

2025 年 10 月 13 日至 10 月 19 日周报

何瑞杰
中山大学, 大湾区大学

1. 项目进展

1.1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学

1.1.1. 对模型和训练的改动

1. 将所有 3×3 的卷积核大小增加到 5
2. 依照 e2cnn [1] 构建 tiny 版本的 p4cnn
3. 在训练代码中增加了 early stopping 机制。

1.1.2. 在不同规则的演化系统上的实验结果

实验结果如下。表中每格上侧的数表示最后的训练集损失，下侧的数表示验证集正确率。

演化规则 / 模型名	CNN-tiny	CNN-small	MCNN	P4CNN-tiny	P4CNN-small	P4MCNN
B36/S23	0.7002	0.0045	0.0055	0.3631	0.0037	0.0036
	86.79%	100.00%	99.97%	94.74%	100%	100.00%
B36/S23	0.3451	0.0167	0.0262	0.4740	0.0274	0.0148
	90.46%	99.89%	98.94%	92.32%	99.77%	99.86%
B3678/S34678	0.2035	0.0133	0.0660	0.4534	0.0159	0.0097
	92.36%	99.96%	98.19%	93.40%	99.96%	99.98%
B35678/S5678	0.0165	0.0216	0.0955	0.0086	0.0058	0.0041
	99.24%	98.73%	99.52%	99.32%	99.65%	99.77%
B2/S	0.0231	0.0023	0.0024	0.6136	0.0022	0.0034
	99.74%	100.00%	100.00%	88.79%	100.00%	100.00%
B345/S5	0.1710	0.0065	0.0039	0.0028	0.0028	0.0119
	96.25%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	99.92%
B13/S012V	0.2489	0.0066	0.0045	0.1243	0.0016	0.0010
	92.30%	100.00%	99.99%	99.04%	100.00%	100.00%
B2/S013V	0.5533	0.0046	0.0025	0.7082	0.0091	0.0015
	77.24%	100.00%	100.00%	84.71%	100.00%	100.00%

不同模型的大小、参数量和计算量对比如下：

模型名	FLOPs (M)	参数量	估计大小 (MB)	最低正确率 (%)
P4CNN-tiny	1.28	94	11.21	84.71
CNN-tiny	5.32	133	2.24	77.24
MCNN	40.48	1,004	7.36	98.19
P4MCNN	6.4	1,276	—	99.77
CNN-small	98.5	2,450	—	98.73%
P4CNN-small	10.24	3,202	—	99.65

