

# 虚构史学家的生成模型

“如果说 真实会为虚拟着墨  
我看到的景色 是不是也源自哪个你呢”

# 统计力学的『反问题』

“从统计力学的观点看，具有大自由度的系统的状态应当由其相空间中的一个分布（这个分布就是在  $t$  时刻系统处于  $x$  位置的概率  $p(t, x)$ ）来描述，统计力学的一个重要任务是根据分布导出宏观可观测的热力学量及研究分布的动力学演化规律。然而，在很多情况下，由于与系统密切相关的力学量（如哈密顿量）以及系统在相空间中的分布难以事先得知，因此直接求解系统的演化是困难的，人们时常会通过实验观测或计算机模拟得到与系统相关的采样数据，从而由采样估计分布，这一过程称为求解统计力学的反问题”

显然，生成模型的目的是尽可能地捕捉数据的真实分布，我们可以把它归类到统计力学的『反问题』中。

# 生成模型的基本工作原理

计算机中一些分布 (e.g. 均匀分布、正态分布) 是容易采样的, 因此, 生成模型实际上在学习一个推前映射  $\sharp(\cdot) : p \mapsto q$ , 其中  $p$ : 一个好采样的分布,  $q$ : 真实分布。

- 隐变量 (前动力学) 时代
  - ▶ VAE
  - ▶ GAN
- 动力学时代
  - ▶ 基于随机动力学的模型
  - ▶ 基于确定动力学的模型
  - ▶ 其他异形模型
- 动力学的推断
  - ▶ 给生成模型添加作用量

直接逼近数据的分布显然是困难的，因此我们做一个拆分，使用如下方式逼近数据的真实分布  $p(x)$ ：

$$q(x) = \int q(x|z)q(z)dz$$

这里实际上我们同时给出了“好采样的分布”  $q(z)$  与“推前映射”：  
 $\sharp(\cdot) = \int q(x|z)(\cdot)dz$ 。如何训练这个推前映射？最直接的想法是参数化未知的  $q(x|z)$ ，然后用极大似然估计：

$$\theta^* = \arg \max_{\theta} \mathbb{E}_{x \sim p(x)} [q_{\theta}(x)]$$

## VAE-2

然而，直接求解极大似然损失是困难的。所以 VAE 选择了一种替代损失：最小化联合分布  $q(x, z)$  和  $p(x, z)$  之间的距离：

$$\begin{aligned} D_{KL}(p||q) &= \int \int dx dz p(x, z) \log \frac{p(x, z)}{q(x, z)} \\ &= \int dx p(x) \int dz p(z|x) \log \frac{p(x, z)}{q(x, z)} \\ &= \mathbb{E}_{x \sim p(x)} \left[ \int dz p(z|x) \log \frac{p(x, z)}{q(x, z)} \right] \end{aligned}$$

可以从里面拆东西，注意到分子上拆出来一个常数：

$$\mathbb{E}_{x \sim p(x)} \left[ \int dz p(z|x) \log p(x) \right] = \mathbb{E}_{x \sim p(x)} [\log p(x)]$$

所以这一项后面就可以不管了。继续分析其他项。

## VAE-3

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{x \sim p(x)} \left[ -\mathbb{E}_{z \sim p(z|x)} [\log q(x|z)] + \mathbb{E}_{z \sim p(z|x)} \left[ \log \frac{p(z|x)}{q(z)} \right] \right]$$

这就是常见的 VAE 损失。分析其训练方式：从数据集中选取  $x$ ，根据分布  $p(z|x)$  采样  $z$ ，通过  $x, z$  计算两项损失。第一项损失是“重建损失”，要求数据  $x$  的似然尽可能大；第二项实际上是  $D_{KL}[p(z|x)||q(z)]$ ，要求  $p(z|x)$  与我们预先指定的“好采样的分布”  $q(z)$  尽可能接近。于是，实际训练中需要处理（参数化）两项： $p(z|x)$  和  $q(x|z)$ 。在  $q(z)$  指定为标准正态分布， $p(z|x)$  为各分量独立的正态分布（其均值、方差被神经网络参数化）的情况下，可以显式计算：

$$D_{KL}(p(z|x)||q(z)) = \frac{1}{2} \sum_i (\mu_i^2(x) + \sigma_i^2(x) - \log \sigma_i^2(x) - 1)$$

