arXiv:2301.10250v2 [cs.LG] 5 Dec 2023

利用分数匹配求解逆物理问题

Benjamin Holzschuh [1], [2*] **Simona Vegetti** [2] **Nils Thuerey** [1]

[1]慕尼黑工业大学，德国加兴 85748 [2]马克斯·普朗克天体物理研究所，德国加兴 85748

摘要

我们提出利用扩散模型的最新进展，求解涉及物理系统时间演化的逆问题。我们的方法结合近似反物理模拟器与学习得到的校正函数，使系统当前状态逐步向后回溯时间。我们工作的一个核心洞见是，使用单步损失训练学习得到的校正项，等价于分数匹配目标；而在训练过程中递归预测更长的轨迹片段，则与相应概率流的最大似然训练相关。我们展示了该算法相较于标准去噪分数匹配、隐式得分匹配以及完全学习得到的基线方法，在广泛的逆物理问题上的优势。由此得到的反问题求解器具有出色的精度和时间稳定性；与其他学习型反问题求解器不同，它还支持对解的后验分布进行采样。代码和实验见 https://github.com/tum-pbs/SMDP。

1 引言

许多物理系统在微观尺度上具有时间可逆性。例如，连续介质可以表示为一组相互作用粒子 [Gur82; BLL02]，基于此我们能够预测未来状态。我们也可以计算更早的状态，也就是说，可以让模拟随时间倒退 [Mar+96]。从宏观视角来看，我们只能知道特定区域内的平均量 [Far93]，，这会造成信息损失，因此时间不再可逆。下文中，我们的目标是针对逆问题，重建给定终态所对应的初始宏观状态分布。这个问题确实非常棘手[ZDG96; Góm+18; Del+18; LP22]，，而现有方法缺乏可行的途径来表示和采样状态分布。

我们的方法基于扩散方法领域的最新进展 [Soh+15; HJA20; Son+21b]：数据样本 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ 通过随机微分方程（SDE） $d\mathbf{x} = f(\mathbf{x}\ t)dt + g(t)dW$ 逐渐被扰乱为高斯白噪声，其中 SDE 的确定性分量 f： $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}^D$ 称为漂移，而 D 维布朗运动 W 的系数 g： $\mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 称为扩散。如果已知时间 t 受损样本的数据分布 $p_t(\mathbf{x})$ 的**得分** $\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$，那么 SDE 的动力学就可以在时间上反转，从而能够从噪声中采样数据。扩散模型通过神经网络 s_θ 来近似得分，随后可将其用作反向时间随机微分方程的即插即用估计。

然而，在我们基于物理的方法中，我们考虑一个描述物理系统的随机微分方程 $d\mathbf{x} = \mathcal{P}(\mathbf{x})dt + g(t)dW$，其中 $\mathcal{P}$：$\mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D$ 是一个物理模拟器，用来替代扩散模型的漂移项。我们不是将数据分布转换为噪声，而是将 $t = 0$ 时刻的模拟状态转换为 $t = T$ 时刻的模拟状态，并以高斯噪声作为扰动。基于给定的

*通讯邮箱：benjamin.holzschuh@tum.de

第37届神经信息处理系统大会（NeurIPS 2023）。

系统在 $t = T$时刻的终态，我们通过向后回退一个很小的时间步并多次重复这一过程，来预测前一状态。与扩散模型的反向时间随机微分方程类似，对前一状态的预测依赖于物理模拟器的近似逆过程、一个学习得到的更新 s_θ，以及一个较小的高斯扰动。

s_θ 的训练与用于数值模拟的学习式校正方法类似 [Um+20；Koc+21；LCT22]：网络 s_θ 学习对模拟状态进行校正。这些状态会根据物理模拟器随时间演化，使校正后的轨迹与目标轨迹相匹配。在我们的方法中，我们旨在学习对“反向”模拟的校正。训练可以基于单个模拟步，只预测一个先前状态；也可以扩展到多步展开。后者要求逆向物理步具备可微性 [Thu+21]。

重要的是，我们表明，在温和条件下，学习 s_θ 等价于匹配时刻 t训练数据集分布的得分 $\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$。因此，从物理系统的反向时间随机微分方程中采样，在理论上有充分依据，可用于从正确的后验分布中采样。

虽然单步训练会直接最小化分数匹配目标，但我们表明，将其扩展到多步训练，相当于对相关的神经常微分方程（ODE）进行最大似然训练。考虑多个步对于生成轨迹的稳定性至关重要。训练时物理与神经网络之间的交互所产生的反馈，能够带来更稳健的结果。

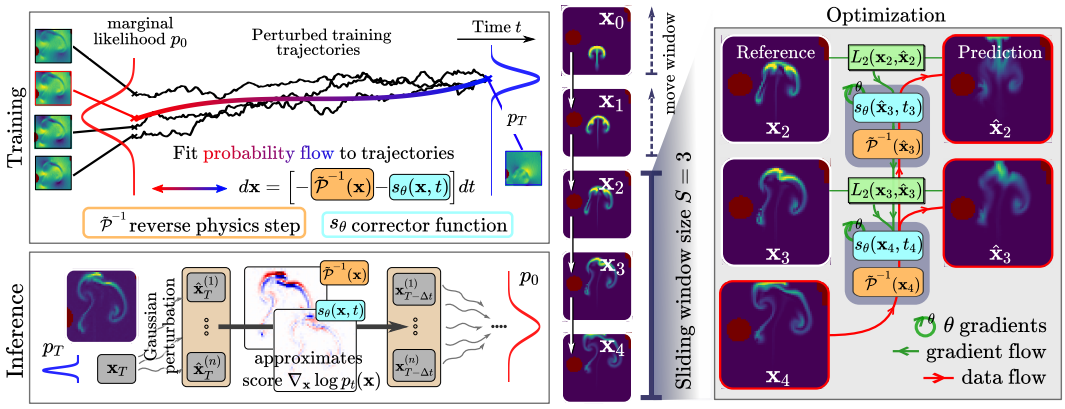
与以往的扩散方法不同，我们将关于物理过程的领域知识融入一个近似逆向模拟器中，并用它替代扩散模型的漂移项[Son+21b; ZC21]。在实践中，学习得到的组件 s_θ 会校正数值问题（例如时间离散化）所造成的误差，并消除模拟过程中信息随时间丢失所导致的歧义。

图1概述了我们的方法。我们的核心目标是展示扩散技术与可微模拟相结合对于求解逆问题的价值，并为偏微分方程与扩散建模的结合提供理论基础。下文中，我们将采用这种组合的方法称为基于可微物理的分数匹配 （SMDP）。我们的工作主要有以下贡献：（1）我们在扩散模型中引入反向物理模拟步骤，构建用于求解逆问题的概率框架。（2）我们提供理论基础，证明这种组合能够产生代表底层数据分布得分的学习得到的校正。（3）我们通过一系列具有挑战性的逆问题，展示SMDP的有效性，并表明与多种随机和确定性基线方法相比，SMDP性能更优。

2 相关工作

基于随机微分方程的扩散模型与生成建模 扩散模型 [Soh+15; HJA20]已被用于广泛的生成应用，尤以图像 [DN21]、视频 [Ho+22; Höp+22; YSM22]、音频合成 [Che+21]、不确定性量化 [CSY22; Chu+22; Son+22; KVE21; Ram+20]以及自回归偏微分方程求解器 [KCT23]为代表。然而，大多数方法要么聚焦于自然图像相关任务中常见的去噪目标，要么在合成解的过程中未直接考虑底层物理规律。基于朗之万动力学 [Vin11; SE19] 或离散马尔可夫链 [Soh+15; HJA20] 的方法，可以通过随机微分方程在连续时间框架下统一起来 [Son+21b]。例如，已有研究考虑通过从神经随机微分方程中采样来合成数据 [Kid+21; Son+21b]。与现有方法不同，我们的方法中的漂移代表一个实际的物理步，而底层随机微分方程并非将数据分布转换为噪声，而是对具有随机扰动的物理系统的时间演化进行建模。

求解（随机）偏微分方程逆问题的方法 物理动力学的可微求解器可通过在求解器步中反向传播梯度，使用基于梯度的方法优化逆问题的解 [Thu+21]。基于学习的方法直接学习偏微分方程和随机偏微分方程的解算子，即函数空间之间的映射，例如傅里叶神经算子 [Li+21]、DeepONets [Lu+21]，或其推广形式；这类推广形式将随机强迫纳入随机偏微分方程，例如神经随机偏微分方程 [SLG22]。近期，已有若干方法利用扩散模型学得的得分，作为数据驱动的



(a) 训练与推理概述。 (b) 滑动窗口与优化 s_{θ_0}。

图1：我们方法的概述。训练时，我们将一个神经常微分方程（即概率流）拟合到一组受扰动的训练轨迹上（a，上）。概率流由一个反向物理模拟器 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 和一个校正函数s_θ构成，其中反向物理模拟器近似于正向求解器 $\mathcal{P}$ 的逆。在许多情况下，我们可以通过采用负步长 Δt，或从数据中学习代理模型，从 $\mathcal{P}$ 得到 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$。推理时，我们在每一步结合 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$、训练好的 s_θ 和高斯噪声，使系统从$\mathbf{x}_T$沿时间反向模拟至$\mathbf{x}_0$（a，下）。为优化 s_θ，我们的方法沿训练轨迹移动一个大小为 S 的滑动窗口，并重构当前窗口（b）。θ 的梯度会累积起来，并通过所有预测步骤进行反向传播。

线性逆问题的正则化 [Ram+20; Son+22; KVE21; CSY22; Chu+22]以及一般含噪逆问题的正则化 [Chu+23]。我们的方法可应用于具有时间演化的通用非线性逆物理问题，并且在推理期间无需通过所有求解器步反向传播梯度。这使推理速度显著提升，稳定性也更高。

数值误差的学习式校正 机器学习模型能显著提升数值模拟的效果 [Tom+17; Mor+18; Pfa+20; Li+21]。通过将神经网络集成到微分方程求解器中，可以学习减少数值误差 [Um+20; Koc+21; BWW22]，或引导模拟朝着期望的目标状态发展 [HTK20; Li+22]。使用我们在第 3.1 节提出的单步损失和多步损失来优化 s_θ，在概念上与学习式校正方法相似。然而，据我们所知，这种方法尚未用于校正“反向”模拟和求解逆问题。

最大似然训练与连续归一化流 连续归一化流（CNFs）是基于神经常微分方程的可逆生成模型 [Che+18a; KPB20; Pap+21]，与我们提出的基于物理的神经常微分方程相似。描述物理系统所依据的随机微分方程的边缘概率密度演化的方程是柯尔莫哥洛夫前向方程[Øks03]，，并且存在相应的概率流常微分方程 [MRO20; Son+21b]。当得分由 s_θ表示时，这便构成一个连续归一化流，通常可以使用标准方法[Che+18b] 和最大似然训练 [Son+21a]进行训练。Huang 等人 [HLC21] 表明，最小化得分匹配损失等价于最大化通过从反向时间随机微分方程采样而获得的似然下界。近期的一种变体将分数匹配与连续归一化流相结合 [ZC21]，并通过联合学习漂移及其对应的得分来进行生成建模。据我们所知，迄今尚未有人研究通过多步展开进行训练及其与最大似然训练之间的关系。

3 方法概述

问题表述 设 $(\Omega\ \mathcal{F}, P)$ 为一个概率空间，且 $W(t)\ =(W_1(t)\ldots,\ W_D(t))^T$ 是一个 D 维布朗运动。此外，设 $\mathbf{x}_0$ 是一个 $\mathcal{F}_0$-可测的、取值于 $\mathbb{R}^D$ 的随机变量，其分布为 p_0，并表示初始模拟状态。我们考虑

由随机微分方程（SDE）建模的物理系统在 $0 \leq t \leq T$ 下的时间演化

$$d\mathbf{x} = \mathcal{P}(\mathbf{x})dt + g(t)dW \tag{1}$$

初始值为 $\mathbf{x}_0$，漂移 $\mathcal{P}$ 为博雷尔可测函数： $\mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D$，扩散 g 为： $[0,T] \to \mathbb{R}_{\geq 0}$。该随机微分方程将初始状态在时间 0 的边缘分布 p_0 转换为时间 T 时终止状态的边缘分布 p_T。我们在附录 A 中列出了其他假设。

此外，我们假设从上述随机微分方程中采样了 N 条长度为 M 的轨迹，时间区间 $[0,T]$ 上采用固定的时间离散化 $0 \leq t_0 < t_1 < ... < t_M \leq T$，并将这些轨迹收集到训练数据集 $\{ (\mathbf{x}_{t_m}^{(n)})_{i=0}^{M} \}_{n=0}^{N}$ 中。为简单起见，我们假设所有时间步的间隔都相等，即 $t_{m+1} - t_m := \Delta t$。此外，在下文中，我们使用记号 $\mathbf{x}_{\ell:m}$ 表示 $0 \leq \ell < m \leq M$，以指代轨迹（$\mathbf{x}_{t_\ell}$，$\mathbf{x}^{t_{\ell+1}}$<style id='24>，.....$\mathbf{x}_{t_m}$）。我们在附录 A 中列出了其他假设。

我们的目标是根据模拟终止状态 $\mathbf{x}_0$ 推断初始状态 $\mathbf{x}_M$，也就是说，我们希望从分布 $p_0(\cdot \,|\, \mathbf{x}_M)$ 中采样，或获得最大似然解。

3.1 反向模拟的学习校正

在下文中，我们进一步假设可以使用反向物理模拟器 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1} : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D$，它使模拟状态随时间倒退，并且是正向模拟器 $\mathcal{P}$ [HKT22] 的近似逆。在我们的实验中，我们要么通过使用负步长 Δt 从正向模拟器获得反向物理模拟器，要么根据训练数据学习一个代理模型。我们训练一个由 θ 参数化的神经网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$，使得

$$\mathbf{x}_m \approx \mathbf{x}_{m+1} + \Delta t \left[\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}_{m+1}) + s_\theta(\mathbf{x}_{m+1}, t_{m+1}) \right]. \tag{2}$$

在这个方程中，项 $s_\theta(\mathbf{x}_{m+1}, t_{m+1})$ 用于校正近似误差，并消除高斯扰动 $g(t)dW$ 带来的不确定性。下面，我们将介绍所提出的单步训练损失及其多步扩展，然后在下一节中说明这一表述与扩散模型的联系。

单步损失对于数据轨迹上的一对相邻样本（$\mathbf{x}_m$，$\mathbf{x}^{m+1}$），优化 s_θ 的单步损失是$\mathbf{x}_m$ 与通过式（2）得到的预测值之间的 L_2 距离。对于整个训练数据集，损失变为

$$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta) := \frac{1}{M} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{0:M}} \left[\sum_{m=0}^{M-1} \left[\left|\left| \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m+1} - \Delta t \left[\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}_{m+1}) + s_\theta(\mathbf{x}_{m+1}, t_{m+1}) \right] \right|\right|_2^2 \right] \right]. \tag{3}$$