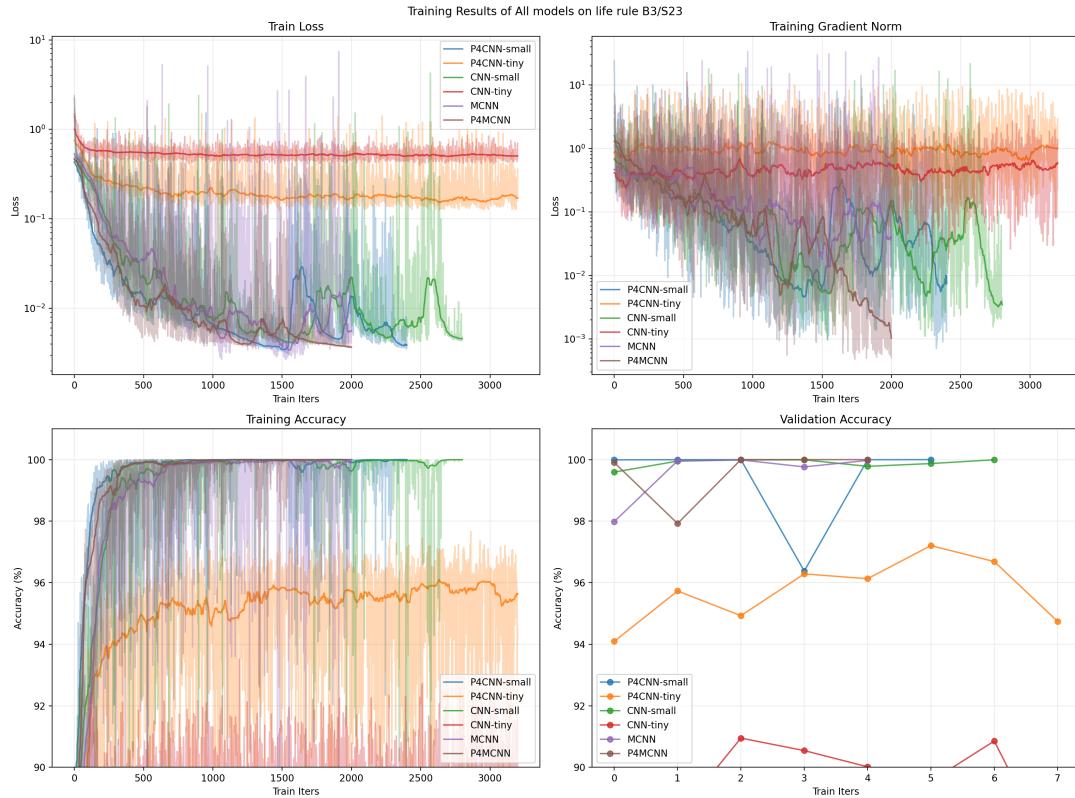


Figure 1:

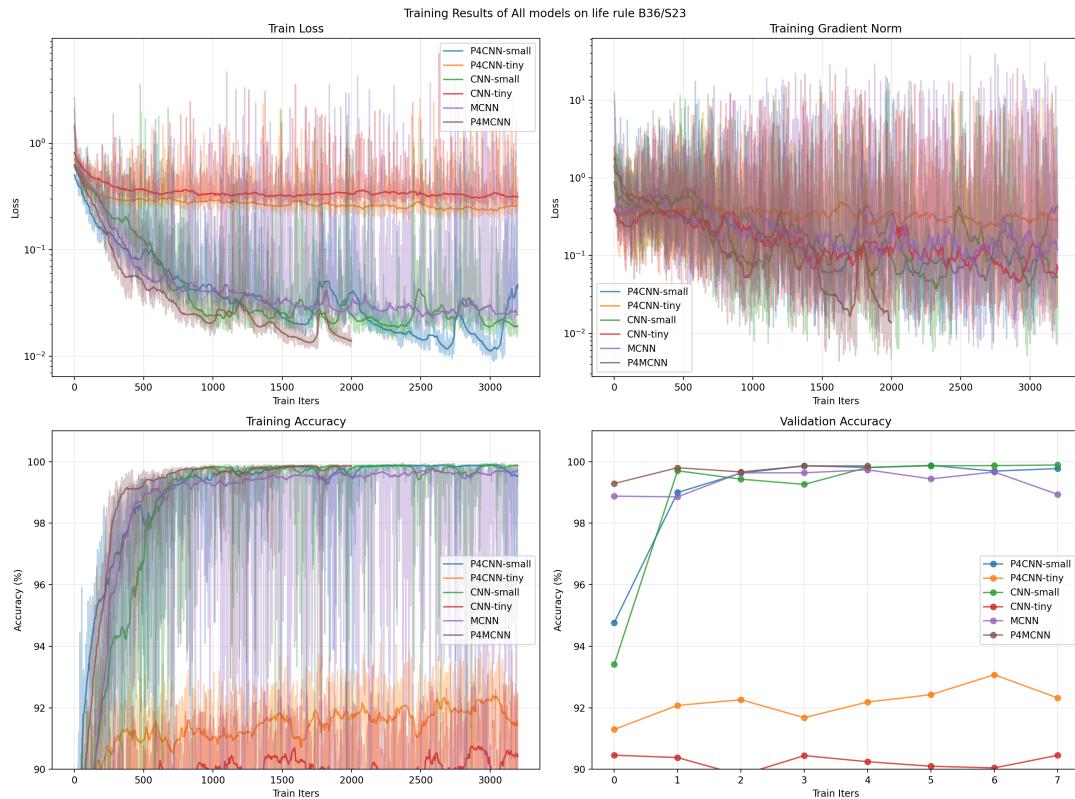


Figure 2:

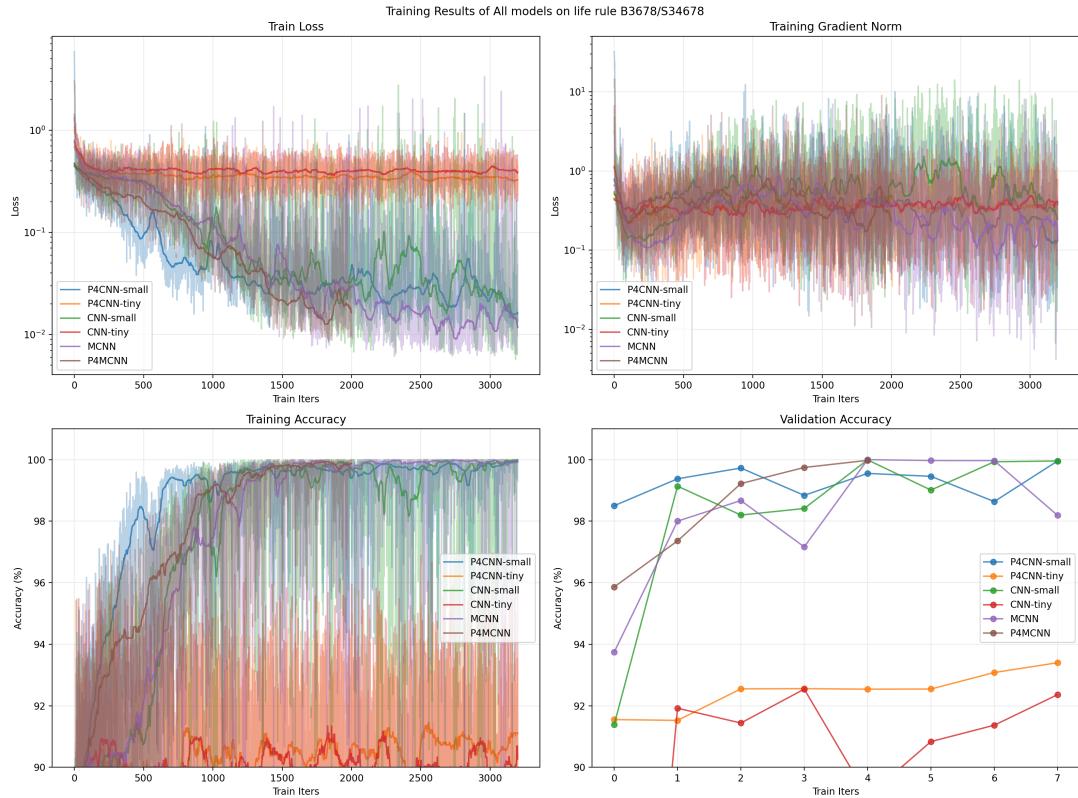


Figure 3:

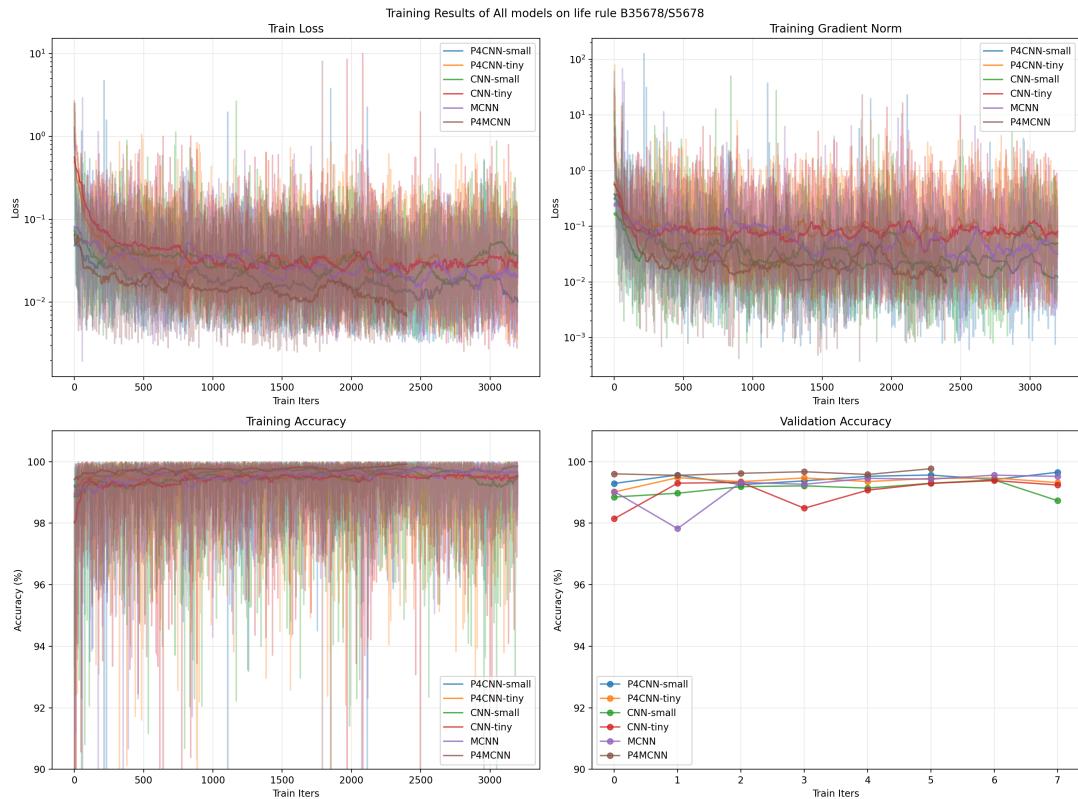


Figure 4:

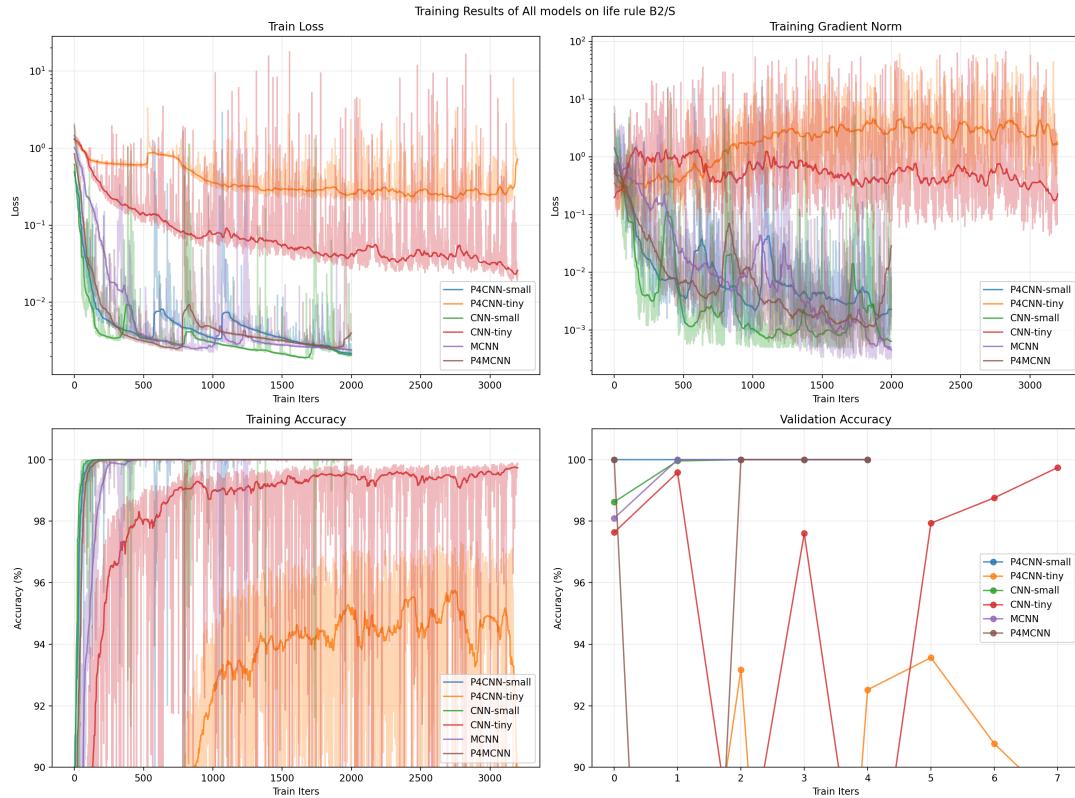


Figure 5:

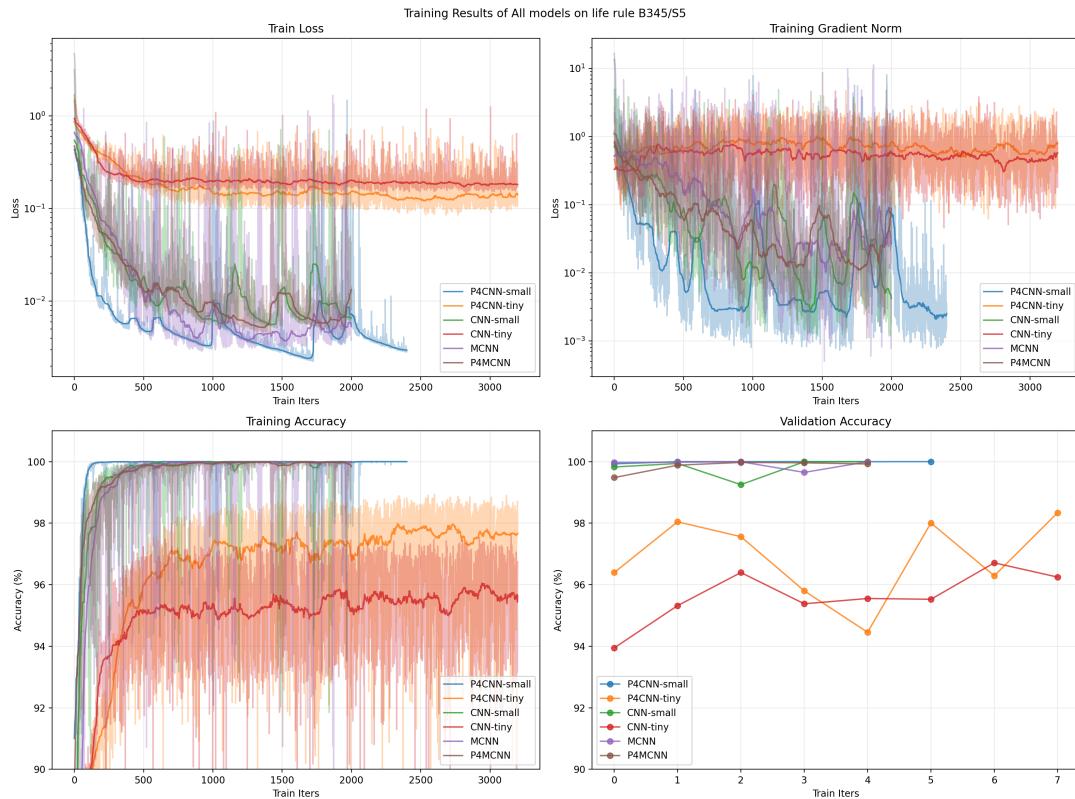


Figure 6:

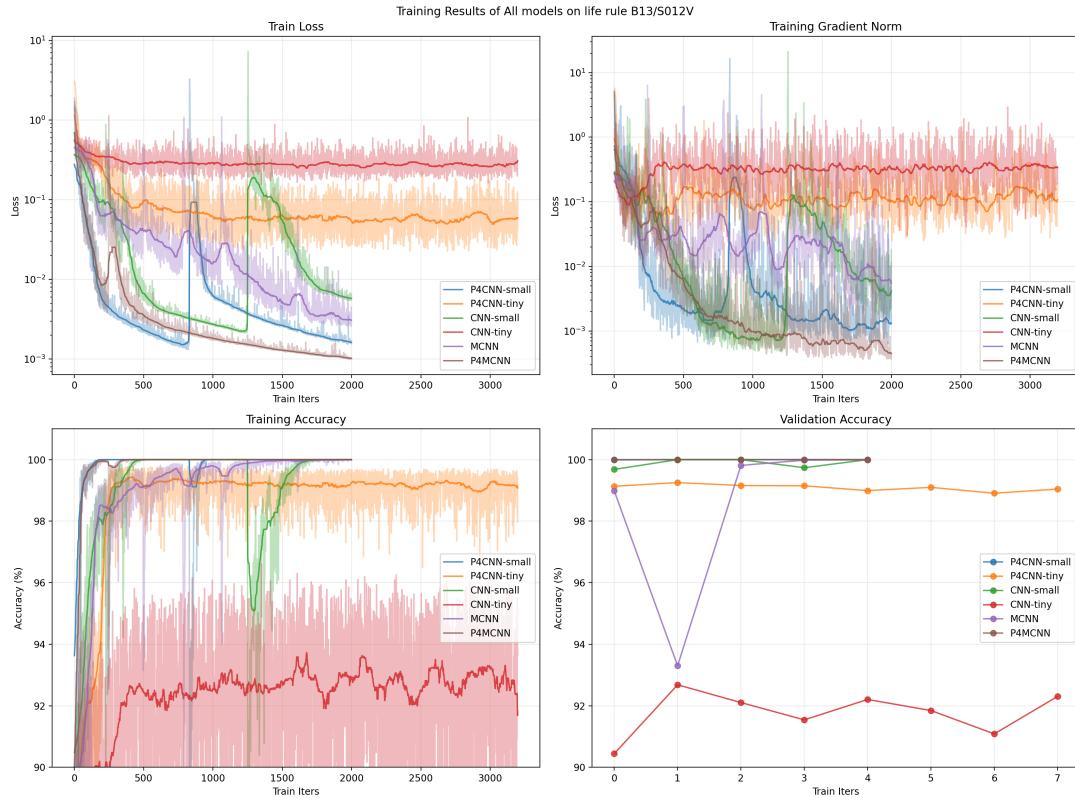


Figure 7:

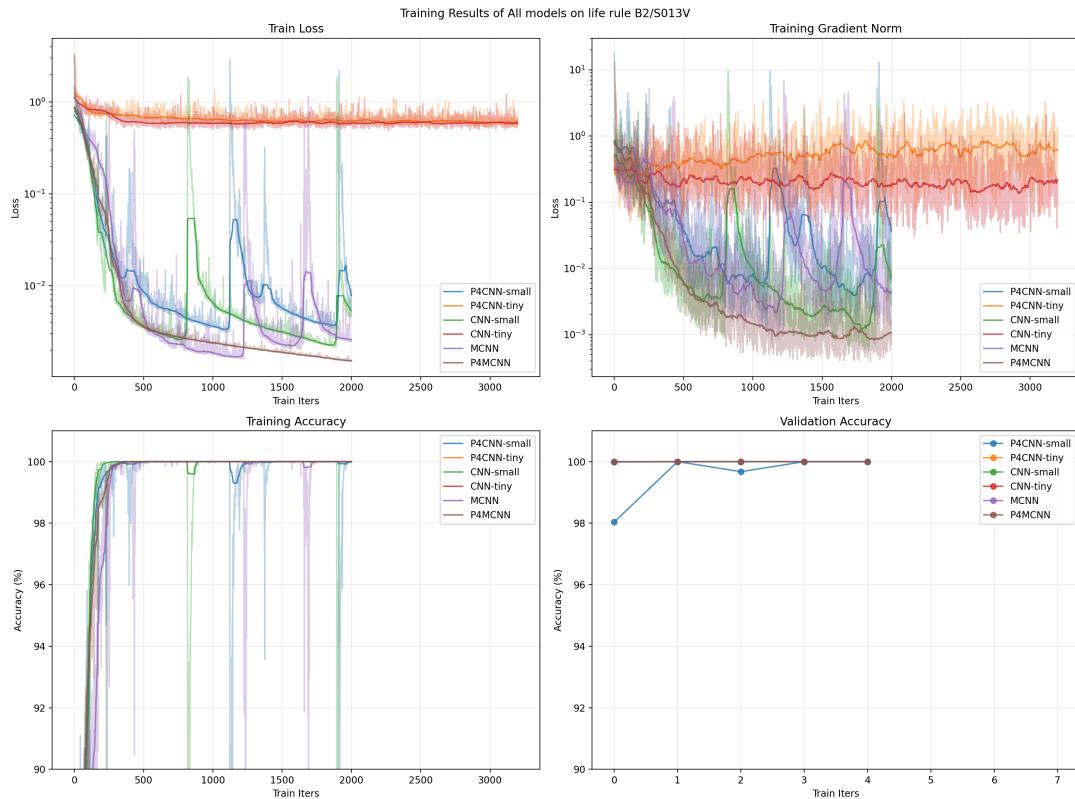


Figure 8:

1.2. 微型抗癌机器人在血液中的动力学

1.2.1. 项目目的

微型抗癌机器人是通过癌细胞散发出的化学吸引物 (chemoattractant) 趋化性驱动 (chemotaxis-driven) 运动，与癌细胞进行配体-受体结合后定向释放药物，达到治疗的目的。本项目研究理想状况下的微型抗癌机器人集群在血液中的动力学。

1.2.2. 建模

目前项目对血液中的化学吸引物、游离的微型机器人和与癌细胞结合的微型机器人分布进行建模。设 t 时刻，位于血液中 x 位置的化学吸引物浓度为 $c(x, t)$ ，化学吸引物正常的消耗或讲解速率为 k ，则有

