Draft version October 10, 2023年 使用 LaTeX 双栏样式，采用 AASTeX63

arXiv:2303.03192v2 [astro-ph.IM] 9 Oct 2023

# 单位约束引导的物理学深度符号回归：迈向物理定律的自动发现

Wassim Tenachi ,[1] Rodrigo Ibata ,[1] and Foivos I. Diakogiannis [2]

[1] *Université de Strasbourg, CNRS, Observatoire astronomique de Strasbourg, UMR 7550, F-67000 Strasbourg, France*
[2] *Data61, CSIRO, Kensington, WA 6155, Australia*

（收到日期：2023年3月3日；修订日期：2023年10月6日；接受日期：2023年10月6日）

投稿至《天体物理学杂志》

## 摘要

符号回归研究的是能够自动搜索拟合数据的解析表达式的算法。尽管深度学习的最新进展让这类方法重新受到关注，但符号回归方法的发展并未聚焦于物理学，而物理学中的数据带有单位，因此还受到重要的额外约束。本文介绍 Φ-SO：一种物理符号优化框架，通过学习单位约束，运用深度强化学习技术从物理学数据中恢复解析符号表达式。我们的系统从底层构建，旨在提出在构造上物理单位始终一致的解。这不仅有助于排除不符合物理规律的解，而且由于量纲分析的“语法”规则极大地限制了方程生成器的自由度，因而能显著提升性能。该算法可用于拟合无噪声数据，例如推导物理模型的解析性质；也可用于获得噪声数据的解析近似。我们在一组标准基准测试上检验了该方法，其中包括《费曼物理学讲义》及其他物理学教材中的方程。在存在噪声时，我们取得了最先进的性能（噪声超过 0.1% 时亦然），并展示了该方法即使在存在大量噪声（10%）的情况下仍具有稳健性。最后，我们通过一系列天体物理学示例展示了该方法的能力。

关键词：符号回归、强化学习、循环神经网络、量纲分析、物理单位、语法引导的符号生成

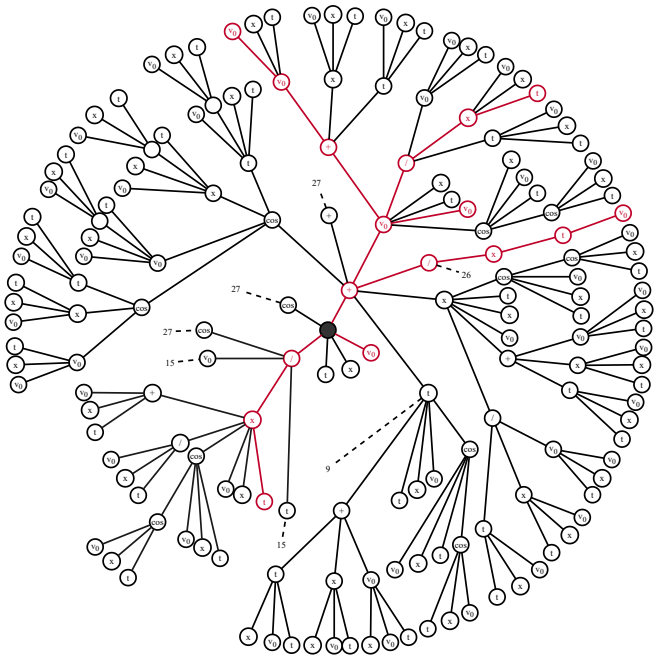
## 1. 引言

伽利略在《物理学家试金石》（伽利略（1623））中著名地领悟到，宇宙之书“是用数学语言写成的”。自那时起，物理学一直致力于用数学语言解释自然界的性质，即提出或推导出能够概括我们通过实验和观测所获得测量结果的数学表达式。这种方法已被证明极为强大。几个世纪以来，物理学大师们通过不断试错，发展并传承给我们一套丰富的工具和技巧，使我们得以理解世界，并建立起现代技术文明。然而，如今得益于现代深度学习网络的发展，这项工作有望得到加速，因为机器能够考察的试探解空间远远大于人类独自所能探索的范围。

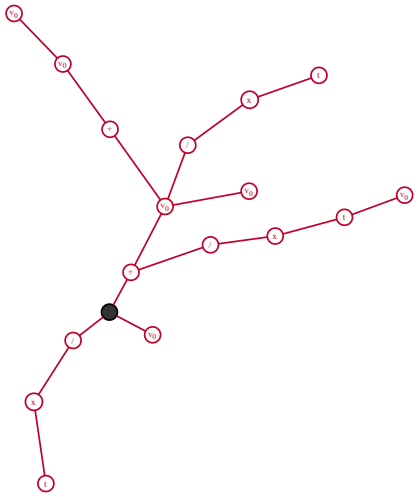
当然，自计算机革命以来，人们已经开发出许多方法，用于将线性或非线性函数的系数拟合到数据中（例如，参见 Press 等，2007 年）。尽管这类方法无疑非常有用，但本文将要讨论的过程更为通用，因为它们旨在寻找函数本身以及所需的任何拟合系数。具体而言，我们希望推断出一个形式自由的符号解析函数 $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$，使其能够拟合 $y = f(\mathbf{x})$ 给定的 $(\mathbf{x}\ y)$ 数据。在计算机科学中，这类过程通常称为“符号回归”（SR）。

### 1.1. 物理学与大数据的动机

尽管符号回归在物理学中的能力已得到多次展示（例如，Wu &Tegmark 2019；Liu & Tegmark 2021；Liu et al. 2021；Lemos et al.2022；DiPietro&Zhu 2022；Bartlett 等人 2023；Reinboldet al. 2021）以及天体物理学中的能力（例如，Wadekaret al. 2023；



搜索空间



采用我们的原位物理单位先验的搜索空间

**图1**。 我们的 *in situ* 物理单位先验所实现的符号表达式搜索空间缩减示意图。我们表示了导向具有物理上可能的单位的表达式的路径（采用前缀表示法，以红色表示），以及部分导向具有非物理单位的表达式的路径（以黑色表示）；为便于阅读，其他非物理路径以点线及其总数概括表示并予以省略。这里我们考虑使用符号库 $\{+, /, \text{余弦}\ v_0, x, t\}$ 恢复一个速度 $v$，其中$v_0$ 为速度， $x$ 为长度， $t$ 为时间（为便于阅读，将表达式限制为长度为5的符号序列）。这将搜索空间从268个表达式缩减至仅6个。

Matchev 等， 2022；Shao etal. 2022；Delgado etal.2022；Wadekaretal.2020；Desmond et al. 2023；Wong& Cranmer 2022），迄今为止，符号回归从未被用于根据天体物理测量发现新物理定律。不过，随着盖亚等新观测任务和巡天观测的开展（Gaia 合作组 et al. 2016）、欧几里得（Laureijs et al. 2011）、大型综合巡天望远镜（˘Zeljko Ivezi´cet al. 2019；Collaboration 2009）以及平方公里阵列（Carilli & Rawlings 2004），这一局面或将改变。借助这些以及其他大型巡天，我们的领域正进入数据丰饶的新时代。人们十分期待能够从这些前所未有的丰富而复杂的数据集中识别出新的经验定律，并最终发现新物理学。然而，海量数据也带来了重大的概念性挑战。深度学习虽能帮助我们从大型巡天中提取有价值的信息，但其最强大的组成部分之一——底层神经网络——既是其优势，也是其掣肘。神经网络足够灵活且功能强大，可以对任何物理系统建模（只要该系统可描述为勒贝格可积函数Lu et al. 2017），也能处理高维问题，但遗憾的是，它们在很大程度上由.....构成不可解释的黑箱。显然，可解释性和可理解性在物理学中极为重要，这不禁引出一个问题：如何在保留对这些大型数据集进行解释并将其与理论联系起来的能力的同时，利用其中的信息？在训练深度神经网络以拟合数据集之后，我们能否打开这个黑箱，理解其中所建模的物理学？

### 1.2. 符号回归

符号回归通过生成简洁、可解释且具有泛化能力的模型来解决这些问题。事实上，其目标是找到非常简单的定律，例如牛顿万有引力定律，从而能够很好地解释大量实验和观测。与大型数值模型相比，以简洁的数学表达式形式发现物理定律具有诸多优势：

- 紧凑性：符号回归方法能够生成极其紧凑的模型，例如包含 $\sim 10^1$ 符号的La Cava 等人 2021表达式，其长度与《费曼物理学讲义》中表达式的典型长度相当（Feyn- man 等人 1971），例如长度为 16（其中

符号回归方法生成的表达式长度通常远低于 $10^3$）。相比之下，神经网络等数值模型通常依赖更多参数。这使得模型的运行计算成本较低；原则上，这也使符号回归能够使用比传统机器学习方法少得多的数据，正确恢复数据集所对应的精确数学表达式（Wilstrup &Kasak2021），并且即使要实现完美的模型恢复，也能对噪声保持稳健性（Reinbold 等人 2021；La Cava 等人 2021）。

•泛化：此外，除非目标方程由任意长的多项式构成，否则与大型数值模型相比，符号回归（SR）生成的紧凑表达式不易对测量误差过拟合；在数据提供的拟合范围之外，它们也更加稳健可靠，整体上展现出强得多的泛化能力，正如（Sahoo 等人 2018；Kamienny 等人 2022；Kamienny &Lamprier 2022；Wilstrup& Kasak 2021）中所展示的那样（我们将在第 5.5节给出一个例子）。因此，符号回归有望成为一种强大的工具，用于发现对测量结果最简洁、最具泛化性的表示。

•易理解性与可解释性：由于符号回归生成的模型由数学表达式构成，因此与大型数值模型不同，我们能够理解其行为。这在物理学中具有极其重要的价值（Wu & Tegmark 2019），因为符号回归模型可能使人们能够将新发现的物理定律与理论联系起来，并推动后续的理论发展。更广泛地说，这种方法契合了机器学习模型日益朝着易理解（Sabbatini& Calegari2022）、可解释（Arrietaet al. 2020）和可阐释（Murdochet al. 2019）方向发展的趋势；在模型可能影响人类生命的领域，这一点尤为重要（欧盟委员会 2021；第117届美国国会 2022）。

然而，尽管利用符号回归发现新物理定律的前景可能十分诱人，但实现起来也极具挑战性。不妨设想一下，如果以一种朴素的方式解决这个问题，会有多困难。假设在试探解析表达式中，我们允许表达式长度为35个符号（正如我们将在下文中所做的那样），并且每个符号都可以从15种不同的变量或运算（例如 $x, +, -, \times, /,$ sin, 对数, ...）中选择（这与我们下文采用的设置相当）。那么，一种朴素的蛮力法拟合数据集的尝试可能需要考虑多达 $15^{35} \approx 1.5 \times 10^{41}$ 个试探解，这显然远远超出我们当今或可预见的未来任何时候所具备的计算能力，无法用数据对其进行检验，因此符号回归是一个“NP困难”（非确定性多项式时间）问题（Virgolin & Pissis 2022年）。此外，还必须对所提出表达式中的自由常数进行优化。由这些考量显而易见，符号回归要求我们开发高效策略，以筛除较差的猜测。

### 1.3. 物理符号回归

有多种符号回归方法（详见第2节）能够生成准确的解析模型。然而，在物理学领域，我们还有一项额外要求：方程必须在物理单位上保持平衡，否则无论它对数据数值的拟合效果如何，该方程都毫无意义。尽管这些方法功能强大，据我们所知，所有现有的符号回归方法都将大部分时间花在探索搜索空间上，而其中绝大多数候选表达式在单位方面都不符合物理规律，因此最终往往会产生不符合物理规律的模型（例外情况是先将变量转换为无量纲形式的方法，如第3.2小节所述）。解决这一问题的一种非常简单的方法，是使用现有的符号回归代码，并事后检查所提出的解是否满足这一约束。但这不仅会极大浪费时间和计算资源，甚至可能使许多有趣的符号回归任务无法实现，还会导致相当一部分最终得到的“最佳”解析模型无法使用，也无法解释。需要说明的是，为了表述清晰，本文始终将由物理量纲 $\{L, M, T, I, \Theta, N, J\}$（即具有物理单位{m、kg、s、A、K、mol、cd}或其子集）构成的唯一量系统，或由问题特定量构成的系统（如 $\{L, V, \rho, P, v\}$（即具有物理单位 {m、$m^3$,kg/$m^{-3}$、Pa、m.$s^{-1}$}）称为“单位” [1]。

乍看之下，人们可能会认为，单位约束是限制符号回归能力的严苛限制，因为它们会阻止生成不符合物理规律的中间表达式。然而，在这项工作中，我们表明，遵循物理约束实际上有助于提升符号回归的性能，不仅能提高可解释性，也能提升准确性，因为它能引导搜索

[1]尽管这也可以扩展到包含非物理量的系统，例如 {标量、向量、矩阵}，甚至是{美元、人、年}。

解的空间，使其朝着精确的解析定律探索。这与（Petersen 等（2021a），b；Kammerer 等，2020）的研究结果一致，他们发现，在解析表达式生成过程中使用实时约束效率要高得多，因为这会大幅缩小候选表达式的搜索空间（不过，我们注意到，在这些框架中加入此类约束并非易事，因为每次添加新符号时，都需要重新计算表示解析表达式及其底层单位约束的整个关系图）。

这里介绍我们的物理符号优化框架（Φ-SO）。该框架从设计之初就旨在通过存储和管理与量纲分析相关的信息，在符号回归过程中纳入并充分利用物理单位信息。这在一定程度上解决了上文第1.2小节中讨论的组合挑战。我们的 Φ-SO框架在方程生成过程中实时纳入单位约束，因此按照构造原则，仅会提出单位平衡的方程，从而也大幅缩小了搜索空间，如图1所示。

尽管我们的框架几乎可以应用于第2节所述的任何一种符号回归方法，我们仍选择使用PyTorch（Paszke 等，2019，目前研究领域中最流行的深度学习库，Papers With Code 2023），从头构建我们的方法，同时借鉴了Petersen 等人（2021a）和Landajuela 等人（2021b）提出的先进深度符号回归框架中的一些数学原理和关键策略。该框架依靠基于风险偏好策略梯度的强化学习（其基础源自Rajeswaran 等人（2017））。

在本研究中，我们为物理学开发了一种基础性的符号嵌入，使整个表达式树图以及局部单位约束都能够得到处理。不同于以往在应用标准符号回归技术之前先将数据集转换为无量纲形式、从而考虑单位的尝试（Udrescu& Tegmark2020；Matchev 等，2022；Keren 等，2023），我们的方法能够预先确定在部分构成的数学表达式中生成后续符号所需的单位。采用这种方法后，我们不仅像Pe- tersen 等，（2021a）一样，专注于训练神经网络以生成日益精确的表达式，还会生成必要单位的标签，并主动训练神经网络遵循这些约束。从本质上说，我们的方法赋予神经网络学习以下能力：根据局部单位约束选择适当符号。

据我们所知，此前尚未构建过这样的框架。这是我们计划开展的研究项目的第一步，旨在为天体物理学及其他物理科学领域构建一种强大的通用符号回归算法。本文旨在向学界介绍该算法，展示其工作原理和潜力；具体的天体物理学研究应用则留待未来研究。

本文的结构如下。首先，我们在第 2 节简要回顾近期符号回归文献。我们的 Φ-SO 框架将在第 3 节详细介绍；在第4 节中，我们将其应用于一个包含 120 个《费曼物理学讲义》方程的基准测试，并将其与另外 17 种广受欢迎的符号回归算法进行比较，报告其达到最先进水平的性能。在第 5 节中，我们将通过一组天体物理学测试案例展示 Φ-SO 的能力，并进行消融研究。最后，在第6 节和第 7 节中，我们将讨论结果并得出结论。

## 2. 相关研究——现代符号回归简要综述

符号回归（SR）传统上采用遗传编程来处理：候选数学表达式群体通过受自然进化启发的操作（如自然选择、交叉和变异）不断迭代改进。这类方法包括广为人知的 Eureqa 软件（Schmidt & Lip- son 2009年，2011年）（关于 Eureqa 在天体物理学测试案例中的能力基准测试，见 Graham 等人 2013 ），以及较新的研究（Cranmer 2020年；de Franca & Aldeia 2021年；La Cava 等人 2019年；Cava 等人 2019年；Vir- golin 等人 2019年；Cranmer 等人 2020年；Virgolin 等人 2021年；Stephens 2015年；Kommenda 等人 2020年）。此外，符号回归还通过多种方法实现，从穷举法到（无）引导的蒙特卡罗方法，再到概率搜索（McConaghy 2011年；Kammerer 等，2020；Bartlett 等人 2023年；Brence 等人 2021年；Jin 等人 2019年），也采用问题简化算法（Luo 等人 2022年；Tohme 等人 2023年）。

