

评论

开放



模型、猜测、检查：Wordle作为材料研究中主动学习的入门教程

Keith A. Brown ¹

研究和游戏都需要参与者做出一系列的选择。主动学习是一个从机器学习中借来的用于算法选择的过程，它已被越来越多地用于加速材料研究。虽然这个过程对机器学习领域以外的研究人员来说可能显得不透明，但在游戏中研究主动学习为展示这个过程和它的优点提供了一种易懂的方式。在这里，我们通过游戏Wordle的视角来考察主动学习，以解释主动学习过程，并描述在使用主动学习进行材料研究时出现的研究问题类型。

npj 计算材料

(2022) 8:97 ; <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00787-7>

无论是计算性研究还是实验性研究，一个共同的挑战是决定下一步要做什么实验。虽然许多这样的选择是研究人员在仪器前临时做出的，但有一个群体，其根源可以追溯到几个世纪前，研究如何最佳地选择实验¹。广泛使用的策略包括一次一个因素（OFAT）的优化和在可用的参数空间内均匀地选择实验（例如，基于网格的搜索）。与在进行实验活动前选择所有实验的策略相比，主动学习是机器学习的一个分支，在这个分支中，实验是利用从所有先前的实验中获得的知识按顺序选择的。^{2,3}令人鼓舞的是，最近的研究报告指出，主动学习比一开始就确定一组实验的实验设计和由人类直觉指导的实验都要好。^{4,5}事实上，近年来主动学习在材料研究中的例子层出不穷⁶⁻¹¹。一个特别显示出这种趋势的领域是自主实验，在这个领域中，机器人系统被用来进行主动学习所选择的实验¹²。这样的系统已经出现在广泛的领域，包括机械学^{13,14}生物学^{15,16}化学^{17,18}纳米技术¹⁹和显微镜学^{20,21}。鉴于这些自主实验的进展以及主动学习的优势，人们越来越清楚地看到，在广泛的研究领域中应用主动学习的概念有巨大的机会。

尽管在研究中采用主动学习有很多好处。

在学习如何实施主动学习以及向远离机器学习或数据驱动科学领域的研究人员宣传主动学习的优势方面，仍然存在一些障碍。有趣的是，由Josh Wardle制作的文字游戏Wordle的引入和迅速普及为克服这两个挑战提供了一个迷人的平台。在Wordle中，玩家有六次猜测机会来识别一个特定的五个字母的单词。每次猜测之后，都会提供反馈，说明每个字母是否出现在目标单词中，以及该字母是否在正确的位置。这个游戏之所以受欢迎，部分原因在于它每天只能玩一次，这进一步提高了每次猜测的风险。一目了然，这个游戏与实验选择有一些极其突出的与中国科学院上海陶瓷研究所合作出版

联系，在

研究活动。首先，Wordle玩家可以猜出任何五个字母的单词，这意味着有一个很大但有限的参数空间，是提前知道的。这在研究活动中通常是真实的，因为可以转动的旋钮是已知的，即使它们的重要性还没有确定。其次，可用的实验预算是有限的，Wordle中的程序员只有6个，而研究中的时间和其他资源的自然限制也是有限的。最后，Wordle的目标是识别目标词，这反映了在某些参数空间中找到最大或最小属性的目标，这也是许多研究中的一项常见任务。尽管有这些相似之处，Wordle的目标和研究的目标往往有意义的不同。例如，研究人员可能不知道他们什么时候找到了最佳实验，研究活动的目标通常是学习某些属性的行为，而不是简单地找到其极值，而且在一个参数空间中可能有多个最佳实验。撇开这些注意事项不谈，优化的任务是非常普遍的，也是任何更复杂的研究目标中明显的第一步。

鉴于Wordle和研究活动之间的相似性。

我们希望通过研究Wordle中的主动学习，人们可以深入了解主动学习，并有动力更普遍地采用它。从主动学习的贝叶斯优化形式化中得到启发，我们可以列出一个选择和解释猜测的迭代循环（图1A）。第一项任务是确定一个包含我们对系统知识的代理模型。作为其中的一部分，我们必须确定参数空间，对于Wordle来说，这相当于识别所有有效的五个字母的单词，我们识别了12478个。为了说明为什么玩Wordle需要主动学习，给定一个这么大的参数空间，从可用的单词中均匀地随机选择猜测，意味着玩家只能赢得0.05%的时间。在材料研究活动中，确定参数空间类似于确定所有可用的材料以及可以调整的实验或计算参数的有效范围。一旦我们确定了参数空间，我们就需要为我们对这个空间的信念建立一个代理模型。在Wordle中，这可以是对一个给定的词是否可能正确的信念，它最初对所有可用的词是统一的。这个代理模型是以查询表的形式实现的，其中每个词都被分配一个