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \nabla^2 c - kc + S_{\Omega_t}(x) \quad (1)$$

其中

- D_c 为化学吸引物在血液中的扩散系数
- k 为化学吸引物正常的消耗或讲解速率
- Ω_t 为癌细胞所在区域， $S_{\Omega_t}(x)$ 为癌细胞区域中 x 位置向血液中释放化学吸引物的速度

类似地，设 $\rho(x, t)$ 为游离机器人血液中的分布密度， $b(x, t)$ 为非游离的机器人的分布密度，有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= D_\rho \nabla^2 \rho - \nabla \cdot (\chi \rho \nabla c) - k_b \rho \delta_{\Omega_t} + k_u b \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= k_b \rho \delta_{\Omega_t} - k_u b \end{aligned} \quad (2)$$

其中

- D_ρ 为游离机器人在血液中的扩散系数
- k_b 为游离机器人绑定癌细胞的速率
- k_u 为绑定癌细胞的机器人释放药物后和癌细胞解绑的速率
- χ 为机器人逆浓度梯度制导的成功率

1.2.3. 局限性

- 没有考虑机器人密度增大后的互相碰撞问题
- 没有考虑血流对化学吸引物扩散和机器人运动的影响
- 没有考虑血液中的其他细胞对机器人的影响

2. 文献阅读

2.1. Denoising Diffusion Probabilistic Models [2]

Jonathan Ho, Ajay Jain and Pieter Abbeel | <https://arxiv.org/abs/2006.11239>

本周把 DDPM 的剩余部分补完。

2.1.1. 补遗

2.1.2. 实验结果

2.1.3. 总结和讨论

参考资料

1. <https://arxiv.org/abs/1907.05600>
2. <https://arxiv.org/abs/2006.11239>
3. <https://lilianweng.github.io/posts/2021-07-11-diffusion-models/#nice>

2.2. Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation [3]

- Yang Song, Sahaj Garg, Jiaxin Shi, Stefano Ermon
- <https://arxiv.org/abs/1905.07088>

2.3. General E(2)-Equivariant Steerable CNNs [4]

- Maurice Weiler and Gabriele Cesa
- <https://arxiv.org/abs/1911.08251>

3. 学习进度

3.1. 机器学习理论

3.1.1. Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

3.2. 随机过程

本周学习到了 Poisson 过程，以及一般宽平稳随机过程相关函数的诸性质。

3.3. 随机微分方程

本周没有推进。

4. 问题解决记录

4.1. uv 相关

uv 是基于 Rust 的新一代 Python 包管理器，具有可迁移性强、快速、简单的特点。

4.1.1. Pytorch CUDA 版本的配置

4.2. Typst 相关

4.2.1. 数学公式自动编号

4.3. Python 相关

5. 下周计划

论文阅读

1. 生成模型
 - DDPM 收尾
 - Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation
2. 动力学
 - 暂无
3. 其他
 - General $E(2)$ - Equivariant Steerable CNNs

项目进度

1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学
 - 收集实验数据，若有必要，实现更小的 $p4$ -等变 CNN 模型并测试
 - 尝试对模型权重进行解释，并用模型作为系统的演化模拟器，统计验证所学到的规则是否正确
2. 微型抗癌机器人在血液中的动力学
 - 开始学习 PDE 的数值解方法

理论学习

1. 随机过程课程
 - 完成 Poisson 过程的学习
 - 预习 Markov 过程
2. 随机微分方程
 - 完成第四章 随机积分
 - 第五章 随机微分方程 开头

参考文献

- [1] QUVA-Lab, “E(2)-Equivariant CNNs Library for Pytorch.” Accessed: Oct. 15, 2025. [Online]. Available: <https://github.com/QUVA-Lab/e2cnn>
- [2] J. Ho, A. Jain, and P. Abbeel, “Denoising Diffusion Probabilistic Models,” *CoRR*, 2020, [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2006.11239>
- [3] Y. Song, S. Garg, J. Shi, and S. Ermon, “Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation,” *CoRR*, 2019, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1905.07088>
- [4] M. Weiler and G. Cesa, “General E(2)-Equivariant Steerable CNNs,” *CoRR*, 2019, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1911.08251>