2025 年 11 月 3 日至 11 月 9 日周报

何瑞杰
中山大学, 大湾区大学

1. 项目进展

1.1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学

本周将 `CNN-small` 的层数从三层降低至两层，在 8 epoch 内可以成功收敛，其权重待分析。

1.1.1. 下一步

目前将目标从提取显式的规则改为从已知部分规则和黑箱规则代理产生的少量数据，结合带有等变性的神经网络训练作为动力学仿真器。规则发现的具体流程是，从一些已知规则出发，首先根据一条有偏的轨道从一个规则空间中选取一系列的假设规则，在神经网络学习这条轨道后，再通过神经网络作为演化模拟器的演化统计结果，和原来的统计数据对比，以确定某些候选规则存在或不存在，从而逐步确定系统演化的真正动力学。

2. 文献阅读

2.1. Score-based generative modeling through SDE [1]

Yang Song et al. | https://arxiv.org/abs/2011.13456

本文从 SDE 的视角统一了先前的 Langevin 退火的 score matching 方法 SMLD[2]和原版扩散模型 DDPM[3]，从它们的共同点出发，先将加噪动力学连续化变成 SDE，再利用已有的逆向 SDE 解析解，得到与加噪 SDE 相反演化方向的逆向 SDE；最后从 SMLD 和 DDPM 逆向求解的数值算法提出了新的预测-校正方法和概率流 ODE 方法。可以说本文所提出的是随机采样的改进，神经网络扮演的角色仅仅为 $\nabla \log p(\boldsymbol{x})$ 的逼近器，它不是本文的重点。

2.1.1. Score matching: SMLD 和 DDPM

Score-based 生成模型的核心思想是通过学习 $\boldsymbol{s}_\theta(\boldsymbol{x}, t)$，让其逼近 $\nabla \log p(\boldsymbol{x})$，然后再根据 Langevin 采样，生成来自未知分布 $p(\boldsymbol{x})$ 的样本。在 SMLD 中，由于数据分布未知而无法计算的目标项 $\nabla \log p(\boldsymbol{x})$ 是通过加噪解决的，即考虑高斯核 $q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x}) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0}, \sigma \boldsymbol{I})$，加噪后变量对应的目标函数可以写成

$$
\begin{aligned}
J(\boldsymbol{\theta}) &= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p(\boldsymbol{x}), \hat{\boldsymbol{x}}\sim q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x})}\left[\|\boldsymbol{s}_\theta(\hat{\boldsymbol{x}}, \sigma) - \nabla_{\hat{\boldsymbol{x}}} \log q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x})\|_2^2\right] \\
&= \frac{1}{2}\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p(\boldsymbol{x}), \hat{\boldsymbol{x}}\sim q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x})}\left[\left\|\boldsymbol{s}_\theta(\hat{\boldsymbol{x}}, \sigma) + \frac{\sigma}{\varepsilon}\right\|_2^2\right] \qquad \hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0}, \sigma \boldsymbol{I})
\end{aligned} \tag{1}
$$

可以看出，采用加噪技巧的 SMLD 中，分数函数实际上在预测噪声，这就与 DDPM 建立了联系。即使 DDPM 论文中并未显式地做出 score matching，但我们也可以认为 DDPM 是在训练一个分数函数。

现在来看二者的去噪动力学。SMLD 使用 Langevin 采样的方法，对于某个固定的噪声水平 σ_i，有

$$
\boldsymbol{x}_i^m = \boldsymbol{x}_{i-1}^m + \alpha_i \boldsymbol{s}_\theta(\boldsymbol{x}_{i-1}^m, \sigma_i) + \sqrt{2\alpha_i}\boldsymbol{z}_i^m, \qquad \boldsymbol{z}_i^m \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}), m = 1, ..., M \tag{2}
$$

其中 $i = 1, ..., N$。DDPM 的版本和 SMLD 相似，它通过两个 Gauss 分布之间 KL 散度的解析解，可以求出逆向条件分布 $q(\boldsymbol{x}_{i-1}|\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_0)$ 的均值 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t$ 和方差 $\tilde{\beta}_t$，最后得到去噪公式

$$
\boldsymbol{x}_{i-1} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta_i}}(\boldsymbol{x}_i - \beta_i \boldsymbol{s}_\theta(\boldsymbol{x}_i, \sigma_i)) + \sqrt{\beta_i}\boldsymbol{z}_i, \qquad \boldsymbol{z}_i \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}) \tag{3}
$$