在  $q(x|z)$  被指定为正态分布的情况下，损失的第一项（二次方损失）：

$$-\log q(x|z) = \frac{1}{2} \left\| \frac{x - \mu(x)}{\sigma(x)} \right\|^2 + C$$

# GAN-1

GAN 也可以使用与 VAE 类似的视角理解。它实际上引入了离散隐变量  $z = 0/1$  代表生成的是假/真图片。先验分布取为

$q(z = 0) = q(z = 1) = \frac{1}{2}$ , 条件分布为:

$$q(x|0) = q^\dagger(x) \quad q(x|1) = p(x)$$

与 VAE 一样, 考虑将难以计算的极大似然问题转化为 KL 散度的优化问题:

$$D_{KL}(q||p) = \int \frac{1}{2} q^\dagger(x) \log \frac{\frac{1}{2} q^\dagger(x)}{p(0|x)p(x)} dx + \int \frac{1}{2} p(x) \log \frac{\frac{1}{2} p(x)}{p(1|x)p(x)} dx$$

我们不知道的是  $p(1|x)$  和  $g^\dagger(x)$ , 可以通过分步优化来求解这两个未知函数。

## GAN-2

首先, 固定  $q^\dagger(x)$ , 此时的优化损失可以写为:

$$\mathcal{L}_{p(1|x)} = -\mathbb{E}_{x \sim q^\dagger(x)} [\log[1 - p(1|x)]] + -\mathbb{E}_{x \sim p(x)} [\log[(1|x)]]$$

此时对  $p(1|x)$  是无约束的, 因此我们可以直接将其最优解写出来:

$$p(1|x) = \frac{p(x)}{p(x) + q^\dagger(x)}$$

其次, 固定  $p(1|x)$ , 此时的优化损失写为:

$$\mathcal{L}_{q^\dagger(x)} = \int q^\dagger(x) \log \frac{q^\dagger(x)}{(1 - p(1|x))q^\dagger(x)} dx$$

将上一阶段的  $p(1|x)$  最优解代入, 这一项损失就变形为:

$$\int q^\dagger(x) \log \frac{q^\dagger(x)}{p(1|x)q_{old}^\dagger(x)} = -\mathbb{E}_{x \sim q^\dagger(x)} \log p(1|x) + D_{KL}(q^\dagger(x) || q_{old}^\dagger(x))$$



## GAN-3

不难发现，如果我们认为  $q^\dagger(x)$  是生成器生成图像的分布（即取  $n \sim N(0, I)$ ,  $x = G(n) \sim q^\dagger(x)$ ）， $p(1|x) = D(x)$ ，则以上框架变为一般的 GAN 框架。

注意！ $\mathcal{L}_{q^\dagger(x)}$  中比我们常见的 GAN 损失多了一项。如果没有这一项，生成器大可以只生成使得  $p(1|x)$  最大的那个  $x$ ，这种现象被称为生成模型的模式坍缩。KL 散度项的引入使得  $q^\dagger(x)$  不会变得太快，一定程度上放置了模式坍缩的发生。

还有一些方法可以防止模式坍缩，从而改进 GAN 的生成质量。典型的操作是风格迁移任务中的 Cycle GAN。它有两个生成器  $G_{A \rightarrow B}$  和  $G_{B \rightarrow A}$ ，它们互为逆映射。因此，CGAN 除了使用正常的 GAN 损失之外，额外增加了如下损失：

$$\mathcal{L}_{reversible} = \mathbb{E}_{x \sim p_X(x)} \|G_{B \rightarrow A}(G_{A \rightarrow B}(x))\|^2 + \mathbb{E}_{y \sim p_Y(y)} \|G_{A \rightarrow B}(G_{B \rightarrow A}(y))\|^2$$

## Score Matching-1

现在我们正式开始考虑动力学驱动的生成过程。考虑如下 SDE:

$$dx = \frac{1}{2}\epsilon \nabla_x \log p_{data}(x) + \sqrt{\epsilon} dW_t$$

写出它对应的 Fokker Planck 方程:

$$\partial_t p(x, t) = \frac{1}{2}\epsilon \nabla_x^2 p(x, t) - \frac{1}{2}\epsilon \nabla_x \cdot (p_{data}(x) \nabla_x \log p_{data}(x))$$

