用最直覺的方式從 SDE 走到 Probability Flow ODE（一維）

我們要把下列 **隨機微分方程（SDE, Itô）**

$$\mathrm{d}x_t \;=\; f(x_t,t)\,\mathrm{d}t \;+\; g(x_t,t)\,\mathrm{d}W_t$$

改寫成一條 **沒有雜訊的 ODE**，
但要求：兩條路徑族在每個時間 t 上都產生**同樣的機率密度** $p(x,t)$。
最後答案會是

$$\boxed{\mathrm{d}x_t = \Big[f(x_t,t) - \tfrac{1}{2}\,\partial_x g^2(x_t,t) - \tfrac{1}{2}\,g^2(x_t,t)\,\partial_x \log p(x_t,t)\Big]\mathrm{d}t}$$

這條 deterministic ODE 就叫 **probability flow ODE**。

下面用「搬運機率的流量」來直觀推導。

0. 名詞介紹

- **密度** $p(x,t)$：在時間 t 時，樣本落在位置 x 的「機率濃度」。
- **機率流量** $J(x,t)$：單位時間內，從位置左往右「被搬運」的機率量。
  把 p 想成水，把整條 x 軸想成水管，J 是水的**淨流速 × 濃度**。
- **關鍵守恆式（連續方程）**：
  「某段區間裡的機率變化 = 進來多少 − 流出去多少」
  轉成微分就是

$$\partial_t p(x,t) \;=\; -\,\partial_x J(x,t). \qquad (\bigstar)$$

1. SDE 的流量長什麼樣？

對 Itô 形式的 SDE

$$
\mathrm{d}x_t = f\,\mathrm{d}t + g\,\mathrm{d}W_t,
$$

它的密度 p 滿足**Fokker–Planck 方程**：

$$
\partial_t p \;=\; -\partial_x\big(f\,p\big) \;+\; \tfrac{1}{2}\,\partial_x^2\big(g^2\,p\big). \tag{FP}
$$

把 (FP) 與 (★) 對比，就能讀出 **SDE 的機率流量**

$$
\boxed{J_{\mathrm{SDE}}(x,t) \;=\; f(x,t)\,p(x,t) \;-\; \tfrac{1}{2}\,\partial_x\big(g^2(x,t)\,p(x,t)\big).} \tag{1}
$$

直覺：

- $f\,p$：漂移把「水」往 f 的方向推。
- $-\frac{1}{2}\partial_x(g^2p)$：擴散會把高濃度往低濃度推（像在做**抹平**），所以出現空間導數。

> 初學者可以只先記住 (1)：**SDE 的流量 = 漂移造成的流量 − 擴散造成的「梯度流量」**。

2. ODE 的流量長什麼樣？

若我們用一條沒有噪聲的 ODE 來移動粒子：

$$
\dot{x}_t = u(x_t,t),
$$

那密度的變化只會來自「被速度場 u 搬運」，所以

$$
\partial_t p \;=\; -\,\partial_x\big(u\,p\big),
$$

因此 **ODE 的機率流量** 很單純：

$$
\boxed{J_{\mathrm{ODE}}(x,t) \;=\; u(x,t)\,p(x,t).} \tag{2}
$$

3. 要兩邊密度一樣 ⇒ 讓兩邊流量一樣

我們的目標是：**不論何時何地，兩套動力學搬運出的密度都一樣**。
最直接的做法：把兩個流量**直接設相等**：

$$J_{\mathrm{ODE}}(x,t) \;\equiv\; J_{\mathrm{SDE}}(x,t).$$

把 (1) 與 (2) 代入，立刻得到

$$u(x,t)\,p(x,t) \;=\; f(x,t)\,p(x,t) - \tfrac{1}{2}\,\partial_x\big(g^2(x,t)\,p(x,t)\big).$$

只要 $p > 0$（在機率有支撐的地方），除以 p：

$$u(x,t) = f(x,t) - \frac{1}{2}\,\frac{\partial_x\big(g^2 p\big)}{p}. \tag{3}$$

把分子展開（就是乘法微分）：

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

代回 (3) 並整理：

$$u(x,t) = f(x,t) - \tfrac{1}{2}\,\partial_x g^2(x,t) - \tfrac{1}{2}\,g^2(x,t)\,\frac{\partial_x p(x,t)}{p(x,t)}.$$

注意 $\partial_x \log p = (\partial_x p)/p$，所以

$$\boxed{u(x,t) = f(x,t) - \tfrac{1}{2}\,\partial_x g^2(x,t) - \tfrac{1}{2}\,g^2(x,t)\,\partial_x \log p(x,t).} \tag{4}$$

最後把 u 放回 ODE：

$$\mathrm{d}x_t = \Big[f - \tfrac{1}{2}\,\partial_x g^2 - \tfrac{1}{2}\,g^2\,\partial_x \log p\Big]\mathrm{d}t,$$