鉴于深度学习技术在许多其他领域取得了巨大成功，它们如今被应用于符号回归也就不足为奇了，并且现在正挑战着 Eureqa 式方法的主导地位（La Cava 等人 2021； Matsubara 等人 2022）。人们已经开发出多种将神经网络融入符号回归的方法，涵盖了功能强大的问题简化方案（Udrescu & Tegmark 2020； Udrescu 等人 2020；Cranmer 等人 2020），以及端到端符号回归方法：通过监督式训练神经网络来映射数据集之间的关系

及其对应符号函数之间的关系（Kamienny 等人 2022；Biggio 等人 2020、2021；Vastl 等人 2022；d'Ascoli 等人 2022；Kamienny 等人 2023；Bendinelli 等人 2023；Becker 等人 2022；Alnuqaydan 等人 2022；Ar´echiga 等人 2021），乃至将符号融入神经网络，并通过稀疏拟合使其具备可解释性或恢复数学表达式（Martius 与 Lampert 2017；Brunton 等人 2016；Zheng 等人 2022；Sahoo 等人 2018；Valle 与 Haddadin 2021；Kim 等人 2020；Panju 与 Ghodsi 2020；Ouyang 等人 2018）。有关符号回归算法的最新综述，参见（La Cava 等人 2021；Makke 与 Chawla 2022；Angelis 等人 2023）。

尽管上述部分算法在生成非常准确的符号近似方面表现出色，但 Petersen 等人（2021a）提出的基于强化学习的深度符号回归框架，如今已成为精确符号函数恢复的行业标准，尤其是在存在噪声的情况下（La Cava 等人 2021年；Matsubara 等人 2022年）。因此，文献中出现了许多基于该框架开展的研究 Lan- dajuela 等人 2021b, a；Kim 等人 2021年；Petersen 等人 2021b；Landajuela 等人 2022年；Du 等人 2022年；DiPietro 与 Zhu 2022；Zheng 等人 2022 年；Landajuela 等人 2021a；Usama 与 Lee 2022。

## 3. 方法

鉴于深度强化学习方法在准确恢复精确符号表达式方面取得的成功，而这在物理学领域尤为重要，因为精确恢复物理定律至关重要，我们选择将这一方法纳入物理符号回归方法的机器学习组件中。在小节3.1中，我们介绍如何利用循环神经网络（RNN）生成解析表达式。小节 3.2 介绍了我们用于生成原位 单位约束的算法细节；这些单位约束用于教授循环神经网络量纲分析规则，并帮助缩小搜索空间。在小节 3.3中，我们介绍所采用的强化学习策略，使我们的循环神经网络不仅能够生成准确表达式，还能生成具有物理意义的表达式。最后，我们在小节PhySO中介绍物理符号优化实现的计算细节，3.4。

### 3.1. 生成符号表达式

符号表达式可以视为二叉树，其中每个节点代表可用符号库中的一个表达式符号，即输入变量（例如 $x$, $t$）、常数（例如 $v_0$）或运算（例如 $+$, $-$, $\times$, $/$, sin, log, ...）。在这种表示中，输入变量和常数可称为终端节点或符号（没有子节点），接受单个参数的运算（例如 sin, log, ...）是一元符号（有一个子节点），而接受两个参数的运算（例如 $+$, $-$, $\times$, $/$, ...）是二元符号。先按深度、再从左到右遍历每个节点，即可计算出一维列表，也就是前缀[2] 表示法；在这种表示法中，运算符置于表达式中相应操作数之前，从而无需使用括号。使用前缀表示法，并将称为词元的符号视为类别，我们便可以将任意表达式视为一个纯粹由类别向量构成的序列。例如，考虑一个由词元 $\{+, \cos\ x\}$ 构成的简易示例算子库，运算符 $+$ 可编码为 $[1, 0, 0]$, 函数 cos 编码为 $[0, 1, 0]$，变量 $x$ 编码为$[0, 0, 1]$。

与以往的深度符号回归研究一样（例如（Kamienny 等人 2022；Vastl 等人 2022；Petersen 等（2021a）；Du 等人 2022；DiPietro 与 Zhu 2022）），将数学表达式视为序列，使我们能够运用传统的自然语言处理技术对其进行采样。词元序列通过循环神经网络（RNN）生成；本质上，循环神经网络是一种可以多次调用以构建由相似运算组成的逻辑链的神经网络。每次调用时 $i < N$ （$N$代表最大步数），循环神经网络都会生成一个时变输出及相应的记忆状态 $S_i$。循环神经网络以某些随时间变化的观测$O_i$ [3] 以及上一次调用的状态 $S_{i-1}$作为输入。实际操作中，我们使用循环神经网络生成一个关于可用词元库的类别概率分布，然后直接从中采样，选取一个确定的词元。生成词元后，我们将生成有效解析表达式仍需的最少词元数（即悬空节点数）、该词元的属性及其周围元素的属性，作为下一次调用循环神经网络时的观测。具体而言，我们提供上一步采样所得词元的性质（因为循环神经网络无法获取这一信息，而该信息来自随机过程）[4], 树表示中待生成词元的兄弟节点（若此步存在）和父节点的词元；在我们 Φ-SO 框架中，还会加入这些词元的物理单位

[2]这也称为"波兰表示法"，可转换为树表示或我们更熟悉的"中缀"表示法，因为两者之间存在一一对应关系。[3]在强化学习的语境中，我们所说的"观测"是指与正在生成的表达式相关的上下文分析信息，而非用于拟合的科学数据。[4]不提供这些信息通常会影响性能。

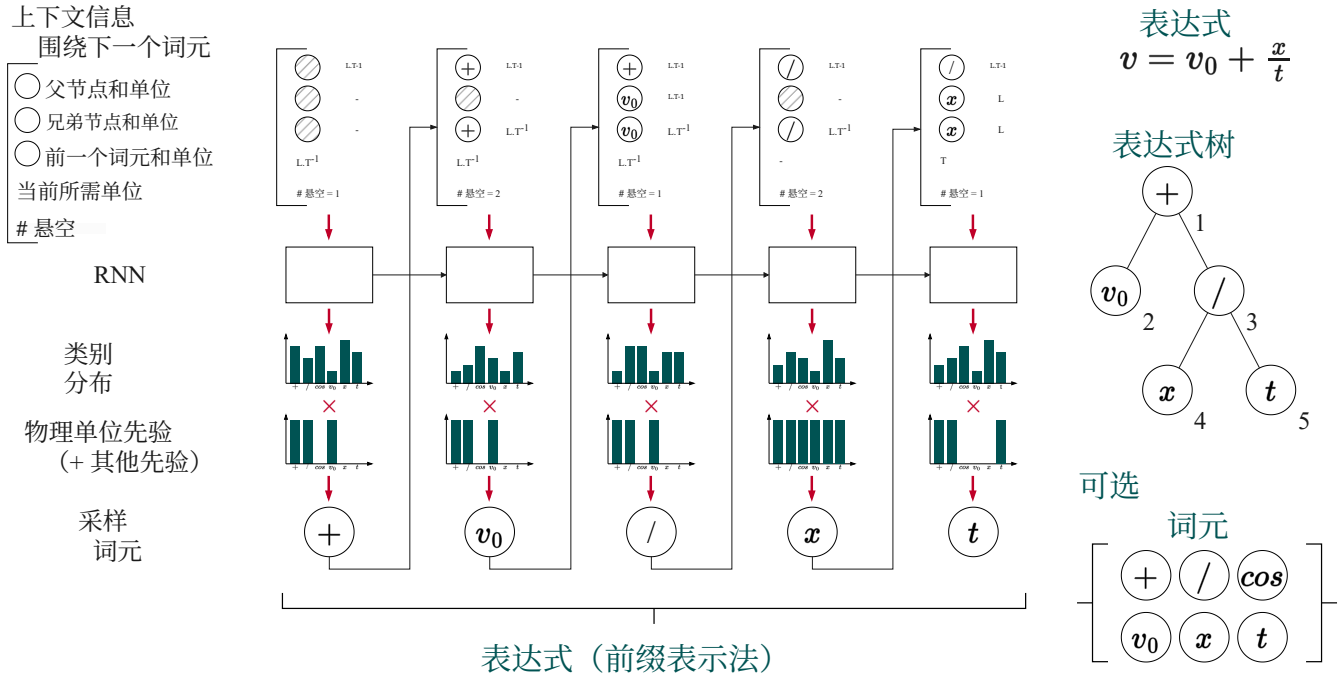



**图2.** 表达式生成示意图。该过程从左上方的循环神经网络模块开始。对于每个词元，循环神经网络都会获得关于待生成下一个词元周围环境的上下文信息，即父节点、兄弟节点和先前采样的词元及其单位、待生成词元所需的单位，以及悬空数（即生成有效表达式所需的最少词元数）。循环神经网络根据这些信息生成一个关于可用词元库的类别分布（上方的直方图），并产生一个状态，该状态会在其下一次调用时传递给循环神经网络。随后，根据局部单位约束对生成的分布进行屏蔽（下方的直方图），禁止会导致无意义表达式的词元。在本例中，从该分布中采样得到的词元为“+”。重复这一过程，从左向右生成，即可得到完整的物理表达式；此处为 $[+, v_0, /, x, t]$，用我们更熟悉的中缀表示法可写作 $v_0 + x/t$。

以及待生成词元所需满足单位规则的单位。这样一来，神经网络的内部机制在生成下一个词元时，不仅能考虑表达式的局部结构，也能考虑局部单位约束。上述过程可以重复多次，直至生成完整的词元函数前缀表示法，如图2所示。

需要指出的是，我们可以人为调整生成的类别分布，将先验知识融入其中，并在生成表达式的过程中即时实现。例如，可以根据正在生成的表达式树中编码的上下文，将某些词元的概率设为零，从而大幅缩小搜索空间（Petersen 等（2021a），b）。因此，我们采用先验来强制限制表达式的大小为 $< 35$ 个词元，并通过软长度先验鼓励表达式“简洁”：该先验采用方差为$\sigma^2 = 5$、中心位于长度 8 处的高斯分布；此外，还要求嵌套的三角运算不超过 2 层（例如，禁止 $\cos(f.t + \sin(x/x0 + \tan(\square)))$，但仍允许 $\cos(f.t + \sin(x/x0))$），禁止指数函数和对数运算符彼此嵌套（例如，禁止 $e^{e^{\square}}$），并禁止无用的逆一元运算（例如，禁止$e^{\log \square}$）。值得注意的是，我们采用的先验组合在某些情况下可能会相互冲突，此时我们会舍弃相应的候选项（例如，下文详述的物理单位先验可能要求使用一定数量的词元才能满足单位约束，这可能与长度先验要求提前终止表达式相冲突）。

除了上述取决于局部树结构（父节点、兄弟节点、祖先）的先验之外，我们的方法还能够纳入考虑整棵树结构的任何先验，而无需在每一步从头重新计算。这之所以可行，是因为不同于其他基于深度学习的符号回归算法，在 Φ-SO 框架中，我们会计算并跟踪树表示的完整图及其底层语法信息（例如单位、符号类型，如函数、

自由参数、固定常数，或某个符号所需的参数数量），并在生成表达式的过程中持续维护这些信息，因为它们是计算单位约束的关键要素，具体详见下文小节。请注意，这也使 Φ-SO 能够纳入任何未来依赖此类信息的先验。

### 3.2. 实时物理单位约束

我们的工作属于语法引导的符号回归这一更广泛的领域（Ali 等人 2022年；Brence 等人 2021年；Crochep- ierre 等人 2022年；Korns 2011年；Hoai 等人 2002；Manrique 等人 2009年；Worm 和 Chiu 2013），其目标是依据领域特定规则，约束数学表达式的符号排列。具体来说，如上所述，在物理学中，我们已经知道，由于单位约束，某些词元组合是不可能的。例如，如果算法正在生成一个表达式，其中速度（$v_0$）与长度（$x$）相加，而长度要除以一个尚待生成的词元或子表达式（□）：

$$v_0 + \frac{x}{\square}, \tag{1}$$

那么，根据表达式树（如图2所示），我们已经知道，□ 必须是一个时间变量，或一个最终具有时间单位的更复杂子树，但它绝不可能是长度，也不可能是对数函数等无量纲算子。

计算此类约束在序列生成过程中（即在不完整、仅部分采样的树中，其中包含空占位节点）要比事后检查给定方程的单位是否合理困难得多，因为在某些情况下，直到序列生成的后期才能计算此类约束，导致某些节点的单位不受限制（即在序列的当前阶段可与任意单位兼容）。例如，对于（二元）乘法运算符词元的左子节点，无法计算其单位要求 $\square \times \triangle$，因为左子节点中的任意单位 □ 都可以由 △ 右子节点中的单位抵消。根据表1中总结的量纲分析规则，我们设计了算法1。该算法给出了我们设计的过程的伪代码，以便在可能时计算所需单位，否则将其设为不受限制。该过程应用于位置 $i < N$ 处的不完整或完整词元序列 $\{\tau_j\}_{j<N}$，该序列大小为 $N$，并已知终端节点和根节点的单位（例如，分别为 $\{v_0, x, t\}$ 和 $\{v\}$，如图2所示）。序列可能部分由尚未确定性质的占位符号组成（表示悬空节点）。在每次生成词元之前运行算法1，便可获得

**算法1：原位单位约束算法 输入：不完整或完整的表达式 $\{\tau_j\}_{j<N}$，词元 $i$ 的位置输出：$i$ 处词元所需的物理单位 $\Phi_i$ 1 函数 ComputeRequiredUnits($\{\tau_j\}_{j<N}, i$)**

**2** $p \leftarrow$**PositionOfParent(**$i$**)3** $s \leftarrow$**PositionOfSibling(**$i$**)**

**4** $\Phi_p \leftarrow$**Units(**$\tau_p$**)5** $\Phi_s \leftarrow$**Units(**$\tau_s$**) 6 NodeRank** $\leftarrow 1$ **若为左侧节点则为 1，若为右侧节点则为 2 7 AdditiveTokens** $\leftarrow \{+, -\}$**8 MultiplicativeTokens** $\leftarrow \{\times, /\}$**9 PowerTokens** $\leftarrow \{1/\square, \sqrt{\square}, \square^n\}$**10 PowerValues** $\leftarrow \{1/\square: -1, \sqrt{\square}: 1/2, \square^n: n\}$**11 DimensionlessTokens** $\leftarrow$ **{余弦、sin、tan、指数函数、对数}12 若** $\tau_p$ **属于 AdditiveTokens 且** $\Phi_s$ **已知，则**

**13** $\Phi_i \leftarrow \Phi_s$**14 否则，若** $\neg\tau_p$ **属于 AdditiveTokens 且** $\Phi_p$ **未知、NodeRank 为 2 且** $\neg\Phi_s$ **未知，则 15 BottomUpUnitsAssignement(start** $= s$**, end** $= i - 1$**)**

**16** $\Phi_i \leftarrow \Phi_s$**17 否则，若** $\Phi_p$ **未知、** $\tau_p$ **不属于 MultiplicativeTokens 且** $\tau_s$ **不是占位符，则**

**18** $\Phi_i \leftarrow$**未知；19 否则，若** $i = 0$**，则20** $\Phi_i \leftarrow$ **Units(root) 21 否则，若** $\tau_p$ **属于 AdditiveTokens，则**

**22** $\Phi_i \leftarrow \Phi_p$**23 否则，若** $\tau_p$ **属于 PowerTokens，则**

**24** $n \leftarrow$ **PowerValues**$[\tau_p]$**25** $\Phi_i \leftarrow \Phi_p / n$**26 否则，若** $\Phi_p = 0$ **或** $\tau_p$ **属于 DimensionlessTokens，则**

