

$$1. dx_t = f(x_t, t)dt + g(x_t, t)dW_t$$

with corresponding Fokker Planck eq.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(fp) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(g^2 p) \quad \text{--- (1)}$$

We want to find a ODE: $dx_t = v(x_t, t)dt \Leftrightarrow \frac{dx_t}{dt} = v(x_t, t)$

and $p(x, t)$ satisfy $\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[vp]$ --- (2)

$$\text{①} = \text{②}$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial x}[vp] = -\frac{\partial}{\partial x}[fp] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}[g^2 p]$$

$$\text{and } \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[fp - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(g^2 p)\right]$$

$$\text{so } J_{SDE} = fp - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(g^2 p), \quad \bar{J}_{SDE} = vp$$

$$\hat{J}_{SDE} = \bar{J}_{SDE} \Rightarrow vp = fp - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(g^2 p) \quad \text{--- (3)}$$

$$\text{展开 } \frac{\partial}{\partial x}(g^2 p)$$

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

$$\text{代入 (3)} = vp = fp - \frac{1}{2}\frac{\partial g^2}{\partial x}p - \frac{g^2}{2}\left(\frac{1}{p}\frac{\partial p}{\partial x}\right) \quad \text{--- (4)}$$

$$\text{代入 } \frac{\partial \ln p}{\partial x} = \frac{1}{p}\frac{\partial p}{\partial x} \quad \text{--- (5)}$$

$$v = f - \frac{1}{2}\frac{\partial g^2}{\partial x} - \frac{g^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\ln p$$

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

#

AI 與物質世界共學：邁向自組裝智能材料

一，AI 的未來能力

在未來二十年，人工智慧將從「資料分析工具」進化為能與物質世界共同學習的智能系統。它不再只是模擬與預測，而是直接參與材料生成過程的決策。這樣的 AI 能透過高解析度感測器觀測原子層級的結構演化，預測能量梯度，並即時調整溫度、壓力或化學勢等控制變數，引導材料自組裝至能量最穩定的構型。

這種「AI - 物質共學」模式將改變傳統製程邏輯。製造不再是被動設定的流程，而是一場 AI 與材料共同演化的學習實驗。結果是誕生出具有自我修復、結構可重構、能帶可調整等特性的「智能材料」。例如自我愈合金屬、拓撲量子導體或高穩定性能源陶瓷。這些成果將標誌著材料科學進入一個由 AI 主導發現與實驗設計的新時代。

二，涉及的機器學習模型

此目標的實現需整合多層次的學習方法：

強化學習 (Reinforcement Learning, RL)

AI 與材料系統互動，以最小化自由能或最大化穩定性作為獎勵函數，自主調整控制參數。

物理啟發神經網路 (Physics-Informed Neural Networks, PINN)

在網路結構中嵌入熱力學與動力學方程，使 AI 學習結果自動滿足能量守恆與物理限制。

自我監督學習 (Self-Supervised Learning, SSL)

從光譜、影像或原子軌跡等感測資料中自動提取結構變化特徵，減少標註需求。

主動學習 (Active Learning)

AI 根據當前不確定性決定下一步實驗條件，形成自我驅動的實驗學習閉環。

這樣的系統不僅是演算法集合，而是一個能同時學習、控制、驗證的物理智能體。

三、第一步模型化構想（含數學說明）

1. 材料動力學的數學描述

材料的微觀演化同時受確定性力場與熱擾動影響，可用隨機微分方程（SDE）描述：

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

此式可視為隨機微分方程（SDE）對應的確率流 ODE，描述材料結構在能量勢場中的演化

成功標準：

模型能在不同初始條件下穩定生成規則結構；

可泛化至未訓練組成；

具可解釋性（AI 能指出支配自組裝的主要能量貢獻）。

四、科學意涵

此研究構想若能實現，將開啟「自主材料科學（Autonomous Materials Science）」的新時代。AI 不再僅模擬自然，而能與自然共同探索。

這種共學體系使材料的形成過程成為持續學習的動態系統，並最終建立「物理—資料—智能」三者的閉環互動。從長遠來看，這將使製造邏輯從「人設計、物反應」轉向「人與物共同學習」，讓人工智慧成為自然法則的延伸，而非替代者。

3. Unanswered Questions

如何應用 SDE/PF-ODE 模型來描述材料微結構演化？

本課程在第 8 週開始討論隨機微分方程（SDE）與其對應的確率流動 ODE（PF-ODE）的概念。在材料科學（例如晶粒成長、界面擴散、析出物演化）中，如何將微結構演化過程映射為 SDE 模型？然後如何轉換為 PF-ODE 用於 AI 控制或預測？這樣的模型中，「噪聲／隨機擾動」代表什麼物理過程？漂移項 $f(x_t)$ 又代表什麼材料驅動力？