

Project Report: AI 作為極致的現實模擬器

The AI Reality Simulator

1. AI 的未來能力

能力描述：全尺度複雜隨機系統的生成模擬

(Full-Scale Generative Simulation of Stochastic Systems)

目前主流 AI 擅長生成靜態圖像或單一類型的文本，但在模擬「受隨機性主導的複雜動態系統」上仍顯不足。我認為未來的 AI 將具備「生成平行現實」的能力。它不僅是預測未來（Forecasting），而是能生成無數種「統計上合理」的未來軌跡，特別是在氣候變遷、全球金融市場或流行病傳播等混沌系統中。

應用場景

政府或科學家可以要求 AI：「生成 10,000 種未來 50 年的全球氣候情境，其中包含罕見的極端黑天鵝事件。」

AI 不是給出一個平均值，而是利用 **隨機微分方程 (SDE)** 生成具備精細物理細節的連續動態影像與數據。這將徹底改變風險管理——我們不再是預測「會發生什麼」，而是模擬「所有可能發生的事」並提前準備。

2. 所需的成分與資源 (Ingredients)

要實現這種「生成隨機過程」的能力，我們需要以下核心成分：

資料 (Data)

- 高頻率的連續時間序列數據 (High-frequency Time Series)**：重點在於捕捉資料的「分佈變化」而非單一數值（例如：不是紀錄今天的溫度，而是紀錄溫度的波動機率密度演化）。

工具 (Tools) - 數學核心

- **Stochastic Differential Equations (SDEs)**：用來描述數據如何隨時間演化並疊加隨機雜訊。

$$dX_t = f(X_t, t)dt + g(t)dW_t$$

- **Score Matching / Score PDE**：用於學習數據分佈的梯度場 (Score function, $\nabla_x \log p(x)$)，這是生成模型的「導航圖」。
- **Fokker-Planck Equation**：用於描述機率密度函數 $p(x, t)$ 隨時間的演化過程。

學習架構

- **Generative Learning (生成式學習)**：透過學習將「已知的隨機雜訊」逆向還原為「有意義的數據結構」(即解 Reverse SDE)。

3. 涉及的機器學習類型

這主要涉及 **非監督式學習 (Unsupervised Learning)** 中的 **生成模型 (Generative Modeling)**。

理由

我們沒有標註「正確答案」(沒有 Y 值)。我們的目標是讓模型觀察大量的現實數據 (如氣候數據)，然後學習其潛在的機率分佈 (Probability Distribution)。

資料來源與目標訊號

- **資料來源**：真實世界的觀測樣本 (如一組股票走勢或氣流圖)。
- **目標訊號**：並非分類標籤，而是 Score Function (分佈的對數梯度 $\nabla_x \log p(x)$)。模型試圖預測「如何移動數據點」才能讓它看起來更像真實數據。

互動與回饋

這是一個從雜訊中「取樣」的過程，模型透過比對「生成分佈」與「真實分佈」的差異 (如 Score Matching Loss) 來進行自我修正。

4. 「可實作模型問題」(Solvable Model Problem)

問題設計

對應目標：為了驗證「AI 作為現實模擬器」的核心機制，我們將複雜的氣候或金融系統簡化為一個 **1維雙峰分佈 (1D Bimodal Distribution)**。這個分佈模擬了物理系統中常見的「雙穩態」特徵（例如：氣候系統中的冰河期與間冰期），中間則是低機率的不穩定過渡區。

明確定義：

- 輸入 (Input)：**一個狀態數值 x （可能是真實數據，也可能是純雜訊）以及當前的噪聲強度 σ 。
- 輸出 (Output)：**該位置的 Score（即數據密度的梯度方向 $\nabla_x \log p(x)$ ）。
- 任務目標：**模型不直接記憶數據點，而是學習數據的「梯度場」。最終透過解逆向 SDE，將毫無意義的高斯白雜訊「導航」回兩個特定的數值聚集區（-2 與 +2）。
- 資料形式：**由程式碼生成的合成數據，包含大量連續數值。

模型與方法

- 模型選擇：**ScoreNet (Simple MLP)。
- 理由：**我們需要一個能擬合非線性梯度場的函數逼近器。程式碼中選用了三層 MLP 搭配 Softplus 激活函數。
關鍵選擇：選擇 **Softplus** 而非 ReLU 的原因在於其平滑性 (Smoothness)。物理場的梯度通常是連續且可微的，Softplus 提供了比 ReLU 更符合物理直覺的曲線擬合能力。
- 核心方法：**Denoising Score Matching 搭配 Langevin Dynamics (Reverse SDE)。
我們採用「去噪」的訓練策略：將真實數據 x_0 加上高斯雜訊 z 得到擾動數據，然後強迫模型去預測「加了多少雜訊」。根據 Vincent (2011) 的理論，這在數學上等價於學習真實數據分佈的 Score Function。

