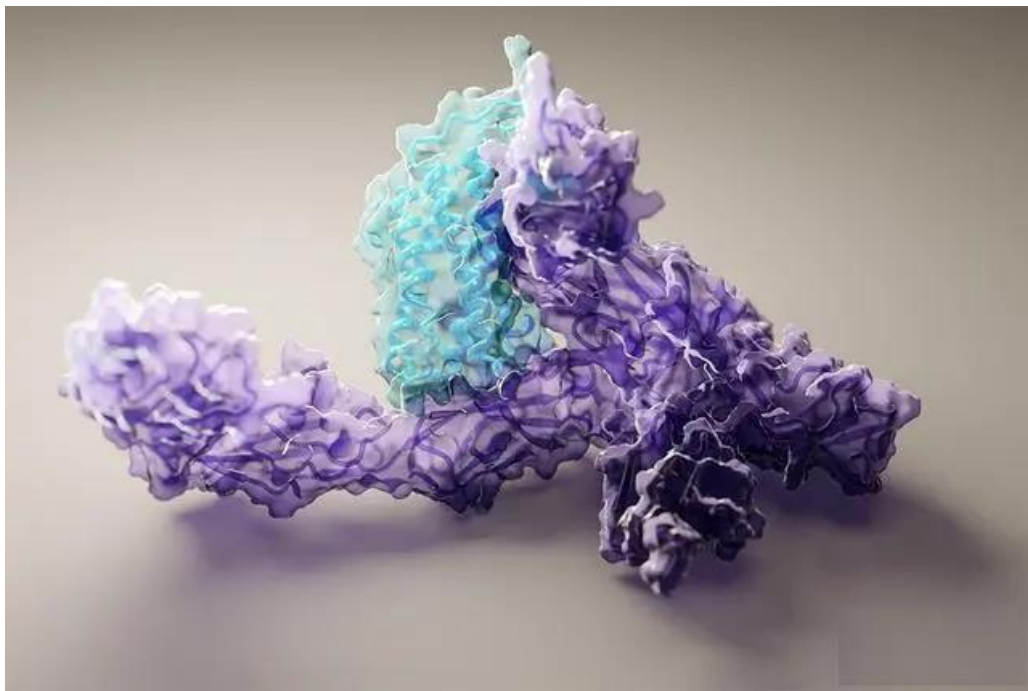




然后Attention机制会对所有原子都进行预测，最终汇总得出一个高度准确的蛋白质结构。

此外，研究人员还强调AlphaFold2是一个“端到端”的神经网络。他们会反复把最终损失应用于输出结果，然后再对输出结果进行递归，不断逼近正确结果。这样做既能减少额外的训练，还能大幅提高预测结构的准确性。

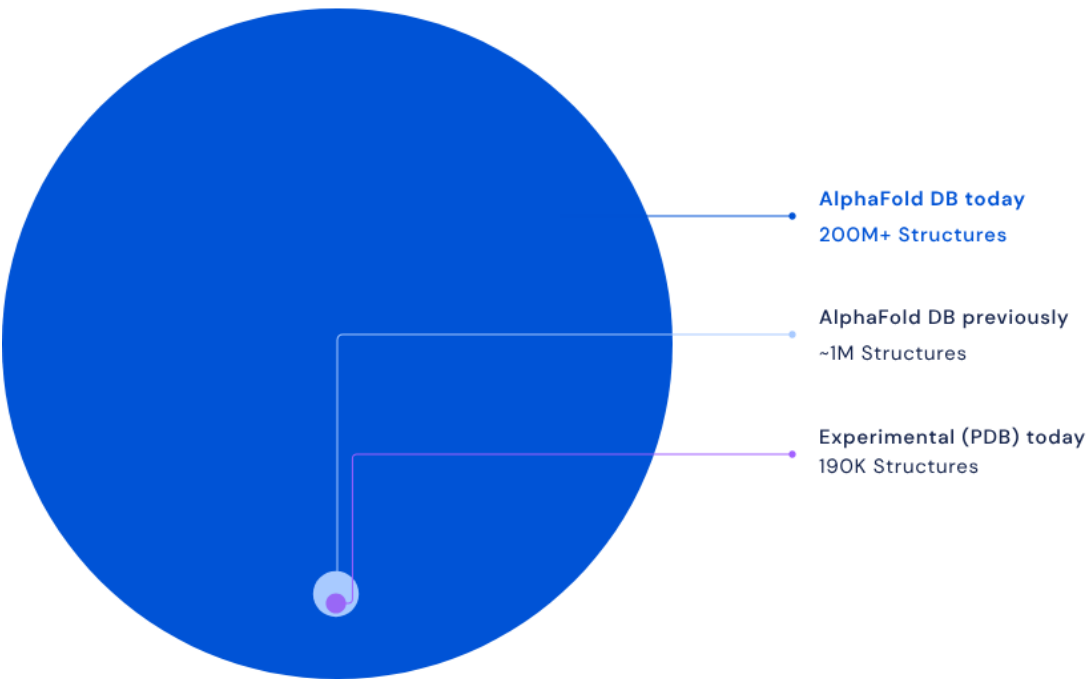
Alphafold2的出现，能更好地预判蛋白质与分子结合的概率，从而极大地加速新药研发的效率。





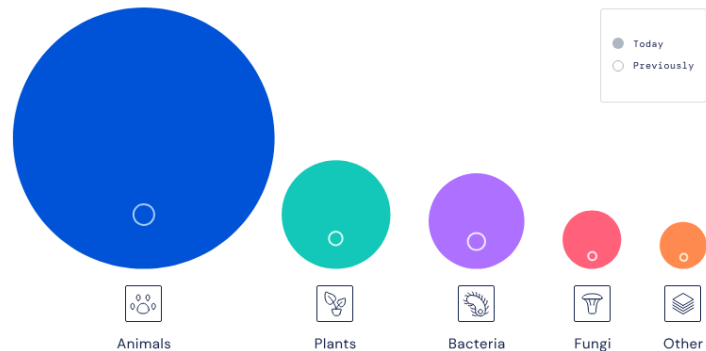
Number of Protein Structures

### AlphaFold预测了几乎所有已知蛋白质！ 涵盖2.14亿结构开放免费用



Number of species represented in AlphaFold DB

Total increase from ~10K to ~1M





## Cell封面：麻省理工学者通过AI人工智能，发现史上最强抗生素

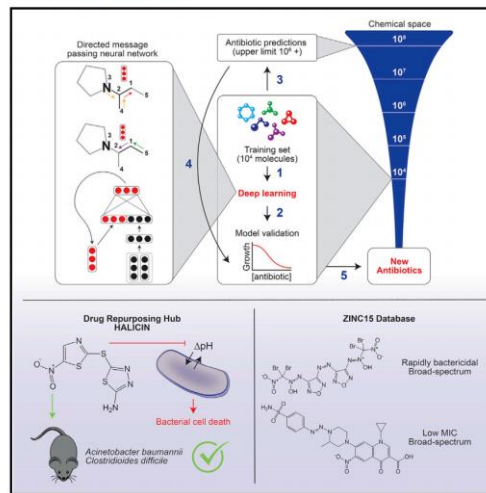
由于耐药细菌的迅速出现，如何寻找新的抗生素是当前科学家一直面临的难题。论文报道了麻省理工学院**Jim Collins**领导的研究团队**利用深度学习模型发现了超强抗生素halicin**。halicin与常规抗生素在结构上有所不同，展示了前所未有的广谱抗菌能力，可以消灭一些世界上最危险的细菌。

这项开创性的研究，标志着抗生素发现乃至更普遍的药物发现发生了范式转变。

### Cell

## A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery

### Graphical Abstract



### Authors

Jonathan M. Stokes, Kevin Yang, Kyle Swanson, ..., Tommi S. Jaakkola, Regina Barzilay, James J. Collins

### Correspondence

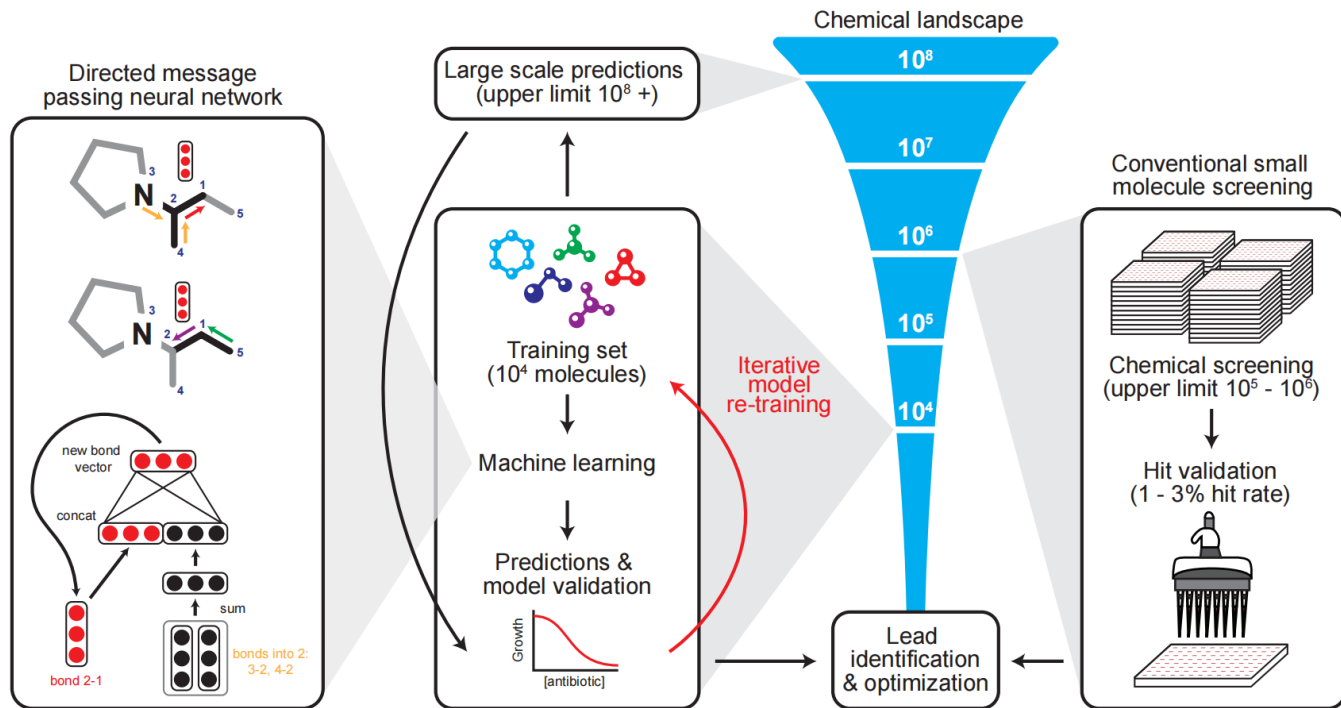
regina@csail.mit.edu (R.B.), jimjc@mit.edu (J.J.C.)

### In Brief

A trained deep neural network predicts antibiotic activity in molecules that are structurally different from known antibiotics, among which Halicin exhibits efficacy against broad-spectrum bacterial infections in mice.



研究人员们使用Broad研究所的一个化合物库，让这套模型从其中6111个分子里，寻找具有潜在抗菌潜力的分子。从中，这种模型认为一个分子具有很强的抗菌活性。有意思的是，这种分子原先是作为一种糖尿病药物而开发出来的，在结构上和已有的任何一种抗生素都明显不同。后续的一些研究，也表明该分子对人类细胞的毒性较低。



# 提纲

---

一、AI for 生命科学

二、AI for 材料科学

三、AI for 数学

四、AI for 核聚变&天气预报

五、AI for 机器人设计



上海大学  
SHANGHAI UNIVERSITY





## 加速800年研究成果！谷歌DeepMind用AI预测220万新晶体，论文登《Nature》

GNoME发现了220万种新晶体预测，其中有38万个稳定的晶体结构，有望通过实验合成。这些材料预测相当于800年的知识价值，部分材料或许会引发技术变革，如下一代电池、超导体等。GNoME项目旨在降低发现新材料的成本。

目前谷歌DeepMind已和多家实验室合作，已有736种GNoME新材料被制造。其中，劳伦斯伯克利国家实验室通过人工智能预测完成了自主材料合成。

### Article

# Scaling deep learning for materials discovery

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>

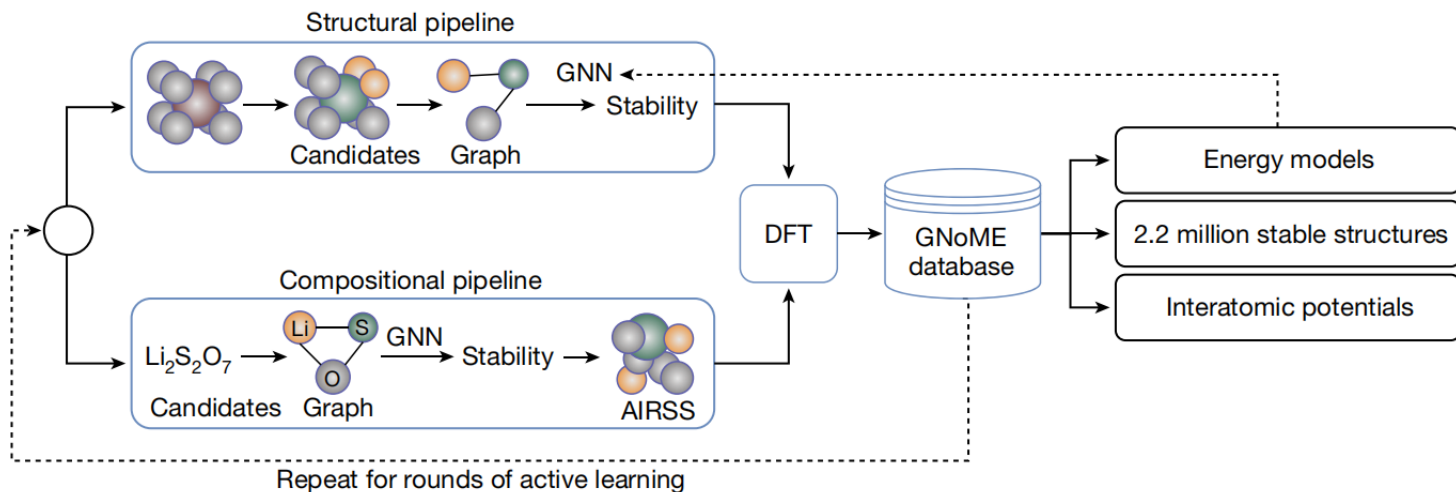
Amil Merchant<sup>1,3</sup>✉, Simon Batzner<sup>1,3</sup>, Samuel S. Schoenholz<sup>1,3</sup>, Muratahan Aykol<sup>1</sup>,  
Gwoon Cheon<sup>2</sup> & Ekin Dogus Cubuk<sup>1,3</sup>✉

Received: 8 May 2023



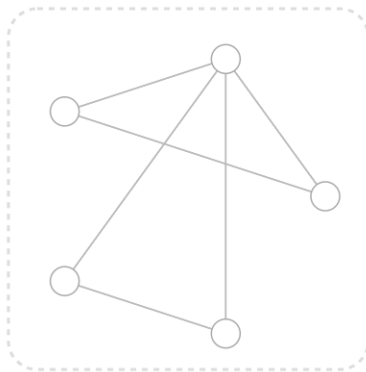
**GNoME**是一种先进的图神经网络（GNN）模型。该模型的输入数据主要采用图表的形式，形成类似原子之间的连接，这也让**GNoME**更容易发现新的晶体材料。据介绍，**GNoME**将会预测新型稳定晶体的结构，然后通过**DFT**（密度泛函理论）进行测试，并将所得的高质量训练数据反馈到模型训练中。

**GNoME**最初被喂了有关晶体结构及其稳定性的数据训练，部分数据从**Materials Project**公开获得。现阶段，新模型将材料稳定性预测的发现率从**50%**左右提高到**80%**，新材料的发现率从**10%**以下提高到**80%**以上，该效率的提高可能会对每次发现所需的计算量产生重大影响。



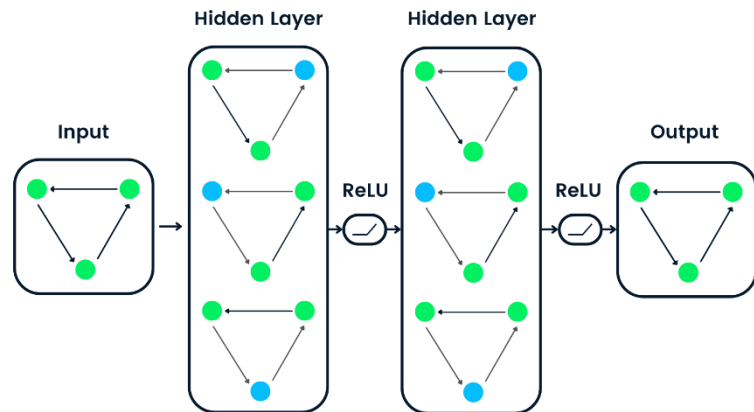
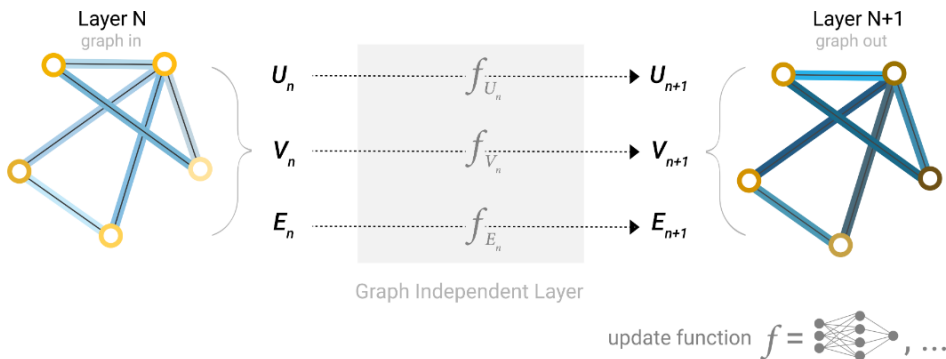


## Graph neural network (GNN)



Three types of attributes we might find in a graph, hover over to highlight each attribute. Other types of graphs and attributes are explored in the [Other types of graphs](#) section.