计算期望可以理解为：将大小为二的窗口从每条轨迹的起点滑动到终点，并对各对相邻点的损失求平均。

多步损失由于每个模拟状态只取决于其前一个状态，因此单步损失应该足以用于训练 s_θ。然而在实践中，基于预测较长轨迹片段来定义损失的方法，在训练学习得到的校正项时效果更好 [Bar+19；Um+20；Koc+21]。为此，我们定义一个名为滑动窗口大小的超参数 S，并用$\mathbf{x}_{i:i+S} \in \mathbb{R}^{S \times D}$ 表示从$\mathbf{x}_i$ 开始的轨迹，该轨迹由$\mathbf{x}_i$ 及其后续的 $S-1$ 个状态组成。然后，我们将多步损失定义为

$$\mathcal{L}_{\text{multi}}(\theta) := \frac{1}{M} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{0:M}} \left[\sum_{m=0}^{M-S+1} \left[||\mathbf{x}_{m:m+S-1} - \hat{\mathbf{x}}_{m:m+S-1}||_2^2 \right] \right], \tag{4}$$

其中 $\hat{\mathbf{x}}^{i:i+S-1}$ 是按递归方式定义的预测轨迹

$$\hat{\mathbf{x}}_{i+S} = \mathbf{x}_{i+S} \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{x}}_{i+S-1-j} = \hat{\mathbf{x}}_{i+S-j} + \Delta t \left[\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\hat{\mathbf{x}}_{i+S-j}) + s_\theta(\hat{\mathbf{x}}_{i+S-j}, t_{i+S-j}) \right]. \tag{5}$$

3.2 学习得分

去噪分数匹配 给定状态分布 p_t for $0 < t < T$，我们遵循 [Son+21b]，并考虑分数匹配目标

$$\mathcal{J}_{\text{SM}}(\theta) := \frac{1}{2} \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_t} \left[||s_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})||_2^2 \right] dt, \tag{6}$$

也就是说，网络 s_θ 经过训练，以近似得分 $\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$。在去噪分数匹配中[Vin11；Soh+15；HJA20]，，分布 p_t 由加噪过程隐式定义，该过程由正向随机微分方程 $d\mathbf{x} = f(\mathbf{x}, t)dt + g(t)dW$ 给出，其中 W 是标准布朗运动。函数 $f\colon \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}^D$ 称为漂移，$g\colon \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 称为扩散。该过程将训练数据分布 p_0 转换为近似高斯分布的噪声分布 p_T。对于仿射函数 f 和 g，转移概率可以通过解析方式获得，从而能够高效训练 s_θ。可以证明，在温和条件下，对于正向随机微分方程，存在对应的反向时间随机微分方程 $d\mathbf{x} = [f(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})]dt + g(t) d\tilde{W}$ [And82]。特别地，这意味着给定一个近似高斯的状态边缘分布 p_T，我们可以从 p_T 中采样，并模拟反向时间随机微分方程的路径，从而获得数据分布 p_0中的样本。

分数匹配、概率流常微分方程和单步训练 存在一个确定性常微分方程[Son+21b]，，称为概率流常微分方程，它对边缘概率从 p_T 到 p_0 的变换与反向时间随机微分方程相同。对于基于物理的随机微分方程 (1)，它表示为

$$d\mathbf{x} = \left[\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} g(t)^2 \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})\right] dt. \tag{7}$$

对于 $\Delta t \to 0$，我们可以将训练的更新规则 (2) 改写为

$$d\mathbf{x} = \left[-\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}) - s_\theta(\mathbf{x}, t)\right] dt. \tag{8}$$

因此，我们可以将 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x})$ 视为 $-\mathcal{P}(\mathbf{x})$，并将 $s_\theta(\mathbf{x}, t)$ 视为 $\frac{1}{2} g(t) \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$。我们证明，对于单步训练且 Δt 足够小时，最小化的是分数匹配目标 (6)。

定理 3.1。考虑一个数据集，其中包含从随机微分方程 (1) 采样得到的轨迹，并令 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}) = -\mathcal{P}(\mathbf{x})$。那么，单步损失 (3) 等价于在 $\Delta t \to 0$ 时最小化分数匹配目标(6) 。证明：见附录 A.1 □

最大似然与多步训练 将单步训练扩展到多个步骤，并不能直接最小化分数匹配目标，但我们仍然可以从概率角度解释学习得到的校正项。对于去噪分数匹配，可以通过 s_θ 最大似然训练 [S+21对], 进行训练，以最小化 p_0 与通过从 p_T 采样并从$t = T$ 到 $t = 0$模拟概率流常微分方程 (8) 所得到的分布之间的 KL 散度。我们为多步损失推导了类似的结果。

定理 3.2。考虑一个包含从随机微分方程(1) 中采样得到的轨迹的数据集，并令 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}) = -\mathcal{P}(\mathbf{x})$。那么，多步损失(4) 最大化了概率流常微分方程(7) 最大似然训练的一个变分下界，其形式为 $\Delta t \to 0$。

证明。见附录 A.2 □

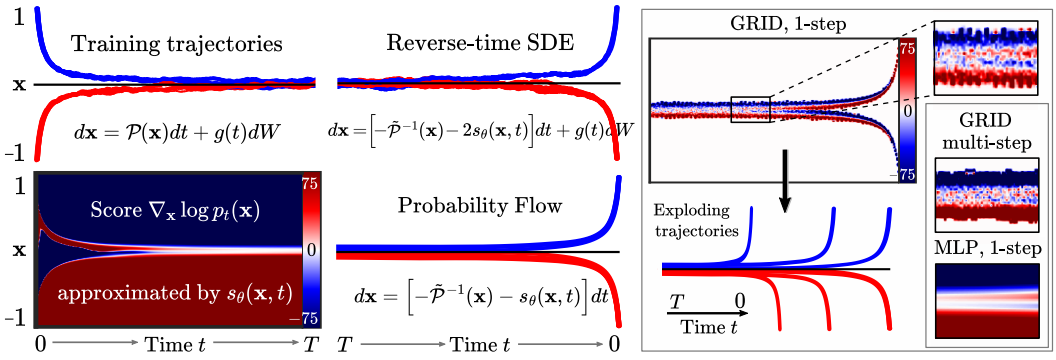
总而言之，我们提出了用于求解逆物理问题的概率多步训练方法，并为利用分数匹配求解这些问题提供了理论基础。接下来，我们将介绍实现 SMDP 的更多细节。

3.3 训练与推理

我们从窗口大小为 $S = 2$ 的多步损失开始训练 s_θ，这等价于单步损失。然后，我们逐渐增大窗口大小 S，直到达到最大值 $S_{\max}$。对于 $S > 2$，预测轨迹的展开包含 s_θ 与反向物理模拟器 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 之间的相互作用。对于推理，我们考虑神经随机微分方程

$$d\mathbf{x} = \left[-\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}) - C\, s_\theta(\mathbf{x}, t)\right] dt + g(t) dW, \tag{9}$$

我们通过欧拉–丸山方法求解。对于 $C = 2$，我们得到系统的反向时间随机微分方程，从该随机微分方程中采样即可得到后验分布。令 $C = 1$，并去除噪声项，即可得到概率流常微分方程（8）。我们将常微分方程变体记为*SMDP* 常微分方程，将 SDE 变体记为 *SMDP SDE*。随机微分方程可用于生成多个样本并探索后验分布，而常微分方程变体则是基于最大似然训练得到的唯一确定性解。



(a) 训练 (b) 推理 (c) 单步与多步

图 2：我们的一维玩具随机微分方程概览。(a) 使用轨迹数据集和已知时间动力学进行训练，动力学由 $\mathcal{P}(\mathbf{x}) := -\text{sign}(\mathbf{x})\mathbf{x}^2$ 和 $g \equiv 0.1$ 给出。我们使用所提出的方法和多层感知机网络，为 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 估计得分 $\nabla_\mathbf{x} \log p_t(\mathbf{x})$。负值（蓝色）会使轨迹向下移动，正值（红色）则会使其向上移动。结合动力学，可以如 (b) 所示，通过反向时间随机微分方程或概率流常微分方程来反转系统。要成功反演动力学，网络 s_θ 必须稳健且具有良好的外推能力 (c)。使用经单步损失训练的 GRID 进行推理会导致轨迹发散，因为该网络的外推能力较差。使用多步损失训练 GRID 可解决这一问题。

4 实验

我们通过一系列实验展示所提算法的能力。第一个实验（第 4.1 节）使用一个简单的一维过程，将我们的方法与现有的分数匹配基线方法进行比较。底层模型的后验分布已知，因此可以准确评估性能；我们利用这一点分析多步损失形式的作用。其次，在第 4.2 节中，我们对随机热方程进行了实验。这是一个特别有趣的测试案例，因为该方程的扩散特性会随时间推移有效地抹去信息。在第 4.3 节中，我们将方法应用于一个不存在随机扰动的场景，即存在障碍物的浮力驱动纳维–斯托克斯流。此案例凸显了常微分方程变体的用处。最后，在第 4.4 节中，我们考虑反向物理模拟器 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 未知的情形。在此，我们针对各向同性湍流训练代理模型 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$，并评估 SMDP 在使用学习得到的反向物理模拟器时的表现。

4.1 一维玩具随机微分方程

作为首次针对已知后验分布进行的实验，我们考虑一个形式为：$dx = -\left[\lambda_1 \cdot \text{sign}(x)x^2\right] dt + \lambda_2 dW$ 的简单二次随机微分方程，其中 $\lambda_1 = 7$ 且 $\lambda_2 = 0.03$。在整个实验中，p_0 是一个分类分布，我们以相同的概率抽取 1 或 -1。将 $T = 10$ 时刻的值分布 p_T 变换为 p_0 的反向时间随机微分方程为

$$dx = -\left[\lambda_1 \cdot \text{sign}(x)x^2 - \lambda_2^2 \cdot \nabla_x \log p_t(x)\right] dt + \lambda_2 dw. \tag{10}$$

在图 2a 中，我们展示了使用欧拉–丸山方法模拟该随机微分方程得到的路径。随着 t 增加，这些轨迹趋近于 0。给定 $t = 10$时刻的轨迹值，便无法再推断该轨迹在 $t = 0$时刻的起点。

这项实验使我们能够使用解析的反向模拟器：$\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(x) = \lambda_1 \cdot \text{sign}(x)x^2$。这是一个具有挑战性的问题，因为反向物理步骤会随 x呈二次增长，而且 s_θ 必须精确控制反向过程，使其保持在训练域内，否则路径就会发散至无穷大。我们根据预测轨迹 $\hat{x}_{0:T}$ 与后验分布的匹配程度来评估每个模型。从 $[-0.1, 0.1]$中随机抽取 $\hat{x}_T$ 时，我们应得到 $\hat{x}_0$ 为 -1 或 1、且似然相同的轨迹。如果端点的相对距离为 $< 10\%$，我们就将其标记为 -1 或 1，并用 ρ_{-1} 和 ρ_1表示各类别所占的百分比。由于有些轨迹未能命中目标，通常 $\rho_{-1} + \rho_1 < 1$。因此，我们将后验度量 Q 定义为 ρ_{-1} 和 ρ_1中的较小值的两倍，即 $Q := 2 \cdot \min(\rho_{-1},\ \rho_1)$，这样，数值越接近 1，就表示与正确后验分布的匹配程度越高。

训练 训练数据集由 2500 条从 0 到 T、 $\Delta t = 0.02$的模拟轨迹组成。因此，每条训练轨迹的长度为 $M = 500$。对于网络 $s_\theta(x,\ t)$，我们考虑多层感知机（MLP），以及一种特殊情况——基于网格的离散化（GRID）。后者不适用于实际应用场景和高维数据，但可用于深入分析不同的训练变体。对于 GRID，我们将定义域 $[0, T] \times [-1.25, 1.25]$ 离散化，得到一个包含 500×250 个网格单元的矩形网格，并对解进行线性插值。网格单元中心初始化为 0。我们评估通过单步损失和多步损失训练的 s_θ，并使用 $S_{\max} = 10$。超参数和模型架构的详细信息见附录 C。

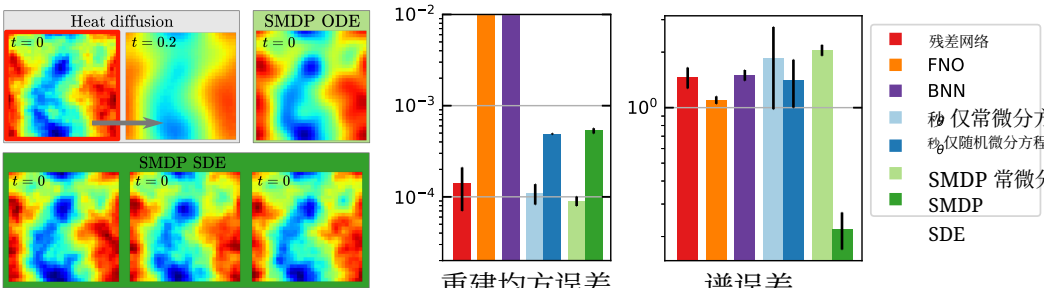
多步损失带来更好的外推能力和鲁棒性图 2c 概述了 MLP 和 GRID 学得的得分及多步损失所产生影响之间的差异。对于使用 MLP 进行的单步训练，我们观察到一个清晰、平滑的得分场，其中两条管状区域在 $x = 0$ 处合并为一条，且随着 t 增大而发生这一变化。因此，概率流常微分方程和反向时间随机微分方程的轨迹会收敛到正确值。使用 GRID 训练时，大多数网格单元都没有得到任何梯度更新，因而保持为 0。这是因为这些区域需要更多训练数据。此外，训练区域的边界参差不齐且模糊。穿过这些区域的轨迹可能会迅速发散。相比之下，多步损失在 $x = 0$ 处的中心线周围产生一致的信号，从而有效防止轨迹发散。

与基线方法的评估和比较作为学习得分的基线方法，我们考虑隐式得分匹配 [Hyv05、ISM]。此外，我们还考虑将带方差缩减的切片得分匹配 [Son+19、SSM-VR] 作为 ISM 的一种变体。我们使用相同的网络架构，在三种不同的数据集规模上训练所有方法。如表 1 所示，单步损失，在概念上类似于去噪——分数匹配表现良好，优于 ISM 和 SSM-VR。所有方法在反向时间随机微分方程上的表现都很好，即使训练数据极少也是如此。使用多步损失始终能带来显著提升，代价是训练时间略有增加。对于所有数据集大小和推理类型，我们提出的多步训练表现最佳，或至少与基线方法持平。由于后验指标 Q 对路径从两个起始点相交处的得分非常敏感，因此评估结果略有波动。

方法	概率流常微分方程			反向时间随机微分方程		
	数据集大小			数据集大小		
	100%	10%	1%	100%	10%	1%
多步	**0.97**	**0.91**	**0.81**	**0.99**	0.94	**0.85**
单步	0.78	0.44	0.41	0.93	0.71	0.75
ISM	0.19	0.15	0.01	0.92	0.94	0.52
SSM-VR	0.17	0.49	0.27	0.88	0.94	0.67

