22 Dec 生成扩散模型漫谈（十五）：构建ODE的一般步骤（中）

By 苏剑林 | 2022-12-22 | 28367位读者 引用

上周笔者写了《生成扩散模型漫谈（十四）：构建ODE的一般步骤（上）》（当时还没有“上”这个后缀），本以为已经窥见了构建ODE扩散模型的一般规律，结果不久后评论区大神 @gaohuazuo 就给出了一个构建格林函数更高效、更直观的方案，让笔者自愧不如。再联想起之前大神之前在《生成扩散模型漫谈（十二）：“硬刚”扩散ODE》同样也给出了一个关于扩散ODE的精彩描述（间接启发了上一篇博客的结果），大神的洞察力不得不让人叹服。

经过讨论和思考，笔者发现大神的思路本质上就是一阶偏微分方程的特征线法，通过构造特定的向量场保证初值条件，然后通过求解微分方程保证终值条件，同时保证了初值和终值条件，真的非常巧妙！最后，笔者将自己的收获总结成此文，作为上一篇的后续。

前情回顾

简单回顾一下上一篇文章的结果。假设随机变量$\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^d$连续地变换成$\boldsymbol{x}_T$，其变化规律服从ODE

$$\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} = \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t) \tag{1}$$

那么对应的t时刻的分布$p_t(\boldsymbol{x}_t)$服从“连续性方程”：

$$\frac{\partial}{\partial t} p_t(\boldsymbol{x}_t) = -\nabla_{\boldsymbol{x}_t} \cdot \Big(\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t) p_t(\boldsymbol{x}_t)\Big) \tag{2}$$

记$\boldsymbol{u}(t, \boldsymbol{x}_t) = (p_t(\boldsymbol{x}_t), \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t) p_t(\boldsymbol{x}_t)) \in \mathbb{R}^{d+1}$，那么连续性方程可以简写成

$$\left\{\begin{aligned} &\nabla_{(t,\, \boldsymbol{x}_t)} \cdot \boldsymbol{u}(t, \boldsymbol{x}_t) = 0 \\ &\boldsymbol{u}_1(0, \boldsymbol{x}_0) = p_0(\boldsymbol{x}_0), \int \boldsymbol{u}_1(t, \boldsymbol{x}_t) d\boldsymbol{x}_t = 1 \end{aligned}\right. \tag{3}$$

为了求解这个方程，可以用格林函数的思想，即先求解

$$\left\{\begin{array}{l}\nabla_{(t,\,\boldsymbol{x}_t)}\cdot\boldsymbol{G}(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)=0\\ \boldsymbol{G}_1(0,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)=\delta(\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_0),\int\boldsymbol{G}_1(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)d\boldsymbol{x}_t=1\end{array}\right.\tag{4}$$