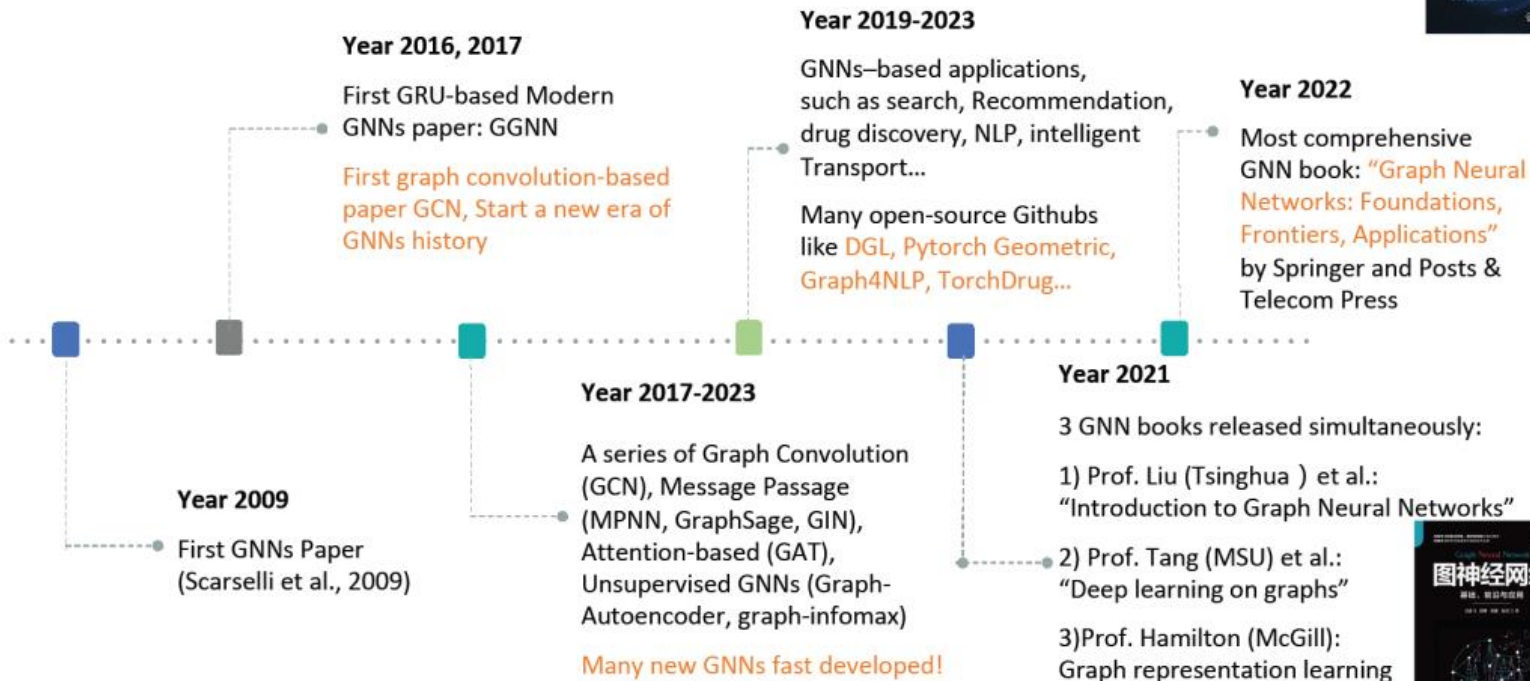
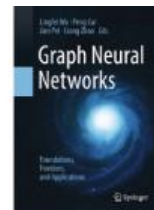
- V** Vertex (or node) attributes  
e.g., node identity, number of neighbors
- E** Edge (or link) attributes and directions  
e.g., edge identity, edge weight
- U** Global (or master node) attributes  
e.g., number of nodes, longest path



A single layer of a simple GNN. A graph is the input, and each component (V,E,U) gets updated by a MLP to produce a new graph. Each function subscript indicates a separate function for a different graph attribute at the n-th layer of a GNN model.



## GNNs: A Brief History





## AI for 材料科学

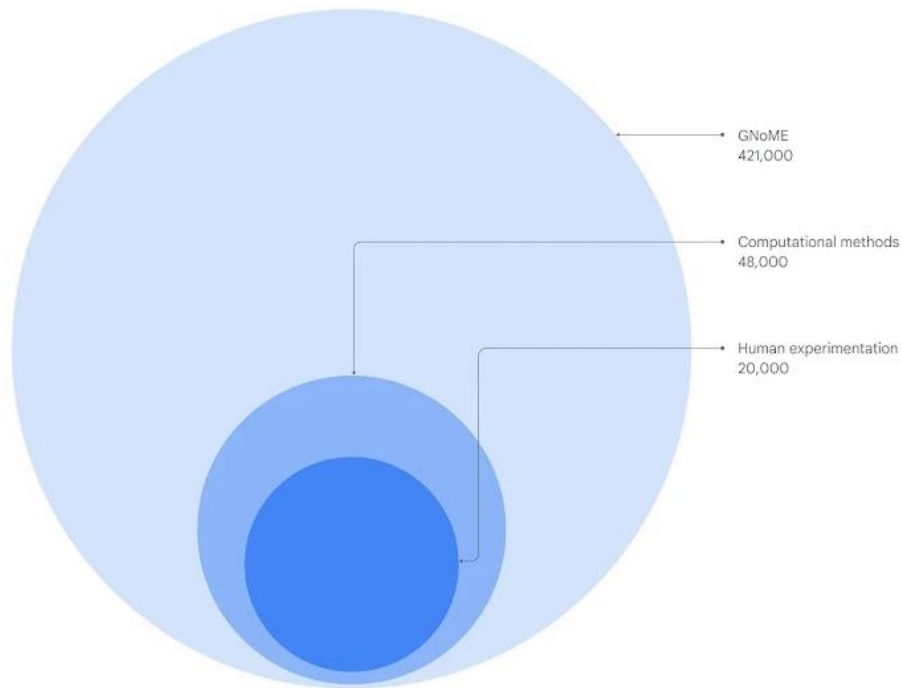
谷歌现已向研究界发布了新发现晶体的数据库，希望帮助科学家们测试并制造出最好的材料。

基于这些晶体的新技术的快速开发将取决于它们的制造能力。伯克利实验室的合作者领导的一篇论文中，研究人员表明机器人实验室可以利用自动合成技术快速制造新材料。

基于材料项目中的已有材料和GNoME对稳定性的见解，机器人实验室创建了晶体结构的新配方，并成功合成了超过41种新材料，为材料合成开辟了新的可能性。

如今，谷歌和伯克利实验室、谷歌研究院以及世界各地团队的合作者的研究表明了使用人工智能指导材料发现、实验和合成的潜力。

## GNoME





材料学突破！微软MatterGen直接生成新材料稳定性超SOTA模型2.9倍

# MatterGen: a generative model for inorganic materials design

Claudio Zeni<sup>1†</sup>, Robert Pinsler<sup>1†</sup>, Daniel Zügner<sup>1†</sup>,  
Andrew Fowler<sup>1†</sup>, Matthew Horton<sup>1†</sup>, Xiang Fu<sup>1</sup>,  
Sasha Shysheya<sup>1</sup>, Jonathan Crabbé<sup>1</sup>, Lixin Sun<sup>1</sup>, Jake Smith<sup>1</sup>,  
Ryota Tomioka<sup>1\*</sup>, Tian Xie<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Microsoft Research AI4Science.





## AI for 材料科学

### MatterGen

当前，材料科学的核心挑战是，发现所需特性的材料，比如高锂离子电导率的电池材料。一般来说，要做到这一点，首先需要找到新材料，然后根据应用进行筛选。

这就好比要创建一只猫的图像，首先要生成100万张不同图像，然后再搜索有猫的图像。而有了MatterGen模型，就可以「直接生成」所需特性的新型材料，这与DALL·E处理图像生成的方式非常相似。

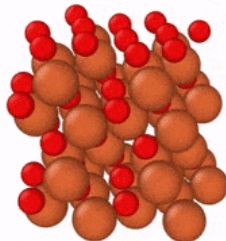
MatterGen是扩散模型的一种，专门设计用于生成新颖、稳定的材料。

另外，MatterGen还有适配器模块，可根据化学、对称性等各种约束条件进行微调，以生成材料。

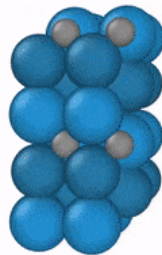
值得一提的是，与SOTA模型（CDVAE）相比，MatterGen生成的新颖独特结构的稳定性高出2.9倍。它还生成接近能量局部最小值17.5倍的结构。

# To property-guided Materials Design

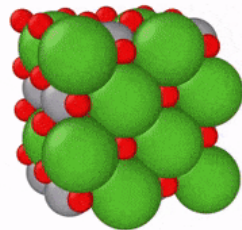
High Magnetic  
Density



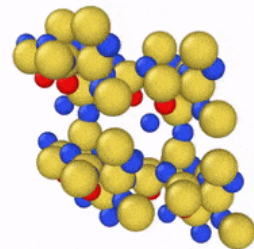
High Bulk  
Modulus



Specific  
Chemistry

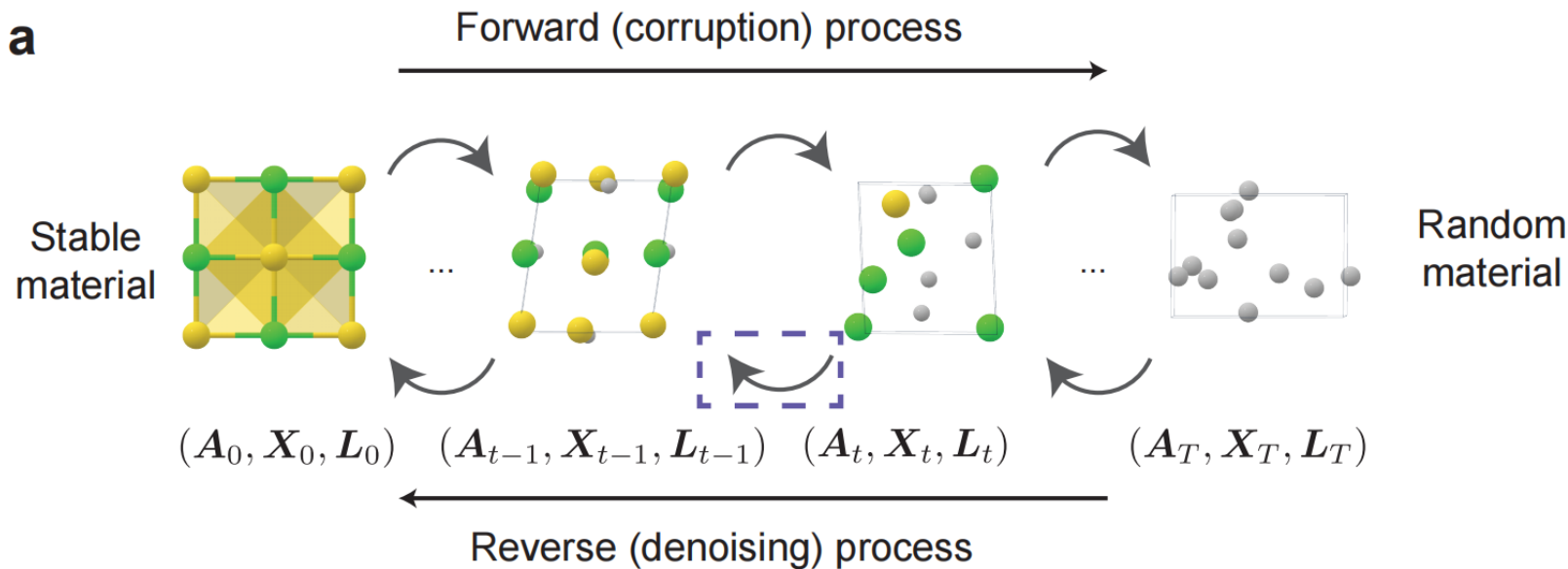


Specific  
Band Gap





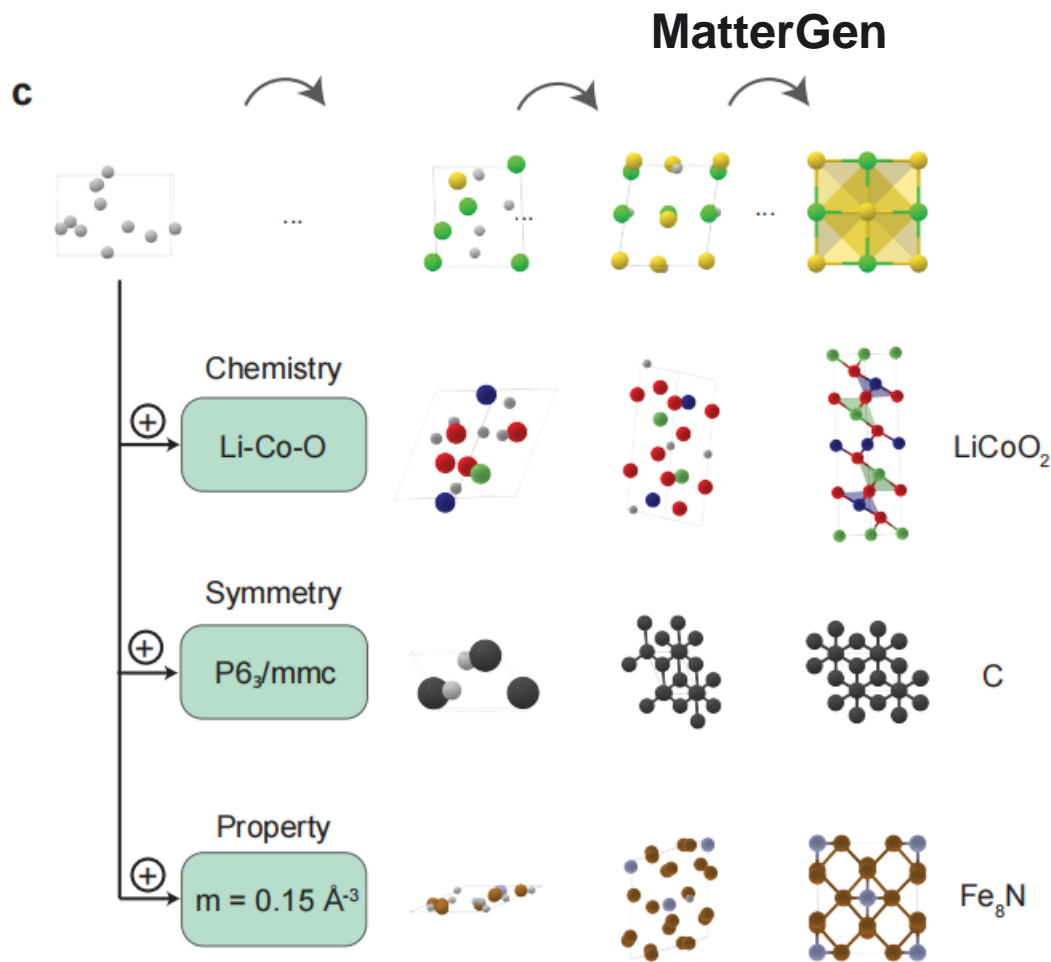
在MatterGen中，研究人员介绍了一种为晶体材料量身定制的新型扩散过程。扩散模型通过学习分数网络（score network）来逆转固定的破坏过程来生成样本。图像的破坏过程通常添加高斯噪声，但晶体材料具有独特的周期结构和对称性，需要定制的扩散过程。晶体材料可由其重复单元（即单元格）定义，单元格编码原子类型 $A$ （即化学元素）、坐标 $X$ 和周期晶格 $L$ 。作者为每个成分定义了一个适合其自身几何形状的破坏过程，并具有物理上的极限噪声分布。





# AI for 材料科学

作者将这种方法应用于多种类型的属性，生成了一套微调模型，可以生成具有目标化学成分、对称性或标量属性（如磁密度）的材料，下图c。





研究人员将逆向材料设计的生成模型设计为一个两步过程：  
首先预训练一个通用的基本模型，以便在元素周期表上生成稳定的、多样的晶体，  
然后针对不同的下游任务对基本模型进行微调。

为了训练基础模型，  
研究者从 **Materials Project (MP)** 和 **Alexandria** 数据集中重新计算了 **607,684** 个稳定结构（多达 **20** 个原子），并将其称为 **Alex-MP-20**。

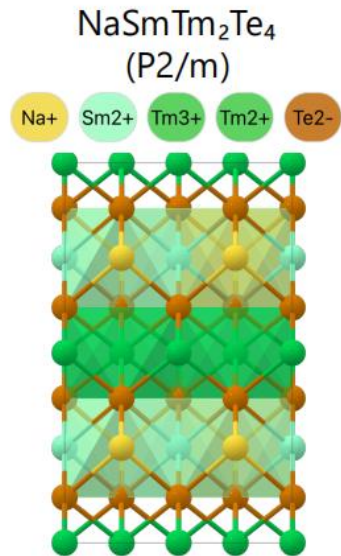
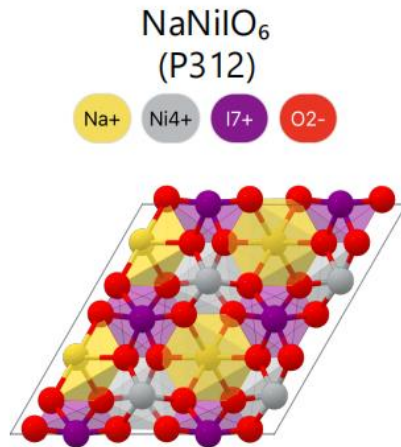
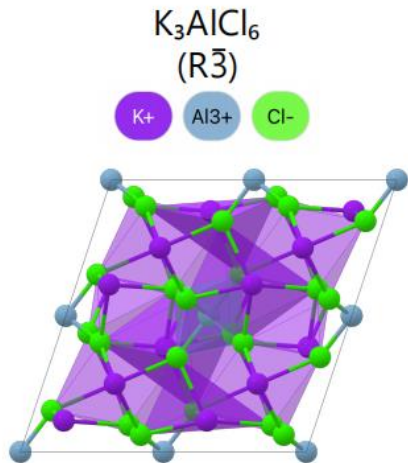
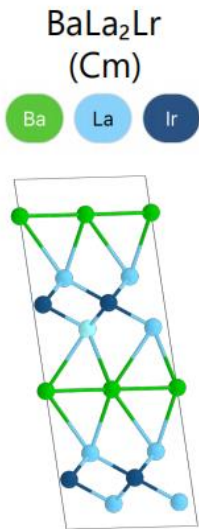




