



# 人工智能驱动复杂系统研究前沿

丁璟韬<sup>1</sup>, 徐丰力<sup>1</sup>, 孙浩<sup>2</sup>, 严钢<sup>3,4</sup>, 胡延庆<sup>5</sup>, 李勇<sup>1\*</sup>, 周涛<sup>6</sup>

(1. 清华大学 电子工程系, 北京 100084; 2. 中国人民大学 高瓴人工智能学院, 北京 100872;

3. 同济大学 物理科学与工程学院, 上海 200092; 4. 同济大学 上海自主智能无人系统科学中心, 上海 200092;

5. 南方科技大学 统计与数据科学系, 深圳 518055; 6. 电子科技大学 计算机科学与工程学院, 成都 611731)

**摘要** 作为一个研究对象涵盖基本物质、生命体和社会的跨学科研究领域, 复杂系统的研究有助于增进对自然和社会现象的理解和预测, 在解决人类面临的复杂问题中具有重要价值。这一领域的早期研究积累了海量的各类真实复杂系统数据, 在此基础上发展数据密集型、人工智能方法驱动的复杂性科学研究新范式, 将为复杂系统的描述、预测与知识发现提供一条全新的路径。该文对人工智能驱动的复杂系统研究进行前瞻性的综述, 探讨人工智能助力下的复杂系统研究发展前沿, 并分析基于人工智能方法的领域代表性工作, 最后讨论复杂系统视角下人工智能理论及技术的潜在发展方向。

**关键词** 复杂系统; 人工智能; 机器学习; 数据科学

中图分类号 TP39

文献标志码 A

DOI 10.12178/1001-0548.2023257

## Advancements in Artificial Intelligence-Driven Complex Systems Research

DING Jingtao<sup>1</sup>, XU Fengli<sup>1</sup>, SUN Hao<sup>2</sup>, YAN Gang<sup>3,4</sup>, HU Yanqing<sup>5</sup>, LI Yong<sup>1\*</sup>, and ZHOU Tao<sup>6</sup>

(1. Department of Electronic Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. Gaolin School of Artificial Intelligence, Renmin University of China, Beijing 100872, China;

3. School of Physical Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China;

4. Shanghai Research Institute for Intelligent Autonomous Systems, Tongji University, Shanghai 200092, China;

5. Department of Statistics and Data Science, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China;

6. School of Computer Science and Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China)

**Abstract** Spanning across disciplines with research interests in fundamental matter, life forms, and societal dynamics, the study of complex systems plays a pivotal role in deciphering and forecasting natural and social phenomena, thereby confronting intricate problems of human concern. The wealth of diverse real-world complex system data accumulated through early research has paved the way for a novel paradigm in complexity science research, which is intensively data-driven and steered by Artificial Intelligence (AI) methodologies. This innovative approach provides fresh insights into the characterization, forecasting, and knowledge extraction of complex systems. This article offers a visionary review of AI-driven studies in complex systems, highlighting the pioneering developments spearheaded by AI. It further scrutinizes exemplary works in the domain that leverage AI methodologies and concludes by contemplating the prospective evolution of AI theory and techniques under the lens of complex systems.

**Key words** complex system; artificial intelligence; machine learning; data science

复杂系统领域的研究已有半个世纪的历史, 2021 年的诺贝尔物理学奖可视为这一领域的里程碑式事件。这一年, 奖项授予了三位在复杂系统研究领域做出了杰出贡献的科学家: 真锅淑郎 (Syukuro Manabe), 克劳斯·哈塞尔曼 (Klaus

Hasselmann) 和乔治·帕里西 (Giorgio Parisi)。前两位科学家因“对地球气候的物理建模、量化可变性和可靠地预测全球变暖”这一贡献获奖; 而帕里西的贡献则在于“发现了从原子到行星尺度的物理系统中无序和涨落之间的相互作用”。这一奖项的

收稿日期: 2023-10-13; 修回日期: 2024-03-09

基金项目: 国家重点研发计划 (2022YFC3303102)

作者简介: 丁璟韬, 博士, 主要从事人工智能、数据挖掘等方面的研究。

\*通信作者 E-mail: liyong07@tsinghua.edu.cn

颁发，不仅肯定了复杂系统科学在揭示科学基本规律和改善人类福祉方面的重要贡献，更标志着这一领域的研究已经进入一个新的历史阶段，学界和社会可以进一步期待复杂系统科学发展带来的更多科学突破和社会应用。