表 1：1000 条预测轨迹的后验度量 Q，取三次运行的平均值。标准差请参见附录中的表 3。

与解析得分的比较 我们通过比较本方法学习到的得分与附录 C 中的解析分数，进一步开展实验，以实证验证定理 3.1。



(a) 推理　　(b) 评估

图3：随机热方程概览。常微分方程轨迹给出的解平滑，且重建均方误差最低；而随机微分方程解则合成高频内容，显著降低了谱误差。不包含反向物理步骤的“s_θ only”版本，其谱误差明显更大。(b) 中的指标为三次运行的平均值。

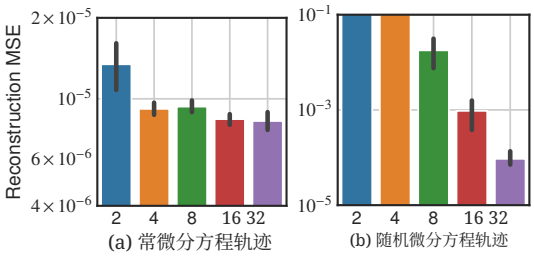
4.2 随机热方程

热方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \Delta u$ 在许多物理系统中发挥着基础性作用。在这项实验中，我们考虑随机热方程，它对热扩散过程施加了轻微扰动，并包含一个额外项 $g(t)\ \xi$，其中 ξ 是时空白噪声，参见 Pardoux [Par21，第 3 章2]。在实验中，我们将扩散系数设为 $\alpha = 1$，并从高斯随机场中采样初始条件，采样时刻为$t = 0$，其中 $n = 4$，分辨率为 32×32。我们使用欧拉–丸山方法和谱求解器 $\mathcal{P}_h$，以固定步长 $\Delta t = 6.25 \times 10^{-3}$ 和 $g \equiv 0.1$，模拟从 $t = 0$ 到 $t = 0.2$ 的含噪热扩散过程。给定模拟终止状态 $\mathbf{x}_T$，我们希望恢复一个可能的初始状态 $\mathbf{x}_0$。在这项实验中，由于噪声导致的高频分量会被放大，从而产生不符合物理规律的解，因此无法直接通过正向求解器一步推断$\mathbf{x}_0$，也无法在不进行修正的情况下推断。我们通过使用求解器 $\mathcal{P}_h(\mathbf{x})$的正向步来实现反向物理模拟器 $\tilde{P}^{-1}$，即 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}(\mathbf{x}) \approx -\mathcal{P}_h(\mathbf{x})$。

训练与基线方法 我们的训练数据集由 2500 个初始条件及其对应的轨迹和在 $t = 0.2$ 时的终态组成。我们采用一种类似小型残差网络的架构，由编码器和解码器两部分构成，用于表示评分函数 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$。谱求解器通过*JAX* [SC20], 实现可微编程，见附录 D。作为基线方法，我们考虑对同一类似残差网络的架构进行监督训练，以表示 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$；还考虑贝叶斯神经网络 (BNN) 以及傅里叶神经算子 (FNO) 网络 [Li+21]。我们对所有这些方法采用 L_2 损失，即训练数据由初始状态$\mathbf{x}_0$ 和终态$\mathbf{x}_T$组成的配对数据构成。

此外，我们还考虑了所提出方法的一种变体，其中移除了反向物理步骤 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$，因此必须完全通过 s_θ 学习动力学的反演，我们将其记为“$s_\theta$only”。接下来的比较中不包含 ISM 和 SSM-VR，因为数据维度过高，无法让这两种方法正常训练，而且在推理过程中未能获得稳定的轨迹。

重建准确度与数据流形拟合度我们通过在包含 500 个初始条件和终态的测试集上考察重建均方误差，评估我们的方法和基线方法。对于重建均方误差，我们使用求解器 $\mathcal{P}_h$，对网络的预测进行正向时间模拟，以获得相应的终态，并通过 L_2 距离将其与真实值进行比较。这项指标的缺点是无法衡量预测与训练数据流形的匹配程度。也就是说，在此情况下，它无法衡量预测是否呈现出高斯随机场的特性。因此，我们还会比较



(a) 常微分方程轨迹 (b) 随机微分方程轨迹

图4：多步 $S_{\max}$ 与重建均方误差，取 5 次运行的平均值。

状态的功率谱密度作为谱损失。图3展示了对重建结果的评估和可视化，可以看出，我们的 ODE 推断在重建均方误差方面表现最佳。然而，其解较为平滑，缺少必要的小尺度结构，因此谱误差较高。另一方面，SDE 变体在谱误差方面表现出色，生成的解在视觉上令人信服，且重建均方误差仅略有增加。这凸显了噪声作为 SMDP SDE 推断过程中熵源的作用，而这对于合成小尺度结构至关重要。请注意，这两项指标之间存在自然的权衡；使用相同的一组权重时，ODE 和 SDE 推断分别在各自对应的指标上表现最佳。

多步损失对于取得良好性能至关重要 我们针对图4中的最大窗口大小 $S_{\max}$，就重建均方误差进行了消融研究。对于 ODE 和 SDE 推断，增大 $S_{\max}$ 可显著提升性能，但训练资源消耗也会略有增加。这也凸显了对于条件性较差的逆问题，使用多步损失而非单步损失（$S_{\max} = 2$）的重要性。

我们进一步开展实验，研究修改噪声尺度和扩散率时的测试时分布偏移，详见附录D，这些实验展示了我们方法的鲁棒性。

4.3 含障碍物的浮力驱动流

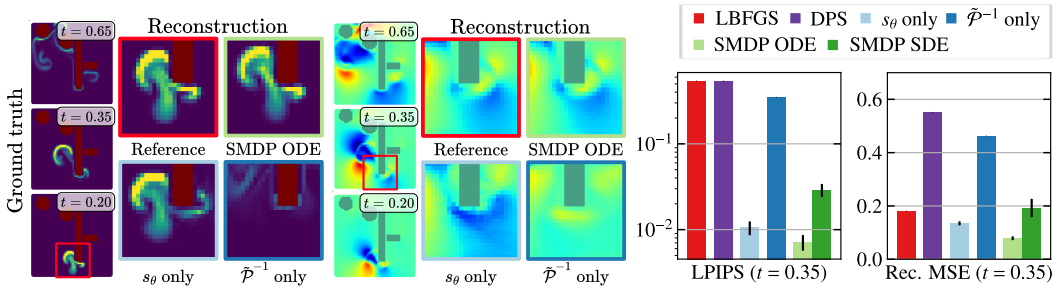
接下来，我们在一个更具挑战性的问题上测试我们的方法。为此，我们考虑在固定区域 $\Omega \subset [0,1] \times [0,1]$ 内进行的浮力驱动流确定性模拟，其中障碍物随机放置。每次模拟从时间 $t = 0.0$ 运行至 $t = 0.65$，步长为 $\Delta t = 0.01$。如图5a和图5b所示，SMDP 的训练目标是：给定时间 $t = 0.65$的标记物密度和速度场终态，重建一个合理的初始状态。我们在模拟域内的不同位置放置大小各异的球体和立方体，并确保它们不与标记物流入区域重叠。每次模拟中，我们会放置每类物体一至两个。

确定性系统的分数匹配训练期间，我们向每个模拟状态$\mathbf{x}_t$ 添加高斯噪声，噪声为 $\sigma_t = \sqrt{\Delta t}$。在此实验中，生成数据集时未使用随机强迫，即 $g \equiv 0$。通过向模拟状态添加噪声，在这种情况下，单步损失仍会最小化一个分数匹配目标，这与去噪分数匹配类似；推导过程见附录 A.3。在没有随机强迫的情况下进行推理时，我们的方法实际上会交替执行反向物理步骤、小幅扰动，以及通过 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$进行校正；后者会将受扰动的模拟状态投影回分布 p_t。我们发现，对于随机微分方程轨迹，$C = 2$ 会略微过冲，而 $C = 1$ 则能提升性能。在这种设置下，我们方法的“s_θ only”版本与一种学习额外物理动力学的去噪器十分相似。

训练与比较 我们的训练数据集由 250 次模拟及其对应轨迹组成，这些轨迹由 *phiflow* [Hol+20]生成。我们用于 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 的神经网络架构采用了膨胀卷积 [Sta+21]，详情请参见附录 E。反向物理步骤 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 通过在时间积分中使用负步长 $-\Delta t$ 直接在求解器中实现。训练时，我们采用包含 $S_{\max} = 20$ 的多步形式。此外，我们还将结果与以下解进行比较：在 $t = 0.35$ 处，使用可微前向模拟和有限内存 BFGS [LN89, LBFGS]直接优化初始烟雾和速度状态所得到的解；以及通过针对一般含噪逆问题的扩散后验采样 [Chu+23, DPS]，结合在模拟状态上训练的预训练扩散模型 $t = 0.35$ 所得到的解。评估时，我们采用与第 4.2 节类似的重建均方误差，以及感知相似度指标 LPIPS。测试集包含五次模拟。随机微分方程版本在此实验中表现良好，但其性能很可能受到近似逆向物理步骤和较大步长的限制。不过，如图 5c 所示，常微分方程版本的表现优于直接对模拟进行数值反演（仅 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$），也优于不使用反向物理步骤进行训练（仅 s_θ）。

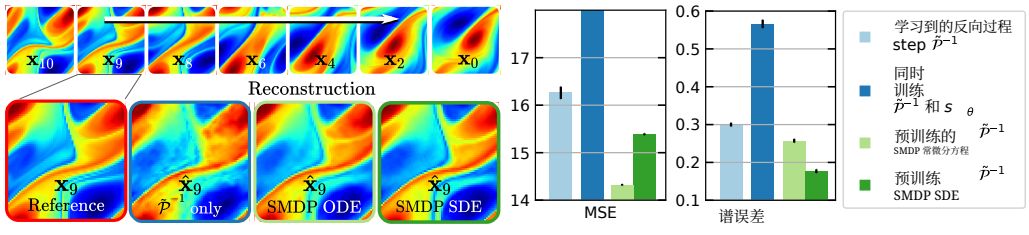
4.4 未知动力学下的纳维–斯托克斯方程

作为第四个实验，我们旨在采用与 Li 等人类似的设置，学习各向同性受迫湍流的时间演化。 [Li+21]。训练数据集包含来自 1000 条模拟轨迹的涡量场，这些轨迹从 $t = 0$ 到 $T = 10$，其 $\Delta t = 1$空间分辨率为 64×64 且



(a) 标记物密度　(b) 速度场 (x)　(c) 评估

图 5：浮力流案例。真实值显示了测试集模拟轨迹中不同时间点的标记物密度和x方向的速度场（a、b）。我们展示了以 $t = 0.65$ 处的模拟终止状态为条件得到的重建结果，并基于感知相似度（LPIPS）和重建均方误差，对三次运行的重建轨迹进行评估（c）。



(a) $t = 9$处的重建轨迹。 (b) 评估

图 6：湍流案例。不同训练变体的重建轨迹对比（a），以及均方误差和谱误差评估（b）。我们提出的常微分方程和随机微分方程推断优于学习得到的代理模型 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$。各项指标取三次运行的平均值。

黏度固定为 $\nu = 10^{-5}$。与之前一样，我们的目标是预测轨迹 $\hat{\mathbf{x}}_{0:M}$，使其能够根据终态 $\mathbf{x}_M$重建真实轨迹。在此实验中，我们使用 Li 等人提出的 FNO 架构，对反向模拟进行训练，以预训练反向物理步骤 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$。[Li+21]。预训练时，$\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 我们采用所提出的训练设置，使用多步损失和 $S_{\max} = 10$，但将得分函数固定为 $s_\theta(\mathbf{x}\ t) \equiv 0$。随后，我们在固定反向物理步骤的同时，训练时变得分函数 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$。这种方法确保所有时不变物理规律都由 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 捕捉，而 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$则可以专注于学习对 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 的小幅改进，并响应可能存在的时变数据偏差。更多训练细节见附录 F。

评估与训练变体在评估中，我们考察重建的初始状态 $\hat{\mathbf{x}}_0$ 相对于参考值$\mathbf{x}_0$的均方误差和谱误差。作为基线方法，在推理过程中，我们仅使用学习得到的代理模型 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$，不使用 s_θ。此外，我们还评估一种变体：同时训练代理模型和 s_θ（$\mathbf{x}\ t$）。由于这两个组件类似于反向时间随机微分方程的漂移项和得分，该方法与*DiffFlow* [ZC21], 类似，后者在生成建模背景下同时学习这两个组件。我们将此方法称为同时训练。结果如图 6 所示。与第 4.2 节中随机热方程的结果类似，随机微分方程取得了最佳谱误差，而常微分方程的均方误差最佳。我们提出的方法优于代理模型和同时训练这两个组件的方法。

5 讨论与结论

我们将学习型校正训练与扩散模型相结合，用于物理模拟和可微物理，以解决逆物理问题。我们在具有挑战性且多样化的实验中展示了该方法的竞争力、准确性和长期稳定性，并阐述了设计选择的依据。我们考察了两种具有互补推理优势的变体：常微分方程变体的均方误差最佳，而随机微分方程变体能够对后验分布进行采样，并提升对目标数据流形的覆盖度。此外，我们还从理论上指出，单步在数学上等价于优化分数匹配目标。我们证明，其多步扩展能够最大化最大似然训练的变分下界。

尽管初步结果令人振奋，我们的工作仍有一些局限，也为未来研究开辟了令人期待的方向：其中之一是需要逐步向后模拟系统的时间演化，这一过程可能代价高昂，而降阶方法或可降低其成本。此外，我们假设 Δt 足够小，且反向物理模拟器足够准确。如何在时间步较少时获得准确的解，同时在时间步较多时获得多样化的解，并在二者之间取得良好平衡，是未来研究的重要方向。

致谢 BH、SV 和 NT 感谢欧洲研究理事会（ERC）通过欧盟地平线2020研究与创新计划提供资助（LEDA：资助协议编号 758853；SpaTe：资助协议编号 863850）。SV 感谢马克斯·普朗克学会通过马克斯·普朗克莉泽·迈特纳研究组提供支持。本研究部分使用了由马克斯·普朗克学会（MPG）运营、位于加兴的马克斯·普朗克计算与数据中心（MPCDF）FREYA集群的高性能计算资源。

