

神经网络探索物理问题

(中国原子能科学研究院 周书华 编译自 Mario Krenn. *Physics*, January 8, 2020)

基于神经网络的机器学习模型是许多现代技术进步的基础，并被越来越多地用于解决物理问题。

神经网络是一种计算工具，其运行方式模仿人类的大脑。神经网络一般由多层相互连接的人工神经元组成。神经元之间的连接是加权的，权重数可以是几百万到几十亿，构成网络的可调参数。神经网络的奇妙之处在于它们不需要通过编程来解决任务，而是通过例子进行学习，调节参数，使得输出结果不断改进。为了训练一个神经网络识别一张人脸，将同一人的许多不同的照片输入该网络。网络将改变连接的权重识别这张脸，直到其“识别的质量”足够可靠。经过训练的神经网络便可与这同一人的脸相匹配，并不需要用户提供人脸的特征信息。

神经网络能够学会解决大量不同类型的问题，但是其内部如何工作通常是不清楚的。分析网络的权重，是了解网络内部工作的一种方法。但是由于权重的数量巨大，这种方法很难实现。不清楚神经网络

如何运行，是尤其不能令物理学家满意的。为此，瑞士的联邦技术研究所(ETH)的Raban Iten, Tony Metger和同事们对网络的内部工作进行了研究。

研究团队从含有7层的标准神经网络出发。然后用两种重要的方法改变网络。首先他们改变网络的第四层——中间层，使得这层所含的神经元比其他层少，产生一个所谓的信息瓶颈。在某种情况下，例如，他们将这层含有的神经元数从100减到2。在其他情况，所改变的层中有较多的神经元，但其数量总是少于10。其次，他们对所改变的层编码，使得它的每个神经元都含有独立信息。对于人脸识别的例子，这就意味着经过改变的层中的一个神经元可能含有嘴的形状，另一个神经元含有眼睛的大小。经过这两种改变后，形成最终的神经网络，研究团队称其为SciNet，它具有参数较少的层。其中每个神经元含有关于要解决的问题的一个独立信息，使得这个神经网络容易研究。研究人员正是通过探索这层网络来研究网络的内部工作。

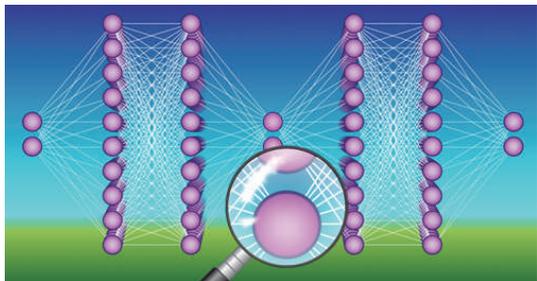
ETH团队要求SciNet解决不同的物理问题，最具代表性的是一个天文学问题。将火星与太阳的角度坐标赋予SciNet，该角度是从地球相对于某个固定的恒星测量的。然后要求SciNet预言这些天体未来的位置。经过训练，团队观察与网络的第4层的

两个神经元相关的权重，以了解SciNet如何解决这项任务。通过分析中间层的神经元的输出，他们发现，SciNet进行了坐标变换，改变了火星的角度，使之成为是从太阳而不是从地球测量的。这就是说，在没有外界明确要求下，SciNet从“地心观点”转变到“日心观点”。

ETH团队的演示使他们能理解神经网络如何解决各种特殊问题。这一结果还有更广泛的重要性。通过了解神经网络的内部工作，物理学家可以使用神经网络增进对问题新的概念性的认知，而不仅仅是最终答案。例如，可以训练SciNet预言一个量子系统的测量结果，看网络如何将量子力学的数学理论与现实联系起来。另一个令人激动的机会是用SciNet研究星系的转动曲线。物理学家仍然不理解，为何星系中的恒星自转速度比根据其可见质量预言的快，这导致认为宇宙中存在着某种未知的“暗物质”质量。不知道是否SciNet通过加上隐藏的暗物质质量，改进引力理论，或使用全新的不同的表象能解决这一问题。SciNet的答案将帮助研究人员沿着新的方向去解决这一长期未解决的重要问题。

Raban Iten团队的工作进一步使机器学习模型成为科学中的激励源泉，帮助研究人员发现关于物理问题的新理念和增强人类的创造性，并加速物理学本身的进步。

更多内容详见：*Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 010508。



机器学习可用于解决物理学中挑战性的问题。Raban Iten等演示了人类研究神经网络内部工作的方法