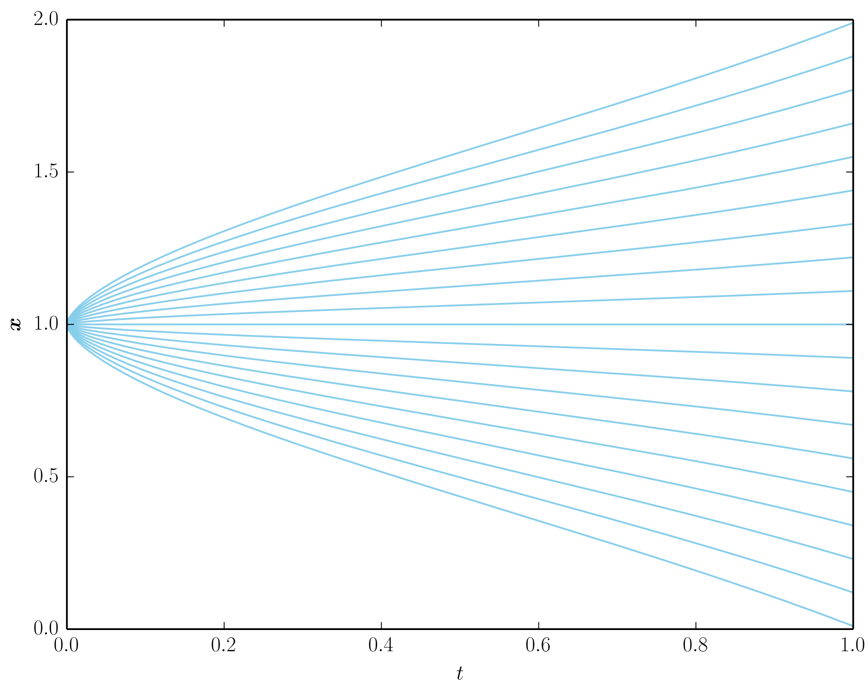
那么

$$\boldsymbol{u}(t,\boldsymbol{x}_t)=\int\boldsymbol{G}(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)p_0(\boldsymbol{x}_0)d\boldsymbol{x}_0=\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0\sim p_0(\boldsymbol{x}_0)}[\boldsymbol{G}(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)]\tag{5}$$

就是满足约束条件的解之一。

几何直观

所谓格林函数，其实思想很简单，它就是说我们先不要着急解决复杂数据生成，我们先假设要生成的数据只有一个点$\boldsymbol{x}_0$，先解决这单个数据点的生成问题。有的读者想这不是很简单吗？直接$\boldsymbol{x}_T\times 0+\boldsymbol{x}_0$就完事了？当然不是这么简单，我们需要的是连续的、渐变的生成，如下图所示，就是$t=T$上的任意一点$\boldsymbol{x}_T$，都沿着一条光滑轨迹运行到$t=0$的$\boldsymbol{x}_0$上：



格林函数示意图。图中T=1，在t=1处的每个点，都沿着特定的轨迹运行到t=0处的一个点，除了公共点外，轨迹之间无重叠，这些轨迹就是格林函数的场线

而我们的目的，只是构造一个生成模型出来，所以我们原则上并不在乎轨迹的形状如何，只要它们都穿过$\boldsymbol{x}_0$，那么，我们可以人为地选择我们喜欢的、经过$\boldsymbol{x}_0$的一个轨迹簇，记为

$$\boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{x}_T \tag{6}$$

再次强调，这代表着以$\boldsymbol{x}_0$为起点、以$\boldsymbol{x}_T$为终点的一个轨迹簇，轨迹自变量、因变量分别为$t, \boldsymbol{x}_t$，起点$\boldsymbol{x}_0$是固定不变的，终点$\boldsymbol{x}_T$是可以任意变化的，轨迹的形状是无所谓的，我们可以选择直线、抛物线等等。

现在我们对式(6)两边求导，由于$\boldsymbol{x}_T$是可以随意变化的，它相当于微分方程的积分常数，对它求导就等于$\boldsymbol{0}$，于是我们有

$$\begin{gathered}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial \boldsymbol{x}_t}\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} + \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial t} = \boldsymbol{0} \\ \Downarrow \\ \frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} = -\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial \boldsymbol{x}_t}\right)^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial t}\end{gathered} \tag{7}$$

对比式(1)，我们就得到

$$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = -\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial \boldsymbol{x}_t}\right)^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)}{\partial t} \tag{8}$$

这里将原本的记号$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t)$替换为了$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$，以标记轨线具有公共点$\boldsymbol{x}_0$。也就是说，这样构造出来的力场$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$所对应的ODE轨迹，必然是经过$\boldsymbol{x}_0$的，这就保证了格林函数的初值条件。

特征线法

既然初值条件有保证了，那么我们不妨要求更多一点：再保证一下终值条件。终值条件也就是希望$t = T$时$\boldsymbol{x}_T$的分布是跟$\boldsymbol{x}_0$无关的简单分布。上一篇文章的求解框架的主要缺点，就是无法直接保证终值分布的简单性，只能通过事后分析来研究。这篇文章的思路则是直接通过设计特定的$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$来保证初值条件，然后就有剩余空间来保证终值条件了。而且，同时保证了初、终值后，在满足连续性方程(2)的前提下，积分条件是自然满足的。

用数学的方式说，我们就是要在给定$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$和$p_T(\boldsymbol{x}_T)$的前提下，去求解方程(2)，这是一个一阶偏微分方程，可以通过“特征线法”求解，其理论介绍可以参考笔者之前写的《一阶偏微分方程的特征线法》。首先，我们将方程(2)等价地改写成

$$\frac{\partial}{\partial t}p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) + \nabla_{\boldsymbol{x}_t}p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\cdot\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = -p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\nabla_{\boldsymbol{x}_t}\cdot\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) \tag{9}$$

