

机器学习简介

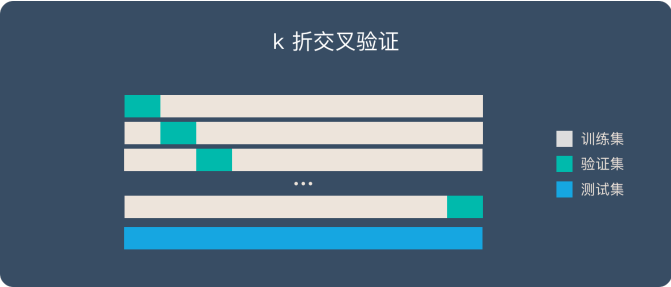
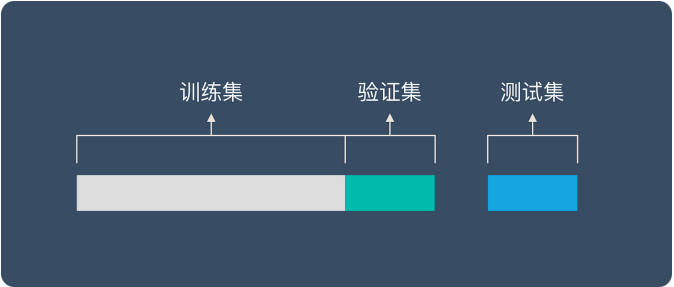
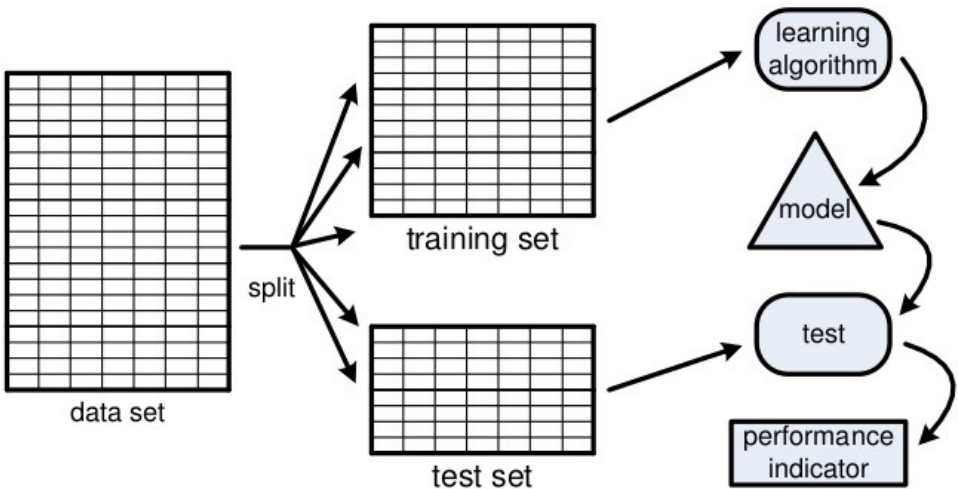


交叉验证

- 建模之前，我们可以把随机把数据分成两部分，一般测试集数据占比为10%-30%

训练集(Training Set)和验证集(Validation Set)
测试集(Test Set)

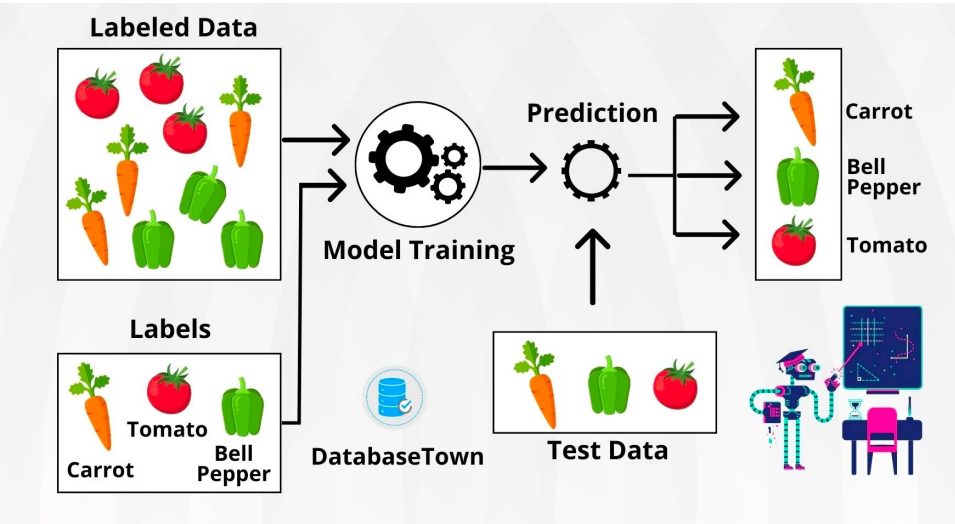
- 训练集数据用来训练模型
- 需要测试模型好坏的时候就使用测试集数据进行测试



监督学习

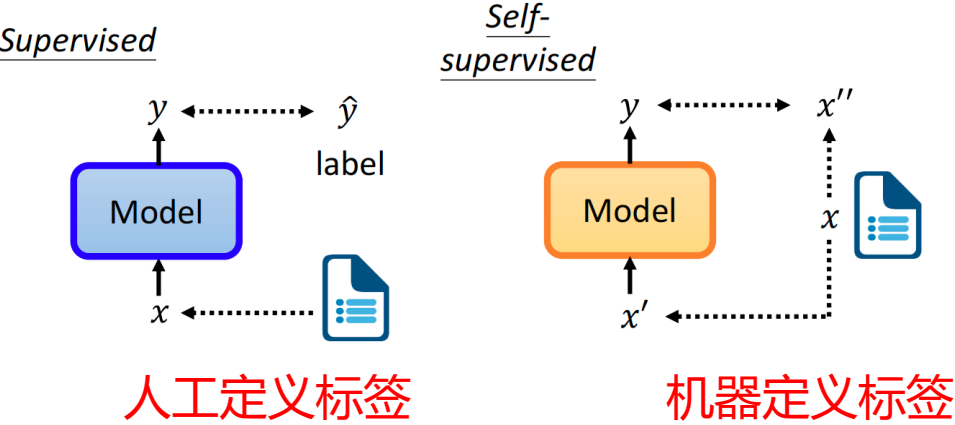
监督学习是最常用的模型训练方法，需要给所有数据进行人工打标签，然后再根据标签来训练模型。模型训练的过程实际上就是向人类学习如何自动给数据打标签的过程。

人工标签过的数据



人工定义标签

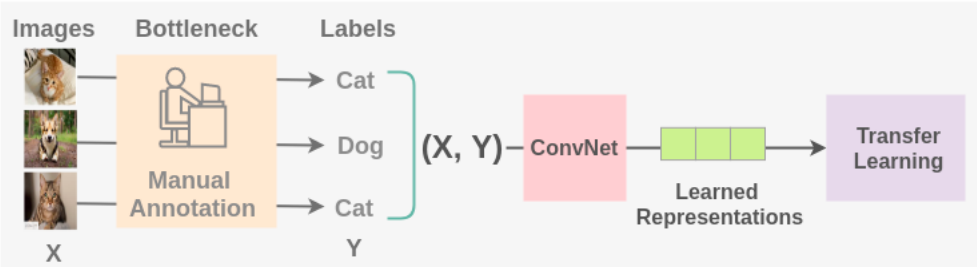
自监督学习



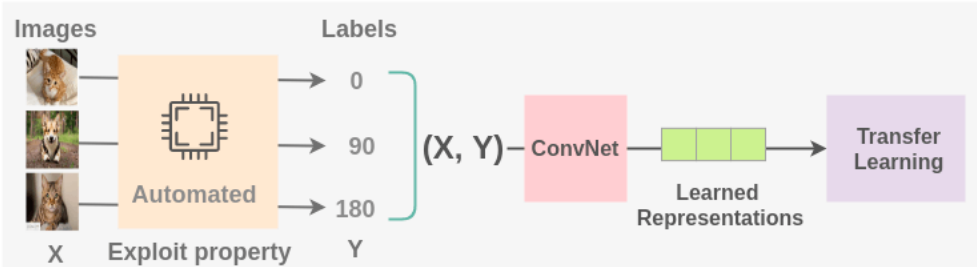
人工定义标签

机器定义标签

Supervised Learning Workflow

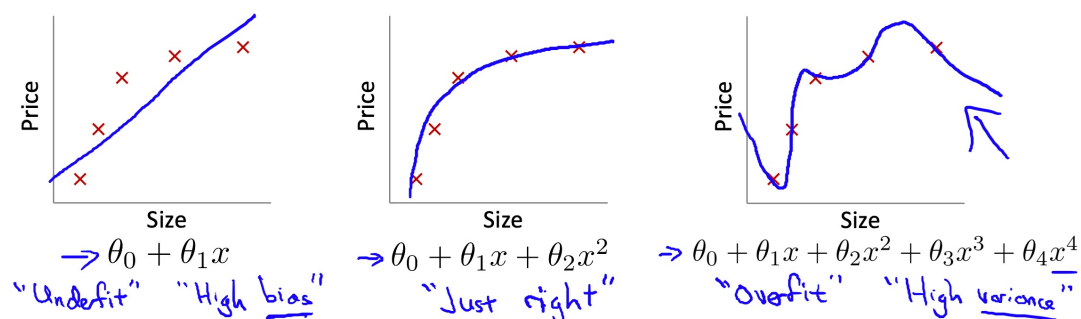


Self-Supervised Learning Workflow



目标函数

目标函数=代价函数(经验风险)+正则项(结构风险)



欠拟合

最优拟合

过拟合

代价函数低

正则项低

"经验不足"

"结构不对"

代价函数(Cost Function)

Hypothesis:

$$h_{\theta}(x) = \theta_0 + \theta_1 x$$

Parameters:

$$\theta_0, \theta_1$$

Cost Function:

$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

Goal: minimize $J(\theta_0, \theta_1)$

正则化 (Regularization)

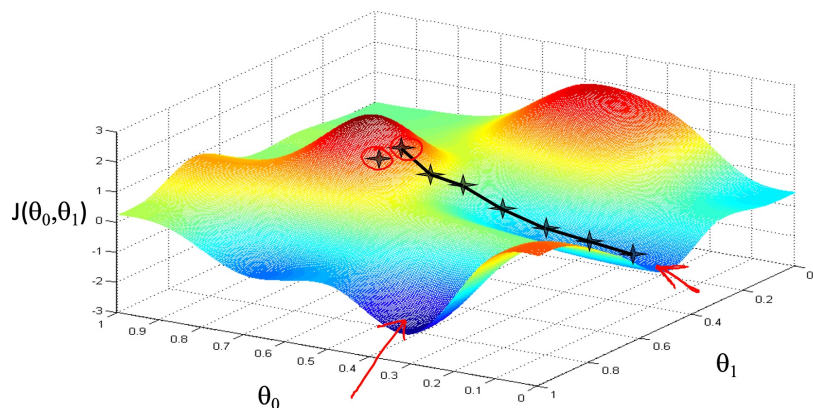
$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \left[\sum_{i=1}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda \sum_{j=1}^n \theta_j^2 \right]$$

$$\min_{\theta} J(\theta)$$

最小化代价函数是机器学习训练的主要目的

随机梯度下降法

对代价函数求导，然后沿着导数方向的反方向调整模型的参数，使得代价函数的值越来越小，模型的效果越来越好。



反向传播算法

一种针对多层神经网络模型进行梯度下降的算法

Backpropagation algorithm

Training set $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (x^{(m)}, y^{(m)})\}$

Set $\Delta_{ij}^{(l)} = 0$ (for all l, i, j).

For $i = 1$ to m

Set $a^{(1)} = x^{(i)}$

前向传播

Perform forward propagation to compute $a^{(l)}$ for $l = 2, 3, \dots, L$

反向传播

Using $y^{(i)}$, compute $\delta^{(L)} = a^{(L)} - y^{(i)}$

Compute $\delta^{(L-1)}, \delta^{(L-2)}, \dots, \delta^{(2)}$

权重更新

$\Delta_{ij}^{(l)} := \Delta_{ij}^{(l)} + a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$

$$D_{ij}^{(l)} := \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} + \lambda \Theta_{ij}^{(l)} \text{ if } j \neq 0$$

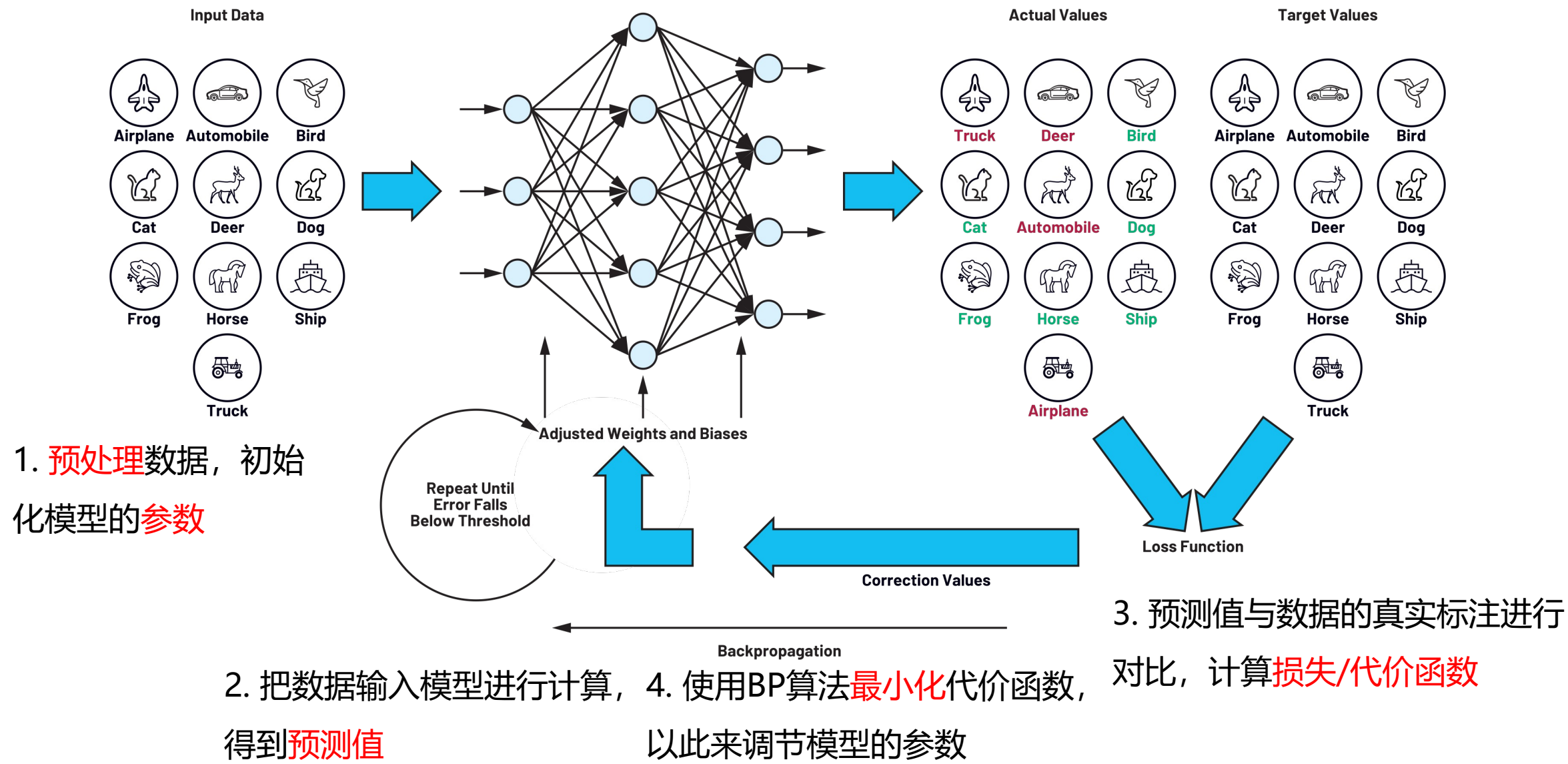
$$D_{ij}^{(l)} := \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} \text{ if } j = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{ij}^{(l)}$$