参考资料

[与82] B. Anderson。《反向时间扩散方程模型》。载于：《随机过程及其应用》12.3（1982年），第313–326页。[Bar+19] Y. Bar-Sinai、S. Hoyer、J. Hickey 和 M. P. Brenner。《学习偏微分方程的数据驱动离散化方法》。载于：《美国国家科学院院刊》116.31（2019年），第15344–15349页。[BLL02] X. Blanc、C. Le Bris 和 P.-L. Lions。《从分子模型到连续介质力学》。载于：《理性力学与分析档案》164.4（2002年），第341–381页。[BWW22] J. Brandstetter、D. Worrall 和 M. Welling。《消息传递神经偏微分方程求解器》。载于：国际学习表征会议（2022年）。[Che+18a] R. T. Chen、Y. Rubanova、J. Bettencourt 和 D. K. Duvenaud。《神经常微分方程》。载于：神经信息处理系统进展31（2018年）。[Che+18b] T. Q. Chen、Y. Rubanova、J. Bettencourt 和 D. Duvenaud。《神经常微分方程》。载于：神经信息处理系统进展。2018年，第6572–6583页。网址：https://proceedings.neurips.cc/paper/2018/hash/69386f6bb1dfed68692a24c8686939b9-Abstract.html。[Che+21] N. Chen、Y. Zhang、H. Zen、R. J. Weiss 等。《WaveGrad：为波形生成估计梯度》。载于：第9届国际学习表征会议。OpenReview.net，2021年。网址：https://openreview.net/forum?id=NsMLjcFaO8O。[Chu+22] H. Chung、B. Sim、D. Ryu 和 J. C. Ye。《利用流形约束改进逆问题的扩散模型》。载于：NeurIPS。2022年。网址：http://papers.nips. cc / paper / 2022 / hash / a48e5877c7bf86a513950ab23b360498 - Abstract - Conference.html。[Chu+23] H. Chung、J. Kim、M. T. McCann、M. L. Klasky 和 J. C. Ye。《用于一般含噪逆问题的扩散后验采样》。载于：第十一届国际学习表征会议。OpenReview.net，2023年。网址：https://openreview. net/pdf?id=OnD9zGAGT0k。[CSY22] H. Chung、B. Sim 和 J. C. Ye。《靠近些——扩散快些：通过随机收缩加速用于逆问题的条件扩散模型》。载于：IEEE/CVF计算机视觉与模式识别会议，CVPR 2022，美国路易斯安那州新奥尔良，2022年6月18日至24日。IEEE，2022年，第12403–12412页。数字对象唯一标识符：10.1109/CVPR52688. 2022.01209。网址：https://doi.org/10.1109/CVPR52688.2022.01209。[Del+18] S. Delaquis、M. Jewell、I. Ostrovskiy、M. Weber 等。《用于 EXO-200 能量和位置重建的深度神经网络》。载于：《仪器学报》13.08（2018年），P08023。[DN21] P. Dhariwal 和 A. Q. Nichol。《扩散模型在图像合成方面胜过生成对抗网络》。载于：神经信息处理系统进展。2021年，第8780–8794页。网址：https : / / proceedings . neurips . cc / paper / 2021 / hash / 49ad23d1ec9fa4bd8d77d02681df5cfa-Abstract.html。[Far93] S. J. Farlow。《面向科学家和工程师的偏微分方程》。Courier Corporation，1993年。[Góm+18] R. Gómez-Bombarelli、J. N. Wei、D. Duvenaud、J. M. Hernández-Lobato 等。《利用分子的数据驱动连续表征进行自动化学设计》。载于：《ACS中央科学》4.2（2018年），第268–276页。[Gur82] M. E. Gurtin。《连续介质力学导论》。学术出版社，1982年。[HJA20] J. Ho、A. Jain 和 P. Abbeel。《去噪扩散概率模型》。载于：神经信息处理系统进展。2020年。网址：https: //proceedings. neurips . cc / paper / 2020 / hash / 4c5bcfec8584af0d967f1ab10179ca4b - Abstract.html。[HKT22] P. Holl、V. Koltun 和 N. Thuerey。《通过物理反演实现尺度不变学习》。载于：神经信息处理系统进展35（2022年），第5390–5403页。[HLC21] C. Huang、J. H. Lim 和 A. C. Courville。《扩散生成模型与分数匹配的变分视角》。载于：神经信息处理系统进展。2021年，第22863–22876页。网址：https://proceedings.neurips.cc/paper/2021/hash/c11abfd29e4d9b4d4b566b01114d8486-Abstract.html。

[Ho+22] J. Ho, T. Salimans, A. A. Gritsenko, W. Chan 等。“视频扩散模型”。载于：NeurIPS。2022年。网址：http://papers.nips.cc/paper%5C_files/paper/2022/hash/39235c56aef13fb05a6adc95eb9d8d66-Abstract-Conference.html。[Hol+20] P. Holl、V. Koltun、K. Um 和 N. Thuerey。“phiflow：一种通过物理模拟进行深度学习的可微偏微分方程求解框架”。载于：NeurIPS研讨会。第2卷。2020年。[Höp+22] T. Höppe、A. Mehrjou、S. Bauer、D. Nielsen 和 A. Dittadi。“用于视频预测与补全的扩散模型”。载于：CoRR abs/2206.07696（2022年）。数字对象唯一标识符：10.48550/ arXiv.2206.07696。网址：https://doi.org/10.48550/arXiv.2206.07696。[HTK20] P. Holl、N. Thuerey 和 V. Koltun。“利用可微物理学习控制偏微分方程”。载于：第八届国际学习表征会议。OpenReview.net，2020年。网址：https://openreview.net/forum?id=HyeSin4FPB。[Hyv05] A. Hyvärinen。“通过分数匹配估计非归一化统计模型”。载于：机器学习研究期刊6（2005年），第695–709页。网址：http://jmlr.org/papers/ v6/hyvarinen05a.html。[KCT23] G. Kohl、L.-W. Chen 和 N. Thuerey。“使用自回归条件扩散模型进行湍流模拟”。载于：arXiv:2309.01745（2023年）。[Kid+21] P. Kidger、J. Foster、X. Li 和 T. J. Lyons。“作为无限维生成对抗网络的神经随机微分方程”。载于：《第38届国际机器学习会议论文集》，ICML 2021，2021年7月18日至24日，线上会议。第139卷。《机器学习研究论文集》。PMLR，2021年，第5453–5463页。网址：http://proceedings.mlr.press/ v139/kidger21b.html。[Koc+21] D. Kochkov、J. A. Smith、A. Alieva、Q. Wang 等。“机器学习加速计算流体力学”。载于：CoRR abs/2102.01010（2021年）。网址：https:// arxiv.org/abs/2102.01010。[KPB20] I. Kobyzev、S. J. Prince 和 M. A. Brubaker。“归一化流：当前方法的介绍与综述”。载于：IEEE模式分析与机器智能汇刊43.11（2020年），第3964–3979页。[KVE21] B. Kawar、G. Vaksman 和 M. Elad。“SNIPS：随机求解含噪逆问题”。载于：神经信息处理系统进展。2021年，第21757–21769页。网址：
h
t
t
p
s://
p
r
oceedings.neurips.cc/paper/2021/hash/b5c01503041b70d41d80e3dbe31bbd8c-Abstract.html。[LCT22] B. List、L.-W. Chen 和 N. Thuerey。“利用可微流体求解器进行学习型湍流建模：基于物理的损失函数与优化时域”。载于：流体力学杂志949（2022年），A25。[Li+21] Z. Li、N. B. Kovachki、K. Azizzadenesheli、B. Liu 等。“用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子”。载于：第9届国际学习表征会议，ICLR 2021，线上会议，奥地利，2021年5月3日至7日。OpenReview.net，2021年。网址：https://openreview.net/forum?id=c8P9NQVtmnO。[Li+22] S. Li、Z. Huang、T. Du、H. Su 等。“利用可微物理发现软体操控的接触点”。载于：国际学习表征会议（2022年）。[LN89] D. C. Liu 和 J. Nocedal。“关于用于大规模优化的有限内存BFGS方法”。载于：数学规划45.1-3（1989年），第503–528页。数字对象唯一标识符：10.1007/BF01589116。网址：https://doi.org/10.1007/BF01589116。[LP22] J. Lim 和 D. Psaltis。“MaxwellNet：基于麦克斯韦方程组的物理驱动深度神经网络训练”。载于：应用光子学7.1（2022年），第011301页。[Lu+21] L. Lu、P. Jin、G. Pang、Z. Zhang 和 G. E. Karniadakis。“基于算子通用逼近定理，通过DeepONet学习非线性算子”。载于：自然机器智能3.3（2021年），第218–229页。数字对象唯一标识符：10.1038/S42256-021-00302-5。网址：https://doi.org/10.1038/S42256-021-00302-5。[Mar+96] G. J. Martyna、M. E. Tuckerman、D. J. Tobias 和 M. L. Klein。“扩展系统动力学的显式可逆积分器”。载于：分子物理学87.5（1996年），第1117–1157页。[Mor+18] J. Morton、A. Jameson、M. J. Kochenderfer 和 F. Witherden。“非定常流动的深度动力学建模与控制”。载于：神经信息处理系统进展。2018年。

[MRO20] D. Maoutsa、S. Reich 和 M. Opper。“通过梯度对数密度估计求解福克-普朗克方程的相互作用粒子解”。载于：熵22.8（2020年），第802页。数字对象唯一标识符：10.3390/e22080802。网址：https://doi.org/10.3390/e22080802。[Øks03] B. Øksendal。“随机微分方程”。载于：《随机微分方程》。Springer，2003年，第65–84页。[Pap+21] G. Papamakarios、E. Nalisnick、D. J. Rezende、S. Mohamed 和 B. Lakshminarayanan。“用于概率建模与推理的归一化流”。载于：《机器学习研究期刊》22.1（2021年），第2617–2680页。[Par21] É. Pardoux。《随机偏微分方程：导论》。Springer，2021年。[Pfa+20] T. Pfaff、M. Fortunato、A. Sanchez-Gonzalez 和 P. Battaglia。“利用图网络学习基于网格的模拟”。载于：国际学习表征会议（2020年）。[Ram+20] Z. Ramzi、B. Remy、F. Lanusse、J. Starck 和 P. Ciuciu。“用于逆问题不确定性量化的去噪分数匹配”。载于：CoRR abs/2011.08698（2020年）。网址：https://arxiv.org/abs/2011.08698。[SC20] S. Schoenholz 和 E. D. Cubuk。“Jax md：一个可微物理框架”。载于：神经信息处理系统进展33（2020年），第11428–11441页。[SE19] Y. Song 和 S. Ermon。“通过估计数据分布梯度进行生成建模”。载于：神经信息处理系统进展。2019年，第11895–11907页。网址：
h
t
t
ps://proceedings.neurips.cc/paper/2019/hash/3001ef257407d5a371a96dcd947c7d93-Abstract.html。[SLG22] C. Salvi、M. Lemercier 和 A. Gerasimovics。“神经随机偏微分方程：连续时空动力学的分辨率不变学习”。载于：NeurIPS。2022年。网址：http://papers.nips.cc/paper%5C_files/paper/2022/hash/091166620a04a289c555f411d8899049-Abstract-Conference.html。[Soh+15] J. Sohl-Dickstein、E. A. Weiss、N. Maheswaranathan 和 S. Ganguli。“利用非平衡热力学进行深度无监督学习”。载于：《第32届国际机器学习会议论文集》。第37卷。《JMLR研讨会与会议论文集》。JMLR.org，2015年，第2256–2265页。网址：http://proceedings.mlr.press/v37/sohl-dickstein15.html。[Son+19] Y. Song、S. Garg、J. Shi 和 S. Ermon。“切片得分匹配：一种可扩展的密度与分数估计方法”。载于：《第35届人工智能不确定性会议论文集》。第115卷。《机器学习研究论文集》。AUAI出版社，2019年，第574–584页。网址：http://proceedings.mlr.press/v115/song20a.html。[Son+21a] Y. Song、C. Durkan、I. Murray 和 S. Ermon。“基于分数的扩散模型的最大似然训练”。载于：神经信息处理系统进展。2021年，第1415–1428页。网址：
h
ttps://proceedings.neurips.cc/paper/2021/hash/0a9fdbb17feb6ccb7ec405cfb85222c4-Abstract.html。[Son+21b] Y. Song、J. Sohl-Dickstein、D. P. Kingma、A. Kumar 等。“通过随机微分方程进行基于分数的生成建模”。载于：第9届国际学习表征会议。OpenReview.net，2021年。网址：https://openreview.net/forum?id=PxTIG12RRHS。[Son+22] Y. Song、L. Shen、L. Xing 和 S. Ermon。“利用基于分数的生成模型求解医学成像中的逆问题”。载于：第10届国际学习表征会议。OpenReview.net，2022年。网址：https://openreview.net/forum?id=vaRCHVj0uGI。[Sta+21] K. Stachenfeld、D. B. Fielding、D. Kochkov、M. Cranmer 等。“用于湍流的学习型模拟器”。载于：国际学习表征会议。2021年。[Thu+21] N. Thuerey、P. Holl、M. Mueller、P. Schnell 等。《基于物理的深度学习》。WWW，2021年。网址：https://physicsbaseddeeplearning.org。[Tom+17] J. Tompson、K. Schlachter、P. Sprechmann 和 K. Perlin。“利用卷积网络加速欧拉流体模拟”。载于：第5届国际学习表征会议研讨会论文集。OpenReview.net，2017年。网址：https://openreview.net/forum?id=ByH2gxrKl。

[Um+20] K. Um、R. Brand、Y. (Fei、P. Holl 和 N. Thuerey。《循环内求解器：从可微物理中学习并与迭代偏微分方程求解器交互》。载于：神经信息处理系统进展。2020年。网址：https://proceedings.neurips.cc/paper/2020/hash/43e4e6a6f341e00671e123714de019a8-Abstract.html。[Vin11] P. Vincent。《分数匹配与去噪自编码器之间的联系》。载于：神经计算23.7（2011年），第1661–1674页。[YSM22] R. Yang、P. Srivastava 和 S. Mandt。《用于视频生成的扩散概率建模》。载于：*CoRR* abs/2203.09481（2022年）。数字对象唯一标识符：10.48550/arXiv.2203.09481。网址：https://doi.org/10.48550/arXiv.2203.09481。[ZC21] Q. Zhang 和 Y. Chen。《扩散归一化流》。载于：神经信息处理系统进展34（2021年），第16280–16291页。[ZDG96] K. Zhou、J. Doyle 和 K. Glover。《鲁棒与最优控制》。载于：控制工程实践 4.8（1996年），第1189–1190页。

附录

A 证明与训练方法

下面我们总结主论文中的问题表述，并详细介绍训练流程以及我们方法的推导。

问题设定 设 $(\Omega\ \mathcal{F},\ P)$ 为一个概率空间，且 $W(t)\ =(W_1(t)\ ...,\ W_D(t))^T$ 是一个 D 维布朗运动。此外，设 $\mathbf{x}_0$ 是一个 $\mathcal{F}_0$-可测、取值于 $\mathbb{R}^D$ 的随机变量，其分布为 p_0，并表示初始模拟状态。我们考虑由随机微分方程（SDE）建模的物理系统在 $0 \leq t \leq T$ 下的时间演化：

$$d\mathbf{x} = \mathcal{P}(\mathbf{x})dt + g(t)dW \tag{11}$$

其初始值为 $\mathbf{x}_0$，漂移 $\mathcal{P}$：$\mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D$ 为博雷尔可测，扩散 g：$[0,T] \to \mathbb{R}_{\geq 0}$。该 SDE 将初始状态在时间 0 的边缘分布 p_0 转化为时间 T 时终止状态的边缘分布p_T。

此外，我们假设已从上述 SDE 中采样得到 N 条长度为 M 的轨迹，时间离散化固定为 $0 \leq t_0 < t_1 < ... < t_M \leq T$，区间为 $[0,T]$，并将其收集到训练数据集 $\{(\mathbf{x}_{t_m}^{(n)})_{i=0}^{M}\}_{n=0}^{N}$ 中。为简单起见，我们假设所有时间步的间隔相等，即 $t_{m+1} - t_m := \Delta t$。此外，在下文中，我们使用记号 $\mathbf{x}_{\ell:m}$ 表示 $0 \leq \ell < m \leq M$，指代轨迹 $(\mathbf{x}^{t_\ell},\ \mathbf{x}^{t_{\ell+1}},\ ...,\ \mathbf{x}^{t_m})$。