同样，人工智能（Artificial Intelligence, AI）这个最早可追溯到 20 世纪 50 年代的研究领域，也在经历了起初的发展和低谷之后，在 21 世纪第二个十年里取得了革命性进步。2012 年，谷歌公司研究团队开发的深度学习神经网络 AlexNet 在图像分类竞赛中战胜了传统方法，这一事件引发了对深度学习的广泛兴趣；随后，2016 年，DeepMind 公司开发的 AlphaGo 击败了围棋世界冠军，这一里程碑事件标志着 AI 在复杂策略游戏中的巨大突破。在科学领域，AI 技术也展现出了令人瞩目的应用，其中一项备受瞩目的成就是 DeepMind 团队开发的 AlphaFold，其利用深度神经网络技术，成功地解决了蛋白质结构预测这一长期以来困扰科学家的难题。这一突破性的成果在 2020 年引起了广泛关注，并被认为是 AI 在生物化学领域的重大突破，为新药物研发、疾病治疗等领域打开了全新的可能性，引发了“AI for Science”的研究热潮。

在这样的背景下，复杂系统研究与 AI 的结合，预示着一一种新的可能性。传统复杂系统的研究范式是寻求基本原理的理论模型，然而在很多复杂问题中无法建立有效的理论体系。基于各类真实复杂系统收集的大规模数据，我们有望借助 AI 在理论难以触及的领域发展出新的知识获取和知识表达方法。这种以数据为中心、AI 驱动的复杂性科学研究新范式，有可能突破领域研究瓶颈，帮助我们更好地理解自然界和社会中的各类复杂现象、更可靠地预测和控制系统的未来行为，应对现实世界中的复杂问题和挑战。除了加速复杂性科学的发展，复杂系统与 AI 及数据科学的结合，将进一步鼓励不同学科之间的交流和合作，推动新的研究领域的形成和发展。

为了更好地了解这一极具前景和价值的研究方向，从而为进一步研究和发展提供参考，本文对 AI 驱动的复杂系统研究进行了综述。首先回顾复杂系统及复杂性科学早期的研究，整理当前领域研究存在的挑战性难题，进一步探讨 AI 助力下的复杂系统研究，讨论复杂系统预测模拟与规律发现研究方面融合 AI 技术的代表性工作及发展方向。在 AI 为传统复杂系统研究领域带来变革的同时（即 AI for Complex System），我们还注意到复杂系统视角下

AI 理论及技术的潜在发展方向（即 Complex System for AI），并在本文中进行了系统性的阐述与总结。

## 1 复杂性科学与复杂系统早期的研究

复杂性科学与复杂系统早期的研究起源于 20 世纪中叶，主要由物理学家以及少量数学家推动，通过设计一些较简单的机制模型，将自然界中的复杂性或者系统特征拆分成了若干简单的统计规律并将其作为复杂性的代表<sup>[1]</sup>。

突变理论由法国数学家雷内·托姆（René Thom）在 20 世纪 70 年代初提出，研究的是复杂系统中的突变这种非线性现象，表现为系统从一个稳定状态突然转移到另一个稳定状态的过程，其通常伴随着系统的新特征和行为的出现；混沌理论在 20 世纪 60 年代到 70 年代间取得了重要突破，其关注的是确定性动态系统中的无序和不可预测性，混沌现象通常表现为系统状态对初始条件的高度敏感性，这意味着即使是微小的初始条件变化也可能导致巨大的结果差异。耗散结构理论由比利时物理学家伊利亚·普利高津（Ilya Prigogine）在 20 世纪 70 年代提出，其通过研究开放系统，发现能量和物质的输入与输出之间存在不平衡时，系统可以自我组织形成一种更复杂的结构，展现出与热力学第二定律相反的从无序转向有序的过程；赫尔曼·哈肯（Hermann Haken）提出的协同学理论进一步研究了远离平衡态的开放系统如何通过内部协同作用，自发地出现空间、时间或者功能上的有序结构，具体表现为各子系统的协同相互作用产生宏观序参量，支配各子系统行为，主宰系统的整体演化过程。自组织理论认为复杂性源于自组织和涌现，斯图尔特·考夫曼（Stuart Kauffman）于 20 世纪 70 年代提出的随机布尔网络及 NK 模型展示了如何通过简单的本地规则产生复杂的全局行为；皮尔·巴克（Per Bak）于 1987 年提出的自组织临界理论研究了不同领域系统临界状态下宏观行为的空间或时间尺度不变特性（幂律分布），发现系统的这种临界行为的涌现是自发的，并不依赖于一个精确的控制参数；约翰·霍兰德（John Holland）对复杂系统自适应性和涌现现象的研究进一步完善了这一理论。

基于上述理论，代表性的机制模型被提出，有伊辛模型、分形模型<sup>[2]</sup>、元胞自动机模型<sup>[3]</sup>等。然而，实际复杂系统远比这些要复杂，钱学森提出了“复杂巨系统”的概念，指出生物体系统、人脑系统、地理系统、社会系统等皆属于此类，包含很多种类的子系统并有层次结构，子系统之间关联关系复杂，无法用统计方法略去细节概括起来<sup>[4]</sup>。