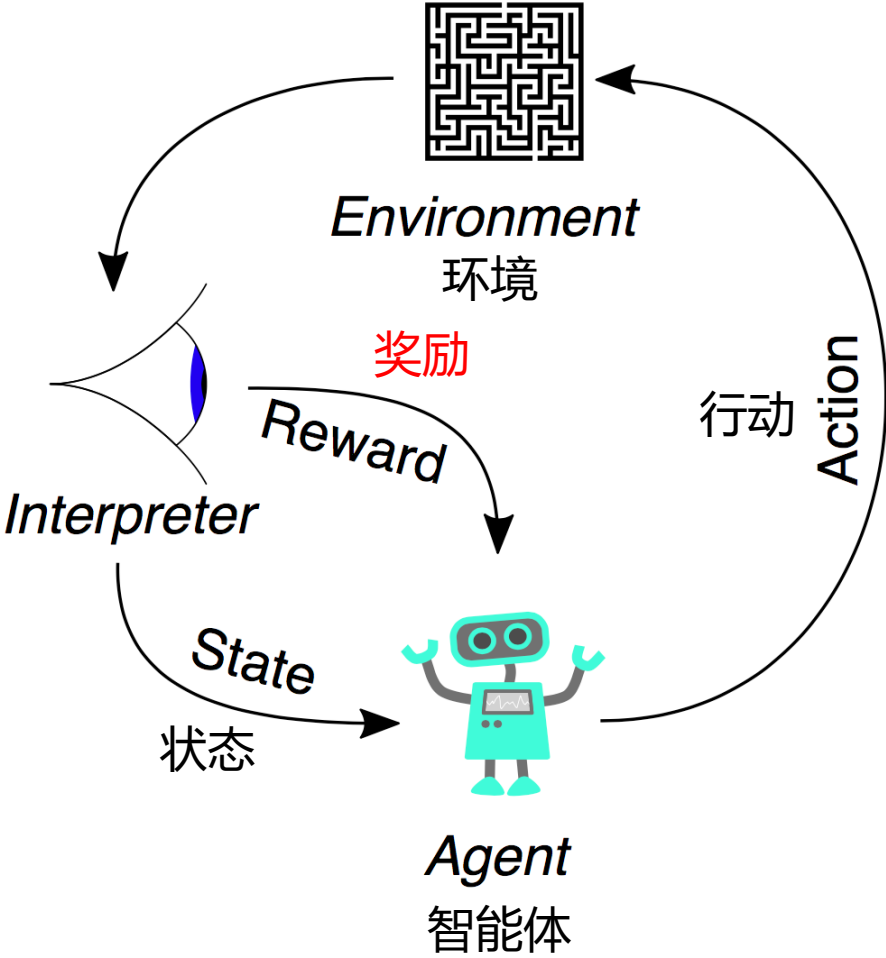
现在绝大多数深度学习模型都是使用BP算法来训练

任意机器学习模型的训练流程

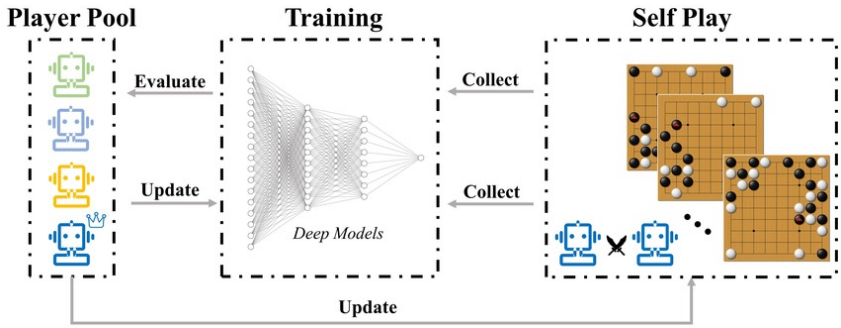
5. 重复，**迭代**调整参数，代价函数**最优**，模型的预测效果最优



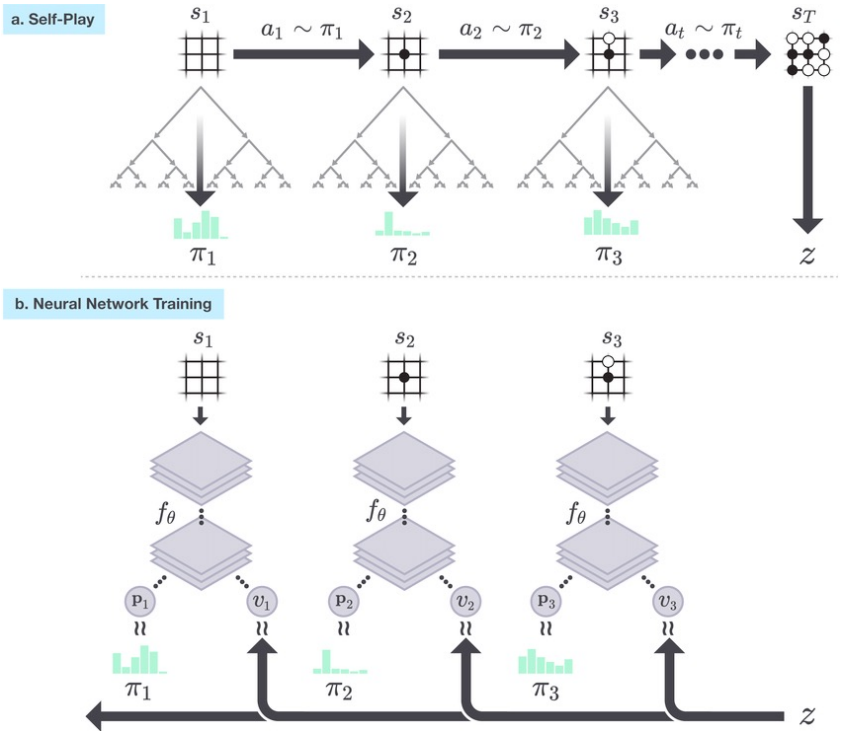
强化学习



奖励机制替代监督者身份



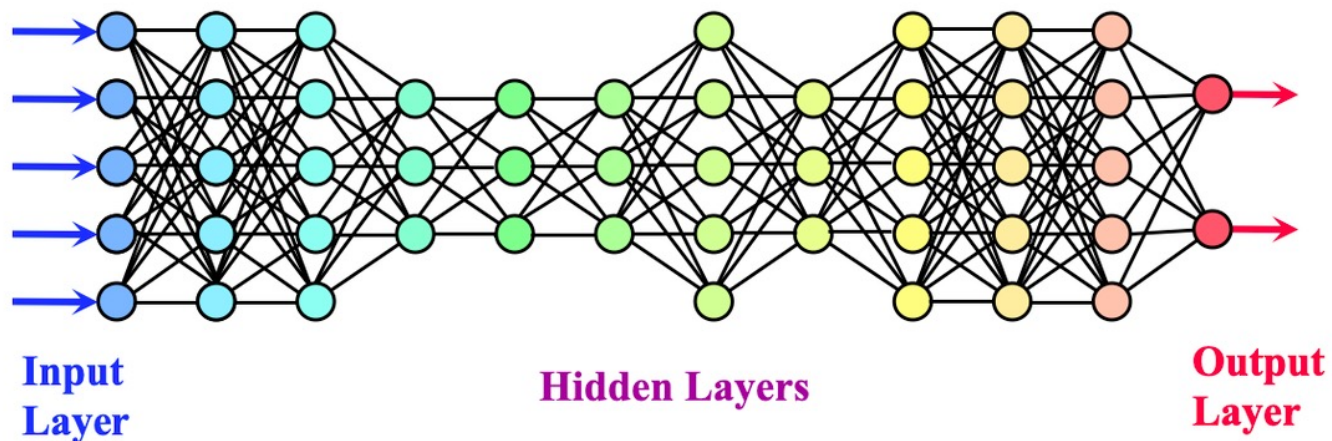
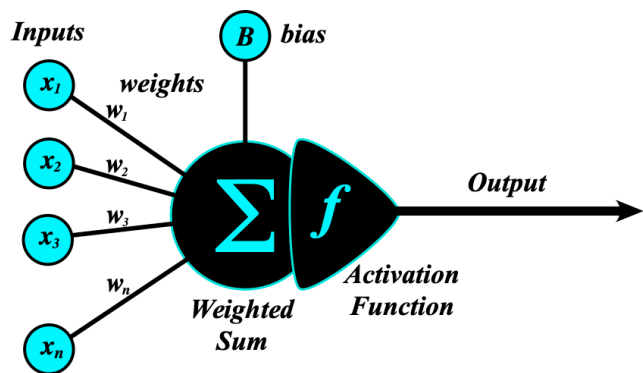
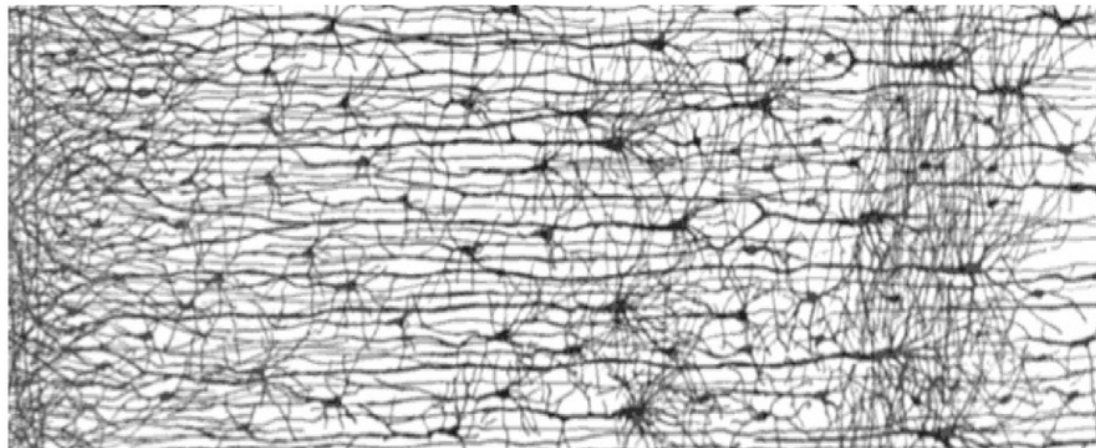
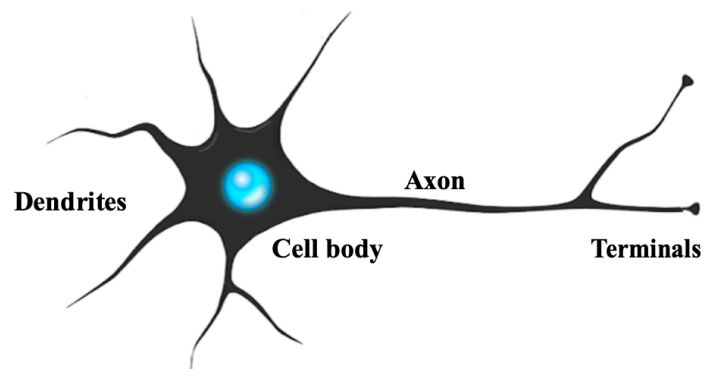
强化学习可以使Alpha GO实现自己和自己下棋



强化学习和深度学习的共同作用是Alpha GO先进的关键

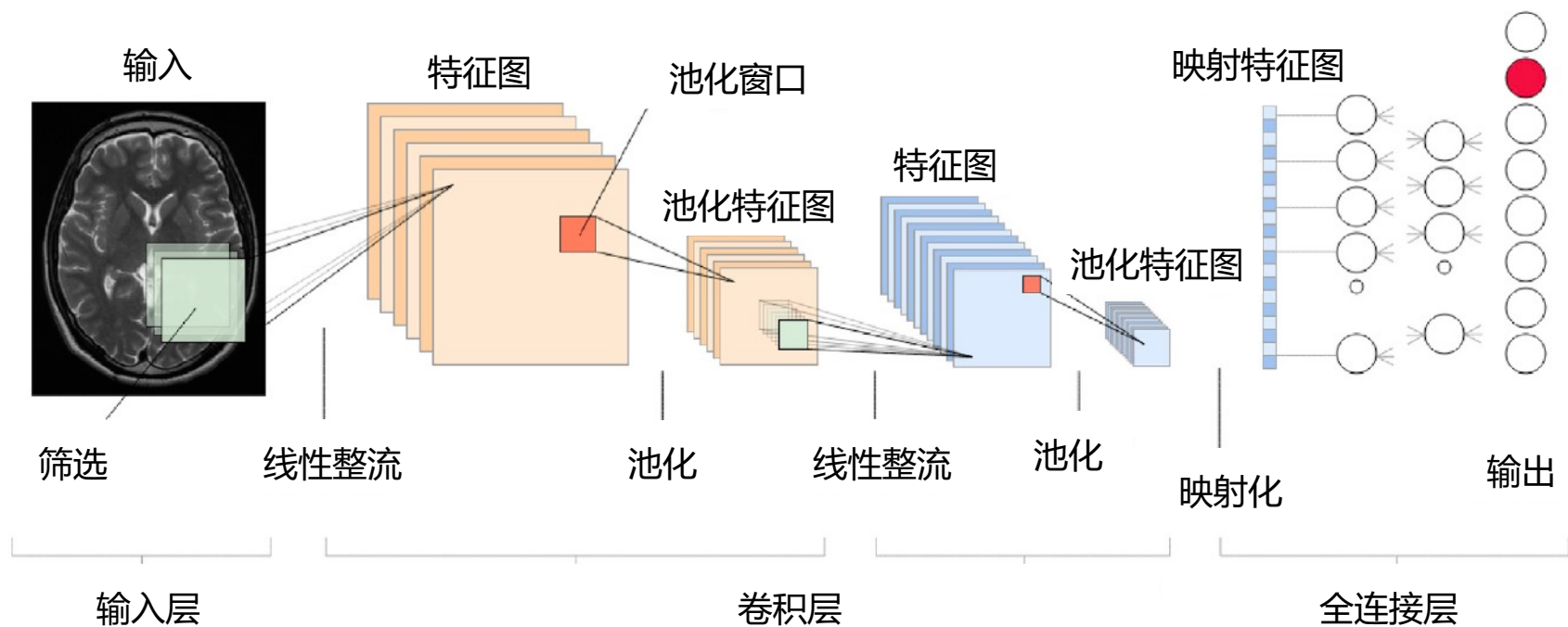
深度学习常用架构

深度神经网络 (Deep Neural Network, DNN)



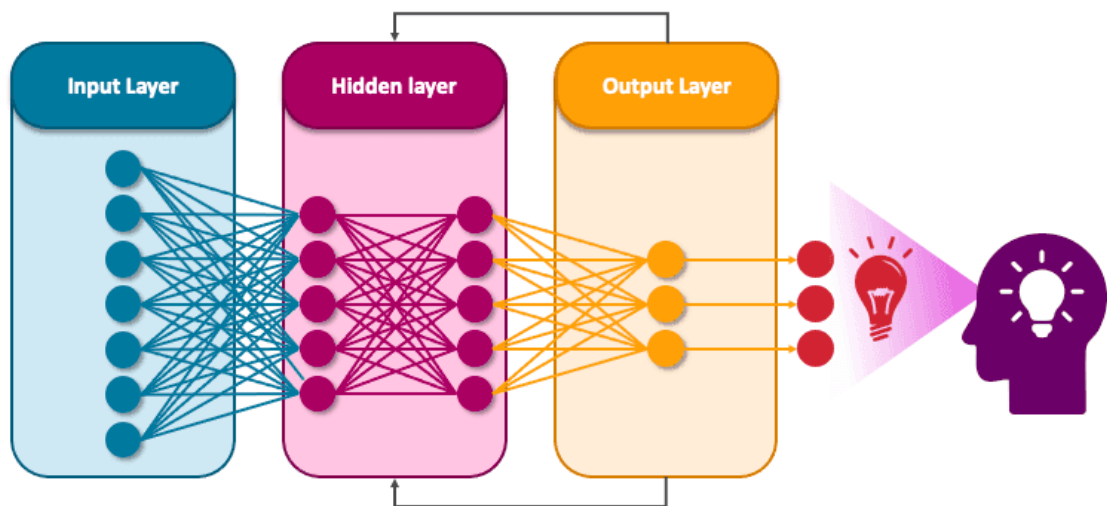
大数据和算力提升使DNN具有了可行性

卷积神经网络 (Convolutional Neural Network, CNN)



根据生物的视觉处理过程设计，专门用于处理**像素**数据，因此普遍适用于**计算机视觉**相关的应用场景

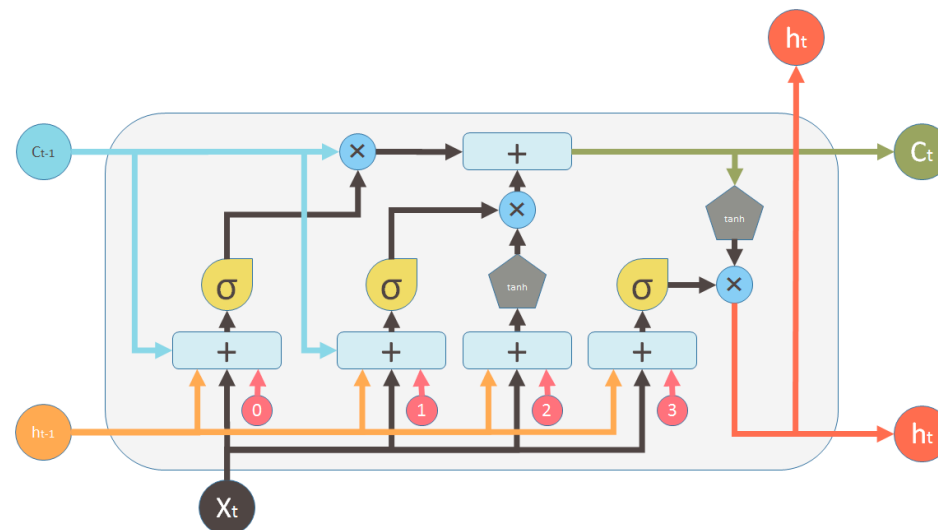
循环神经网络 (Recurrent Neural Network, RNN)



在自然语言中，前一个输入和后一个输入具有
序列关系，例如词性、语境

前一个输出，影响后一个输入的隐层参数

长短时记忆网络 (Long Short-Term Memory, LSTM)



Inputs:

x_t

Input vector

C_{t-1}

Memory from previous block

h_{t-1}

Output of previous block

outputs:

C_t

Memory from current block

h_t

Output of current block

Nonlinearities:

σ

Sigmoid

tanh

Hyperbolic tangent

Bias:

0

Vector operations:

$\times$

Element-wise multiplication

$+$

Element-wise Summation / Concatenation

一种特殊设计的RNN，更适合处理**长文本**

Transformer

6 Dec 2017

Attention Is All You Need

Ashish Vaswani*
Google Brain
avaswani@google.com

Noam Shazeer*
Google Brain
noam@google.com

Niki Parmar*
Google Research
nikip@google.com

Jakob Uszkoreit*
Google Research
usz@google.com

Llion Jones*
Google Research
llion@google.com

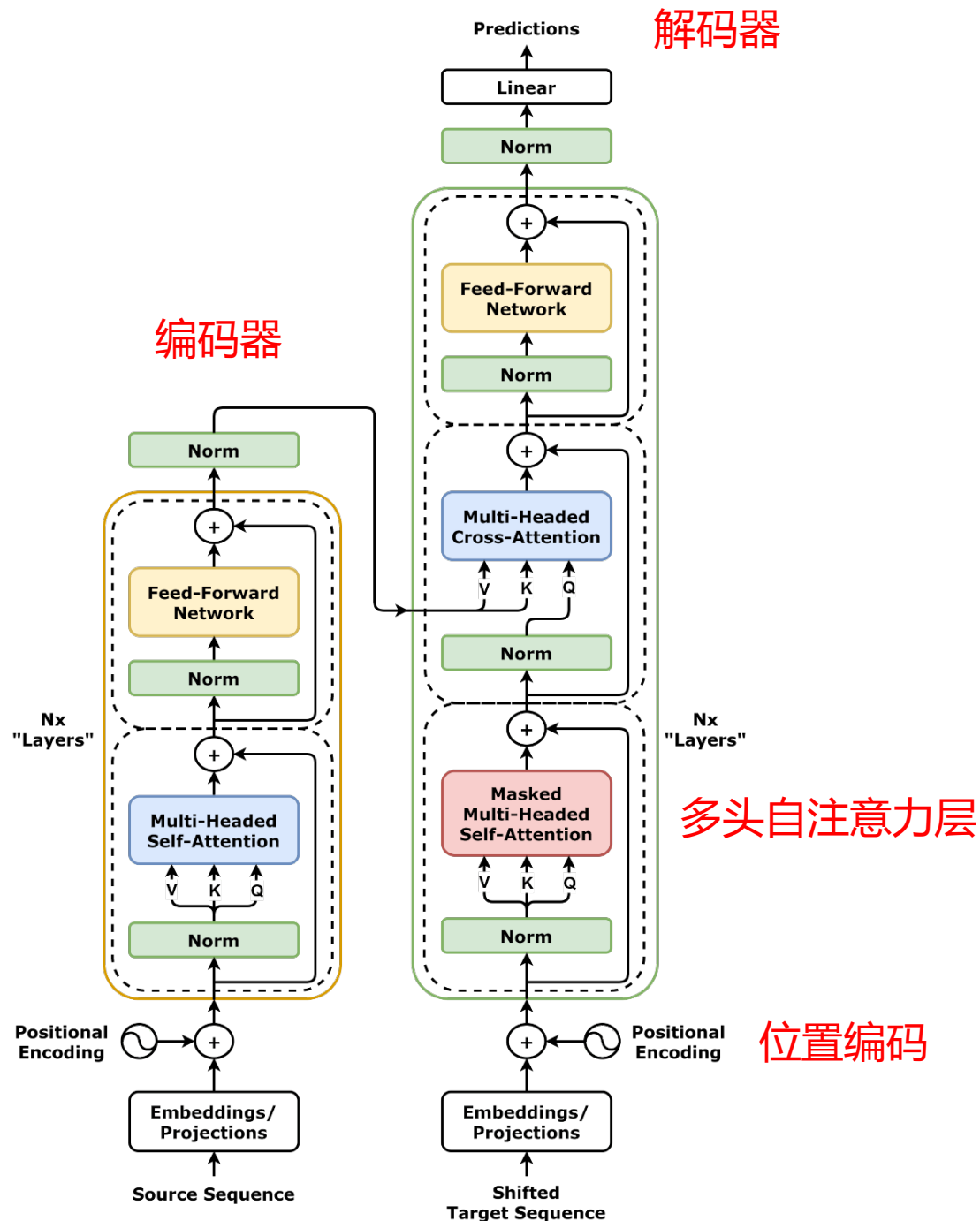
Aidan N. Gomez*[†]
University of Toronto
aidan@cs.toronto.edu

