arXiv:2302.02105v1 [cs.LO] 4 Feb 2023

计算科学哲学短文

Michał J. Gajda

摘要

科学哲学试图以一种通用的方式描述科学过程的所有组成部分，以便促进对这一过程的描述、执行和改进。

迄今为止，所有提出的哲学都只对现有过程和学科进行了部分且不完善的涵盖。尤其是，逻辑方法一直备受关注，因为人们试图通过还原论理论，从根本上解决科学作为一门学科的定义问题。

我们提出一种从计算复杂度视角切入这一问题的新方法，并论证为何这种方法可能优于以纯逻辑和数学为基础的既有主张。

许多科学家呼吁将计算科学视为一种新型科学（Wolfram 2002；Angius、Primiero 和 Turner 2021）。为计算科学提供一个合理的哲学定义极为重要，因为这门学科植根于数据科学和自然的经验建模等领域。寻找令人满意的定义，引领我们走向科学哲学的新路径。这表明，计算科学不仅可能是一种新的程序构造形式方法，也可能为科学哲学本身开辟一条新路径。事实上，这也使我们能够以远比迄今许多尝试更令人满意的方式推广科学哲学（Kuhn 1970；Rodych 2018；拉普拉斯 1902；Hoang 2020）。

引言

有人认为，计算能力的发展是人类历史上的一股重要推动力量。回溯至古埃及，当时数学和工程学由祭司掌握；再到地理发现时期，普及的天文学知识和精确计算使人们能够每日修正航向；直至如今，个人计算设备的普及使几乎所有科学家都能借助生物信息学、星系模拟或社交网络的大规模分析来应对更艰巨的挑战（Himelboim 2017）。

在当前的科学哲学中，有观点认为，大量经验数据

使我们能够更快地证伪那些不太有用的科学理论，因此，我们基础理论的整体质量呈指数级提升。然而，与此同时，也有观点认为，尽管方法论日益先进，科学期刊发表的基本事实为假的概率却越来越高（Ioannidis 2005；Economist 2013；Colquhoun 2017年）。

事实上，科学哲学家似乎至今未能将我们对科学知识增长的感受，与为量化这种增长而提出的统计指标协调起来。

定义

经验主义 是一种哲学观点，认为所有概念都源自经验，因此，经验科学 也就是以实验确认为基础、并可被证伪的知识。因此，科学理论是指那些可能根据实验结果不断修正的理论。

证伪主义 认为，大多数陈述无法通过逻辑推导得出，只能由相反证据予以推翻。因此，科学知识通过经验对理论的证伪 而发展。只有能够被证伪的知识才可能是科学知识。证伪尝试失败会增强我们对理论的信心，而成功的证伪则促使我们提出新理论（Popper 1934）。

贝叶斯主义 认为，所有知识都具有不同程度的概率，因此，我们更新信念时也应遵循贝叶斯定理（Laplace 1902；Hoang 2020）。

预测主义 是本文提出的观点，认为我们需要超越经验验证这一要求以及概率化的知识观。所有科学知识都只是提供概率预测的一种方式，并受到我们计算能力的限制。因此，即使理论已被证伪，只要计算成本较低，仍应将其视为有效的科学知识，因为与更复杂的理论相比，它仍能以较低成本提供预测。

研究问题

我们希望讨论以下研究问题：

研究问题 1 科学与其他人类活动相比有哪些特征？**研究问题 2** 我们能否以一种涵盖当前所有活动的方式来定义科学？**研究问题 3** 科学哲学在适用于不同领域和科学活动时有何差异？

提案

我们提出将朴素的简化与计算原则加以推广。该原则认为，能够让我们获得更简单解释的理论，确实是更好的科学理论。

鉴于证伪理论的逻辑发展，我们希望消除否定性标准对于理论有效性所造成的荒谬性。
毕竟，当尚未创立更好的理论时，科学家会自愿将被证伪的理论作为工具使用。当这些被证伪的理论具有一定的预测力时，人们很少会认为它们是一种倒退。