**27** $\Phi_i \leftarrow 0$**28 否则，若** $\tau_p$ **属于 MultiplicativeTokens，则 29 若** $\tau_i$ **是占位符且** $\tau_s$ **是占位符，则30** $\Phi_i \leftarrow$**未知 31 否则，若 NodeRank 为 1，则32** $\Phi_i \leftarrow$**未知 33 否则，若** $\Phi_p$ **未知，则34** $\Phi_i \leftarrow$**未知 35 否则 36 BottomUpUnitsAssignement(start** $= s$**, end** $= i - 1$**) 37 若** $\tau_i$ **是** $\{\times\}$**，则38** $\Phi_i \leftarrow \Phi_p - \Phi_s$**；39 否则，若** $\tau_i$ **是** $\{/\}$**，则40** $\Phi_i \leftarrow \Phi_s - \Phi_p$**；41 返回** $\Phi_i$

量纲分析规则

| 表达式 | 单位 |
|---|---|
| $\tau_A \pm \tau_B$ | $\Phi_A$ 或 $\Phi_B$ |
| $-\tau_A$ | $\Phi_A$ |
| $\tau_A \times \tau_B$ | $\Phi_A + \Phi_B$ |
| $\tau_A / \tau_B$ | $\Phi_A - \Phi_B$ |
| ${\tau_A}^n$ | $n \times \Phi_A$ |
| $\mathrm{opo}(\tau_A)$ | $\mathbf{0}$ |

单位要求规则

| 表达式 | 要求 |
|---|---|
| $\tau_A \pm \tau_B$ | $\Phi_A = \Phi_B$ |
| $y = \tau_A$ | $\Phi_y = \Phi_A$ |
| $\mathrm{opo}(\tau_A)$ | $\Phi_A = \mathbf{0}$ |

**表1.** 用于强制执行的量纲分析规则。 $\tau_A$、 $\tau_B$、 $y$、 $\Phi_A$、 $\Phi_B$、 $\Phi_y$ 分别指两个节点、输出变量及其单位向量的幂次；opo 表示无量纲运算（例如 {余弦、正弦、指数函数、对数}），而 ${\tau_A}^n$ 表示任意幂运算（例如$1/\tau_A = {\tau_A}^{-1}$、 $\sqrt{\tau_A} = {\tau_A}^{\frac{1}{2}}$）。

按单位信息充分完善的表达式树图。

能够即时获取词元所需的物理单位，不仅使我们能够将对单位的预期告知神经网络，并向其提供周围词元的单位，从而让模型利用这些信息；还使我们能够为算子库设定先验分布。这样，算法便能将会导致表达式违反单位规则的禁用符号的概率置零。将该先验分布与表达式生成过程中循环神经网络给出的类别分布相结合，就能构建一种从设计上确保只有物理单位正确的表达式才能被构造并由神经网络学习的系统。

我们承认，Udrescu&Tegmark 2020在AI Feynman算法中曾尝试在符号回归的背景下考虑单位。AI Feynman 采用的方法是，先对变量进行变换，使其无量纲；这通常会减少变量的数量，并使算法能够生成物理量纲平衡的表达式。然而，如果该方法失败，算法便会恢复到原始问题设定。因此，AIFeynman 往往会转而拟合高阶多项式或复杂表达式。尽管这些表达式非常精确，但从量纲角度来看，它们缺乏物理意义；在无法找到完美拟合解时，从分析角度看，大多数情况下都是如此。例如，即使在它提出的较短表达式中，也能找到诸如 $K = 反正弦(0.169 * e^{-3.142*m+w})$这样的方程，其中 $K$、 $m$和 $w$ 分别表示费曼问题 I.13.4 中的能量、质量和速度（有关费曼符号回归问题的详情，请参见小节4.1）。相比之下， Φ-SO从设计上始终只生成物理上合理的表达式。与AI Feynman不同， Φ-SO通过在生成表达式时利用对函数形式的约束，处理有量纲数据，如表1所示。不过值得注意的是，像AIFeynman中采用的那样，将问题转化为无量纲形式是一种很有价值的方法，可以与任何符号回归方法配合使用，以确保输出不荒谬。

确实，可以认为，我们本可通过利用 Buckingham Π 定理（Buckingham1914），并借助变量和常数之间的乘法运算将其无量纲化，来处理符号回归中表达式的物理单位有效性问题。实际上，这种方法可以与任何符号回归框架结合，作为初步步骤加以采用（例如，见Matchev 等，2022；Keren 等，2023）。然而，尽管使用所谓的 Π 组可确保生成在物理上有效的表达式（因为所有项均变为无量纲），但这同时也消除了量纲分析所施加的约束，从而使符号回归过程更加复杂。值得注意的是，自然界（或者至少物理学）并非无量纲的，因此，在将变量和常数无量纲化的过程中会丢失信息，使我们无法利用与这些量纲信息相关的、对函数形式的强大约束。借鉴 Udrescu &Tegmark （2020年）中给出的示例，让我们考虑一个与目标表达式相关的数据集

$$F = \frac{G m_1 m_2}{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}\,. \tag{2}$$

将目标表达式转化为无量纲形式后，得到

$$y = \frac{\frac{m_2}{m_1}}{(\frac{x_2}{x_1} - 1)^2 + (\frac{y_2}{x_1} - \frac{y_1}{x_1})^2 + (\frac{z_2}{x_1} - \frac{z_1}{x_1})^2}\,. \tag{3}$$

虽然这种变换将输入变量的数量减少到 $\{\frac{m_2}{m_1}, \frac{x_2}{x_1}, \frac{y_2}{x_1}, \frac{z_1}{x_1}\}$，但也同时消除了固有的量纲分析约束。因此，符号回归算法可能会生成诸如 $\frac{m_2}{m_1} - \frac{x_2}{x_1}$ or $(\frac{x_2}{x_1} - 1)^2 + \frac{y_2}{x_1}$ 这样的表达式。相比之下，采用我们的原位约束时，长度只能与长度项相加，

平方长度也只能与平方长度相加；而为了满足表达式与力同质的要求，$Gm_1m_2$ 必须出现在分子中。本质上，尽管将变量变为无量纲可确保表达式符合物理规律，但同时也丢弃了对其函数形式颇有价值的约束。

最后，我们指出，在本文首次投稿后，出现了两种与我们的方法相似的方案：第一种与稀疏拟合方法配合使用（Purcell 等（2023）），第二种则与概率搜索方法配合使用（Brence 等（2023））。

### 3.3. 学习

人们或许会认为，可以利用现代机器学习框架的自动微分能力[5]，直接优化符号的选择来拟合问题，从而解决符号回归问题。不幸的是，这种方法无法用于符号回归，因为代价函数不可微（例如，选择正弦函数而非对数，无法对数据求导），因此不能使用梯度下降。一种实用的解决方案是将神经网络用作“中间媒介”，生成一个类别分布，并从中采样符号。随后，可以优化该神经网络的参数，使其根据拟合质量和物理单位约束生成这些符号。

生成符号分布的网络训练依赖于“强化学习”策略（Sutton 和 Barto（2018）），这是一种常用方法，用于训练人工智能智能体在电子游戏等虚拟世界中穿行[6]，或掌握开放式任务（Bauer 等（2023））。在当前语境下，其思路是生成一组试验性符号函数（在机器学习中通常称为“批次”），并通过将每个函数与数据进行比较来计算其标量奖励。然后，我们可以要求神经网络生成新一批试验函数，并通过强化与高奖励值相关的行为，鼓励它取得更好的结果；同时利用所谓的“策略”（即定量策略）近似梯度。我们希望通过反复试错，网络的可学习参数最终能够收敛到能够生成与数据良好拟合的符号函数的值。

遵循 Petersen 等人（2021a）的见解，我们采用风险偏好策略梯度，并结合 Landajuela 等人（2021b）提出的熵正则化方案。其核心是，我们只强化表现最好的 5% 候选解，而不会因神经网络提出其余 95% 的候选解而对其进行惩罚，因此，我们最大化的是表现最佳的少数候选解所获得的奖励，而非平均奖励。我们选用的批次大小为 10k，详见表 2；按照这一策略，排名靠前的 500 个候选解将得到强化。这使我们能够高效地探索搜索空间，代价是平均表现有所降低。在符号回归中，这一点尤为重要，因为我们通常最关心的是找到最优候选解；尤其是在目标为精确符号恢复时，我们并不在意神经网络的平均表现是否良好[7]。这种新颖的风险偏好策略受到（Rajeswaran 等人（2017年））的启发，并由 Petersen 等人（2021a）首次提出，显著提升了符号回归的表现。

值得注意的是，我们的方法不仅根据循环神经网络的输出，还根据由单位先验分布推导出的局部单位约束，对采样得到的候选项进行强化，从而确保词元选择具有物理正确性。因此，我们的方法能够以准监督学习的方式，有效训练循环神经网络依据局部单位约束作出恰当的符号选择。这与通用的强化学习范式相结合，使我们能够生成既准确又具有物理意义的符号表达式。

我们允许候选函数 $f$ 还包含用户指定固定物理单位的“常数”，但其数值可以自由取值。这些自由常数使我们能够对问题包含某些未知物理尺度的情况进行建模。星系动力学中的一个（略显牵强的）例子是：如果我们获得了某个未知函数的一组势值 $\Phi$ 以及柱坐标值 $(R, z)$，而该函数实际上是一个简单的对数势模型：

$$\Phi = \frac{1}{2} v_0^2 \ln\left(R_c^2 + R^2 + \frac{z^2}{q^2}\right), \tag{4}$$

其参数为速度参数 $v_0$、核心半径 $R_c$ 和势扁率 $q$。当然，我们通常无法预先知道正确解需要多少个参数，

[5] 大多数机器学习任务利用已实现模型相对于数据的可微性，实施（随机）梯度下降，从而寻找最优模型解，使其尽可能拟合数据。[6]例如，参见 https://www.youtube.com/watch?v=QilHGSYbjDQ

[7] 这与强化学习的许多其他应用（例如机器人自动化、电子游戏）截然不同；后者有时甚至需要风险规避梯度策略（例如自动驾驶汽车）（Rajeswaran 等人（2017））。

也无法预先知道这些参数的数值。然而，为了评估试探函数 $f$ 的损失，我们需要为其中可能包含的所有自由“常数”赋值。我们通过处理每个试探函数来完成这项任务：使用 Zhu等人（1997）提出的 L-BFGS算法优化例程，在 *PyTorch* 中进行优化（迭代 20 步，并采用均方误差指标），同时利用我们可以通过 $f$ 的 *PyTorch* 函数对符号进行编码这一事实。由于 *PyTorch*内置了自动微分功能，因此通过梯度下降寻找常数的最优值非常高效。

然后，与Petersen 等人(2021a) 一样，对于每个候选项$f$，我们计算一个能够代表拟合质量的奖励 $r$：$r = 1/(1 +$归一化均方根误差（NRMSE），其中 NRMSE 是均方根误差除以目标变量的偏差$\sigma_y$：~~NRMSE $= \frac{1}{\sigma_y}\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - f(\mathbf{x}_i))^2}$~~。我们使用 Adam 优化器Kingma & Ba(2015年) 来应用策略梯度，并采用长短期记忆（LSTM）类型的循环神经网络（RNN）（Hochreiter& Schmidhuber1997）。其他学习超参数见表2。值得注意的是，我们通过经验调优确定的批次大小（10k）大于Petersen 等人 (2021a) 使用的批次大小（1k）。我们认为，这是因为我们的 Φ-SO 设置施加了非常严格的约束，因此需要强有力的探索机制，以避免陷入局部最小值。这有助于确保模型不会因为不断强化局部最优表达式而过早收敛，而是继续寻找更多解，直至找到最理想的解。

同样值得注意的是，在强化学习框架中，奖励函数可以被视为一个黑箱，它不必是可微的，因此可以将任何东西用作奖励。例如，我们还可以将符号函数的复杂度纳入奖励函数，从而获得类似于奥卡姆剃刀的判据。但实际上，原则上可以将许多想法融入奖励函数中：对称性、对基本运算或导数的约束、微分方程中的适应度、使用外部软件包（例如 `Mathematica`（Wolfram（2003））或`SymPy`（Meurer 等，2017) 进行某些符号计算所得的结果、函数在N体模拟中实现时的行为，等等。需要注意的是，在本文的背景下，尽管还存在更复杂的复杂度定义方案（见

例如，Vladislavleva 等人（2009））我们将其简单定义为长度，即表达式中出现的词元数量（不包括括号），或树表示中的节点数量。

| 学习参数 | |
|---|---|
| 批次大小 | 10 000 |
| 学习率 | 0.0025 |
| 熵系数 | 0.005 |
| 风险因子 | 5 % |

**表 2.** 学习参数。

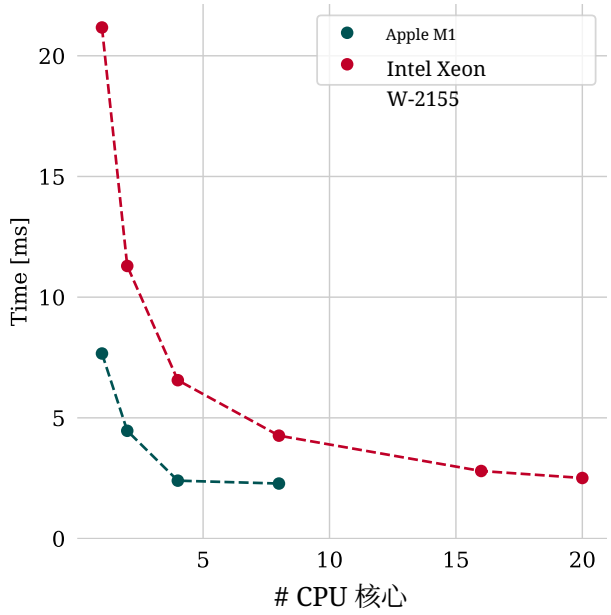



**图 3.** 在使用 $10^3$ 个数据点，通过 PhySO 算法在 Apple M1 笔记本电脑（一台配有 4 个快速 CPU 核心的机器）和 Intel Xeon W-2155 CPU（一台拥有大量核心的机器）上并行运行此任务 10 000 次时，经过 20 次迭代优化 $\{a, b\}$ in $y = a \sin(b.x) + e^{-x}$ 自由常数所需的计算时间。

### 3.4. 计算细节

由于每次迭代都要评估大量候选表达式，而且每个表达式都必须经过多次评估才能优化其自由常数，因此优化步骤是我们`PhySO` 算法的主要性能瓶颈之一。因此，我们对该步骤进行了批次并行处理，使得优化给定表达式的自由常数通常只需毫秒级的时间。图3展示了现实场景下的效率图。 [8]

此外，管理用于计算先验和传递给神经网络的上下文信息所必需的符号信息，也可能占用不可忽略的计算

[8]测试所用的 Apple M1 机器配有 4 个高性能核心和 4 个能效核心，这解释了将核心数增加到 8 个时观察到的停滞现象。

时间。因此，在 PhySO 中，这些运算会在方程长度和批次两个维度上进行向量化。

最后值得一提的是，在完成方程空间的探索后，PhySO 会保存帕累托前沿方程（即在拟合度与低复杂度之间取得平衡的最优解），包括总体最佳拟合方程、跨迭代的最佳拟合方程，并存储运行期间生成的所有方程的完整日志。

## 4. FEYNMAN 基准测试

为了验证我们 Φ-SO 方法的有效性，我们使用广为人知的费曼符号回归基准进行了基准测试。这组挑战最初由 Udrescu&Tegmark（2020年）提出，随后由 SRBench（La Cava 等人 2021）正式确立，包含 120 个方程，其中 100 个来自著名的《费曼物理学讲义》Feynman 等人 （1971），其余 20 个来自其他教科书: Goldstein 等人 2002； Jackson 2012； Weinberg 1972； Schwartz 2014。主要目标是在不同噪声水平下，仅利用给定数据点重新发现这些方程。

尽管该基准测试存在固有局限，例如将自然界常数（如 $G$、 $c$、 $\hbar$）和量子力学中的离散物理值视为连续变化的输入变量（这使得对 Udrescu &Tegmark(2020年) 提出的简化方案实现更加重要），但它全面展现了物理函数形式的多样性；由于大多数符号回归方法都已在其上进行了全面基准测试（见 La Cava 等人 2021），因此它仍是一个有价值的比较标准。