2000年以来兴起的复杂网络研究方法是把各类复杂系统简化为节点以及连接节点的边的集合, 节点代表系统的基本单元, 边代表各个单元之间的相互作用<sup>[5-6]</sup>。自然界和人工环境中广泛存在的真实复杂系统均可以用网络数据的形式表示, 如生物蛋白质相互作用网络、基因调控网络、神经网络、道路交通运输网、电力网、通信网络、社会网络等。这类研究综合运用数学中的图论、物理中的统计学方法, 进一步结合数据驱动的计算方法, 属于一种不同于传统复杂性研究的思路。复杂网络研究早期关注各类无标度网络和小世界网络建模, 此后拓展到多层网络<sup>[7]</sup>、时序网络<sup>[8]</sup>、空间网络<sup>[9]</sup>、高阶网络<sup>[10]</sup>等, 典型研究问题包括网络结构分析(如节点重要度<sup>[11]</sup>和高阶结构<sup>[12]</sup>), 网络功能分析(如鲁棒性<sup>[13]</sup>、稳定性<sup>[14]</sup>、韧性<sup>[15]</sup>和可控性<sup>[16]</sup>), 网络控制与优化应用<sup>[17-18]</sup>。值得关注的是, 基于记录人类活动历史(如邮件通信、访问地点等)的大规模真实数据, 复杂网络研究者从中挖掘出人类从事特定活动行为的统计规律, 发现其具有阵发和胖尾的特性, 形成了人类行为动力学这一新的研究方向<sup>[19]</sup>。随着社交媒体的兴起, 由人类行为所决定的信息传播与观点演化研究近年来也受到了广泛的关注<sup>[20-21]</sup>。

尽管这些理论和模型为我们理解真实世界的复杂性提供了重要的工具, 然而, 现有研究在以下3个方向仍存在关键挑战。首先, 复杂系统规模宏大, 且存在典型的多尺度和异质性, 难以基于第一性原理进行精确、高效的仿真模拟; 其次, 系统内部广泛存在的非线性动力学和非高斯(幂律)分布造成了系统演化的不确定性, 存在多个不同稳定状态(相), 即便是很小的扰动也可能发生状态转移, 使得当前复杂系统预测方法的(长期)预测真实性受到很大制约; 最后, 系统微观层面的个体状态与相互作用难以适用于统计方法中的概率描述, 两者间的存在和共演化也对理论建模提出了挑战。要解决上述难题, 复杂系统研究需要寻求在理论与技术层面新的突破。

## 2 AI助力下的复杂系统研究

复杂系统的早期研究及应用积累了丰富的真实世界数据, 且以复杂网络为代表的研究很大程度上采用了数据驱动的计算方法, 这为其进一步结合人工智能技术提供了良好的基础。目前结合AI技术的复杂系统研究主要包括预测模拟与规律发现工作。

### 2.1 预测模拟

相比传统复杂系统预测方法, 数据驱动的AI方法通过在观测系统数据基础上训练机器学习

模型, 从数据中提炼出通用规律用于目标系统的预测, 不受理论模型分析能力和适用条件的制约, 可以提供更高精度和更细粒度的预测结果。这方面的一项代表性研究开发了一种基于深度学习的临界点早期预警算法<sup>[22]</sup>, 通过利用不同动态系统在临界点附近普遍存在的标准形式和标度行为信息, 在未明确训练的系统中提供临界点的早期预警和具体的临界点新状态类型。另一项工作开发了数据驱动的能自动识别科研团队结构的AI模型<sup>[23]</sup>, 并通过分析超过1600万篇论文对应的科研团队结构与多个科研表现指标的关系, 探讨团队结构在促进创新、产生高质量研究以及培养青年科学家方面的关键作用。与预测问题类似, 传统复杂系统模拟方法难以兼顾大规模模拟的精度与降阶模型的效率, 文献[24]设计了基于自编码器模块实现尺度变换以及递归神经网络实现隐层空间动力学模拟的多尺度模拟方法, 可以将计算量减少多达两个数量级, 同时保持整个系统动力学的预测准确性。文献[25]提出使用图神经网络来模拟传染动力学的演变, 该方法对动力学的假设很少, 且允许对任意网络结构进行模拟。除了深度学习方法, 以储备池计算为代表的预测方法同样可以在未知系统参数的条件下预测系统未来演化<sup>[26]</sup>。

虽然基于AI的复杂系统预测模拟研究已经产生了一系列代表性工作, 本文认为这一领域仍存在下列值得深入研究的问题。

1) 复杂系统中的预测问题往往关注预测结果背后的可解释机制, 以及预测结果本身的不确定性, 而这些恰恰是深度学习模型所不擅长的, 如何提升现有AI预测方法的可解释性以及概率分布的建模能力是一个关键挑战。前者可以考虑结合可解释AI领域的最新研究成果, 后者则可以引入以概率生成模型为代表的生成式AI技术。