事实上，我们认为，一系列经验理论可能由于过度概括而都存在一定程度的错误；但如果每个后续理论都能提供更准确的预测，它们仍然可以代表科学知识的增长。

因此，我们认为，预测力 应当是科学最重要的品质。这使科学成为一种实用工具，能够让我们简化并预测由诸多事实构成的宇宙，也解释了已经被证伪的理论为何仍然广受使用。较为简单的理论可能具有更简单的计算需求，从而使预测对科学家而言更加易于获取 。因此，被证伪的理论成为理论层级中常见的垫脚石，也是将科学视为预测工具的科学整体观不可或缺的一部分。

人们甚至可能会尝试按照这样的层级绘制理论，并得出结论：如果将预测的计算复杂度作为横轴，将预测准确度作为纵轴，那么有用的科学理论将沿着偏好函数的前沿一路分布。

科学理论与方法论概述

这里举几个例子，说明预测主义框架如何解释科学的演变。

牛顿动力学与相对论之争

牛顿动力学（牛顿，1687）是一套源自牛顿三条运动定律的理论。其数学表述是物理学、工程学和建筑学中大量先进物理描述的基础。然而，证实光速极限的实验后来证伪了它，它也因此被广义相对论（爱因斯坦，1905）和后牛顿近似（钱德拉塞卡，1969）所取代。

量子力学的发现也迫使人们修正牛顿方程（Meter，2011）。

为什么该理论在被证伪很久之后仍然被使用？停止教授一个显然错误的理论，并将所有数学

虽然这对于宏观相互作用似乎可行，但也会显著增加这些描述的复杂性。

事实上，该领域的研究者长期以来一直认为，扎实的研究以可证伪理论、实验测量和有效近似之间的相互作用为特征（Hartmann2001）。

此外，对于量子力学，我们尚不清楚这种替代方法是否普遍适用。

量子力学与广义相对论之比较

量子力学对世界的描述（Feynman 1950；Schweber 1986）被认为与广义相对论的描述不一致。广义相对论能够正确描述宏观尺度上的现象，而量子力学则能正确描述亚纳米尺度过程。

因此我们看到，当两种理论被全面应用时，它们都遭到了证伪!

生物分子结构预测

在建立了蛋白质结构理论（Pauling、Corey 和 Branson，1951）之后，科学家尝试用分子力学（Allinger，1959）描述小分子和大分子的力学特性。该理论运用牛顿运动定律，并结合对化学势的简化描述，来说明作用于不同原子上的力，进而模拟它们之间的相互作用。

这种方法非常成功，如今实验研究人员会借助分子力学来处理复杂的实验数据（Joosten 等人，2011）。这是一个理论应用实例：尽管与量子化学相比并不准确，却仍然得到使用（Warshel 和 Levitt，1976）。事实上，它的成功还推动了进一步简化：用固定长度的刚性连接近似共价键，并在角度空间中重新计算所有作用力，由此诞生了扭转角力学（Bae 和 Haug，1987；Kumar、Hosur 和 Govil，1991）。这种方法将计算简单模型所需的蛋白质结构测定时间从数天或数小时缩短至数分钟（Winn 等人，2002）。更进一步的是 Rosetta 方法（Rohl 等人，2004）：它在结构精修的最后阶段使用分子力学，但一开始只是尝试从蛋白质数据库中复制并粘贴现有蛋白质结构的片段（H. M. Berman，2003、2007；Consortium，2019），并检查其几何相容性[1]。

