

2025 年 10 月 13 日至 10 月 19 日周报

何瑞杰
中山大学, 大湾区大学

1. 项目进展

1.1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学

1.1.1. 对模型和训练的改动

1. 将所有 3×3 的卷积核大小增加到 5
2. 依照 e2cnn [1] 构建 tiny 版本的 p4cnn
3. 在训练代码中增加了 early stopping 机制。

1.1.2. 在不同规则的演化系统上的实验结果

实验结果如下。表中每格上侧的数表示最后的训练集损失，下侧的数表示验证集正确率。

演化规则 / 模型名	CNN-tiny	CNN-small	MCNN	P4CNN-tiny	P4CNN-small	P4MCNN
B36/S23	0.7002	0.0045	0.0055	0.3631	0.0037	0.0036
	86.79%	100.00%	99.97%	94.74%	100%	100.00%
B36/S23	0.3451	0.0167	0.0262	0.4740	0.0274	0.0148
	90.46%	99.89%	98.94%	92.32%	99.77%	99.86%
B3678/S34678	0.2035	0.0133	0.0660	0.4534	0.0159	0.0097
	92.36%	99.96%	98.19%	93.40%	99.96%	99.98%
B35678/S5678	0.0165	0.0216	0.0955	0.0086	0.0058	0.0041
	99.24%	98.73%	99.52%	99.32%	99.65%	99.77%
B2/S	0.0231	0.0023	0.0024	0.6136	0.0022	0.0034
	99.74%	100.00%	100.00%	88.79%	100.00%	100.00%
B345/S5	0.1710	0.0065	0.0039	0.0028	0.0028	0.0119
	96.25%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	99.92%
B13/S012V	0.2489	0.0066	0.0045	0.1243	0.0016	0.0010
	92.30%	100.00%	99.99%	99.04%	100.00%	100.00%
B2/S013V	0.5533	0.0046	0.0025	0.7082	0.0091	0.0015
	77.24%	100.00%	100.00%	84.71%	100.00%	100.00%

不同模型的大小、参数量和计算量对比如下：

模型名	FLOPs (M)	参数量	估计大小 (MB)	最低正确率 (%)
P4CNN-tiny	1.28	94	11.21	84.71
CNN-tiny	5.32	133	2.24	77.24
MCNN	40.48	1,004	7.36	98.19
P4MCNN	6.4	1,276	—	99.77
CNN-small	98.5	2,450	—	98.73%
P4CNN-small	10.24	3,202	—	99.65