2) 现有AI方法需要进一步结合传统复杂系统研究中的机制模型, 以更好地克服训练样本规模小、数据存在偏差等真实应用场景下存在的性能下降问题。以网络科学中最为基础的链路预测问题为例(即通过已有网络结构预测真实存在但尚未观测到的网络链路), 文献[27]提出了一系列基于资源分配、局部路径等信息的机制模型; 最新的研究表明, 其相比当前主流的AI模型在小样本学习、不平衡样本学习以及抓取网络演化核心规律方面, 仍具备一定的优势<sup>[28]</sup>; 当前的AI技术依旧缺乏发现新的网络生长机制的能力, 简单集成学习已有的机制规则无法进一步带来预测精度的提升<sup>[29]</sup>。此外, 虽然图神经网络在网络降维(即图池化)领域

应用非常广泛<sup>[30]</sup>，但要解决高维复杂网络的降维表示问题，仍需紧密结合这方面一系列理论研究成果，包括节点度加权平均<sup>[31]</sup>、双曲几何<sup>[31]</sup>、重整化群<sup>[32]</sup>等。通过将机制模型背后的复杂系统知识嵌入 AI 模型的结构设计，一方面可以增强其可解释性，另一方面可以降低数据依赖，增强模型泛化能力。

## 2.2 规律发现

综合运用图神经网络、强化学习、符号回归等技术的 AI 方法在基于观测数据发现物理公式<sup>[33]</sup>和图结构物理机制<sup>[34]</sup>领域取得了突破，这一思想同样可以用于复杂系统的规律发现研究。系统动力学方面，文献 [35] 设计了基于两阶段的动力学自动推理方法，从数据中学习基函数的最优组合，实现了不完整网络结构和噪声数据影响下的鲁棒推理；文献 [36] 提出了具有稀疏回归的物理信息神经网络，以非线性时空系统的稀疏、带噪声数据中发现系统的控制偏微分方程。网络结构方面，除了对交互关系的推断，高阶网络重构仍是一个极具挑战性的子领域，近期有工作基于统计推断框架设计了一种纯数据驱动的方法从观测到的时间序列数据中重构一类高阶网络模型的特例，即 2-单纯复形网络<sup>[37]</sup>，如何进一步结合以深度学习、大语言模型为代表的人工智能技术拓展到更一般的高阶网络模型仍是值得研究的问题<sup>[38-39]</sup>。文献 [40] 利用神经网络从数据中学习可编程实现、易于人类理解的算法；文献 [41] 证明大语言模型（Large Language Model, LLM）通过自主的不断评估、修正，能够发现一系列数学难题的更优解法，推动理论发展。

随着 AI 技术深入人类社会的日常生活，其自身已形成由人类、机器智能体构成的复杂系统，如推荐系统中用户与算法的交互，外卖配送平台中骑手与算法的交互等，未来关于人的博弈行为的研究中，面对的可能是大量的 AI 玩家，最终涌现出赢家与输家，需要借助 AI 去挖掘其背后的知识、洞见、规律、因果关系。文献 [42] 研究发现借助语言模型与策略学习，AI 有能力掌握人类的一项高级技巧——外交谈判，考虑到 AI 在人类生活中逐渐不可或缺，以类似人类行为的方式对 AI 机器行为同等看待，从算法以及伦理角度进行研究都是有必要的<sup>[43]</sup>。

## 2.3 发展方向

本文认为，AI 技术助力下的复杂系统研究有以下 3 个发展方向。

1) 第一个方向是发展网络科学中的代数方法。相比统计方法中的概率描述手段，使用确定性的矩阵表达一个真实的复杂网络，使用面向网络的

特征值、代数特性分析将更具复杂规律挖掘的潜力。文献 [44] 针对复杂网络稳定性的研究在系统稳定性矩阵（即雅可比矩阵）基础上进一步引入动态雅可比系综（Dynamic Jacobian Ensemble），综合考虑系统的动力学函数、微观参数和网络结构，研究发现其呈现出非随机标度模式，可以解释真实世界复杂网络稳定性的来源，即规模与异质性。文献 [45] 的系统临界转变预警信号的研究基于动力系统的分岔理论来估计系统的主特征值，该动态特征值（Dynamical Eigenvalue）绝对值趋于 1 时系统趋近于临界转变，复平面分析能进一步揭示临界转变的类型。上述研究通过网络科学中的代数方法来挖掘系统稳定性与临界转变等复杂规律，随着 AI 方法在证明数学定理、发现矩阵乘法新解法等数学领域的突破<sup>[46]</sup>，我们认为 AI 助力下的网络科学代数方法对于解决复杂系统的规律挖掘问题将更具潜力。