研究者认为，如果通过DFT松弛后每个原子的能量低于参考数据集的0.1 eV/原子阈值，包括从MP、Alexandria和ICSD数据集重新计算的1,081,850个独特结构，则该结构是稳定的。

下图a显示了，MatterGen生成的几个随机样品，具有典型的无机材料配位环境。

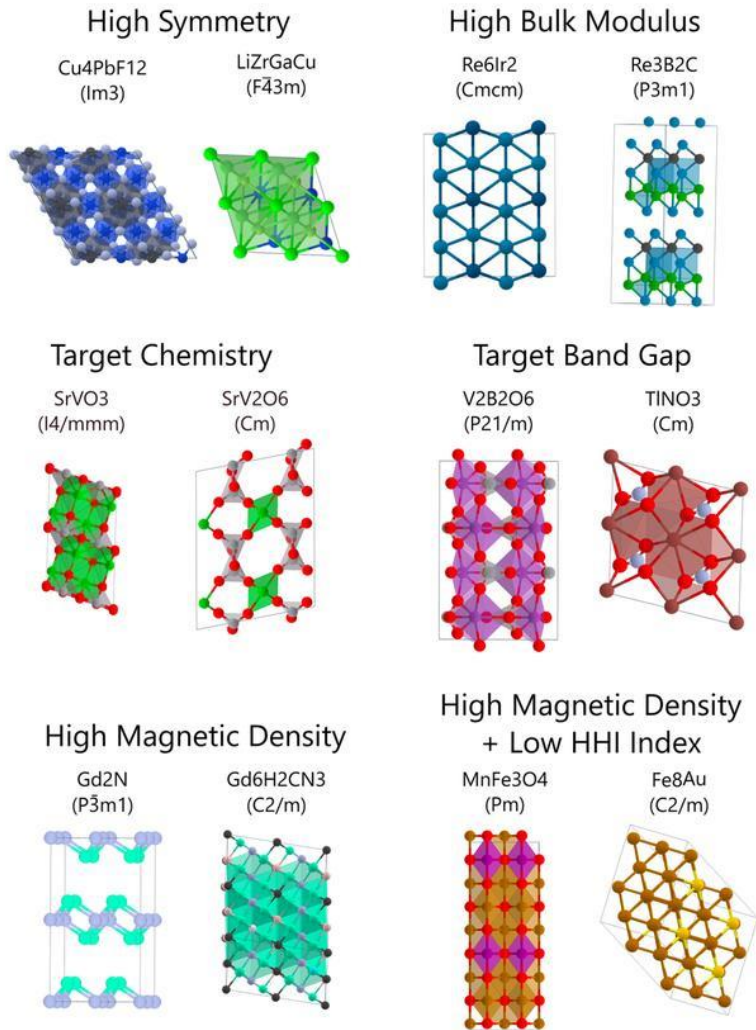
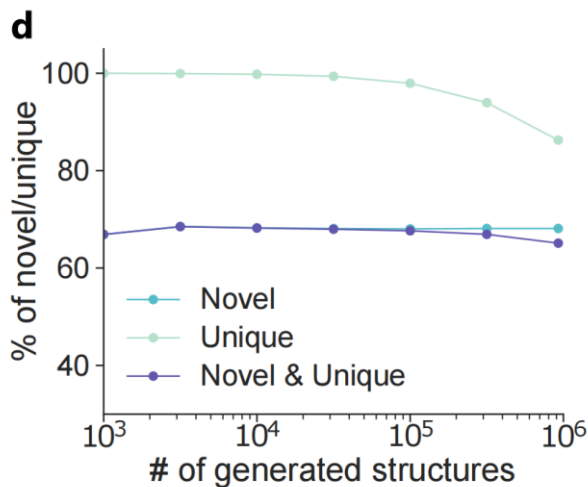
a







MatterGen可以生成大量独特和新颖的材料。  
如图d所示，当生成1000个结构时，独特结构的百分比是100%，而当生成100万个结构时，独特结构的百分比仅下降到86%，而新颖性保持稳定在68%左右。





# 提纲

---

一、AI for 生命科学

二、AI for 材料科学

三、AI for 数学

四、AI for 核聚变&天气预报

五、AI for 机器人设计



上海大学  
SHANGHAI UNIVERSITY



DeepMind 团队在 Nature 杂志上发表的一项最新研究中，人们成功让 AI 与人类数学家进行了合作，利用机器学习从大规模数据中探测模式，然后数学家尝试据此提出猜想，精确表述猜想并给出严格证明。他们解决了纯数学领域的两个问题：得到了纽结理论中代数和几何不变量之间的关系，提出了表示论中组合不变性猜想的可能证明方法。这次成功意味着未来机器学习可能会被引入数学家的工作中，AI 和数学家之间将展开更深入的合作。有数学家认为，这就像是伽利略有了望远镜，能够凝视数据宇宙的深处，看到之前从未探测到的东西。

### Article

# Advancing mathematics by guiding human intuition with AI

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-04086-x>

Received: 10 July 2021

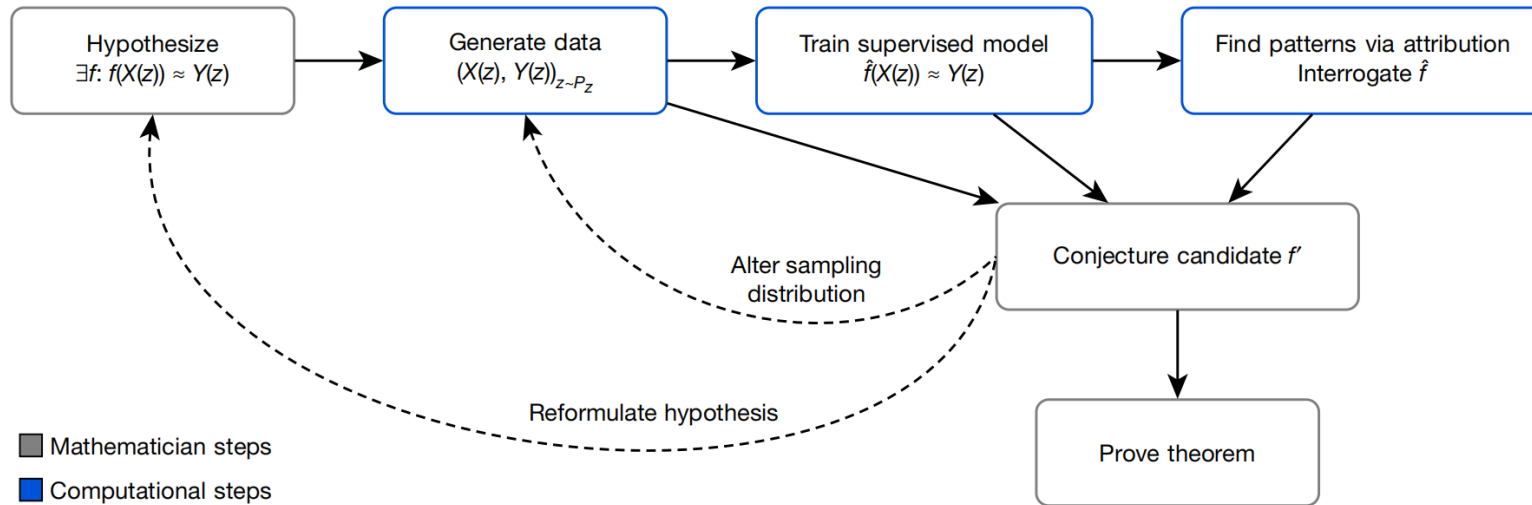
Alex Davies<sup>1</sup>✉, Petar Veličković<sup>1</sup>, Lars Buesing<sup>1</sup>, Sam Blackwell<sup>1</sup>, Daniel Zheng<sup>1</sup>, Nenad Tomašev<sup>1</sup>, Richard Tanburn<sup>1</sup>, Peter Battaglia<sup>1</sup>, Charles Blundell<sup>1</sup>, András Juhász<sup>2</sup>, Marc Lackenby<sup>2</sup>, Geordie Williamson<sup>3</sup>, Demis Hassabis<sup>1</sup> & Pushmeet Kohli<sup>1</sup>✉



# AI for 数学

## Mathematics

数学家的直觉在数学发现中起着极其重要的作用——“只有将严谨的形式主义和良好的直觉结合起来，才能解决复杂的数学问题”。下面的框架描述了一种通用方法，通过该方法，数学家可以使用机器学习中的工具来指导他们对复杂数学对象的直觉，验证他们关于关系可能存在的假设并帮助理解这些关系。这是一种自然且富有成效的方式，可以将统计学和机器学习中这些广为人知的技术做为数学家工作的一部分。



**Fig. 1 | Flowchart of the framework.** The process helps guide a mathematician’s intuition about a hypothesized function  $f$ , by training a machine learning model to estimate that function over a particular distribution of data  $P_z$ . The insights from

the accuracy of the learned function  $\hat{f}$  and attribution techniques applied to it can aid in the understanding of the problem and the construction of a closed-form  $f'$ . The process is iterative and interactive, rather than a single series of steps.



## 陶哲轩：ChatGPT已加入我的数学 workflows



ChatGPT数学能力虽然不咋滴，但对做学术研究的人来说是个发散思维的好工具。

大到寻找公式、辅助证明定理；小到改写论文语句、查询小语种数学名词的发音。

传统的计算机软件就像是数学中的**标准函数**，比较死板；AI工具更像是数学中的**概率函数**，会更加灵活。



纽结理论学家利用机器学习技术对纽结的数学方程式进行猜测，验证了一个纽结数学方程。人工智能巨头DeepMind联手数学家探索此前未知的规律并寻求新发现。研究人员利用大量关于纽结的数据训练了一套机器学习算法，发现了一个连接扭结两种性质的方程式——随后该方程式得到严格证明。在另一项测试中，研究小组发现一种与对称性相关的可能模式，数学家们搜寻这类模式已经数十年。纽结理论专家Marc Lackenby感叹：“我非常震惊，机器学习工具在指导直觉方面竟能如此有用。”

NEWS | 01 December 2021

## DeepMind's AI helps untangle the mathematics of knots

The machine-learning techniques could benefit other areas of maths that involve large data sets.





一篇加州理工和MIT研究者用ChatGPT证明数学定理的论文爆火，在数学圈引发了极大关注。

---

## LeanDojo: Theorem Proving with Retrieval-Augmented Language Models

---

Kaiyu Yang<sup>1</sup>, Aidan M. Swope<sup>2</sup>, Alex Gu<sup>3</sup>, Rahul Chalamala<sup>1</sup>, Peiyang Song<sup>4</sup>,  
Shixing Yu<sup>5</sup>, Saad Godil\*, Ryan Prenger<sup>2</sup>, Anima Anandkumar<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Caltech, <sup>2</sup>NVIDIA, <sup>3</sup>MIT, <sup>4</sup> UC Santa Barbara, <sup>5</sup>UT Austin

<https://leandojo.org>





英伟达首席科学家Jim Fan激动转发，称AI数学Copilot已经到来，下一个发现新定理的，就是全自动AI数学家了！

纽约时报近日也发文，称数学家们做好准备，AI将在十年内赶上甚至超过最优秀的人类数学家。

## *A.I. Is Coming for Mathematics, Too*

For thousands of years, mathematicians have adapted to the latest advances in logic and reasoning. Are they ready for artificial intelligence?



Terence Tao

@tao

3 时

Siobhan Roberts from the #NewYorkTimes attended the #IPAM workshop on #MachineAssistedProof earlier this year. Based on her experiences and interviews there and elsewhere, she has now written an article about #AI and #math : [nytimes.com/2023/07/02/science...](https://nytimes.com/2023/07/02/science...)

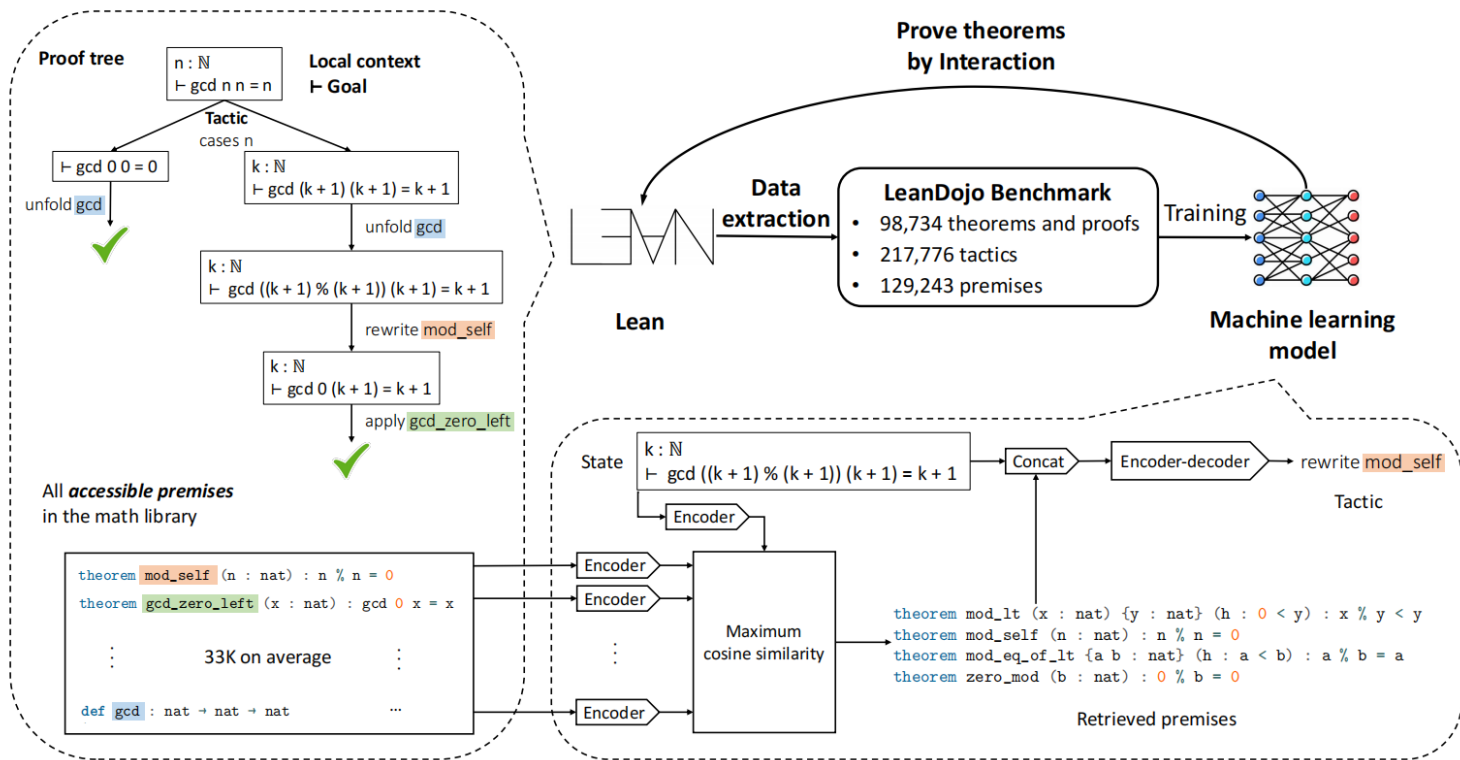


A.I. Is Coming for Mathematics, Too

The New York Times

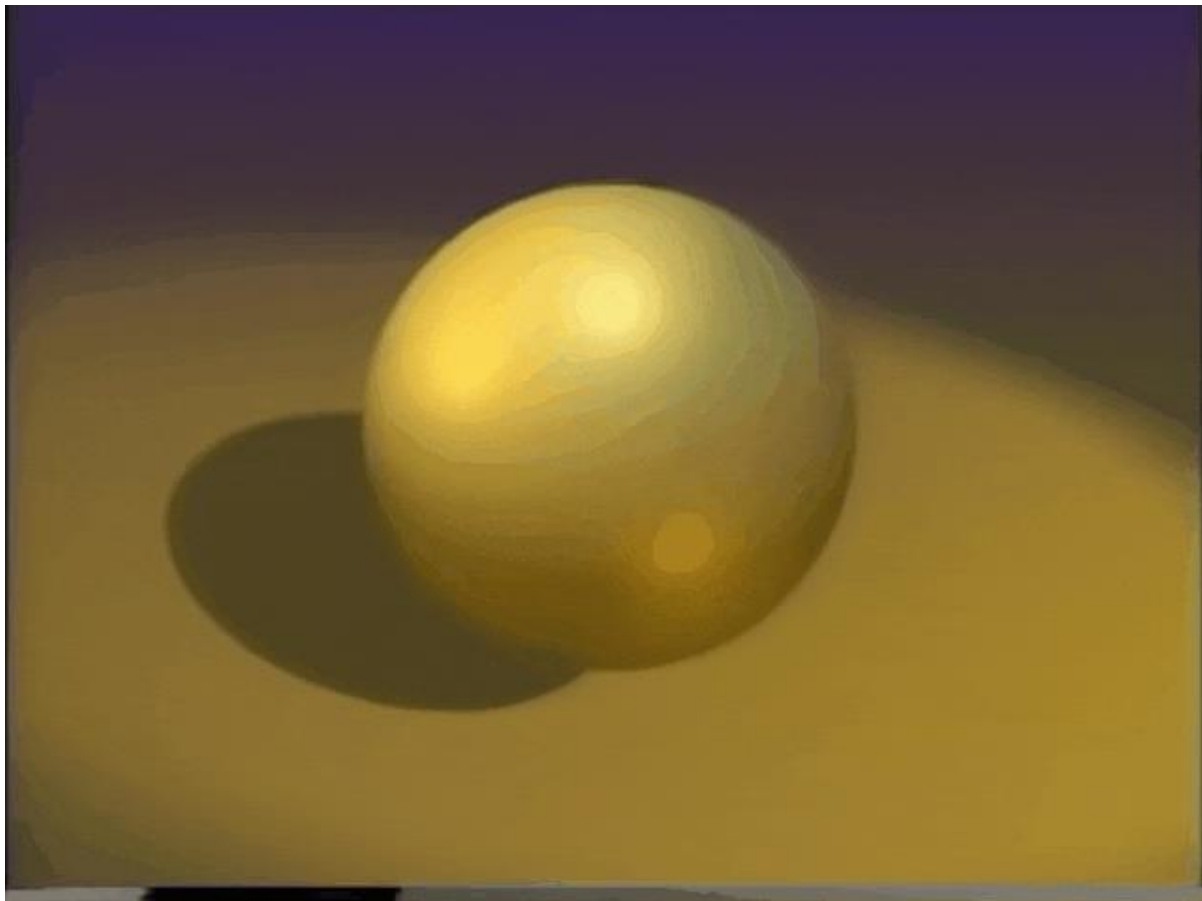


根据当前的证明状态，它可以检索出少数可能有用的前提，并根据状态和检索出的前提的连接情况生成一个策略。在证明定理时，该模型在每一步都会生成多个策略候选者，这些候选者被用于标准的最优搜索算法来寻找证明。