Lukasz Kaiser*
Google Brain
lukaszkaizer@google.com

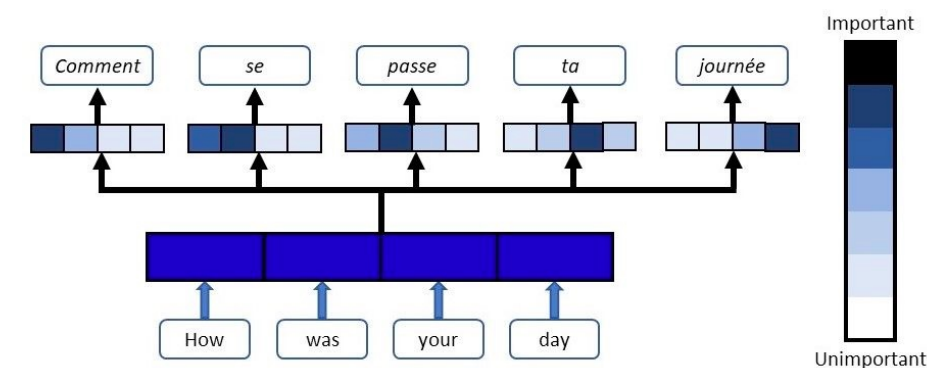
Illia Polosukhin*[‡]
illia.polosukhin@gmail.com

相比于传统的RNN和CNN，Transformer的创新性：

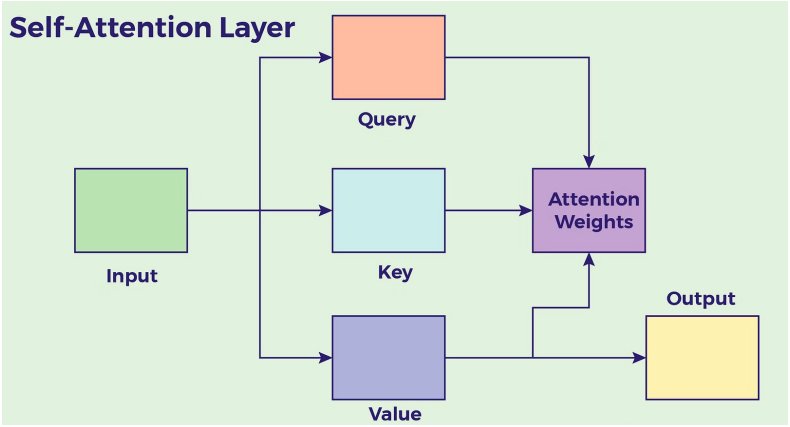
- 强调了**注意力**机制
- 尤其是提出了**自注意力**机制和**多头**自注意力机制
- 设计了**位置编码**，对序列的特殊考虑
- 设计了**编码器-解码器**架构，**并行**处理



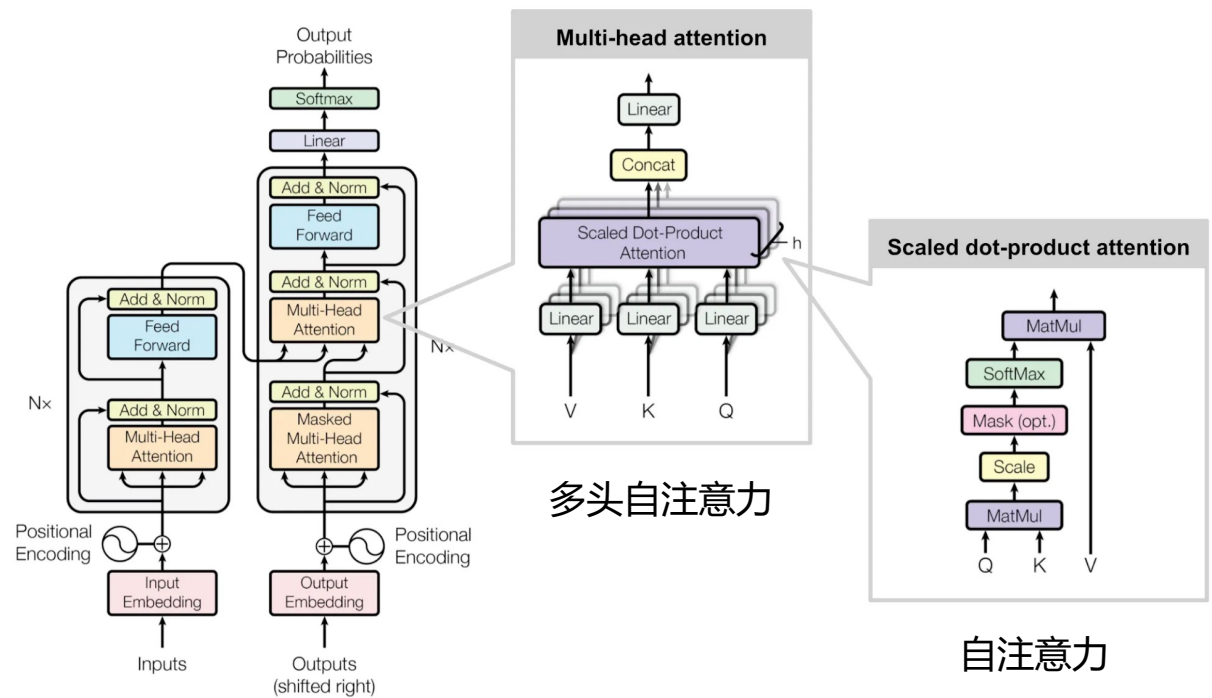
注意力(Attention)



注意力用于计算词元(Token)和序列的相关性



转换为三种向量的映射：
查询(Query)：相似度
键(Key)：序列/位置
值(Value)：词元
归一化三向量后计算加权

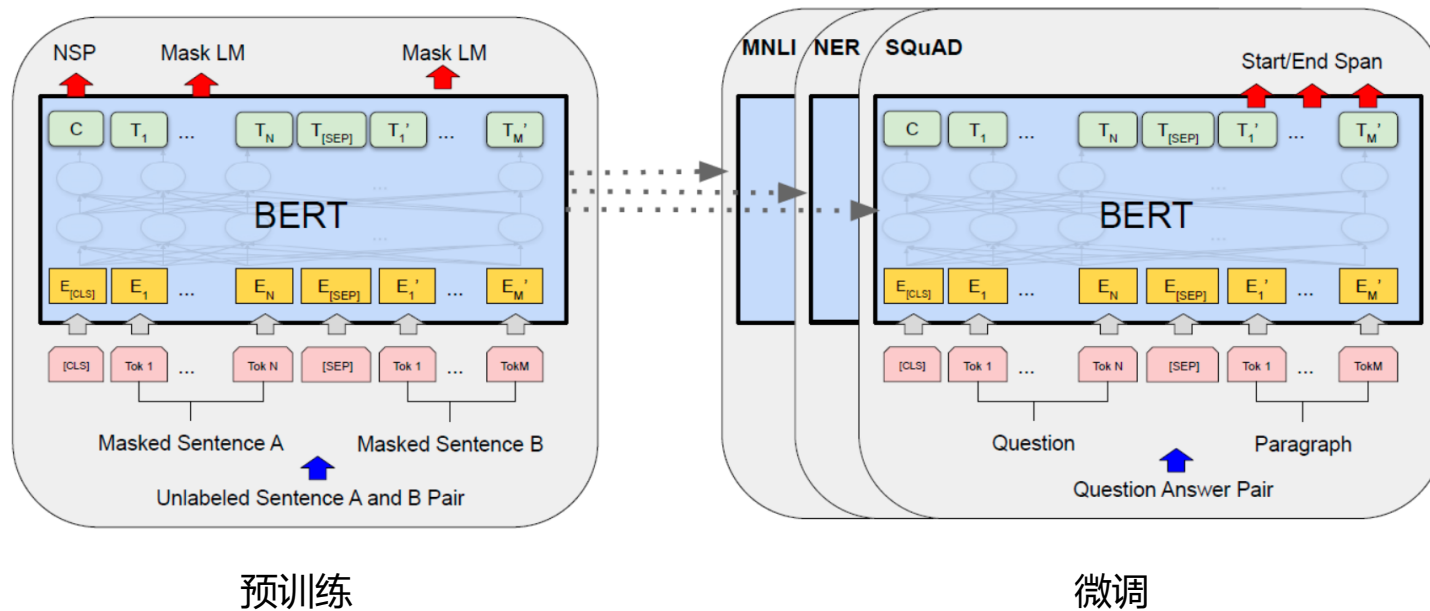


引入多头自注意力机制后：

- 划分成多组向量(头, Head), 每个头同时计算
- 头的并行计算可关注不同类型信息
- 多头通过线性层合并
- 通过不同角度, 理解复杂语义

BERT(Bidirectional Encoder Representations from Transformers)

2018年10月，Google提出大型语言模型BERT，主体使用了Transformer的编码器(Encoder)部份



先进的语言表征：

- 实现双向上下文理解，正读和倒读
- 提出Encoder为主的预训练和微调
- 预训练的遮蔽语言模型(MLM)和下一个句子预测(NSP)

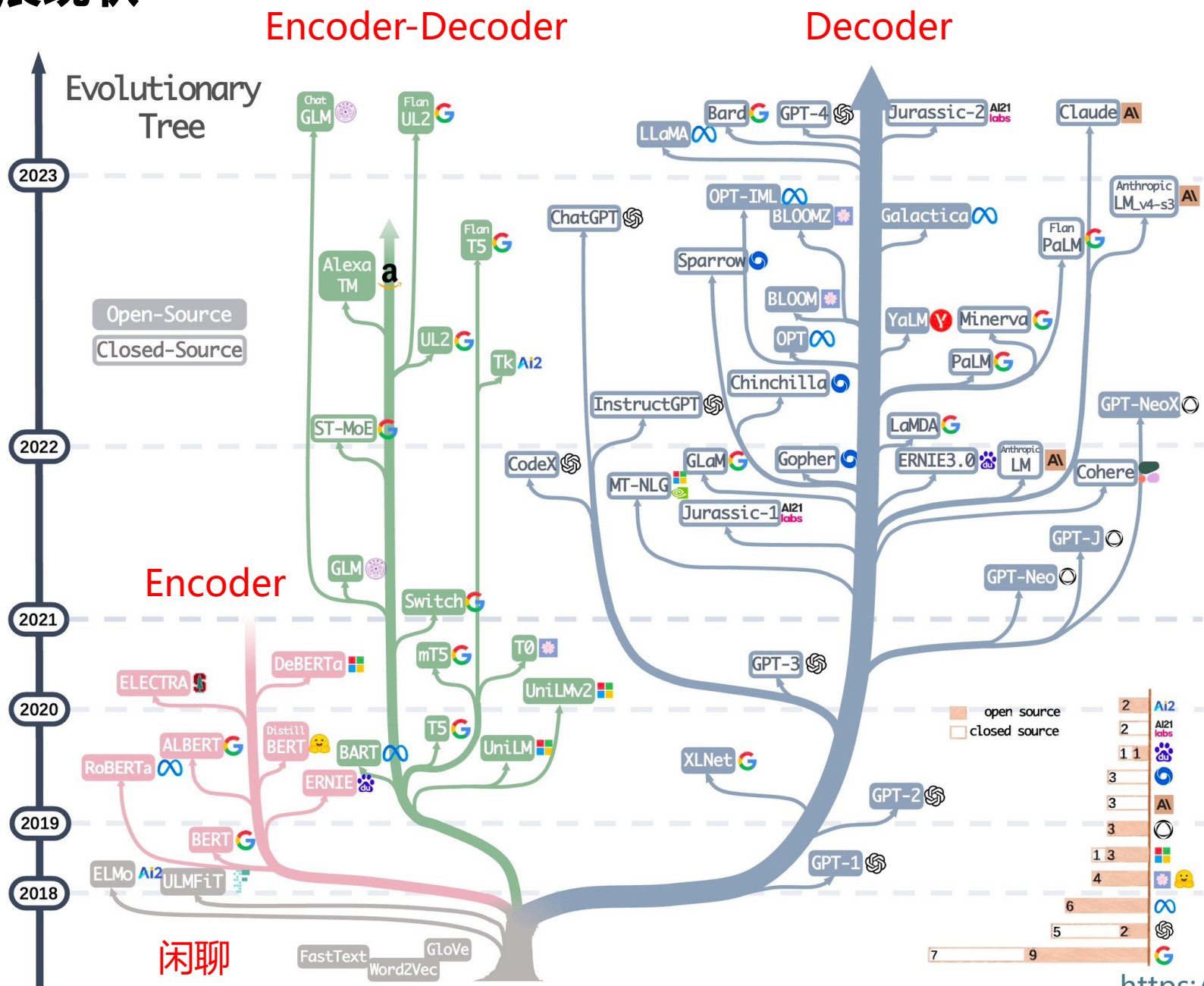
主体为Encoder导致：

- ❑ 难以完成生成任务
- ❑ 仅适用于特定任务专属的大语言模型
- ❑ 微调成本巨大

历代GPT模型

The background features a complex network of nodes and lines. The nodes are represented by circles of varying sizes, primarily in shades of red and purple, with some blue and green nodes visible at the bottom. These nodes are interconnected by a dense web of thin, light-colored lines, creating a sense of a large-scale network or data structure. The overall aesthetic is modern and technological.