下面是各网络在较为困难的四个规则数据下的训练轨迹对比图，其中对于密集的数据点采用的是滑动窗口的中位数作为平滑后的值。

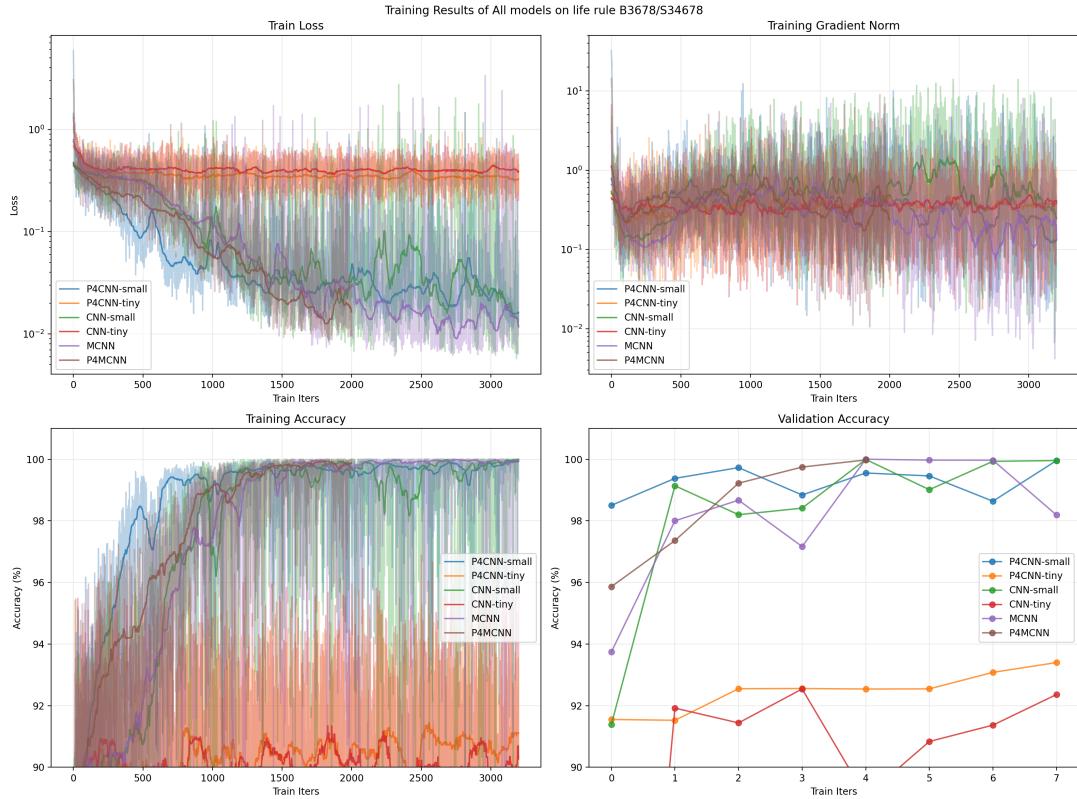


Figure 1: 各网络在 B3678_S34678 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

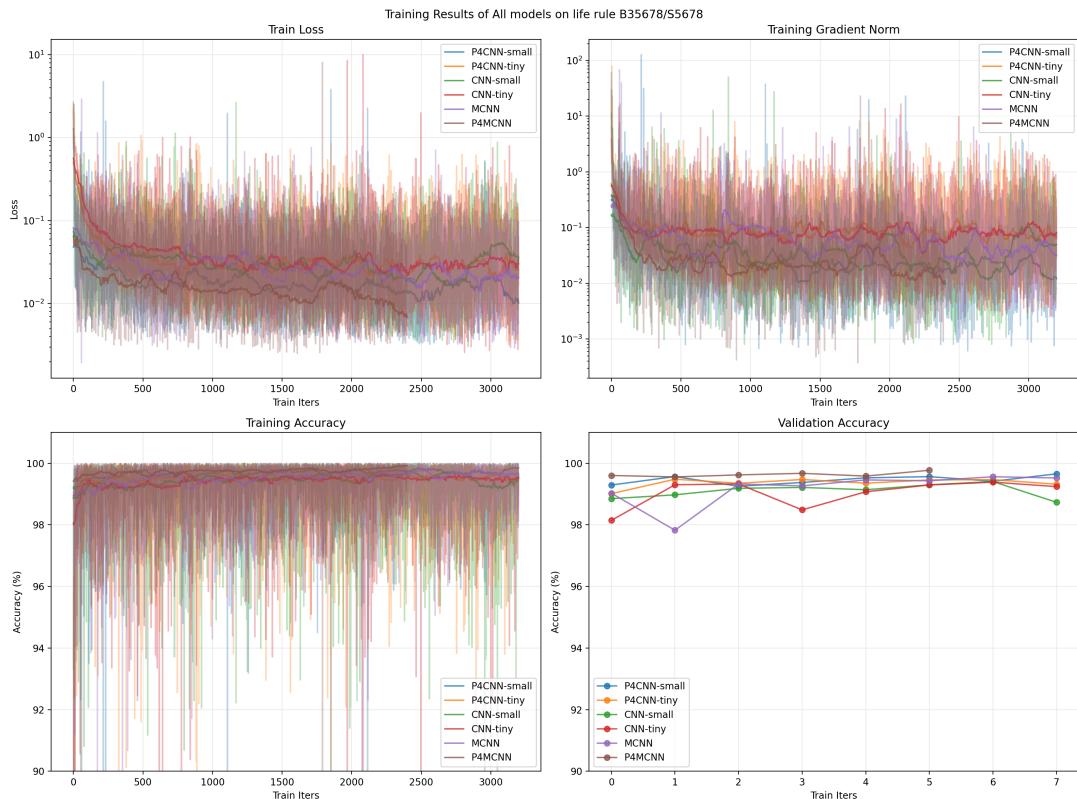


Figure 2: 各网络在 B35678/S5678 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