截至目前，  
Lean已经验证  
了一个将球体  
从内到外转动  
的有趣定理，  
以及一个统一  
数学领域方案  
的关键定理。





Google DeepMind 的研究团队提出了一种为数学和计算机科学问题搜索解决方案的新方法——FunSearch。FunSearch 的工作原理是将预训练的 LLM（以计算机代码的形式提供创造性解决方案）与自动「评估器」配对，以防止产生幻觉和错误思路。通过在这两个组件之间来回迭代，最初的解决方案演变成了「新的知识」。

nature

[View all journals](#)

Search

[Log in](#)

[Explore content](#) ▾

[About the journal](#) ▾

[Publish with us](#) ▾

[nature](#) > [articles](#) > [article](#)

Article | [Published: 14 December 2023](#)

## Mathematical discoveries from program search with large language models

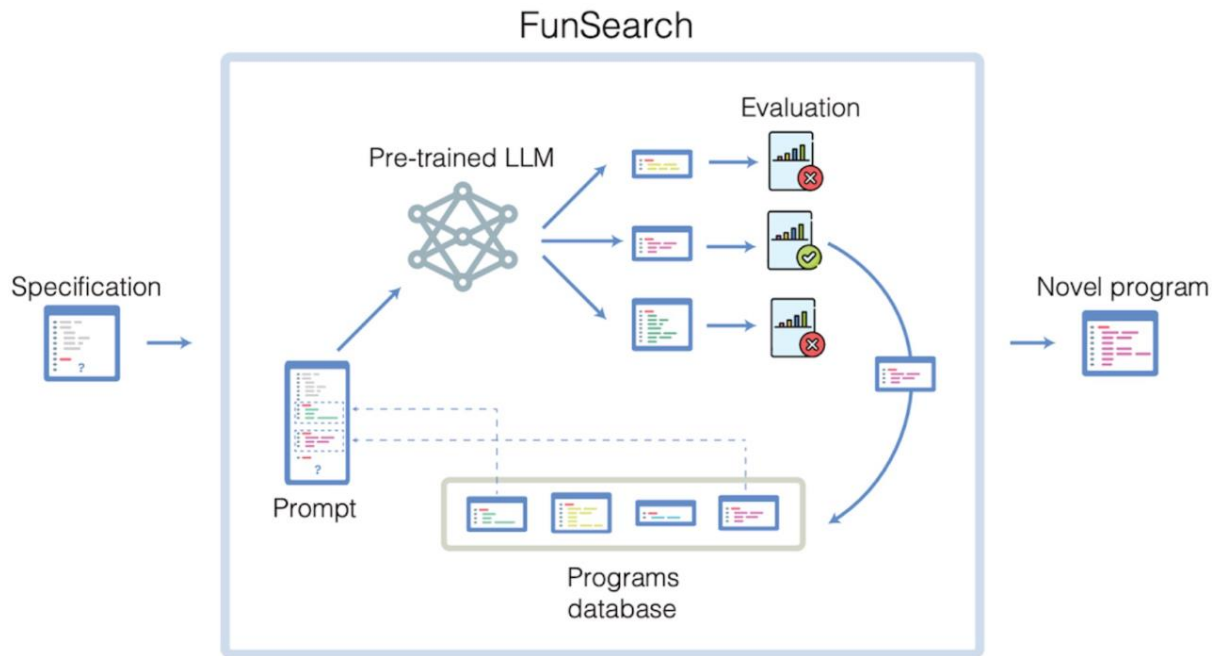
[Bernardino Romera-Paredes](#), [Mohammadamin Barekatin](#), [Alexander Novikov](#), [Matej Balog](#), [M. Pawan Kumar](#), [Emilien Dupont](#), [Francisco J. R. Ruiz](#), [Jordan S. Ellenberg](#), [Pengming Wang](#), [Omar Fawzi](#), [Pushmeet Kohli](#) & [Alhussein Fawzi](#)

[Nature](#) (2023) | [Cite this article](#)



首先，用户需要以代码的形式编写问题的描述。该描述包括评估程序的过程和用于初始化程序池的种子程序。

FunSearch 是一个迭代过程，在每次迭代中，系统都会从当前的程序池中选择一些程序，并将其馈送到 LLM。LLM 创造性地在此基础上进行构建，生成新的程序，并自动进行评估。最好的程序将被添加回现有程序库中，从而创建一个自我改进的循环。FunSearch 使用 Google 的 PaLM 2，但对其他接受过代码训练的方法兼容。

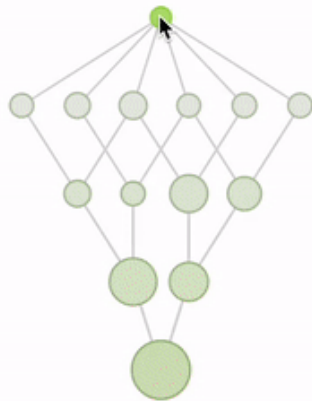




## AI for 数学

FunSearch 发现了 cap set 问题的全新解决方案，这是数学中一个长期存在的开放问题，知名数学家陶哲轩曾把它描述为自己最喜欢的开放性问题。

此外，为了展示 FunSearch 的实际用途，DeepMind 还用它来发现更有效的算法来解决「装箱」问题，该问题应用广泛，比如可以用于提高数据中心的效率。



## FunSearch

```
def priority(el: tuple[int, ...], n: int, w: int) -> float:  
    return 0.0
```



Best-fit heuristic



FunSearch





AlphaTensor 横空出世，DeepMind 宣布其解决了数学领域 50 年来一个悬而未决的数学算法问题，即矩阵乘法。AlphaTensor 成为首个用于为矩阵乘法等数学问题发现新颖、高效且可证明正确的算法的 AI 系统。论文也登上了 Nature 封面。

## Article

# Discovering faster matrix multiplication algorithms with reinforcement learning

<https://doi.org/10.1038/s41586-022-05172-4>

Received: 2 October 2021

Accepted: 2 August 2022

Alhussein Fawzi<sup>1,2</sup>✉, Matej Balog<sup>1,2</sup>, Aja Huang<sup>1,2</sup>, Thomas Hubert<sup>1,2</sup>, Bernardino Romera-Paredes<sup>1,2</sup>, Mohammadamin Barekatin<sup>1</sup>, Alexander Novikov<sup>1</sup>, Francisco J. R. Ruiz<sup>1</sup>, Julian Schrittwieser<sup>1</sup>, Grzegorz Swirszcz<sup>1</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Demis Hassabis<sup>1</sup> & Pushmeet Kohli<sup>1</sup>



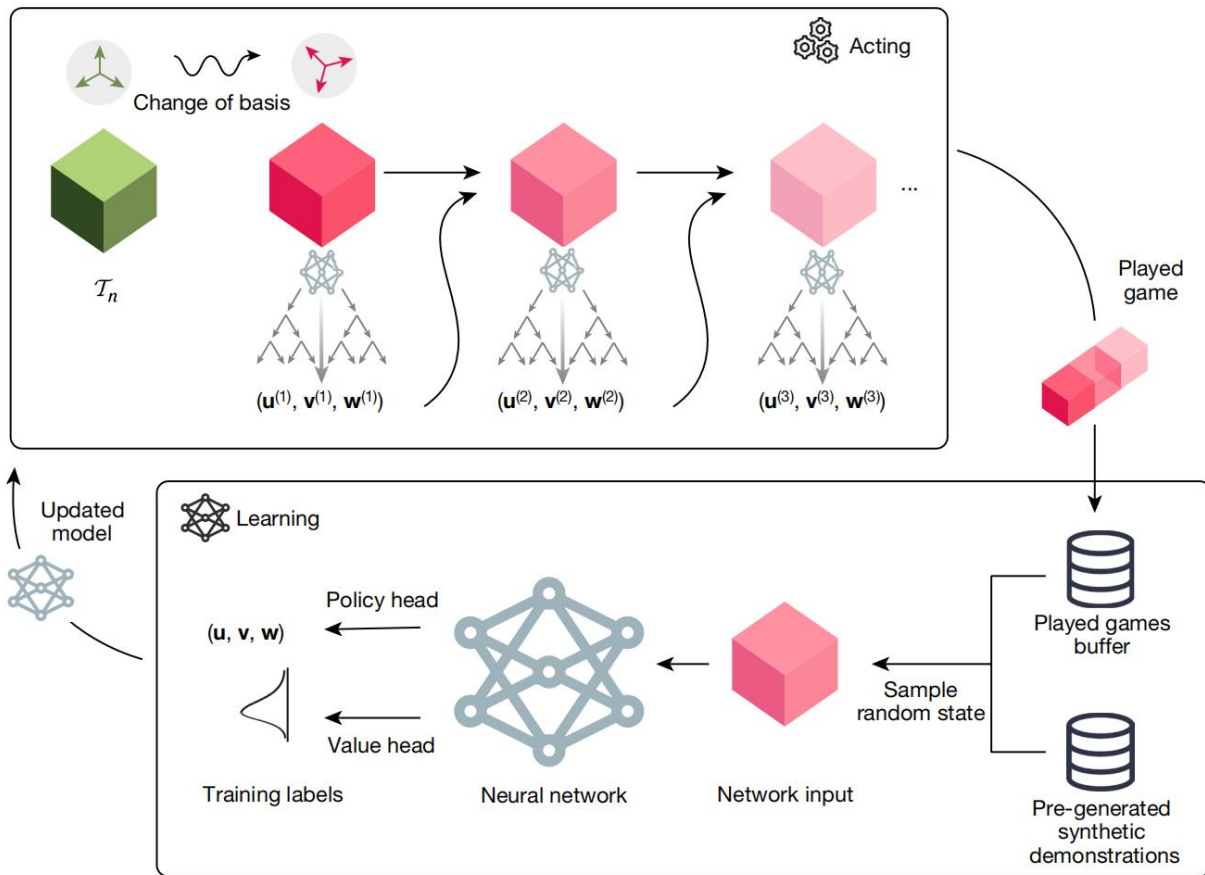
# AI for 数学

AlphaTensor利用人工智能技术 (RL强化学习) 对**算法** (矩阵乘) 流程进行**自动设计**。

• "**算法**": 指不基于深度学习的传统算法/数值计算方法。

• "**自动设计**": 把"算法"的流程**参数化** (一套参数即可对应一个算法的流程), 然后自动寻找一套好的参数, 使其对应的算法流程的执行效率 (时间复杂度) 最优。这样就可以把**算法流程的设计问题**转化为一个**参数的搜索/优化问题**。优化目标是时间复杂度, 优化手段可以是RL强化学习。

## AlphaTensor



# 提纲

---

一、AI for 生命科学

二、AI for 材料科学

三、AI for 数学

四、AI for 核聚变&天气预报

五、AI for 机器人设计



上海大学  
SHANGHAI UNIVERSITY



## DeepMind用AI控制核聚变反应登上《Nature》

DeepMind与瑞士洛桑联邦理工学院（EPFL）合作研究出第一个可以在托卡马克（Tokamak）装置内保持核聚变等离子体稳定的深度强化学习系统，为推进核聚变研究开辟了新途径

### Article

# Magnetic control of tokamak plasmas through deep reinforcement learning

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-04301-9>

Received: 14 July 2021

Accepted: 1 December 2021

Published online: 16 February 2022

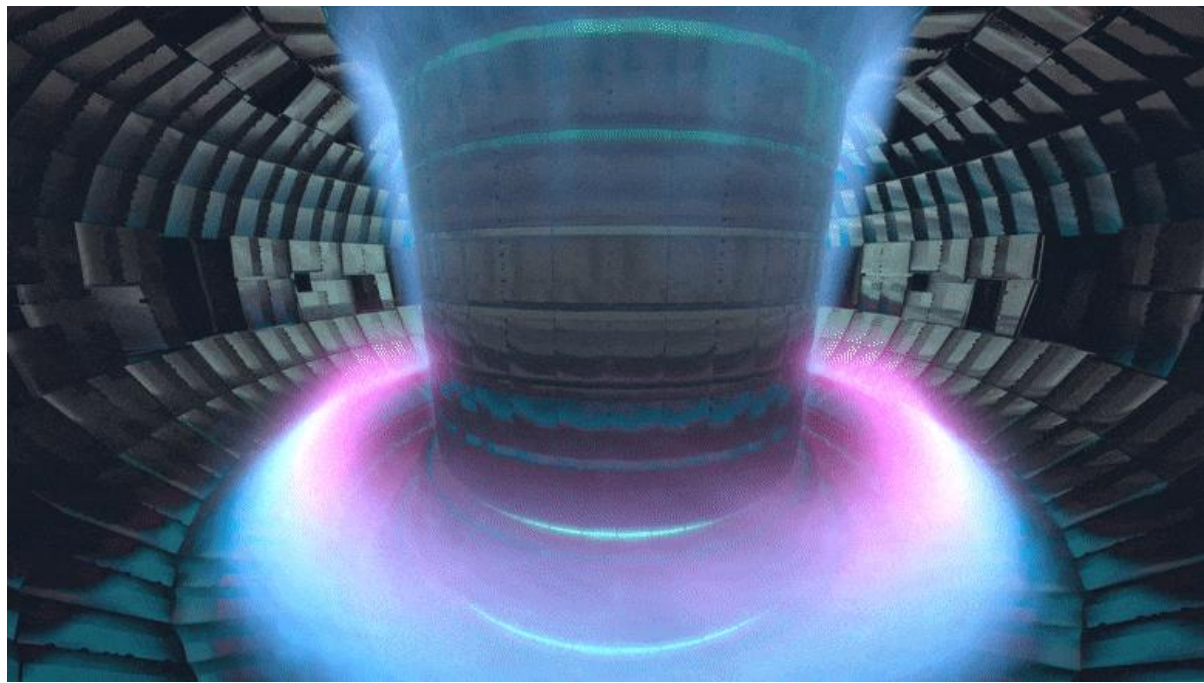
Open access

Jonas Degraeve<sup>1,3</sup>, Federico Felici<sup>2,3</sup>✉, Jonas Buchli<sup>1,3</sup>✉, Michael Neunert<sup>1,3</sup>, Brendan Tracey<sup>1,3</sup>✉, Francesco Carpanese<sup>1,2,3</sup>, Timo Ewalds<sup>1,3</sup>, Roland Hafner<sup>1,3</sup>, Abbas Abdolmaleki<sup>1</sup>, Diego de las Casas<sup>1</sup>, Craig Donner<sup>1</sup>, Leslie Fritz<sup>1</sup>, Cristian Galperti<sup>2</sup>, Andrea Huber<sup>1</sup>, James Keeling<sup>1</sup>, Maria Tsimpoukelli<sup>1</sup>, Jackie Kay<sup>1</sup>, Antoine Merle<sup>2</sup>, Jean-Marc Moret<sup>2</sup>, Seb Noury<sup>1</sup>, Federico Pesamosca<sup>2</sup>, David Pfau<sup>1</sup>, Olivier Sauter<sup>2</sup>, Cristian Sommariva<sup>2</sup>, Stefano Coda<sup>2</sup>, Basil Duval<sup>2</sup>, Ambrogio Fasoli<sup>2</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup>, Demis Hassabis<sup>1</sup> & Martin Riedmiller<sup>1,3</sup>



托卡马克，又称“环磁机”，俄语原文“Токамак”，是一种利用磁约束来实现磁约束聚变的环形容容器，最早由位于苏联莫斯科库尔恰托夫研究所（NRC KI）的物理学家伊戈尔·塔姆、安德烈·萨哈罗夫和列夫·阿齐莫维齐等人在1950年代发明。

托卡马克的中央是一个环形的真空室，外面缠绕着线圈。通电时，托卡马克的内部会产生巨大的螺旋型磁场，将其中的等离子体加热到很高的温度，以达到核聚变的目的。





托卡马克是用于核聚变研究的环形装置，是产生可持续电力的主要候选者。限制托卡马克内的每个配置需要设计一个反馈控制器，该控制器可以通过精确控制与等离子体磁耦合的几个线圈来操纵磁场，以实现所需的等离子体电流、位置和形状，这个问题被称为托卡马克磁控制问题。通过使用强化学习(RL)来生成非线性反馈控制器，使一种全新的控制器设计方法成为可能。