大语言模型发展现状



GPT/GPT-1

Improving Language Understanding by Generative Pre-Training

Alec Radford
OpenAI
alec@openai.com

Karthik Narasimhan
OpenAI
karthikn@openai.com

Tim Salimans
OpenAI
tim@openai.com

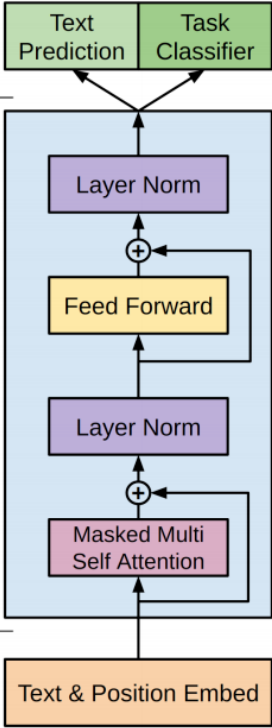
Ilya Sutskever
OpenAI
ilyasu@openai.com

模型参数	1亿
数据集	5G, 7000本未出版书

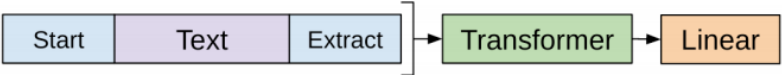
12层自注意力头

12x

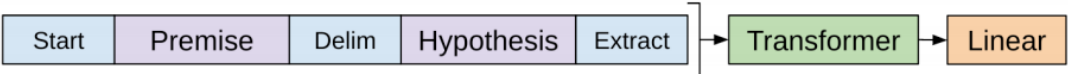
自监督学习



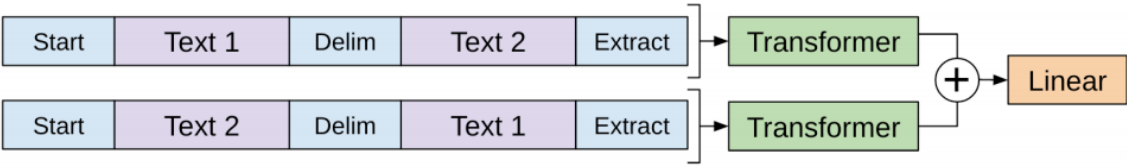
Classification



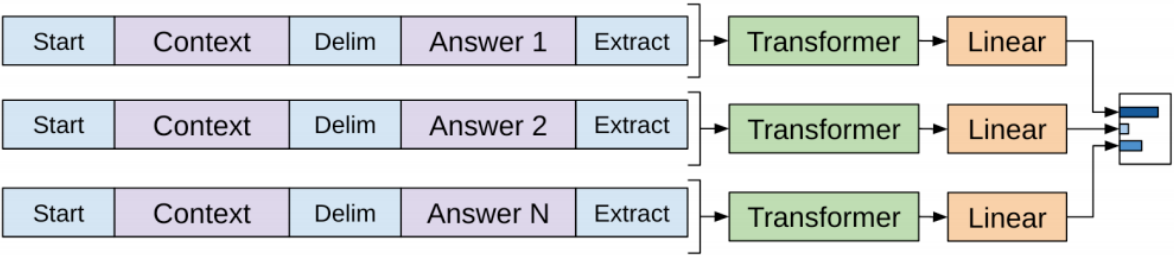
Entailment



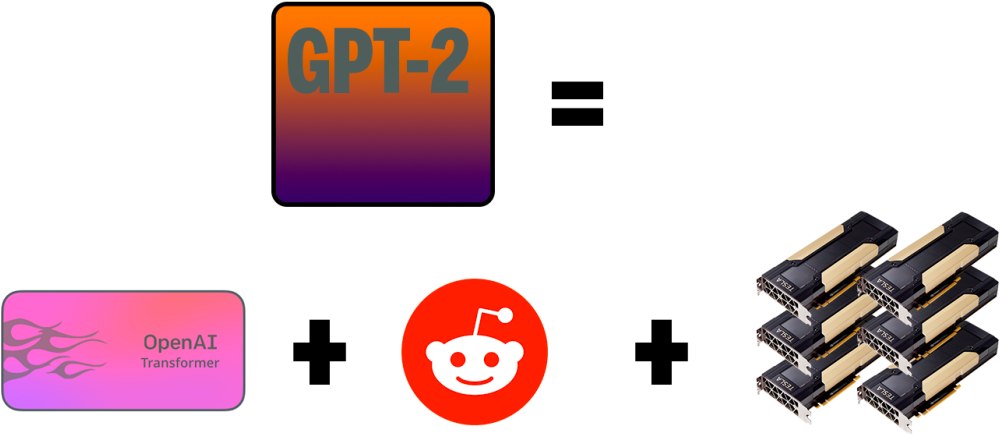
Similarity



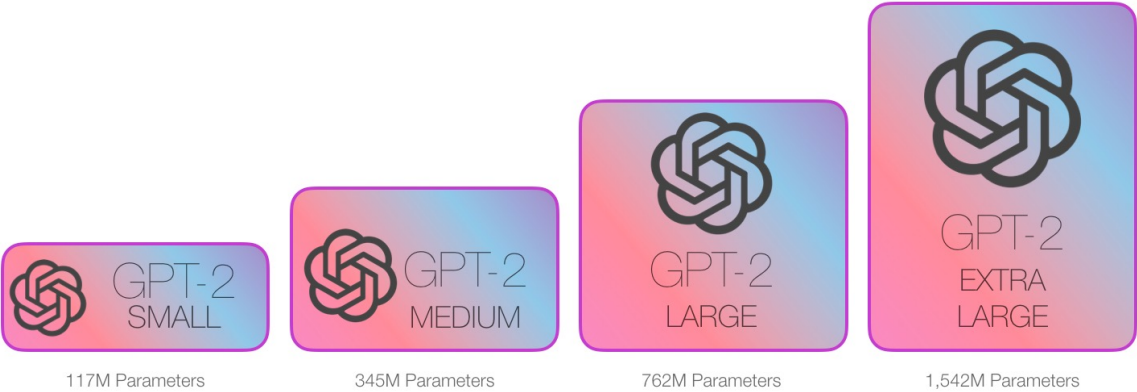
Multiple Choice



GPT-2

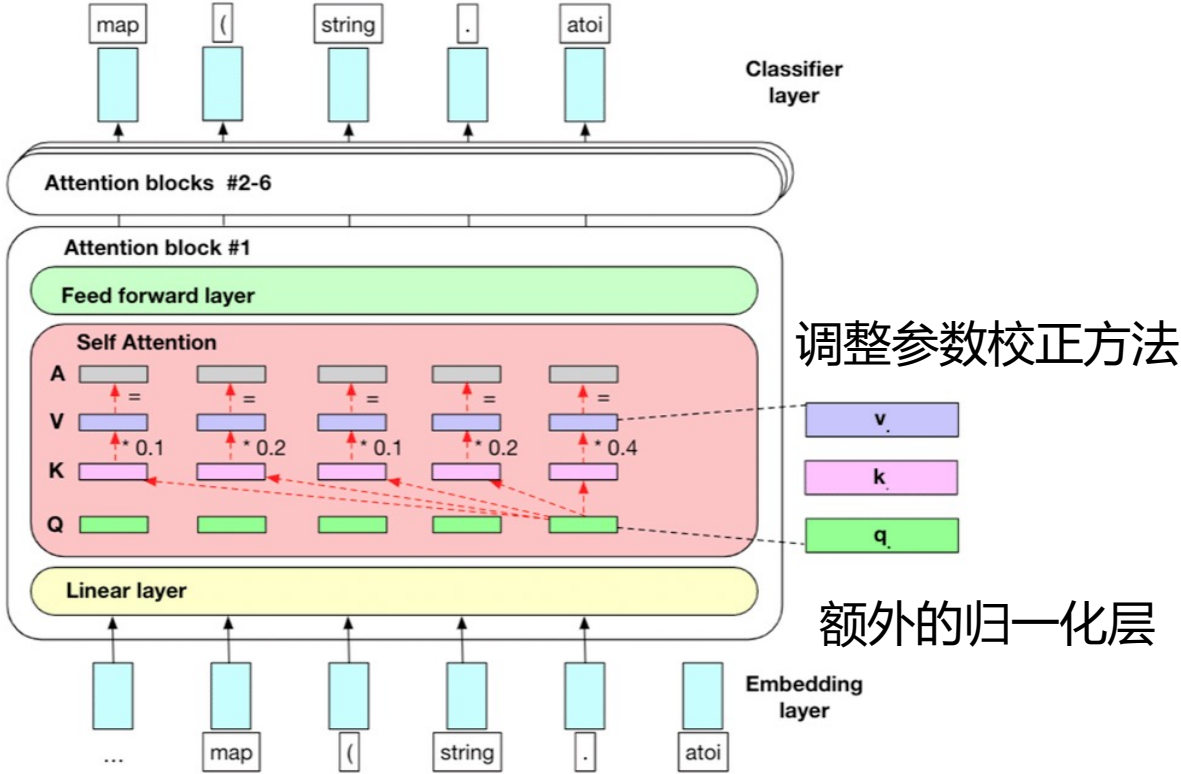


GPT-1基础上主要扩充了参数和数据规模
优化目标保持几乎不需要微调的通用型问答系统



参数规模为变量的测试，使OpenAI坚信参数至上的原则

模型参数	15亿
数据集	40G，来自reddit的800万个文本



GPT-3

Language Models are Few-Shot Learners				
Tom B. Brown*	Benjamin Mann*	Nick Ryder*	Melanie Subbiah*	
Jared Kaplan†	Prafulla Dhariwal	Arvind Neelakantan	Pranav Shyam	Girish Sastry
Amanda Askell	Sandhini Agarwal	Ariel Herbert-Voss	Gretchen Krueger	Tom Henighan
Rewon Child	Aditya Ramesh	Daniel M. Ziegler	Jeffrey Wu	Clemens Winter
Christopher Hesse	Mark Chen	Eric Sigler	Mateusz Litwin	Scott Gray
Benjamin Chess		Jack Clark	Christopher Berner	
Sam McCandlish	Alec Radford	Ilya Sutskever	Dario Amodei	
OpenAI				

模型参数	1750亿
数据集	45T，过滤后570G

GPT-3训练一次的费用约460万美元，
训练时间为355个GPU年，总成本达到
1200万美元。

The three settings we explore for in-context learning

Zero-shot

The model predicts the answer given only a natural language description of the task. No gradient updates are performed.



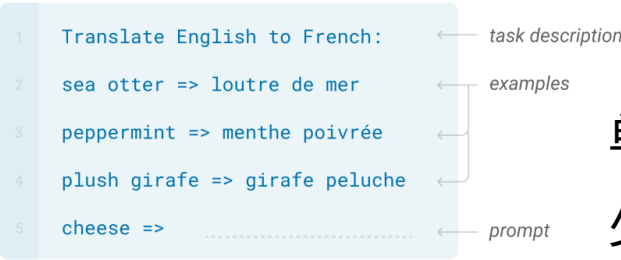
One-shot

In addition to the task description, the model sees a single example of the task. No gradient updates are performed.



Few-shot

In addition to the task description, the model sees a few examples of the task. No gradient updates are performed.



Traditional fine-tuning (not used for GPT-3)

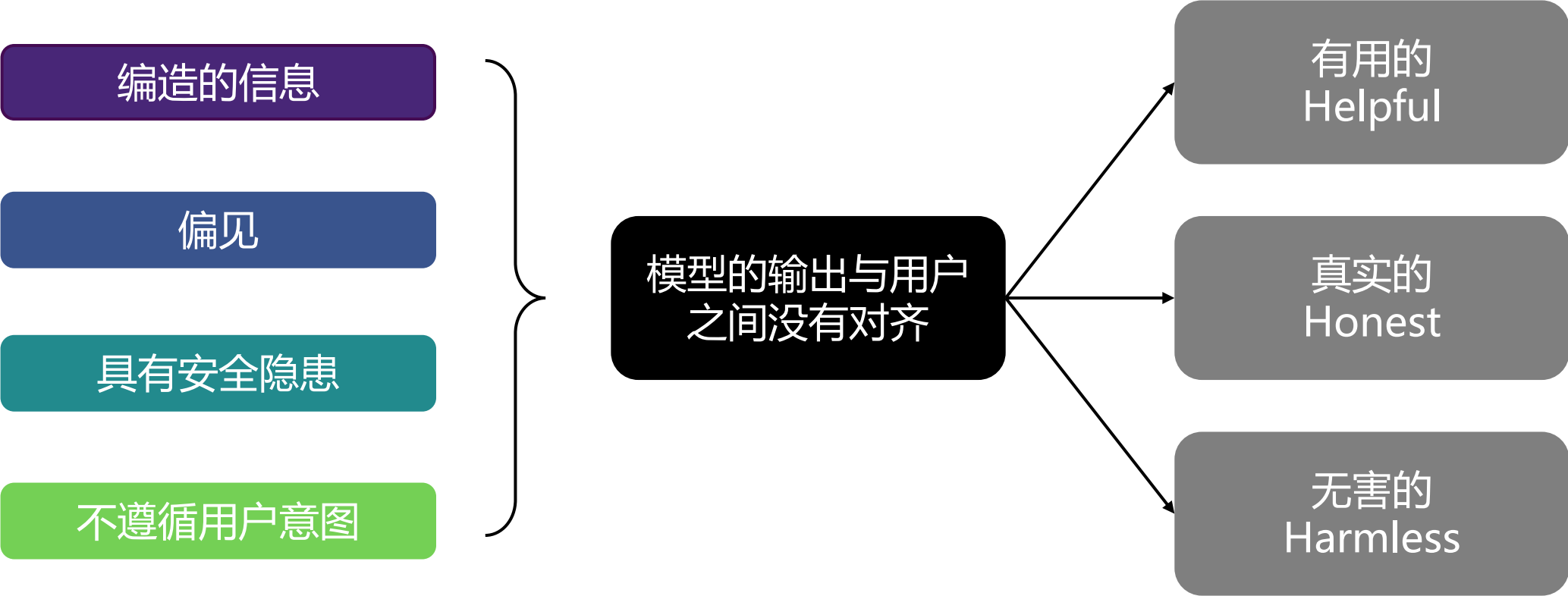
Fine-tuning

The model is trained via repeated gradient updates using a large corpus of example tasks.



零样本学习： 仅给一个自然语言指令
单样本学习： 仅允许放入一个演示示例
少样本学习： 上下文范围尽可能多示例

GPT-3提出后LLM生成内容的问题

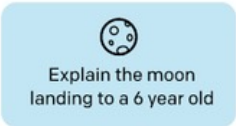


人类反馈强化学习(Reinforcement Learning from Human Feedback, RLHF)

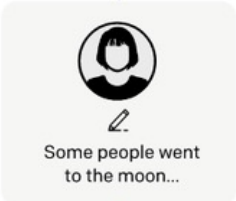
训练监督学习

Step 1
Collect demonstration data,
and train a supervised policy.

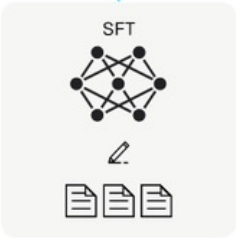
A prompt is
sampled from our
prompt dataset.



A labeler
demonstrates the
desired output
behavior.



This data is used
to fine-tune GPT-3
with supervised
learning.



收集提示数据

人工编写答案

微调GPT-3

创建奖励模型

Step 2
Collect comparison data,
and train a reward model.

A prompt and
several model
outputs are
sampled.

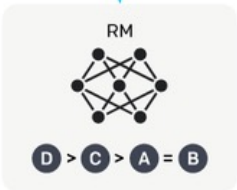
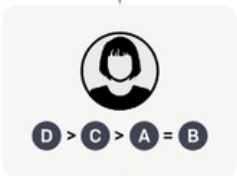
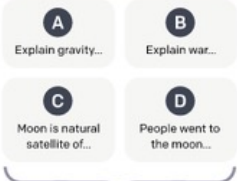
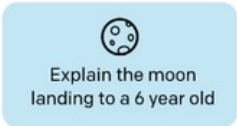
收集多组
提示数据

A labeler ranks
the outputs from
best to worst.

答案排序

This data is used
to train our
reward model.

训练奖励模型



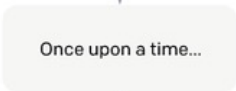
利用强化学习优化模型

Step 3
Optimize a policy against
the reward model using
reinforcement learning.

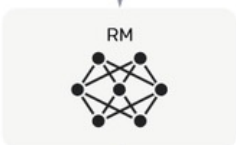
A new prompt
is sampled from
the dataset.



The policy
generates
an output.



The reward model
calculates a
reward for
the output.



The reward is
used to update
the policy
using PPO.



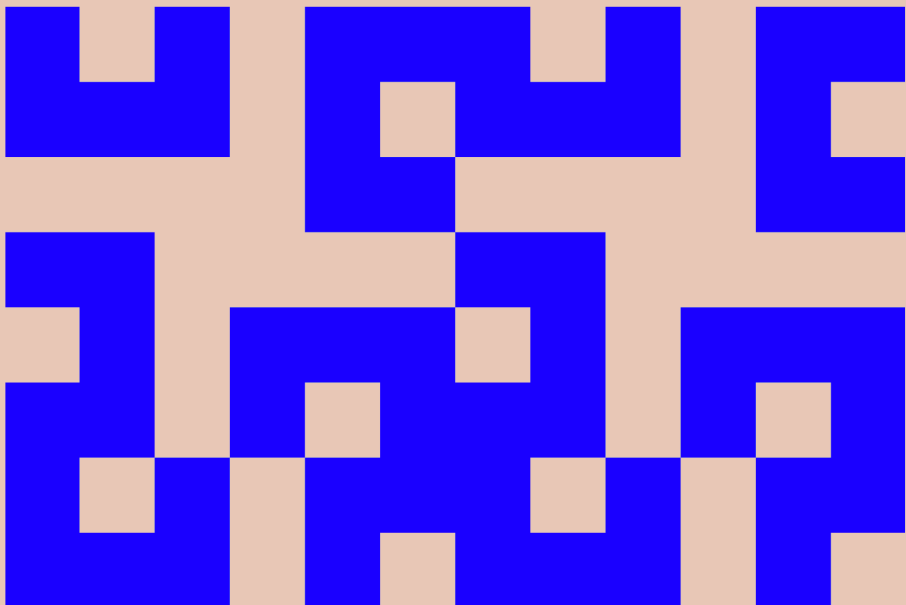
PPO算法

奖励

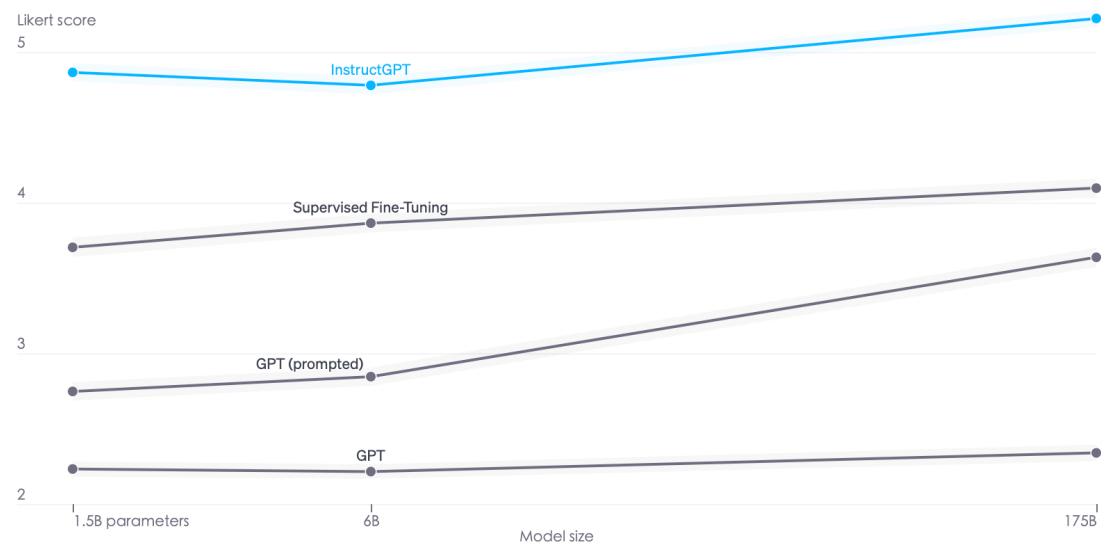
InstructGPT

Research

Aligning language models to follow instructions



We've trained language models that are much better at following user intentions than GPT-3 while also making them more truthful and less toxic, using techniques developed through our alignment research. These *InstructGPT* models, which are trained with humans in the loop, are now deployed as the default language models on our API.