2) 第二个方向是发展数据密集型、基于 AI 的复杂系统方法。针对复杂系统多尺度、异质特性造成的模拟仿真难题，可以研究大规模数据驱动的多智能体模拟方法；相较传统第一性原理驱动的仿真，可以结合物理信息融合的机器学习技术，从数据中发现驱动仿真的规律，融合数据驱动的复杂系统 AI 模拟方法<sup>[47-48]</sup>。针对传统网络科学方法表征数据能力弱的问题，以图神经网络为代表的机器学习技术处理高维稀疏特征的能力显著增强，在网络节点分类、链接预测等任务上往往能取得更高的预测精度，文献 [49] 的疫情溯源研究设计了一个基于图神经网络的算法达到了当前最优效果；通过研究图神经网络池化方法<sup>[30]</sup>，从数据驱动角度对高维复杂网络进行降维，可以辅助大规模复杂系统的多尺度模拟。

3) 第三个方向是发展知识与 AI 结合的复杂系统研究方法。以代数方法和 AI 方法为代表的两类研究分别趋向于“白盒”（可解释）与“黑盒”（不可解释）两个极端，因此第三个方向是把代数和 AI 结合，将已知的知识、符号化的数学语言嵌入 AI 模型，形成一个介于“黑盒”“白盒”之间的“灰盒”。一方面，可以通过知识的嵌入提高 AI 模型的通用可解释性；另一方面能够助力传统手段有困难的复杂系统规律发现<sup>[50]</sup>。复杂系统常见的知识描述形式有两种，一种可以用数学方程表示（Formal Knowledge），另一种无法用简明方程描述（Informal Knowledge），如语言，本质上是一种符号，背后仍然存在一定的规律。以上两类知识均属于人类已经掌握的规律，可以通过合理的设计

嵌入 AI 模型。随着 AI 技术的发展, 未来还有可能出现一类人类未知、但是可以使用的 AI 知识, 如 AlphaGO 下围棋能够超过人类选手, 背后一定是搜索到了人类本不知道的有效策略, 因此如何学习复杂系统的机器行为 (Machine Behavior) 背后的知识同样是一个值得关注的研究方向<sup>[43]</sup>。

AI 助力下的复杂系统研究对于社会发展同样具有极大的推动作用。一方面, AI 技术的结合更能帮到人类社会背后的真实复杂系统<sup>[51-52]</sup>。AI 往往擅长做人类不擅长的问题, 在一个给定的问题下可以快速搜索、试错迭代, 而人类擅长基于关心的事物来抽象、定义问题, 两者可以起到很好的互补作用。因此可以畅想结合 AI 的复杂系统研究在以下 4 个应用领域取得突破: 1) 以城市为代表的社会经济系统, 基于复杂性的思路方法, 仿真城市运行情况以及人的行为, 进行真实的干预和控制<sup>[53-54]</sup>; 2) 生物医药, 如癌症、老年病的治疗; 3) 具备复杂规律的高性能混合材料, 如电池; 4) AI 驱动的新型复杂系统, 如线上推荐系统、智能配送平台、智慧工厂, 人类与智能机器 (人工智能体) 之间的交互、协作甚至竞争行为, 代表着社会、技术、环境之间的复杂作用<sup>[55-56]</sup>。另一方面, 人类可以从复杂系统的行为模式中反向学习一类人类没掌握但可以使用的知识, 对这一类知识的翻译、借鉴和探索可以帮助我们更好地理解人类、复杂系统背后的智能, 如脑科学研究<sup>[57-58]</sup>。

### 3 复杂系统视角下的 AI 研究发展方向

AI 自身已形成复杂系统, 需要借助复杂性的视角理解 AI、解决其发展过程中的问题。本文认为有以下 3 类问题值得研究, 涵盖 AI 的理论分析、模型优化以及近期广受关注的大语言模型 (LLM) 研究。

1) 基于复杂网络结构理论, 可以研究表现好的深度学习网络是否存在普适的规律。文献 [59] 的研究利用信息论、统计物理中熵的相关理论, 对网络结构预测极限进行了研究, 推导出网络结构预测算法的性能上界, 可用于指导未来推荐系统、蛋白质相互作用探测等场景中的机器学习算法设计。神经网络的连接方式是影响其性能的重要方面, 早期设计受生物神经网络启发的连接主义 AI 思想影响。文献 [60] 的研究发现小鼠小脑网络遵循冗余、非随机的连接模式, 增加了对噪声的恢复能力, 这种编码容量与冗余之间的权衡可以指导人工神经网络的设计。进一步地, 当前 AI 领域性能表现优异的网络结构如残差网络、自动化的网络拓扑搜索、随机网络启发的神经网络设计等, 这些复杂

的网络结构设计一定程度上已经背离连接主义, 可从网络结构理论角度研究决定 AI 智能水平的关键机制、网络连接规律。

2) 从系统动力学理论角度, 与复杂系统高度强相关的统计物理方法可以用来分析一定理想化的机器学习方法, 其中两个代表一个是 Hebb 学习规则, 一个是 Hopfield 网络; 最近的一项工作采用快慢变量尺度分离的方式, 用热力学理论解释和预测深度卷积网络的特征学习能力<sup>[61]</sup>。神经网络的参数权重的更新可以视作动态的演化过程, 因此可以从动力系统角度研究其是否存在规律, 从而用于启发设计训练 AI 模型的新方法。