¹美国马萨诸塞州波士顿市，波士顿大学机械工程系、物理系和材料科学与工程部。✉电子邮件: brownka@bu.edu

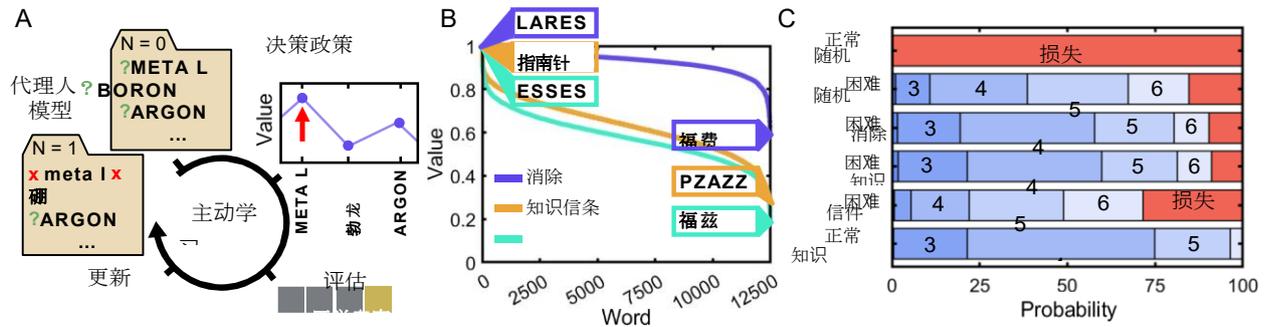


图1 使用主动学习玩Wordle。一张图显示了主动学习在Wordle游戏中的解剖情况。一个代理模型描述了目前对系统的信念。在第一轮游戏中 ($N=0$)，所有的词都被认为是获胜词的候选词。接下来，一个决策政策被用来量化每个词的相对价值。随后，猜测价值最高的词，并使用响应来更新代理模型。这个过程一直持续到找到正确的词或玩家输掉为止。**B** 对所有单词的三种决策政策的排名顺序评估。决策政策包括“消除”，其中每个词的价值由猜中后可能被消除的词的数量来估计，“知识”，其中每个词的价值由猜中该词可能产生的独特结果的数量来决定，以及“字母”，其中每个词的价值是基于其字母在词的目录中的丰富程度。**C** 在不同策略指导下玩Wordle的不同结果的概率。颜色表示找到正确答案所需的猜测次数，红色表示需要猜测7次或更多。策略是“困难”的，因为它们要求从那些没有被排除的词中选择，或者是“正常”的，因为所有的词都可以被选择。‘随机’表示单词被均匀地随机选择。用来产生这些结果的代码可以在 <https://github.com/kabrownlab/wordle>找到。

它是正确单词的概率。如果一个给定的词被排除了，那么它的概率就被设置为0，空间的其他部分被重新规范化。更加复杂和通用的代理模型，如高斯过程回归，可以利用参数空间中彼此接近的点应该有类似的行为这一理念来构建，但一个简单的查询表足以说明这一过程。在任何一种情况下，这个代理模型都会随着实验的进行而更新，在Wordle中，这相当于排除了与先前猜测的反应不一致的词。为了显示反复纳入这种知识的价值，如果玩家从这个不断缩小的可能性中随机选择单词，他们将在85%的时间里赢得Wordle。这一惊人的结果变化说明了利用所有可用的知识选择每个实验的价值。

从仍在争论中的词语中随机猜测

利用以前猜测结果的信息，但不利用参数空间本身所体现的信息。主动学习的一个主要目标是确定一个给定猜测的预期值。在材料研究活动中，这可能跟材料特性有关，比如它的塞贝克系数或断裂韧性。在Wordle中，一个给定单词的价值与它对识别正确单词的帮助程度有关。鉴于此，有许多不同的方法来评价一个潜在的猜测（图1B）。三个例子包括：（1）根据单词中字母的常见程度给每个单词打分；（2）优先考虑让玩家排除最多的单词；或者（3）针对导致最多可能结果的单词，从而获得最独特的信息。每个选择都代表了一种决策政策，它根据代理模型的当前状态为参数空间中的任何给定点分配一个值。在这里，我们发现，根据它们消除了多少可能的词语或提供了多少信息来选择词语，在90%以上的情况下都能取得胜利，比从现有的词语中随机选择要好5%。然而，根据字母的共性进行选择实际上比从潜在的赢家中随机选择表现得更好，突出了明智地选择决策政策的重要性。正如这个例子所显示的，选择不同的决策政策所带来的好处和风险，对学习速度有很大的影响，也是看待材料研究的一个迷人的视角。