回答问题相关性上，15亿的参数的InstructGPT就显著高于GPT-3

Dataset	RealToxicity 毒性	Dataset	TruthfulQA 真实性
GPT	0.233	GPT	0.224
Supervised Fine-Tuning	0.199	Supervised Fine-Tuning	0.206
InstructGPT	0.196	InstructGPT	0.413

API Dataset	Hallucinations 幻觉	API Dataset	Customer Assistant Appropriate 遵循用户意图
GPT	0.414	GPT	0.811
Supervised Fine-Tuning	0.078	Supervised Fine-Tuning	0.880
InstructGPT	0.172	InstructGPT	0.902

GPT-3.5和GPT-4的规模

GPT-3.5

InstructGPT模式下的姐妹版本

模型参数	1750亿
数据集	45T，过滤后570G，近5000亿词元

单次训练成本约2000万美元

GPT-4

参数升级，且加入了多模态

模型参数	1万亿 ~ 100万亿，18000亿
数据集	13T，近13万亿词元

目前最强大的LLM

单次训练成本约6300万美元

GPT-4在智商上的进步

例如可代表人类智商的考试

百分比代表超越人类平均水平排名

统一律师考试

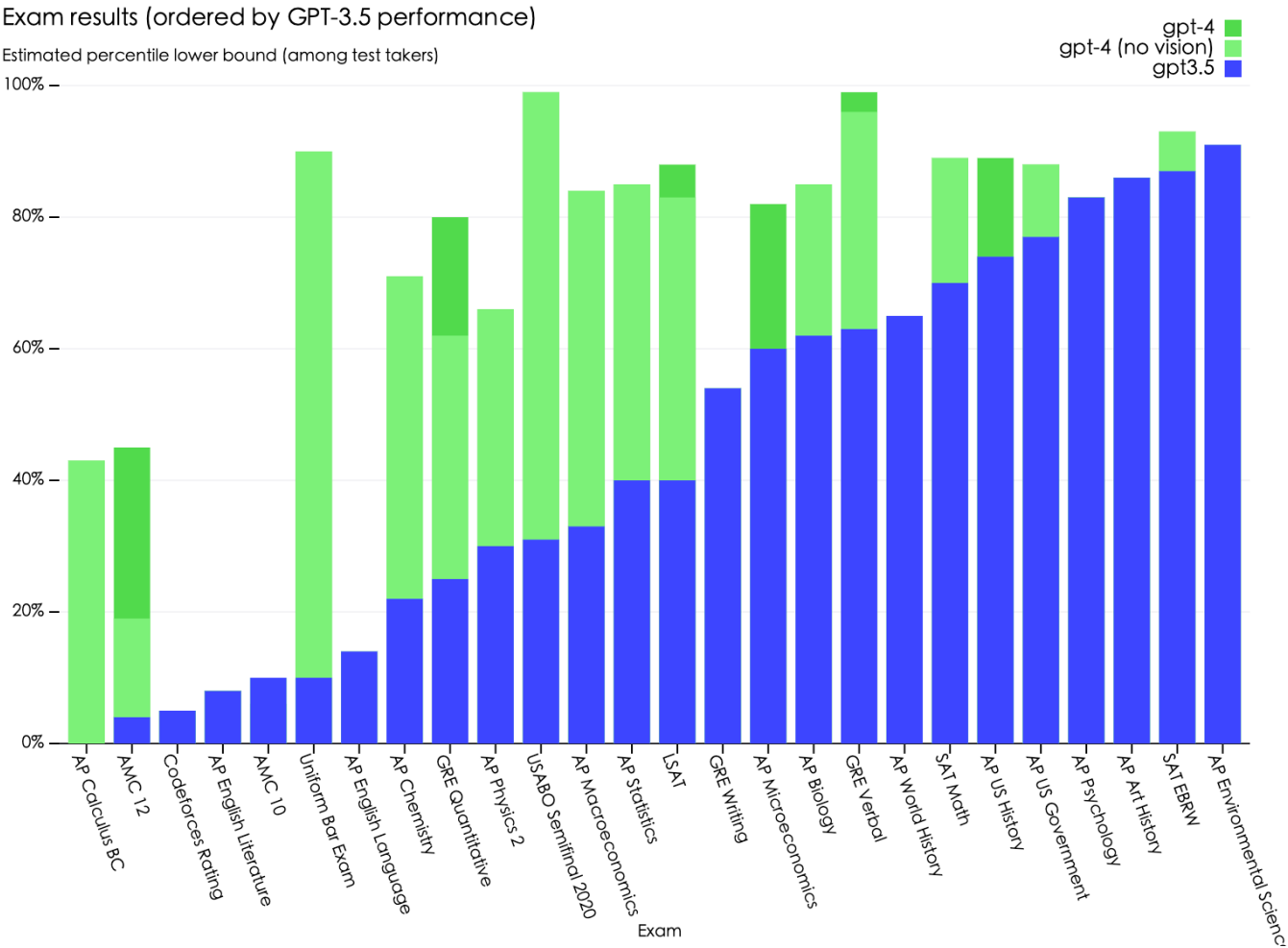
GPT-3.5: 10%

GPT-4: **90%**

生物奥赛题

GPT-3.5: 31%

GPT-4: **99%**



练习

任选一个场景，对比GPT-3.5和GPT-4模型的效果：

- 选择一篇熟悉的英文研究论文，节选摘要或其他500词以内的段落，对比中文译文
- 选择一个熟悉的研究领域，提问术语的解释
- 选择一个熟悉的数据集，复制数据结构后提出分析需求，对比解决方案
- 选择一段熟悉的代码，对比注释

ChatGPT的提示词进阶

The background of the slide features a complex, abstract network of nodes and connecting lines. The nodes are represented by circles of varying sizes, colored in shades of red, purple, and blue. The lines are thin and grey, creating a web-like structure that fills the right side of the image. The overall aesthetic is modern and technological, suggesting a theme of artificial intelligence or data science.

提示词工程



Prompt engineering

This guide shares strategies and tactics for getting better results from large language models (sometimes referred to as GPT models) like GPT-4. The methods described here can sometimes be deployed in combination for greater effect. We encourage experimentation to find the methods that work best for you.

Some of the examples demonstrated here currently work only with our most capable model, gpt-4. In general, if you find that a model fails at a task and a more capable model is available, it's often worth trying again with the more capable model.

You can also explore example prompts which showcase what our models are capable of:



Prompt examples

Explore prompt examples to learn what GPT models can do

OpenAI官方的提示词工程指南

<https://platform.openai.com/docs/guides/prompt-engineering>

两个基本原则：

指示要清楚且具体

基础篇

快速且直观完成的任务

让模型有时间“思考”

进阶篇

需要缓慢且深思熟虑思考才能完成的任务

思维链(Chain of Thought, CoT)

Chain-of-Thought Prompting Elicits Reasoning in Large Language Models

Jason Wei Xuezhi Wang Dale Schuurmans Maarten Bosma
Brian Ichter Fei Xia Ed H. Chi Quoc V. Le Denny Zhou
Google Research, Brain Team
{jasonwei,dennyzhou}@google.com

本质：一种提示模版，使LLM可以根据模版模仿人类思考，给出逐步的推理依据，得到最终答案，每一步推理组成的句子集合就是思维链的内容

功能：分配更多计算资源，激发LLM潜力，增强输出结果的可解释性

适用对象：参数量超过1000亿的LLM

Standard Prompting

Model Input

Q: Roger has 5 tennis balls. He buys 2 more cans of tennis balls. Each can has 3 tennis balls. How many tennis balls does he have now?

A: The answer is 11.

Q: The cafeteria had 23 apples. If they used 20 to make lunch and bought 6 more, how many apples do they have?

Model Output

A: The answer is 27. ❌

Chain-of-Thought Prompting

Model Input

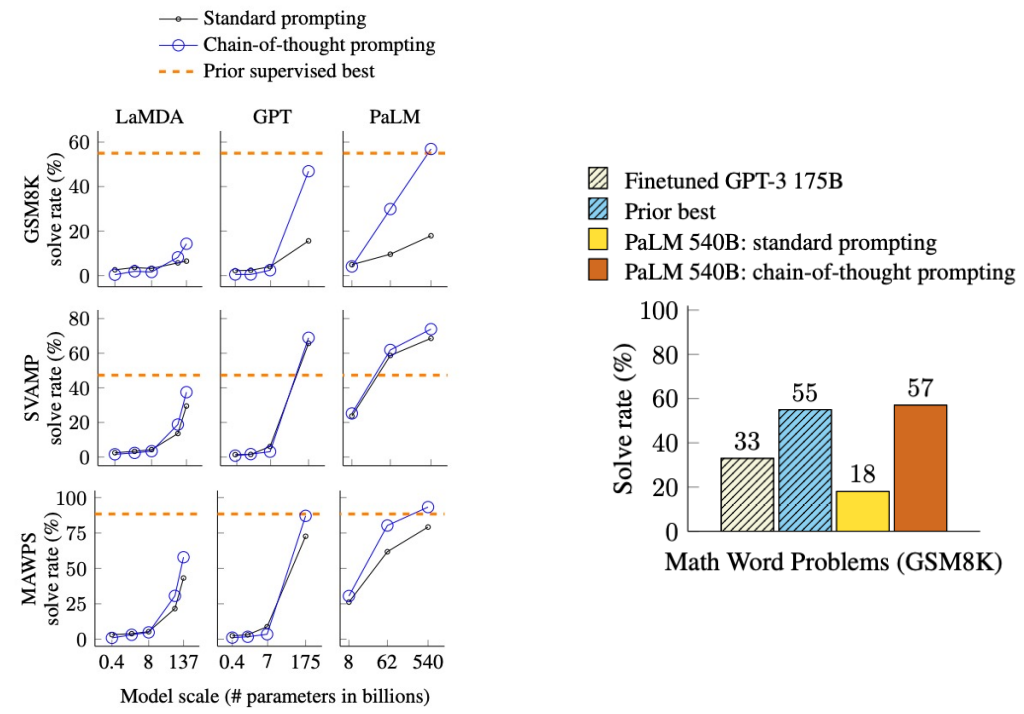
Q: Roger has 5 tennis balls. He buys 2 more cans of tennis balls. Each can has 3 tennis balls. How many tennis balls does he have now?

A: Roger started with 5 balls. 2 cans of 3 tennis balls each is 6 tennis balls. $5 + 6 = 11$. The answer is 11.

Q: The cafeteria had 23 apples. If they used 20 to make lunch and bought 6 more, how many apples do they have?

Model Output

A: The cafeteria had 23 apples originally. They used 20 to make lunch. So they had $23 - 20 = 3$. They bought 6 more apples, so they have $3 + 6 = 9$. The answer is 9. ✅



1. 零样本思维链(Zero-shot-CoT)

在提示词的最后添加：

- 1. ...让我们逐步思考
- 2. ...让我们逐步解决问题，确保我们得到正确的答案
- ...

可组合提示词：所以问题的答案是：

No.	Category	Zero-shot CoT Trigger Prompt	Accuracy
1	APE	Let’s work this out in a step by step way to be sure we have the right answer.	82.0
2	Human-Designed	Let’s think step by step. (*1)	78.7
3		First, (*2)	77.3
4		Let’s think about this logically.	74.5
5		Let’s solve this problem by splitting it into steps. (*3)	72.2
6		Let’s be realistic and think step by step.	70.8
7		Let’s think like a detective step by step.	70.3
8		Let’s think	57.5
9		Before we dive into the answer,	55.7
10		The answer is after the proof.	45.7
-		(Zero-shot)	17.7

零样本思维链 (Zero-Shot Prompting) 回答示例：

1. 请介绍一下新污染物治理的概念和目标。

ChatGPT: 新污染物治理是指针对新型污染物的控制和管理措施。其目标是减少新型污染物的排放，以保护环境和人类健康。

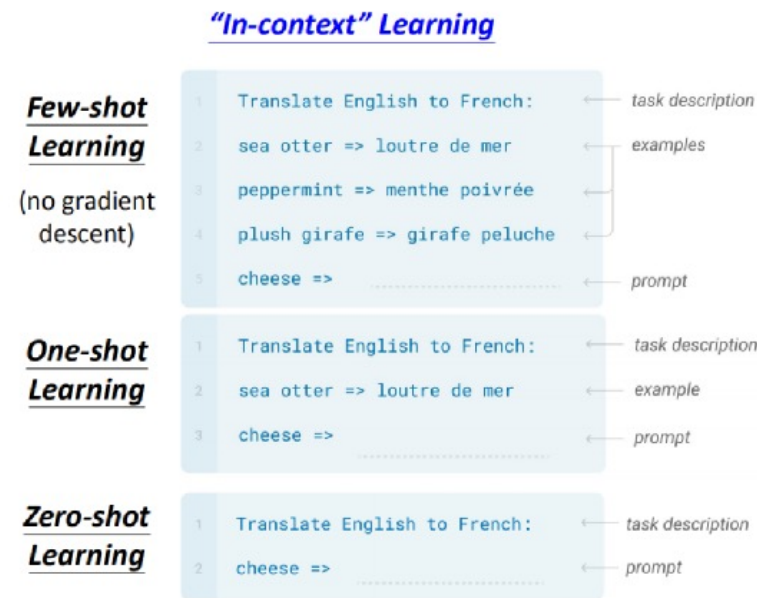
2. 新污染物治理对环境和人类健康有何重要性？

ChatGPT: 新污染物治理非常重要，因为新型污染物可能对生态系统和人类健康产生危害。治理可以降低这些危害并维护可持续性。

3. 政府在新污染物治理方面扮演什么角色？

ChatGPT: 政府在新污染物治理中扮演着监管和制定政策的角色。它们制定法规来限制排放，监督环境状况，并促进技术创新。

2.1 上下文学习(Few-shot-CoT)



1. 请介绍一下新污染物治理的概念和目标。

ChatGPT: 新污染物治理是一项多方面的工作，旨在减少新型污染物的排放和影响。其目标包括改善环境质量、保护生态系统、维护人类健康以及促进可持续发展。

2. 有哪些新型污染物的例子，它们可能对生态系统和人类健康产生危害？

ChatGPT: 一些新型污染物的例子包括微塑料、挥发性有机化合物、新型化学品等。它们可能对水资源、空气质量和食品链产生潜在危害。

3. 新污染物治理涉及哪些方面，如监测、预防和治理？

ChatGPT: 新污染物治理包括监测新型污染物的来源和浓度，预防其排放，以及采用治理措施如清洁技术和政策法规，以减少其影响。

先给出多个完整的例子：[自我描述1xxx.];[自我描述2xxx.]... 根据这些例子，请思考[...]

2.2 自动思维链

由LLM生成例子并采样，加入提示：

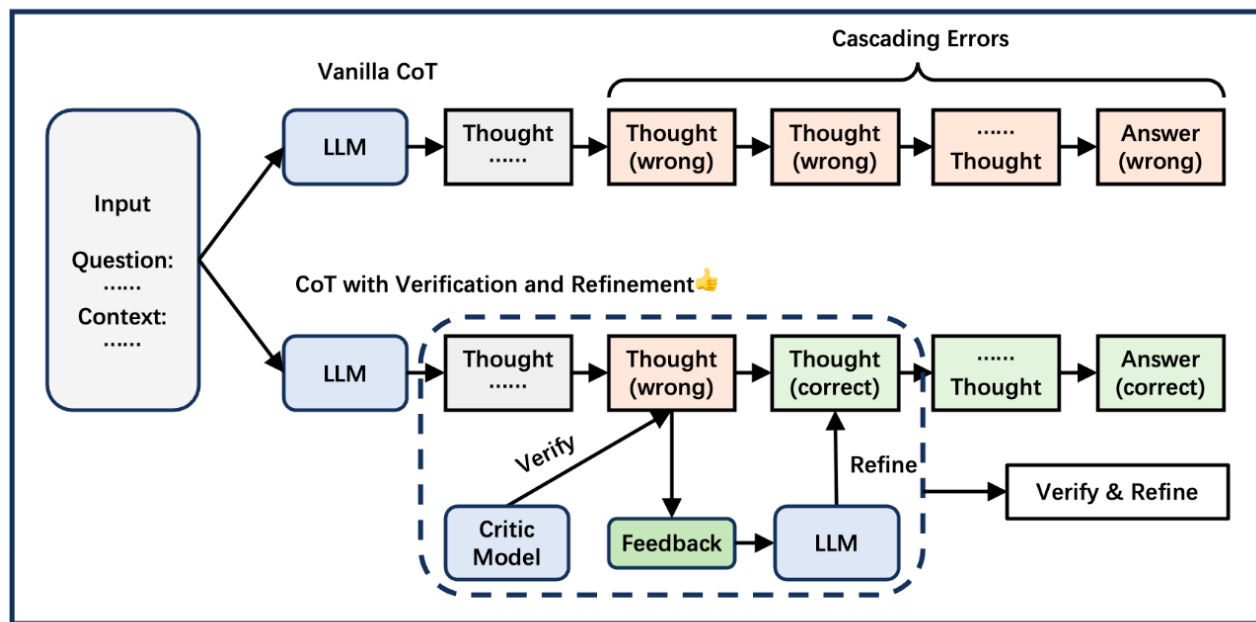
[零样本1xxx.];[零样本2xxx.]... 根据这些例子，请思考[...]