假设在本文中，我们做出一些额外假设，以确保随机微分方程（11）存在唯一解，并确保欧拉–丸山方法的强收敛。具体而言：

- 来自的样本具有有限方差 p_0：$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_0 \sim p_0}[||\mathbf{x}_0||_2^2] < \infty$
- $\mathcal{P}$的利普希茨连续性：$\exists K_1 > 0\, \forall \mathbf{x},\ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$：$||\mathcal{P}(\mathbf{x}) - \mathcal{P}(\mathbf{y})||_2 \leq K_1||\mathbf{x} - \mathbf{y}||_2$
- g的利普希茨连续性：$\exists K_2 > 0\, \forall t,\ s \in [0,T]$：$|g(t) - g(s)| \leq K_3|t-s|$
- 线性增长条件：$\exists K_3 > 0\, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$：$||\mathcal{P}(\mathbf{x})||_2 \leq K_3(1 + ||\mathbf{x}||_2)$
- g 有界：$\exists K_4 > 0\, \forall t \in [0,T]$：$|g(t)| \leq K_4$

欧拉–丸山方法 使用欧拉–丸山步进，我们可以模拟随机微分方程 (11) 的路径，这与常微分方程 (ODE) 的做法类似。给定初始状态 $\mathbf{X}_{t_0}$，令 $\hat{}\mathbf{X}_{t_0}^{\Delta t} = \mathbf{X}_{t_0}$，并递归定义

$$\hat{\mathbf{X}}_{t_{m+1}}^{\Delta t} \leftarrow \hat{\mathbf{X}}_{t_m}^{\Delta t} + \Delta t\, \mathcal{P}(\hat{\mathbf{X}}_{t_m}^{\Delta t}) + \sqrt{\Delta t}\, g(t_m)\, z_{t_m}, \tag{12}$$

其中 z_{t_m}是独立同分布的，且服从 $z_{t_m} \sim \mathcal{N}(0, I)$。对于 $t_i \leq t < t_{i+1}$，我们将欧拉–丸山方法的分段常值解定义为 $\hat{}\mathbf{X}_t^{\Delta t} := \hat{}\mathbf{X}_{t_i}^{\Delta t}$。令 $\mathbf{X}_t$ 表示随机微分方程 (11) 的解。那么，欧拉–丸山解 $\hat{}\mathbf{X}_t^{\Delta t}$强收敛于$\mathbf{X}_t$。

引理 A.1。 *[欧拉–丸山方法的强收敛]* 考虑欧拉–丸山方法的分段常值解 $\hat{}X_t^{\Delta t}$。存在一个常数 C 使得

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \mathbb{E}[||X_t - \hat{X}_t^{\Delta t}||_2] \leq C\sqrt{\Delta t}. \tag{13}$$

证明。 参见 Kloeden 等人 [Klo+92，第 10.2 页。2] □

A.1 单步损失与分数匹配目标

定理 A.2。 考虑一个数据集 $\{\mathbf{x}_0^{(n)} :\ _m\}_{n=1}^{N}$ 其轨迹由随机微分方程 (11)采样得到。则单步损失

$$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta) := \frac{1}{M}\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{0:M}}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\left[||\mathbf{x}_m - \{\mathbf{x}_{m+1} + \Delta t\,[-\mathcal{P}(\mathbf{x}_{m+1}) + s_\theta(\mathbf{x}_{m+1}, t_{m+1})]\}||^2\right]\right] \tag{14}$$

等价于最小化分数匹配目标

$$\mathcal{J}(\theta) := \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{x}_t}[||\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x}) - \tilde{s}_\theta(\mathbf{x}, t)||_2^2]dt, \tag{15}$$

其中 $\tilde{s}_\theta(\mathbf{x}\ t) = s_\theta(\mathbf{x}\ t)/g^2(t)$ 当 $\Delta t \to 0$ 时。

证明。

"⇐": 考虑满足 $\tilde{s}_{\theta^*}(\mathbf{x}\ t) \equiv \nabla_{\mathbf{x}} \log\ p_t(\mathbf{x})$ 的 θ^*，它使分数匹配目标 $\mathcal{J}(\theta)$ 最小化。然后固定一个时间步 t，并从数据集中采样 $\mathbf{x}_t$ 和 $\mathbf{x}_{t+\Delta t}$。基于方程 (14) 的概率流解$\mathbf{x}_t^p$ 为

$$\mathbf{x}_t^p := \mathbf{x}_{t+\Delta t} + \Delta t\left[-\mathcal{P}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) + s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)\right]. \tag{16}$$

同时，我们知道边缘似然从 $p_{t+\Delta t}$ 到 p_t 的变换遵循反向时间随机微分方程 [并且82]

$$d\mathbf{x} = \left[\mathcal{P}(\mathbf{x}) + g^2(t)\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})\right] dt + g(t)dW, \tag{17}$$

该方程从 T 反向运行至 0。用 $\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t}$ 表示在时间 t 处、以时间 $t+\Delta t$ 的 $\mathbf{x}_{t+\Delta t}$ 为初始值的欧拉–丸山方法的解。

利用平方范数的三角不等式，我们可以写成

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] \le 2 \lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t}||_2^2\right] + 2 \lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right]. \tag{18}$$

由于欧拉–丸山方法的强收敛性，对于方程 (18) 中界的第一项，我们有

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t}||_2^2\right] = 0 \tag{19}$$

与 θ 无关。同时，对于欧拉-丸山离散化，我们可以写成

$$\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} = \mathbf{x}_{t+\Delta t} + \Delta t\left[-\mathcal{P}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) + g^2(t+\Delta t)\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t})\right] \tag{20}$$

$$+g(t+\Delta t)\sqrt{\Delta t} z_{t+\Delta t}, \tag{21}$$

其中 $z_{t+\Delta t}$ 是标准高斯分布，即 $z_{t+\Delta t} \sim \mathcal{N}(0, I)$。因此，我们可以简化方程 (18) 中界的第二项

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[\left|\left|\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} - \mathbf{x}_t^p\right|\right|_2^2\right] \tag{22}$$

$$= \lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t+\Delta t}\sim p_{t+\Delta t}, z\sim\mathcal{N}(0,I)}\left[\left|\left|\Delta t\, g(t+\Delta t)^2\left[\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t})\right.\right.\right. \tag{23}$$

$$\left.\left.\left. -\tilde{s}_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)\right] + g(t+\Delta t)\sqrt{\Delta t}\, z\right|\right|_2^2\Bigg]. \tag{24}$$

如果 θ^* 使分数匹配目标最小化，那么 $\tilde{s}_{\theta^*}(\mathbf{x}\ t) \equiv \nabla_{\mathbf{x}} \log\ p_t(\mathbf{x})$，因此上式等价于

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}_z[||\sqrt{\Delta t}\, g(t+\Delta t)\, z||_2^2] = 0. \tag{25}$$

结合方程 (18)、(19) 和 (25)，可得

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] = 0. \tag{26}$$

此外，由于 g 有界，我们甚至有

$$\mathbb{E}[||\sqrt{\Delta t}\, g(t+\Delta t)\, z||_2^2] \le \mathbb{E}[||\sqrt{\Delta t}\, K_4\, z||_2^2] = \mathbb{E}[||K_4\, z||_2^2]\Delta t. \tag{27}$$

对于 $\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta)$，利用上述界（27）以及欧拉–丸山方法的强收敛性，我们因此可以推导出以下界

$$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta) = \frac{1}{M}\mathbb{E}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\left[||\mathbf{x}_m + \Delta t\left[-\mathcal{P}(\mathbf{x}_{m+1}) + s_\theta(\mathbf{x}_{m+1}, t_{m+1})\right]||^2\right]\right] \tag{28}$$

$$\le \frac{1}{M}\, M\, 2\left[C\sqrt{\Delta t} + \mathbb{E}_z[||K_4\, z||_2^2]\Delta t\right], \tag{29}$$

这意味着，当 $\Delta t \to 0$时，$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta) \to 0$。

“⇒”：根据“⇐”中的定义，令 θ^* 表示一个极小化器，使得当$\Delta t \to 0$时，$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta) \to 0$，即我们假设存在一个序列 Δt_1、Δt_2、.....，满足 $\lim_{n\to\infty} \Delta t_n = 0$，以及一个序列 θ_1、θ_2、.....，其中 θ_n 是目标函数 $\mathcal{L}^{\Delta t_n}$single(θ)的全局极小化器，该目标函数取决于步长 Δt_n。若存在 θ^* 使得$s_{\theta^*}(\mathbf{x}\ t) \equiv \nabla_{\mathbf{x}} \log\ p_t(\mathbf{x})$，那么$\mathcal{L}^{\Delta t_n}$single($\theta_n$) $\leq \mathcal{L}^{\Delta t_n}$single($\theta^*$)。由“⇐”可知，$\lim_{n\to\infty} \mathcal{L}^{\Delta t_n}$single($\theta^*$) $= 0$，因此 $\lim_{n\to\infty} \mathcal{L}^{\Delta t_n}$single($\theta_n$) $= 0$。这意味着，当$\Delta t \to 0$时，$\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta)$中的每一项也都趋于零，即 $\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] = 0$. 再次，根据平方范数的三角不等式，我们有

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] \leq 2 \lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t}||_2^2\right] + 2 \lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right]. \tag{30}$$

根据欧拉–丸山方法的强收敛性以及 $\theta = \theta^*$，我们得到

$$\lim_{\Delta t\to 0} \mathbb{E}\left[||\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] = 0. \tag{31}$$

同时，对于固定的 $\Delta t > 0$，我们可以计算

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[||\hat{\mathbf{x}}_t^{\Delta t} - \mathbf{x}_t^p||_2^2\right] && (32)\\
=\ &\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t+\Delta t}, z\sim\mathcal{N}(0,I)}[||\Delta t\, g(t+\Delta t)^2\, [\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) && (33)\\
&\qquad - s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)] + \sqrt{\Delta t}\, g(t+\Delta t)\, z||_2^2] && (34)\\
=\ &\Delta t\, g(t+\Delta t)\, \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t+\Delta t}, z\sim\mathcal{N}(0,I)}[||\Delta t^{3/2}\, g(t+\Delta t)^{5/2}\, [\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) && (35)\\
&\qquad - s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)] + z||_2^2]. && (36)
\end{aligned}$$

对于固定的$\mathbf{x}_{t+\Delta t}$，方程 (36) 中 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$ 的分布对应于一个非中心卡方分布 [JKB95，第 13 章。4], 其均值可以计算为

$$\mathbb{E}_{z\sim\mathcal{N}(0,I)}\left[\left|\left|\Delta t^{3/2}\, g(t+\Delta t)^{5/2}\, [\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) - s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)] + z\right|\right|_2^2\right] \tag{37}$$

$$= \left|\left|\Delta t^{3/2}\, g(t+\Delta t)^{5/2}\, [\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t}) - s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)]\right|\right|_2^2 + D. \tag{38}$$

对于每个 $\Delta t > 0$，当且仅当 $\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t+\Delta t}(\mathbf{x}_{t+\Delta t})$ $= s_\theta(\mathbf{x}_{t+\Delta t}, t+\Delta t)$ 时，上式达到最小值。

□

A.2 多步损失与最大似然训练

现在，我们将上述单步形式扩展到多个步骤，并讨论它与最大似然训练的关系。为此，我们考虑所提出的概率流常微分方程，其定义为

$$d\mathbf{x} = [\mathcal{P}(\mathbf{x}) + s_\theta(\mathbf{x}, t)]\, dt \tag{39}$$

并且，对于 $t_i < t_j$，将 $p^{t_j,\ \text{常微分方程}\ t_i}$ 定义为如下分布：对 $\mathbf{x} \sim p_{t_j}$ 进行采样，并利用网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$，按照方程 (7) 将概率流向后积分，直至 t_i。我们可以选择两个任意时间点 t_i 和 t_j，满足 $t_i < t_j$，因为我们不要求模拟具有固定的起始和结束时间。

概率流常微分方程 (7) 的最大似然训练目标可以写成最大化

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}\sim p_{t_i}}[\log p_{t_i}^{p_{t_j},\,\text{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i})]. \tag{40}$$

我们提出的多步损失基于滑动窗口大小 S，它表示我们旨在通过概率流常微分方程(7)重建的子轨迹长度。多步损失定义为

$$\mathcal{L}_{\text{multi}}(\theta) := \frac{1}{M}\, \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{0:M}}\left[\sum_{m=0}^{M-S+1}\left[||\mathbf{x}_{m:m+S-1} - \hat{\mathbf{x}}_{m:m+S-1}||_2^2\right]\right], \tag{41}$$

其中，我们通过从训练数据集中采样来计算期望，$\mathbf{x}_{0:m}$，而 $\hat{}\mathbf{x}^{i:i+S-1}$ 是按以下递归方式定义的预测子轨迹

$$\hat{\mathbf{x}}_{i+S} = \mathbf{x}_{i+S} \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{x}}_{i+S-1-j} = \hat{\mathbf{x}}_{i+S-j} + \Delta t \left[-\mathcal{P}(\hat{\mathbf{x}}_{i+S-j}) + s_\theta(\hat{\mathbf{x}}_{i+S-j}, t_{i+S-j})\right]. \quad (42)$$

接下来，我们证明多步损失 (4) 最大化了最大似然训练目标 (40) 的一个变分下界。

定理 A.3. 考虑一个数据集 $\{\mathbf{x}_0^{(n)}{}_{:m}\}_{n=1}^N$，其轨迹是从随机微分方程 (11)中采样得到的。那么，多步损失 (4) 最大化了概率流常微分方程 (40) 的最大似然训练目标的一个变分下界，其中 $\Delta t \to 0$。

令 $\mu_{t_i}^{\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}^{t_j})$ 表示概率流常微分方程 (7) 从时间 t_j反向积分至 t_i、初始值为$\mathbf{x}^{t_j}$时的解。

对于最大似然目标，我们可以推导出一个变分下界

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log p_{t_i}^{t_j,\,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i})\right] &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log\left(\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}}\left[p_{t_i}^{t_j,\,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_j})\right]\right)\right] && (43)\\
&= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log\left(\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{t_i}}\left[\frac{p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i})}{p_{t_j}(\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{\mathbf{t_i}})}p_{t_i}^{t_j,\,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_j})\right]\right)\right] && (44)\\
&\geq \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log\left(\frac{p_{t_j}(\mathbf{x}_{t_j})}{p_{t_j}(\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{\mathbf{t_i}})}p_{t_i}^{t_j,\,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_j})\right)\right] && (45)\\
&= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log\left(\frac{p_{t_j}(\mathbf{x}_{t_j})}{p_{t_j}(\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{\mathbf{t_i}})}\right) + \log\left(p_{t_i}^{t_j\,,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_j})\right)\right], && (46)
\end{aligned}$$

其中，不等式由詹森不等式得出。由于只有 $p^{t_j\,,\text{常微分方程}\,t_i}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}^{t_j})$ 依赖于 θ，因此这等价于最大化

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{t_i}}\left[\log\left(p_{t_i}^{t_j\,,\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_j})\right)\right]. \quad (47)$$