實作與結果

我們使用 Python (PyTorch) 實作此過程。以下為核心程式碼邏輯描述：

1. Score Network 定義

建立一個類神經網路，接收狀態 x 與噪聲強度 σ 。透過多層線性層與 Softplus 激活函數，最後輸出一個純量 Score(因為我們目前只在一維活動)。

2. 訓練過程 (Training)

計算 Loss 的方式為比較「模型預測的 Score」與「真實的目標 Score」。真實目標由物理公式導出： $TargetScore = -z/\sigma$ 。模型透過最小化 MSE Loss 來學習。

3. 生成過程 (Reverse SDE)

從純雜訊開始，依據學到的 Score 進行迭代。每一步更新公式為： $x = x + step_size \times score + noise$ 。

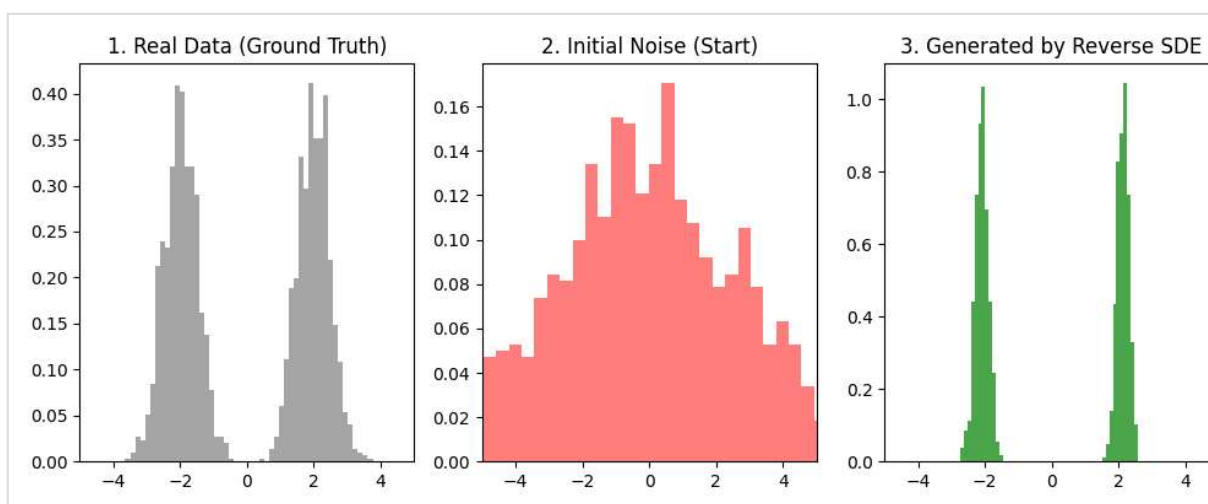


圖 1：模擬結果展示。左圖為真實雙峰數據，中圖為初始雜訊，右圖為經由 Reverse SDE 生成的結果。

結果分析：

執行程式後產生的三張直方圖（如上圖所示）顯示了訓練的成效：

- **左圖 (Ground Truth)：** 顯示真實數據集中在 -2 與 +2 的雙峰結構。
- **中圖 (Initial Noise)：** 顯示生成前的初始狀態，是一個雜亂無章的紅色高斯分佈（純雜訊）。
- **右圖 (Generated)：** 經過 Reverse SDE 迭代後，原本紅色的雜訊被成功「推」成了綠色的雙峰分佈。這證明模型學會了物理場的結構。

5. 討論

從簡化問題中學到了什麼？

這個實驗驗證了「生成即去噪」(Generation is Denoising) 的核心概念。我們發現，只要模型能準確估計不同噪音尺度下的 Score (梯度方向)，就能利用隨機微分方程 (SDE) 將無序的亂數重構為有序的結構。這也確立了 σ (噪音強度) 作為模型輸入的重要性：它充當了導航的「比例尺」。

揭示的未來關鍵困難：

雖然 1D 問題很容易解決，但此實作揭示了「維度災難」(Curse of Dimensionality) 的隱憂。在 1D 中，Score 只是一個純量數值；但在高維氣候模擬中，Score 是一個極高維的向量場。隨著維度增加，要精確估計全空間的梯度將變得極其昂貴且不穩定。這暗示了在未来的進階研究中，必須引入 *Sliced Score Matching* 等技術來降低高維運算的複雜度。