基准测试流程的详情见 4.1。精确符号恢复的结果见4.2，而拟合质量相关的结果见4.3。最后，我们在4.4中提供训练曲线。

### 4.1. 基准测试流程

我们严格遵循了 SRBench中由 La Cava 等人 (2021年) 所规定的协议，将 PhySO 算法设置为针对每个费曼基准测试方程对应的 10,000 个数据点识别拟合表达式。 PhySO每次运行最多只能评估一百万个表达式；评估精确符号恢复时，则确保 PhySO 生成的表达式与目标表达式之差化简为常数，或通过 SymPy 将该分式化简为常数

用于符号数学的 SymPy 算子库（Meurer 等，2017年）。此外，使用 $R^2$ 指标评估拟合质量，该指标定义为 $R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - f_i(\mathbf{x}))^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y})^2}$，并在~~100,000~~个无噪声测试数据点上计算。按照基准测试规则，为确保稳健性，每个方程均重复执行此流程多次（由于此类基准测试的计算需求相当高，此处选择进行 5 次试验，而非 10 次）；每次试验使用唯一的随机种子，随后对恢复率取平均值。按照 SRBench 的规定，方程 I.26.2、I.30.5 和测试 10（包含反余弦和反正弦函数）以及 II.11.17 未纳入结果。整个基准测试在四种噪声水平下进行：0%、0.1%、1% 和 10%，共评估了 2,320,000,000 个表达式。

我们使用 PhySO 运行实验，采用第 3 节给出的超参数和奖励指标（值得注意的例外是三角函数先验，其最大嵌套层数设为 1），并允许使用 $\{+, -, \times, /, 1/\square, \sqrt{\square}, \square^2, -\square$, 指数函数、对数、余弦、正弦$\}$，以及两个无量纲可调自由常数和一个等于 1 的常数 $\{\theta_1, \theta_2, 1\}$。每次运行后，我们检查了帕累托前沿中准确性最高的若干个表达式。这对仅遇到简化难题的 SymPy 案例有所帮助，使恢复率提高了约 1%，幅度虽小但有所裨益。值得注意的是，尽管费曼数据集为每个变量提供了单位信息，PhySO却是自 Udrescu& Tegmark (2020年) 引入该数据集以来，唯一利用这一特征的方法，这体现了其独特的物理学专用设计。为确保可复现性，我们提供了使用 PhySO 运行基准测试所需的全部代码，以及每次运行的详细 SRBench风格结果。

我们将所提出的 Φ-SO 方法与其他已报告精确符号恢复率的符号回归算法进行比较，相关数据见（La Cava 等人 2021）和（Landajuela 等人 2022）。这些算法总结于表3中。值得注意的是，其中包括一种类似于AFP FE aEureqa的方法，该方法由同一批作者提出，将AFP与Eureqa的适应度估计方法相结合（La Cava 等人 2021），我们将其记为AFP FE (∼ Eureqa）。在La Cava 等人 2021中，DSR (Petersen 等（2021a）) 在生成表达式时不得使用任何自由参数，这极大地限制了其能力；因此，我们还将最新版本的DSR (Landajuela 等（2021b）) 的表现纳入考量。该表现由Landajuela 等人(2022年) 在消融研究中自行报告，并采用了更合适的超参数，可作为基线。不过，

| 方法 | 技术 | 描述 | 参考文献 |
|---|---|---|---|
| PhySO | 强化学习，差分进化 | 物理符号优化 | 本研究 |
| uDSR | 强化学习，遗传编程，简化，监督学习 | 深度符号回归的统一框架 | Landajuela 等人 （2022年） |
| AIFeynman 2.0 | 简化，差分进化 | 利用图模块性的符号回归 | Udrescu 等人 （2020年） |
| AFP 特征工程 | GP | 采用协同进化的适应度估计的 AFP，类似 Eureqa | Schmidt& Lipson (2009年) |
| DSR | RL | 深度符号回归 | Petersen 等人(2021a) |
| AFP | GP | 年龄-适应度帕累托优化 | Schmidt& Lipson (2011年) |
| gplearn | GP | Python 中的 Koza 风格符号回归 | Stephens (2015年) |
| GP-GOMEA | GP | 遗传编程最优混合进化算法 | Virgolin 等人（2021年） |
| ITEA | GP | 交互-变换进化算法 | de Franca & Aldeia(2021年) |
| EPLEX | GP | $\epsilon$-词法选择 | La Cava 等人（2019年） |
| NeSymReS | Sup. | 可扩展神经符号回归 | Biggio 等人（2021年） |
| Operon | GP | 带非线性最小二乘的符号回归 | Kommenda 等人(2020年) |
| SINDy | NeuroSym | 非线性动力学稀疏辨识 | Brunton 等人(2016年) |
| SBP-GP | GP | 语义反向传播遗传编程 | Virgolin 等人(2019年) |
| BSR | MCMC | 贝叶斯符号回归 | Jin 等人(2019年) |
| FEAT | GP | 特征工程自动化工具 | Cava 等人(2019年) |
| FFX | 随机 | 快速函数提取 | McConaghy (2011年) |
| MRGP | GP | 多元回归遗传编程 | Arnaldo 等人 (2014) |

**表 3.** 基线符号回归方法概述及其所依赖的底层技术：强化学习（强化学习）、遗传编程（遗传编程问题简化方案（简化）、端到端监督学习（监督学习）、量纲分析（差分进化）、基于神经符号/自动微分的稀疏拟合技术（NeuroSym）、马尔可夫链蒙特卡罗（马尔可夫链蒙特卡洛）和随机搜索（Rand.）。

我们注意到，在解读这项额外的DSR性能数据点，以及SINDy、NeSymReS和uDSR的表现时应保持谨慎，因为现有数据仅提供了它们在复合数据集上的最终得分。该数据集涵盖费曼基准和 Strogatz 基准（La Cavaet al. 2016），后者约占总分的 5%。本节所有图表展示的均为这一汇总得分。此外，SINDy 和NeSymReS接受基准测试时的具体条件尚不清楚；而对于uDSR 和额外的DSR数据点，基准测试分别允许评估最多 200 万和 50 万个表达式，与其他方法设定的 100 万个上限不同。此外，这些方法的详细结果（尤其是它们识别出的具体表达式）无法获取，因此在涉及表达式指标（复杂度或自由参数数量）的比较分析中无法纳入这些方法。尽管按照SRBench 的规则，我们允许所提方法评估最多 100 万个表达式，而DSR最多评估 50 万个，但PhySO 通常在达到这一上限之前就能识别出正确表达式，否则便完全无法识别。此外，尽管DSR的 42% 得分受到另一项基准测试的影响，但这一影响很小，仅占 5%。这一外部基准测试相对简单，DSR 即使没有自由参数，也能达到约 25%（La Cava 等人 2021），这表明它对总分的影响有限。因此，我们认为，直接比较 PhySO 的得分与DSR 在 Landajuela 等人 (2022年) 中的得分是合理的，尤其是考虑到下一小节详细介绍的性能差距。

### 4.2. 精确符号恢复

图4 展示了PhySO在 Feynman 基准测试中与表3中的基线算法相比的性能。结果包括不同噪声水平下的平均精确符号恢复率、准确表达式率（定义为拟合系数 $R^2 > 0.999$）以及考虑表达式中自由参数数量后的归一化准确表达式率。与DSR严格依赖强化学习不同，PhySO 同时采用强化学习和量纲分析。鉴于DSR的得分约为 42%，我们的方法得分达到 58.5%，突显了引入量纲分析带来的显著益处。在物理学领域，精确符号恢复率是至关重要的指标；考虑到真实世界物理数据通常带有噪声，算法抵御噪声的能力也同样关键。然而，即使噪声水平仅为 0.1%，

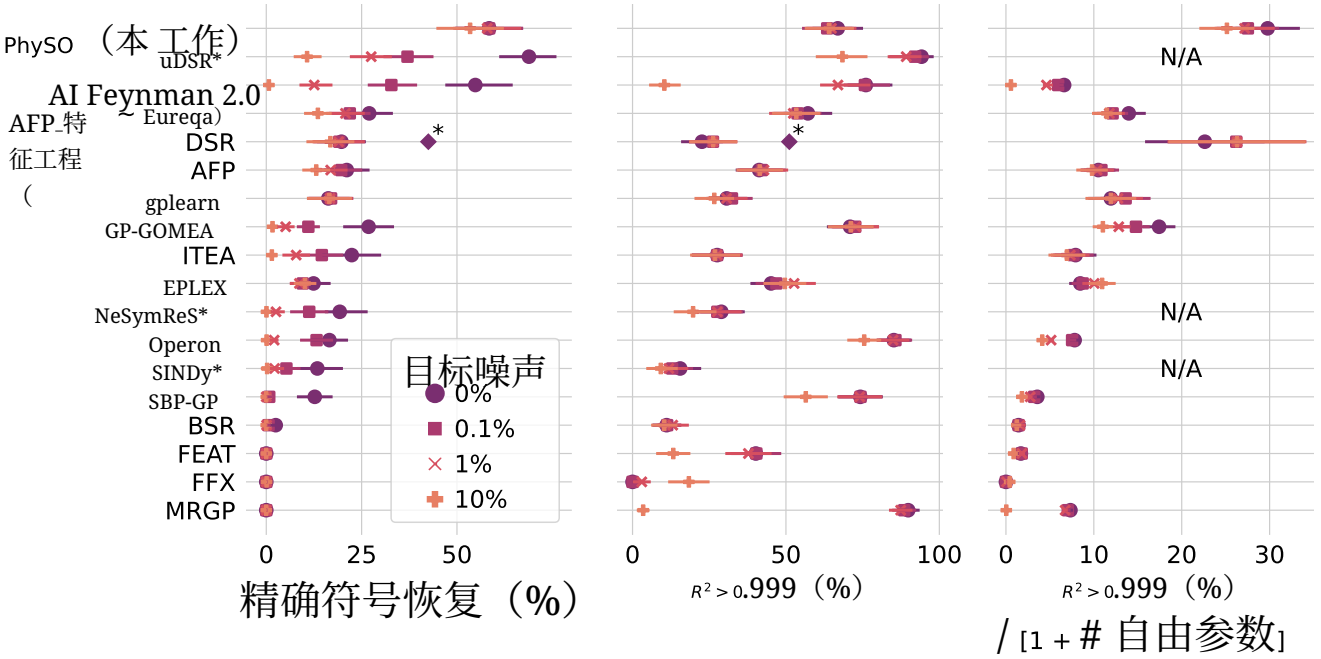



**图 4.** 精确符号恢复率、准确表达式（具有 $R^2 > 0.999$）的比率，以及按表达式中出现的自由参数数量归一化后的相同比率，展示了 PhySO 及其他基线方法在费曼基准测试上的表现。即使噪声水平极低，PhySO 在符号恢复方面也远超所有其他方法（$> 0.1\%$）。此外，对比 DSR （纯强化学习方法）与我们的实现 PhySO （结合强化学习与量纲分析）时，可以清楚地看到我们 Φ-SO 方法中量纲分析方案的有效性。误差条表示 95%置信区间，♦ 表示 DSR （Landajuela 等（2021b））在 Landajuela 等人 （2022年）中报告的无自由常数限制下、基于无噪声数据得出的表现；* 表示基准测试条件可能有所不同，且评分中约有 5% 的结果来自另一项基准测试。

许多表现出色的方法，其恢复率几乎减半。相比之下，PhySO 的性能始终稳定。值得注意的是，在噪声水平为 10% 时，大多数方法的恢复率都降至 20% 以下，即使是 uDSR 和 AI Feynman 2.0 这样的高性能方法，得分也分别只有 10.7% 和 0.7%；而 PhySO 仍能在超过 53% 的情况下准确恢复表达式。

在无噪声场景中，PhySO 仅次于 uDSR；后者综合运用了五种最强大的符号回归技术：利用强化学习进行迭代调整，利用遗传编程增强随机化与探索，利用监督学习借助已有知识，采用神经符号风格的稀疏系数拟合来处理其线性符号模块，以及强大的简化策略——这些策略类似于 AI Feynman 2.0 所采用的策略，而 AI Feynman 2.0 的表现仅略逊于 PhySO。这些技术依赖于对可分离性的利用（例如，将搜索 $f(x_1, x_2)$ 简化为搜索更简单的函数 $f_1(x_1)$ 和 $f_2(x_2)$，其中 $f(x_1, x_2) = f_1(x_1) + f_2(x_2)$），对称性（例如，将搜索 $f(x_1, x_2)$ 简化为搜索 $f_1(x_1, x_2)$ 和 $f_2(x_2)$，其中 $f(x_1, x_2) = f_1(x_1, f_2(x_2))$）以及许多其他规避基准测试中复杂函数形式的方案。尽管仅依赖强化学习和量纲分析，在无噪声数据上，PhySO 仍可与 uDSR 媲美并超越 AI Feynman 2.0，展现了我们方法的有效性。

值得注意的是，尽管前述 AI Feynman 风格的“分而治之”简化策略十分有效，但它们对噪声极其敏感，而在这种情况下，PhySO 的方法仍能保持稳定。总而言之，该基准测试表明，将量纲分析约束纳入符号回归能够显著提升性能。鉴于引入单位约束使 PhySO 相较于 DSR 有了明显改进，同时考虑到 uDSR 在无噪声场景中的出色表现，我们认为，将 Φ-SO 与 uDSR 结合起来或许能进一步提升结果。

### 4.3. 拟合质量

在表达式占比达到 $R^2$ >0.999方面，许多方法通过引入大量自由常数来取得高分，导致表达式复杂繁冗，往往缺乏可解释性，并且

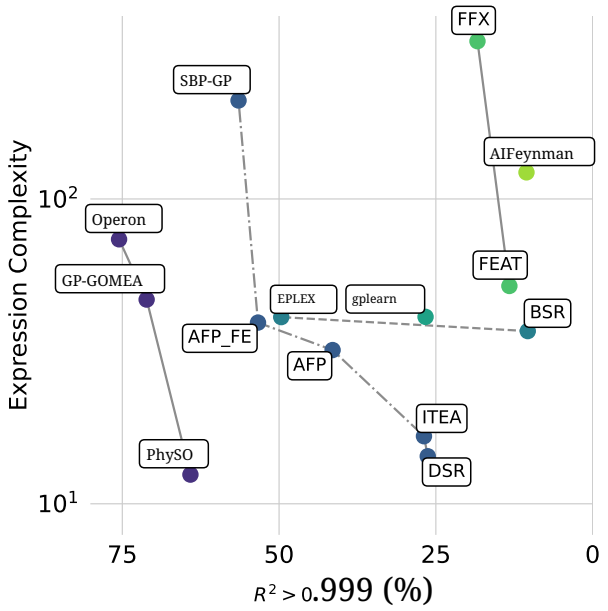



**图5.** 表达式复杂度与具有 $R^2 > 0.999$ 在 PhySO 及文献中其他符号回归方法在费曼基准测试上的 10% 噪声水平下的速率（La Cava 等人 2021年）。线条和颜色表示 $1^{st}$、$2^{nd}$、$3^{rd}$、$4^{th}$、$5^{th}$ 和 $6^{th}$ 帕累托前沿，遵循 SRBench 算法比较框架。PhySO 是帕累托最优解，能够生成简单而有效的表达式。

从量纲分析的角度来看毫无意义。例如，AI Feynman 2.0在未能识别出精确的符号表达式时，往往会采用蛮力多项式拟合方法，生成复杂的表达式；简化后，这些表达式平均包含 147 个符号和 18 个自由常数。同样，Operon [9]和MRGP 生成的表达式在 10% 噪声水平下，简化后平均分别包含 17 个和 88 个自由常数。在许多不以人工可解释性为优先考量的领域，这并非问题。然而，鉴于这一标准在物理学中的重要性，我们还在图4中展示了准确表达式的比率，并按自由常数数量加 1 进行归一化。PhySO 是表现最佳的方法，能够生成简洁、符合物理规律且可解释的表达式，以最佳方式近似数据集；也就是说，即使它无法完整恢复精确的底层表达式，仍能做到这一点。

图 5进一步展示了这一点，其中我们给出了所有参与基准测试的方法在噪声水平为 10% 时，表达式复杂度与拟合质量之间的帕累托前沿

[9]需要指出的是，Operon 最近的一项改进（参见Burlacu (2023年）使其能够生成更简单的表达式；这项改进是在我们论文首次投稿后推出的。我们预计这一改进版本在费曼基准测试上的表现会更好。

