1.

Consider a forward SDE

$$dx_t = f(x_t, t)\, dt + g(x_t, t) dW_t,$$

show that the corresponding probability flow ODE is written as

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

證明過程

將此問題分三步驟來進行：

1. 寫下 SDE 對應的 Fokker-Planck 方程式，它描述了機率密度 $p(x,t)$ 如何隨時間演化。
2. 寫下要找的 ODE 對應的連續性方程式 (Continuity Equation)，它也描述了 $p(x,t)$ 如何隨時間演化。
3. 令這兩個 $p(x,t)$ 的演化方程式相等，然後解出 ODE 的速度場 $v(x,t)$。

步驟 1：SDE 的 Fokker-Planck 方程式

給定的**隨機微分方程式 (SDE)** 如下：

$$dx_t = f(x_t, t)dt + g(x_t, t)dW_t$$

此 SDE 描述了單一粒子（或狀態 x_t）的隨機軌跡。它所對應的機率密度 $p(x,t)$ 的時間演化，是由 **Fokker-Planck 方程式**（也稱為前向 Kolmogorov 方程式）所描述：

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x,t)p(x,t)\right] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$$

- 此方程式說明機率密度的變化率（左側）來自兩個部分：
  i. **漂移 (Drift) 項**：$-\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x,t)p(x,t)\right]$ 描述的是由 $f(x,t)$ 引起的機率 "流動"。
  ii. **擴散 (Diffusion) 項**：$\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$ 描述的是由 $g(x,t)$（隨機雜訊）引起的機率 "擴散"。

步驟 2：ODE 的連續性方程式

假設存在一個**確定性的機率流 (Probability Flow) ODE**：

$$dx_t = v(x_t, t)dt$$

其中 $v(x, t)$ 是要尋找的確定性速度場。

此 ODE 描述的是一個沒有隨機性的流動。其機率密度 $p(x, t)$ 的演化遵循一個更簡單的**連續性方程式**（這其實是 Fokker-Planck 方程式在擴散項 $g = 0$ 時的特例）：

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[v(x,t)p(x,t)\right]$$

- 此方程式說明機率密度的變化，完全來自於由速度場 $v(x, t)$ 所驅動的機率流動。

步驟 3：聯立求解 $v(x, t)$

最終目標是找到一個 $v(x, t)$，使得 SDE 和 ODE 描述的機率密度演化 $p(x, t)$ 完全相同。因此，必須讓兩個方程式中的 $\frac{\partial p(x,t)}{\partial t}$ 相等：

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left[v(x,t)p(x,t)\right] = -\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x,t)p(x,t)\right] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$$

這一步在物理上等同於讓我們SDE的 **機率通量 (Probability Flux)** J_{SDE} 與 ODE 的機率通量 J_{ODE} 相等。

- $J_{ODE}(x,t) = v(x,t)p(x,t)$
- $J_{SDE}(x,t) = f(x,t)p(x,t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$

（註：將 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 寫成 $\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}\dots\right]$，並整合 x 之後，即可得到 J_{SDE}。假設在邊界（如無窮遠處）通量為 0。）

設定 $J_{ODE} = J_{SDE}$：

$$v(x,t)p(x,t) = f(x,t)p(x,t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$$

為了分離出 $v(x, t)$，將等式兩邊同除以 $p(x, t)$（假設 $p(x, t) > 0$）：

$$v(x,t) = f(x,t) - \frac{1}{2p(x,t)}\frac{\partial}{\partial x}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right]$$

接下來，對 $\frac{\partial}{\partial x}[\dots]$ 這一項使用 Product Rule：

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[g^2(x,t)p(x,t)\right] = \left[\frac{\partial g^2(x,t)}{\partial x}\right]p(x,t) + g^2(x,t)\left[\frac{\partial p(x,t)}{\partial x}\right]$$

將這個展開式代回 $v(x, t)$ 的方程式中：

$$v(x,t) = f(x,t) - \frac{1}{2p(x,t)}\left(\left[\frac{\partial g^2(x,t)}{\partial x}\right]p(x,t) + g^2(x,t)\left[\frac{\partial p(x,t)}{\partial x}\right]\right)$$

分配 $\frac{1}{2p(x,t)}$：

$$v(x,t) = f(x,t) - \frac{1}{2}\frac{\partial g^2(x,t)}{\partial x} - \frac{g^2(x,t)}{2}\frac{1}{p(x,t)}\frac{\partial p(x,t)}{\partial x}$$

最後，使用一個關鍵的恆等式（**對數的導數**）：

$$\frac{\partial}{\partial x}\log p(x,t) = \frac{1}{p(x,t)}\frac{\partial p(x,t)}{\partial x}$$