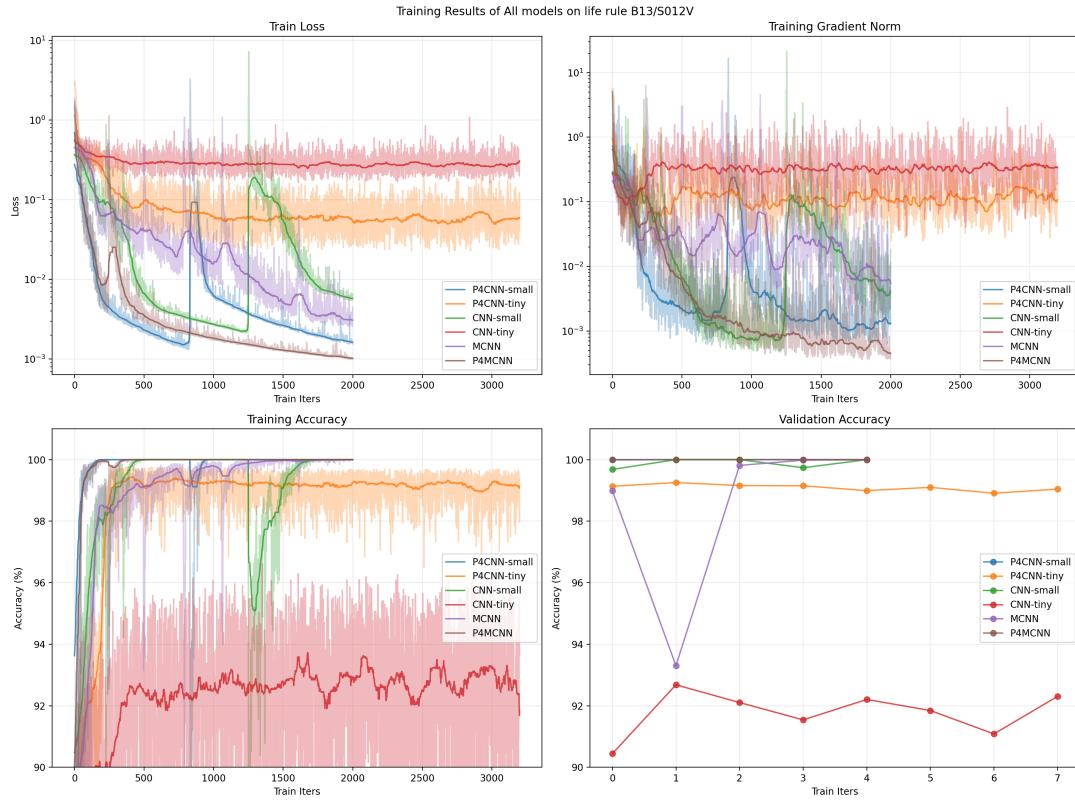


Figure 3: 各网络在 B13/S012V 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

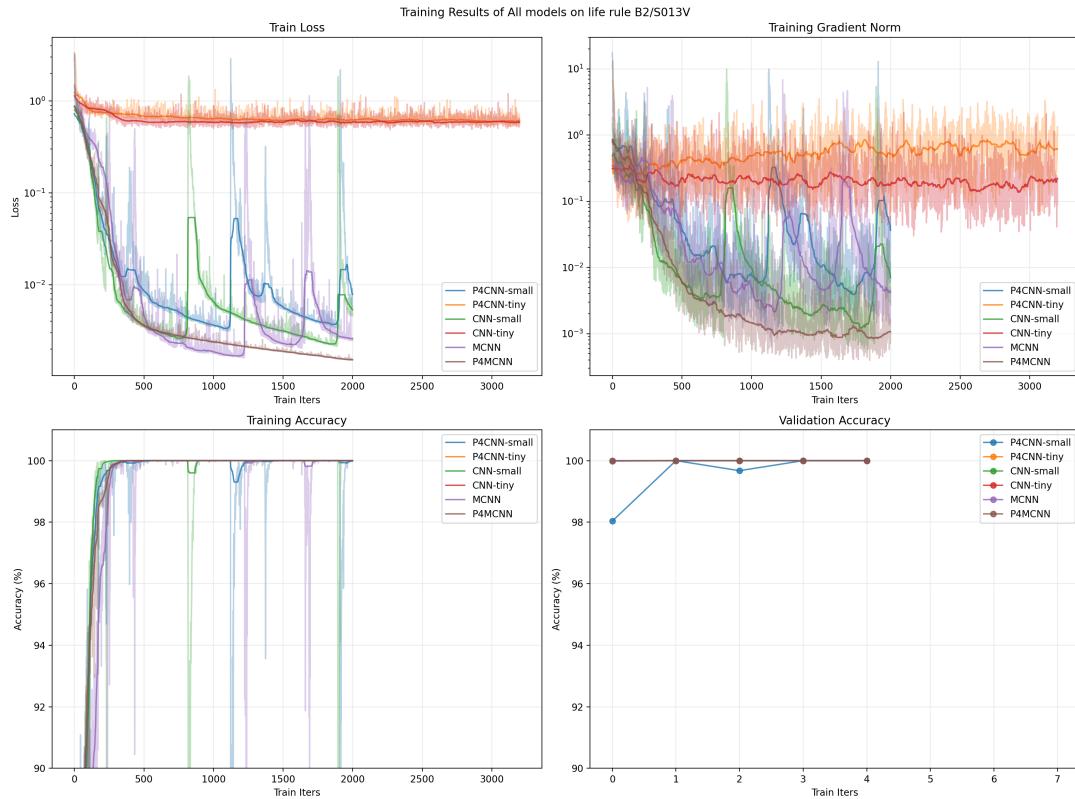


Figure 4: 各网络在 B2/S013V 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

2. 学习进度

2.1. 随机过程

本周学习到了 Poisson 过程，以及一般宽平稳随机过程相关函数的诸性质。对于实值随机过程 $X(\cdot)$ ，(宽) 平稳指的是其相关函数 $R_X(s, t) = \mathbb{E}[X(s)X(t)]$ 仅依赖于 s 和 t 之间的时间差，因此也常记为 $R_X(\tau)$ 。对于宽平稳的随机过程，其相关函数 $R_X(\tau)$ 一定是偶函数，且从相关函数事实上是两个随机变量 $X(s)$ 和 $X(t)$ 的内积的角度看由 Cauchy-Schwartz 不等式可以得到

$$|R_X(\tau)| = |R_X(s, t)| = |\langle X(s), X(t) \rangle| \leq \sqrt{\langle X(s), X(s) \rangle^2 \langle X(t), X(t) \rangle^2} = R_X(0). \quad (1)$$

另外，如果有一宽平稳过程的相关函数满足存在某个 $T > 0$ ，使得 $R_X(0) = R_X(T)$ ，一定有对任意 τ ， $R_X(\tau) = R_X(\tau + T)$ 几乎处处成立。考虑 $\mathbb{E}[|X(t) - X(t + T)|^2]$ ，有

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[|X(t) - X(t + T)|^2] &= \mathbb{E}[X^2(t) - 2X(t)X(t + T) + X^2(t + T)] \\ &= 2R_X(0) - 2R_X(T) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

相关函数都是正定函数，一个函数是正定函数，是指任取正整数 n ，任取定义域中一列点 x_1, \dots, x_n ，矩阵 $R = (f(x_i - x_j))_{i,j}$ 是正定的。该定义难以作为判断依据，但所幸有下面的定理

定理 2.1.1 (Bochner): 函数 f 是正定的，当且仅当其 Fourier 变换非负。

证明：先证必要性。首先回忆 Fourier 变换和 Fourier 逆变换：

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i\omega x} dx && \text{Fourier transform} \\ f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{i\omega x} d\omega && \text{Inverse Fourier transform} \end{aligned} \quad (3)$$