同前面类似，由于接下来是在给定起点$\boldsymbol{x}_0$进行求解，所以上式将$p_t(\boldsymbol{x}_t)$替换为$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$，以标记这是起点为$\boldsymbol{x}_0$的解。

特征线法的思路，是先在某条特定的轨迹上考虑偏微分方程的解，这可以将偏微分转化为常微分，降低求解难度。具体来说，我们假设$\boldsymbol{x}_t$是t的函数，在方程(1)的轨线上求解。此时由于成立方程(1)，将上式左端的$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$替换为$\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt}$后，左端正好是$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$的全微分，所以此时有

$$\frac{d}{dt}p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = -p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\nabla_{\boldsymbol{x}_t}\cdot\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\tag{10}$$

注意，此时所有的$\boldsymbol{x}_t$应当被替换为对应的t的函数，这理论上可以从轨迹方程(6)解出。替换后，上式的p、$\boldsymbol{f}$都是纯粹t的函数，所以上式只是关于p的一个线性常微分方程，可以解得

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = C\exp\left(\int_t^T\nabla_{\boldsymbol{x}_s}\cdot\boldsymbol{f}_s(\boldsymbol{x}_s|\boldsymbol{x}_0)ds\right)\tag{11}$$

代入终值条件$p_T(\boldsymbol{x}_T)$，得到$C=p_T(\boldsymbol{x}_T)$，即

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = p_T(\boldsymbol{x}_T)\exp\left(\int_t^T\nabla_{\boldsymbol{x}_s}\cdot\boldsymbol{f}_s(\boldsymbol{x}_s|\boldsymbol{x}_0)ds\right)\tag{12}$$

把轨迹方程(6)的$\boldsymbol{x}_T$代入，就得到一个只含有$t,\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0$的函数，便是最终要求解的格林函数$\boldsymbol{G}_1(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)$了，相应地有$\boldsymbol{G}_{>1}(t,0;\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)=p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$。

训练目标

有了格林函数，我们就可以得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}_1(t,\boldsymbol{x}_t) =&\, \int p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_0(\boldsymbol{x}_0)d\boldsymbol{x}_0 = p_t(\boldsymbol{x}_t)\\ \boldsymbol{u}_{>1}(t,\boldsymbol{x}_t) =&\, \int \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_0(\boldsymbol{x}_0)d\boldsymbol{x}_0\end{aligned}\tag{13}$$

于是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t) =&\, \frac{\boldsymbol{u}_{>1}(t,\boldsymbol{x}_t)}{\boldsymbol{u}_1(t,\boldsymbol{x}_t)} \\ =&\, \int \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\frac{p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_0(\boldsymbol{x}_0)}{p_t(\boldsymbol{x}_t)}d\boldsymbol{x}_0 \\ =&\, \int \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_t(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_t)d\boldsymbol{x}_0 \\ =&\, \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0\sim p_t(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_t)}\left[\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\right]\end{aligned} \tag{14}$$

根据《生成扩散模型漫谈（五）：一般框架之SDE篇》中构建得分匹配目标的方法，可以构建训练目标

$$\begin{aligned}&\,\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_t\sim p_t(\boldsymbol{x}_t)}\left[\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_t\sim p_t(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_t)}\left[\left\Vert\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_t, t) - \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\right\Vert^2\right]\right]d\boldsymbol{x}_t \\ =&\,\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{x}_t\sim p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)p_0(\boldsymbol{x}_0)}\left[\left\Vert\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_t, t) - \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)\right\Vert^2\right]\end{aligned} \tag{15}$$

它跟《Flow Matching for Generative Modeling》所给出的“Conditional Flow Matching”形式上是一致的，后面我们还会看到，该论文的结果都可以从本文的方法推出。训练完成后，就可以通过求解方程$\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt}=\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_t, t)$来生成样本了。从这个训练目标也可以看出，我们对$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$的要求是易于采样就行了。

一些例子

可能前面的抽象结果对大家来说还是不大好理解，接下来我们来给出一些具体例子，以便加深大家对这个框架的直观理解。至于特征线法本身，笔者在《一阶偏微分方程的特征线法》也说过，一开始笔者也觉得特征线法像是“变魔术”一样难以捉摸，按照步骤操作似乎不困难，但总把握不住关键之处，理解它需要一个反复斟酌的思考过程，无法进一步代劳了。