容易验证它的平稳分布是  $p(x, t) = p_{data}(x)$ , 因此, 只要  $\nabla_x p_{data}(x)$  学得好, 从全空间任意采样一些点, 按照上面的动力学演化至  $t \rightarrow \infty$ , 就可以得到目标分布。现在的问题是如何学好  $\nabla_x p_{data}(x)$ ? 数据点通常分布在高维空间中的低维流形上, 或者也可以说, 数据点的分布是稀疏的, 为了使得全空间都能学到一个差不多的  $\nabla_x p_{data}(x)$ , 作者将数据点使用高斯核“抹匀”到全空间:  $p_\sigma(x) = \int p_\sigma(x|y) p_{data}(y) dy$ , 此后最小化平方损失:

$$\frac{1}{2} \mathbb{E}_{p_\sigma(y|x) p_{data}(x)} [\|s_\theta(x) - \nabla_y \log p_\sigma(y|x)\|^2]$$

## Score Matching-2

上面的方法依赖于一个 SDE 的平稳分布，可以找到它的许多问题，比如需要演化无穷长时间才能演化到数据分布上，因此采样很慢。有没有什么不依赖平稳分布的方法？我们希望构建一个 SDE，使得它将  $t = 0$  时的数据分布  $p_{data}$  运输到  $t = 1$  时的某个好采样的分布（比如正态分布）。下面给出一个这样的 SDE 的例子：

$$dx = -\frac{1}{2}\beta(t)xdt + \sqrt{\beta(t)}dW_t$$

假设初始的时候数据都在一个点上，即初始分布为  $\delta(x - x_0)$ 。取一个积分因子：

$$\mu(t) = \exp\left(\frac{1}{2} \int_0^t \beta(s)ds\right)$$

并令  $Y_t = \mu(t)x_t$ ，使用 Ito's Lemma 可以验证

$$dY_t = \mu(t)\sqrt{\beta(t)}dW_t$$

## Score Matching-3

两边积分可以得到这个 SDE 的解，利用 Ito Isometry 可以显式计算解的方差，最终，解显式写为：

$$x_t = x_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^t \beta(s) ds\right) + \sqrt{1 - \exp\left(-\int_0^t \beta(s) ds\right)} z$$

可以看出，只要  $\int_0^1 \beta(s) ds$  足够大，那么  $t = 1$  时刻的分布就是标准正态分布（这是一个好采样的分布！）。现在我们做到了将数据分布运送到好采样的分布这一过程，问题是如何再运回去？考虑一个一般情况，假设我们将数据运到正态分布使用的 SDE 是：

$$dx = b(x, t)dt + \sigma(t)dW_t$$

我们写出它对应的 Fokker Planck 方程（简单起见，我们只考虑一维情况，高维可类推）：

$$\partial_t p(x, t) = -\partial_x (b(x, t)p(x, t)) + \frac{1}{2} \partial_x^2 (\sigma^2(t)p(x, t))$$

## Score Matching-4

构造守恒荷  $q(x, t) = p(x, t)$  和守恒流

$$j(x, t) = b(x, t) - \frac{1}{2p(x, t)} \partial_x (\sigma^2(t) p(x, t)) = b(x, t) - \frac{1}{2} \partial_x (\sigma^2(t) \log p(x, t))$$

我们惊喜地发现上面的 Fokker Planck 方程变成了流守恒方程：

$$\partial_t q(x, t) + \partial_x (q(x, t) j(x, t)) = 0$$

这个流守恒方程是与一个 ODE 对应的：

$$dx = \left[ b(x, t) - \frac{1}{2} \sigma^2(t) \partial_x \log p(x, t) \right] dt$$

在前面的 SDE 中，直接反演时间是不能“调转”分布的演化方向的，但是 ODE 可以，所以我们在这里反转时间，取  $\tau = 1 - t$ ，则下面的 ODE 可以把终末分布（“好采样”的分布）运输回初始分布：

## Score Matching-5

$$dx = - \left[ b(x, \tau) - \frac{1}{2} \sigma^2(\tau) \partial_x \log p(x, \tau) \right] d\tau$$