概率流常微分方程是无似然的，因此难以优化。因此，我们通过将常微分方程分布与一个高斯核卷积来扰动这些分布，从而放宽目标G_ϵ，其中 $\epsilon > 0$较小，参见例如 Kersting 等人 [Ker+20、高斯常微分方程滤波]。这样，我们就可以将条件分布 $p^{t_j\,,\text{常微分方程}\,t_i}|\mathbf{x}^{t_j}$建模为高斯分布，其均值为 $\mu^{t_j,\,\text{常微分方程}\,t_i}(\mathbf{x}^{t_j})$，方差为 $\sigma^2 = \epsilon$。随后，最大化 (47) 就转化为匹配该分布的均值，即最小化

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_i}}\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{t_j}|\mathbf{x}_{t_i}}\left[||\mathbf{x}_{t_i} - \mu_{t_i}^{\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_j})||_2^2\right] \quad (48)$$

独立于 $\epsilon > 0$。由于这对任何时间步 $t_j > t_i$ 及其对应的模拟状态$\mathbf{x}^{t_j}$（给定$\mathbf{x}^{t_i}$）都成立，因此我们可以选取这些配对（$\mathbf{x}^{t_i}$,$\mathbf{x}^{t_{i+1}}$）、（$\mathbf{x}^{t_i}$,$\mathbf{x}^{t_{i+2}}$）、（$\mathbf{x}^{t_i}$,$\mathbf{x}^{t_{i+3}}$）等。然后，我们可以考虑最大滑动窗口大小内各个目标函数之和，对它们进行联合优化

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{i:j}}\left[\sum_{k=i}^{j-1}||\mathbf{x}_{t_k} - \mu_{t_k}^{\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}_{t_j})||_2^2\right]. \quad (49)$$

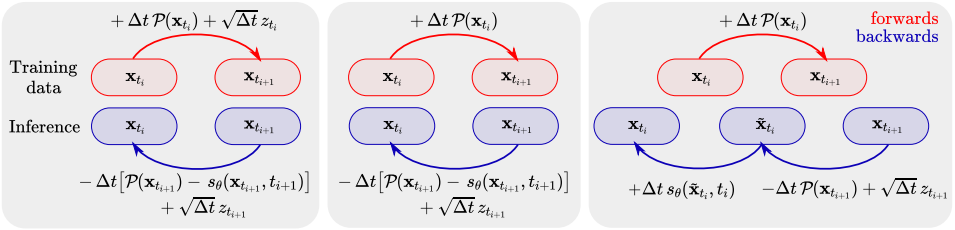
作为 $\Delta t \to 0$，我们通过欧拉方法，在从$\mathbf{x}^{t_i}$开始、滑动窗口为 S 且覆盖轨迹直至$\mathbf{x}^{t_j}$ 的单条轨迹上计算项 $\mu_{t_k}^{\mathrm{ODE}}(\mathbf{x}^{t_j})$，即可以递归定义

$$\hat{\mathbf{x}}_{i+S} = \mathbf{x}_{i+S} \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{x}}_{i+S-1-j} = \hat{\mathbf{x}}_{i+S-j} + \Delta t \left[-\mathcal{P}(\mathbf{x}_{i+S-j}) + s_\theta(\mathbf{x}_{i+S-j}, t_{i+S-j})\right]. \quad (50)$$

通过改变滑动窗口的起始点$\mathbf{x}^{t_i}$，即可得到我们提出的多步损失$\mathcal{L}_{\text{multi}}(\theta)$。

A.3 确定性模拟的去噪分数匹配

到目前为止，我们考虑的都是可以用随机微分方程（即方程（11））建模的物理系统。虽然这种问题设定适用于许多情形，但我们也希望采用类似的



(a) SDE for training data and reverse-time SDE for inference (b) ODE for training data and SDE for inference (c) ODE for training data and physics step + denoising step for inference

图 7：不同物理系统的训练与推理变体。(a) 展示了系统由随机微分方程建模时，采用欧拉-丸山离散化的随机微分方程和反向时间随机微分方程设置。扩散项 $g(t)$ 被吸收到高斯随机变量 $z_t \sim \mathcal{N}(0,\ g(t)^2 I)$ 和网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 中。(b) 中，我们假设训练数据的时间演化是确定性的，即对不含扩散项的物理系统进行建模。然而，在推理时，我们考虑与 (a) 中形式相同的反向时间随机微分方程，其中扩散系数 $g(t)$ 被选作一个超参数，取值取决于添加到数据中的噪声尺度。接着，在 (c) 中，我们将反向的欧拉步拆分为仅物理更新、添加高斯噪声 z，以及通过 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 进行的去噪步骤。

方法来处理确定性系统，即可以将问题写成常微分随机方程的情形

$$d\mathbf{x} = \mathcal{P}(\mathbf{x})dt. \tag{51}$$

对于混沌动力系统，这仍然是一个困难的逆问题，尤其是在轨迹生成后添加的噪声导致信息丢失时。

基于用随机微分方程对物理系统进行建模的训练设置如图 7a 所示。图 7b 和 7c 展示了针对由常微分方程 (51) 建模的确定性物理系统的另外两种数据设置和推理变体。对于正文第 3.1 节和第 3.2 节中的实验，我们采用的设置类似于 (a)；而对于正文第 3.3 节中的浮力驱动流和第 3.4 节中的受迫各向同性湍流，由于系统是确定性的，我们考虑 (c)。
对于这个变体，$-\mathcal{P}(\mathbf{x})$ 和 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 的更新分为两个步骤。从 t_{i+1} 到 t_i 的时间演化完全由物理过程决定。我们向系统添加加性噪声，并执行 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 更新步骤；这可以理解为对当前略有扰动的状态$\tilde{\mathbf{x}}_{t_i}$进行去噪。在这种情况下，我们表明，网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 在训练期间仍能通过去噪分数匹配学得正确的得分 $\nabla_{\mathbf{x}} \log\ p_t(\mathbf{x})$。我们在附录 E 中比较了变体 (b) 和 (c) 在浮力驱动流上的表现。

将物理更新与得分更新分开时，我们按如下方式计算这些更新

$$\hat{\mathbf{x}}_{t_i} = \mathbf{x}_{t_{i+1}} - \Delta t\, \mathcal{P}(\mathbf{x}_{t_{i+1}}) \tag{52}$$

$$\hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i} = \hat{\mathbf{x}}_{t_i} + \sqrt{\Delta t}\, g(t_i)\, z_{t_i} \tag{53}$$

$$\mathbf{x}_{t_i} = \hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i} + \Delta t\, g^2(t_i)\, s_\theta(\hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i}, t_i), \tag{54}$$

其中 $z_{t_i} \sim \mathcal{N}(0,\ I)$。如果物理系统是确定性的，且 Δt 足够小，那么我们可以近似$\mathbf{x}_{t_i} \approx \hat{}\mathbf{x}^{t_i}$，并且暂且假设我们可以写成

$$\hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i} = \mathbf{x}_{t_i} + \sqrt{\Delta t}\, g(t_i)\, z_{t_i}. \tag{55}$$

在这种情况下，我们可以改写式 (14) 中的单步损失 $\mathcal{L}_{\text{single}}(\theta)$，得到去噪分数匹配损失

$$\mathcal{L}_{\text{DSM}}(\theta) := \mathbb{E}_{(\mathbf{x}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_{i+1}})} \left[||\mathbf{x}_{t_i} - \hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i} - \Delta t\, g^2(t_i)\, s_\theta(\hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i}, t_i)||_2^2 \right], \tag{56}$$

这与最小化

$$\mathbb{E}_{(\mathbf{x}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_{i+1}})} \left[||s_\theta(\hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i}, t_i) - \frac{1}{\Delta t\, g^2(t_i)} (\mathbf{x}_{t_i} - \hat{\mathbf{x}}^{\text{noise}}_{t_i})||_2^2 \right]. \tag{57}$$

现在，Vincent [Vin11]提出的思路是，对于分数匹配，我们可以考虑样本 $\mathbf{x}_{t_i}$ 与受损样本 $\tilde{\mathbf{x}}_{t_i}$的联合分布 $p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}, \tilde{\mathbf{x}}_{t_i})$。根据贝叶斯定理，我们可以写出 $p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}, \tilde{\mathbf{x}}_{t_i}) = p_\sigma(\tilde{\mathbf{x}}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i})$。受损样本的条件分布 $p_\sigma(\cdot|\mathbf{x}_{t_i})$ 随后用标准差为 $\sigma = \sqrt{\Delta t}\, g(t_i)$ 的高斯分布建模，即我们可以写作$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \sqrt{\Delta t}\, g(t_i)\, z$其中 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$，与方程 (55) 类似。此外，我们可以将受损数据分布 q_σ 定义为

$$q_\sigma(\tilde{\mathbf{x}}) = \int p_\sigma(\tilde{\mathbf{x}}|\mathbf{x}) p_{t_i}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \tag{58}$$

如果 σ 很小，那么 $q_\sigma \approx p_{t_i}$ 和$\mathrm{KL}(q_\sigma || p_{t_i}) \to 0$ 当 $\sigma \to 0$时。重要的是，在这种情况下，我们可以直接计算 $p_\sigma(\cdot|\mathbf{x})$的得分：

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} \log p_\sigma(\tilde{\mathbf{x}}|\,\mathbf{x}) = \frac{1}{\sigma^2}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}). \tag{59}$$

此外，Vincent [Vin11] 证明的定理意味着，我们可以使用条件分布 $p_\sigma(\cdot|\mathbf{x})$的得分来训练 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$，使其学习 $q_\sigma(\mathbf{x})$的得分，即：

$$\arg\min_\theta \mathbb{E}_{\tilde{\mathbf{x}}\sim q_\theta}\left[||s_\theta(\mathbf{x}, t_i) - \nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} \log q_\sigma(\tilde{\mathbf{x}})||_2^2\right] \tag{60}$$

$$= \arg\min_\theta \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim p_{t_i}, \tilde{\mathbf{x}}\sim p_\sigma(\cdot|\,\mathbf{x})}\left[||s_\theta(\mathbf{x}, t_i) - \nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} \log p_\sigma(\tilde{\mathbf{x}}|\,\mathbf{x})||_2^2\right]. \tag{61}$$

结合(61)和(59)，这恰好等于(57)中的去噪损失 $\mathcal{L}_{\mathrm{DSM}}(\theta)$。由于 $q_\sigma \approx p_{t_i}$，我们还得到 $\nabla_{\mathbf{x}} \log\ q_\sigma(\mathbf{x}) \approx \nabla_{\mathbf{x}} \log\ p_{t_i}(\mathbf{x})$，因此网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t_i)$近似学习到了 p_{t_i}的正确得分。

我们在(55)中假设，$\hat{\mathbf{x}}_{t_i}^{\mathrm{noise}}$受到的唯一扰动是高斯噪声。但事实并非如此，因为我们有

$$\hat{\mathbf{x}}_{t_i}^{\mathrm{noise}} = \mathbf{x}_{t_i} + \sqrt{\Delta t}\, g(t_i)\, z_{t_i} + (\mathbf{x}_{t_{i+1}} - \Delta t\, \mathcal{P}(\mathbf{x}_{t_{i+1}}) - \mathbf{x}_{t_i}), \tag{62}$$

因此，还存在另一个误差来源，即项$\mathbf{x}_{t_{i+1}} - \Delta t\, \mathcal{P}(\mathbf{x}^{t_{i+1}}) - \mathbf{x}^{t_i}$带来的数值误差。条件分布 $p_\sigma(\cdot|\,\mathbf{x})$ 仅近似服从高斯分布。理想情况下，数值误差的影响应由高斯随机噪声主导。然而，即使是微小的误差，也可能在较长的推理步骤序列中累积。为考虑这一点，我们认为应使用多步损失 $\mathcal{L}_{\mathrm{multi}}(\theta)$。训练期间，将物理更新与去噪分开，首先使用反向物理求解器将模拟状态从时间 t_{i+1} 推进到时间 t_i。由于数值精度不足，这只能得到时间 t_i 处模拟状态的一个扰动版本。随后加入少量高斯噪声，并通过去噪网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 将模拟状态投影回分布 p_{t_i}，这也应能消除数值误差。如正文第 2 节所述，这一过程会根据滑动窗口大小及其位置反复进行。

B 架构

残差网络 我们采用一种简单的类 ResNet 架构，用于评分函数 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$，也用作第 3.2 节随机热方程的卷积神经网络基线（残差网络），并在第 3.4 节中再次用于得分 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$。

对于采用周期边界条件的实验，我们使用长度为 16 的周期填充，也就是说，如果底层二维数据的维度为 $N \times N$，那么周期填充后的维度为 $(N + 16) \times (N + 16)$。我们通过在 x 和 y 方向上将输入平铺三次，然后裁剪至正确尺寸，实现周期填充。当该架构表示得分 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 时，时间 t 会作为额外的常数通道与二维输入数据拼接。
我们的网络编码器部分以一个单独的二维卷积编码层开始，该层包含 32 个滤波器，卷积核大小为 4，且不使用激活函数。接下来是连续的四个残差块，每个残差块由二维卷积、LeakyReLU、二维卷积和 LeakyReLU 组成。所有二维卷积均包含 32 个滤波器，卷积核大小为 4，步幅为 1。编码器部分以一个单独的二维卷积结束，该卷积包含一个滤波器，卷积核大小为 1，且不使用激活函数。随后，解码器部分以一个二维转置卷积开始，包含 32 个滤波器，卷积核大小为 4。之后是连续的四个残差块，其结构与编码器残差块类似，但将二维卷积替换为二维转置卷积。最后，使用一个最终的二维卷积，包含一个滤波器，卷积核大小为 5。该模型及其他模型的参数数量见表2。

UNet 对于第 3.2 节的随机热方程实验，我们采用 [Mue+22] 附录 A.1 中所述的带空间丢弃的 UNet 架构，作为贝叶斯神经网络基线。丢弃率设为 0.25。我们不使用批归一化，并采用与 ResNet 架构相同的周期填充。

傅里叶神经算子 我们采用 [Li+21] 提出的 FNO-2D 架构，每个通道使用 $k_{\max,j} = 12$ 个傅里叶模态，将其作为第 3.2 节随机热方程实验和第 3.4 节学习型物理代理模型的基线。

Dil-ResNet Dil-ResNet 架构详见 [Sta+21] 的附录 A。该架构用于表示第 3.3 节含障碍物的浮力驱动流实验中的得分 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$。我们采用与 ResNet 架构类似的方式，将恒定时间通道拼接在一起。此外，通过在两个独立通道中对定义域内的 x-位置和 y-位置进行编码，将位置信息添加到网络输入中。

架构	参数
ResNet	330 754
UNet	706 035
Dil-ResNet	336 915
FNO	465 377

表2：架构汇总。

C 一维玩具随机微分方程

对于第 3.1 节中讨论的一维玩具随机微分方程，我们考虑如下随机微分方程：

$$dx = -\left[\lambda_1 \cdot \operatorname{sign}(x) x^2\right] dt + \lambda_2 dw, \tag{63}$$