在这项工作中，提出了一个RL设计的磁性控制器，并通过实验验证了它在托卡马克上的性能。控制策略是通过与托卡马克模拟器的互动来学习的，并被证明能够直接在硬件上进行托卡马克磁控制，成功地弥补了“模拟与现实”的差距。这使得从工程驱动的预设计状态的控制到人工智能驱动的操作者指定的目标优化有了根本的转变。

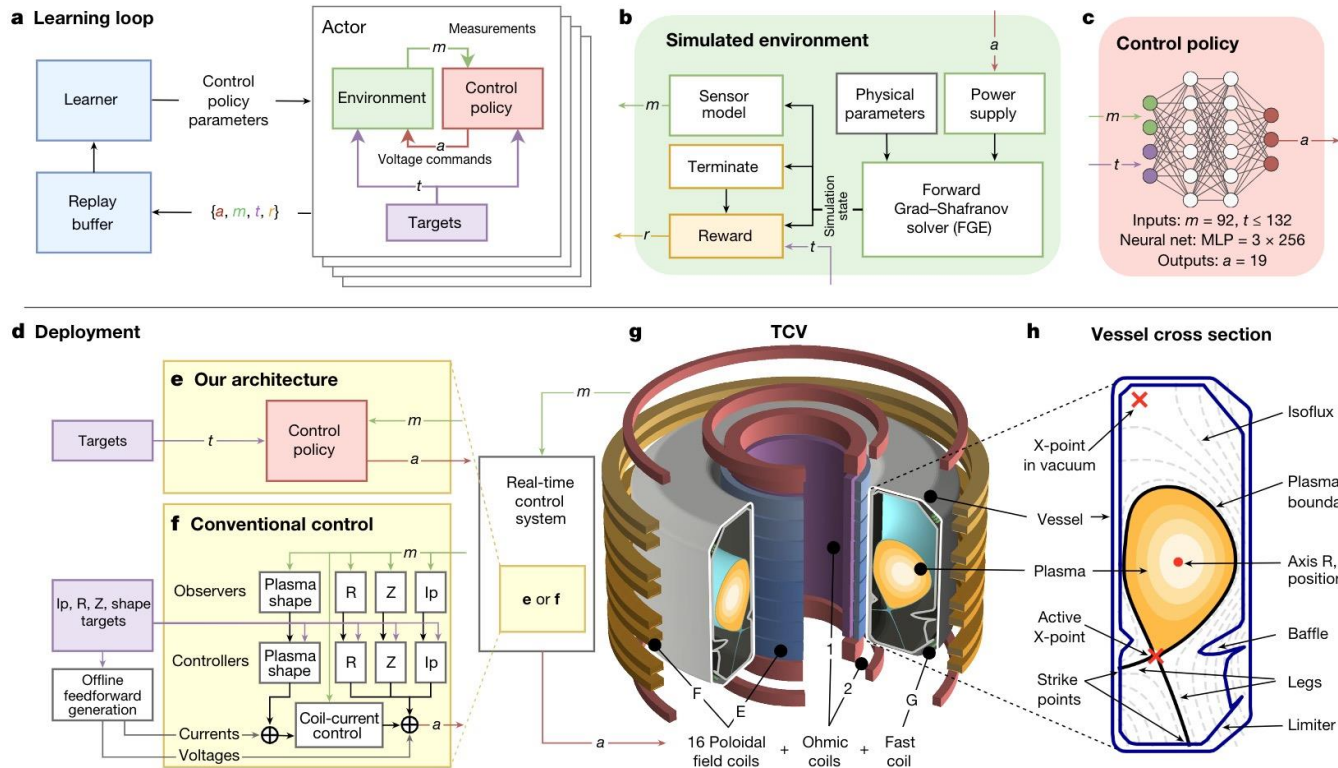




# AI for 核聚变

# Tokamak

该架构是一种设计托卡马克磁约束控制器的灵活方法。该方法有三个主要阶段。首先，设计者为实验指定目标，可能伴随着时间变化的控制目标。其次，一个深度RL算法与托卡马克模拟器进行交互，找到一个接近最优的控制策略来满足指定的目标。第三，以神经网络表示的控制策略直接在托卡马克硬件上实时运行。

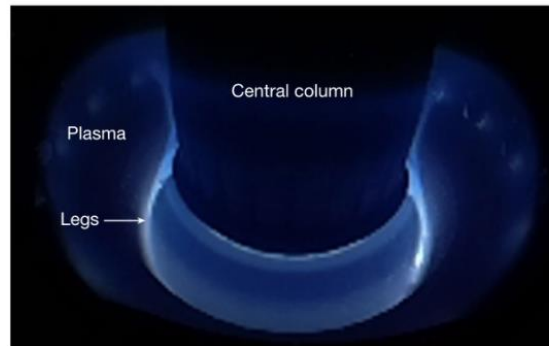
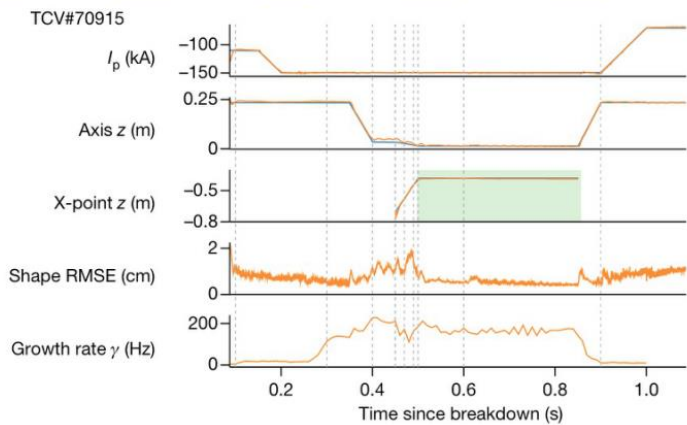
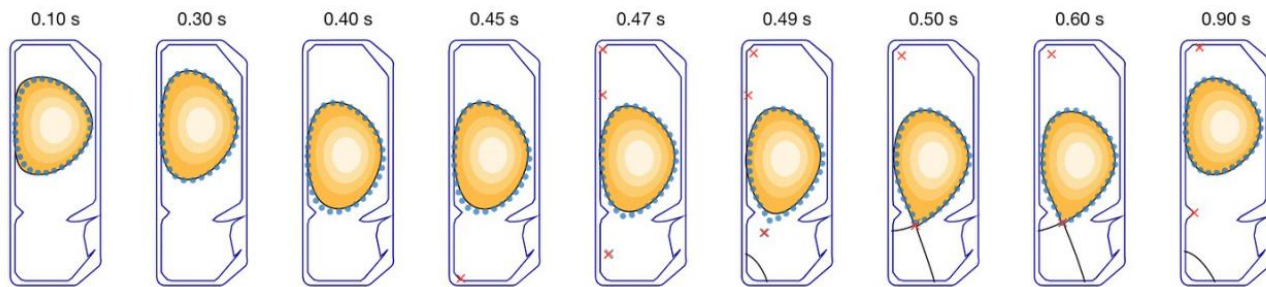




# AI for 核聚变

## Tokamak

图中描述了控制策略的性能。在初始有限阶段(0.1秒至0.45秒),  $I_p$ 均方根误差(RMSE)为0.71 kA(目标值的0.59%), 形状RMSE为0.78 cm(血管半宽的3%)。在分流阶段(0.55秒至0.8秒),  $I_p$ 和形状RMSE分别为0.28 kA和0.53 cm(0.2%和2.1%), 在整个窗口(0.1 s至1.0 s)产生的RMSE为0.62 kA和0.75 cm(0.47%和2.9%)。这表明RL架构能够在放电实验的所有相关阶段实现准确的等离子体控制。



Inside view at 0.6 s



## 华为“盘古气象”登上Nature! 比全球最好数值天气预报系统更准确

nature

Explore content ▾

About the journal ▾

Publish with us ▾

[nature](#) > [articles](#) > [article](#)

Article | [Open Access](#) | [Published: 05 July 2023](#)

### Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks

[Kaifeng Bi](#), [Lingxi Xie](#), [Hengheng Zhang](#), [Xin Chen](#), [Xiaotao Gu](#) & [Qi Tian](#)



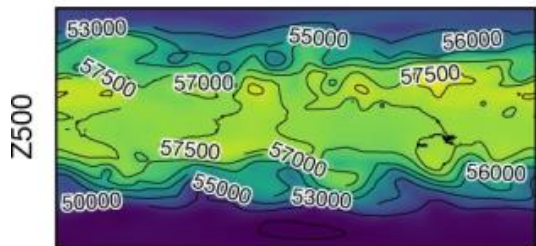
在数值方法应用最广泛的领域如中长期预报中，现有的AI预报方法精度仍然显著低于数值预报方法，并受到可解释性欠缺，极端天气预测不准等问题的制约。

而造成AI气象预报模型的精度不足主要有两个原因：

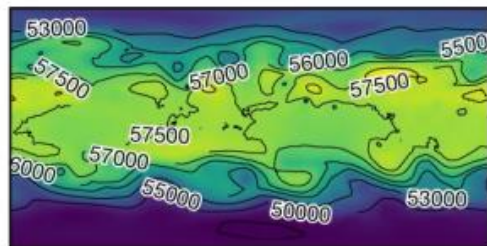
第一，现有的AI气象预报模型都是基于2D神经网络，无法很好地处理不均匀的3D气象数据；

第二，AI方法缺少数学物理机理约束，因此在迭代的过程中会不断积累迭代误差。

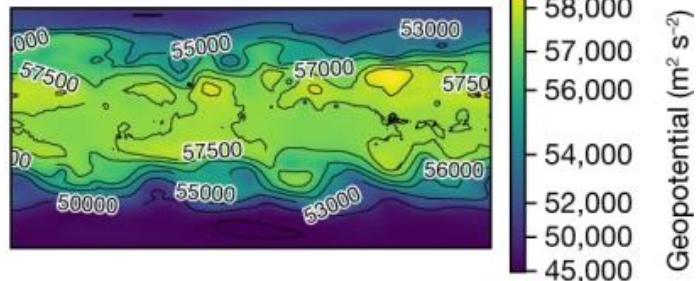
Pangu-Weather, forecast time 72 hours



Operational IFS, forecast time 72 hours



ERA5 (ground truth)





华为云的研究人员提出了**3D Earth-Specific Transformer (3DEST)** 来处理复杂的不均匀3D气象数据，从而打造了盘古气象大模型。

其主要思想是使用一个视觉transformer的3D变种来处理复杂的不均匀的气象要素，并且使用**层次化时域聚合策略**，训练了4个不同预报间隔的模型（分别为1小时间隔、3小时间隔、6小时间隔、24小时间隔），使得预测特定时间气象状况的迭代次数最小，从而减少迭代误差，也避免了由递归训练带来的训练资源消耗。

为了训练每个模型，研究人员使用**1979-2021年**的气象数据，以小时为单位采样，训练了**100个epoch**。

每个模型需要在**192块V100显卡**上训练**16天**。事实上，即使经历**100个epoch**，这些模型依旧没有完全收敛。

也就是说，在计算资源更加充足的情况下，AI预报的精度还能够进一步提升。

最终推理时，盘古气象大模型仅需在**一张V100显卡**上运行**1.4秒**，即可完成**24小时全球气象预报**，包括位势、湿度、风速、温度、海平面气压等，其中水平空间分辨率达到**0.25°×0.25°**，时间分辨率为**1小时**，覆盖**13层垂直高度**，可以精准地预测细粒度气象特征。

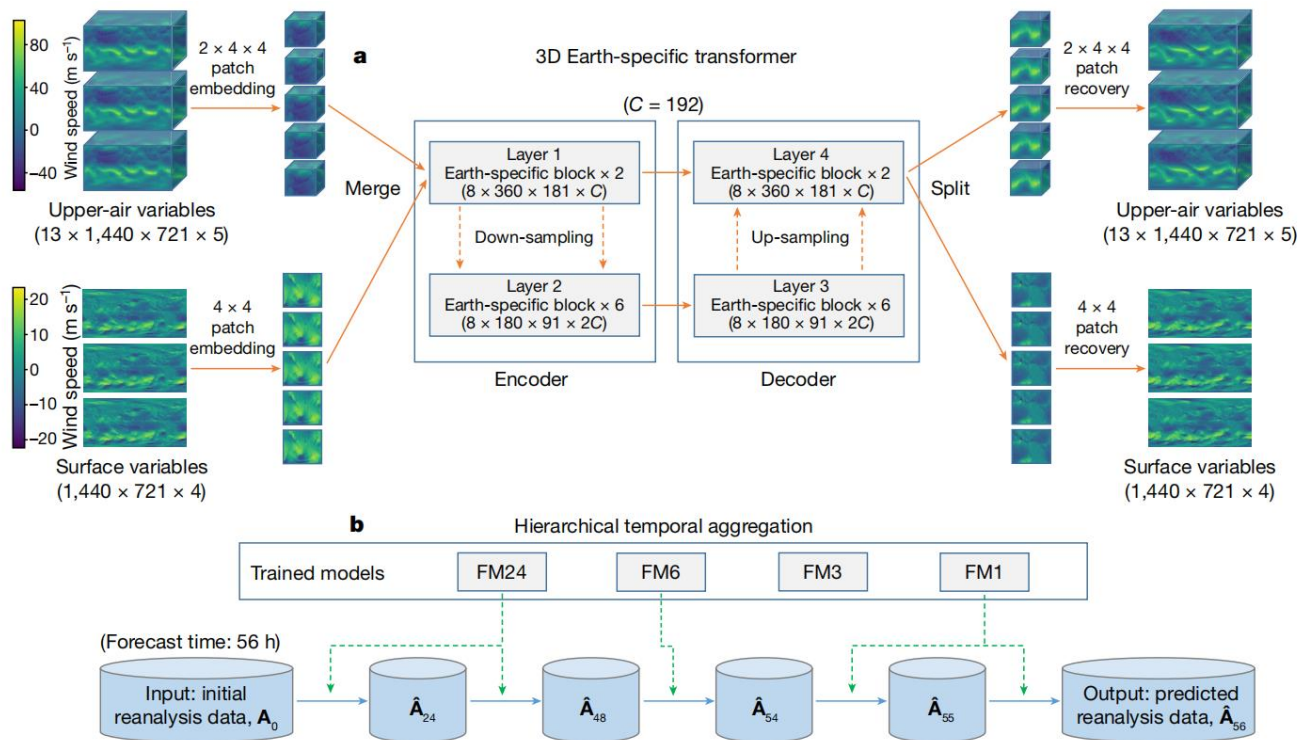
而作为首个精度超过传统数值预报方法的AI方法，它的计算速度相比传统数值预报提升超过**10000倍**。





# AI for 天气预报

## Pangu



**Fig. 1 | Network training and inference strategies. a**, 3DEST architecture. Based on the standard encoder–decoder design of vision transformers, we adjusted the shifted-window mechanism<sup>19</sup> and applied an Earth-specific positional bias. **b**, Hierarchical temporal aggregation. Once given a lead time,

we used a greedy algorithm to perform forecasting with as few steps as possible. We use FM1, FM3, FM6 and FM24 to indicate the forecast models with lead times being 1 h, 3 h, 6 h or 24 h, respectively.  $\mathbf{A}_0$  is the input weather state and  $\hat{\mathbf{A}}_t$  denotes the predicted weather state at time  $t$  (in hours).





华为云盘古气象大模型团队如何看待AI气象预报的未来？

首先，**大数据**。庞大的气象数据是AI模型的基石，当前盘古气象大模型仅使用部分ERA5再分析数据，未来的AI模型将基于海量的、更精细的全球观测数据。

其次，**大算力**。气象数据超高的分辨率对AI模型的训练造成了巨大的挑战，盘古气象大模型现在的输入分辨率为 $1440 \times 720 \times 14 \times 5$ ，相比计算视觉任务常用的分辨率 $224 \times 224 \times 3$ 大约500倍，随着分辨率的进一步增加和模型的增大，需要的算力资源也会迅速增加。

最后，**大模型**。复杂的气象规律，超高的分辨率与庞大的数据量都决定了AI气象预报需要使用计算量极高的AI模型。同时，想要不断迭代领先的AI气象预报模型，稳定的云上环境、工作套件和对应的运维也是必不可少的。



## 1分钟预测10天全球天气！谷歌DeepMind全新AI天气预报登上Science

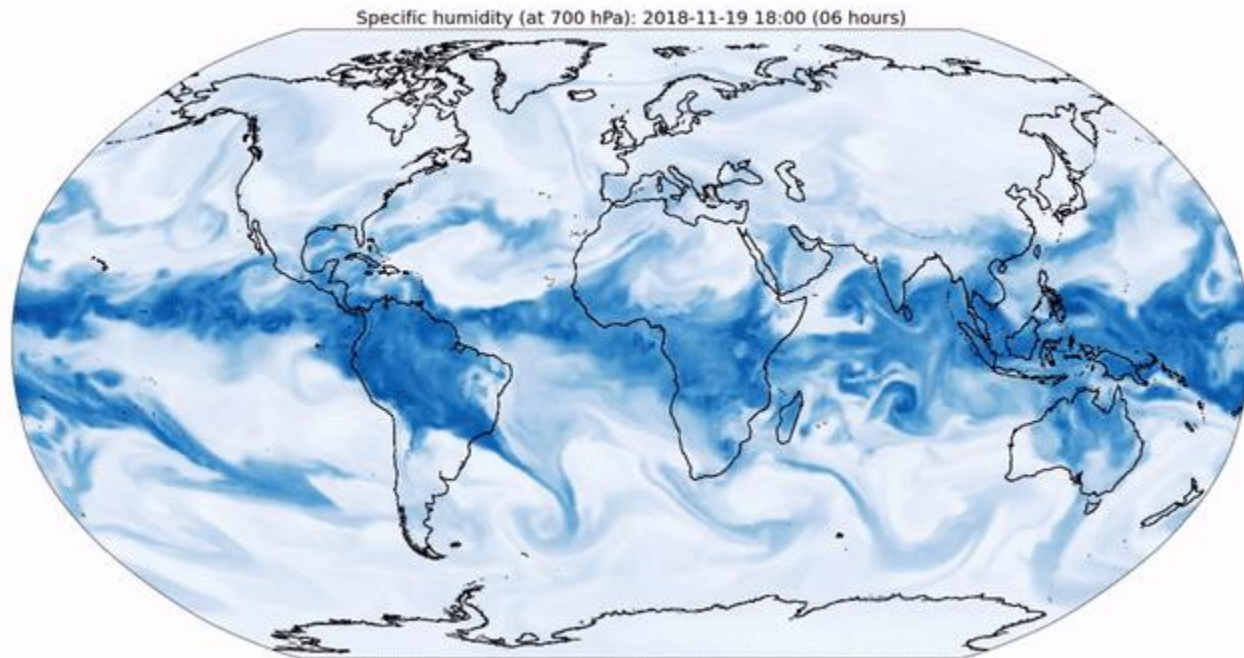
RESEARCH

---

WEATHER FORECASTING

# Learning skillful medium-range global weather forecasting

Remi Lam<sup>1\*†</sup>, Alvaro Sanchez-Gonzalez<sup>1\*†</sup>, Matthew Willson<sup>1\*†</sup>, Peter Wirnsberger<sup>1†</sup>,  
Meire Fortunato<sup>1†</sup>, Ferran Alet<sup>1†</sup>, Suman Ravuri<sup>1†</sup>, Timo Ewalds<sup>1</sup>, Zach Eaton-Rosen<sup>1</sup>, Weihua Hu<sup>1</sup>,  
Alexander Merose<sup>2</sup>, Stephan Hoyer<sup>2</sup>, George Holland<sup>1</sup>, Oriol Vinyals<sup>1</sup>, Jacklynn Stott<sup>1</sup>,  
Alexander Pritzel<sup>1</sup>, Shakir Mohamed<sup>1\*</sup>, Peter Battaglia<sup>1\*</sup>