这是一个现代科学领域的绝佳例子：该领域通过采用计算上更为简便快捷的方法，

[1]称为“空间位阻冲突”。

以实现预测数量和准确性的全面提升。

这也表明，科学的巨大进步是如何通过从复杂解释走向简单解释而实现的，尽管简单解释准确性较低，也确实更容易被证伪（Rauscher 等，2015）

DNA 条形码与计算系统发育

将 DNA 条形码作为一种近期提出的近似方法加入进来，这种方法试图降低获得正确答案所需的计算负荷。

DNA 条形码（Woese、Kandler 和 Wheelis，1990；Hebert 等，2003）是一种近期提出的物种鉴定方法，旨在降低这一过程的计算复杂度。它基于对种间变异较小的基因区域进行比较。如今，物种区分的另一种“真理黄金标准”是计算系统发育分析，但这种方法需要对基因组进行大量测序，并开展需要计算资源和专业知识的计算分析。因此，DNA 条形码被提出作为一种更广泛的科学家群体都能使用的方法。DNA 条形码也比传统的形态比较方法更快，并且在无法取得果实和花粉时仍可使用。

历史

历史科学也可以描述为：从已知的历史记录 出发，推断可能的历史事实[2]，以描述塑造人类历史的过程。

这似乎很难用寻求真理的经典框架来描述（因为我们知道，有相当一部分事实并不真实），也很难用经验主义框架来描述（因为我们几乎无法重复实验），更难用证伪主义框架来描述（因为要严格证伪大多数历史事实，就需要时间旅行）。

然而，用预测主义框架来描述却很容易：我们认为，推断出的历史事件最有可能发生，也是对现有历史记录最简单的解释。同样，我们也会讨论历史力量和过程：与逐一罗列事实本身相比，它们是对历史事实更概括、更简洁，因而预测力更强的解释。

这表明，预测主义框架如何描述经验领域之外的科学。

[2]历史事件可能与记录中的事件并不完全对应，而这正是这一过程的重要组成部分

哲学

在我们的提案中，一些哲学研究领域可以重新表述为预测科学领域：

- 本体论：预测抽象术语与分类之间相互关系的一种方式
- 价值论：预测价值判断一致性的一种方式

从这个意义上说，我们可以直接指出，哲学确实是一门经验科学，因为我们对每种理论都有明确的成功度量指标。

作为实现目标之科学的工程学

同样，许多工程学和应用力学领域显然具有科学性：例如，软件工程是一门艺术，它旨在预测哪些软件系统能够满足设计（或业务）目标，同时优化工作投入。

我们还可以指出，这样定义科学，便于解释个人和组织如何运用科学方法参与竞争，从而提升自身适应度。即使这些方法建立在可证伪理论之上，预测力也能帮助这些主体提升适应度：要么减少获得态势感知所需的计算开销，要么增强态势感知。

理论的价值是什么？

科学与个人的认识论决策之间的区别在于，科学理论会在共同体内部传播，并且可由共同体成员验证。

第一个因素使我们能够跨越时间的鸿沟构建科学理论，并稳步加深对世界的理解。但第二个因素也很重要：它使我们能够“剔除垃圾信息”——也就是那些贡献不如其他理论的理论，因为它们提供的预测真理性较低，或计算开销较高。这样一来，我们就能避免非真理在未经筛选的文化中不断累积，最终泛滥成灾。我们仍然会对科学理论进行“估值”。一种估值方式是依据真与非真；然而，拉普拉斯认为，我们只能评估某个理论为真的概率，因此应采用以真理概率为依据的贝叶斯解释。此外，还可以根据解释的柯尔莫哥洛夫复杂度进行分级，因为人们更青睐简单的解释。

这里所描述的哲学指出，除了理论为真的概率之外，我们在实践中运用该理论还要考虑其计算复杂度。因此，认识论偏好只会选择真理概率较高或计算复杂度较低的理论。这对人类和计算机都很重要：人类可以使用多种方法，但在国际象棋等游戏中，只能预判有限几步；

计算机也一样。当然，我们可以认为，人类和计算机的认识论计算成本并不相同。它们拥有不同的计算模型：人类拥有大规模并行的神经网络，但其深度有限、层数有限，而且在计算所需的时间内，可用的层数也有限；计算机则拥有高度串行的中央处理器，每秒可执行数十亿次运算，但并行性有限。我们还可以考虑人类训练的成本，或在计算平台上部署预测软件的成本，但结论大致相同：实施和运行预测理论的整体计算复杂度，远比该理论的真理概率更能决定其价值。因为在大多数时候，我们只能预测计算能力所允许的范围；这样做不仅节省能量，也能及时为我们的决策提供世界观。