主动学习的部分价值在于，它为算法打开了一扇大门，使其能够根据数据内部的关系做出选择，而这些关系对于人类用户来说可能是很难直观感受到的。从概念上讲，这相当于选择那些本身不可能导致高性能的实验，但能提高未来成功的机会。为了在Wordle中应用这个概念，考虑在两个词中选择一个作为潜在的猜测：词1有一定的概率成为一个获胜的词，但如果它不是目标词，将提供很少的可操作信息。相比之下，单词2已经被排除在获胜单词之外，但这个单词的反应平均来说会通过提供可操作的信息（如排除其他单词）而大大增加玩家的成功机会。后一种方法，即在那些已经被排除的单词中选择有最多可能结果的单词，在99.7%的时间里产生了显著的成功。这个有趣的结果可以被概念化为来自探索和利用之间的二分法，即承认如果你的预算是已知的，当然在Wordle中是已知的，在专注于预期成功的区域之前，花早期的猜测探索参数空间是有益的。在主动学习中，有一些决策政策自然地平衡了探索和开发，如预期改进政策，它选择了参数空间中被判断为最有可能增加的点，在最大化的情况下，是最大的当前值。

虽然分析Wordle的顺序选择猜测的算法过程提供了对材料开发过程的洞察力，但它也提出了纯算法的主动学习的一个关键缺陷。所讨论的算法假设所有的词最初都有相同的正确机会，这就忽略了游戏创造者在选择目标词时对深奥的词的偏见。人们可以设想有两种方法来尝试利用这一信息。首先，我们可以设想将关于单词流行度的信息作为主动学习循环中的先验知识。例如，这可能相当于将每个词的初始概率与它在文献中的使用频率成正比。同样值得强调的是，通过只考虑五字母单词的组合是英语单词，已经引入了先验知识。其次，这也可以通过人在回路（HITL）的主动学习来动态解决，在这种情况下，人与机器的合作关系被利用来进一步加速

学习过程。一般来说，HITL需要找到一种富有成效的方式，以结合伙伴关系中每个成员的最佳属性。这已被有效地用于超越算法或，包括放射学和机器人领域的人类。²²和机器人技术²³。在本例中，HITL可能需要使用算法来识别，并允许人类从这些词中进行选择，作为考虑每个词的相对流行度的一种方式。这一领域的进展在材料研究中特别有趣，研究人员的洞察力可能，难以量化，但可以通过这样的合作关系进行有效的利用。

无论是在游戏还是在材料研究中，选择的形式化迫使人们确定并考虑系统中存在的目标和重要信息。由于许多材料研究仍然依赖于相对简单的启发式实验选择，我们希望这篇评论以及它所反映的在材料研究中引入主动学习的广泛努力，能够激发新研究人员的好奇心，让他们更深入地研究如何选择实验。这种兴趣可以通过各种编程语言的易于实现的主动学习包和高质量的教程文章得到补充。^{24,25}沿着这些思路，用于生成本工作中提出的结果的代码，发布在<https://github.com/kabrownlab/wordle>。也许最重要的是，主动学习的融入提升了研究事业中的对话和思考。例如，在Wordle中，玩家不是思考选择哪个单词，而是思考什么决定了一个单词的价值。这种以选择和重新确定决策政策和代理模型为中心的话语水平，对材料界来说是一个令人兴奋的前景。