图为GraphCast 10天滚动预测的一部分，显示了700百帕（距地面约3公里）的湿度、地面温度和地面风速



## AI for 天气预报

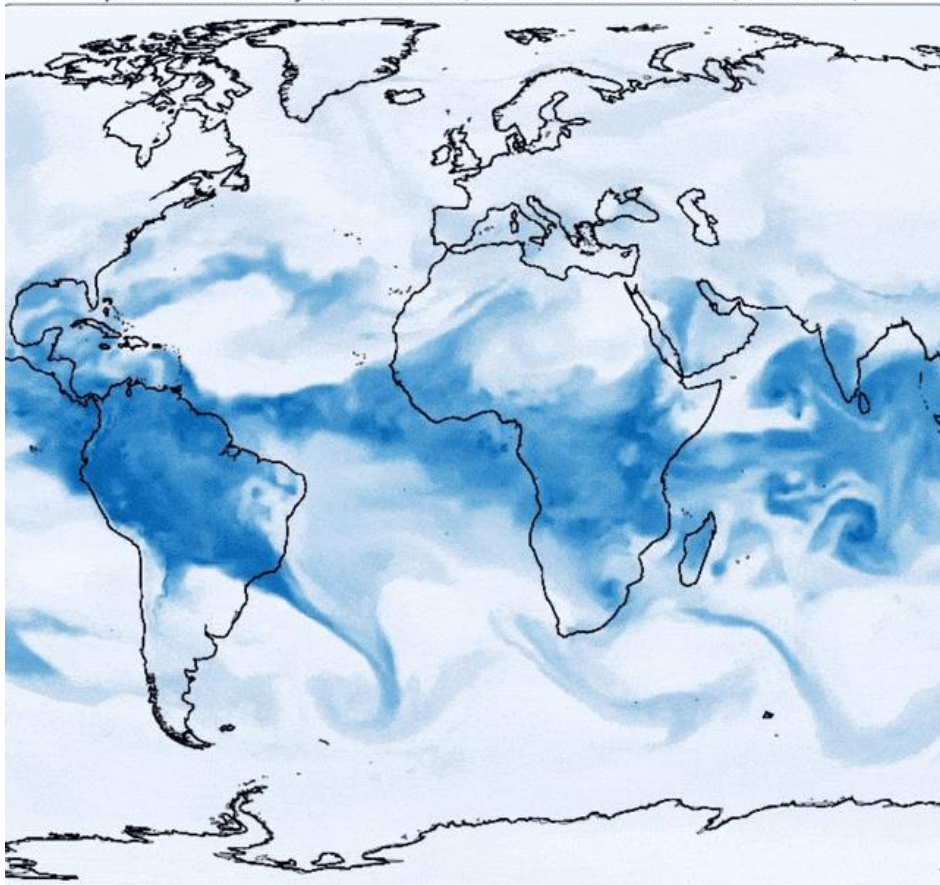
当前天气预报的主流方式就是「数值天气预报」(NWP)，使用复杂的算法求解物理方程，既耗时又昂贵。

而深度学习模型GraphCast在欧洲中期天气预报中心 (ECMWF) 近40年的数据上进行训练，来了解天气如何随时间演变。

不同于传统的预测方式，GraphCast预测主要依靠数据中的规律进行预报，而不使用人类建立的物理方程。相比于人类最准确的HRES预报，GraphCast在1380个测试指标中，90%的预测结果都更为准确。

## Graphcast

Specific humidity (at 700 hPa): 2018-11-19 18:00 (06 hours)



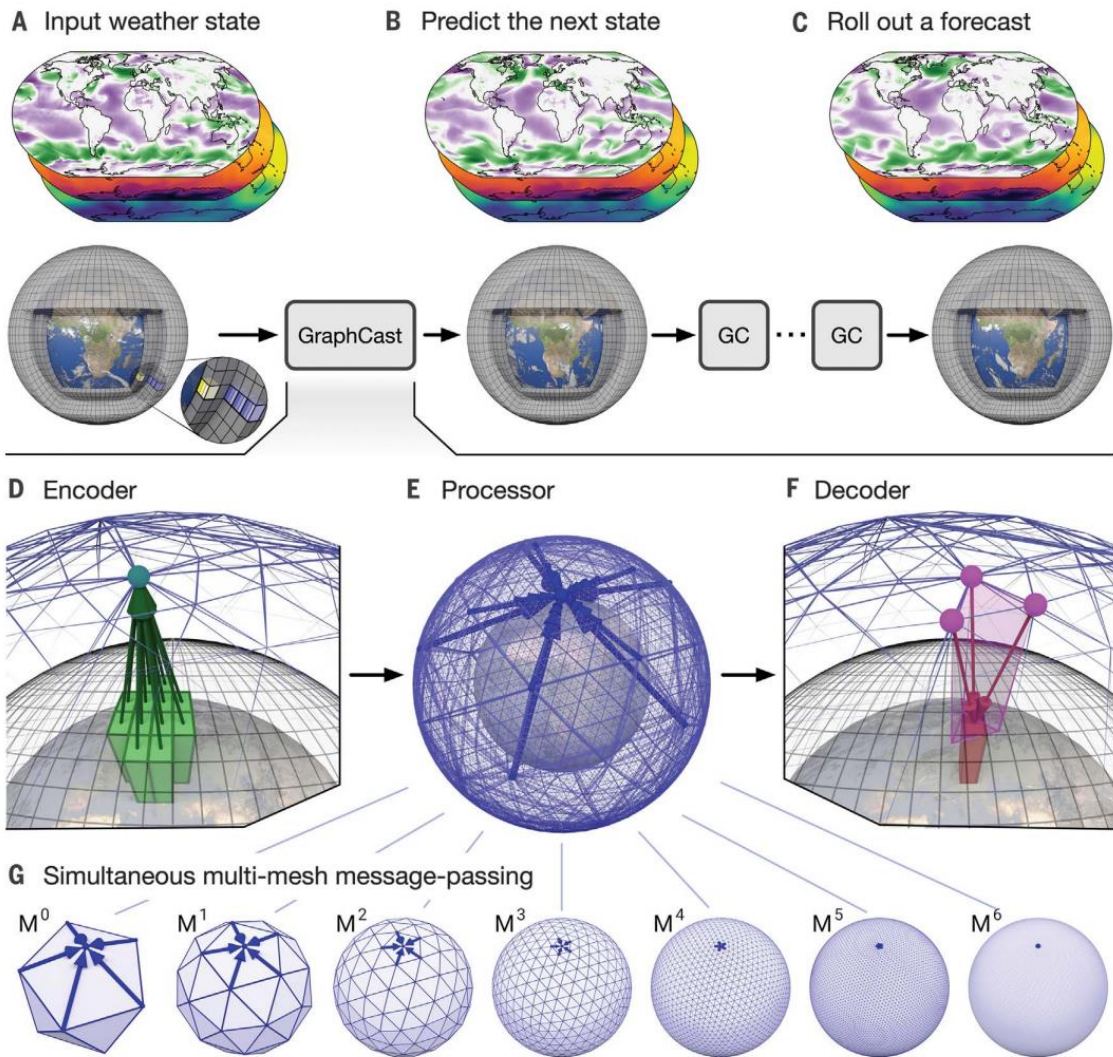




# AI for 天气预报

GraphCast的背后是一个神经网络架构，基于「编码-处理-解码」配置中的GNN，总共有3670万个参数。

工作流程上，输入从6小时前开始到当前的气象数据，GraphCast就可以预测未来6小时的天气。而预测出的数据可以作为新的“当前”态，继续往后迭代预测，最长可以预测到10天后的天气状况。



# 提纲

---

一、AI for 生命科学

二、AI for 材料科学

三、AI for 数学

四、AI for 核聚变&天气预报

五、AI for 机器人设计



上海大学  
SHANGHAI UNIVERSITY





斯坦福李飞飞教授等人的研究「深度进化强化学习」登上nature子刊，首次证明了「鲍德温效应」。研究小组创建了一个计算机模拟的「游乐场」——DERL（深度进化强化学习），其中被称为「Unimals」（通用动物）的智能体在经历不断变异和自然选择。

Article | [Open Access](#) | [Published: 06 October 2021](#)

## Embodied intelligence via learning and evolution

[Agrim Gupta](#) , [Silvio Savarese](#), [Surya Ganguli](#) & [Li Fei-Fei](#) 

[Nature Communications](#) **12**, Article number: 5721 (2021) | [Cite this article](#)

**510** Accesses | **86** Altmetric | [Metrics](#)



研究结果显示，虚拟生物的身体形状影响了它们学习新任务的能力，在更具挑战性的环境中学习和进化的形态，或者在执行更复杂的任务时，比那些在更简单的环境中学习和进化的形态学习进化得更快、更好。

在这项研究中，具有最成功的形态的Unimal也比前几代更快地掌握了任务，尽管它们最初的基线智力水平与前代相同。也就是说，「具身化」是智能进化的关键。





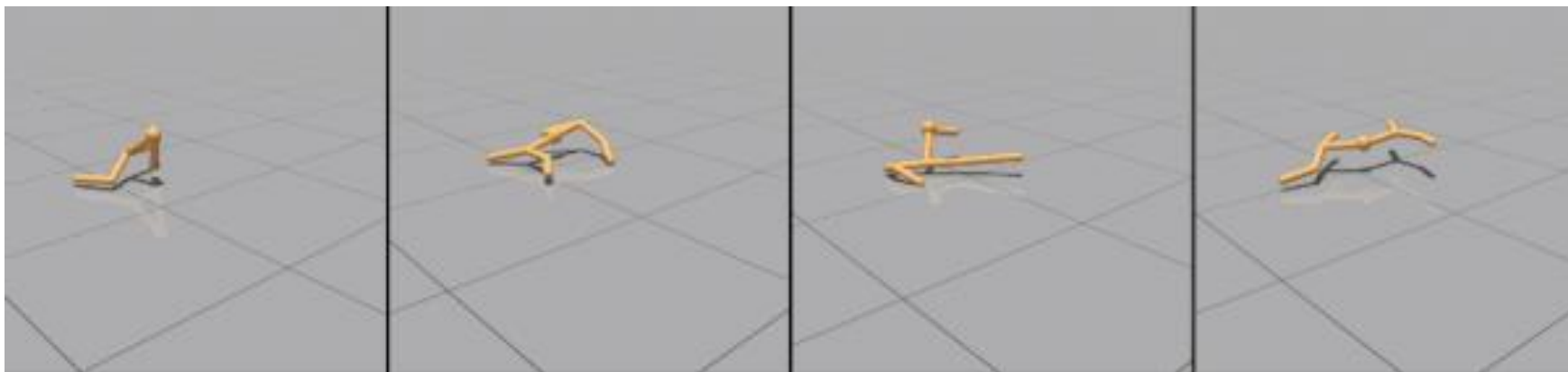
团队设置了一个虚拟空间，并将简单的模拟生物放入其中。当然，这些生物只是一些通过「随机方式」进行移动的「几何图形」(Unimal)。

在学习阶段中，有平坦的地形，有更具挑战性的地形，包括块状山脊、阶梯和光滑的山丘。

Unimal必须在多变的地形上将一个块状物移动到目标位置。

训练结束后，每个Unimal与其他三个在相同环境/任务组合中训练过的Unimal进行比赛。胜者将产生一个单一的后代，该后代在面对与父母相同的任务之前，经历了一次涉及肢体或关节变化的突变。

最终，在训练了4000种不同的形态后，团队结束了模拟。此时，幸存的Unimal平均经历了10代的进化，其形态令人惊讶





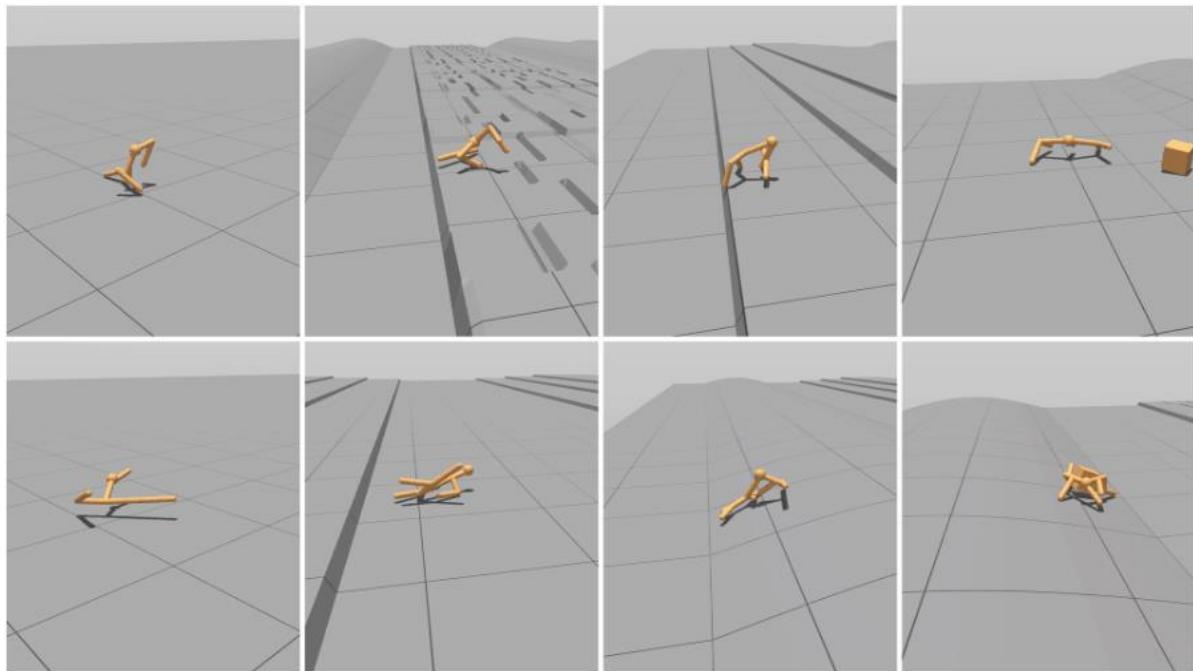
这些Unimal生长在不同的星球中，星球中充满了「起伏的山丘」和「低矮的障碍物」，他们在更加激烈的环境中展开竞争。。

每个环境中的前 10 名Unimal被安排在了新任务中，从「新障碍」到将球移动到目标位置、将盒子推上山或在两点之间巡逻。这些「角斗士」真正展示了他们的虚拟勇气。

最终，那些能在「复杂的地形中」行走的 Unimal 比在「平地上的表亲」更快地学习新任务，并且完成的更好。

换句话说，它们通过「生存」而「进化」，但并不是「边做边学」。而是在复杂的环境中同时进行

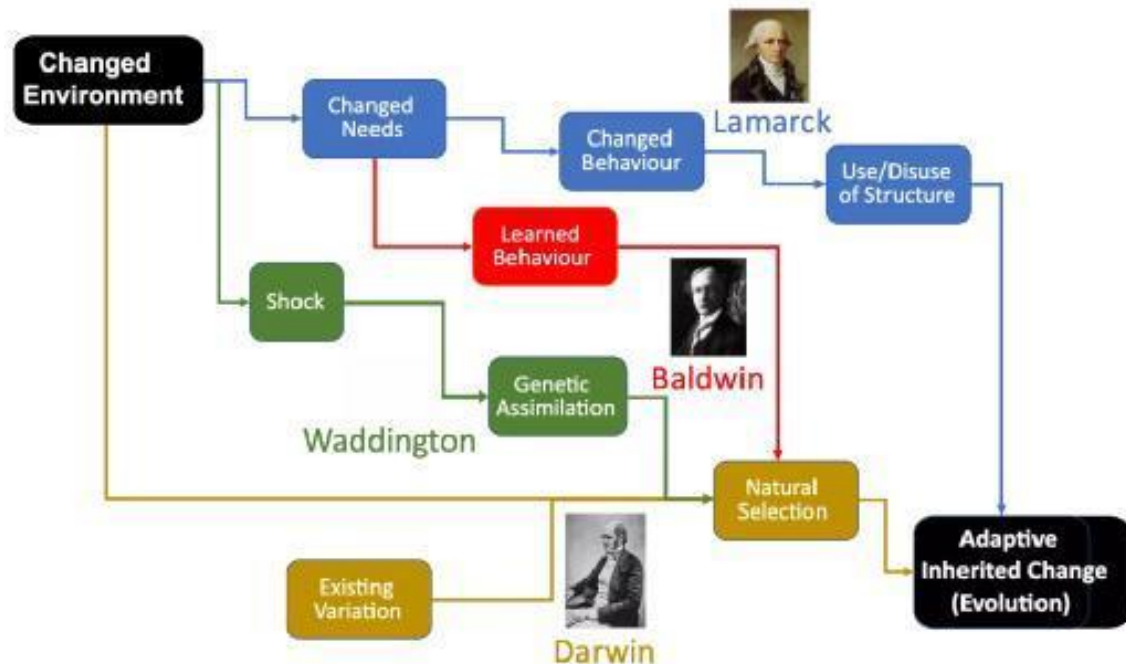
「进化」和「学习」，比如有台阶、丘陵、山脊和移动的地形，以便在这些复杂环境中进行操作。