2.1.2. Score matching 的 SDE 视角

2.1.2.1. 加噪过程

我们考虑将 SMLD 和 DDPM 的加噪动力学连续化为 $\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t)\mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}\boldsymbol{w}$ 的形式，其中 $\boldsymbol{w}$ 是 n 维 Brown 运动，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t)$ 是漂移项，$g(t)$ 是扩散项。对于 SMLD，有下面的改写：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_i &= \boldsymbol{x}_{i-1} + \sqrt{\sigma_i^2 - \sigma_{i-1}^2}\boldsymbol{z}_i \\
\boldsymbol{x}(t+\Delta t) - \boldsymbol{x}(t) &= \sqrt{\sigma(t+\Delta t)^2 - \sigma(t)^2}z(t) \\
\boldsymbol{x}(t+\Delta t) - \boldsymbol{x}(t) &= \sqrt{\frac{\mathrm{d}[\sigma(t)]^2}{\mathrm{d}t}}\sqrt{\Delta t}z(t) \qquad \text{用}\frac{\mathrm{d}[\sigma(t)]^2}{\mathrm{d}t}\text{对}\sigma_i^2 - \sigma_{i-1}^2 \text{ 做一阶近似} \\
\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= \sqrt{\frac{\mathrm{d}[\sigma(t)]^2}{\mathrm{d}t}}\mathrm{d}\boldsymbol{w} \qquad\qquad \mathrm{d}\boldsymbol{w} \sim (\mathrm{d}t)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\varepsilon}
\end{aligned} \tag{4}
$$

类似地，对 DDPM 的加噪过程，也有类似的改写：

$$\boldsymbol{x}_i = \sqrt{1-\beta_i}\boldsymbol{x}_{i-1} + \sqrt{\beta_i}\boldsymbol{z}_{i-1} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}(t+\Delta t) &= \sqrt{1-\beta(t+\Delta t)\Delta t}\boldsymbol{x}(t) + \sqrt{\beta(t+\Delta t)\Delta t}\boldsymbol{z}(t) && \text{令 } \beta(i/N)=\beta_i \text{，其中 } 1/N \text{ 是噪声步长} \\
&\approx \left(1-\frac{1}{2}\beta(t+\Delta t)\Delta t\right)\boldsymbol{x}(t) + \sqrt{\beta(t+\Delta t)}(\Delta t)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{z}(t) && \text{Taylor 展开到一阶} \\
&\approx \boldsymbol{x}(t) - \frac{1}{2}\beta(t)\boldsymbol{x}(t)\Delta t + \sqrt{\beta(t)}(\Delta t)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{z}(t) \\
\mathrm{d}\boldsymbol{x} &= -\frac{1}{2}\beta(t)\boldsymbol{x}\mathrm{d}t + \sqrt{\beta(t)}\mathrm{d}\boldsymbol{w} && \mathrm{d}\boldsymbol{w} \sim (\mathrm{d}t)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\varepsilon}
\end{aligned} \tag{6}$$

如果 DDPM 中的噪声表不是线性变化的，那将得到一个形式类似，但 $\boldsymbol{f}$ 和 g 不同的 SDE。上文中，SMLD 的加噪 SDE 被称为是 **variance exploding (VE)** 的，而 DDPM 的加噪 SDE 被称为是 **variance preserving (VP)** 的。作者还构造出一种 **sub-VP SDE**，加噪 SDE 为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = -\frac{1}{2}\beta(t)\boldsymbol{x}\mathrm{d}t + \underbrace{\sqrt{\beta(t)\left(1-e^{-2\int_0^t \beta(s)\mathrm{d}s}\right)}}_{\sqrt{\bar{\beta}(t)}}\mathrm{d}\boldsymbol{w}. \tag{7}$$

其方差被 VP-SDE 的方差控制。以上三种 SDE 的一维特殊情形的方差推导可见附录，对特殊情形的讨论可以很容易看书这三种 SDE 叫做 VE，VP 以及 sub-VP SDE 的原因。

2.1.3. 求解逆向 SDE

Anderson 给出了上节中一般形式之加噪 SDE 的逆向 SDE，其形式为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = [-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t) + g^2(t)\nabla_{\boldsymbol{x}}\log p_t(\boldsymbol{x})]\mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{w}} \tag{8}$$

其中 $\bar{\boldsymbol{w}}$ 是一个倒流的 Brown 运动，$\mathrm{d}t$ 是倒流的无穷小时间间隔。由于 $\boldsymbol{f}$ 和 g 已知，而 $\nabla_{\boldsymbol{x}}\log p_t(\boldsymbol{x})$ 由神经网络估计。在 SMLD 中其总目标函数是