注意 $F(\omega) \geq 0$ ，如果 $e^{i\omega x}$ 是正定的，由积分的线性性，然后去极限，求和变成积分，容易推出 $f(x)$ 是正定的。现任取 n ，任取 x_1, \dots, x_n ，考察矩阵 $R = (e^{i\omega(x_j - x_k)})_{j,k}$ 。任选 $z \in \mathbb{C}^n$ 计算二次型 $z^\dagger R z$ ：

$$\begin{aligned} z^\dagger R z &= \sum_{j,k=1}^n \bar{z}_j e^{i\omega(x_j - x_k)} z_k = \sum_{j,k=1}^n \overline{z_j e^{-i\omega x_j}} z_k e^{-i\omega x_k} \\ &= \overline{\left(\sum_j z_j e^{-i\omega x_j} \right)} \left(\sum_k z_k e^{-i\omega x_k} \right) \geq 0. \end{aligned} \quad (4)$$

再来看充分性。已知 f 是正定的，选择区间 $[-T/2, T/2]$ 的一个均匀的划分 $K = \{t = x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n = s\}$ ，按上述规律组成的矩阵 R 是正定的。现取 $z = [e^{-i\omega x_1}, \dots, e^{-i\omega x_n}]^\top$ 。假设 f 的 Fourier 变换总存在，它在区间 $[-T/2, T/2]$ 上的积分也总存在，根据 f 的正定条件得到下面的二次型的值一定非负，经过先加细区间划分，然后令 $T \rightarrow \infty$ 的方法，可以得到极限为 f 的 Fourier 变换。由极限的性质和二次型的非负性可使充分性得到证明。

$$\begin{aligned}
 z^\dagger R z &= \sum_{j,k=1}^n f(x_k - x_j) e^{j\omega(x_j - x_k)} \\
 &\propto \sum_{j,k=1}^n f(x_k - x_j) e^{j\omega(x_j - x_k)} (\Delta x)^2 && \text{不变号} \\
 &\rightarrow \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t-s) e^{-j\omega(t-s)} dt ds && |K| \rightarrow 0, \text{ 极限唯一性} \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-T}^T \int_{-T+|\tau|}^{T-|\tau|} f(\tau) e^{-j\omega\tau} d\sigma d\tau && \tau = t-s, \sigma = t+s \\
 &\propto \frac{1}{T} \int_{-T}^T 2(T-|\tau|) f(\tau) e^{-j\omega\tau} d\tau \\
 &\rightarrow \text{P.V.} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) e^{-j\omega\tau} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) e^{-j\omega\tau} dx && T \rightarrow \infty, \text{ 极限唯一性}
 \end{aligned} \tag{5}$$

□

这个事实还可以是另一方向的观察结果。考虑平稳随机过程 $X(\cdot)$ 在对称 $[-T/2, T/2]$ 上的短时 Fourier 变换，考虑下面的极限：

$$\begin{aligned}
 L &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \mathbb{E} \left[\left| \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} X(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \right] \geq 0 \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \mathbb{E} \left[\left(\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} X(t) e^{-i\omega t} dt \right) \left(\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} X(s) e^{-i\omega s} ds \right) \right] \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \mathbb{E}[X(s)X(t)] e^{-i\omega(t-s)} dt ds && (6) \\
 &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} R_X(s, t) e^{-i\omega(t-s)} dt ds \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} R_X(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = S_X(\omega) && \text{上面算过了}
 \end{aligned}$$

该极限自然地证明了上面的定理，除此之外， $S_X(\omega)$ 称为随机过程 $X(\cdot)$ 的**功率谱密度 (power spectrum density)**。

2.2. 随机微分方程

本周没有推进。

3. 下周计划

论文阅读

1. 生成模型
 - DDPM 收尾
 - Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation
2. 动力学
 - 暂无
3. 其他
 - General $E(2)$ - Equivariant Steerable CNNs

项目进度

1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学
 - 尝试对模型权重进行解释，并用模型作为系统的演化模拟器，统计验证所学到的规则是否正确
 - 重新生成部分规则下的生命游戏演化数据
2. 微型抗癌机器人在血液中的动力学
 - 开始学习 PDE 的数值解方法