> $\frac{\partial}{\partial x}\log p(x,t)$ 這個量非常重要，它被稱為 **分數函數 (Score Function)**。

將這個分數函數代入 $v(x,t)$ 的表達式：

$$v(x,t) = f(x,t) - \frac{1}{2}\frac{\partial g^2(x,t)}{\partial x} - \frac{g^2(x,t)}{2}\frac{\partial}{\partial x}\log p(x,t)$$

這個 $v(x,t)$ 就是 ODE $dx_t = v(x_t,t)dt$ 中的速度場。因此，得到了所求的機率流 ODE：

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

總結

我們證明了，對於一個由 SDE 描述的隨機過程，可以找到一個相應的確定性 ODE，它能完美地描述該隨機過程的 "平均" 機率流動。這個 ODE 的漂移項（或速度場）由 SDE 的漂移項 f、擴散項 g 的導數，以及機率密度的分數函數（$\nabla_x \log p_t(x)$）共同決定。

2. AI 的未來與機器學習的基石

1. AI 的未來能力

我認為 AI 在 20 年後有潛力達成的最重要能力是「**創造型科學智慧 (Creative Scientific Intelligence)**」。現今的 AI（如大型語言模型或 AlphaFold）雖然強大，但本質上仍是基於海量資料的「模式歸納者」，它們能重組、模仿或預測，卻無法真正「創造全新的知識或理論」。

20 年後的 AI 將不只是工具，而是「智識夥伴」。它能主動在跨領域資料中發現異常模式，**自主提出全新的科學假說與研究問題**（例如推導出新的材料結構模型或發現未知的物理交互作用）。更進一步，它

能**整合創意與科學推理**，透過與自動化實驗室（robotic lab）的結合，自行規劃並執行實驗，評估假說、修正理論，形成一個完整的「探索-假設-驗證」的科研循環。這項能力之所以重要，因為它將徹底改變知識創生的方式，科學進展將不再受限於人類研究者的時間與認知頻寬，使我們能加速應對能源、醫療與基礎物理學的重大挑戰。

2. 涉及的機器學習類型

要實現上述的「創造型科學智慧」，絕非單一機器學習方法所能達成，而是一個複雜的**混合式學習架構**。首先，**非監督式或自監督學習**是基石，AI 需利用此方法從龐大、無標籤的跨領域資料（如論文、實驗數據）中，自行發掘隱含的結構與規律，建立起一個「世界如何運作」的內部模型（World Model），這也是它「生成假說」的基礎。

接著，**強化學習 (RL)** 扮演關鍵的「探索者」角色。AI 的「資料來源」將是它所互動的「虛擬或真實實驗環境」；它會學習如何設計實驗或調整參數來驗證假說，而「目標訊號」（即回饋）則是根據「理論預測的準確度」或「發現新知識的價值」來設定。最後，**監督式學習**則作為輔助，用於在初期階段導入人類既有的科學理論與創造模式，作為 AI 學習推理的啟發樣本。

3. 第一步的「模型化」

要邁向這個宏大目標，我的第一步研究將從一個「**簡化模型問題 (model problem)**」開始：讓 AI 在一個模擬的物理世界中，自主發現未知的物理規律。在這個任務中，AI 不會被告知任何現有定律（如牛頓定律），但它能觀察環境變數並設計實驗。這個簡化問題在概念上完美地代表了最終能力，因它完整複刻了「探索未知」、「生成假說」（提出數學模型）與「驗證修正」（執行模擬實驗）的科學發現循環。

它的可測試性非常明確：我們能評估 AI 提出的理論（例如一個數學公式）是否能準確「預測未曾見過的實驗結果」，以及該理論是否具有「可解釋性」。要解決這個問題，我們需要整合多種工具：使用**自監督學習**讓 AI 從觀測中建立世界模型；利用**強化學習**來優化 AI 的「實驗設計」策略；並結合**符號推理或生成模型**，幫助 AI 將觀察到的模式轉化為精確的數學定律。

3. Unanswered Questions

關於 Score Matching 損失函數的轉換

在 1D OU 過程的 score matching 部分，損失函數 $\mathrm{Loss}(\theta)$ 最初的目標是學習**邊際機率 (marginal distribution) $p(x_t, t)$ 的分數 (score) $\nabla \log p(x_t, t)$**。但在隨後的推導中，這個目標被轉換為學習**條件機率 (conditional distribution) $p(x_t|x_0)$ 的分數 $\nabla \log p(x_t|x_0)$**。

問題： 這兩個分數是相同的嗎？如果不同，為什麼我們可以用 $p(x_t|x_0)$ 的分數來代替 $p(x_t, t)$ 的分數進行模型訓練？講義中提到的 $+C_0$ 項 是否就是它們之間的差異？