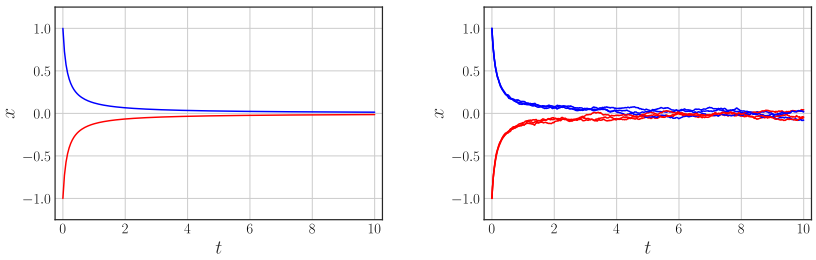
其中 $\lambda_1 = 7$和 $\lambda_2 = 0.03$。相应的反向时间随机微分方程为

$$dx = -\left[\lambda_1 \cdot \operatorname{sign}(x) x^2 - \lambda_2^2 \cdot \nabla_x \log p_t(x)\right] dt + \lambda_2 dw. \tag{64}$$

在整个实验中，p_0 是一个分类分布，我们以相同的概率抽取 1 或 -1。图 8 展示了使用欧拉–丸山方法模拟该随机微分方程得到的轨迹。轨迹从 1 或 -1 开始，并随着 t 增加而趋近于 0。

神经网络架构 我们使用一个由 θ 参数化的神经网络 $s_\theta(x,\ t)$，通过单步损失、多步损失、隐式得分匹配 [Hyv05、ISM]以及带方差缩减的切片得分匹配 [Son+19、SSM-VR]来近似得分。所有情况下，神经网络都是一个简单的多层感知机，采用 ELU 激活函数，包含五个隐藏层，神经元数量依次为 30、30、25、20，最后一个隐藏层为 10。

我们使用 Adam 优化器，并采用原论文 [KB15] 中描述的标准超参数。学习率、批量大小和训练轮数取决于数据集大小（使用 2 500 条轨迹时为 100%、10% 或 1%），并经过选择以确保训练损失收敛。



(a) $\lambda_2 = 0$　　(b) $\lambda_2 = 0.03$

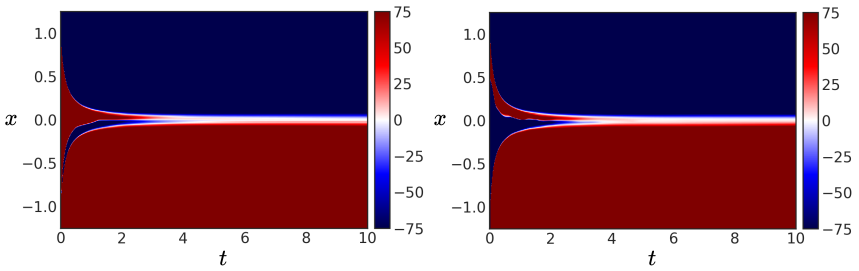
图 8：随机微分方程 (63) 的轨迹，其中 $\lambda_2 = 0$(a) 和 $\lambda_2 = 0.03$ (b)。

训练——单步损失 对于单步损失和所有数据集大小，我们训练 250 轮，学习率为 10e-3，批量大小为 256。第一阶段中，我们仅保留轨迹中的每第 5 个点，并丢弃其余点。随后，我们使用相同的批量大小和 10e-4 的学习率再次训练 250 轮，但保留所有点。最后，我们以 10e-5 的学习率对网络进行微调，训练 750 轮。

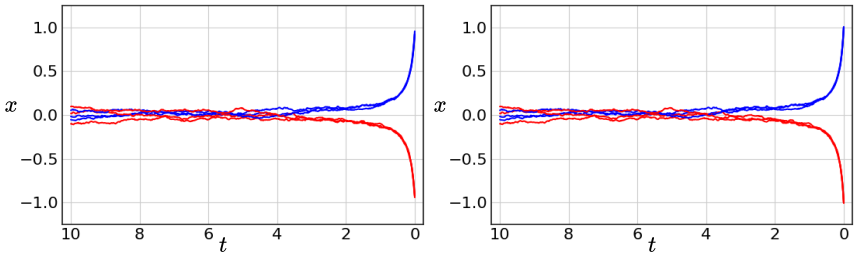
训练——多步损失 对于多步损失和 100% 的数据集，我们首先使用单步损失进行训练，这相当于窗口大小为 2 的滑动窗口。我们先以 512 的批量大小和 10e-3 的学习率训练 1 000 轮，只保留轨迹上的每第 5 个点，并丢弃其余点。然后，将学习率降至 10e-4，开始使用滑动窗口大小为 $S = 2$ 进行训练，并每训练 1 000 轮将其增加 1，直到 $S_{\max} = 10$。在此阶段，我们使用所有点进行训练，不移除任何点。

训练——隐式得分匹配 对于 ISM，我们使用 JAX 中的反向模式自动微分（jax.jacrev）计算偏导数 $\partial s_\theta(\mathbf{x})_i / \partial \mathbf{x}_i$。对于 100% 和 10% 的数据集，我们以 10e-3 的学习率和 10 000 的批量大小训练 2 000 轮。然后，我们以 10e-4 的学习率再训练 2000 轮。对于 1% 的数据集，将训练轮数增加至 20 000。

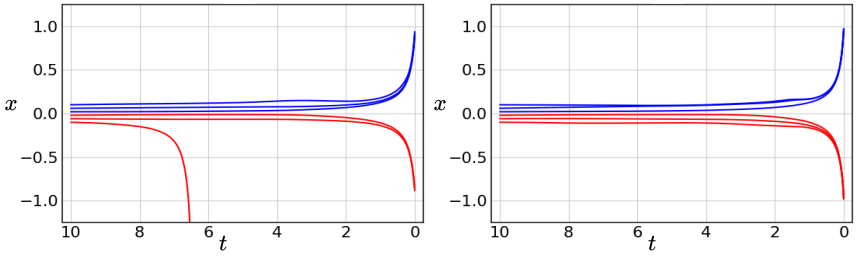
训练——SSM-VR 对于带方差缩减的切片得分匹配 [Son+19，SSM-VR], 采用与 ISM 相同的训练设置。



(a) ISM 学得的得分。 (b) 多步学得的得分。



(c) ISM 反向时间随机微分方程轨迹。 (d) 多步反向时间随机微分方程轨迹。



(e) ISM 概率流轨迹。 (f) 多步概率流轨迹。

图 9：隐式得分匹配（ISM，左）与我们提出的多步损失训练方法（多步，右）的比较。(a) 和 (b) 中的颜色映射截断至 [-75, 75]。

方法	概率流常微分方程			反向时间随机微分方程		
	数据集大小			数据集大小		
	100%	10%	1%	100%	10%	1%
多步	**0.97**±0.04	**0.91**±0.05	**0.81**±0.01	**0.99**±0.01	0.94±0.02	**0.85**±0.06
单步	0.78±0.16	0.44±0.13	0.41±0.13	0.93±0.05	0.71±0.10	0.75±0.10
ISM	0.19±0.05	0.15±0.15	0.01±0.01	0.92±0.05	0.94±0.01	0.52±0.22
SSM-VR	0.17±0.16	0.49±0.24	0.27±0.47	0.88±0.06	0.94±0.06	0.67±0.23

表 3：对三次运行取平均的 1 000 条预测轨迹的后验度量 Q

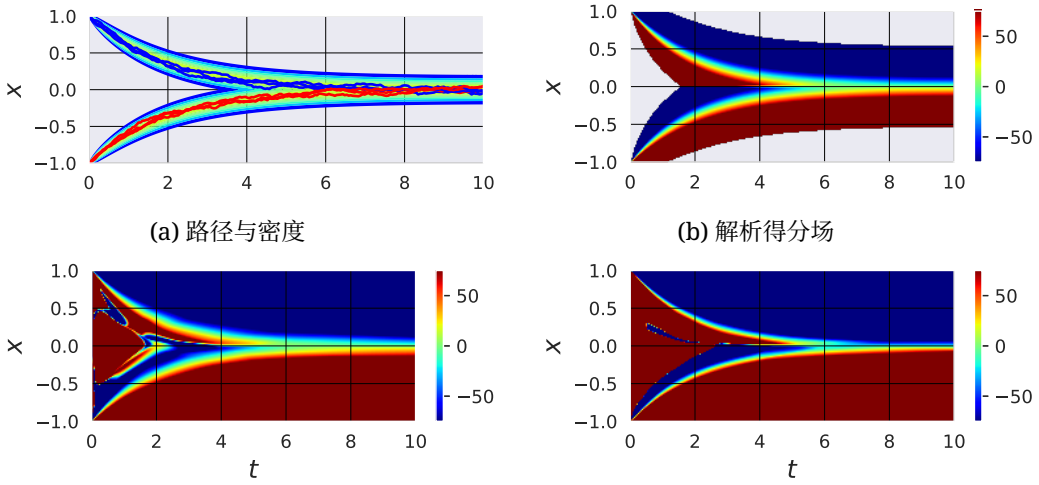
比较 我们在图 9 中直接比较了 ISM 与多步损失在完整数据集上训练得到的反向时间随机微分方程轨迹和概率流轨迹的学习得分。图 9a 和图 9b 中 ISM 与多步损失学习到的得分在视觉上非常相似，这表明我们的方法和损失能够学习到正确的得分。总体而言，在对 ISM 和多步损失进行微调后，多步损失生成的轨迹比 ISM 的轨迹更加准确。例如，图 9e 中的一条轨迹发散至负无穷。此外，多步损失生成的轨迹最终会到达 -1 或 1，而 ISM 的轨迹则会逐渐衰减，无法完全精确地到达 -1或 1，概率流常微分方程尤其如此。

主论文表 1 的结果 我们在上方的表 3 中列出了主论文表 1 的标准差。后验度量 Q 对学习得到的得分 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 非常敏感。总的来说，我们提出的多步损失给出了最一致、最可靠的结果。

定理 3.1 的实证验证 对于二次随机微分方程方程 63，解析得分并非平凡，因此难以直接比较学习得到的网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 与真实得分$\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$。不过，我们可以考虑具有仿射漂移的随机微分方程，其形式为

$$dx = -\lambda x dx + g dW \tag{65}$$

其中 $\lambda = 0.5$ 和 $g \equiv 0.04$。由于该随机微分方程是仿射的，且只有两个起始点 -1 和 1，因此我们可以将从 x_0 开始的状态分布写成高斯分布，其均值为 $\mu(t; x_0) = x_0 e^{-\lambda t}$，方差为 $\sigma^2(t;\ x_0) = \frac{g^2}{2\lambda}(1 - e^{-2\lambda t})$, 参见 [Øks03]。于是，在起始点为 x_0 的条件下，时间 t、位置 x 处的得分为 $(x - \mu(t; x_0))/\sigma^2(t; x_0)$。图 10 展示了解析得分，并将其与学习得到的得分进行了比较。单步训练得到的得分与解析得分非常吻合，尤其是在数据密度足够高的区域。



(a) 路径与密度　(b) 解析得分场

(c) 单步训练　(d) 多步训练

图 10：单步训练的得分与解析得分相匹配。(a) 显示了从随机微分方程 (65) 中采样得到的一些路径以及密度的等高线。(b) 为解析得分场，(c) 和 (d) 则分别是通过单步和多步训练学得的得分的可视化结果。多步训练得到的得分对应于更狭窄的高密度区域。这意味着在推理过程中，与单步训练相比，轨迹会更强烈地被拉向训练数据集分布的众数。

D 随机热方程

谱求解器 二维热方程的物理过程可以通过解析方法计算，其中 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d\times d}$。求解器 $\mathcal{P}_h^{\Delta t}(\mathbf{x})$ 使用（经过平移的）傅里叶变换 $\mathcal{F}$，通过固定的 Δt 在时间上向前模拟系统 $\mathbf{x}$。特别地，我们可以这样实现该求解器：

$$\mathcal{P}_h^{\Delta t}(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\left(A(\Delta t) \circ \mathcal{F}(\mathbf{x})\right), \tag{66}$$

其中，$\circ$ 表示逐元素乘法，$A(\Delta t)_{ij} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 是一个元素为$A(\Delta t)_{ij} := \exp\left(-\Delta t \cdot \min(i, j, d-i, j-i)\right)$的矩阵。$\mathbf{x}$ 的功率谱按 $A(\Delta t)$缩小，高频受到的抑制比低频更强（对于 $\Delta t > 0$）。如果向$\mathbf{x}$中添加噪声，则这意味着高频受到的影响尤其大。因此，逆变换（当 $\Delta t > 0$时）会按噪声对各项贡献进行指数缩放，从而使$\mathbf{x}$的重建产生显著失真。

谱损失 我们考虑一种基于二维功率谱密度的谱误差。两幅图像的径向平均功率谱 s_1 和 s_2，是通过计算二维傅里叶变换的绝对值平方得到的，随后根据各点到平移后功率谱中心的距离（以像素为单位）进行平均。我们将谱误差定义为谱密度对数之间的加权差

$$\mathcal{L}(s_1, s_2) = \sum_k w_k |\log(s_{1,k}) - \log(s_{2,k})| \tag{67}$$

使用权重向量 $w \in \mathbb{R}^d$ 和 $w_k = 1$，适用于 $k \leq 10$，否则使用 $w_k = 0$。

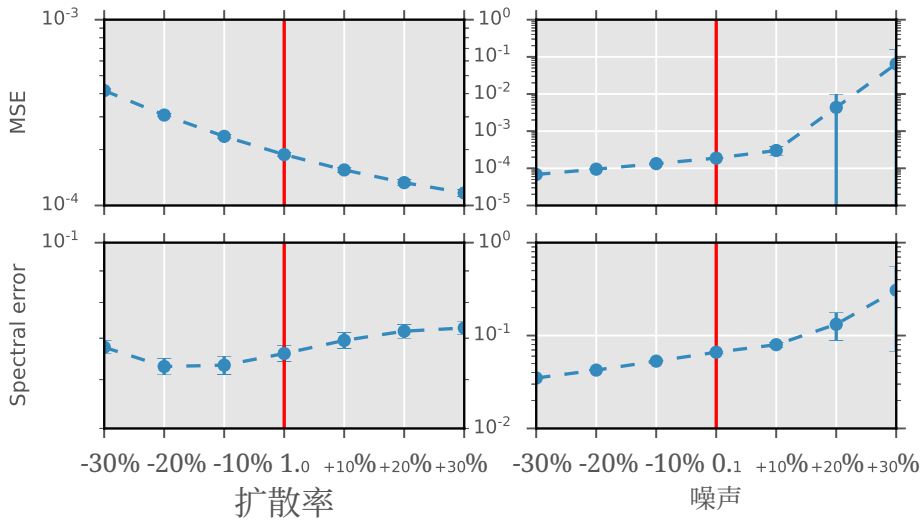
训练 对于推理，我们考虑线性时间离散化 $t_n = n\Delta t$，其中 $\Delta t = 0.2/32$ 和$t_{32} = 0.2$。在训练期间，我们根据 t_n，通过 $t'_n \sim \mathcal{U}(t_n - \Delta t/2,\ t_n + \Delta t/2)$为每个批次抽取随机时间离散化 $0 \leq t_0 < t'_2 < .... < t'_{31} < t_{32}$，用于 $n = 1$，.....，31，并根据时间差 $t_i - t_{i-1}$调整反向物理步骤。在第一个训练阶段，我们考虑采用滑动窗口大小为 $S = 6$，8，.....，32 步的多步损失，每两轮训练增加一次 S。我们使用 Adam 以学习率 10^{-4}更新权重 θ。我们以初始学习率 10^{-4}对网络权重进行微调，训练 80 轮；每 20 轮将学习率降低至原来的 0.5 倍。

s_θ **仅版本** 对于单步损失，该方法与 Rissanen 等人 [RHS22], 提出的经典扩散类模型类似，该模型从热方程的动力学生成数据。尽管如此，其实现细节和方法与多步损失训练类似，只是反向物理步骤 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ 并未明确定义，而是与得分同时由网络$s_\theta(\mathbf{x}\ t)$学习。我们采用与默认变体相同的 ResNet 架构。除反向物理步骤外，训练设置完全相同。虽然在采用多步损失的较大滑动窗口下，网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$训练时不使用任何噪声，但在随机微分方程推理中，我们会向模拟状态添加噪声，而在常微分方程推理中则不添加噪声。