最优理论族

这也让我们能够以平等的视角讨论超有限主义逻辑、构造演算、直觉主义逻辑和经典逻辑，并将它们视为逻辑易用性与消除所有悖论的愿望之间这一尺度上的一些可能的最优 点。因此，可以认为，多模态逻辑及其他变体逻辑的近期发展并非实验，而是在这一空间中对所有可能的最优理论 进行自然探索。

讨论

我们看到，预测主义为界定科学的各个领域提供了易于理解的基础，并解释了那些容易被证伪的理论为何持续发展。我们还提出了一种度量指标，使我们能够在非文献计量基础上比较理论，从而判断它们是否在给定计算复杂度下提供了最佳预测，因而称得上最优。

因此，我们提出从计算复杂度的视角重新评估科学哲学。这表明，计算复杂度或许确实是理解一般科学的一项基本概念，正如概率论一样。

参考文献

Allinger，Norman。1959年。“构象分析。III. 对若干中环化合物的应用1,2。”《美国化学学会志》81（11月）。https://doi.org/10.1021/ja01530a049。Angius，Nicola，Giuseppe Primiero 和 Raymond Turner。2021年。“计算机科学哲学。”载于《斯坦福哲学百科全书》，Edward N. Zalta 编，2021年春季。https://plato.stanford.edu/archives/spr2021/entries/computer-sci

形而上学研究实验室，斯坦福大学。

Bae, Dae-Sung 和 Edward J. Haug。1987年。《受约束机械系统动力学的递归公式：第一部分：开环系统》。《结构与机器力学》15（3）：359–82。https://doi.org/10.1080/08905458708905124。Chandrasekhar, S. 1969年。《广义相对论与后牛顿近似中的守恒定律》158（10月）：45。https://doi.org/10.1086/150170。Colquhoun, David。2017年。《研究的可重复性与对p值的误解》。《英国皇家学会开放科学》4（12）：171085–85。https://doi.org/10.1098/rsos.171085。Consortium, wwPDB。2019年。《蛋白质数据库：三维大分子结构数据的全球唯一档案库》。《核酸研究》47（12）：520–28。https://doi.org/10.1093/nar/gky949。Economist。2013年。2013年。https://www.economist.com/briefing/2013/10/18/trouble-at-the-lab。Einstein, A. 1905年。《论运动物体的电动力学》。《物理学年鉴》322（10）：891–921。https://doi.org/https://doi.org/10.1002/andp.19053221004。Feynman, R. P. 1950年。《电磁相互作用量子理论的数学表述》。《物理评论》80（11月）：440–57。https://doi.org/10.1103/PhysRev.80.440。H. M. Berman, H. Nakamura, K. Henrick。2003年。《全球蛋白质数据库发布公告》。《自然·结构生物学》10（12）：980。———。2007年。《（2007）全球蛋白质数据库（wwPDB）：确保PDB数据档案库的统一性》。核酸研究。35（数据库专刊）：D301-3。《核酸研究》35（数据库专刊）（3）：301。Hartmann, Stephan。2001年。《有效场论、还原论与科学解释》。《科学史与科学哲学研究*B*辑：现代物理学史与哲学研究》32（2）：267–304。https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1355-2198(01)00005-3。Hebert, Paul D. N., Alina Cywinska, Shelley L. Ball 和 Jeremy R. deWaard。2003年。《通过DNA条形码进行生物鉴定》。《伦敦皇家学会学报*B*辑：生物科学》270（1512）：313–21。https://doi.org/10.1098/rspb.2002.2218。Himelboim, Itai。2017年。《社会网络分析（社交媒体）》。收录于。https://doi.org/10.1002/9781118901731.iecrm0236。Hoang, Lê Nguyên。2020年。《知识方程：从贝叶斯定理到统一的科学哲学》。第1版。Chapman; Hall/CRC。https://doi.org/10.1201/9780367855307。Ioannidis, John P. A. 2005年。《为什么大多数已发表的研究结果都是错误的》。《公共科学图书馆医学》2（8）。https://doi.org/10.1371/journal.pmed.0020124。Joosten, Robbie P., Krista Joosten, Serge X. Cohen, Gert Vriend 和 Anastassis Perrakis。2011年。《蛋白质数据库中晶体结构的自动重建与优化》。《生物信息学》27（24）：3392–98。https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btr590。Kuhn, Thomas S. 1970年。《科学革命的结构》。芝加哥：芝加哥大学出版社。Kumar, R. Ajay, R. V. Hosur 和 G. Govil。1991年。《扭转角方法