3) 以 chatGPT 为代表的 LLM 技术近期得到了突破性发展, 探讨大模型与复杂系统之间的关系将是重要的研究前沿。一方面, LLM 有希望发展成为复杂性科学的重要研究工具, 其具备与人类协同交互、存储海量知识并准确检索的强大能力, 可以启发科学家提出新的复杂系统理论<sup>[62]</sup>; 斯坦福大学的一项最新研究利用 chatGPT 构建数十个 AI 智能体并成功模拟出了人类社会的交友与信息传播现象<sup>[63]</sup>。另一方面, 复杂系统的研究同样可以反哺 LLM 的发展, 目前兴起的针对 LLM 智能涌现现象及其背后的神经网络标度率的研究<sup>[64]</sup>, 更多是一种经验性的数据观测和总结, 而其背后的本质原因可能对应到大模型、复杂网络的信息传输效率、结构特性, 进而呈现出训练用的数据量、模型大小以及计算能力之间存在的一种标度率关系, 因此可以考虑用复杂性科学的研究思路与工具展开研究。

### 4 结束语

本文对 AI 驱动的复杂系统研究进行了前瞻性的综述, 包括复杂系统融合 AI 技术的代表性工作及发展方向, 并且探讨了复杂系统视角下的 AI 优化理论及技术, 期望这种以数据为中心、AI 驱动的新范式加速复杂性科学研究的发展。

#### 参考文献

- [1] 宋学锋. 复杂性、复杂系统与复杂性科学[J]. 中国科学基金, 2003, 17(5): 262-269.  
SONG X F. Complexity, complex system, and the science of complexity[J]. Bulletin of National Science Foundation of China, 2003, 17(5): 262-269.
- [2] 张嗣瀛. 复杂系统、复杂网络自相似结构的涌现规律[J]. 复杂系统与复杂性科学, 2006, 3(4): 41-51.  
ZHANG S Y. The law of emergence of self-similar structures in complex systems and complex networks[J]. Complex Systems and Complexity Science, 2006, 3(4): 41-51.