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p(\boldsymbol{x}),\hat{\boldsymbol{x}}\sim q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x})}\left[\|\boldsymbol{s}_\theta(\hat{\boldsymbol{x}},\sigma) - \nabla_{\hat{\boldsymbol{x}}}\log q_\sigma(\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x})\|_2^2\right] \tag{9}$$

将其拓展至连续的情形，目标函数就变为

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_t\left[\lambda(t)\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}(0),\boldsymbol{x}(t)|\boldsymbol{x}(0)}\left[\left\|\boldsymbol{s}_\theta(\boldsymbol{x}(t),t) - \nabla_{\boldsymbol{x}(t)}\log p_{0,t}(\boldsymbol{x}(t)|\boldsymbol{x}(0))\right\|_2^2\right]\right] \tag{10}$$

其中 $\lambda(t)$ 是正的权重函数，t 在 $[0,T]$ 上均匀采样。可以取 $\lambda \propto \mathbb{E}\left[\left\|\nabla_{\hat{\boldsymbol{x}}}\log p_{0,t}(\boldsymbol{x}(t)|\boldsymbol{x}(0))\right\|_2^2\right]$，使得每个 t 下的损失项对总损失的平均贡献相同。剩余的问题来自于如何求解 $p_{0,t}(\boldsymbol{x}(t)|\boldsymbol{x}(0))$，或者说转移核。**如果 $\boldsymbol{f}(\cdot,t)$ 是仿射函数，转移核是 Gauss 分布的密度函数，其参数均值和方差拥有闭式解；而对于一般的 SDE，需要求解 Kolmogorov 前向方程才能得到 $p_{0,t}(\boldsymbol{x}(t)|\boldsymbol{x}(0))$。**但如果不使用加噪技巧，而是使用分片分数匹配以计算目标函数，就可以规避计算转移核的困难（见附录）。

2.1.3.1. 一般的 SDE 求解器

对于 SDE 的模拟，有若干数值方法，例如 Euler-Maruyama 法和随机 Runge-Kutta 法。DDPM 中提出的 Ancestral 采样也是和前二者类似的对逆向 VP-SDE 的一种离散化，但对一般 SDE 而言，要推导出它的 Ancestral 采样并不容易。对于此问题，作者根据逆向 SDE 提出了一种简单有效的离散化方法。考虑一般形式的 SDE $\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}t + \boldsymbol{G}(t)\mathrm{d}\boldsymbol{w}$，并固定离散化的时间点序列，可以得到前向 SDE 的离散版本:

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{G}_i \boldsymbol{z}_i, \qquad i = 0, ..., N-1 \tag{11}$$

根据式 8 中的逆向 SDE 结果，立刻可以得到下面的采样迭代法，作者称之为逆向扩散采样：

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{f}_{i+1}(\boldsymbol{x}_{i+1}) + \boldsymbol{G}_{i+1}\boldsymbol{G}_{i+1}^\top \boldsymbol{s}_{\boldsymbol{\theta}^*}(\boldsymbol{x}_{i+1}, i+1) + \boldsymbol{G}_{i+1}\boldsymbol{z}_{i+1} \tag{12}$$

考虑 DDPM 的情形：$\boldsymbol{x}_{i+1} = \sqrt{1-\beta_{i+1}}\boldsymbol{x}_i + \sqrt{\beta_{i+1}}\boldsymbol{z}_i$，得到 $\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{x}_i) = \left[1 - \sqrt{1-\beta_{i+1}}\right]\boldsymbol{x}_i$ 其对应的逆向扩散采样为

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} + \frac{1}{2}\beta_{t+1}\boldsymbol{x}_t + \beta_{t+1}\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{\theta}^*}(\boldsymbol{x}_{i+1}, i+1) + \sqrt{\beta_{i+1}}\boldsymbol{z}_{i+1} \tag{13}$$

而 DDPM 中的 Ancestral 采样的形式为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_i &= \frac{1}{\sqrt{1-\beta_{i+1}}}(\boldsymbol{x}_{i+1} - \beta_{i+1}\boldsymbol{s}_{\theta}(\boldsymbol{x}_{i+1}, i+1)) + \sqrt{\beta_{i+1}}\boldsymbol{z}_{i+1} \\ &\approx (1+\beta) \end{aligned} \tag{14}$$

