

1.

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

其中 W_t 是一個標準的維納過程。

在一維情況下，Fokker-Planck Equation :

$$\partial p(x, t) / \partial t = - \partial / \partial x [f(x, t) p(x, t)] + (1/2) \partial^2 / \partial x^2 [g^2(x, t) p(x, t)]$$

考慮ODE :

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

其中 $v(x, t)$ 是一個向量場。這個系統中粒子的機率密度 $p(x, t)$ 遵循連續性方程：

$$\partial p(x, t) / \partial t = - \partial / \partial x [v(x, t) p(x, t)]$$

令Fokker-Planck Equation的右側等於連續性方程的右側：

$$-\partial / \partial x [v(x, t) p(x, t)] = - \partial / \partial x [f(x, t) p(x, t)] + (1/2) \partial^2 / \partial x^2 [g^2(x, t) p(x, t)]$$

為了求解 $v(x, t)$ ，對上式兩邊關於 x 進行積分（或直接移除最外層的 $\partial / \partial x$ 算子，假設在邊界處通量為零）：

$$v(x, t) p(x, t) = f(x, t) p(x, t) - (1/2) \partial / \partial x [g^2(x, t) p(x, t)]$$

再將等式兩邊同時除以 $p(x, t)$ 解出 $v(x, t)$:

$$v(x, t) = f(x, t) - [1 / (2 p(x, t))] * \partial / \partial x [g^2(x, t) p(x, t)]$$

展開 $\partial / \partial x [g^2(x, t) p(x, t)]$ 這一項 :

$$\partial / \partial x [g^2(x, t) p(x, t)] = [\partial / \partial x g^2(x, t)] p(x, t) + g^2(x, t) [\partial / \partial x p(x, t)]$$

將展開後的結果代回 $v(x, t)$ 的表達式中 :

$$v(x, t) = f(x, t) - [1 / (2 p(x, t))] * ([\partial / \partial x g^2(x, t)] p(x, t) + g^2(x, t) [\partial / \partial x p(x, t)])$$

化簡得到 :

$$v(x, t) = f(x, t) - (1/2) \partial / \partial x g^2(x, t) - [g^2(x, t) / (2 p(x, t))] * \partial / \partial x p(x, t)$$

因為導數 $\partial / \partial x \log p(x, t)$ 可以寫作 :

$$\partial / \partial x \log p(x, t) = [1 / p(x, t)] * \partial / \partial x p(x, t)$$

將score function。將其代入 $v(x, t)$ 的中，得到 :

$$v(x, t) = f(x, t) - (1/2) \partial / \partial x g^2(x, t) - [g^2(x, t) / 2] * \partial / \partial x \log p(x, t)$$

得到 $v(x, t)$ 後，因此最終ODE :

$$dx_t = [f(x_t, t) - (1/2) \frac{\partial}{\partial x} g^2(x_t, t) - [g^2(x_t, t) / 2] * \frac{\partial}{\partial x} \log p(x_t, t)] dt$$

2.AI 的未來與機器學習的基石

2.1 AI 的未來能力

我認為在 20 年後，AI 有可能達成的、且對人類具有重大意義的一項能力是：自主科學發現與可解釋的假說生成。

這項能力指的是 AI 不再只是數據分析或模式識別的工具，而是可以自主進行科學研究。它能夠：

- 1.整合與理解：包含整個科學領域的知識，包括數百萬篇學術論文、實驗數據庫、專利文件和教科書，並將這些非結構化的資訊建構成一個動態、多維度的知識圖譜。

- 2.提出假說：基於現有知識，自主識別出知識體系中的空白、矛盾或潛在關聯，並提出全新的、具有原創性的科學假說。例如，在材料科學領域，AI 可能會提出一種全新的晶體結構，並預測它將具備前所未見的超導特性。

- 3.設計驗證：為它自己提出的假說設計出最有效率的驗證實驗方案，甚至能在模擬環境中先行測試，篩選出最具潛力的假說。

- 4.解釋與推理：用我們人類可以理解的語言和邏輯，解釋它為何提出此假說，其背後的物理或化學原理是什麼。

因為人壽命有限且需要休息不可能 24 小時不間斷進行研究，且會遇到很多跨領域、超出人腦處理的複雜問題。所以 AI 如果有這個能力，會根本性地加速科學進程，提出人類從未想過的問題以及解決方案，提升人類的文明。

2.2 涉及的機器學習類型

需要監督式學習、非監督式學習與強化學習三者的深度結合。

Unsupervised Learning：因為知識多為非結構化文本。AI 需要利用 LLM 的技術，從文獻中學習概念的表徵、發現潛在的關聯性，建構一個豐富且準確的知識內部表徵。

Supervised Learning：用於驗證。例如，當 AI 思考一個新分子結構時，它可以利用一個在大量已知「分子-特性」數據上訓練出的監督式模型，快速預測這個新分子的穩定性或導電性。

Reinforcement Learning：用於發現。可以將「科學研究」看作一個決策過程。AI 代理 (Agent) 處於一個由現有科學知識構成的「環境 (Environment)」中。

Action：提出一個新假說、設計一個模擬實驗、或選擇閱讀哪一篇論文。

Feedback/Reward：可能是一個模擬實驗的成功、新假說與現有數據的吻合度、或是一個衡量假說「新穎性」與「啟發性」的分數。

資料來源：整個公開的科學文獻數據庫 (如 arXiv, PubMed)、化學與材料數據庫、基因序列數據庫等。

目標訊號：在監督式學習中，目標訊號是明確的（例如，材料的熔點）。但在強化學習驅動的發現過程中，目標訊號（獎勵函數）需要設計，它不僅是「預測準確」，更要獎勵「提出深刻、新穎且可驗證的理論」。學習回饋與環境互動：AI 提出假說（行動），在模擬環境中進行測試，根據結果（回饋）更新其知識庫和策略，然後再提出下一個假說。

2.3 第一步的「模型化」

簡化問題：從觀測數據到符號化定律。例如，可建立一個牛頓力學的模擬器，其中有多個星體在引力作用下運動。AI 只能觀測到這些星體隨時間變化的位罝座標（原始數據）。它的任務是自主提出描述這些運動背後規律的數學方程式。如果它能成功推導出場景背後的萬有引力定律，就等於完成了從觀測到理論建構的整個循環。

- 可測試性：
1. 預測準確性：模型輸出的方程式能否準確預測模擬世界中星體未來的軌跡？
 2. 符號一致性：模型輸出的方程式是否在數學上等價於我們已知的物理定律？
 3. 泛化能力：在新設定（例如，增加一個星體或改變初始條件）下，模型發現的定律是否依然有效？

所需數學或機器學習工具：

1. Symbolic Regression：核心工具。傳統迴歸是擬合參數，目標是直接找到數學方程式的結構。
2. Graph Neural Networks (GNN)：可用來表徵物理系統，將星體視為節點，它們之間的交互作用（如引力）視為邊。
3. 基於強化學習的搜索策略：AI 需要在龐大的可能方程式空間中進行搜索。強化學習可訓練 Agent 學會如何組合數學運算符 ($+, -, *, /, d/dt$) 和物理變數，以更快地找到解釋數據的定律。
4. Causal Inference：幫助 AI 區分變數之間的相關性與因果性，確保找的是根本的物理規律，而非 spurious correlations。

3. Unanswered Questions

在推導 SDE 對應的 ODE 時，如何確保解的唯一性和穩定性的？