边际向量场训练目标推导详解

笔记整理：Gemini

2025 年 7 月 26 日

目录

1 引言：推导的目标

在流模型 (Flow-based Models) 的训练中，我们希望我们的神经网络 $u_t^\theta(x)$ 能够学习到一个理想的向量场。然而，这个理想的向量场是什么，需要通过严谨的数学推导来确定。本笔记的目标就是详细阐述如何从基本原理出发，一步步推导出这个最终的训练目标——**边际向量场 (marginal vector field)**。

2 推导步骤

2.1 第零步：明确“已知”与“未知”

我们的推导策略是利用已知、简单的对象来构建未知、复杂的对象。

- **已知 (我们可以轻易定义的):**
  1. **条件概率路径** $p_t(x|z)$: 从一个噪声点演化到**某一个特定数据点** z 的路径。例如，高斯路径 $p_t(x|z) = \mathcal{N}(x; \alpha_t z, \beta_t^2 I)$。
  2. **条件向量场** $u_t(x|z)$: 驱动上述简单条件路径的向量场，通常有简单的解析形式。
- **未知 (我们想要得到的):**
  1. **边际概率路径** $p_t(x)$: 整个噪声分布 p_{init} 演化到整个数据分布 p_{data} 的路径。
  2. **边际向量场** $u_t(x)$: 驱动上述边际路径的向量场。它不依赖于任何特定的终点 z，因此可以被我们的神经网络学习。

我们的最终目标就是求解出这个未知的**边际向量场** $u_t(x)$。

2.2 第一步：建立“边际”与“条件”的联系

边际概率路径是所有条件概率路径在整个真实数据分布 $p_{\text{data}}(z)$ 上的加权平均。这在数学上通过一个积分来表示，它是我们所有推导的基石：

$$p_t(x) = \int p_t(x|z)\, p_{\text{data}}(z)\, dz \tag{1}$$

2.3 第二步：引入物理定律—— 连续性方程

连续性方程是连接概率密度演化与其驱动向量场之间的桥梁，它本质上是“概率质量守恒”的体现。

- 对于由未知边际向量场 $u_t(x)$ 驱动的**边际路径**，我们有：

$$\frac{\partial p_t(x)}{\partial t} = -\nabla \cdot \big(p_t(x) u_t(x)\big) \tag{2}$$

- 对于由已知条件向量场 $u_t(x|z)$ 驱动的**条件路径**，我们有：

$$\frac{\partial p_t(x|z)}{\partial t} = -\nabla \cdot \big(p_t(x|z) u_t(x|z)\big) \tag{3}$$

2.4 第三步：核心推导—— 连接所有部分

现在，我们将以上所有部分联系起来，推导出我们想要的 $u_t(x)$。

1. 从基石公式 (1) 开始，对等式两边同时求关于时间 t 的偏导数。由于 $p_{\text{data}}(z)$ 与时间无关，导数可以直接移入积分内部：

$$\frac{\partial p_t(x)}{\partial t} = \int \frac{\partial p_t(x|z)}{\partial t} p_{\text{data}}(z)\, dz$$

2. 将两个连续性方程 (2) 和 (3) 分别代入上式的左边和右边：

$$-\nabla \cdot \big(p_t(x)u_t(x)\big) = \int \big[-\nabla \cdot \big(p_t(x|z)u_t(x|z)\big)\big]\, p_{\text{data}}(z)\, dz$$

3. 我们可以将右边的散度算子 $\nabla\cdot$ 和负号提到积分外面（因为积分是关于 z 的，而散度是关于 x 的）：

$$-\nabla \cdot \big(p_t(x)u_t(x)\big) = -\nabla \cdot \left[\int p_t(x|z)u_t(x|z)\, p_{\text{data}}(z)\, dz\right]$$

4. 现在，等式两边都有一个 $-\nabla\cdot$ 作用于一个表达式。如果两个向量场的散度处处相等，我们可以（在一些温和的假设下）认为这两个向量场本身是相等的。因此，我们可以去掉外层的 $-\nabla\cdot$：

$$p_t(x)u_t(x) = \int p_t(x|z)u_t(x|z)\, p_{\text{data}}(z)\, dz$$

5. 我们的目标是求解未知的 $u_t(x)$，所以我们把它分离出来，将 $p_t(x)$ 除到右边：

$$u_t(x) = \int u_t(x|z)\frac{p_t(x|z)\, p_{\text{data}}(z)}{p_t(x)}\, dz$$

2.5 第四步：化简为最终形式—— 使用贝叶斯定理

我们观察上一步得到的公式中那个复杂的分数项：

$$\frac{p_t(x|z)\, p_{\text{data}}(z)}{p_t(x)}$$

这正是**贝叶斯定理**的形式！它等于后验概率 $p_t(z|x)$，其含义是：在时刻 t 观察到粒子在位置 x 的条件下，它的最终目标是 z 的概率。

所以，我们可以将公式重写为：

$$u_t(x) = \int u_t(x|z)\, p_t(z|x)\, dz$$

这个积分形式正是一个**期望 (Expectation)** 的定义！它表示对 $u_t(x|z)$ 在后验分布 $p_t(z|x)$ 下求期望。因此，我们得到了最终的、优雅的公式。

3 结论与意义

$$u_t^{\text{target}}(x) = \mathbb{E}_{z\sim p_t(z|x)}\left[u_t^{\text{target}}(x|z)\right]$$

这个推导的意义是革命性的：

- 它告诉我们，那个我们不知道如何直接计算的、复杂的**边际向量场** $u_t^{\text{target}}(x)$...
- ...可以被表示为我们**知道如何计算**的、简单的**条件向量场** $u_t^{\text{target}}(x|z)$ 的加权平均。

这给了我们一个具体、可操作的训练目标。在下一节课的**流匹配 (Flow Matching)** 中，我们就会学习如何利用这个公式来构建一个可以实际运行的训练损失函数，从而训练我们的神经网络。