

## 2025 年 11 月 24 日至 11 月 30 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

目前的实现尚未考虑改变等变约束, 实现的是其他所有模块的功能。其大致是算法结构如下

```
# read and process the command line arguments
# initialize dataset and dataloader with only one visible trajectory.
# initialize RuleSimulator
# initialize predictor model.

# while prediction loss and simulation loss is not converged
for round_id in range(1, 21):
    # train predictor on visible trajectories.
    # update rules in RuleSimulator from predictor.
    #randomly select one of the invisible trajectories to simulate.
    #evaluate predictor on one of the visible trajectories.
    # calculate simulation acc.

    if sim_acc > 0.99 and train_loss < 0.01 and evaluate_acc > 0.95:
        # break
    else:
        # randomly add one trajectory
# save predictor model.
# save rules.
```

## 2. 文献阅读

### 2.1. Stable Neural SDE in Analyzing Irregular Time Series Data [1] [ICLR 2024](#) | [YongKyung Oh et al.](#)

本论文讨论了提出了一些保证解的唯一性、随机稳定性和数值稳定性的 Neural SDE 模式。

#### 2.1.1. Neural ODE 和 Neural SDE 简介

Neural ODE 将神经网络作为导数  $\frac{df}{dx}$  的预测器。令  $h(x; \theta_h)$  将数据点投影至隐空间（对应地还得有一个 decoder），得到隐空间中的表示  $z$ ，隐空间中的 ODE  $dz = f(t, z(t); \theta_f)dt$  的解就可以写为

$$z(t) = z(0) + \int_0^t f(\tau, z(\tau); \theta_f) d\tau, \quad z(0) = h(x; \theta_h) \quad (1)$$

其中  $f$  和  $h$  都是神经网络。Neural CDE (neural controlled differential equation) 添加了一个控制信号  $X$ ，它常常是数据点的插值曲线。Neural CDE 将 Neural ODE 中的积分改为 Riemann-Stieltjes 积分：

$$z(t) = z(0) + \int_0^t f(\tau, z(\tau); \theta_f) dX(\tau), \quad z(0) = h(x; \theta_h) \quad (2)$$

Neural SDE 的思想也很类似，它将偏移项  $f$  和扩散项  $g$  都由神经网络代替，其求解形式为

$$z(t) = z(0) + \int_0^t f(\tau, z(\tau); \theta_f) d\tau + \int_0^t g(\tau, z(\tau); \theta_s) dW(\tau), \quad z(0) = h(x; \theta_h) \quad (3)$$

其中  $W(t)$  是和  $z$  维数相同的 Brown 运动。我们也可以仿照 Neural CDE 的形式，为 Neural SDE 引入一条控制轨道。令

$$\bar{z}(t) = \zeta(t, z(t), X(t); \theta_\zeta) \quad (4)$$

然后将  $z(t)$  替换为  $\bar{z}(t)$ 。

有了上述的积分形式，**Neural ODE** 和 **SDE** 的求解可以交由数值算法完成。神经网络参与进来的点是估计偏移项和扩散项（若有），训练好的神经网络可以参与数值计算过程，当做原本的偏移项函数和扩散项函数来用。引入随机项使得 Neural SDE 面临三大难题，分别是解的存在**唯一性**、**随机稳定性**和**数值稳定性**。如果某形式的 SDE 缺乏唯一强解，同一初值可能经过计算进入完全不同的轨道，使得训练变得困难。引入的随机项会使得得到的轨道不平稳，可能导致训练过程中的梯度爆炸。另外，随机项的引入会使得数值计算中的稳定性更加重要，需要设置更加数值稳定的 SDE 形式。

#### 2.1.2. 良好性质的 Neural SDE 结构

作者提出了三个 Neural SDE 结构，分别是 **Langevin 型 SDE**、**线性噪声 SDE** 和 **几何 SDE**。其形式分别如下

$$\begin{aligned} dz(t) &= \gamma(z(t); \theta_\gamma) dt + \sigma(t; \theta_\sigma) dW(t) && \text{Langevin 型 SDE (LSDE)} \\ dz(t) &= \gamma(t, z(t); \theta_\gamma) dt + \sigma(t; \theta_\sigma) z(t) dW(t) && \text{线性噪声 SDE (LNSDE)} \\ \frac{dz(t)}{z(t)} &= \gamma(t, z(t); \theta_\gamma) dt + \sigma(t; \theta_\sigma) dW(t) && \text{几何 SDE (GSDE)} \end{aligned} \quad (5)$$

这三种 Neural SDE 结构理论上可以解决先前提到的三个问题，并在实验中表现良好。

### 3. 学习进度

#### 3.1. 随机过程

本周继续系统学习 Markov 链，了解了常返性的一些性质。特别地，在有限状态的时齐 Markov 链中，相互联通的节点常返性相同。

#### 3.2. 随机微分方程

本周开始学习 SDE 解的存在性和唯一性。

#### 3.3. 量子力学

了解了量子力学的一些基本概念，例如波函数、薛定谔方程、无限深势阱、算符。

### 4. 问题记录

#### 4.1. SDE 数值解的问题

我尝试使用 Python 求解下面的 SDE:

### 5. 下周计划

#### 论文阅读

##### 1. 生成模型

- 薛定谔桥
- DDIM

#### 项目进度

##### 1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学

- 调试完成代码，并考虑等变约束

##### 2. 耦合约瑟夫森结

- 将 MATLAB 模拟代码全部迁移至 Python
- 考虑简单的 Neural SDE 方法解带参 OU 过程的参数

#### 理论学习

##### 1. 随机过程课程

- 复习 Poisson 过程和 Markov 过程

##### 2. 随机微分方程

- 第五章

## 参考文献

- [1] Y. Oh, D.-Y. Lim, and S. Kim, “Stable Neural Stochastic Differential Equations in Analyzing Irregular Time Series Data.” [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2402.14989>