- [3] 张永安, 白志学. 复杂系统研究的重要工具: 细胞自动机及其应用[J]. 自然杂志, 1998, 20(4): 192-196.  
ZHANG Y A, BAI Z X. A important tool for complex system research-cellular automata and its application[J]. Nature Journal, 1998, 20(4): 192-196.
- [4] 钱学森, 于景元, 戴汝为. 一个科学新领域: 开放的复杂巨系统及其方法论[J]. 自然杂志, 1990, 12(1): 3-10.  
QIAN X S, YU J Y, DAI R W. A new scientific field: Open complex giant systems and their methodology[J]. Chinese Journal of Nature, 1990, 12(1): 3-10.
- [5] 周涛, 柏文洁, 汪秉宏, 等. 复杂网络研究概述[J]. 物理, 2005, 34(1): 31-36.  
ZHOU T, BAI W J, WANG B H, et al. A brief review of complex networks[J]. Physics, 2005, 34(1): 31-36.
- [6] 汪秉宏, 周涛, 王文旭, 等. 当前复杂系统研究的几个方向[J]. 复杂系统与复杂性科学, 2008, 5(4): 21-28.  
WANG B H, ZHOU T, WANG W X, et al. Several directions in complex system research[J]. Complex Systems and Complexity Science, 2008, 5(4): 21-28.
- [7] BOCCALETTI S, BIANCONI G, CRIADO R, et al. The structure and dynamics of multilayer networks[J]. Physics Reports, 2014, 544(1): 1-22.
- [8] HOLME P, SARAMÄKI J. Temporal networks[J]. Physics Reports, 2012, 519(3): 97-125.
- [9] BARTHÉLEMY M. Spatial networks[J]. Physics Reports, 2011, 499(1-3): 1-101.
- [10] BIANCONI G. Higher-order networks[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2021.
- [11] LYU L Y, ZHOU T, ZHANG Q M, et al. The H-index of a network node and its relation to degree and coreness[J]. Nature Communications, 2016, 7: 10168.
- [12] FAN T L, LYU L Y, SHI D H, et al. Characterizing cycle structure in complex networks[J]. Communications Physics, 2021, 4: 272.
- [13] CALLAWAY D S, NEWMAN M E, STROGATZ S H, et al. Network robustness and fragility: Percolation on random graphs[J]. Physical Review Letters, 2000, 85(25): 5468-5471.
- [14] MENCK P J, HEITZIG J, MARWAN N, et al. How basin stability complements the linear-stability paradigm[J]. Nature Physics, 2013, 9: 89-92.
- [15] GAO J X, BARZEL B, BARABÁSI A L. Universal resilience patterns in complex networks[J]. Nature, 2016, 536(7615): 238.
- [16] LIU Y Y, SLOTINE J J, BARABÁSI A L. Controllability of complex networks[J]. Nature, 2011, 473(7346): 167-173.
- [17] YAN G, VÉRTES P E, TOWLSON E K, et al. Network control principles predict neuron function in the *Caenorhabditis elegans* connectome[J]. Nature, 2017, 550(7677): 519-523.
- [18] YAN G, ZHOU T, HU B, et al. Efficient routing on complex networks[J]. Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2006, 73(4): 046108.
- [19] 韩筱璞, 汪秉宏, 周涛. 人类行为动力学研究[J]. 复杂系统与复杂性科学, 2010, 7(S1): 132-144.  
HAN X P, WANG B H, ZHOU T. Researches of human dynamics[J]. Complex Systems and Complexity Science, 2010, 7(S1): 132-144.
- [20] XIE J R, MENG F H, SUN J C, et al. Detecting and modelling real percolation and phase transitions of information on social media[J]. Nature Human Behaviour, 2021, 5(9): 1161-1168.
- [21] XIE J R, WANG X R, FENG L, et al. Indirect influence in social networks as an induced percolation phenomenon[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2022, 119(9): e2100151119.
- [22] BURY T M, SUJITH R I, PAVITHRAN I, et al. Deep learning for early warning signals of tipping points[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2021, 118(39): e2106140118.
- [23] XU F L, WU L F, EVANS J. Flat teams drive scientific innovation[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2022, 119(23): e2200927119.
- [24] VLACHAS P R, ARAMPATZIS G, UHLER C, et al. Multiscale simulations of complex systems by learning their effective dynamics[J]. Nature Machine Intelligence, 2022, 4: 359-366.
- [25] MURPHY C, LAURENCE E, ALLARD A. Deep learning of contagion dynamics on complex networks[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 4720.
- [26] PATHAK J, HUNT B, GIRVAN M, et al. Model-free prediction of large spatiotemporally chaotic systems from data: A reservoir computing approach[J]. Physical Review Letters, 2018, 120(2): 024102.
- [27] LYU L Y, ZHOU T. Link prediction in complex networks: A survey[J]. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 2011, 390(6): 1150-1170.
- [28] ZHOU T. Progresses and challenges in link prediction[J]. iScience, 2021, 24(11): 103217.
- [29] MUSCOLONI A, CANNISTRACI C V. "Stealing fire or stacking knowledge" by machine intelligence to model link prediction in complex networks[J]. iScience, 2023, 26(1): 105697.
- [30] LIU C, ZHAN Y B, LI C, et al. Graph pooling for graph neural networks: Progress, challenges, and opportunities [EB/OL]. [2023-09-03]. <http://arxiv.org/abs/2204.07321>.
- [31] ALMAGRO P, BOGUÑÁ M, ÁNGELES SERRANO M. Detecting the ultra low dimensionality of real networks[J]. Nature Communications, 2022, 13(1): 6096.
- [32] VILLEGAS P, GILI T, CALDARELLI G, et al. Laplacian renormalization group for heterogeneous networks[J]. Nature Physics, 2023, 19: 445-450.
- [33] SUN F, LIU Y, WANG J X, et al. Symbolic physics learner: Discovering governing equations via Monte Carlo tree search[EB/OL]. [2023-09-03]. <https://arxiv.org/abs/2205.13134>.
- [34] SHI H, DING J, CAO Y, et al. Learning symbolic models for graph-structured physical mechanism[C]//The Eleventh International Conference on Learning Representations. Kigali: ICLR, 2023.
- [35] GAO T T, YAN G. Autonomous inference of complex network dynamics from incomplete and noisy data[J]. Nature Computational Science, 2022, 2: 160-168.