对于具有可用输出表达式信息的方法。在该图中，PhySO 是帕累托最优解，表明它能够生成简单且拟合效果良好的表达式。

### 4.4. 学习曲线

由于其先天的强约束性，使用一个尚未训练的神经网络时，我们的原位 单位先验常与长度先验相冲突，而长度先验对于避免表达式生成阶段无限持续至关重要。这通常会导致训练过程的前几次迭代中，大多数表达式因这种冲突而被丢弃。然而，让神经网络在物理正确的表达式上学习，并使其能够观测局部单位约束，就能让它主动学习量纲分析规则。如图 6所示，该图给出了在每种噪声水平下，对费曼基准测试所有运行结果取平均后，成功生成的物理表达式比例随学习迭代次数的变化。

此外，图6展示了在每次迭代中识别出的最佳表达式在 $R^2$训练数据上的拟合系数演变情况。该图表明，随着迭代推进，神经网络不仅提高了生成拟合效果更佳的表达式的能力，还增强了生成具有物理意义的表达式的能力。

根据我们的观测，尽管 Φ-SO偶尔会通过随机变化跳出局部最小值，但收敛通常表现为神经网络大多生成相同的表达式。这种收敛状态通常体现为平均拟合质量和物理表达式比率保持不变，同时奖励分布达到峰值。收敛速率取决于案例的难度、噪声水平以及所选的超参数。如图6所示，在本研究详述的超参数设置下， Φ-SO通常在数百次迭代以内即可达到收敛。请注意，由于其在强化学习框架中运行， Φ-SO是在“移动目标”上进行训练的，因为其目标由自身在上一次迭代中生成的表达式构成；其特征是在训练过程中损失不会下降，除非其在收敛时开始持续生成相似的方程。

## 5. 天体物理学案例研究

现在，我们通过一系列天体物理学测试案例展示 Φ-SO 方法：在第 5.1 小节中考察粒子的相对论能量，在第 5.2 小节中考察描述宇宙膨胀的定律，在第 5.3 小节中考察星系动力学中的等时线作用量，并在5.4 节中给出其他玩具测试案例。我们将

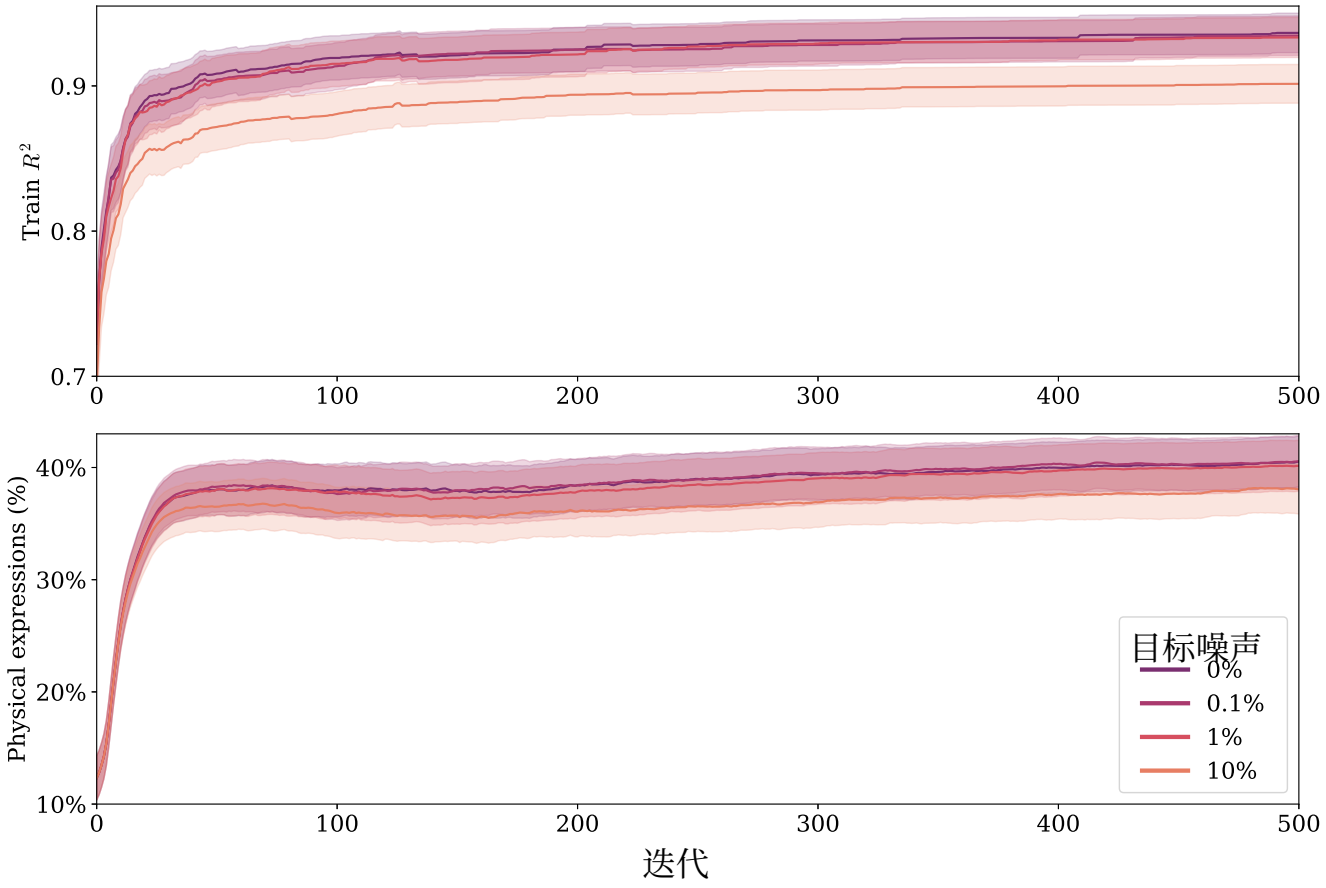



**图6.** $R^2$ 在费曼基准测试中取平均值的训练数据上的值，以及神经网络原生提出且物理单位平衡的表达式所占百分比；误差区域表示95%置信区间。 Φ-SO 的神经网络学会生成的不仅是拟合效果良好的表达式，也是具有物理意义的表达式。

结果以及消融研究也将在第 5.5 节中给出。我们会禁用系统中的特定组件，以确定它们对性能的影响。在无噪声情形下，我们使用模拟数据进行这项消融研究，但仍将 Φ-SO 在第 5.2 小节详述的案例中处理观测噪声数据的能力展示出来，表明该方法能够从真实数据或合成数据中成功恢复物理定律及其关系。模拟数据的生成细节见附录 A ，其中还列出了涉及的所有变量和常数的单位。请注意，对于这些展示案例，我们都会将附录A 中所述的自由常数及其单位明确加入 Φ-SO 的可用词元库中。我们使用第 3 节详述的超参数和奖励指标，并将搜索范围限制为 1000 万个候选表达式；这大约需要 ∼ 4 小时（使用图 3 所示系统的所有核心），且只有最困难的案例（相对论能量）才需要如此搜索。此外，对于相对论能量的展示案例，我们给出了帕累托前沿，其中展示了最基于每种复杂度下的均方根误差（RMSE）确定准确的表达式。此外，与第4节的基准测试类似，我们通过使用 `SymPy` 符号化简子程序（Meurer 等，2017）判断表达式是否成功实现精确符号恢复。最后，我们对所有测试用例统一采用相同的可选词元库：$\{+, -, \times, /, 1/\square, \sqrt{\square}, \square^2,$ 指数函数、对数、余弦、正弦 $1\}$仅根据测试用例添加输入变量以及自由常数或固定常数。

### 5.1. 粒子的相对论能量

我们来考察粒子的相对论能量表达式：

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \tag{5}$$

其中， $m$、 $v$ 和 $c$ 分别表示粒子的质量、速度和光速。

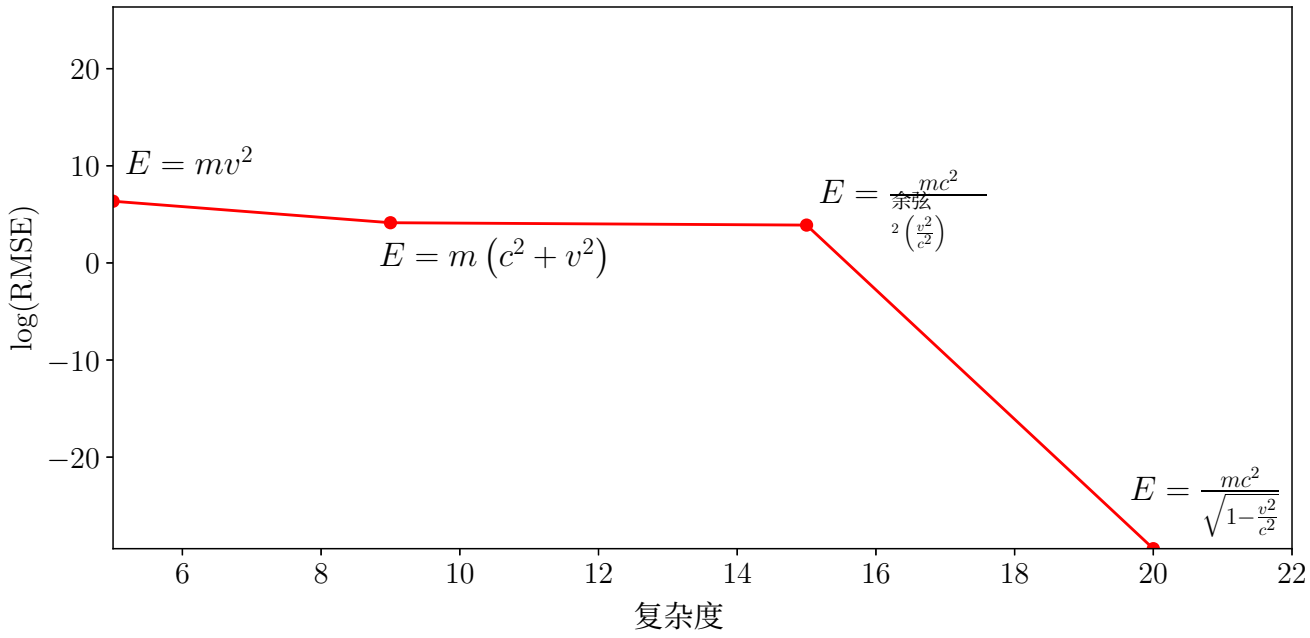



**图7**。 当将我们的 Φ-SO 方法应用于粒子相对论能量的数据时，通常恢复出的物理公式的帕累托前沿编码了精度—复杂度权衡。我们恢复出了相对论表达式以及经典近似。请注意，尽管 Φ-SO 遇到了精确的经典表达式 $\frac{1}{2}mv^2$，但它被更简单的 $mv^2$ 表达式帕累托支配。

使用前述词元算子库以及 $\{m, v\}$ 输入变量和一个自由常数 $\{c\}$， Φ- SO 能够在 100% 的情况下成功恢复该表达式。图7 展示了恢复出的表达式的帕累托前沿。与Udrescu 等人(2020年类似，我们展示了能够恢复粒子的相对论能量，以及复杂度较低的经典近似。

然而，我们注意到，我们的系统能够为相对论能量测试案例恢复出精确表达式，而无需依赖 `AI Feynman 2.0` 方法（由 Udrescu 等人 2020提出）所采用的任何强大简化手段（特别是识别对称性以及识别加性和乘性可分性），也无需通过将问题进一步简化为把 $c$ （一个自然界常数）视为取一系列不同值的变量，如（ Udrescu 等人 2020）中所述。无论是 `DSR` （ Landajuela 等（2021b））还是`AI Feynman` （ Udrescu 等人 2020）都无法在这些更严格的条件下破解这一案例。

### 5.2. 宇宙膨胀

接下来我们考察的案例是 Ia 型超新星的哈勃图，即这些重要标准烛光的观测光度随红移变化的关系 $z$。这是表明宇宙正在经历加速膨胀的重要证据之一，也是支撑 ΛCDM 冷暗物质（ΛCDM）宇宙学的观测支柱之一。在这种宇宙学模型中，暗能量主导着宇宙的能量密度预算。

我们将使用所谓的 *Pantheon* 最先进水平的汇编数据集（Scolnic 等（2018年）），如图 8所示。我们采用类似的校准方法，并遵循与 Bartlett 等人 (2023年) 几乎相同的方法，根据测得的超新星星等和红移数据对，求得哈勃参数 $H(z)$。遵循 Bartlett 等人 (2023年)，我们使用辅助函数

$$y(x \equiv 1 + z) \equiv H(z)^2\,, \tag{6}$$

对于辐射压可忽略的平直宇宙中的 ΛCDM，其表达式为

$$y_{\Lambda\mathrm{CDM}}(x) = H_0^2(\Omega_m x^3 + (1 - \Omega_m))\,, \tag{7}$$

其中，$\Omega_m$ 为物质密度参数， $H_0$ 为哈勃常数。在平直宇宙模型中，宇宙学光度距离为

$$d_L(z) = (1 + z)\int_0^z \frac{c\,dz'}{H(z')}\,, \tag{8}$$

其中， $c$ 为光速。

我们通过对 $H(z \equiv x -$

| 表达式 | 复杂度 | $\widetilde{H}$ | $\theta$ | $R^2$ |
|---|---|---|---|---|
| $\widetilde{H}^2\sqrt{\theta^2 + \text{对数}\ (\theta + x)}$ | 14 | 5.175 | -0.01 | 0.9955 |
| $\widetilde{H}^2\sqrt{\theta + x}$ | 9 | 4.692 | -1.01 | 0.9946 |
| $\widetilde{H}^2\ \text{对数}\ (x)$ | 6 | 7.499 | - | 0.9627 |
| $\widetilde{H}^2\ \text{对数}\ (x)^{\ 2}$ | 8 | 28.276 | - | 0.9523 |
| $\widetilde{H}^2\ (\theta x^3 - \theta + 1)$ [a] | 14 | 73.3 | 0.315 | 0.9166 |

[a] ΛCDM 参考表达式

**表4.** 帕累托精度-复杂度权衡表达式（针对辅助函数 $y(x \equiv 1 + z) \equiv H(z)^2$），采用 Φ-SO 算法（允许两个参数）处理来自 *Pantheon* 样本的 Ia型超新星哈勃图。尽管 Φ-SO 生成了 ΛCDM 表达式，但仅考虑 *Pantheon* 的观测约束时，由于低红移 z 超新星过多，它并非帕累托最优解。我们将其作为参考列在本表最后一行。

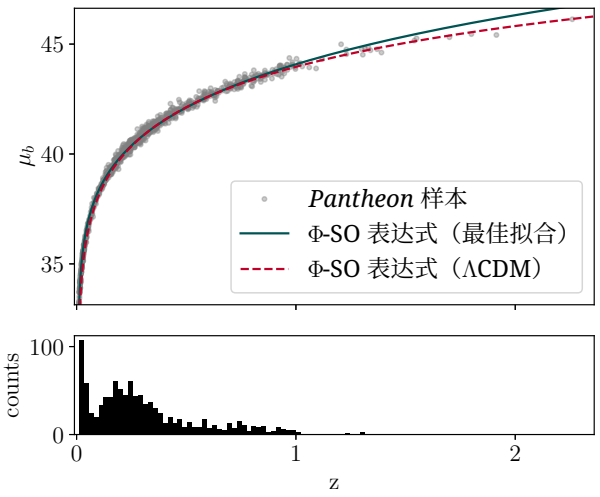



**图8.** 将 Φ- SO 算法（允许两个自由参数）应用于来自 *Pantheon* 样本的 Ia型超新星哈勃图时的符号回归结果。 Φ-SO 重新发现了 ΛCDM 关系（红色），以及另一种关系（蓝色）；仅考虑 *Pantheon* 的观测约束时，由于低红移 z 超新星过多，后者的拟合效果略优于 ΛCDM。

1) $= \sqrt{y(x)}$ 算法根据式子提出的函数——8 所隐含的光度距离 $d_L$。随后可直接将其转换为距离模数$\mu(z)$ $= 5$对数$_{10}(d_L(z)/10\,\text{pc})$，并按照小节中给出的流程，将其与*Pantheon* 数据进行比较 3.3。