理论学习

1. 随机过程课程
 - 完成 Poisson 过程的学习
 - 预习 Markov 过程
2. 随机微分方程
 - 完成第四章 随机积分
 - 第五章 随机微分方程 开头

参考文献

- [1] QUVA-Lab, “E(2)-Equivariant CNNs Library for Pytorch.” Accessed: Oct. 15, 2025. [Online]. Available: <https://github.com/QUVA-Lab/e2cnn>

4. 附录

4.1. 剩余规则数据下的各网络训练结果

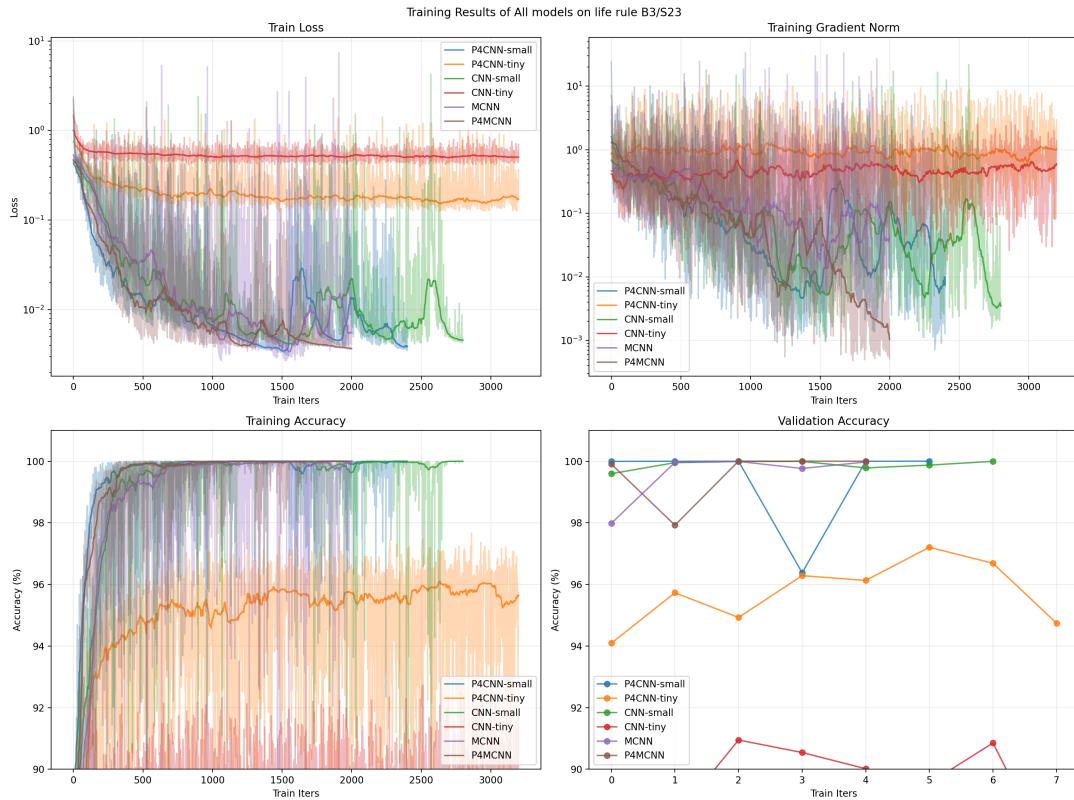


Figure 5: 各网络在 B3/S23 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

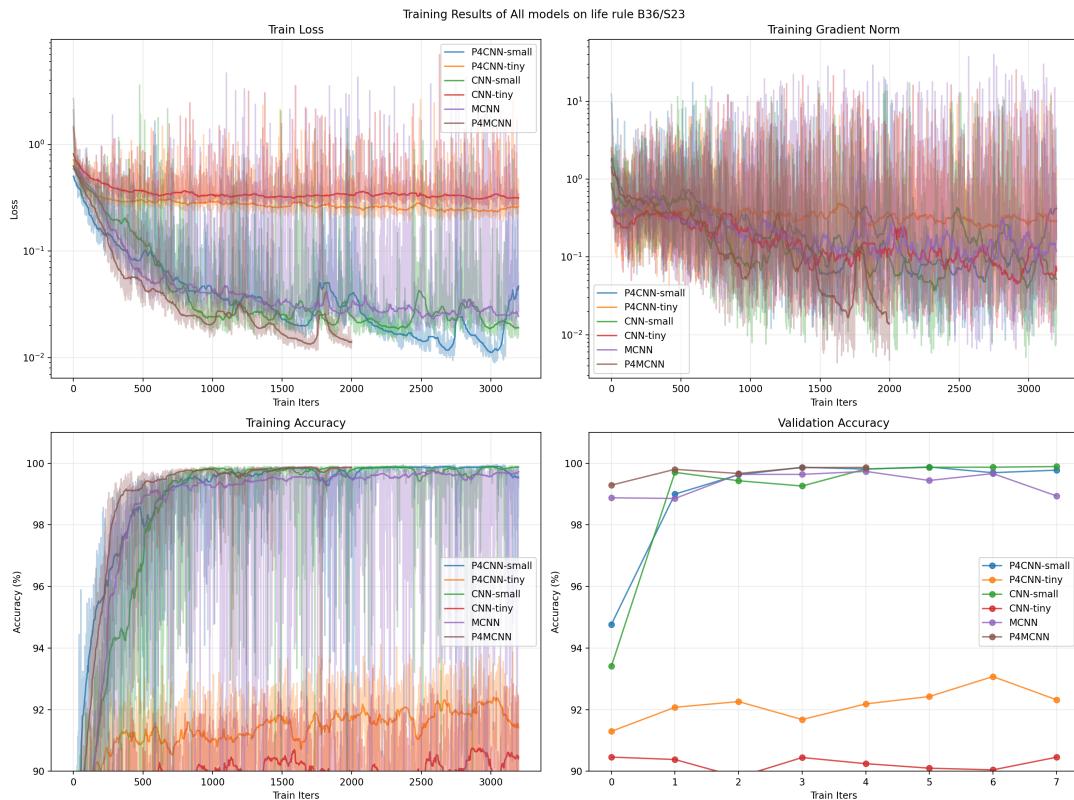


Figure 6: 各网络在 B36/S23 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

