生成式AI与随机微分方程 (Lec 3)

Training Flow and Diffusion Models

笔记整理：Gemini

MIT IAP 2025 | Jan 23, 2025

2025 年 7 月 29 日

目录

1 从理论目标到训练算法

在 Lecture 2 中，我们通过复杂的推导，为流模型和扩散模型找到了理论上的训练目标：

- **流模型 (ODE)** 的目标是学习 **边际向量场** $u_t^{\text{target}}(x)$。
- **扩散模型 (SDE)** 的目标是学习 **边际分数函数** $s_t^{\text{target}}(x) = \nabla_x \log p_t(x)$。

Marginal Prob. Path, Vector Field, and Score

	Notation	Key property	Formula
Marginal Probability Path	p_t	Interpolates p_{init} and p_{data}	$\int p_t(x\|z)p_{\text{data}}(z)\mathrm{d}z$
Marginal Vector Field	$u_t^{\text{target}}(x)$	ODE follows marginal path	$\int u_t^{\text{target}}(x\|z)\frac{p_t(x\|z)p_{\text{data}}(z)}{p_t(x)}\mathrm{d}z$
Marginal Score Function	$\nabla \log p_t(x)$	Can be used to convert ODE target to SDE	$\int \nabla \log p_t(x\|z)\frac{p_t(x\|z)p_{\text{data}}(z)}{p_t(x)}\mathrm{d}z$

图 1: Lec 2 推导出的边际向量场和边际分数函数公式回顾 (源自幻灯片 Lec3, Page 4)。

然而，这些目标都包含对整个数据集积分的项（例如 $p_t(x)$），这在计算上是不可行的。本节课的核心任务就是将这些理论目标转化为**可以实际运行的、高效的训练算法**。

图 2: 今日议程：将理论目标转化为训练算法 (源自幻灯片 Lec3, Page 5)。

2 流匹配 (Flow Matching)

流匹配的目标是训练神经网络 $u_t^\theta(x)$ 来逼近理想的边际向量场 $u_t^{\text{target}}(x)$。

2.1 理论上的损失函数

一个理论上完美的损失函数是最小化神经网络和边际向量场之间的均方误差：

$$\mathcal{L}_{\text{fm}}(\theta) = \mathbb{E}_{t\sim\text{Unif},x\sim p_t}\left[\|u_t^\theta(x) - u_t^{\text{target}}(x)\|^2\right]$$

这个损失函数有两个计算难题：

1. 无法从 $p_t(x)$ 中直接采样。
2. 无法直接计算 $u_t^{\text{target}}(x)$。

2.2 流匹配的魔法：简化损失函数

通过精妙的数学变换（在课程中被称为“marginalization trick”），可以证明上述理论损失函数等价于一个更简单的、可计算的损失函数：

$$\mathcal{L}_{\text{fm}}(\theta) = \mathbb{E}_{t\sim\text{Unif},z\sim p_{\text{data}},x\sim p_t(\cdot|z)}\left[\|u_t^\theta(x) - u_t^{\text{target}}(x|z)\|^2\right]$$

这个新的损失函数是**完全可计算的**！因为它只依赖于我们可以轻易采样和计算的条件项。

2.3 通用流匹配训练算法

基于上述简化的损失函数，我们可以得到一个通用的流匹配训练流程。

Algorithm 1 通用流匹配训练流程

```
对于 每个训练迭代:
    从数据集中采样一个真实样本 z ∼ p_data。
    随机采样一个时间点 t ∼ Unif_[0,1]。
    从条件概率路径 p_t(·|z) 中采样一个点 x。
    计算损失 L(θ) = ‖u_t^θ(x) − u_t^target(x|z)‖²。
    使用梯度下降更新模型参数 θ。
```

2.4 实例：最优传输路径 (CondOT) 的流匹配

为了让算法更具体，我们选择一个特定的条件概率路径。一个简单又高效的选择是**条件最优传输路径 (Conditional Optimal Transport Path)**，它是在噪声 ϵ 和真实数据 z 之间进行线性插值。

- **条件路径采样** $x \sim p_t(\cdot|z)$:

$$x_t = t \cdot z + (1-t) \cdot \epsilon, \quad \text{其中 } \epsilon \sim \mathcal{N}(0, I_d)$$