这个哈勃图示例展示了该软件在表达式搜索中纳入自由“常数”的能力（此处我们纳入了一个具有 $H_0$ 单位的常数，另一个则是无量纲的 $\Omega_m$）；如第3.3节所述，这些常数的值通过 L-BFGS优化中的自动微分求得。对这些常数进行优化时，必须在数值积分步骤（通过 PyTorch 的 可微分累积梯形积分计算 Eqn. 8）之后进行，这最终成为该问题在计算成本方面的主要瓶颈。不过，这也表明，该算法能够推导出表达式，并在与数据进行比较之前，将这些表达式传入复杂的运算中。

帕累托前沿见表 4 ，同时列出了ΛCDM 表达式。尽管我们能够利用合成数据恢复该表达式，但正如 Bartlett 等人(2023年) 所示，使用观测数据时，我们的系统发现了比 ΛCDM 模型复杂度更低且更准确的解。尽管这可能意味着 ΛCDM 理论并不准确，但我们暂不贸然得出这一结论，因为我们的系统只能将其对 $H(z)$ 的试探模型与一个相对嘈杂的标准烛光数据集进行比较，而该数据集中低红移事件过多；此外，系统也未获得宇宙微波背景等其他观测约束，这些约束可能会使天平倾向于支持 ΛCDM，认为它是在相应复杂度水平下最准确的模型。然而，尽管在这组观测约束下， ΛCDM 表达式并非全局最小值，但在探索一系列日益准确的表达式时，我们的系统将其识别为一个中间步骤，并将其记录在搜索历史中，随后最终收敛到另一个表达式。此外，我们允许的自由参数最多为两个，因此系统能够恢复 ΛCDM 表达式并不令人意外，因为我们的主要目标只是展示系统的能力。多参数研究将留待未来工作。最后，我们通常通过探索 $< 50$k 个表达式来恢复该表达式（在图 3所示的系统上耗时不到一分钟），这与 Bartlett 等人 (2023年) 提出的穷举符号回归方法所需的表达式数量级相同，但我们允许使用更多函数（余弦、正弦、指数函数、对数）。

### 5.3. 星系动力学中的等时线作用量

符号回归的另一个有趣应用，是推导物理系统解析模型的精确解析性质。为此，我们尝试求解球对称等时线势的径向作用量 $J_r$ 。

$$\Phi(r) = -\frac{GM}{b + \sqrt{b^2 + r^2}}, \tag{9}$$

其中 $G$为引力常数， $M$ 为模型的质量， $b$ 为模型的长度尺度，而 $r$ 为球半径（Binney & Tremaine 2011年）。作用量变量是可积势中的特殊运动积分，可用于描述系统中物体的轨道。它们在星系考古学中特别重要，因为它们是绝热不变量，因此当星系或恒星系统缓慢演化时，其值会保持不变。等时线势模型是唯一一个其作用量可用初等函数解析表示的势模型[10]。对于等时线模型，粒子的径向作用量分量可表示为

$$J_r = \frac{GM}{\sqrt{-2E}} - \frac{1}{2}\left(L + \frac{1}{2}\sqrt{L^2 - 4GMb}\right), \tag{10}$$

其中 $E$ 和 $L$ 分别为粒子能量和总角动量（Binney & Tremaine 2011年）。

我们提供算法，根据 $L$ 和$E$计算 $J_r$的数值（其单位为角动量），并将 $b$留作自由缩放参数。由于我们预计每次出现 $M$ 时都会伴随引力常数，因此将 $GM$ 作为单一变量提供给算法。

这个表达式（方程 10）既无法通过标准的DSR 算法（Landajuela 等（2021b））求解，也无法通过AI Feynman 2.0 算法（Udrescu&Tegmark2020）求解。我们的算法在尝试了 1000 万次猜测后，也未能识别出该方程。不过，AI Feynman 2.0 算法的其中一个步骤是检验未知函数的加性可分离性和乘性可分离性，并为每个可分部分创建新的数据集。对于加性可分离的情况，单位保持不变，因此只需将由 Φ-SO 算法分离的数据依次提供给我们的AI Feynman 2.0算法进行拟合即可。这样，方程 10 右侧第一项（具有 $E$ 依赖关系）便很容易得到求解，同时还能拟合出一个加性自由常数。随后，我们从第二个数据集中减去拟合得到的常数， Φ-SO 便正确地还原了方程 10 右侧的第二项（具有 $L$依赖关系）。

[10]我们最近已经证明，可以利用深度学习技术，根据现实星系势中轨道上的点样本数值计算作用量（Ibata 等，2021）。

### 5.4. 补充案例

除上述案例外，我们还考虑以下一组教科书方程，用于5.5中的消融研究。我们纳入牛顿万有引力定律：

$$F = \frac{Gm_1m_2}{r^2}, \tag{11}$$

其中， $G$ 是万有引力常数， $m_1$ 和$m_2$ 是相互吸引的物体的质量， $r$ 是它们之间的距离。对于这一测试案例，我们使用$\{m_1, m_2, r\}$ 作为输入变量，并将 $G$ 设为自由常数。

我们还纳入了一个阻尼谐振子，它广泛出现在（天体）物理学背景中：

$$y = e^{-\alpha t}\cos(\omega t + \Phi), \tag{12}$$

其中， $\alpha$ 和 $\omega$ 分别是阻尼参数和振荡的角频率（二者的量纲均为时间的逆量纲）， $\Phi$是（无量纲的）相位。我们将这三个参数设为自由常数，并使用 $t$ 作为输入变量。

最后，我们考虑一种 Navarro–Frenk–White（NFW）暗晕剖面（Navarro 等人，1996 年），这是一种用于描述宇宙学 N 体模拟中无碰撞暗物质暗晕密度剖面的经验关系： $\rho(r)$

$$\rho = \frac{\rho_0}{\frac{r}{R_s}\left(1 + \frac{r}{R_s}\right)^2}, \tag{13}$$

其中， $r$ 是我们用作输入变量的半径， $\rho_0$ 和 $R_s$ 分别是密度和半径尺度参数，我们将它们设为自由常数。

### 5.5. 消融研究

在物理学中，我们常常希望构建近似模型，例如通过对某些数据进行多项式函数拟合或傅里叶级数拟合来获得模型。在这些情况下，均方根误差通常是判断该方法效果好坏的相关标准。然而，在这里，我们希望恢复“真实”的底层模型，因此恢复率应作为衡量成功与否的标准。

在上述测试用例的无噪声模拟数据上， Φ-SO 的性能汇总于表 5 所报告的消融研究中。我们还报告了符号回归

| 消融配置 | | A [a] | B | C | D [b] | E | F [c] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 物理单位先验 | | ✓ | | ✓ | | ✓ | |
| 物理单位信息神经网络 | | ✓ | ✓ | | | | |
| 已启用神经网络 | | ✓ | ✓ | ✓ | ✓ | | |
| 表达式 | 表达式数量 | | | | | | |
| $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ | 10M | 100 % | 0 % | 60 % | 0 % | 20 % | 0 % |
| $J_r = \frac{GM}{\sqrt{-2E}} - \frac{1}{2}\left(L + \frac{1}{2}\sqrt{L^2 - 4GMb}\right)$ | 4M | 100 % | 0 % | 80 % | 0 % | 60 % | 0 % |
| $\rho = \rho_0 / \left(\frac{r}{R_s}(1+\frac{r}{R_s})^2\right)$ | 2M | 100 % | 100 % | 40 % | 100 % | 20 % | 100 % |
| $y = e^{-\alpha t}$余弦$(\omega t + \Phi)$ | 1M | 100 % | 0 % | 0 % | 0 % | 0 % | 0 % |
| $F = \frac{Gm_1m_2}{r^2}$ | 100K | 100 % | 80 % | 100 % | 20 % | 80 % | 0 % |
| $H^2(x \equiv 1+z) = H_0{}^2(\Omega_m x^3 + (1-\Omega_m))$ | 100K | 100 % | 100 % | 100 % | 100 % | 40 % | 40 % |
| | **平均值** | **100 %** | **47 %** | **63 %** | **37 %** | **37 %** | **23%** |

[a] 完整的 Φ-SO 方法。
[b] 与 Landajuela 等人 (2021b) 类似。
[c] 完全依赖随机数生成器。

**表 5.** 在无噪声合成数据上，对我们的一组天体物理学示例进行 5 次运行并取平均后，精确符号恢复率汇总及消融研究。通过研究对 *in situ* 单位先验、神经网络获知局部单位约束的能力以及神经网络本身（即未标记为启用时由随机数生成器替代）的不同组合进行消融后的表现，我们表明这三者都是 Φ-SO 方法取得成功的关键要素。输入变量和自由参数分别以红色和蓝色标出，固定常数则以黑色标出。

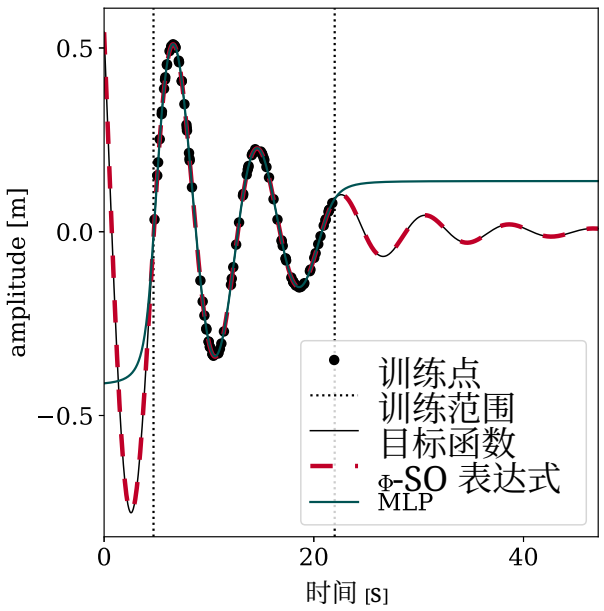



**图9.** 符号回归泛化能力的示例。这里展示了从公式 12 所示的阻尼简谐振子模型中随机抽取的数据点（黑点）（黑色实线）。多层感知机（绿色实线）能够很好地拟合这些数据，但在训练数据范围（竖直虚线）之外的区域则表现不佳。相比之下，我们的符号回归算法 Φ-SO（红色虚线）能够实现可靠得多的外推。

在停用单位先验后（仅使用获知单位信息的循环神经网络）、停用循环神经网络获知局部单位约束的能力后（仅使用单位先验和标准符号回归循环神经网络）、同时停用单位先验和单位信息后（仅使用与 Landajuela 等（2021b）设置类似的标准循环神经网络）、使用随机数生成器代替循环神经网络进行单位引导随机搜索，以及最后进行纯随机搜索后的性能。

我们证明，仅通过外部单位先验分布方案（详见 3.2）约束符号的选择，并不足以确保完美地恢复物理定律的符号表达；向循环神经网络提供局部单位约束（详见3.1）则至关重要，因为这能让循环神经网络主动学习单位规则。此外，我们证明，我们的系统并非仅仅依赖蛮力方法与单位约束的结合，3.3 中介绍的深度强化学习设置也是 Φ-SO 成功的关键因素。

需要注意的是，在 NFW测试案例 中，仅表达一个三次多项式的逆函数就足以解决该问题。然而，在不让循环神经网络观察局部单位约束的情况下使用单位先验，或将单位先验与随机数生成器结合使用，可能会导致恢复率低于单独使用随机数生成器的情况。这是由于单位先验具有高度的限

制性，在这样一个简单的案例中，实际上可能会减缓向解收敛的速度。

最后，我们还在图9中展示了，相较于良好近似，找到数据集背后精确解析表达式所带来的泛化能力。如预期所示，这些解析表达式的表现远远优于多层感知机（MLP）神经网络（此处使用一个具有 5 层、每层 32 个单元并采用 Sigmoid 激活的 MLP，在测试集上训练至收敛，损失函数为均方误差，$10^{-3}$ 学习率为 Kingma & Ba 2015年，并使用 Adam 优化器）。

## 6. 讨论

由于深度符号回归框架（Petersen 等人 2021a）及大多数其他符号回归方法都是通过最大化拟合质量来工作的，因此对符号排列的约束很少。然而，通往全局最小值（完美拟合质量和完美符号排列）的拟合质量路径与符号排列路径并不一定相关。这就导致了准确率引导符号回归的困境：拟合质量的微小变化可能掩盖函数形式的巨大变化，反之亦然。本质上，在学习迭代过程中，候选解的拟合质量可能不断提高，但其符号排列却可能离正确解越来越远。因此，在物理学背景下，为函数形式施加强约束（例如我们在本方案中提出的约束）对于引导符号回归算法具有重要价值。这是物理学所具备、并由 Φ-SO 加以利用的一项优势，具体方式包括：（i）缩小搜索空间；（ii）使神经网络能够主动学习量纲分析规则，并利用这些规则更高效地探索解空间。尽管 Petersen 等人(2021b曾暗示可以采用物理单位先验，但据我们所知，此前从未构建过这样的框架。

单位约束所提供的指导使Φ-SO 在寻找精确符号解方面优于其他方法，从纯预测角度提升了性能。这使得 Φ-SO 成为一种可能有用的工具，可用于揭示基于物理现象数据拟合的神经网络等黑箱物理模型。此外，我们注意到，在物理学语境下，我们的 Φ-SO 框架的组件不仅可以用于提升基于Petersen 等人(2021a）的框架（Landajuela 等人 2022，2021b；DiPietro 与 Zhu 2022；Du 等人 2022）构建的算法的性能，还可以与其他方法协同使用。例如，我们的原位单位先验可以在概率搜索或穷举搜索的语境下，通过切断物理上不可能的符号连接来缩小搜索空间（Bartlett 等人 2023；Kammerer 等，2020；Brence 等人 2021；Jin 等人 2019），也可以应用于神经符号方法（Martius 与 Lampert 2017；Brunton 等人 2016；Zheng 等人 2022；Sahoo 等人 2018；Valle 与 Haddadin 2021；Kim 等人 2020；Panju 与 Ghodsi 2020），或应用于遗传编程算法的种群初始化或变异阶段（Schmidt & Lipson 2009年、2011年；de Franca & Aldeia 2021年；La Cava 等人 2019；Cava 等人 2019；Virgolin 等人 2019；Cranmer 2020年；Cranmer 等人 2020；Virgolin 等人 2021；Stephens 2015年；Kommenda 等人 2020；Landajuela 等人 2022），还可以用于构建物理驱动的表达式数据集；结合使循环神经网络获知局部单位约束，这可能提升监督式方法的性能（Kamienny 等人 2022；Biggio 等人 2021年、2020年；Vastl 等人 2022；Becker 等人 2022；Kamienny 等人 2023；Landajuela 等人 2022）。

我们认识到，以目前的形式， Φ-SO 需要预先获知其可使用的自由参数的物理单位。虽然对于符号回归问题而言，这通常不是问题，因为这类问题往往偏重理论研究；表达式中可能出现的常数通常也都广为人知。但在新颖的经验性科学探索中，合适的自由参数及其单位可能无法立即确定。在这种情况下，我们建议为每个变量都纳入一个自由参数，并使其单位与该变量的单位相匹配。这样， Φ-SO 便可灵活地组合这些参数（或其中一部分），从单位角度找出最协调的组合，并将其无缝纳入表达式中。附录B详述了这一方法；借助该方法， Φ-SO 能够准确推导出公式及其中出现的物理常数。示例包括推导自由落体时终端速度的表达式，以及终端速度与加速度平方根之间的正比关系；这可以通过巧妙地组合速度与面积来推导出加速度参数。在其他示例中，我们展示了 Φ-SO 能够有效地重新发现万有引力常数或理想气体常数及其单位，以及这些常数所参与的表达式。

诚然，允许存在大量具有不同物理单位的自由参数，可能会无意中扩大搜索空间。尽管这一观察有其道理，但值得注意的是，该算法仍受到显著约束：一方面是这类参数种类有限，另一方面是输入变量之间固有的单位约束

，尤其是在考虑余弦、指数函数等无量纲运算时。此外，鉴于该算法会根据变量的单位组合参数，并优先选择复杂度较低的解，新物理常数的单位通常与问题所属的单位体系密切相关，而非任意取值。最后值得注意的是，除了量纲分析约束之外，我们研究的另一项重要发现是：让神经网络在生成部分书写的表达式时，能够观察符号的单位以及当前所需的单位，通常可以提高恢复率，即使不直接施加约束也是如此。然而，在不知道表达式中可能出现的自由参数的单位先验信息时，通常更难解决符号回归问题。我们承认这一局限，并正在积极考虑对 Φ-SO 进行后续改进，使其能够智能且自主地确定自由参数的单位。