這就是 **probability flow ODE**。完成。

4. 兩個「為什麼」的直覺

1. **為什麼會出現** $-\frac{1}{2}\,\partial_x g^2$？
   擴散強度 g 在空間不均勻時，噪聲本身就會「偏向把粒子推向噪聲比較小的地方」——Itô 詮釋下要加這個修正，才能在 ODE 里重現同樣的淨流量。
2. **為什麼會出現** $-\frac{1}{2}\,g^2\,\partial_x \log p$？
   擴散會把高密度往低密度推，這種「往密度下降方向流動」在連續極限上就和 $\nabla \log p$（**score**）成正比。於是 ODE 只要沿著 $-g^2\nabla \log p$ 方向再推一下，就能模擬擴散對密度的抹平效果。

5. 快速檢查（sanity check）

- **常數擴散** $g \equiv \sigma$：
  $\partial_x g^2 = 0$，所以

$$u = f - \tfrac{1}{2}\sigma^2\,\partial_x \log p.$$

  沒有空間變化的噪聲，只剩「沿著 score 往低密度方向推」的項。很合理。
- **零噪聲** $g \equiv 0$：
  $u = f$。回到原本的 ODE，密度只被漂移搬運。

8. 結語

整件事就一句話：
把 SDE 的「機率流量」改用一個沒有噪聲的速度場 u 來搬運，而且讓兩邊的流量完全一樣。
解出 u 就得到 probability flow ODE。

AI 的未來與機器學習的基石

1. AI 的未來能力

題目能力：以「跨學科機理發現助理」自動提出可檢驗的新定律。

它能從生醫、材料、經濟等異質資料中，生成**可重複、可反駁**的假說（含變數關係、因果方向與可操作

的實驗設計)，並輸出**必要資料量、估計效應大小與風險**。
為何重要：

- 目前 AI 多做預測與總結；**真正創新的「可驗證機理」**仍仰賴少數人類專家。若能把「提出可檢驗假說」流程標準化，將大幅縮短從資料到知識的周期。
- 在醫療與能源上，這代表**更快的藥物靶點發現**與**高效材料設計**；在公共政策上，能提出**低成本準實驗**來估計介入效果。
  典型場景：「自動產出 CRISPR 實驗方案以測試某代謝通路的因果方向」「為鋰電新電解質生成反應機制與 3 項關鍵驗證實驗」。

2. 涉及的機器學習類型與理由

- **監督式學習（SL）**：
  - 用途：表徵學習與基礎預測模型（結構式/序列式預測、實驗成敗分類）。
  - 標註來源與目標訊號：歷史論文資料庫、公開數據集、LIMS 實驗結果；目標是數值效能或成敗標籤。
- **非監督式學習（UL）與表徵學習**：
  - 用途：在跨模態資料（文本、圖譜、結構、時間序列）中學習**潛在變量**與**結構稀疏性**，為因果與規則歸納做前處理。
- **因果學習 / 結構學習（Causal + Graphical Models）**：
  - 用途：從觀測資料與干預碎片中推斷圖結構，估計可辨識的因果效應。
- **強化學習（RL）/ 主動實驗設計（Active Learning, Bayesian Optimization）**：
  - 用途：在「實驗昂貴」情境下，**規劃下一步最有價值的實驗**；回饋是實驗獲得的效用（信息增益、價值函數）。
- **人機互動學習（HF/HITL）**：
  - 用途：納入專家先驗與可解釋約束；由人提供**結構先驗/不變性規則**作為正則化。
- **是否要與環境互動？**
  - 需要。系統必須在「**提出—實驗—更新**」的閉環中運作（線上同化新證據）。

3. 第一研究步驟的「模型化」

最小可行問題（Model Problem）：
以「小分子—表型效應」為例，建立一個能**產生並評分可檢驗假說**的閉環：

1. **資料與表徵**：蒐集分子圖（SMILES/3D）、多組學與已有干預結果；以圖神經網路與變分自編碼器學到共享潛在空間。
2. **結構學習**：以稀疏可解釋的因果圖（NOTEARS/FCI + 結構先驗）得到候選因果邊。
3. **假說產生器**：把候選邊轉成**操作性假說**（變數、預期方向、效應大小先驗、控制變項）。
4. **實驗規劃（RL/BO）**：以**信息增益最大化**為回饋選擇下一個實驗；安全約束來自專家規則與成本上限。
5. **評估指標**：
    - 離線：在合成/模擬資料的「已知真相」上測**結構恢復率（SHD/F1）**、效應估計誤差（PEHE/ATE 誤差）。
    - 在線：每單位成本的**發現率**、重複驗證通過率、對外部資料集的轉移性。
6. **成功判準**：在固定實驗預算下，相比基線（隨機或貪婪）達成**更高的真實陽性數與更低的假陽性**，且假說可被人類審核理解。
7. **需要的工具**：大語言模型做文獻抽取與實驗步驟標準化；圖學習/因果結構學習套件；貝葉斯最佳化與主動學習框架；一個小型濕實驗或高可信模擬器作為在線回饋來源。

> 核心精神：把「知識生產」拆成**表徵 → 結構 → 假說 → 實驗 → 校正**五步，並以**可檢驗性**與**成本效率**作為第一性原則來設計學習與評估。