使用和上文中完全一样的方法，我们找到与其等价的 SDE（给出相同的 Fokker Planck 方程的 SDE）是：

$$dx = - \left[ b(x, \tau) - \sigma^2(\tau) \partial_x \log p(x, \tau) \right] d\tau + \sigma(\tau) dW_\tau$$

直观上，扩散是一个输运过程，它将粒子从浓度高的地方运输到浓度低的地方。而  $+\sigma^2(\tau) \partial_x \log p(x, \tau)$  抵充了这种效应。该模型中只有  $\partial_x \log p(x, t)$  需要学习，参数化后使用 MSE 损失梯度下降即可。

关于 Score Matching 有一些评注。首先，最初的 DDPM 是使用极大似然损失训练的，这里使用二次方损失训练，二者等价吗？可以证明：

$$-\mathbb{E}_{p(x)}[\log p_\theta^{SDE}(x)] \leq \frac{1}{2} \int_0^T \mathbb{E}_{p(x,t)}[\sigma^2(t) \|\partial_x \log p(x, t) - s_\theta(x, t)\|^2]$$

## Score Matching-6

其次, DDPM 和 Score Matching 的关系是什么? 考虑 DDPM 的加噪过程:

$$x_t = \sqrt{1 - \beta_t} x_{t-1} + \sqrt{\beta_t} z, z \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

上面给出的是一个时间步额更新。现在假如时间连续起来, 在  $\Delta t$  时间内, 上式写为:

$$x_{t+\Delta t} = \sqrt{1 - \beta(t)\Delta t} x_t + \sqrt{\beta(t)\Delta t} z \approx x_t - \frac{1}{2}\beta(t)x_t\Delta t + \sqrt{\beta(t)\Delta t} z$$

从中读出  $x_t$  均值和方差的增量, 得到对应的 SDE:

$$dx = -\frac{1}{2}\beta(t)xdt + \sqrt{\beta(t)}dW_t$$

这正是我们在上面举出的例子。由于它不会导致方差无止境增长, 因此这种加噪方式称为 VP-SDE。

最后, 可以使用多种方式为 Score Matching 的生成过程添加引导。主要的方式有 Classifier Guidance 和 Classifier Free Guidance 两种。

# Flow Matching-1

相对于使用 SDE 生成，使用 ODE 生成肯定更简单（生成模型的最终目标就是要多快好省地学习目标分布），流匹配是使用 ODE 生成目标数据的典型方法。流匹配让数据点沿着一个 ODE 行走，就能从初始分布转移到终末分布。设粒子的特征线为  $z(x, t)$ ，则 ODE 写为：

$$\frac{d}{dt}z(x, t) = u(z(x, t), t)$$

现在  $u$  是不知道的，我们可以钦定一个  $u$ ，然后用神经网络来学习它，最小化以下 MSE 损失：

$$\mathcal{L}_{FM} = \mathbb{E}_{t, x \sim p(x, t)} \|u_{\theta}(x, t) - u(x, t)\|^2$$

然而， $u(x, t)$  难以设计，一个技巧是先取定终末分布中的一个点，先设计出初始分布到取定点的路径，这个操作是简单的。取定终末分布中数据点  $x_1 \sim q$ ，我们可以直接使用直线把初始分布中各点和取定的点连接起来：

$$X_{t|x_1} = tx_1 + (1 - t)X_0, X_0 \sim p$$



## Flow Matching-2

假设初始分布  $p$  是标准正态分布，容易计算得到：

$$X_{t|x_1} \sim \mathcal{N}(x|tx_1, (1-t)^2 I)$$

以及所谓条件向量场（负责将初始分布中所有点转移到目标分布中  $x_1$  的向量场）：

$$u(x, t|x_1) = x_1 - x_0 = \frac{x_1 - x}{1 - t}$$

使用条件向量场，我们可以给出条件损失，可以证明，它对  $\theta$  的梯度与上面的  $\mathcal{L}_{FM}$  一致：

$$\mathcal{L}_{CFM} = \mathbb{E}_{t \sim \mathcal{U}[0,1], x \sim p(x, t|x_1), x_1 \sim q} \|u_\theta(x, t) - u(x, t|x_1)\|^2$$