- **条件向量场** $u_t(x|z)$:

$$u_t^{\text{target}}(x|z) = z - \epsilon$$

将这两个简单的公式代入通用算法，我们就得到了一个可以直接用代码实现的、非常高效的训练算法。

Figure credit: Yaron Lipman

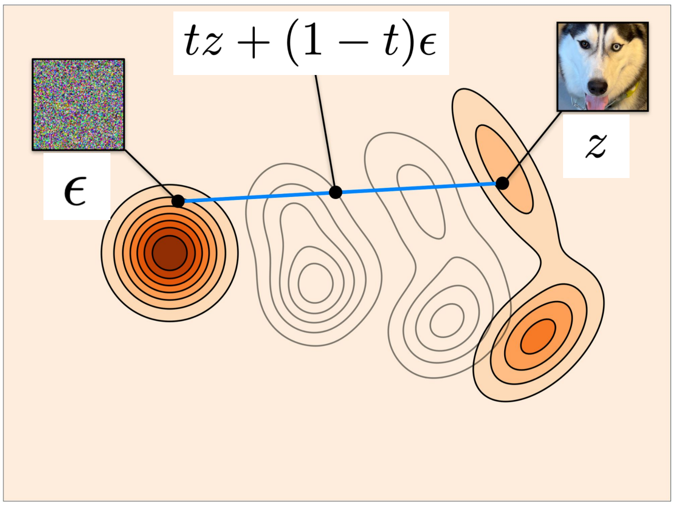

图 3: CondOT 路径在噪声 ϵ 和数据 z 之间进行线性插值 (源自幻灯片 Lec3, Page 8)。

Algorithm 2 基于CondOT路径的流匹配算法

对于 每个训练迭代:
  从数据集中采样一个真实样本 $z \sim p_{\text{data}}$。
  随机采样一个时间点 $t \sim \text{Unif}_{[0,1]}$。
  采样一个高斯噪声 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, I_d)$。
  构建插值点 $x_t = t \cdot z + (1-t) \cdot \epsilon$。
  计算损失 $\mathcal{L}(\theta) = \|u_t^\theta(x_t) - (z - \epsilon)\|^2$。
  使用梯度下降更新模型参数 θ。

这个简单而强大的算法是许多现代生成模型（如 Stable Diffusion 3）的核心。

3 分数匹配 (Score Matching)

分数匹配是训练扩散模型 (SDE) 的方法，其目标是训练分数网络 $s_t^\theta(x)$ 来逼近理想的边际分数函数 $s_t^{\text{target}}(x) = \nabla_x \log p_t(x)$。

3.1 从理论到实践：去噪分数匹配

与流匹配类似，理论上的分数匹配损失也难以计算。通过类似的数学技巧，我们可以得到一个等价且可计算的损失形式，称为**去噪分数匹配 (Denoising Score Matching, DSM)**。

对于高斯条件路径 $p_t(x|z) = \mathcal{N}(x; \alpha_t z, \beta_t^2 I_d)$，其损失函数为：

$$\mathcal{L}_{\text{dsm}}(\theta) = \mathbb{E}_{t,z,\epsilon}\left[\left\| s_t^\theta(\alpha_t z + \beta_t \epsilon) + \frac{\epsilon}{\beta_t} \right\|^2\right]$$

这个损失的直观意义是：训练一个网络 s_t^θ，让它在输入一个带噪声的样本 $x_t = \alpha_t z + \beta_t \epsilon$ 后，能够预测出所添加的噪声（经过缩放的 ϵ）。

3.2 分数匹配训练算法

Algorithm 3 基于高斯路径的分数匹配算法

1: **需要:** 调度器 α_t, β_t
2: **对于** 每个训练迭代:
3: 从数据集中采样一个真实样本 $z \sim p_{\text{data}}$。
4: 随机采样一个时间点 $t \sim \text{Unif}_{[0,1]}$。
5: 采样一个高斯噪声 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, I_d)$。
6: 构建加噪点 $x_t = \alpha_t z + \beta_t \epsilon$。
7: 计算损失 $\mathcal{L}(\theta) = \|s_t^\theta(x_t) + \epsilon/\beta_t\|^2$。
8: 使用梯度下降更新模型参数 θ。

3.3 流匹配与分数匹配的关系

对于高斯概率路径（在扩散模型中也称为DDM），条件向量场 $u_t(x|z)$ 和条件分数函数 $\nabla_x \log p_t(x|z)$ 都是 x 和 z 的线性组合。这意味着它们之间可以**相互转换**。

在DDM中，我们只需要训练一个网络（无论是向量场网络还是分数网络），就可以免费得到另一个。例如，在训练完分数网络 $s_t^\theta(x)$ 后，可以通过一个简单的代数转换公式得到对应的向量场 $u_t^\theta(x)$。这为采样提供了极大的灵活性。

4　总结

通过本节课的学习，我们成功地将Lecture 2中抽象的理论目标，转化为了两个具体、可执行的训练算法：**流匹配**和**分数匹配**。我们现在拥有了从数据准备、模型训练到最终采样的完整端到端流程，真正构建起了一个生成模型。