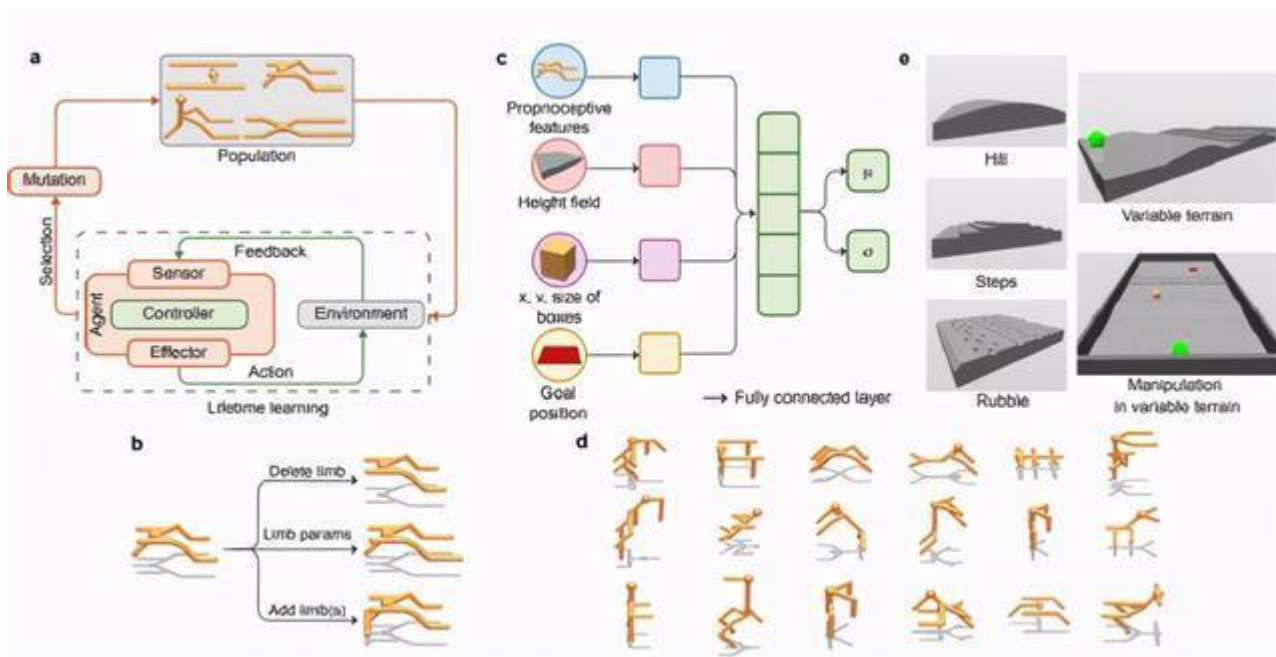
在10代之后，最成功的Unimal形态在学习同一任务的时间是其最早祖先的一半。这也验证了美国心理学家James Mark Baldwin在19世纪末提出的假设：「学习具有适应性优势的事物的能力」可以通过达尔文的自然选择来传承。

在进化生物学中，鲍德温效应提出，在进化过程的早期世代一生中最初学会的行为将逐渐成为本能，甚至可能遗传给后代。





深度进化强化学习框架（**DERL**）可以在环境，形态和控制这三种复杂维度同时扩展创建具身智能体的规模。



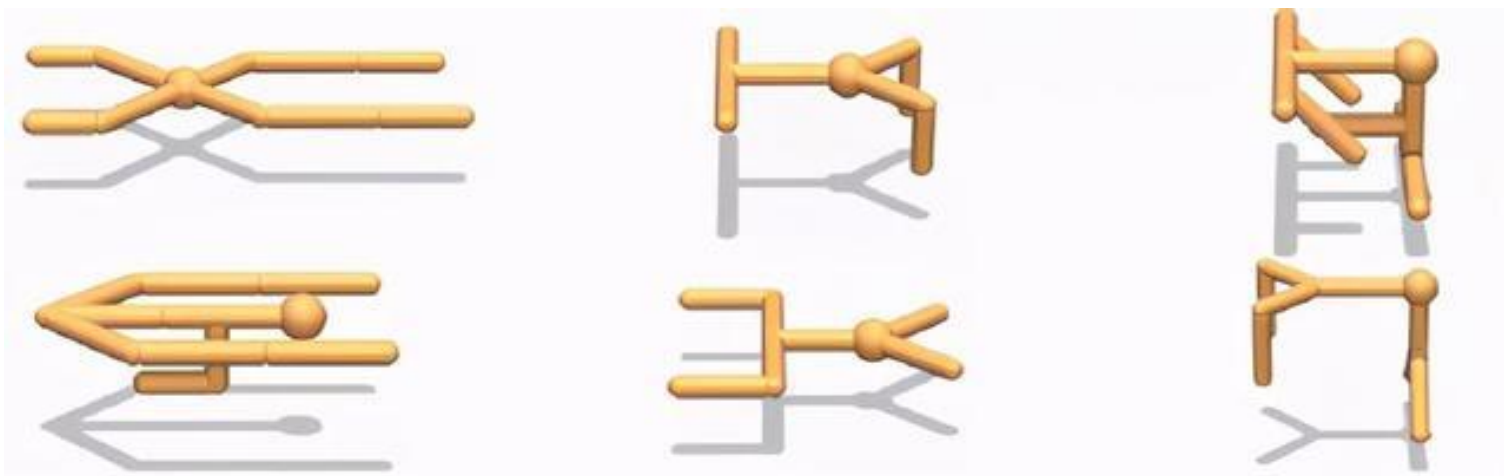




运动树的节点由两种类型的组件组成：代表智能体头部的球体（树的根）和代表肢体的圆柱体。

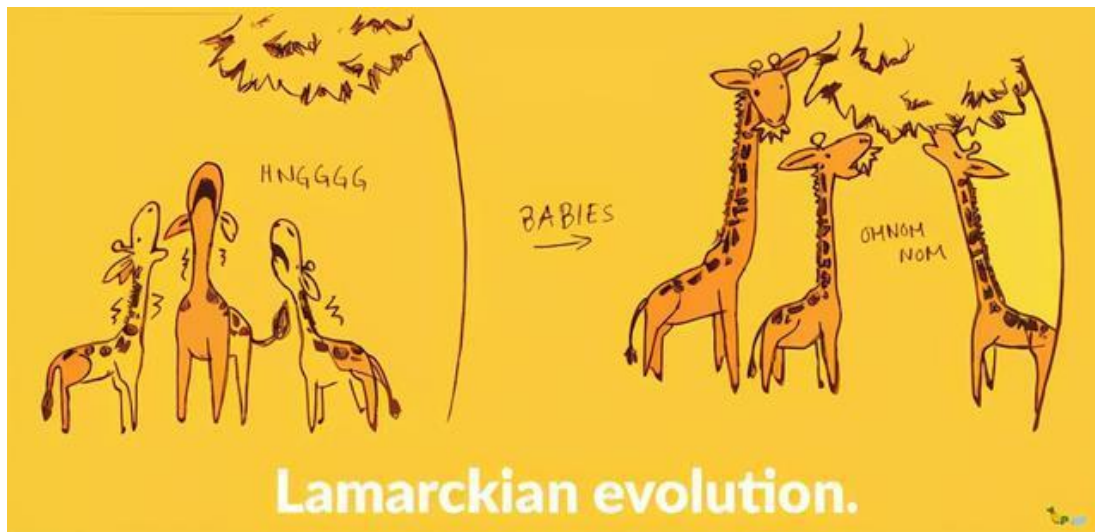
进化通过三种类型的变异算子无性繁殖：

- 1 通过增加或减少肢体来收缩或生长运动树
- 2 改变现有肢体的物理特征，如长度和密度
- 3 修改四肢之间关节的属性，包括自由度、旋转角度限制以及齿轮比





研究表明，利用DERL证明了环境复杂性、形态智能和控制的可学习性之间的关系：首先，环境复杂性促进了形态智能的进化，可用形态促进新任务学习的能力来量化。其次，进化快速选择学得更快的形态，从而使早期祖先一生中较晚学会的行为在其后代一生中较早表现出来。第三，实验表明，通过物理上更稳定、能量效率更高的形态的进化，促进学习和控制，鲍德温效应和形态智能的出现都有一个机理基础。





# AI for Science

MIT本科生在NeurIPS 2021发论文，  
研发机器人基准“健身房”，可进化出  
30多种运动能力



## Evolution Gym: A Large-Scale Benchmark for Evolving Soft Robots

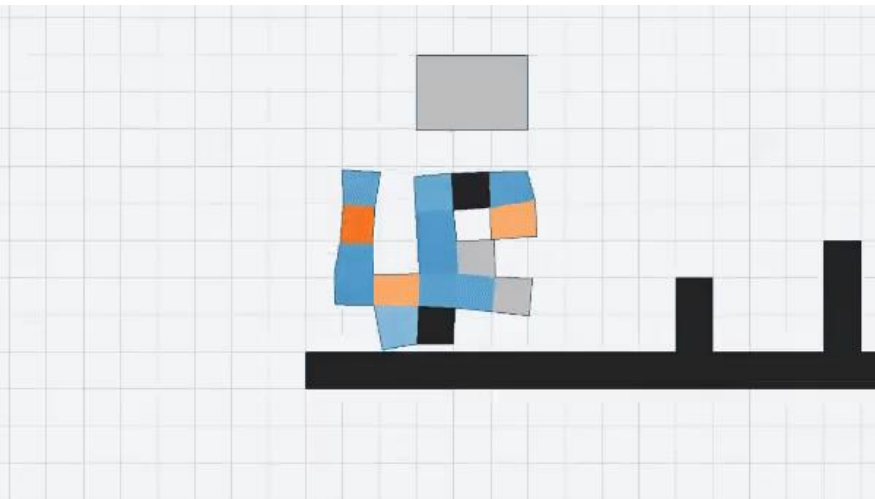
Jagdeep Singh Bhatia  
MIT CSAIL  
jagdeep@mit.edu

Holly Jackson  
MIT CSAIL  
hjackson@mit.edu

Yunsheng Tian  
MIT CSAIL  
yunsheng@csail.mit.edu

Jie Xu  
MIT CSAIL  
jiex@csail.mit.edu

Wojciech Matusik  
MIT CSAIL  
wojciech@csail.mit.edu

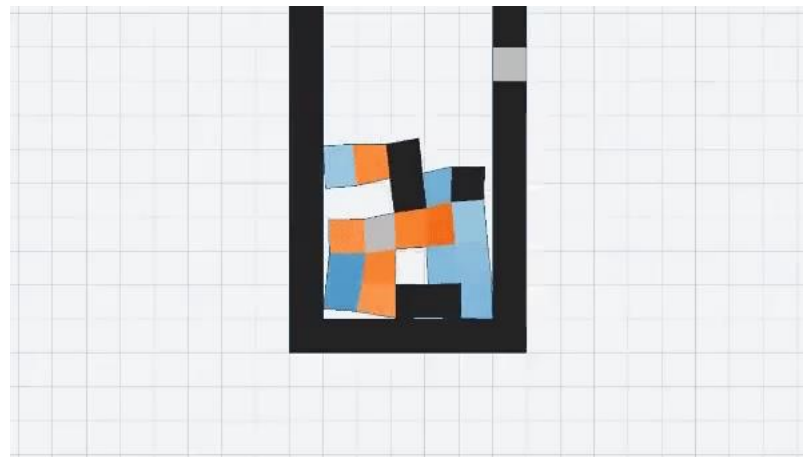
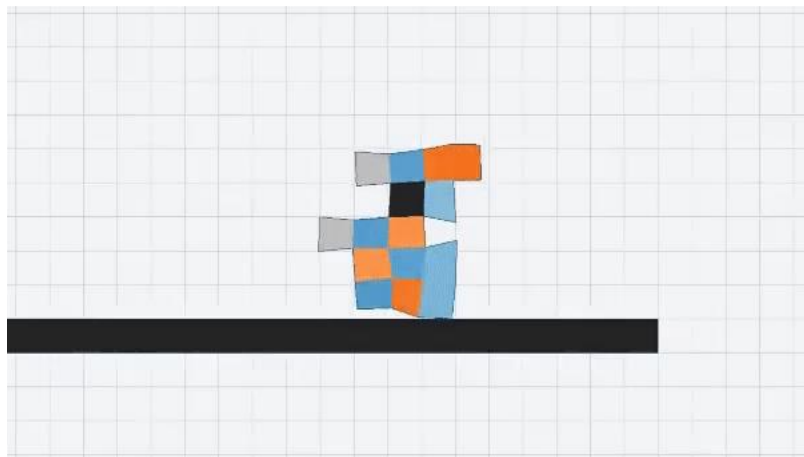




## AI for Science

在不依赖人提供任何初始形态的前提下，算法可以自主根据任务需要，进化出适合任务的身体结构和动作，并且不断通过进化自己，让任务完成得越来越好。

Evolution Gym 专门为软体机器人而开发，涵盖 30 多个不同的任务环境，包括跑步、上台阶、攀爬、搬运物体等。

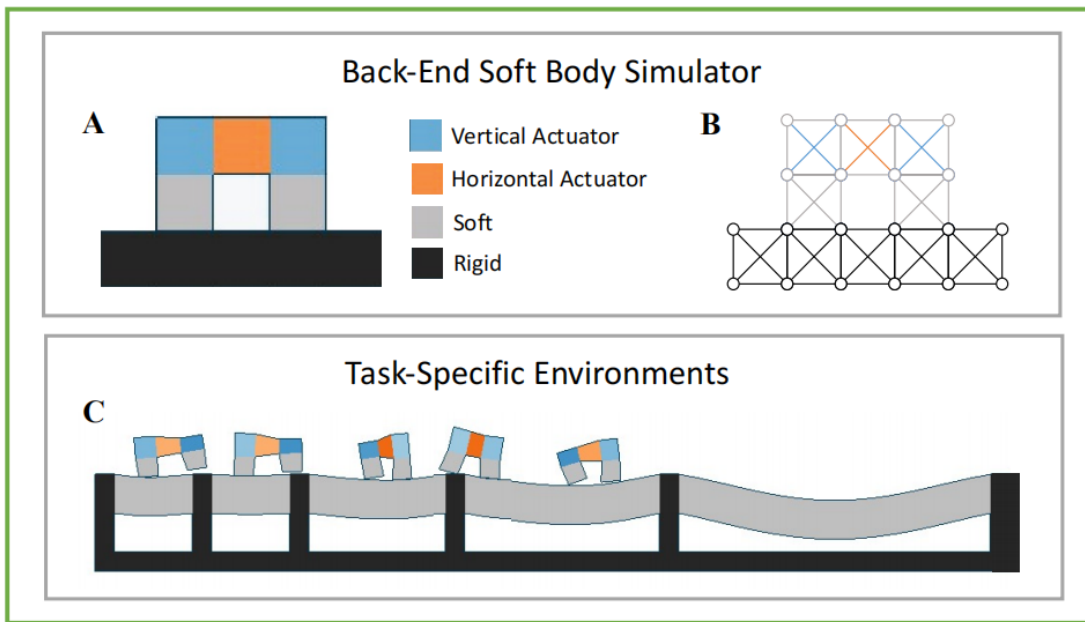




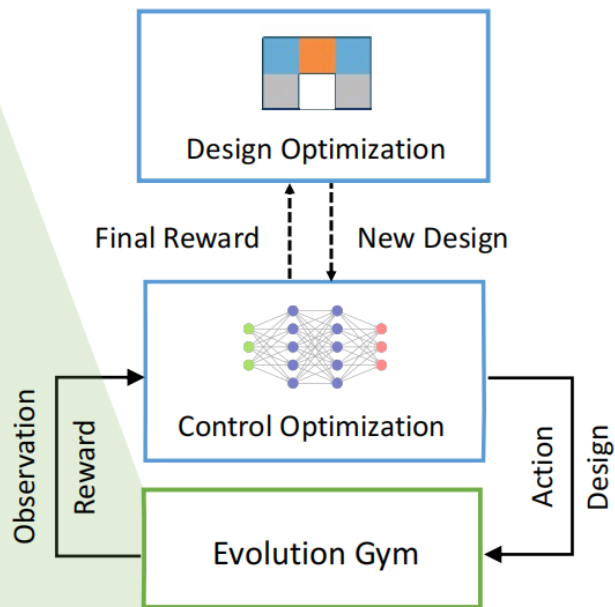
# AI for Science

团队用深度强化学习去优化机器人的控制，并采用遗传算法、贝叶斯优化等方法，根据控制器的表现作为反馈信号来优化机器人的形态。整个进化过程是在控制优化和形态优化之间不断迭代进行，机器人可以像人类一样在环境中通过反复试验不断理解任务，并最终进化出更适合任务的形态。

## Evolution Gym



## Co-Design Algorithm





# AI for Science

Evolution Gym 中的机器人看起来像是柔软、可移动的俄罗斯方块，整体呈网格状结构，由许多个“细胞”作为基本单元组成，其中包括可以自由形变的软体细胞、坚硬的刚体细胞、以及可以主动收缩或扩张的致动器细胞。这种灵活的形态，使得机器人可以自由“进化”其形状，最终在不同地形上完成一系列运动和操纵物体等任务。这种可同时“进化”形态与控制的算法被称为协同设计（co-design）。

## Locomotion Tasks

Walker (Easy)



Bridge Walker (Easy)



Up Stepper (Medium)



Traverser (Hard)



Climber (Medium)



## Object Manipulation Tasks

Carrier (Easy)



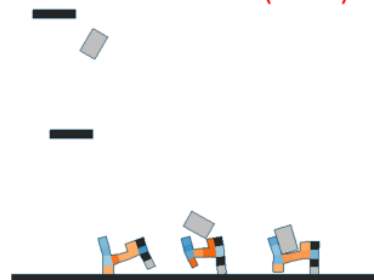
Thrower (Medium)



Beam Slider (Hard)



Catcher (Hard)



Lifter (Hard)



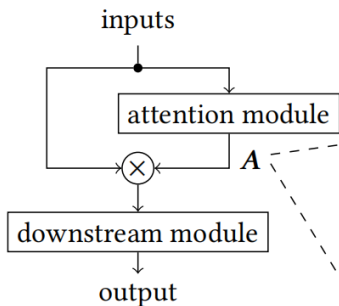




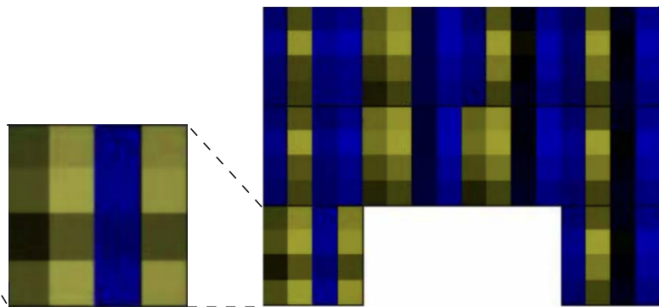
Pigozzi, Federico, et al. "Evolving modular soft robots without explicit inter-module communication using local self-attention." *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*. 2022.