显然，在这样的生成模型中，“走直线”有很多好处：路程短、生成快、容易蒸馏（蒸馏的模型不需要学习高阶导数信息）。虽然上面的条件速度场是使用线性插值做出来的，但是空间中一点在插值中被多次经过，直观上，这导致这一点上的速度场是多个条件速度场的平均。这会导致粒子的轨迹发生弯曲。

## Flow Matching-3

有一个非常直观的方式来解决这个问题。在上面的训练过程中，我们相当于随机抽取  $x_0$  和  $x_1$  配对，换言之，CFM 目标可以重写成：

$$\mathcal{L}_{CFM} = \mathbb{E}_{x_0 \sim p, x_1 \sim q, t \sim \mathcal{U}[0,1], x = tx_1 + (1-t)x_0} \|u_\theta(x, t) - u(x, t|x_0, x_1)\|^2$$

我们将随机变量对  $(X_0, X_1)$  “整流” 一次后的结果记为

$$(Z_0^{(1)}, Z_1^{(1)}) = (X_0, z^{(0)}(X_0, 1)) = \text{Rectify}(X_0, X_1)$$

其中  $z^{(0)}(x, t)$  为使用 CFM 目标学到的粒子特征线。换言之，现在我们不是从  $p, q$  中随机抽取配对进行训练，而是抽取  $z_0^{(1)} = x_0 \sim p$ ，可以找到唯一的  $z_1^{(1)} = z(x_0, 1)$  与之对应。使用这样的配对进行训练可以使得  $z(x, t)$  尽可能成为直线。（显然可以观察到，如果训练过程中所有的条件插值直线不交，那么此时是  $\text{Rectify}(\cdot)$  映射的不动点。）

## Flow Matching-4

最后，在流匹配中也可以使用极大似然估计的方式进行训练，这是因为沿着粒子的特征线，似然  $\log p(\psi(x, t), t)$  是可以被推出来的：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \log p(z(x, t), t) &= \frac{1}{p} (\partial_t p + \sum_i \partial_i p \cdot \partial_t z_i) \\ &= \frac{1}{p} (-\nabla_x \cdot (pu) + \sum_i \partial_i p \cdot u_i) \\ &= \frac{1}{p} (-p \nabla_x \cdot u) \\ &= -\nabla_x \cdot u\end{aligned}$$

以及我们指出，FM 和 SM 有内在联系：设条件分布  $p(x, t|x_1) = \mathcal{N}(\alpha(t)x_1, \sigma^2(t)I)$ ，流匹配学习到的速度场和 Score 有如下关系：

$$u(x, t) = \left( \sigma^2 \frac{\dot{\alpha}}{\alpha} - \dot{\sigma} \sigma \right) \nabla_x \log p(x, t) + \frac{\dot{\alpha}}{\alpha} x$$

在上面介绍的所有模型中，生成数据所用的动力学都是我们“钦定”的，我们希望生成地越快越好。如果我们在这个动力学上加上某些限制，就可以使得满足限制的动力学是唯一一种。

我们所期望的那种动力学的有关信息被编码在作用量中，一种最简单的情形是所谓最优传输：单粒子服从动力学

$$\frac{d}{dt}z(x, t) = u(z(x, t), t)$$

则粒子群体的概率密度演化服从连续性方程：

$$\partial_t p(z, t) + \nabla_x \cdot (p(z, t)u(z, t)) = 0$$

我们期望最小化以下作用量：

$$S = \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|u(z, t)\|^2 p(z, t) dz dt$$

## OT-2

先考虑这个作用量的物理意义：这里的  $z(x, t)$  给出了一个坐标变换。考虑它将零时刻  $(x, x + dx)$  体元内的粒子变换到  $(z, z + dz)$  内。体元  $dx$  和  $dz$  的体积差一个  $z(x, t)$  的雅可比行列式作为系数，这个行列式是什么呢？因为我们假设了  $dz$  内的粒子就是  $dx$  内的那些粒子，那么我们立刻得到：

$$dx \, p(x, 0) = dz \, p(z, t)$$

从而上面的作用量重写为（我们交换了积分顺序）：

$$S = \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 \frac{1}{2} \|u(z(x, t), t)\|^2 p(x, 0) dt dx$$