直线轨迹

作为最简单的例子，我们假设$\boldsymbol{x}_T$是沿着直线轨迹变为$\boldsymbol{x}_0$，简单起见我们还可以将T设为1，这不会损失一般性，那么$\boldsymbol{x}_t$的方程可以写为

$$\boldsymbol{x}_t = (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0)t + \boldsymbol{x}_0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_0}{t} + \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_1 \tag{16}$$

根据式(8)，有

$$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_0}{t} \tag{17}$$

此时$\nabla_{\boldsymbol{x}_t}\cdot\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{d}{t}$，根据式(12)就有

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{p_1(\boldsymbol{x}_1)}{t^d} \tag{18}$$

代入式(16)中的$\boldsymbol{x}_1$，得到

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{p_1\left(\frac{\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_0}{t} + \boldsymbol{x}_0\right)}{t^d} \tag{19}$$

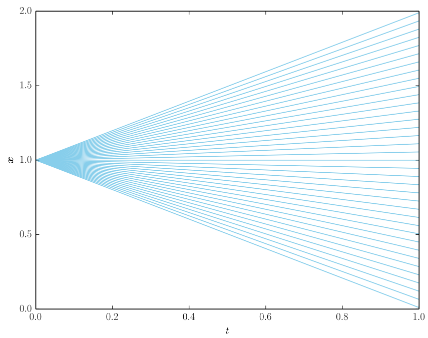
特别地，如果$p_1(\boldsymbol{x}_1)$是标准正态分布，那么上式实则意味着$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_t;(1-t)\boldsymbol{x}_0, t^2\boldsymbol{I})$，这正好是常见的高斯扩散模型之一。这个框架的新结果，是允许我们选择更一般的先验分布$p_1(\boldsymbol{x}_1)$，比如均匀分布。另外在介绍得分匹配(15)时也已经说了，对$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$我们只需要知道它的采样方式就行了，而上式告诉我们只需要先验分布易于采样就行，因为：

$$\boldsymbol{x}_t \sim p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{x}_t = (1-t)\boldsymbol{x}_0 + t\boldsymbol{\varepsilon},\ \boldsymbol{\varepsilon}\sim p_1(\boldsymbol{\varepsilon}) \tag{20}$$

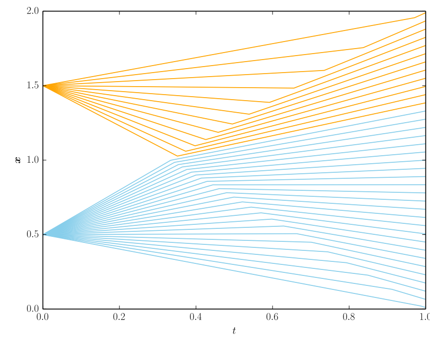
效果演示

注意，我们假设从$\boldsymbol{x}_0$到$\boldsymbol{x}_1$的轨迹是一条直线，这仅仅是对于单点生成的，也就是格林函数解。当通过格林函数叠加出一般分布对应的的力场$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t)$时，其生成轨迹就不再是直线了。