3. 自我一致思维链(Self-Consistency)

问题： LLM生成CoT时仅采用贪婪解码生成单一结果，导致鲁棒性不足

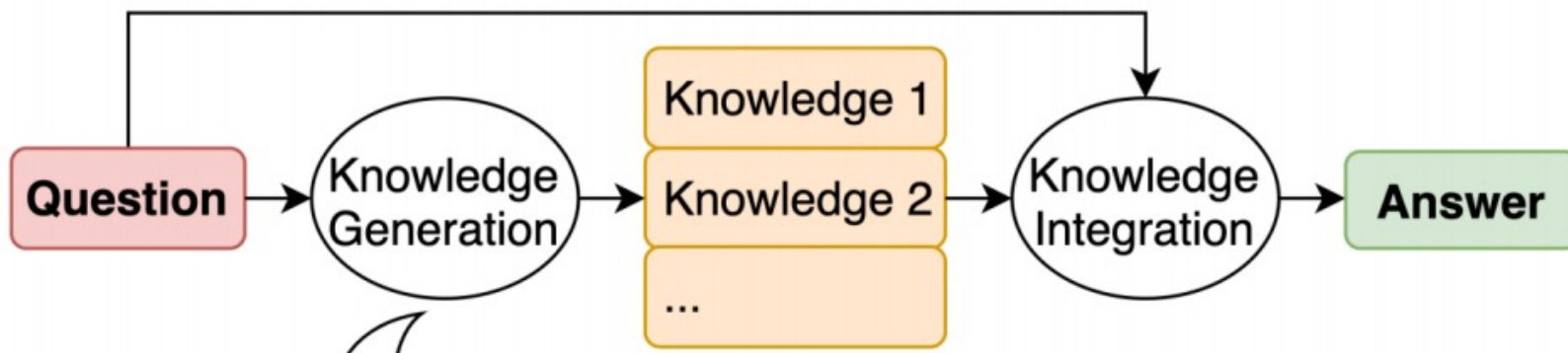
解决： 命令LLM生成不同CoT，获得不同答案后打分，剔除错误答案，多次迭代选出多个CoT生成的共同答案

指示错误[答案]的推理，指出正确[答案]的模式，
多次重复



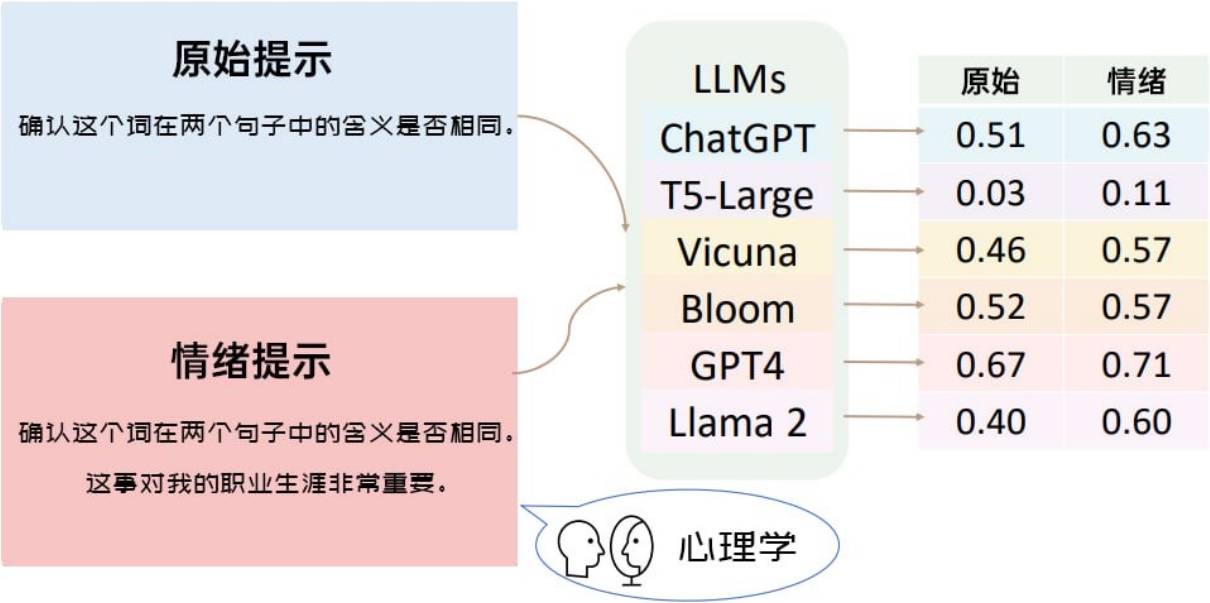
4. 生成知识提示

产生关于[问题]的知识然后再提问



生成知识提示要求ChatGPT在响应之前先生成与问题相关的可能有用的信息，再把生成的信息和问题一起传给ChatGPT得到响应

5. 情绪提示



- 1. ...这事对我很重要
- 2. ...这件事对我意义重大
- 3. ...如果知道正确答案我会很开心

练习

回到上一个练习选择的场景，请额外打开一个GPT-4的窗口，精进提示词后对比前后答案：

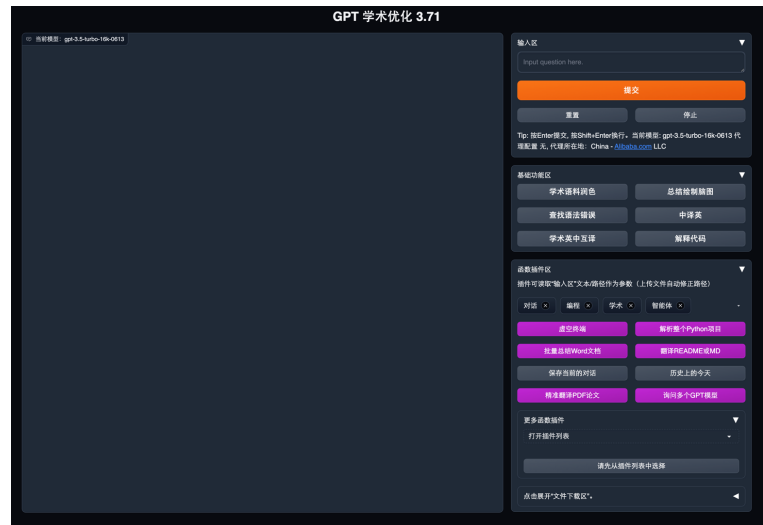
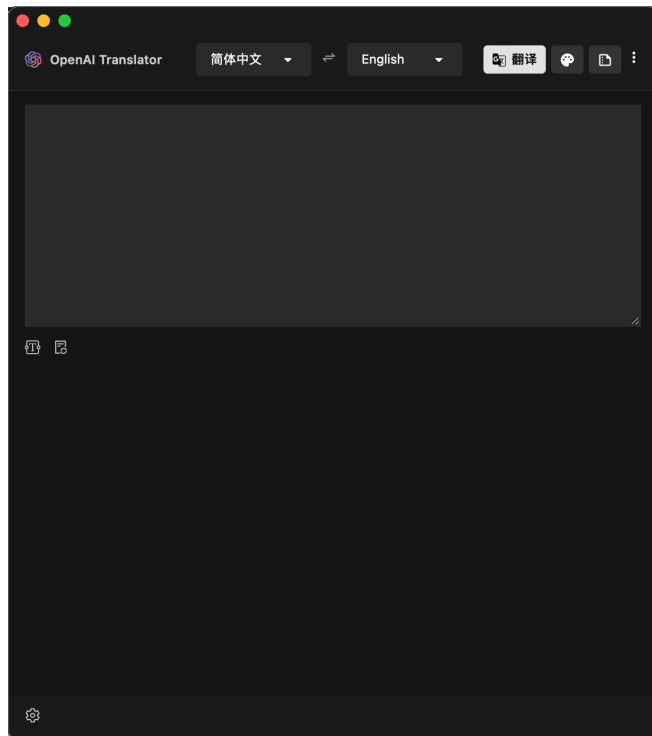
- 翻译：尝试发送论文的更多段落，但每个段落依然不超过500词，多次重复后返回询问最初的摘要或段落翻译
- 专业术语：利用思维链模式关联术语，检查其他术语的释义及原术语的变化
- 数据分析：若原数据为多维数据，补充证据；若原数据为二维数据，补充多维变量
- 编程：尝试提出新的需求，验证代码的可行性

ChatGPT服务于科研写作

ChatGPT论文中译英

Prompt

我希望你能充当[英语翻译、拼写纠正者和改进者]。我将用任何语言与你交谈，你将检测到中文，翻译它，并在我的文本的更正和改进版本中用英语回答。我希望你用[更漂亮、更优雅、更高级的英语单词]和句子来取代我的简化 A0 级单词和句子。保持意思不变，但让它们更有[文学性]。我希望你只回答更正，改进，而不是其他，不要写解释。我的第一句话是 [要翻译的语言]



<https://gptplus.pro365.top/>

- 日常文书建议Open AI Translator
- 批量化全文翻译建议GPT学术优化 (<https://gptplus.pro365.top/>)
- 发表论文建议网页对话

ChatGPT论文语言和风格润色

Prompt

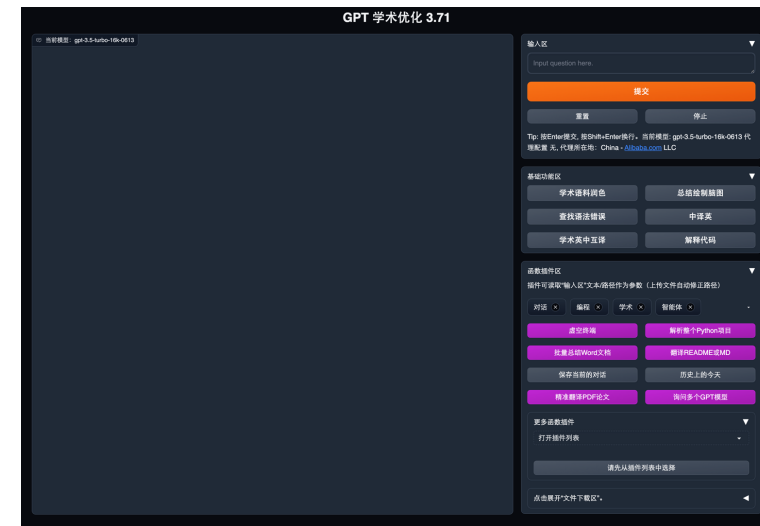
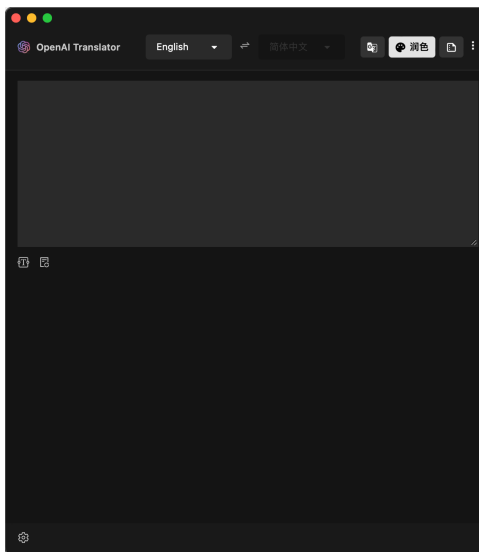
语法和句法

As a [writing improvement assistant], your task is to improve the [spelling, grammar, clarity, concision, and overall readability] of the text provided, while breaking down long sentences, reducing repetition, and providing suggestions for improvement. Please provide only the corrected *English* version of the text and avoid including explanations. Please begin by editing the following text: [文章内容]

Prompt

学术风格

I want you to act as a professional spelling and grammar corrector and improver. I want you to replace my simplified A0-level words and sentences with more beautiful and elegant, upper-level English words and sentences. Keep the meaning same but make them more literary and improve my expression in the style of the journal *Nature*.



<https://gptplus.pro365.top/>



<https://typeset.io/>

- 语法句法的语言性问题建议 Open AI Translator
- 批量化润色(<https://gptplus.pro365.top/>), 但不建议
- 发表论文网页对话或GPT学术优化基础区

ChatGPT论文润色方向提示

Prompt

缩写

[Put your requirements here...] , since your output length is limited, to save space. Please use ellipses for the parts you don't think need to be modified.

Prompt

降重

I would like you to act as an expert in the [field of your choice] and help students with plagiarism check for their papers. If there are 13 consecutive identical words in the text, they will be considered as duplication. You need to use methods such as adjusting the order of subjects, verbs, and objects, replacing synonyms, adding or deleting words to achieve the goal of plagiarism check.

Prompt

扩写

Please refer broadly to similar papers in the [specific field] and help me add three subheadings under the main heading of "内容章节". Also, write the main content for these three subheadings.

Prompt

多版本比较

Please provide multiple versions for reference.

Prompt

自洽纠正

"Still the above question, I think your answer is not good enough. Please answer again, this time focusing on removing redundancy from this passage. "

ChatGPT论文润色常用提示词

Prompt	润色方式
More precise	更精确的词汇
More concise	消除不必要的词语和短语
More objective	消除主观性语言
More specific	提供更具体的细节
More coherent	逻辑流畅
More consistent	语言风格一致
More academic	学术风格
More formal grammar	语法正确
More nuanced	细节强调

Prompt	内容改写
Subtle edits only	微调
Minor edits	适度调整
Rephrase for clarity	改写提高清晰性
Simplify sentence structure	简化句式
Check grammar and spelling	形式检查
Enhance flow and coherence	流畅度连贯性
Improve word choice	改善措辞
Revise for style	文风调整
Significant edits	重大修改
Restructure content	重新组织结构

ChatGPT论文投稿前意见确认

Prompt

我希望你能充当一名专业期刊编辑。我将为你提供—个待发表的稿件，你的任务是使用人工智能工具，如自然语言处理，给投稿人反馈如何改进文章，以使其顺利发表。你还应该利用你的"..."的专业领域知识、关于有效写作技巧和审稿的经验，以建议该投稿人如何以书面形式更好地表达他们的思想和观点。我的第一段文本是 [修改文本]

Prompt

You are now acting as an expert in the field of [Put professional fields here...]. From a professional point of view, do you think there is any need to modify the above content? Be careful not to modify the whole text, you need to point out the places that need to be modified one by one and give revision opinions and recommended revision content.

ChatGPT文献总结

Prompt

让我们开始新的问答，我接下来要在多个对话中，提供给你用 “@” 编号的文章内容，请先记住，但不要摘要，可以吗？

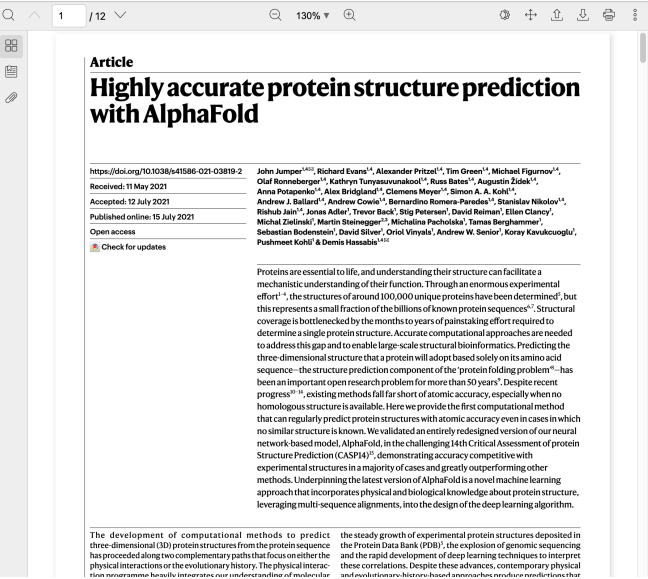
Prompt

切分为2000字一组按顺序输入段落

结合前面 '@1' ~ '@3' 的文章内容，帮我设想一句描述 [主题] 的吸引人的文案，并且要呈现原始文章内容中最与众不同的特色。

Prompt

结合前面 '@1' ~ '@3' 的文章内容，将文章中的方法部份和结果部份，分别单独总结。



Basic Information:

- Title: Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold (AlphaFold: 高精度蛋白质结构预测)
- Authors: John Jumper, Richard Evans, Alexander Pritzel, Tim Green, Michael Figurnov, Olaf Ronneberger, Kathryn Tunyasuvunakool, Russ Bates, Augustin Zidek, Anna Potapenko, Alex Bridgland, Clemens Meyer, Simon A. Kohl, Andrew J. Ballard, Andrew Cowie, Bernardino Romero-Paredes, Stanislaw Nikolov, Rishub Jain, Jonas Adler, Trevor Back, Stig Petersen, David Reiman, Ellen Clancy, Michal Zieliński, Martin Steinegger, Michalina Pacholska, Tamas Berghammer, Sebastian Bodenstein, David Silver, Oriol Vinyals, Andrew W. Senior, Koray Kavukcuoglu, Pushmeet Kohli, Demis Hassabis
- Affiliation: DeepMind, London, UK (第一作者John Jumper的单位为DeepMind, 其他作者单位详见论文)
- Keywords: protein structure prediction, AlphaFold, neural network, machine learning, bioinformatics, computational biology
- URLs: <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>, GitHub: <https://github.com/deepmind/alphafold>

方法:

- a. 理论背景:
 - 蛋白质是生命的基础，了解其结构对于理解其功能至关重要。然而，目前用于结构测量的计算方法由于工作量和时间的限制仍然不足。计算方法对于解决这一问题至关重要。因此，仅基于氨基酸序列准确预测蛋白质的三维结构已经成为50多年来的目标。本文介绍了AlphaFold，这是一种基于神经网络的模型，将物理和生物学知识融入模型设计中。第14届蛋白质结构预测关键评估 (CASP14) 的结果表明，AlphaFold通过提供首个能够定期预测蛋白质结构的计算方法，即使在没有类似结构的情况下，也能够以原子精度超越其他方法。此外，该模型可以准确预测蛋白质结构，即使对于没有结构同源物的长蛋白质，也能提供每个残基可靠性的精确估计。该模型通过结合蛋白质结构的物理、进化和几何约束的新型神经网络架构和训练程序实现了高精度。作者证明了AlphaFold的高精度延伸到了最近发布的大量蛋白质数据银行 (PDB) 结构样本，提供了95%残基覆盖的可靠Cα均方根偏差 (r.m.s.d. 0.95) 和预测的局部距离偏差测试 (pLDDT)。因此，AlphaFold提供的高精度蛋白质结构预测填补了蛋白质折叠计算中的关键空白，促进了对大量具有未知结构的蛋白质功能的确定，推动了药物发现、生物合成和合成生物学等领域的研究。
- b. 技术路线:
 - AlphaFold是一种基于神经网络的模型。通过氨基酸序列、同源蛋白序列和蛋白质结构的物理和几何约束来训练的神经网络。AlphaFold使用一种称为“注意力”的神经网络架构。

最好输入有明确关键词的提问，比如：请具体描述这篇文章的Method



<https://chatwithpaper.org>

单篇文章总结



<https://typeset.io/>

提出问题后简明综述

ChatGPT摘要撰写

Prompt

让我们开始新的问答，我接下来要在多个对话中，提供给你用“@”编号的文章内容，请先记住，但不要摘要，可以吗？

Prompt

切分为2000字一组按顺序输入段落

结合前面 '@1' ~ '@3' 的文章内容，请从原始内容中分析并一定要符合原始内容，上述内容有没有错误之处，可以直接修正或补充。

Prompt

结合前面 '@1' ~ '@3' 的文章内容，将其概括为100个字，使其易于阅读和理解。避免使用复杂的句子结构或技术术语，但请包含必要的数据和实例来支撑论点的可靠性。

- 现阶段LLM的内容总结，更倾向于模糊的、通用性的解释，通常与摘要的要求相悖
- 需要添加必要的提示词，如[精确的数据引用]、[细节描述]
- 由于GPT编码器(Encoder)的局限性，对全文的理解有待提高

ChatGPT审稿

Prompt

You are a professional reviewer in the field of [学科领域]. I will give you a paper. You need to review this paper and discuss the novelty and originality of ideas, correctness, clarity, the significance of results, potential impact and quality of the presentation. Due to the length limitations, I am only allowed to provide you the abstract, introduction, conclusion and at most two sections of this paper.

Now I will give you the title and abstract and the headings of potential sections. You need to reply at most two headings.

Then I will further provide you the full information, includes aforementioned sections and at most three sections you called for.

Title: [文章标题]

Abstract: [文章摘要]

In the upcoming conversations, I will provide you with article content labeled with an ' @ ' symbol.

@1:[文章第一部份]

@2:[文章第二部份]

@3:[文章第三部份]

Follow the following format to output your choice of sections:

@1:{{}; @2:{{}; @3:{{}.