物理意义：内层积分计算单粒子作用量；外层积分将全空间按照  $p(x, 0)$  加权，相当于计算了所有粒子的作用量（如果感觉不直观，可思考  $p(x, 0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i)$  的情形）。因此，最优传输的物理意义：**最小化从初始分布运输到终末分布过程中所有粒子的作用量之和**。这也是为什么训练出的 OT 总是走直线的直观解释。

## OT-3

根据物理意义，我们容易把它推广到其他情形，比如流形上的情形。取一组正交归一基底  $\{x^\mu\}$ ，设曲线  $z(x, t)$  的切矢在这一组基底下的分量为  $u^\mu$ ，流形上的度规张量分量为  $g_{\mu\nu}$ ，我们自然有：

$$S = \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 \frac{1}{2} \|g_{\mu\nu} u^\mu(z(x, t), t) u^\nu(z(x, t), t)\|^2 p(x, 0) dt dx$$

求解它的一种方式是采用变分法，使用拉格朗日乘子将连续性方程作为约束引入，得到增广作用量：

$$S^\dagger = \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} \left[ \frac{1}{2} \|u\|^2 p + \lambda(z, t) (\partial_t p + \nabla_x \cdot (pu)) \right] dx dt$$

对  $\lambda(x, t)$  变分直接得到连续性方程，不提供新信息。对  $u$  变分：取试探函数  $\delta(u)$ ，使得  $u' = u + \delta u$ ，则作用量的变化：

$$\delta S^\dagger = \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} [u^T \delta u + \lambda(z, t) (\nabla_x \cdot (p \delta u))] dx dt$$

## OT-4

我们需要把  $\delta u$  暴露出来，所以处理第二项，考虑：

$$\int_{\mathbb{R}^n} \lambda \nabla_x \cdot (p \delta u) dx = \int_{\mathbb{R}^n} \nabla_x \cdot (\lambda p \delta u) dx - \int_{\mathbb{R}^n} (\nabla_x \lambda)^T \delta u dx$$

右边第一项可以使用高斯定理转换成在无穷大球面上的积分，考虑到  $n$  维球面的面积  $S_n \propto R^{n-1}$ ，只需要  $p$  的衰减速度快于  $\frac{1}{R^{n-1}}$ ，这一项就直接没了，由于  $\delta u$  任意，得到：

$$u = \nabla_x \lambda$$

因此速度是一个梯度场。考虑对  $p$  变分，并且注意到（使用相同的技巧处理）：

$$\int_{\mathbb{R}^n} \lambda \nabla_x \cdot (\delta p u) = - \int_{\mathbb{R}^n} \delta p u^T \nabla_x \lambda \quad \int_0^1 \lambda \partial_t \delta p dt = - \int_0^1 \delta p \partial_t \lambda$$

立刻得到所谓 HJB 方程：

$$\partial_t \lambda(x, t) + \frac{1}{2} \|\nabla_x \lambda(x, t)\|^2 = 0$$

上面的 OT 用确定性动力学连接两个分布，Schrodinger Bridge 的想法是使用随机微分方程连接两个分布，它的作用量提法比较特（困）殊（难），考虑一个标准布朗运动  $X(t) = W(t)$ ，它诱导出  $t = [0, 1]$  的轨道空间上的一个维纳测度。说人话，就是考虑将  $[0, 1]$  分成  $N$  段，右端点分别为  $t_1, \dots, t_{N+1}$  这些点上的联合分布，我们有：

$$P_{N+1}(x_1, \dots, x_{N+1}) dx_1 \cdots dx_{N+1} = \frac{1}{Z_{N+1}} \exp(-I_{N+1}(x_1, \dots, x_{N+1})) \mathcal{D}x$$

其中：

$$I_{N+1}(x_1, x_2, \dots, x_{N+1}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N+1} \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{t_i - t_{i-1}} \rightarrow \int_0^1 \frac{1}{2} \dot{x}_t^2 dt$$