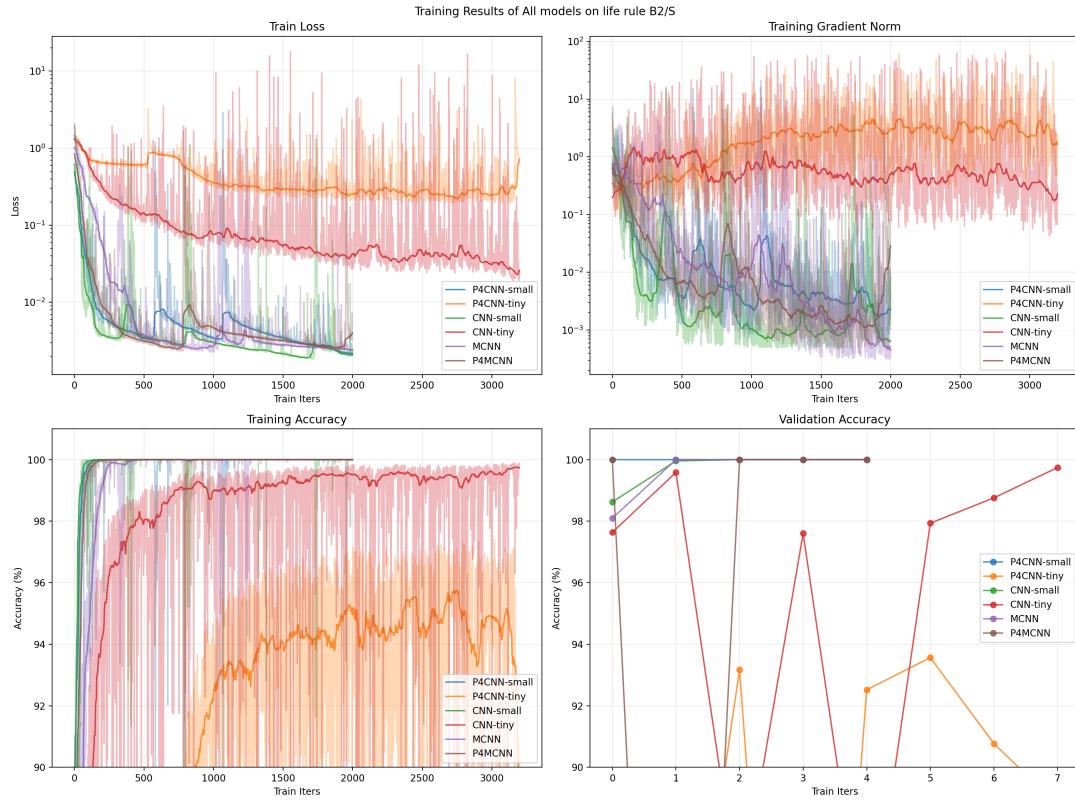


Figure 7: 各网络在 B2/S 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果

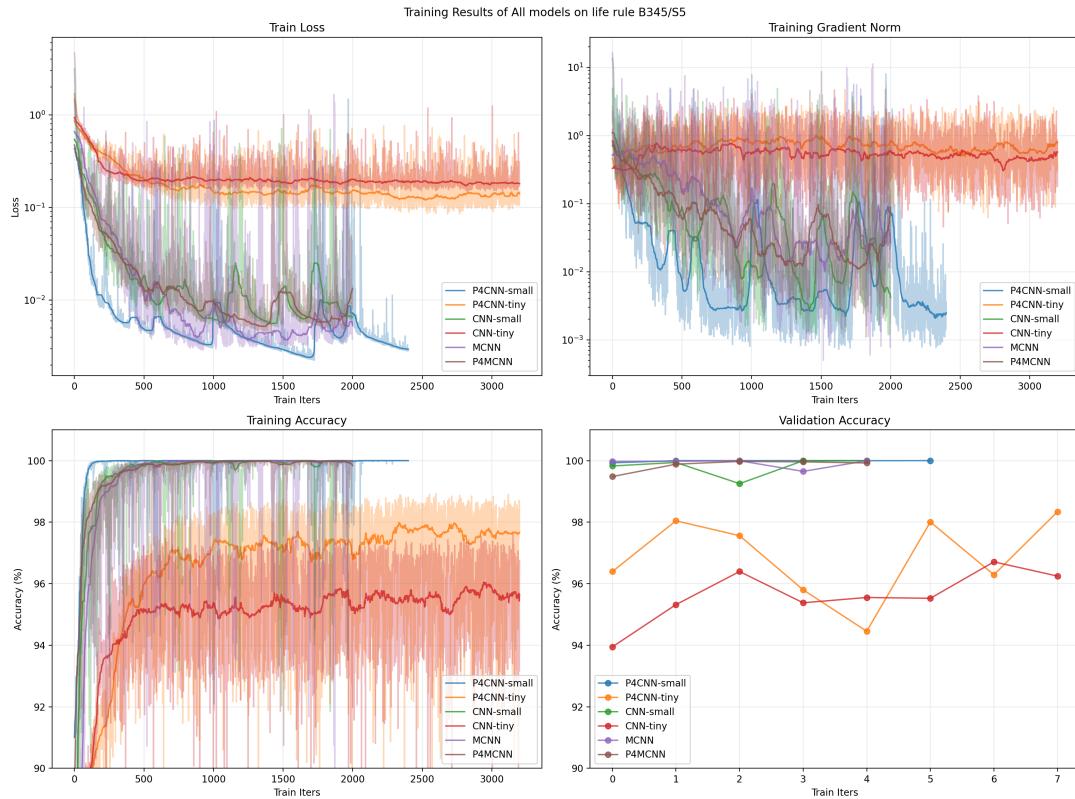


Figure 8: 各网络在 B345/S5 规则下生成的生命游戏数据上的训练和测试结果