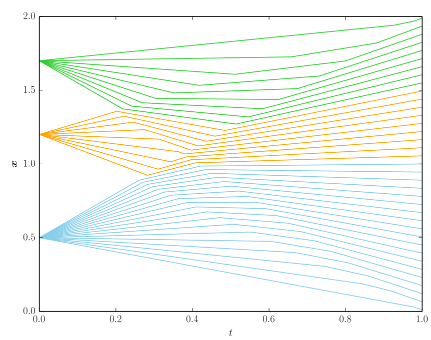
下图演示了先验分布为均匀分布时多点生成的轨线图：



单点生成



两点生成



三点生成

参考作图代码：

```
import numpy as np
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
matplotlib.rc('text', usetex=True)
matplotlib.rcParams['text.latex.preamble']=[r"\usepackage{ams

prior = lambda x: 0.5 if 2 >= x >= 0 else 0
p = lambda xt, x0, t: prior((xt - x0) / t + x0) / t
f = lambda xt, x0, t: (xt - x0) / t

def f_full(xt, t):
    x0s = [0.5, 0.5, 1.2, 1.7]  # 0.5出现两次，代表其频率是其余的
    fs = np.array([f(xt, x0, t) for x0 in x0s]).reshape(-1)
    ps = np.array([p(xt, x0, t) for x0 in x0s]).reshape(-1)
    return (fs * ps).sum() / (ps.sum() + 1e-8)
```

```
for x1 in np.arange(0.01, 1.99, 0.10999/2):
    ts = np.arange(1, 0, -0.001)
    xs = odeint(f_full, x1, ts).reshape(-1)[::-1]
    ts = ts[::-1]
    if abs(xs[0] - 0.5) < 0.1:
        _ = plt.plot(ts, xs, color='skyblue')
    elif abs(xs[0] - 1.2) < 0.1:
        _ = plt.plot(ts, xs, color='orange')
    else:
        _ = plt.plot(ts, xs, color='limegreen')

plt.xlabel('$t$')
plt.ylabel(r'$\boldsymbol{x}$')
plt.show()
```

一般推广

其实上面的结果还可以一般地推广到

$$\boldsymbol{x}_t = \boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{x}_0) + \sigma_t \boldsymbol{x}_1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{x}_0)}{\sigma_t} = \boldsymbol{x}_1 \tag{21}$$

这里的$\boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{x}_0)$是任意满足$\boldsymbol{\mu}_0(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{\mu}_1(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{0}$的$\mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$函数，$\sigma_t$是任意满足$\sigma_0 = 0, \sigma_1 = 1$的单调递增函数。根据式(8)，有

$$\boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \dot{\boldsymbol{\mu}}_t(\boldsymbol{x}_0) + \frac{\dot{\sigma}_t}{\sigma_t}(\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{x}_0)) \tag{22}$$

这也等价于《Flow Matching for Generative Modeling》中的式(15)，此时$\nabla_{\boldsymbol{x}_t} \cdot \boldsymbol{f}_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{d\dot{\sigma}_t}{\sigma_t}$，根据式(12)就有

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{p_1(\boldsymbol{x}_1)}{\sigma_t^d} \tag{23}$$

代入$\boldsymbol{x}_1$，最终结果是

$$p_t(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \frac{p_1\left(\frac{\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{x}_0)}{\sigma_t}\right)}{\sigma_t^d} \tag{24}$$

这是关于线性ODE扩散的一般结果，包含高斯扩散，也允许使用非高斯的先验分布。

再复杂些？

前面的例子，都是通过$\boldsymbol{x}_0$（的某个变换）与$\boldsymbol{x}_1$的简单线性插值（插值权重纯粹是t的函数）来构建$\boldsymbol{x}_t$的变化轨迹。那么一个很自然的问题就是：可不可以考虑更复杂的轨迹呢？理论上可以，但是更高的复杂度意味着隐含了更多的假设，而我们通常很难检验目标数据是否支持这些假设，因此通常都不考虑更复杂的轨迹了。此外，对于更复杂的轨迹，解析求解的难度通常也更高，不管是理论还是实验，都难以操作下去。

更重要的一点的，我们目前所假设的轨迹，仅仅是单点生成的轨迹而已，前面已经演示了，即便假设为直线，多点生成依然会导致复杂的曲线。所以，如果单点生成的轨迹都假设得不必要的复杂，那么可以想像多点生成的轨迹复杂度将会奇高，模型可能会极度不稳定。

文章小结

接着上一篇文章的内容，本文再次讨论了ODE式扩散模型的构建思路。这一次我们从几何直观出发，通过构造特定的向量场保证结果满足初值分布条件，然后通过求解微分方程保证终值分布条件，得到一个同时满足初值和终值条件的格林函数。特别地，该方法允许我们使用任意简单分布作为先验分布，摆脱以往对高斯分布的依赖来构建扩散模型。

如果您需要引用本文，请参考：

苏剑林. (Dec. 22, 2022). 《生成扩散模型漫谈（十五）：构建ODE的一般步骤（中）》[Blog post]. Retrieved from https://spaces.ac.cn/archives/9379

```
@online{kexuefm-9379,
    title={生成扩散模型漫谈（十五）：构建ODE的一般步骤（中）},
    author={苏剑林},
    year={2022},
    month={Dec},
    url={\url{https://spaces.ac.cn/archives/9379}},
}
```