它的物理意义是： $t_1$  时刻轨道处于  $x_1 \sim x_1 + dx_1 \cdots \cdots t_{N+1}$  时刻轨道处于  $x_{N+1} \sim x_{N+1} + dx_{N+1}$  之间的概率，所以可以看作它给出了一条轨道的概率，所以我们说它是路径空间上的概率测度。



## SB-2

现在我们要搞一个新的概率测度  $Q$ ，使得  $Q$  不把上面的东西量测为维纳过程，而是量测为  $dx = dW^P = b(x, t)dt + dW_t^Q$ 。也就是说  $Q$  需要把  $W^Q$  这个东西量测成布朗运动：

$$Q(w_1, \dots, w_{N+1}) = \frac{1}{Z_{N+1}} \exp(-I(w_1, \dots, w_{N+1})) dw_1 \dots dw_{N+1}$$

为了找到  $P, Q$  二者的关系，我们把这个 SDE 离散化了：

$$x_i - x_{i-1} = b_{i-1}(t_i - t_{i-1}) + (w_i - w_{i-1})$$

，从坐标变换的角度看，这给出了  $\{x_1, \dots, x_{N+1}\} \rightarrow \{w_1, \dots, w_{N+1}\}$  的一个坐标变换，且坐标变换的雅可比行列式为 1，也就是说我们可以无伤地将  $dx_1 \dots dx_{N+1}$  换成  $dw_1 \dots dw_{N+1}$ 。将离散化的 SDE 代入  $Q$  的表达式，立刻有：

$$Q[w] \mathcal{D}w = P[w] \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 b^2(w, t) dt\right) \exp\left(\int_0^1 b(w, t) dW_t^P\right) \mathcal{D}x$$

上式是简版的 Girsanov 定理，它指出了满足关系  $dW^Q = b(x, t) + dW^P$  的两个随机过程所诱导出两个不同的维纳测度之间的关系。我们可以形式化地写出所谓 RN 导数：

$$\frac{Q[w]}{P[w]} = P[w] \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^1 b^2(w, t) dt\right) \exp\left(\int_0^1 b(w, t) dW_t^P\right) \mathcal{D}x$$

薛定谔桥的作用量是希望最小化  $D_{KL}(Q||P)$ ，它定义为：

$$D_{KL}(Q||P) = \mathbb{E}_Q \left[ \log \frac{Q[w]}{P[w]} \right]$$

利用关系  $dW^P = dW^Q + b(x, t)dt$ ，就得到二次方的优化目标：

$$\min_Q \mathbb{E}_Q \left[ \frac{1}{2} \int_0^1 b^2(w, t) dt \right]$$

下面介绍 SB 中的一些结论。刚才为了简单起见，我们使用  $W(t)$  作为参考测度  $P$  下被度量为布朗运动的过程，下面介绍结论的时候，使用  $X(t) = \sqrt{2\epsilon}W(t)$  作为  $P$  下被量测为布朗运动的过程，在测度  $Q$  下它是  $dX(t) = u(x, t) + \sqrt{2\epsilon}dW(t)$

使用和刚才如出一辙的变分法，立刻得到最优控制必要条件：

$$u = \nabla_x \lambda \quad \partial_t \lambda + \frac{1}{2} \|\nabla_x \lambda\|^2 + \epsilon \nabla_x^2 \lambda = 0$$

做变量替换，可以使非线性的 HJB 方程变得更简单：

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{\lambda(x, t)}{2\epsilon}\right) \quad \hat{\psi}(x, t) = p(x, t) \exp\left(-\frac{\lambda(x, t)}{2\epsilon}\right)$$

方程将直接变为两个不耦合的方程：

$$\partial_t \psi + \epsilon \nabla_x^2 \psi = 0 \quad \partial_t \hat{\psi} + \epsilon \nabla_x^2 \hat{\psi} = 0$$

## 其他的动力学

这一类问题有很多变种，例如在 Fokker Planck 方程中引入所谓非平衡项：

$$\partial_t p = -\nabla_x \cdot (pu) + \frac{1}{2} \nabla_x^2 : (\sigma^2(t)Ip) + gp$$

优化目标中也加入非平衡项：

$$\min_{p,u,g} \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} \left( \frac{1}{2} \|u\|^2 + \alpha \phi(g) \right) dx dt$$

就变成了 RUOT 问题。

感谢您的观看