我们的方法基于深度强化学习方法，其中神经网络会在每个符号回归任务开始时重新初始化。因此，网络针对每个具体问题独立训练，既无法利用过去的经验，也不会在由众所周知的物理函数形式构成的数据集上进行预训练。有人可能会认为，这使我们的方法原则上如同无监督学习设置一样“无偏”，因而非常适合发现新物理学（Kara- giorgi 等人 2022）。然而，这也从根本上限制了符号回归的能力，因为利用这类先验知识对于解决上述准确率引导符号回归的困境极具价值。利用这类先验知识的一种方式，是将其表述为现场先验（Kim 等人 2021；Guimer`a 等人 2020），另一种方式则是运用 Transformer 学习技术，以监督方式从中学习（Kami- enny 等人 2022，2023年；Bendinelli 等人 2023；Biggio 等人 2021；Vastl 等人 2022）。然而，尽管迄今最先进的监督式符号回归方法擅长提供准确的近似结果，但其精确符号表达式的恢复率不如其他方法（例如，参见图NeSymReS 中的4表现，或 Landajuela 等人 2022开展的消融研究）。

尽管监督学习与强化学习相结合看起来颇具前景，Landajuela 等人（2022年）证明，这种组合对精确符号恢复的提升微乎其微。尽管如此，在大语言模型时代，仍有望利用互联网规模的海量知识（例如，参见 Valipour 等人 2021年）。通过学习数据点与数学表达式之间的关联在现实场景中的对应关系，并利用监督学习技术使其符合领域特定假设，因此可以设想将这些知识整合到强化学习框架中，Fan 等人（2022年）展示了这一思路。该方法或许能够恢复复杂度远高于我们在第5节所探讨的表达式。此外，虽然我们的方法生成了一个体现准确性与复杂度权衡的帕累托前沿，但未来若能将复杂度和准确性整合为单一指标（如Bartlett 等人 （2023年）所示），或许能够提升符号回归的性能并应对模型选择方面的挑战。

正如我们在第 5.3 节所示，将我们的方法与（Udrescu&Tegmark 2020；Udrescu 等人 2020；Luo 等人 2022；Tohme 等人 2023；Cranmer 等人 2020）提出的强大问题简化方案相结合，就能轻松改进我们的方法。（Udrescu 等人 2020）算法中实现的可分离性过程，其结果会方便地记录在单独的数据文件中，因此完全可以轻松地将他们的方法用作 Φ-SO 的预处理步骤。我们预计，按照 Landa- juela 等人 (2022年) 的方法，将他们的方法整合到我们的算法中，应能提升Φ-SO 的性能。

## 7. 结论

我们提出了一种全新的符号回归算法，从设计之初就旨在利用物理科学中一项高度严格的约束：方程必须满足单位平衡。该算法的核心是一种嵌入机制，它在生成数学符号序列的同时，持续追踪这些符号的物理单位。我们采用了 Petersen 等人(2021a) 非常成功的深度强化学习策略，用它训练循环神经网络，使其不仅能生成准确表达式，还能生成符合物理规律的表达式，方法是让它学习局部单位约束。

该算法在《费曼物理学讲义》及其他教科书中的 120 个案例上进行了基准测试，并与另外 17 种基线符号回归方法进行了比较。结果表明，与Petersen 等人 (2021a)提出的纯粹基于强化学习的基线方法相比，利用量纲分析所产生的约束是有益的。此外，即使在噪声水平极低（超过 0.1%）的情况下，我们的方法仍取得了最先进的领先表现，并且在噪声水平高达 10% 时依然表现稳定。

该算法应用于天体物理学中的若干测试用例。首先，我们尝试简单地搜索狭义相对论中粒子的能-

量（第5.1节），我们的算法成功找到了该表达式，而标准的 Petersen 等人(2021a) 代码却无法解决这一问题。第二个测试用例是将该算法应用于著名的 Ia 型超新星哈勃图。尽管标准 $H(z)$ 中哈勃参数的形式Λ确实得到了恢复，但算法发现，其他更简单的解在拟合超新星数据（单独考察）时效果更好。这一结果与 Bartlett 等人(2023年) 的发现一致。另一个测试考察了星系动力学中的一个相对复杂的函数：我们搜索等时线恒星势模型中径向作用量坐标的函数形式。这一方程既不是 Petersen 等人(2021a) 的方法，也不是 Udrescu 等人(2020年) 的方法能够找到的。尽管我们的算法最初未能通过这一测试，但我们先使用 Udrescu& Tegmark (2020年) 实现的加性可分性判据对数据集进行拆分，最终成功恢复了正确的方程。

这些测试证明，该算法既适用于对现实世界的数据建模，也能推导出物理系统理想数学模型性质中不显而易见的解析表达式。尽管我们认识到，本方法可能发现的物理定律将取决于数据范围、先验的选择等因素，但这仍是朝着一种完全不带预设、连接观测数据与理论的方法迈出的一步。未来，这项研究计划将进一步扩展该算法，使其支持微分和积分算子，从而有望在物理单位约束下求解常微分方程与偏微分方程。不过，我们的首要目标是利用这套新工具，从天体物理学界现有的最先进水平的大型巡天观测中发现迄今未知的物理关系。

## 代码可用性

文档完善的 Φ-SO 算法及演示笔记本可在 GitHub 上获取github.com/WassimTenachi/PhySO，与本研究相关的冻结版本已存档于 Zenodo：10.5281/zenodo.8415435。

## 致谢

RI 感谢欧洲研究委员会（ERC）通过欧盟“地平线 2020”研究与创新计划提供资助（资助协议编号：834148）。作者谨向斯特拉斯堡大学高性能计算中心致谢，感谢其提供科学支持和计算资源访问权限，助力本研究开展。部分计算资源由 Equipex Equip@Meso 项目（未来投资计划）和 CPER Alsacalcul/Big Data 资助。

## 参考文献

第117届美国国会。2022年，《算法问责法案》。
h
t
t
p
s://
www.congress.gov/bill/117th-congress/house-bill/6580/Ali, M. S., Kshirsagar, M., Naredo, E., & Ryan, C. 2022年，载于遗传与进化计算会议论文集，GECCO ’22（美国纽约州纽约市：美国计算机协会），902–910，doi：10.1145/3512290.3528852Alnuqaydan, A., Gleyzer, S., & Prosper, H. 2022年，《机器学习：科学与技术》；Angelis, D., Sofos, F., & Karakasidis, T. E. 2023年，《计算工程方法档案》，1 Ar´echiga, N., Chen, F., Chen, Y.-Y., 等。2021年，arXiv 预印本 arXiv:2112.04023；Arnaldo, I., Krawiec, K., & O’Reilly, U.-M. 2014年，载于2014年遗传与进化计算年度会议论文集，879–886；Arrieta, A. B., D´ıaz-Rodr´ıguez, N., Del Ser, J., 等。2020年，《信息融合》，58，82

Bartlett, D. J., Desmond, H., & Ferreira, P. G. 2023年，IEEE《进化计算汇刊》，1，doi：10.1109/TEVC.2023.3280250

Bauer, J., Baumli, K., & Rezhabkhani, F. 2023年，载于《机器学习研究论文集》第202卷《第40届国际机器学习大会论文集》，编者：A. Krause、E. Brunskill、K. Cho、B. Engelhardt、S. Sabato 和 J. Scarlett（PMLR），1887–1935。

https://proceedings.mlr.press/v202/bauer23a.htmlBecker, S., Klein, M.,Neitz, A., Parascandolo, G., & Kilbertus,N. 2022年，载于NeurIPS 2022科学人工智能：进展与展望。https://openreview.net/forum?id=vhrtZYgxLzV

Bendinelli, T., Biggio, L., & Kamienny, P. 2023年，载于机器学习研究论文集，第202卷，国际机器学习会议，ICML 2023，2023年7月23日至29日，檀香山，夏威夷，美国，A. Krause、E. Brunskill、K. Cho、B. Engelhardt、S. Sabato与J. Scarlett编（PMLR），2063–2077。
h
t
t
p
s://proceedings.mlr.press/v202/bendinelli23a.htmlBiggio, L., Bendinelli, T., Lucchi, A., & Parascandolo, G. 2020年，载于NeurIPS 2020的学习遇见组合算法 Biggio, L., Bendinelli, T., Neitz, A., Lucchi, A., & Parascandolo, G. 2021年，载于机器学习研究论文集，第139卷，第38届国际机器学习会议论文集，M. Meila与T. Zhang编（PMLR），936–945。
h
ttps://proceedings.
mlr.press/v139/biggio21a.htmlBinney, J., & Tremaine,S. 2011年，《银河系动力学》，第13卷（普林斯顿大学出版社）Brence, J., Dˇzeroski, S., & Todorovski, L. 2023年，《信息科学》，632，742，doi：
https://doi.org/10.1016/j.ins.2023.03.073Brence, J., Todorovski, L., & Dˇzeroski, S. 2021年，《基于知识的系统》，224，107077 Brunton, S. L., Proctor, J. L., & Kutz, J. N. 2016年，《美国国家科学院院刊》，113，3932，doi：
10.1073/pnas.1517384113Buckingham, E. 1914年，《物理评论》，4，345 Burlacu, B. 2023年，载于遗传与进化计算伴会论文集，GECCO 23伴会论文集（美国纽约州纽约市：美国计算机协会），2412–2419，doi：
10.1145/3583133.3596390Carilli, C., & Rawlings, S. 2004年，《新天文学评论》，48，979，doi：
https://doi.org/10.1016/j.newar.2004.09.001Cava, W. L., Singh, T. R., Taggart, J., Suri, S., & Moore, J. 2019年，载于国际学习表征会议。https://openreview.net/forum?id=Hke-JhA9Y7合作组，L. S. 2009年，LSST科学手册，2.0版 Cranmer, M. 2020年，PySR：Python/Julia中的快速并行符号回归，Zenodo，doi：
10.5281/zenodo.4041459Cranmer, M., Sanchez Gonzalez, A., Battaglia, P., 等。2020年，《神经信息处理系统进展》，33，17429 Crochepierre, L., Boudjeloud-Assala, L., & Barbesant, V. 2022年，arXiv预印本，arXiv:2202.04367 d'Ascoli, S., Kamienny, P.-A., Lample, G., & Charton, F. 2022年，arXiv预印本，arXiv:2201.04600 de Franca, F. O., & Aldeia, G. S. I. 2021年，《进化计算》，29，367 Delgado, A. M., Wadekar,D., Hadzhiyska, B., 等，2022年，《皇家天文学会月刊》，515
,
2733 Desmond, H., Bartlett, D. J., & Ferreira, P. G. 2023年，《皇家天文学会月刊》，521
,
1817，doi：10.1093/mnras/stad597DiPietro, D. M., & Zhu, B. 2022，arXiv 预印本 arXiv:2209.01521 Du, M., Chen, Y., & Zhang, D. 2022，arXiv 预印本 arXiv:2210.02181 欧盟委员会。2021，《人工智能法案》。https://artificialintelligenceact.eu/Fan, L., Wang, G., Jiang, Y., 等。2022，载于神经信息处理系统第三十六届会议数据集与基准专题。https://openreview.net/forum?id=rc8o j8I8PXFeynman, R. P., Leighton, R. B., Sands, M., 等。1971，《费曼物理学讲义》第1–3卷（Addison-Wesley，马萨诸塞州雷丁）Gaia 合作组，Prusti, T., DeBruijne, J., Brown, A. G., 等。2016，天文学与天体物理学，595，A1 Galilei, G. 1623,-《试金者》Goldstein, H., Poole, C., & Safko, J. 2002，《经典力学》（Addison Wesley）。https://books.google.fr/books?id=tJCuQgAACAAJGraham, M. J., Djorgovski, S., Mahabal, A. A., Donalek, C., & Drake, A. J. 2013，皇家天文学会月刊，431，2371 Guimer`a, R., Reichardt, I., Aguilar-Mogas, A., 等。2020，《科学进展》，6，eaav6971，doi：10.1126/sciadv.aav6971Hoai, N., McKay, R., Essam, D., & Chau, R. 2002，载于《2002年进化计算大会论文集》。CEC'02（目录号 02TH8600），第2卷，1326–1331，第2卷，doi：
10.1109/CEC.2002.1004435Hochreiter, S., & Schmidhuber, J. 1997，神经计算，9，1735 Ibata, R., Diakogiannis, F. I., Famaey, B., & Monari, G. 2021，《天体物理学杂志》，915，5，doi：
10.3847/1538-4357/abfda9Jackson, J. 2012，《经典电动力学》（威利）。https://books.google.fr/books?id=8qHCZjJHRUgCJin, Y., Fu, W., Kang, J., Guo, J., & Guo, J. 2019，arXiv 预印本 arXiv:1910.08892

Kamienny, P., Lample, G., Lamprier, S., & Virgolin, M. 2023，载于《机器学习研究论文集》第202卷，国际机器学习会议，ICML 2023，2023年7月23日至29日，檀香山，夏威夷，美国，编者：A. Krause, E. Brunskill, K. Cho, B. Engelhardt, S. Sabato, & J. Scarlett（PMLR），15655–15668。
https://proceedings.mlr.press/v202/kamienny23a.htmlKamienny, P.-A., d'Ascoli, S., Lample, G., & Charton, F. 2022，载于《神经信息处理系统进展》，编者：A. H. Oh, A. Agarwal, D. Belgrave, & K. Cho。https://openreview.net/forum?id=GoOuIrDHG YKamienny, P.-A., & Lamprier, S. 2022，载于NeurIPS 2022科学人工智能：进展与展望。https://openreview.net/forum?id=yeF6cyYU7WKammerer, L., Kronberger, G., Burlacu, B., 等。2020，载于《遗传编程理论与实践 XVII》（施普林格），79–99 Karagiorgi, G., Kasieczka, G., Kravitz, S., Nachman, B., & Shih, D. 2022，《自然·物理学评论》，4，399 Keren, L. S., Liberzon, A., & Lazebnik, T. 2023，《科学报告》，13，1249，doi：10.1038/s41598-023-28328-2Kim, J. T., Landajuela, M., & Petersen, B. K. 2021，载于首届通用人工智能数学推理会议、国际学习表征会议（ICLR）Kim, S., Lu, P. Y., Mukherjee, S., 等。2020，IEEE 神经网络与学习系统汇刊，32，4166 Kingma, D., & Ba, J. 2015，载于国际学习表征会议（ICLR），美国加利福尼亚州圣迭戈 Kommenda, M., Burlacu, B., Kronberger, G., & Affenzeller, M. 2020，《遗传编程与可进化机器》，21，471 Korns, M. F. 2011，《遗传编程理论与实践 VIII》，109 La Cava, W., Danai, K., & Spector, L. 2016，《人工智能工程应用》，55，292 La Cava, W., Helmuth, T., Spector, L., & Moore, J. H. 2019，《进化计算》，27，377 La Cava, W., Orzechowski, P., Burlacu, B., 等。2021，载于《神经信息处理系统数据集与基准专题论文集》，编者：J. Vanschoren & S. Yeung，第1卷（Curran）。https://datasets-benchmarks-proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2021/file/c0c7c76d30bd3dcaefc96f40275bdc0a-Paper-round1.pdf
Landajuela, M., Petersen, B. K., Kim, S., 等. 2021a，载于《机器学习研究论文集》第139卷《第38届国际机器学习会议论文集》，编者 M. Meila 和 T. Zhang（PMLR），5979–5989。
https://proceedings.mlr.press/v139/landajuela21a.htmlLandajuela, M., Petersen, B. K., Kim, S. K., 等. 2021b，载于首届通用人工智能数学推理会议，国际学习表征会议（ICLR） Landajuela, M., Lee, C. S., Yang, J., 等. 2022，神经信息处理系统进展，35，33985 Laureijs, R., Amiaux, J., Arduini, S., 等. 2011，arXiv 电子预印本，arXiv:1110.3193。https://arxiv.org/abs/1110.3193Lemos, P., Jeffrey, N., Cranmer, M., Ho, S., 和 Battaglia, P. 2022，arXiv 预印本 arXiv:2202.02306 Liu, Z., 和 Tegmark, M. 2021，《物理评论快报》，126，180604 Liu, Z., Wang, B., Meng, Q., 等. 2021，《物理评论E》，104，055302，doi：10.1103/PhysRevE.104.055302Lu, Z., Pu, H., Wang, F., Hu, Z., 和 Wang, L. 2017，神经信息处理系统进展，30 Luo, C., Chen, C., 和 Jiang, Z. 2022，《国际计算方法杂志》，19，2142002 Makke, N., 和 Chawla, S. 2022，arXiv 预印本 arXiv:2211.10873 Manrique, D., R´ıos, J., 和 Rodr´ıguez-Pat´on, A. 2009，《人工智能百科全书》，767 Martius, G., 和 Lampert, C. H. 2017，外推与方程学习。https://openreview.net/forum?id=BkgRp0FYeMatchev, K. T., Matcheva, K., 和 Roman, A. 2022，《天体物理学杂志》，930，33 Matsubara, Y., Chiba, N., Igarashi, R., 和 Ushiku, Y. 2022，载于 NeurIPS 2022科学人工智能：进展与展望。https://openreview.net/forum?id=oKwyEqClqkbMcConaghy, T. 2011，载于《遗传编程理论与实践第九卷》（施普林格），235–260 Meurer, A., Smith, C. P., Paprocki, M., 等. 2017，《PeerJ计算机科学》，3，e103 Murdoch, W. J., Singh, C., Kumbier, K., Abbasi-Asl, R., 和 Yu, B. 2019，《美国国家科学院院刊》，116，22071 Navarro, J. F., Frenk, C. S., 和 White, S. D. M. 1996，《天体物理学杂志》，462，563，doi：10.1086/177173Ouyang, R., Curtarolo, S., Ahmetcik, E., Scheffler, M., 和 Ghiringhelli, L. M. 2018，《物理评论·材料》，2，083802，doi：10.1103/PhysRevMaterials.2.083802