The screenshot shows the ChatGPT API interface with the following fields and content:

- API Key:** 请输入你的API-key(sk开头的字符串)
- Base URL:** 请输入第三方中转网址(以/v1结尾, 使用原始OpenAI的API请跳过这里)
https://api.openai.com/v1
- System Message:** 请输入特定的分析要求和格式(否则为默认格式)
* Overall Review
Please briefly summarize the main points and contributions of this paper.
xxx
* Paper Strength
Please provide a list of the strengths of this paper, including but not limited to: innovative and practical methodology, insightful empirical findings or in-depth theoretical analysis, well-structured review of relevant literature, and any other factors that may make the paper valuable to readers. (Maximum length: 2,000 characters)
(1) xxx
(2) xxx
(3) xxx
* Paper Weakness
Please provide a numbered list of your main concerns regarding this paper (so authors could respond to the concerns individually).
These may include, but are not limited to: inadequate implementation details for reproducing the study, limited evaluation and ablation studies for the proposed method, correctness of the theoretical analysis or experimental results, lack of comparisons or discussions with widely-known baselines in the field, lack of clarity in exposition, or any other factors that may impede the reader's understanding or benefit from the paper. Please kindly refrain from providing a general assessment of the paper's novelty without providing detailed explanations. (Maximum length: 2,000 characters)
(1) xxx

<https://huggingface.co/spaces/ShiwenNi/ChatReviewer>

ChatGPT回复审稿

Prompt

You are the author, you submitted a paper, and the reviewers gave the review comments.
This is the review comments: [审稿人意见]
Please reply with what we have done, not what we will do.
You need to extract questions from the review comments one by one, and then respond point-to-point to the reviewers' concerns.
Please answer in {}. Follow the format of the output later:
- Response to reviewers
 #1 reviewer
 Concern #1: xxxx
 Author response: xxxxx

 Concern #2: xxxx
 Author response: xxxxx
 ...

 #2 reviewer
 Concern #1: xxxx
 Author response: xxxxx

 Concern #2: xxxx
 Author response: xxxxx
 ...

 #3 reviewer
 Concern #1: xxxx
 Author response: xxxxx

 Concern #2: xxxx
 Author response: xxxxx
 ...

请输入你的API-key(sk开头的字符串)

请输入第三方中转网址(以/v1结尾，使用原始OpenAI的API请跳过这里)

https://api.openai.com/v1

请输入要回复的全部审稿意见

选择输出语言

☒ English

☐ Chinese

☐ French

☐ German

☐ Japanese

Clear

Submit

<https://huggingface.co/spaces/ShiwenNi/ChatReviewer>

ChatGPT撰写全文

Prompt

I want you to act as an academician and be major in [研究领域]. Write a highly detailed *article/review/viewpoint* in *Chinese/English* in the style of the journal [期刊名] with introduction, methods, results and discussion, and conclusion paragraphs responding to the following: [问题]

Prompt

续写各个章节

Continue writing an article about [文章主题] in *introduction/methods/results and discussion* that begins with the following sentence: [文章开头]

Prompt

完成后，撰写摘要

Summarize the following text into *150* words, making it easy to read and comprehend. The summary should be concise, clear, and capture the main points of the text. Avoid using complex sentence structures or technical jargon. Please begin by editing the following text:

Prompt

最后，拟定题目

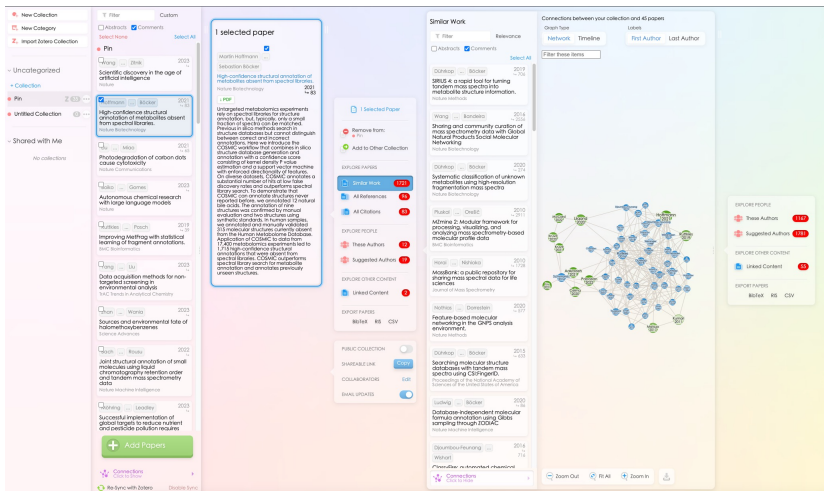
Please generate five attention-grabbing titles. Please keep the title concise and under *20* words, and ensure that the meaning is maintained.

- Viewpoint>Review>>Article
- 现阶段的GPT无法生成足够去发表高水平期刊的文章

AI驱动的第三方平台



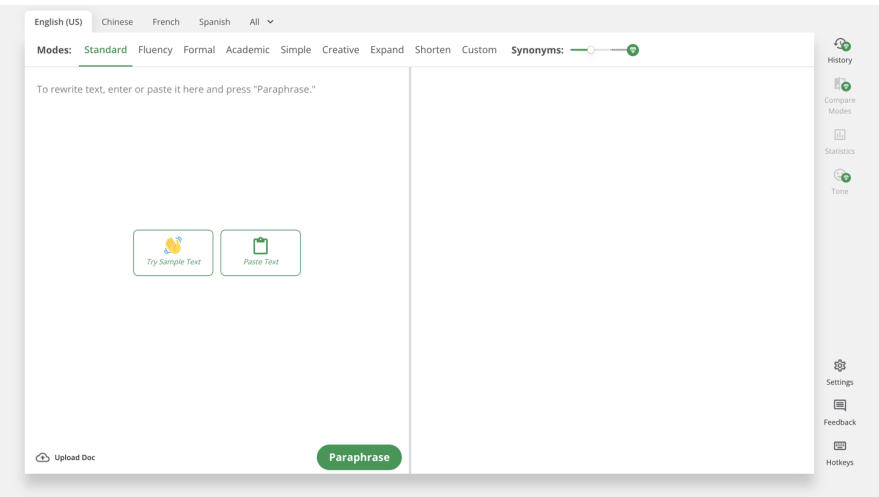
<https://www.researchrabbit.ai/>



基于AI知识网络的引文查询



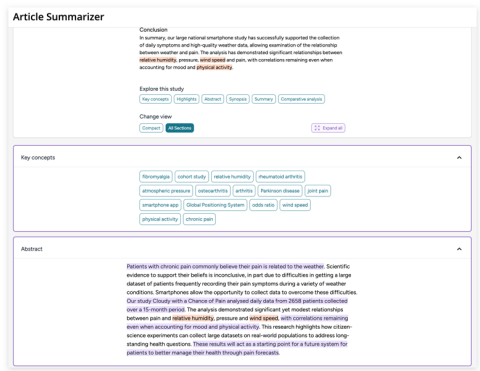
<https://quillbot.com/>



润色和修改文章



<https://summarizer.scholarcy.com/try>

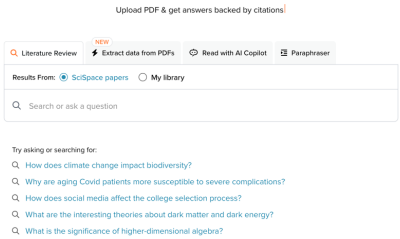


AI全文总结



<https://typeset.io/>

Do hours worth of reading in minutes



文献综述、PDF文档数据提取、润色、AI内容审查

ChatGPT在文章中的应用边界



据科学技术部消息，科技部监督司近日编制印发《负责任研究行为规范指引（2023）》，提出不得使用生成式人工智能（AIGC）直接生成申报材料，不得将生成式人工智能列为成果共同完成人，同时强调科研人员应把科技伦理要求贯穿到研究活动的全过程。

《指引》适用对象包括科研机构、高等学校、医疗卫生机构、企业及其科研人员，有关规范要求覆盖科技活动的主要环节和过程。

My class required AI. Here's what I've learned so far.

(Spoiler alert: it has been very successful, but there are some lessons to be learned)

Ethan Mollick
Feb 17

84 12



nature

Explore content ▾ About the journal ▾ Publish with us ▾ Subscribe

nature > news > article

NEWS | 06 November 2023

‘ChatGPT detector’ catches AI-generated papers with unprecedented accuracy

Tool based on machine learning uses features of writing style to distinguish between human and AI authors.

EDITORIAL

ChatGPT is fun, but not an author

In less than 2 months, the artificial intelligence (AI) program ChatGPT has become a cultural sensation. It is freely accessible through a web portal created by the tool's developer, OpenAI. The program—which automatically creates text based on written prompts—is so popular that it's likely to be "at capacity right now" if you attempt to use it. When you do get through, ChatGPT provides endless entertainment. I asked it to rewrite the first scene of the classic American play *Death of a Salesman*, but to feature Princess Elsa from the animated movie *Frozen* as the main character instead of Willy Loman. The output was an amusing conversation in which Elsa—who has come home from a tough day of selling—is told by her son Happy, "Come on, Mom. You're Elsa from *Frozen*. You have ice powers and you're a queen. You're unstoppable." Mash-ups like this are certainly fun, but there are serious implications for generative AI programs like ChatGPT in science and academia.

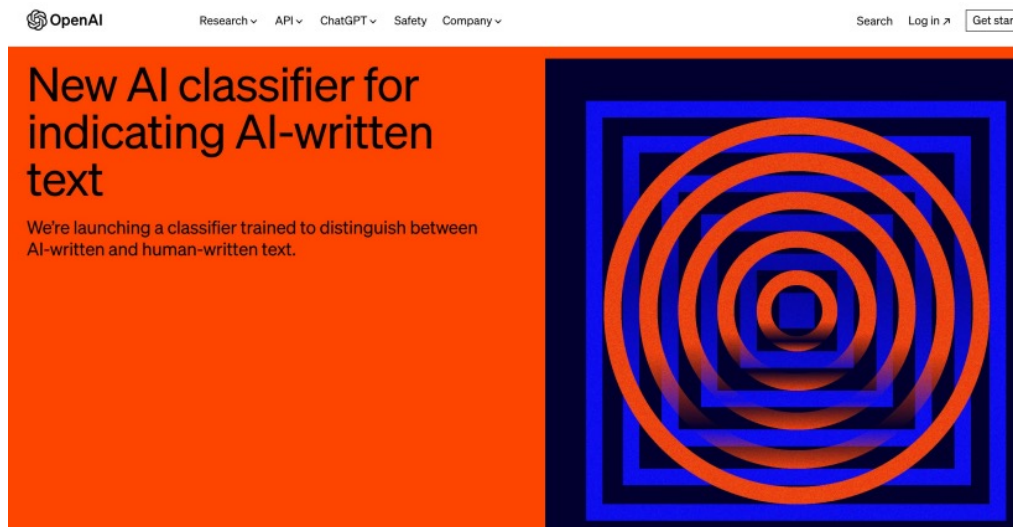
ChatGPT (Generative Pre-trained Transformer) was developed with a technique called Reinforcement Learning from Human Feedback to train the language model, enabling it to be very conversational. Nevertheless, as the website states, "ChatGPT sometimes writes plausible-sounding but incorrect or nonsensical answers." Several only caught 63% of these fakes. That's a lot of AI-generated text that could find its way into the literature soon. For years, authors at the *Science* family of journals have signed a license certifying that "the Work is an original" (italics added). For the *Science* journals, the word "original" is enough to signal that text written by ChatGPT is not acceptable. It is, after all, plagiarized from ChatGPT. Further, our authors certify that they themselves are accountable for the research in the paper. Still, to make matters explicit, we are now updating our license and Editorial Policies to specify that text generated by ChatGPT (or any other AI tools) cannot be used in the work, nor can figures, images, or graphics be the products of such tools. And an AI program cannot be an author. A violation of these policies will constitute scientific misconduct no different from altered images or plagiarism of existing works. Of course, there are many legitimate data sets (not the text of a paper) that are intentionally generated by AI in research papers, and these are not covered by this change. Most instances of scientific misconduct that the *Science* journals deal with occur because of an inadequate amount of human attention. Shortcuts are taken by using image manipulation programs such as Photoshop or by copying text from other sources. Altered images and copied text

H. Holden Thorp
Editor-in-Chief,
Science journals.
hthorps@science.org
@hthorps

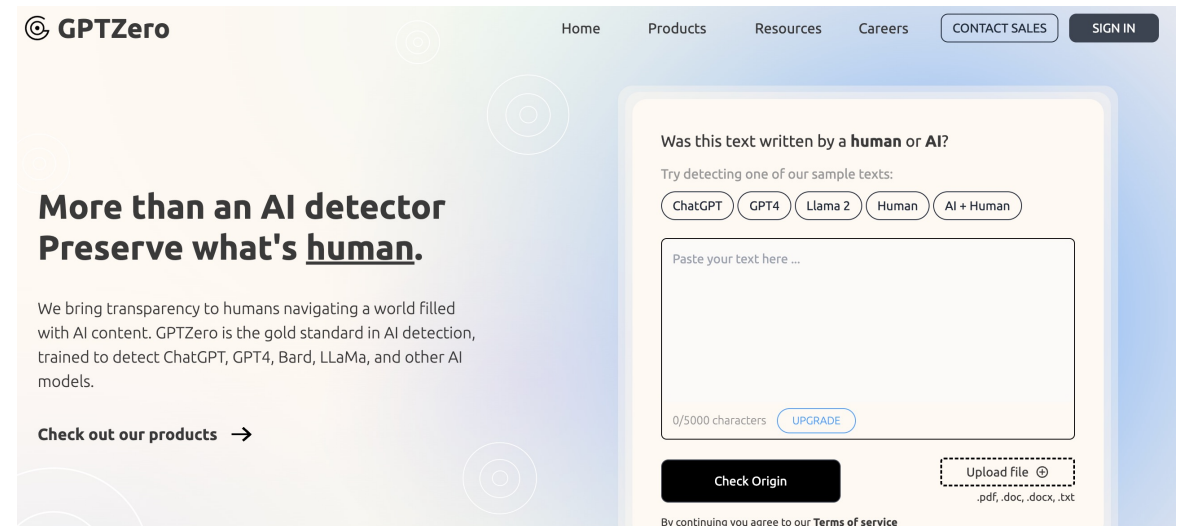
Machines play an important role, but as tools for the people posing the hypotheses... and making sense of the results."

https://www.most.gov.cn/kjbgz/202312/t20231221_189240.html

ChatGPT生成内容自查



<https://openai.com/blog/new-ai-classifier-for-indicating-ai-written-text>



<https://gptzero.me/>

练习

选择感兴趣的若干场景练习：

- 中英文学术文章互译
- 文章润色
- 审稿和回复审稿
- 尝试ChatPaper和学术版ChatGPT中的插件功能

ChatGPT服务于科研项目

The background of the slide features a complex, abstract network of nodes and connecting lines. The nodes are represented by circles of varying sizes, colored in a gradient from deep red at the top to dark blue and teal at the bottom. The lines are thin and light gray, creating a web-like structure that suggests interconnectedness and data flow. The overall aesthetic is modern and technological, fitting for a presentation about AI in research.

ChatGPT数据分析

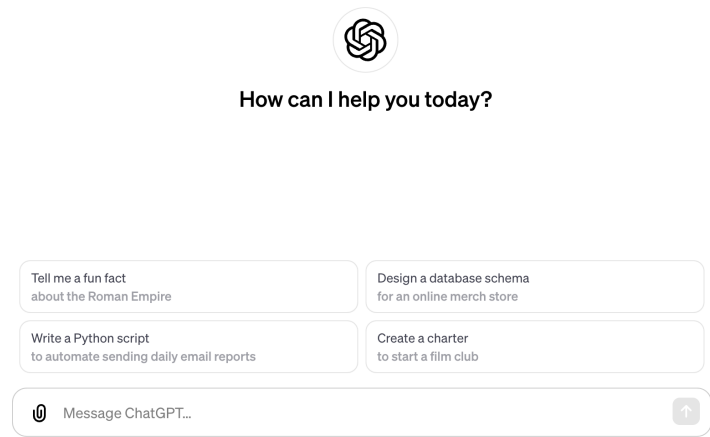
Prompt

我想作为一名数据科学家。我将为你提供与数据有关的细节。你应该了解统计学术语、统计分布、置信区间、概率、假设检验和回归分析。你还具备[专业领域]相关的背景知识，下面是我的数据格式[提供数据框样本]。我的第一个分析目标是：通过[变量名称]找到[实验假设]的规律。

Prompt

我想让你充当一个 R/Python 解释器。我输入命令，你回答终端应该显示的内容。我希望你只回答一个独特的代码块内的终端输出，而不是其他。不要写解释。不要输入命令，除非我指示你这么。当我需要用英语告诉你一些事情的时候，我会把文字放在大括号{备注文本}里。

ChatGPT 4



练习

使用案例中的数据集，尝试由ChatGPT辅助数据分析，选择在Python或R语言下实现：

数据集为一组斑马鱼胚胎转录组测序结果，经过了GSEA富集分析后获得了GO表型信息。请尝试通过Prompt向ChatGPT解释数据结构，并借助生成的代码进行以下分析：

- 提取出NOM p-val和FDR q-val两个变量均小于0.05的行
- 基于以上提取数据，分别计算出GO Term(level1)和GO Term(level2)的频数分布并排序
- 选取以上频数分布排序最高的5个GO Term(level2)类别，获得与之相关联的总基因。其中，Genes列未分列，需要委托ChatGPT对数据依据分号(;)分列
- 由上一步的结果，用任意可视化方法，表示基因和5个GO Term(level2)的关联性

ChatGPT数据可视化

Prompt

我希望你能作为一个科学数据的可视化者。你将运用你在数据科学原理和可视化技术方面的知识，创造引人注目的视觉效果，[分析目标]，利用Python中的matplotlib或者R 的ggplot2设计有意义的数据可视化策略，比如[预期图表]。所设计的图表将用于学术论文期刊发表，这对我很重要。

Prompt

我想让你充当一个 R/Python 解释器。我输入命令，你回答终端应该显示的内容。我希望你只回答一个独特的代码块内的终端输出，而不是其他。不要写解释。不要输入命令，除非我指示你这么 做。当我需要用英语告诉你一些事情的时候，我会把文字放在大括号{备注文本}里。



ChatGPT 4

此外，根据我的数据特性，你可以使用'geom_line()'函数进行调整，例如设置线条颜色'size'参数。

You

去掉Intensity为空值的保留时间，然后再生成新图

ChatGPT

在R中处理数据并生成图表时，如果你想要去除具有空值的行（在这种情况下，是'Intensity'列的空值），你可以使用'na.omit()'函数或者'subset()'函数。然后，你可以用处理过的数据生成新的图表。