2.1.3.2. 预测-校正方法

2.1.3.3. 概率流 **ODE**

2.1.4. 可控生成

2.1.5. 实验结果和讨论

2.1.6. 依然存在的疑惑

- Variance Exploding SDE 和 Variance Preserving SDE 以及 sub-VP SDE 为什么叫这些名字，换言之，如何证明它们分别是 variance exploding 和 variance preserving 的？
- 概率流 ODE 是否只是一个求解逆向 SDE 的方法？它和文中提出的 SDE 求解方法之间有什么不同？

2.2. Stochastic dynamics of the resistively shunted superconducting tunnel junction system under the impact of thermal fluctuations [4]

Shenglan Yuan | 10.1016/j.chaos.2025.116917

3. 学习进度

3.1. 随机过程

本周继续系统学习 Markov 链。

3.2. 随机微分方程

3.2.1. Itô 链式法则和乘积法则的多维情形

3.2.2. 典型的随机微分方程

3.2.2.1. 股市模型

3.2.2.2. Brown 桥

3.2.2.3. Langevin 方程

3.2.2.4. Ornstein–Uhlenbeck (OU) 过程

3.2.2.5. 随机谐振子

3.2.3. 解的存在性和唯一性

3.2.4. 随机微分方程的数值模拟

考虑一个自守的 SDE

$$\mathrm{d}X = F(X)\mathrm{d}t + G(X)\mathrm{d}\boldsymbol{W} \tag{15}$$

下面给出模拟它的三种方法。

3.2.4.1. Euler-Maruyama 法

Euler-Maruyama 法主要思想是 Brown 运动 $W(\cdot)$ 的增量独立性，即 $W(t+\Delta t) - W(t) \sim \mathcal{N}(0,1)$，因此有

$$X(t+\Delta t) \approx X(t) + F(X)\Delta t + \sqrt{\Delta t} \cdot G(X)Z \tag{16}$$

其中 $Z \sim \mathcal{N}(0,1)$

3.2.4.2. Milstein 法

Milstein 法相比于 Euler-Maruyama 法更细，来源于对 $\displaystyle\int_t^{t+\Delta t} G(X)\mathrm{d}W$ 更精确的估计。其形式为

$$\begin{aligned} X(t+\Delta t) \approx X(t) &+ F(X)\Delta t + \sqrt{\Delta t} \cdot G(X)Z \\ &+ \frac{1}{2}G(X)\frac{\partial}{\partial X}G(X)[Z^2 t - (\Delta t)^2] \end{aligned} \tag{17}$$

其推导我还需要再看一下。

3.2.4.3. 随机 Runge-Kutta 法

3.3. 量子力学初步

3.4. Josephson 结

4. 问题解决记录

4.1. Typst 相关

4.1.1. 自定义图表标题位置和内容

5. 下周计划

论文阅读

1. 生成模型
   - Score Matching 和 SDE（完结）
   - 薛定谔桥（精读）
   - DDIM（泛读）

项目进度

1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学
   - 阅读等变 CNN 的代码
   - 尝试开始做单轨道训练样本的生成、训练和演化动力学统计
2. 耦合约瑟夫森结
   - 了解约瑟夫森结的基本知识
   - 浏览 matlab 数值模拟代码

理论学习

1. 随机过程课程
   - 学习完毕 Markov 过程
2. 随机微分方程
   - 完成第四章 随机积分
   - 第五章 随机微分方程 开头

参考文献

[1] Y. Song, J. Sohl-Dickstein, D. P. Kingma, A. Kumar, S. Ermon, 和 B. Poole,《Score-Based Generative Modeling through Stochastic Differential Equations》, *CoRR*, 2020, [在线]. 载于: https://arxiv.org/abs/2011.13456

[2] Y. Song 和 S. Ermon, 《Generative Modeling by Estimating Gradients of the Data Distribution》, 收入 *Advances in Neural Information Processing Systems 32: Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2019, NeurIPS 2019, December 8-14, 2019, Vancouver, BC, Canada*, H. M. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. B. Fox, 和 R. Garnett, 编, 2019, 页 11895～11907. [在线]. 载于: https://proceedings.neurips.cc/paper/2019/hash/3001ef257407d5a371a96dcd947c7d93-Abstract.html

[3] J. Ho, A. Jain, 和 P. Abbeel, 《Denoising Diffusion Probabilistic Models》, *CoRR*, 2020, [在线]. 载于: https://arxiv.org/abs/2006.11239

[4] Z. Geng, M. Deng, X. Bai, J. Z. Kolter, 和 K. He, 《Mean Flows for One-step Generative Modeling》, *CoRR*, 2025, doi: 10.48550/ARXIV.2505.13447.