数据可用性

用于产生本文中数据的代码可以在<https://github.com/kabrownlab/wordle>上找到。

收到。2022年2月19日；接受。2022年4月13日。

Published online: 02 May 2022

参考文献

- Hicks, C. R. Fundamental concepts in the design of experiments. (Holt, New York, 1964).
- Cohn, D. A., Ghahramani, Z. & Jordan, M. I. 用统计模型进行主动学习。 *J.Artif.Intell.Res.* 4, 129-145 (1996).
- Pereira-Santos, D., Prudêncio, R. B. C. & de Carvalho, A. C. 经验调查的主动学习策略。 *Neurocomputing* 326, 15-27 (2019).
- Liang, Q. et al. Benchmarking the performance of Bayesian optimization across multiple experimental materials science domains. *npj Comput.Mater.* 7, 188 (2021).
- Chen, D., Skouras, M., Zhu, B. & Matusik, W. Computational discovery of extremal microstructure families. *Sci. Adv.* 4, eaao7005 (2018).
- Lookman, T., Balachandran, P. V., Xue, D. & Yuan, R. Active learning in materials science with emphasis on adaptive sampling using uncertainties for targeted design. *npj Comput.Mater.* 5, 1-17 (2019).
- Bassman, L. et al. Active learning for accelerated design of layered materials. *npj Comput.Mater.* 4, 74 (2018).
- Tian, Y. et al. Role of uncertainty estimation in accelerating materials development-ment via active learning. *J. Appl. Phys.* 128, 014103 (2020).
- Tran, K. & Ulissi, Z. W. 主动学习跨金属学，以指导发现用于CO₂还原和H₂进化的电催化剂。 *Nat.Catal.* 1, 696 (2018).
- Kusne, A. G. 等人，通过贝叶斯主动学习，进行实时闭环材料发现。 *Nat.Comm.* 11, 1-11 (2020).
- Sun, S. et al. 通过高通量合成和机器学习诊断加速开发过氧化物启发的材料。 *Joule* 3, 1437-1451 (2019).

- Stach, E. et al. 材料开发的自主实验系统：社区视角。 *Matter* 4, 2702-2726 (2021).
- Gongora, A. E. et al. 使用模拟来加速自主实验：使用力学的案例研究。
- Gongora, A. E. et al. A Bayesian experimental autonomous researcher for mechanical design. *Sci. Adv.* 6, eaaz1708 (2020).
- King, R. D. 等人，机器人科学家的功能基因组假说生成和实验。 *自然* 427, 247 (2004)。
- King, R. D. 等人，科学的自动化。 *Science* 324, 85-89 (2009).
- Coley, C. W. et al. 一个由人工智能规划告知的有机化合物流动合成的机器人平台。 *Science* 365, eaax1566 (2019).
- Häse, F., Roch, L. M. & Aspuru-Guzik, A. 下一代实验与自我驱动实验室。 *Trends Chem.* 1, 282-291 (2019).
- Nikolaev, P. et al. Autonomy in material research : a case study in carbon nanotube growth. *npj Comput.Mater.* 2, 16031 (2016).
- Ziatdinov, M.A. et al. 自动实验中的假设学习：应用于组合材料库。 *Adv. Mater.Early View*, 2201345 (2022).
- Roccapriore, K. M., Dyck, O., Oxley, M. P., Ziatdinov, M. & Kalinin, S. V. 4D-STEM的自动实验：探索新兴物理学和结构行为。预印本见 <https://doi.org/10.48550/arXiv.2112.04479> (2021)。
- Patel, B. N. et al. Human-chine partnership with artificial intelligence for chest radiograph diagnosis. *npj Digit.Med.* 2, 1-10 (2019).
- Zhang, J. et al. 人在环中优化行走过程中的外骨骼辅助。 *Science* 356, 1280-1284 (2017).
- Frazier, P. I. A tutorial on Bayesian optimization.预印本见 <https://doi.org/10.48550/arXiv.1807.02811> (2018)。
- Astudillo, R. & Frazier, P. I. Thinking inside the box: a tutorial on grey-box Bayesian optimization. In *2021 Winter Simulation Conference (WSC) 1-15 (2021)* Preprint at <https://doi.org/10.48550/arXiv.2201.00272> (2022).

鸣谢

我们感谢与Sam Ribnick、Alan Gardner和Kelsey Snapp的富有成效的讨论。

作者的贡献

K.A.B.构思了这项工作，进行了模拟，并撰写了手稿。

相互竞争的利益

作者声明没有竞争性利益。

其他信息

通信和材料要求应寄给Keith A. Brown。

转载和许可信息可在<http://www.nature.com/> 转载。

出版商注：《施普林格-自然》对已出版的地图和机构联盟中的管辖权要求保持中立。



开放存取 本文采用知识共享署名4.0国际许可协议，允许以任何媒介或形式使用、分享、改编、分发和复制，但须适当注明原作者和出处，提供知识共享协议的链接，并注明是否作了修改。本文中的图片或其他第三方材料都包含在文章的知识共享许可中，除非在材料的信用行中另有说明。如果材料没有包括在文章的知识共享协议中，而你的预期用途不被法定条例所允许，或者超出了允许的用途，你需要直接从版权持有人那里获得许可。要查看该许可证的副本，请访问<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>。

© 作者：2022年