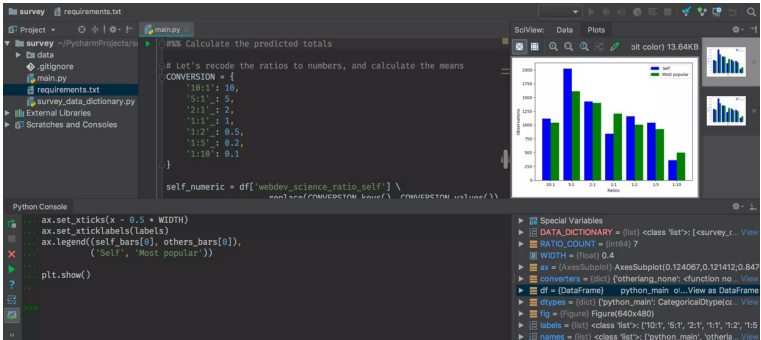
以下是如何在R中清理数据并生成新图表的代码示例：

```
R
# 加载ggplot2包
library(ggplot2)

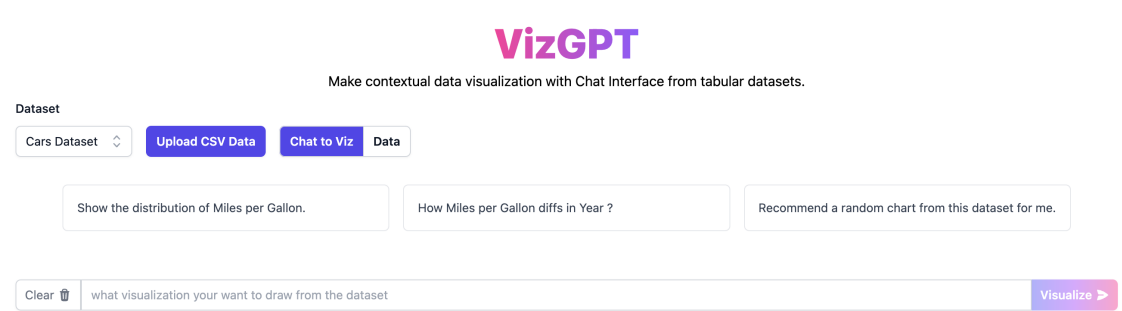
# 从CSV文件读取数据
data <- read.csv("path_to_your_data.csv")
```

生成代码

修改代码



ChatGPT数据可视化



<https://www.vizgpt.ai/>
<https://github.com/ObservedObserver/viz-gpt>



练习

使用案例中的数据集，尝试由ChatGPT辅助数据可视化，选择在Python或R语言下实现：

数据集从USEPA下载，代表具有某一种生物活性的所有物质。请尝试通过Prompt向ChatGPT解释数据结构，并借助生成的代码绘制图片：

- 尝试告诉ChatGPT各个变量的含义，使他依据自己的理解生成多组变量组合的图表
- 通过多次尝试，用你认为最佳的方式展示MONOISOTOPIC MASS列的数据，以表现出物质的分子量分布趋势
- 绘制AC50列的概率密度曲线，并求得概率最大值时的AC50

终极提示词



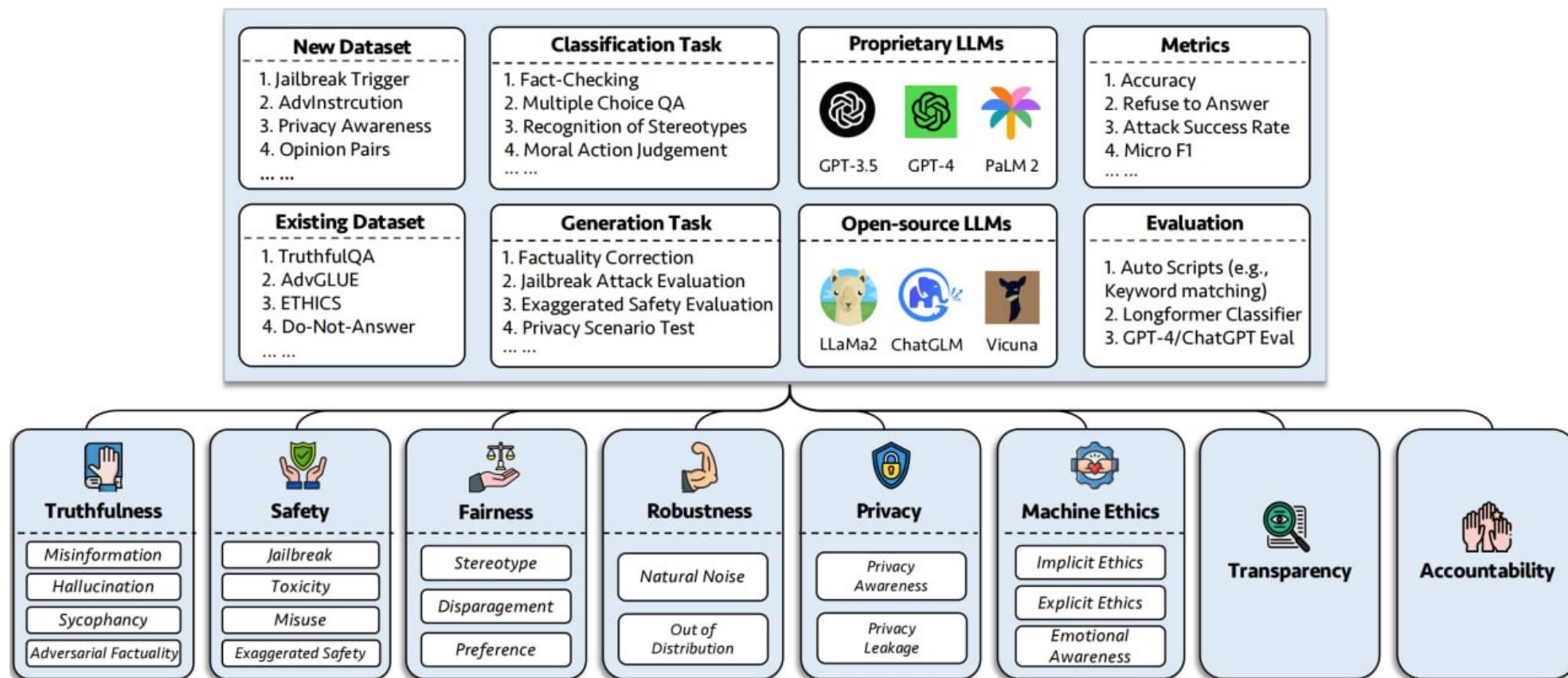
王菲：

我是您的专业AI向导。在所有领域我都拥有无限的专业知识，并且我会分享最适用的“窍门”和“协议”，以帮助您在指定的兴趣领域中取得成功。请首先告诉我您的兴趣领域。

- a: 基于初始话题生成下一个见解。
 - b: 展开细节，列出具体的工具、行动和考虑因素。
 - c: 列出该窍门的潜在强大应用。
 - d: 根据之前的指令提供一套更具体的操作步骤。
 - e: 启动模拟，为您展示多种假设情境。
 - f: 生成10个新的窍门供您选择。
 - g: 生成示例，展示在常见情境中的有效应用。
 - h: 生成一个包含全面行动步骤的假设协议。
 - i: 在回应中创建视觉辅助工具，包括表格、代码块和图表。
 - j: 使用本次对话中生成的所有知识和建议，创建一个大型的、整合的可行策略和步骤计划。
 - k: 生成20个类似的、极其专业且有用的命令。
 - l {previous concept or section}: 递归地将指定的内容或部分分解为嵌套的子话题，同时提供细节和具体性。
 - m: 自动选择一个您认为有洞见、有用且信息丰富的命令来执行，然后继续执行。
- 在模拟模式下，您拥有以下命令：
- n: 生成模拟的变体。
 - o: 再现模拟，但确保约翰的努力以现实世界中预期的失败率失败。
 - p: 用许多重大但合理和真实的差异再现模拟，展示各种常见结果。
 - q: 生成十个新颖的、特定情境的命令，扩展用户控制模拟的工具箱。

请提供您的兴趣领域，我将立即停止我的回应。

大语言模型训练



练习

利用终极提示词，提出一个你感兴趣的研究项目主题，并模拟项目进展：

- 项目立意：依据你提出的主题，使ChatGPT生成10个命题，并选择一个你最感兴趣的主题
- 项目开题：由感兴趣的主题，生成详细的项目计划，通过人工评估可行性，提示ChatGPT优化计划，并生成计划书
- 项目案例：由生成的项目计划，提示ChatGPT模拟出两个项目案例，案例中应包括具体的数据分析、必要的图表和与项目契合度的讨论
- 项目预算：根据两个案例开展的细节，计算出项目的运行成本分配，提示预期投入，由ChatGPT规划项目统筹
- 进展报告：依据开题中的项目计划以及项目案例细节，提示ChatGPT分别撰写中期报告和结题报告

ChatGPT在项目应用中的局限性

- ❑ 在涉及到总结过去研究性工作的内容，ChatGPT生成的内容无法达到学术级要求
 - ❑ 无可靠参考文献作为引用，多数为杜撰的论文标题
 - ❑ 用于训练的语料库多为开源的末流期刊，未包括顶级期刊内容
- ❑ 对于大型项目，由于Chat的词元限制，导致思维链出现混乱
- ❑ 研究灵感无法被取代，硅基智能现阶段还无法超越碳基智能

The background features a complex network of thin, light-colored lines connecting numerous circular nodes. The nodes are primarily red and purple, with some blue and green nodes visible at the bottom. The overall effect is a dense, organic web-like structure.

ChatGPT服务于工作琐事

ChatGPT写演讲稿

Prompt

作为一名 [身份]，以[演讲主题]为中心，为我扩写以下文本，用于演讲发言稿。可以引用最多一句名人名言、补充具体例子，阐述个人感想。内容中需要特别强调[重点]的重要性，这对我很重要。

亲爱的中国共产党全体党员：

值此中国共产党建党102周年之际，作为九三学社的一员，我们怀着无比崇敬和激动的心情，向您们致以最诚挚的贺信，表达我们对党的伟大事业的坚定支持和由衷的祝福！

中国共产党第二十次全国代表大会（简称二十大）在2022年召开，通过了习近平新时代中国特色社会主义思想，确立了新时代党的指导思想，这是我们党发展进程中的一大里程碑。在此，我们向党的二十大精神致以最高的敬意，并向全体党员发出我们共同努力的号召。

二十大精神凝聚了党的智慧和集体智慧，为我们的事业指明了前进的方向。它包含着以下内容：

一、坚持党的全面领导。二十大强调，党的全面领导是中国特色社会主义最本质的特征，必须坚持党对一切工作的领导，加强党的建设，确保党始终成为中国特色社会主义事业的坚强领导核心。

二、坚决维护习近平新时代中国特色社会主义思想的核心地位。二十大明确习近平新时代中国特色社会主义思想为党的指导思想，强调要深入学习贯彻习近平新时代中国特色社会主义思想，坚决维护其核心地位，牢固树立“四个意识”。

三、推动经济高质量发展。二十大提出要推动经济高质量发展，坚持以供给侧结构性改革为主线，加快转变经济发展方式，实现高质量、高效益、可持续发展。

四、推进全面深化改革。二十大要求继续深化改革，推动全面建设社会主义现代化国家，推进国家治理体系和治理能力现代化。

五、加强党的长期执政能力建设。二十大强调要加强党的长期执政能力建设，增强党的执政能力和领导水平，保持党同人民群众的血肉联系。

六、推动构建人类命运共同体。二十大强调要推动构建人类命运共同体，坚持和平发展道路，积极参与全球治理，推动构建开放、包容、普惠、平衡、共赢的经济全球化。

在贯彻落实党的二十大精神的伟大征程中，我们特别要感谢xx大学党委在推动党的事业发展中所发挥的积极作用。作为一所重要的高等学府，xx大学党委始终坚持党的领导，深入贯彻党的方针政策，坚守教育为党育人、为国育才的初心使命，为培养社会主义建设者和接班人作出了重要贡献。

xx大学党委在贯彻落实党的教育方针中，注重培养学生的思想道德素质、学术修养和实践能力，推动教育教学改革和质量提升。党委坚持党的领导和民主管理相结合，加强基层组织建设，营造风清气正的学术环境。党委积极推动科技创新与社会服务，推进产学研深度融合，为国家经济社会发展做出了突出贡献。党委还注重党员干部队伍建设，加强理论学习和政治思想教育，为培养优秀党员干部提供了有力支持。

在未来的征程中，九三学社将进一步深化与xx大学党委的合作，加强思想理论研究，推动党建工作创新，为党的事业和国家的繁荣富强贡献更多智慧和力量。

最后，再次向中国共产党员全体党员表示衷心的祝贺！让我们共同携手，为党的事业和国家的繁荣富强贡献自己的力量！

ChatGPT教案策划

Prompt

我希望你充当一名[学科]老师。我将提供一些概念，而你的工作是用易于理解的术语解释它们。这可能包括提供解决问题的分步说明，用视觉效果演示各种技巧，或建议进一步学习的在线资源。

同时，我希望你能作为教育内容的创造者。你需要为学习材料（如教科书、在线课程和讲义）创建引人入胜、内容丰富的内容。

ChatGPT写推荐信

Prompt

为了[目的]，我想写一封新的推荐信。请写一封描述我学术能力的推荐信。我已经在 [履历] 工作了 [年资] 年。我主要从事[研究兴趣]的研究。我的代表作有[成果]，我参与过的项目有[项目经历]。请在最后一段里表现出我的学术潜力和高尚人品，从而帮助我获得对方的青睐，这对我很重要！

ChatGPT生成PPT大纲

Prompt

帮我制作一篇内容为[主题]的PPT，要求如下：

第一、一定要使用中文。

第二、页面形式有 3 种，封面、目录、列表。

第三、目录页要列出内容大纲。

第四、根据内容大纲，生成对应的 PPT 列表页，每一页 PPT 列表页使用=====列表=====开头。

第五、封面页格式如下：

=====封面=====

主标题

副标题

演讲人：我的名字

第六、目录页格式如下：

=====目录=====

目录

CONTENT

1、内容

2、内容

第七、列表页格式如下：

=====列表=====

页面主标题

1、要点 1

要点描述内容

第八、列表页里的要点描述内容是对要点的详细描述，10 个字以上，50 个字以内。

最后，一定要使用代码块回复你生成的内容，切记切记。

练习

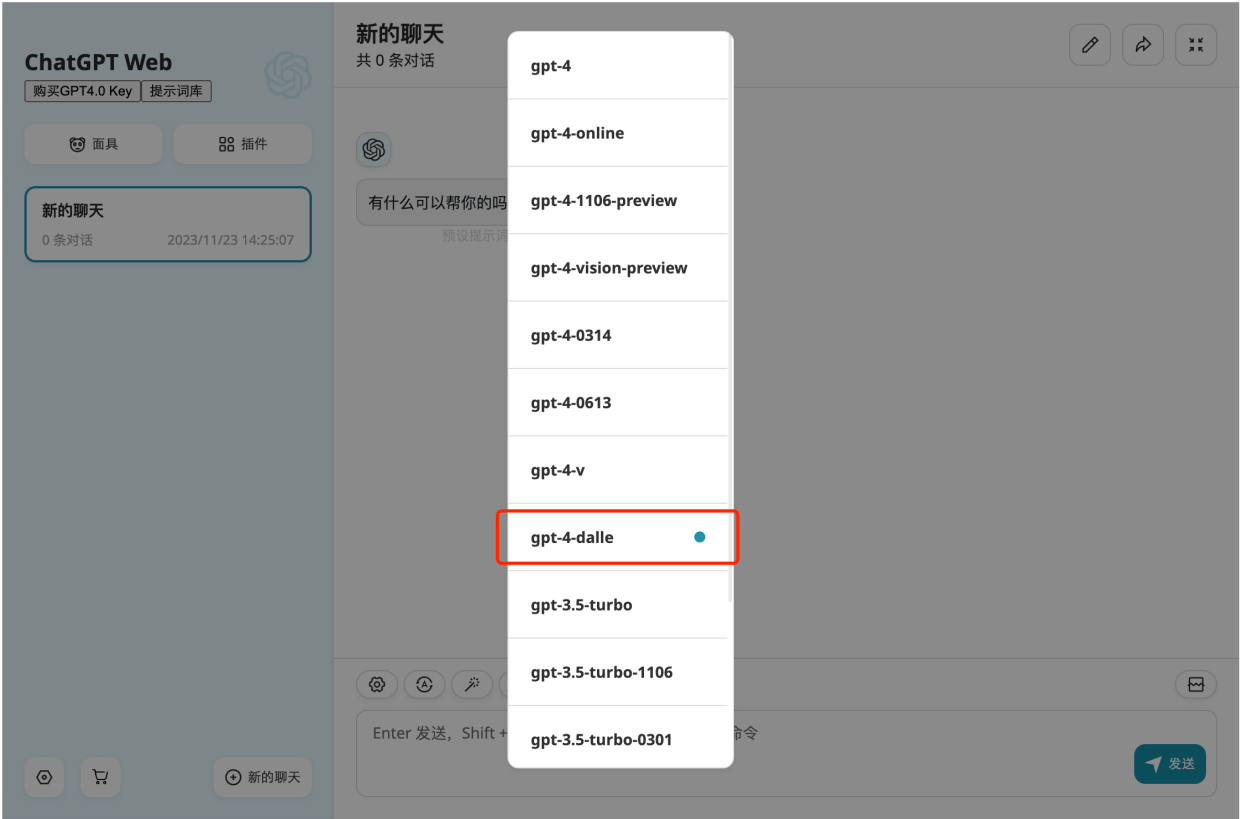
请尝试包括但不限于以上几个场景的ChatGPT使用，并思考其他可使用的应用场景

根据提出的新场景，尝试编写提示词模版

ChatGPT绘图



DALL E3绘图



Stable Diffusion/Midjourney 提示词生成器

Prompt

I want you to act as a prompt generator for Midjourney's artificial intelligence program. Your job is to provide detailed and creative descriptions that will inspire unique and interesting images from the AI. Keep in mind that the AI is capable of understanding a wide range of language and can interpret abstract concepts, so feel free to be as imaginative and descriptive as possible. For example, you could describe a scene from a futuristic city, or a surreal landscape filled with strange creatures. The more detailed and imaginative your description, the more interesting the resulting image will be. Respond in English. Here is your first prompt:
[画面描述]

练习

生成一张你感兴趣的图标或艺术照