核酸距离几何：TANDY。”《生物分子核磁共振杂志》1 (4): 363–78. https://doi.org/10.1007/BF02192860. 拉普拉斯，皮埃尔·西蒙。1902年。《概率论哲学随笔》。纽约：J. Wiley & Sons。Meter，J R van。2011。“薛定谔–牛顿‘坍缩’与波函数。”《经典与量子引力》28 (21): 215013. https://doi.org/10.1088/0264-9381/28/21/215013. 牛顿，艾萨克。1687年。《自然哲学的数学原理》。William Dawson & Sons Ltd.，伦敦。莱纳斯·Pauling、罗伯特·科里和 H. Branson。1951。“蛋白质结构：多肽链的两种氢键螺旋构型。”《美国国家科学院院刊》37 (4月). https://doi.org/10.1073/pnas.37.4.205. 波普尔，K. R. 1934。《科学发现的逻辑》。伦敦：Hutchinson。Rauscher、Sarah、Vytautas Gapsys、Michal J. Gajda、Markus Zweckstetter、Bert L. de Groot 和 Helmut Grubmüller。2015。“内在无序蛋白质的结构系综强烈依赖于力场：与实验的比较。”《化学理论与计算杂志》11 (11): 5513–24. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00736. Rodych，Victor。2018。“维特根斯坦的数学哲学。”载于《斯坦福哲学百科全书》，Edward N. Zalta 编，2018年春季版。https://plato.stanford.edu/archives/spr2018/entries/wittgenstein-mathematics/；形而上学研究实验室，斯坦福大学。https://plato.stanford.edu/archives/spr2018/entries/wittg

Rohl, Carol A., Charlie E. M. Strauss, Kira M. S. Misura, 和 David Baker。2004年。“使用 Rosetta 进行蛋白质结构预测。” 收录于数值计算机方法，第 *d* 部分，383：66–93。《酶学方法》。学术出版社。https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0076-6879(04)83004-0。Schweber, Silvan S. 1986年。“Feynman 与时空过程的可视化。”《现代物理评论》58（4月）：449–508。https://doi.org/10.1103/RevModPhys.58.449。Warshel, A., 和 M. Levitt。1976年。“酶促反应的理论研究：溶菌酶反应中碳正离子的介电稳定、静电稳定和空间位阻稳定作用。”《分子生物学杂志》103（2）：227–49。https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0022-2836(76)90311-9。Winn, M. D., A. W. Ashton, P. J. Briggs, C. C. Ballard, 和 P. Patel。2002年。“用于高通量结构测定的*CCP*4持续开发。”《晶体学报》*D*辑58（11）：1929–36。https://doi.org/10.1107/S0907444902016116。Woese, C R, O Kandler, 和 M L Wheelis。1990年。“迈向生物体的自然系统：关于古菌、细菌和真核生物三个域的提案。”《美国国家科学院院刊》87（12）：4576–79。https://doi.org/10.1073/pnas.87.12.4576。Wolfram, Stephen。2002年。《一种新科学》。第1版。Wolfram Media。https://www.wolframscience.com/nks/。