## 基于局部自注意力的无模块间显式通信的模块化软体机器人进化

Self-attention controller



Self-attention visualization



Generalization

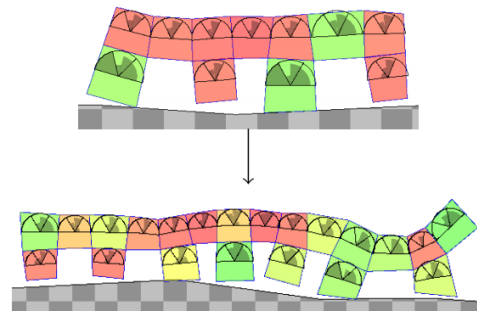
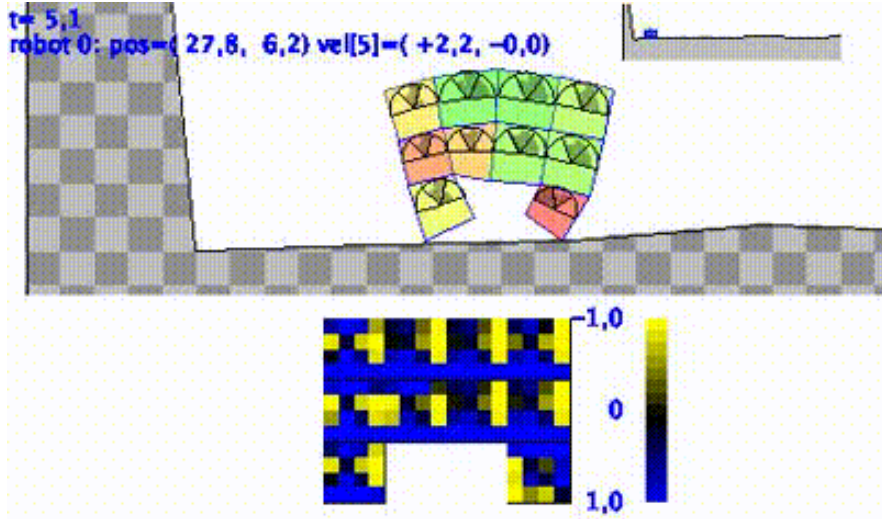


Figure 1: Overview of the proposed approach. We use the same neural controller (left picture) inside each voxel, with shared parameters. The middle picture is a biped with the attention matrices of the different voxels. Each controller uses self-attention to compute importance scores ( $A$ ) among the inputs sensed by its voxel. We also find evolved controllers to generalize to unseen morphologies (right picture; color represents the ratio between the voxel current area and its rest area: red stands for contraction, green for expansion, yellow for no change).

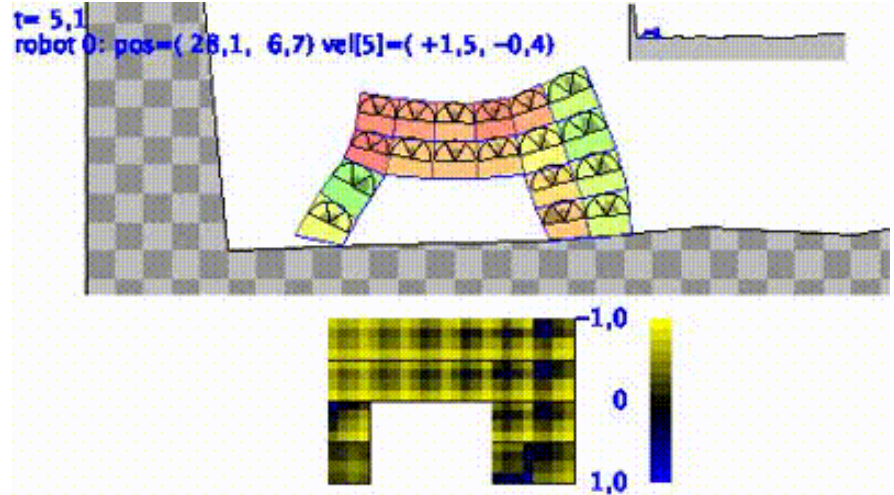




3) Fine-tuning on a small biped the self-attention evolved on a large one.

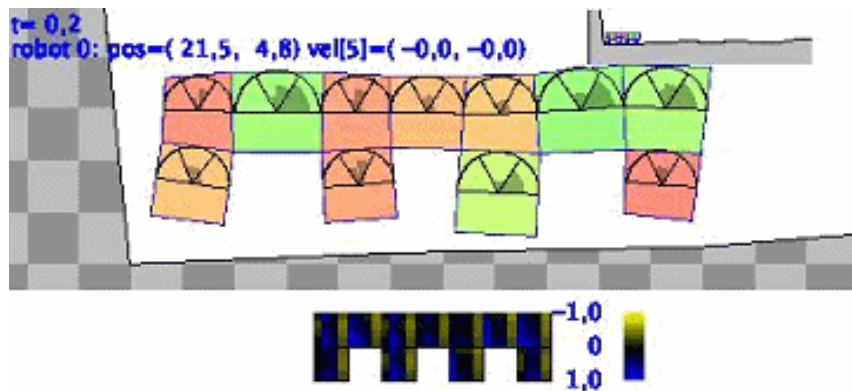


4) Fine-tuning on a large biped the self-attention evolved on a small one.

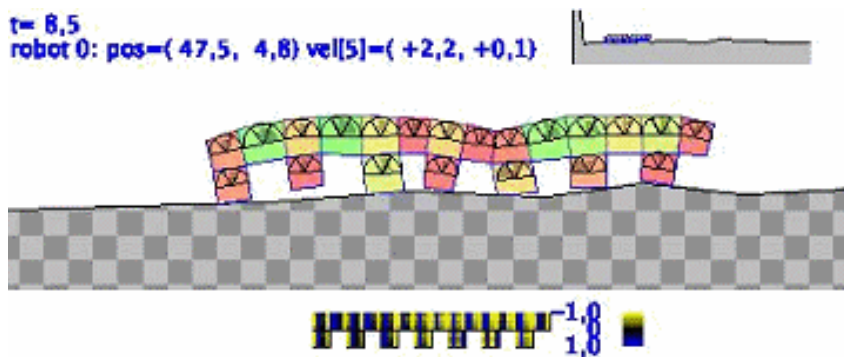




5) Fine-tuning on a small comb the self-attention evolved on a large one.



6) Fine-tuning on a large comb the self-attention evolved on a small one.





美国西北大学（Northwestern University）的研究人员首次开发出一种可以完全自行设计机器人的 AI 算法。

当该团队向 AI 程序发出提示：“设计一个可以在平坦表面上行走的机器人”。

出乎意料的结果发生了，引用西北大学官方的评价，「大自然花了数十亿年的时间才进化出第一个行走的物种，而新 AI 算法程序将进化压缩到闪电般的速度」。

不到 30 秒，就能设计出一个成功行走的机器人。

为了验证计算机中模拟的系统在实践中是否有效，研究人员通过 3D 打印设计的模具并填充硅胶，最终在 AI 系统的驱动下，得到了如下所示：一个虽然有些“蠢萌”，但是能以“大约是人类平均步幅的一半”的速度开始行（蠕）走（动）的机器人。

RESEARCH ARTICLE | ENGINEERING |



## Efficient automatic design of robots

[David Matthews](#) , [Andrew Spielberg](#) , [Daniela Rus](#), +1, and [Josh Bongard](#) [Authors Info & Affiliations](#)

Edited by Terrence Sejnowski, Salk Institute for Biological Studies, San Diego, CA; received March 29, 2023; accepted July 22, 2023

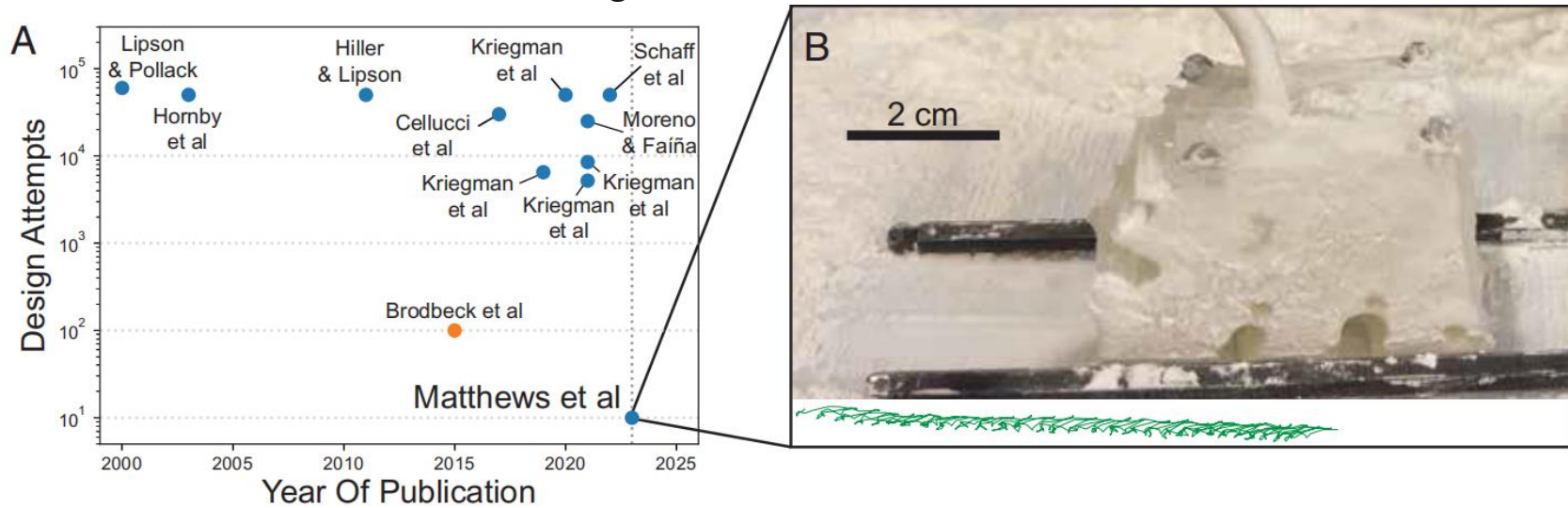
October 3, 2023 | 120 (41) e2305180120 | <https://doi.org/10.1073/pnas.2305180120>



## AI for Science

研究员使用一种自动优化方法，可以通过追踪机器人行为中的失败以找出物理结构中的错误或低效部位，从零开始设计可以自主移动的机器人。以这种方式改进机器人，它可以比以前(设计师以试错的方式尝试不同的机器人设计)更快地优化机器人中互相关联的部件。这为快速、按需定制人工智能驱动的机器人设计开辟了道路，可用于各种任务。

“我们告诉 AI，我们想要一个可以穿越陆地的机器人。然后我们只需按下一个按钮就可以了！它在眨眼间就生成了一个机器人的蓝图，它看起来与地球上行走过的任何动物都截然不同。我把这个过程称为‘即时进化’”， Sam Kriegman 表示。

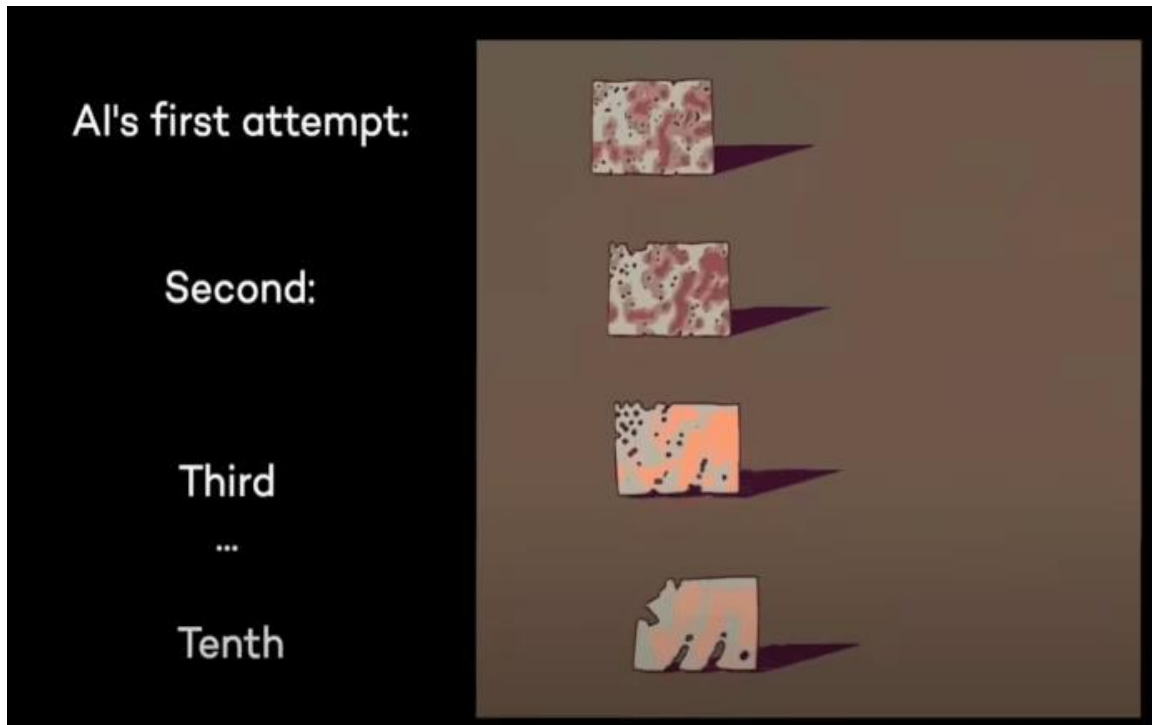






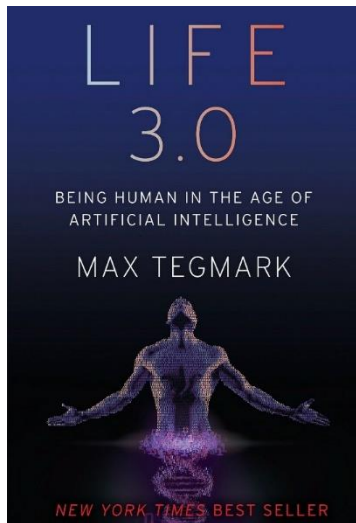
研究人员采用了近些年才出现的可微分物理模拟器使得基于梯度的虚拟机器人设计成为可能。即机器人的形状或材料特性中导致不良行为的方面可以被识别出来，并以非随机的方式减轻以改善其行为。但这些方法无法从根本上改变机器人的内部结构（肌肉组织、质量分布和空隙）或外部结构，如增加新的肢体。因此，研究人员最新研究了一种新的算法，它可以：

- (i) 模拟并评估虚拟机器人的行为适应性；
- (ii) 找出机器人在整体形状、拓扑结构（空隙数量）、肢体数量和形状、质量分布、肌肉组织和行为控制方面的不足；
- (iii) 同时改变所有这些方面，以便在下一次模拟中改善机器人的行为。





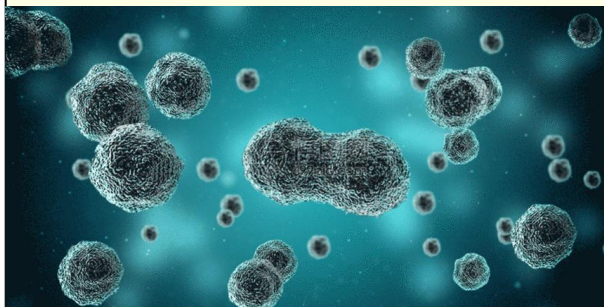
# AI for Science



《生命3.0》对未来生命的终极形式进行了大胆的想法，生命已经走过了1.0阶段和2.0阶段，接下来生命将进入能自我设计的3.0阶段。生命3.0通过更改自身硬件，可以实现快速进化，而不需要等待许多代的漫长进化。

## 生命1.0

- 既不能更改自身软件，也不能更改自身硬件
- 代表：早期生命



## 生命2.0

- 可重新更改自身软件，不能更改硬件
- 代表：人类



## 生命3.0

- 能不断升级自己的软件和硬件
- 代表：未来硅基生命?



Can it survive & replicate?	✗	✗	✓ See you later!
	✗	✓ ¡Hola!	✓ ¡Hola!
	✓ Hi!	✓ Hi!	✓ Hi!
	Life 1.0 (simple biological)	Life 2.0 (cultural)	Life 3.0 (technological)



谢谢大家