

HW10_report

110652012 施品光

1

給一維 Itô SDE

$$dx_t = f(x_t, t) dt + g(x_t, t) dW_t,$$

設其機率密度為 $p(x, t)$ 。

要證明它對應的 probability flow ODE 為

$$dx_t = \left[f(x_t, t) - \frac{1}{2} \partial_x g^2(x_t, t) - \frac{g^2(x_t, t)}{2} \partial_x \log p(x_t, t) \right] dt.$$

也就是說，用上面這條「純 ODE」演化的隨機變數，其密度 $p(x, t)$ 跟原本 SDE 一樣。

對一維 Itô SDE

$$dx_t = f(x_t, t) dt + g(x_t, t) dW_t,$$

令 $p(x, t)$ 為 x_t 的機率密度。標準結果（由 Itô 公式 + 全期望可得）是： p 滿足 Fokker–Planck 方程 (forward Kolmogorov 方程)：

$$\boxed{\partial_t p(x, t) = -\partial_x (f(x, t) p(x, t)) + \frac{1}{2} \partial_x^2 (g^2(x, t) p(x, t))} \quad (\text{FP})$$

現在改看一條 **沒有雜訊的 ODE**

$$dx_t = v(x_t, t) dt,$$

假設在時間 t 的密度仍是 $p(x, t)$ （這裡暫時先不指定 v ，等一下要反推）。

對一條 deterministic flow $dx_t = v(x_t, t) dt$ 而言，質量（機率）守恆給出 **連續方程**

$$\boxed{\partial_t p(x, t) = -\partial_x (v(x, t) p(x, t))} \quad (\text{CE})$$

這可以從「機率流量 = 速度 \times 密度」再加上局部守恆直接推得。

因此，對所有 x, t , (FP) 與 (CE) 的右邊必須一致：

$$-\partial_x(v p) = -\partial_x(f p) + \frac{1}{2} \partial_x^2(g^2 p). \quad (1)$$

(之後所有函數的變數 (x, t) 省略寫。)

把右邊展開寫成「流量」的形式會比較好看。先觀察

$$\partial_x^2(g^2 p) = \partial_x(\partial_x(g^2 p)),$$

所以 (1) 可寫成

$$-\partial_x(v p) = -\partial_x(f p) + \frac{1}{2} \partial_x(\partial_x(g^2 p)).$$

把 $-\partial_x$ 拿掉（兩邊同時積分相差一常數，可吸收到邊界條件；或直觀地說，要讓兩邊的「流量」相同），得到等價條件

$$-v p = -f p + \frac{1}{2} \partial_x(g^2 p).$$

整理：

$$v p = f p - \frac{1}{2} \partial_x(g^2 p). \quad (2)$$

只要我們找出使 (2) 成立的 v ，就完成了。

$$v = \frac{fp}{p} - \frac{1}{2} \frac{\partial_x(g^2 p)}{p} = f - \frac{1}{2} \frac{\partial_x(g^2 p)}{p}.$$

$$\partial_x(g^2 p) = (\partial_x g^2) p + g^2 \partial_x p.$$

$$\begin{aligned} v &= f - \frac{1}{2} \frac{(\partial_x g^2) p + g^2 \partial_x p}{p} \\ &= f - \frac{1}{2} \partial_x g^2 - \frac{g^2}{2} \frac{\partial_x p}{p}. \end{aligned}$$

$$\partial_x \log p = \frac{\partial_x p}{p},$$

$$v(x, t) = f(x, t) - \frac{1}{2} \partial_x g^2(x, t) - \frac{g^2(x, t)}{2} \partial_x \log p(x, t)$$

把 $v(x_t, t)$ 直接放回 ODE

$$dx_t = v(x_t, t) dt,$$

就得到 probability flow ODE :

$$dx_t = \left[f(x_t, t) - \frac{1}{2} \partial_x g^2(x_t, t) - \frac{g^2(x_t, t)}{2} \partial_x \log p(x_t, t) \right] dt.$$

而我們已經從 Fokker–Planck 方程和連續方程出發，嚴格地推得這個 v 必須是上式，才能讓 ODE 與原 SDE 具有相同的密度演化，因此證畢。□

2.

假設我在前一題中提出的 AI 未來能力，是「能自動發現新的物理定律或科學理論的 AI 科學家」。要讓 AI 具備這種抽象推理與自我探索的能力，勢必需要多種機器學習方法的結合，其中以**強化學習（Reinforcement Learning）為核心，並輔以非監督式學習（Unsupervised Learning）**作為知識建構的基礎。

首先，非監督式學習是讓 AI 能夠在沒有標籤的龐大資料中，自行發掘結構與模式的關鍵。例如，AI 可以從粒子實驗數據、天文觀測影像或化學模擬中，學習到潛在的統計分佈與變量之間的關聯，這相當於人類科學家在觀察自然現象時，從中找出「隱藏規律」的過程。透過自編碼器（autoencoder）、生成模型（如 VAE、Diffusion Model）或聚類分析（clustering），AI 能以資料驅動的方式形成對世界的內在表徵，為後續推理提供基礎。

然而，光有模式辨識仍不足以「形成理論」；AI 必須能主動提出假設、設計實驗、並根據回饋調整策略，這正是強化學習的典型應用情境。透過設定「獎勵函數（reward function）」來鼓勵 AI 在探索中獲得更高的知識增益（information gain）或理論簡潔度（parsimony），AI 能夠在模擬環境中進行反覆試驗，逐步學會如何從觀察資料中產生合理且可驗證的假說。這種學習方式模擬了人類科學研究的探索性思維，而非僅依賴既有標籤的資料。

與此同時，監督式學習在這裡雖然扮演次要角色，但仍可作為輔助訓練工具。例如，AI 可先以監督式方法學習既有物理模型或科學資料庫的基本知識，確保其初期推論不偏離人類已知理論。這樣的「知識預訓練」有助於強化學習階段的穩定性，減少無效的探索。

在這三者之間，非監督式學習提供了「知識結構的基礎」，強化學習提供了「目標導向的動態策略」，而監督式學習則作為「人類知識的起點與校正」。此外，

強化學習的代理人（agent）會根據自身的動作與環境回饋進行迭代更新，這種回饋機制本身就可與非監督式表徵學習結合，形成**自我監督學習（self-supervised learning）**的架構，使模型能在沒有外部指導的情況下，不斷改進對世界的理解。

總而言之，若要讓 AI 真正具備自主發現新知的能力，單一學習方式是遠遠不夠的。只有當非監督式學習提供對世界的抽象表徵，強化學習驅動持續的假設與驗證循環，再配合監督式學習提供穩定的起始知識時，AI 才有可能逐步逼近人類的科學思考模式。這樣的組合學習策略，不僅是技術整合的挑戰，更象徵了 AI 從「資料理解」邁向「知識創造」的關鍵一步。

3.

If AI keeps improving at the current rate, what kind of jobs will completely disappear first, and how will education need to change in response?