Course: Machine Learning
Assignment: Week 10_Written_Assignment
Student: Han Yun Chen (112652010)

Problem 1

Consider the forward stochastic differential equation (SDE)

$$dx_t = f(x_t, t)\, dt + g(x_t, t)\, dW_t, \tag{1}$$

where W_t is a standard Wiener process.

Goal: Show that the corresponding *probability flow ODE* is written as

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

Solution.

Let $p(x, t)$ denote the probability density of x_t. The density of an SDE satisfies the **Fokker–Planck equation**:

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

Now consider a deterministic ODE

$$dx_t = v(x_t, t)\, dt, \tag{4}$$

whose density also follows a **continuity equation**

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(v(x,t)p(x,t)\big). \tag{5}$$

We require both equations (3) and (5) to produce the same density $p(x, t)$. Equating their right-hand sides gives

$$-\frac{\partial}{\partial x}\big(vp\big) = -\frac{\partial}{\partial x}\big(fp\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(g^2 p\big). \tag{6}$$

Integrating once with respect to x (assuming $p \to 0$ at infinity), we obtain

$$vp = fp - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\big(g^2 p\big), \tag{7}$$

and thus

$$v = f - \frac{1}{2p}\frac{\partial}{\partial x}\big(g^2 p\big). \tag{8}$$

Expanding the derivative term yields

$$v = f - \frac{1}{2p}\left(p\frac{\partial}{\partial x}g^2 + g^2\frac{\partial p}{\partial x} \right) \tag{9}$$

$$= f - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}g^2 - \frac{g^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\log p. \tag{10}$$

Therefore, the **probability flow ODE** corresponding to the given SDE is

$$\boxed{dx_t = \left[f(x_t, t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} g^2(x_t, t) - \frac{g^2(x_t, t)}{2}\frac{\partial}{\partial x}\log p(x_t, t) \right] dt.} \tag{11}$$

Problem 2

(1) AI 的未來能力

我預期在未來 AI 能夠在大規模，含雜訊的資料中**自動提出、化簡並且驗證可以被人類理解的新的物理定律**。不只侷限在相關性挖掘，而是能輸出符號化的定律（像是微分方程、守恆量）、給出可重現的推導步驟，並且設計相關實驗來區分競爭假說。

以經典力學為例，AI 可由行星位置與時間序列自動發現中心力形式與反平方律，推得角動量守恆，並預測新情境下的軌道偏差。意義在於：把創造理論這件事從少數天才的直覺擴張為人機協作的系統化能力，加速科學的發展。

(2) 涉及的機器學習類型

這項能力需要非監督學習和強化學習的組合。

1. **非監督式學習**（Unsupervised Learning）：
   這類方法讓 AI 在沒有標籤的資料中自己找出規律。
   例如：給它很多行星運動的觀測資料，它可以自己發現「距離和加速度有關」，或「系統中有某些量是固定不變的（守恆量）」。
   資料來源就是大量的觀測數據或模擬結果，AI 的目標是讓找到的規律能夠正確預測新的情況。
2. **強化學習**（Reinforcement Learning）
   這讓 AI 學會「自己做實驗、測試假設」。
   它會不斷嘗試不同的模型（例如各種可能的力公式），然後看預測結果和實際數據差多遠。
   如果預測得準，它就得到獎勵；如果錯很多，就受到懲罰。
   久而久之，它就能學會選出最可能正確的定律。

(3) 第一步的「模型化」

我們可以從一個比較單純的問題開始：
給 AI 一堆行星繞太陽運行的座標資料，讓它自己找出物體之間的引力公式

這就是從觀測中「自己找出自然規律」的縮小版。若能成功發現萬有引力這樣的關係，就有機會推廣到更複雜的領域。

要怎麼知道成功？

- AI 找出的公式能準確預測新的軌道
- 它能給出一個簡潔、可理解的方程

- 它需要的資料比人類原本實驗少

會用到的工具

- 時間序列分析（讓 AI 看出變化規律）
- 符號回歸（讓 AI 寫出像數學公式那樣的結果）
- 強化學習（讓 AI 自動調整和測試假設）

Problem 3

Unanswered Questions:

Can we derive the same probability flow ODE form for higher-dimensional SDEs, and what complications arise when the diffusion term g(x, t) becomes a matrix?