- [36] CHEN Z, LIU Y, SUN H. Physics-informed learning of governing equations from scarce data[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 6136.
- [37] WANG H, MA C, CHEN H S, et al. Full reconstruction of simplicial complexes from binary contagion and Ising data[J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 3043.
- [38] SANTORO A, BATTISTON F, PETRI G, et al. Higher-order organization of multivariate time series[J]. *Nature Physics*, 2023, 19: 221-229.
- [39] PIAGGESI S, PANISSON A, PETRI G. Effective higher-order link prediction and reconstruction from simplicial complex embeddings[EB/OL]. [2023-10-02]. <https://proceedings.mlr.press/v198/piaggessizza.html>.
- [40] BLAZEK P J, VENKATESH K, LIN M M. Automated discovery of algorithms from data[J]. *Nature Computational Science*, 2024, 4: 110-118.
- [41] ROMERA-PAREDES B, BAREKATAIN M, NOVIKOV A, et al. Mathematical discoveries from program search with large language models[J]. *Nature*, 2024, 625(7995): 468-475.
- [42] BAKHTIN A, BROWN N, NOVIKOV A, et al. Human-level play in the game of Diplomacy by combining language models with strategic reasoning[J]. *Science*, 2022, 378(6624): 1067-1074.
- [43] RAHWAN I, CEBRIAN M, OBRADOVICH N, et al. Machine behaviour[J]. *Nature*, 2019, 568: 477-486.
- [44] MEENA C, HENS C, ACHARYYA S, et al. Emergent stability in complex network dynamics[J]. *Nature Physics*, 2023, 19: 1033-1042.
- [45] GRZIWOTZ F, CHANG C W, DAKOS V, et al. Anticipating the occurrence and type of critical transitions[J]. *Science Advances*, 2023, 9(1): eabq4558.
- [46] 高庆, 吕金虎. AI促进数学理论研究新范式: 关于复杂系统的一些思考[J]. *中国科学基金*, 2022, 36(1): 107-109.  
GAO Q, LYU J H. New paradigm on mathematical research promoted by AI: Thoughts about complex systems[J]. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2022, 36(1): 107-109.
- [47] LI R K, WANG H D, LI Y. Learning slow and fast system dynamics via automatic separation of time scales[C]// *Proceedings of the Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. New York: ACM, 2023: 4380-4390.
- [48] ZHANG G Z, YU Z H, JIN D P, et al. Physics-infused machine learning for crowd simulation[C]// *Proceedings of the Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. New York: ACM, 2022: 2439-2449.
- [49] RU X L, MURDOCH MOORE J, ZHANG X Y, et al. Inferring patient zero on temporal networks via graph neural networks[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2023, 37(8): 9632-9640.
- [50] CORNELIO C, DASH S, AUSTEL V, et al. Combining data and theory for derivable scientific discovery with AI-Descartes[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 1777.
- [51] 王飞跃. 人工社会、计算实验、平行系统: 关于复杂社会经济系统计算研究的讨论[J]. *复杂系统与复杂性科学*, 2004, 1(4): 25-35.  
WANG F Y. Artificial societies, computational experiments, and parallel systems: A discussion on computational theory of complex social-economic systems[J]. *Complex Systems and Complexity Science*, 2004, 1(4): 25-35.
- [52] 王芳, 郭雷. 数字化社会的系统复杂性研究[J]. *管理世界*, 2022, 38(9): 208-221.  
WANG F, GUO L. Research on system complexity of the digital society[J]. *Journal of Management World*, 2022, 38(9): 208-221.
- [53] XU F L, LI Y, JIN D P, et al. Emergence of urban growth patterns from human mobility behavior[J]. *Nature Computational Science*, 2021, 1(12): 791-800.
- [54] CALDARELLI G, ARCAUTE E, BARTHELEMY M, et al. The role of complexity for digital twins of cities[J]. *Nature Computational Science*, 2023, 3(5): 374-381.
- [55] 李伯虎, 柴旭东, 张霖, 等. 面向新型人工智能系统的建模与仿真技术初步研究[J]. *系统仿真学报*, 2018, 30(2): 349-362.  
LI B H, CHAI X D, ZHANG L, et al. Preliminary study of modeling and simulation technology oriented to neo-type artificial intelligent systems[J]. *Journal of System Simulation*, 2018, 30(2): 349-362.
- [56] 苏竣, 魏钰明, 黄萃. 社会实验: 人工智能社会影响研究的新路径[J]. *中国软科学*, 2020(9): 132-140.  
SU J, WEI Y M, HUANG C. Social experiment: A new approach to the study of the social impact of artificial intelligence[J]. *China Soft Science*, 2020(9): 132-140.
- [57] BASSETT D S, SPORNS O. Network neuroscience[J]. *Nature Neuroscience*, 2017, 20(3): 353-364.
- [58] BARABÁSI DL, BIANCONI G, BULLMORE E, et al. Neuroscience needs network science[EB/OL]. [2023-10-02]. <https://arxiv.org/abs/2305.06160>.
- [59] SUN J C, FENG L, XIE J R, et al. Revealing the predictability of intrinsic structure in complex networks[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 574.
- [60] NGUYEN T M, THOMAS L A, RHOADES J L, et al. Structured cerebellar connectivity supports resilient pattern separation[J]. *Nature*, 2023, 613(7944): 543-549.
- [61] SEROUSSI I, NAVEH G, RINGEL Z. Separation of scales and a thermodynamic description of feature learning in some CNNs[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 908.
- [62] DAVIES A, VELIČKOVIĆ P, BUESING L, et al. Advancing mathematics by guiding human intuition with AI[J]. *Nature*, 2021, 600(7887): 70-74.
- [63] PARK J S, O'BRIEN J, CAI C J, et al. Generative agents: Interactive simulacra of human behavior[C]// *Proceedings of the 36th Annual ACM Symposium on User Interface Software and Technology*. New York: ACM, 2023.
- [64] WEI J, TAY Y, BOMMASANI R, et al. Emergent Abilities of Large Language Models[EB/OL]. [2023-10-02]. <https://arxiv.org/abs/2206>.