Panju, M., & Ghodsi, A. 2020年, arXiv preprint arXiv:2011.02415 Papers With Code。2023年, Papers With Code 趋势。 https://paperswithcode.com/trendsPaszke, A., Gross, S., Massa, F., 等. 2019年, 《神经信息处理系统进展》, 32 Petersen, B. K., Larma, M. L., Mundhenk, T. N., 等. 2021a, 在国际学习表征会议。 https://openreview.net/forum?id=m5Qsh0kBQGPetersen, B. K., Santiago, C., & Landajuela, M. 2021b, 在第 8 届国际机器学习会议自动化机器学习（自动化机器学习）研讨会。 https://openreview.net/forum?id=yAis5yB9MQPress, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. 2007, 《数值配方》第 3 版：科学计算的艺术（剑桥大学出版社） Purcell, T. A., Scheffler, M., & Ghiringhelli, L. M. 2023年, arXiv 预印本 arXiv:2305.01242 Rajeswaran, A., Ghotra, S., Ravindran, B., & Levine, S. 2017年, 在国际学习表征会议。https://openreview.net/forum?id=SyWvgP5elReinbold, P. A., Kageorge, L. M., Schatz, M. F., & Grigoriev, R. O. 2021年, 《自然·通讯》, 12, 1 Sabbatini, F., & Calegari, R. 2022年, arXiv 预印本 arXiv:2211.00238 Sahoo, S., Lampert, C., & Martius, G. 2018年, 在国际机器学习会议, PMLR, 4442–4450 Schmidt, M., & Lipson, H. 2009年, 《科学》, 324, 81 —. 2011 年, 年龄 - 适应度帕累托优化（纽约州纽约市：施普林格纽约）, 129–146, doi: 10.1007/978-1-4419-7747-28Schwartz, M. 2014, 量子场论与标准模型, 《量子场论与标准模型》（剑桥大学出版社）。 https://books.google.fr/books?id=HbdEAgAAQBAJScolnic, D. M., Jones, D. O., Rest, A., 等. 2018年, 《天体物理学杂志》, 859, 101, doi: 10.3847/1538-4357/aab9bbShao, H., Villaescusa-Navarro, F., Genel, S., 等. 2022年, 《天体物理学杂志》, 927, 85 Stephens, T. 2015年, gplearn。 https://gplearn.readthedocs.io/en/stable/index.htmlSutton, R. S., & Barto,A. G. 2018年, 《强化学习：导论》（麻省理工学院出版社） Tohme, T., Liu, D., & YOUCEF-TOUMI, K. 2023年, 《机器学习研究汇刊》。 https://openreview.net/forum?id=lheUXtDNvPUdrescu, S.-M., Tan, A., Feng, J., 等。2020年, 《神经信息处理系统进展》, 33, 4860 Udrescu, S.-M., & Tegmark, M. 2020年, 《科学进展》, 6, eaay2631 Usama, M., & Lee, I.-Y. 2022年, 《传感器》, 22, 8240 Valipour,M., You, B., Panju,M., &Ghodsi, A. 2021年, arXiv 预印本 arXiv:2106.14131 Valle, C. M. C., & Haddadin, S. 2021年, arXiv 预印本 arXiv:2105.14396 Vastl, M., Kulh´anek, J., Kubal´ık, J., Derner, E., & Babu˘ska, R. 2022年, arXiv 预印本 arXiv:2205.15764 Virgolin, M., Alderliesten, T., & Bosman, P. A. 2019年, 载于《遗传与进化计算会议》论文集, 1084–1092 Virgolin, M., Alderliesten, T., Witteveen, C., & Bosman, P. A. N. 2021年, 《进化计算》, 29, 211, doi: 10.1162/evco a 00278Virgolin, M., & Pissis, S. P. 2022年, 《机器学习研究汇刊》。 https://openreview.net/forum?id=LTiaPxqe2eVladislavleva, E. J., Smits, G. F., & den Hertog, D. 2009年, ¯IEEE《进化计算汇刊》, 13, 333, doi: 10.1109/TEVC.2008.926486Wadekar, D., Villaescusa-Navarro, F., Ho, S., & Perreault-Levasseur, L. 2020年, arXiv 预印本 arXiv:2012.00111 Wadekar, D., Thiele, L., Villaescusa-Navarro, F., 等。2023年, 《美国国家科学院院刊》, 120, e2202074120, doi: 10.1073/pnas.2202074120Weinberg, S. 1972年, 《引力与宇宙学：广义相对论原理与应用》（威利）。 https://books.google.fr/books?id=XLbvAAAAMAAJWilstrup, C., & Kasak, J. 2021年, arXiv 预印本 arXiv:2103.15147 Wolfram, S. 2003年, 《Mathematica 之书》, 第1卷（Wolfram Research, Inc.） Wong, K. W., & Cranmer, M. 2022年, arXiv 预印本 arXiv:2207.12409 Worm, T., & Chiu, K. 2013年, 载于第15届遗传与进化计算年度会议论文集 GECCO '13（美国纽约州纽约市：美国计算机协会）, 1021–1028, doi: 10.1145/2463372.2463486Wu, T., & Tegmark, M. 2019年, 《物理评论 E》, 100, 033311 Zheng, W., Sharan, S., Fan, Z., 等。2022年, arXiv 预印本 arXiv:2212.14849 Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P., & Nocedal, J. 1997年, ACM 《数学软件汇刊》（TOMS）, 23, 550

ˇZeljko Ivezi´c, Kahn, S.M., Tyson, J. A. 等, 2019年, 《天体物理学杂志》, 873, 111, doi: 10.3847/1538-4357/ab042c

# 附录

## A. 天体物理学示例的数据集

本附录详细介绍了天体物理学示例所用的合成数据集。对于每种情况，我们使用模拟数据的任意尺度，按照随机均匀分布生成 1000 个无噪声数据点。表 6列出了目标表达式，表 7 和 8则详细列出了这些表达式中出现的变量和常数。

| Case | 表达式 |
|---|---|
| 相对论能量 | $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ |
| 等时线作用量 | $J_r = \frac{GM}{\sqrt{-2E}} - \frac{1}{2}\left(L + \frac{1}{2}\sqrt{L^2 - 4GMb}\right)$ |
| NFW 密度剖面 | $\rho = \rho_0 / \left(\frac{r}{R_s}(1 + \frac{r}{R_s})^2\right)$ |
| 阻尼谐振子 | $y = e^{-\alpha t}$余弦$(\omega t + \Phi)$ |
| 经典引力 | $F = \frac{Gm_1m_2}{r^2}$ |
| 膨胀定律 | $H^2(x \equiv 1+z) = {H_0}^2(\Omega_m x^3 + (1-\Omega_m))$ |

**表 6**。 天体物理学示例的目标表达式。 Φ-SO 可选作符号的输入变量和自由参数分别以红色和蓝色表示，固定常数则以黑色表示。

| 输出 | | 变量 1 | | | 变量 2 | | | 变量 3 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Name | 单位 | Name | 范围 | 单位 | Name | 范围 | 单位 | Name | 范围 | 单位 |
| $E$ | $M.L^2.T^{-2}$ | m | [-10,10] | $M$ | v | [-9,9] | $L.T^{-1}$ | | | |
| $J_r$ | $L^2.T^{-1}$ | L | [2.3, 3] | $L^2.T^{-1}$ | E | [-4, -6] | $M.L^2.T^{-2}$ | | | |
| $\rho$ | $M.L^{-3}$ | r | [0.2, 3] | $L$ | | | | | | |
| $y$ | 1 | t | $[1.5\pi, 7\pi]$ | $T$ | | | | | | |
| $F$ | $M.L.T^{-2}$ | $m_1$ | [0,1] | $M$ | $m_2$ | [0,1] | $M$ | r | [1,4] | $L$ |
| $H^2$ | $T^{-2}$ | z | [0.01, 2.5] | 1 | | | | | | |

**表 7.** 天体物理学示例中出现的输出和输入变量的数据范围及单位。

| 常数1 | | | 常数2 | | | 常数3 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Name | 值 | 单位 | Name | 值 | 单位 | Name | 值 | 单位 |
| c | 10 | $L.T^{-1}$ | | | | | | |
| GM | 0.467 | $L^3.T^{-2}$ | b | 1.234 | $L$ | | | |
| $r_s$ | 1.391 | $L$ | $\rho_0$ | 0.984 | $M.L^{-3}$ | | | |
| $\omega$ | 0.784 | $T^{-1}$ | $\alpha$ | 0.101 | 1 | $\phi$ | 0.997 | 1 |
| G | 1.184 | $L^3.M^{-1}.T^{-2}$ | | | | | | |
| $H_0$ | 1.072 | $T^{-1}$ | $\Omega$ | 1.315 | 1 | | | |

**表 8.** 天体物理学示例中出现的常数的目标值和单位。

B. 发现解析定律与自然常数

我们注意到，在科学发现中，有时适当的自由参数及其对应的单位并不能立即确定。在这种情况下，我们提出一种方案：允许 Φ-SO 为每个输入变量设置一个自由参数，并使其单位与该输入变量相同；此外，还允许设置另一个反映输出变量单位的自由参数。具体而言，对于一个通过 $\{x_1, ...x_n\}$ 推导 $y$ 的符号回归问题，我们会允许将 $\{\theta_y, \theta_{x_1}, ...\theta_{x_n}\}$ 作为自由常数纳入其中。这样， Φ-SO 就可以灵活地选择组合或省略这些自由参数，从而构造出符合量纲分析约束的新参数。考虑到这些组合，我们将软长度先验的中心调整为长度 12，以便生成更长的表达式。

在这一要求更高的设置中，我们证明 Φ-SO 能够出色地解决表 9中列出的符号回归挑战（数据集详情见表 10 和 11），既能得出精确的符号表达式，也能确定相应的物理常数及其准确单位。这些实验所用的脚本可在我们的代码仓库中获取。

| Case | 表达式 |
|---|---|
| 理想气体定律 | $P = \frac{nRT}{V}$ |
| 自由落体终端速度 | $v_t = \sqrt{\frac{2mg}{\rho A C_d}}$ |
| 经典引力 | $F = \frac{Gm_1m_2}{r^2}$ |
| 黑体光子数 | $n = 1/(e^{\frac{h\nu}{k_bT}} - 1)$ |
| 波干涉 | $E = E_1 + E_2 + 2\sqrt{E_1E_2} +$ 余弦 $\Delta\Phi$ |

**表 9.** 目标表达式。输入变量以红色标示。

| 输出 | | 变量 1 | | | 变量 2 | | | 变量 3 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Name | 单位 | Name | 范围 | 单位 | Name | 范围 | 单位 | Name | 范围 | 单位 |
| P | $L^{-1}.T^{-2}.M$ | n | [1,5] | $N$ | T | [1,5] | $\Theta$ | V | [1,5] | $L^3$ |
| $v_t$ | $L.T^{-1}$ | m | [1, 10] | $M$ | $\rho$ | [1, 6] | $M.L^{-3}$ | A | [1, 5] | $L^2$ |
| F | $L.T^{-2}.M$ | $m_1$ | [1, 5] | $M$ | $m_2$ | [1, 5] | $M$ | r | [1, 5] | $L$ |
| n | 1 | $\nu$ | [1, 5] | $T^{-1}$ | T | [1, 5] | $\Theta$ | | | |
| E | $L$ | $E_1$ | [1, 5] | $L^2.T^{-2}.M$ | $E_2$ | [1, 5] | $L^2.T^{-2}.M$ | $\Delta\Phi$ | [-5, 5] | 1 |

**表 10**。 示例中出现的输出和输入变量的数据范围及单位。

| 常数1 | | | 常数2 | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Name | 值 | 单位 | Name | 值 | 单位 |
| R | 8.314 | $L^{-2}.T^{-2}.M.N^{-1}.\Theta^{-1}$ | | | |
| g | 9.807 | $L.T^{-2}$ | $C_d$ | 0.470 | 1 |
| G | 6.674 | $L.T^{-2}.M$ | | | |
| h | 6.626 | $L^2.T^{-1}.M$ | $k_b$ | 1.123 | $L^2.T^{-2}.M.\Theta^{-1}$ |
| - | - | - | | | |

**表 11.** 示例中出现的常数的目标值和目标单位。

作为示例， Φ-SO 成功推导出描述理想气体状态方程的方程 $P = C\frac{nT}{V}$，其中 $C = \frac{\theta_P\theta_V}{\theta_n\theta_T}$的单位为 $M.L^2.T^{-2}.K^{-1}.N^{-1}$，从而有效地重新发现了通常记作 $R$的理想气体常数。类似地， Φ-SO 能够恢复自由落体物体的终端速度表达式，该速度是其质量 $m$、表面积 $A$ 以及其穿过介质的密度 $\rho$ 的函数，表达为 $v_t = \sqrt{C\frac{m}{\rho A}}$，由此揭示了其正比关系

与加速度 $\sqrt{C}$的平方根成正比。 Φ-SO 将其表示为 $\sqrt{\theta_{v_t}}/\sqrt{\theta_A}$，对应于地球表面重力 $\sqrt{g}$ 及其他尺度因子。此外， Φ-SO 将引力表示为相关质量 $m_1$、 $m_2$ 与距离 $r$ 的函数，形式为 $F = Cm_1m_2/r^2$ ，并发现需要一个单位为 $L^3.T^{-2}.M$的常数 $C$ 。 Φ-SO 将其表示为 $C = \theta_F{\theta_r}^2/{\theta_{m_1}}^2$，从而在此过程中有效地重新发现了引力常数 $G$ 。在另一种情形中，对于任意给定温度 $T$和频率 $\nu$下从黑体辐射中恢复的光子数密度， Φ-SO 能够推导出 $n = 1/($ $e^{\nu C/T} - 1$)，其中 $C$ 表示商 $C = h/k_b$， $h$ 和 $k_b$分别表示普朗克常数和玻尔兹曼常数。在上述大多数情况下， Φ-SO 明智地组合了可用自由参数中的一部分，以确定解决符号回归问题所需的精确常数，并构建出物理上一致的物理定律。在最后这个示例中，我们展示了 Φ-SO 能够识别自由参数大量冗余的情形：已知两列波的能量 $E_1$、 $E_2$ 及其相移 $\Delta\Phi$ ，它能够推导出干涉产生的能量 $E$ ，而无需使用任何 $\{\theta_E, \theta_{E_1}, \theta_{E_2}\}$。