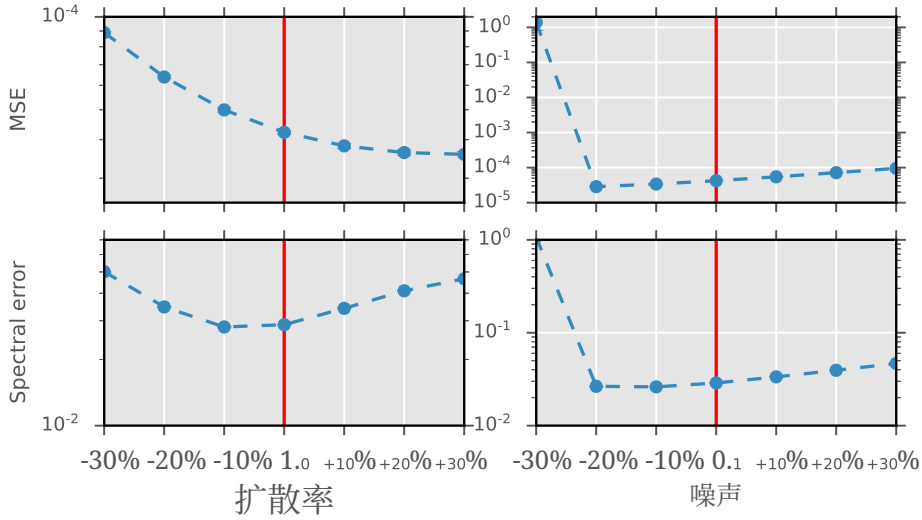
基线方法 所有其他基线方法均使用 Adam 优化器训练 80 轮，初始学习率为 10^{-4}，并每 20 轮将学习率降低至原来的 0.5 倍。对于训练数据，我们考虑由初始状态 $\mathbf{x}_0$ 和终态 $\mathbf{x}_T$构成的热方程解。

测试时分布偏移我们测试了热方程实验中测试时分布偏移的影响。我们针对扩散率 α 和噪声 g 的特定组合训练评分网络 s_θ，并在测试时改变这两个参数。我们相应地调整模拟器和测试用的真实值，以匹配更新后的扩散率和噪声。参见图11。总体而言，参数的小幅变化几乎不会导致过拟合。重建均方误差和谱误差的变化，主要可以归因于任务本身变得更简单或更困难；我们的网络能够很好地泛化到这些变化，例如，噪声更少或扩散率更高都会带来更小的重建误差。

补充结果 我们在图12和图 13中展示了不同方法的预测可视化结果。



(a) 反向时间随机微分方程



(b) 概率流常微分方程

图11：噪声和扩散率的测试时分布偏移。校正网络 s_θ 在扩散率为 $\alpha = 1.0$ 、噪声为 $g \equiv 0.1$的数据上训练。测试时，我们改变测试数据集和模拟器的扩散率，以及推理时的噪声。特别是，较低的谱误差表明该网络能够很好地泛化到物理的新行为。

E 浮力驱动的障碍物流动

对于固定区域 $\Omega \subset [0,1] \times [0,1]$ 内的速度，我们采用半拉格朗日平流；对于热标记密度，我们采用 MacCormack平流。标记场的温度动力学采用 Boussinesq近似进行建模。

训练 我们使用 Adam 优化器和学习率 10^{-4}，以 16 为批量大小训练所有网络。训练开始时，滑动窗口大小为 $S = 2$，之后每 30 个训练轮数增加 2，直到达到 $S_{\max} = 20$。

分别更新与联合更新 我们比较了反向物理步骤和校正函数的联合更新 s_θ（见图 7b），以及反向物理步骤和校正函数的分别更新（见图 7c）。关于重建均方误差和感知距离的评估结果见

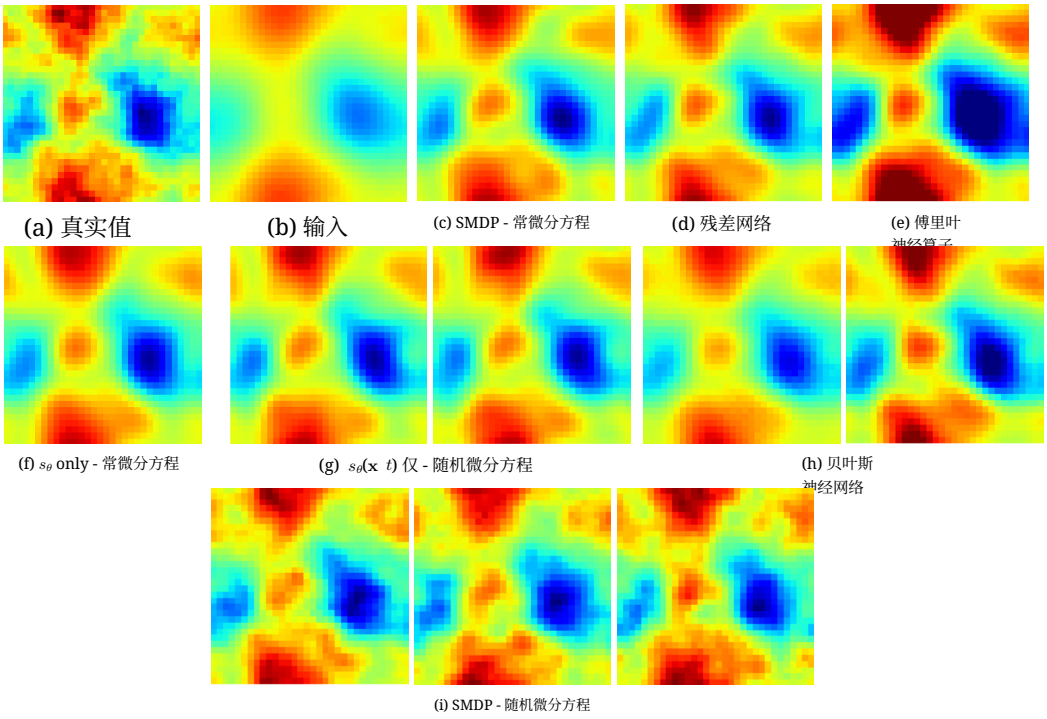


图12：热方程问题的不同方法预测结果（示例 1，共 2 个） .

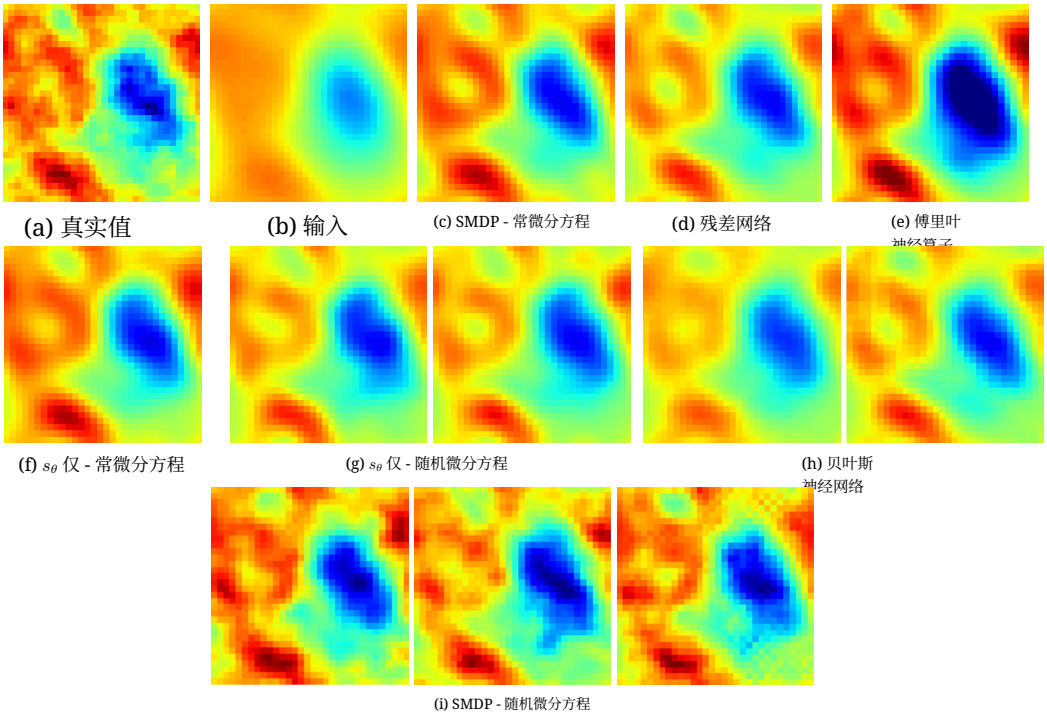


图 13：针对热方程问题的不同方法的预测（示例 2，共 2 个）。贝叶斯神经网络和“s_θ only”模型都无法生成小尺度结构。

figu图 14。训练与推理的变体均优于“$\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$ only”和“s_θ only "

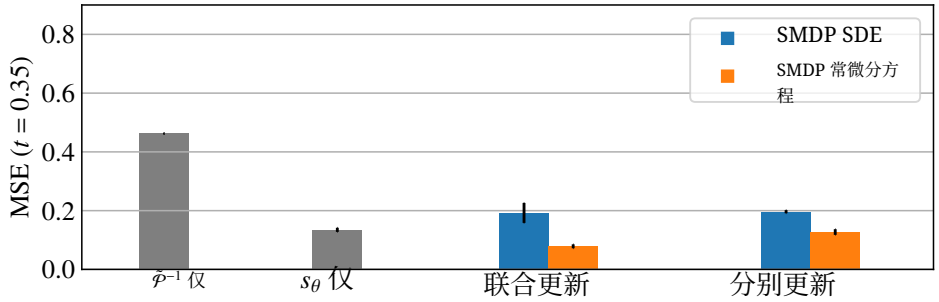
方法。总体而言，常微分方程推断的性能没有明显差异，但将物理过程与校正器更新分开后，随机微分方程推断略有改善。

有限内存 BFGS 我们使用数值优化，在$t = 0.35$ 处调整标记和速度场，使其与 $t = 0.65$ 处的目标烟雾和速度场相匹配；采用有限内存 BFGS[LN89, LBFGS]以及通过 *phiflow* [Hol+20]实现的可微前向模拟。我们的实现直接使用*torch.optim.LBFGS* [Pas+19]提供的 LBFGS 实现。参数设为 history_size $= 10$、max_iter $= 4$ 和 line_search_fn $=$ strong_wolfe。其余参数均采用默认值。我们优化 10 步，在单张 NVIDIA RTX 2070 GPU 上，每个样本约需 240 秒。

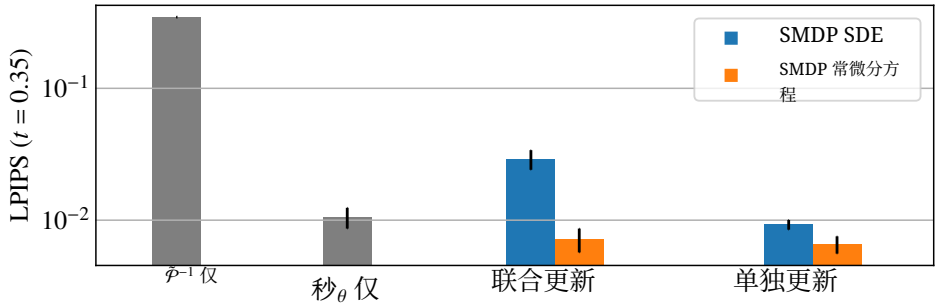
扩散后验采样 DPS 此问题的另一个基线方法是用于一般含噪逆问题的扩散后验采样 [Chu+23, DPS]。首先，我们在 $t = 0.35$处的标记和速度场数据集上预训练一个扩散模型。我们将障碍物位置的掩码作为额外的条件输入提供给网络，且不对其添加噪声。我们的架构和训练方法与去噪扩散概率模型 [HJA20, DDPM]十分相似。网络约含 1844 万个参数，训练 10 万步，学习率为 1×10^{-4}，并使用带热重启的余弦退火（$T_0 = 50000$, $\eta_{\min} = 5 \times 10^{-6}$）。测量算子$\mathcal{A}$通过我们的可微前向模拟实现。我们采用 DPS 的高斯版本，即 [Chu+23]中的算法 1，取 $N = 1000$。每次迭代 i 中，我们将步长 ζ_i 固定为$1/||y - \mathcal{A}(\hat{\mathbf{x}}_0(\mathbf{x}_i))||$。每个推理步骤都需要通过扩散模型和前向模拟反向传播梯度。单个样本的推理在单张 NVIDIA RTX 2070 GPU 上约需 5000 秒。

补充结果 我们在图16和图17中提供了浮力驱动流案例更详细的可视化结果。这些结果再次凸显了反向物理模拟器仅凭自身恢复初始状态的困难。加入学习得到的校正项显著改善了这一表现。

在图15中，我们还展示了随机微分方程（SDE）的一个后验采样示例。可以看出，不同样本推断出的小尺度结构各不相同。然而，与热扩散示例等情况不同，此场景中的物理模拟几乎没有为状态的显著变化留下空间。



(a) 重建均方误差 ($t = 0.35$)。



(b) 感知距离 LPIPS ($t = 0.35$)。

图 14：三次运行的平均值中，单独更新与联合更新的比较。

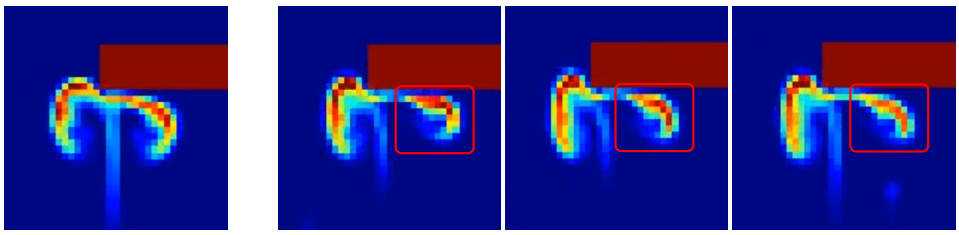
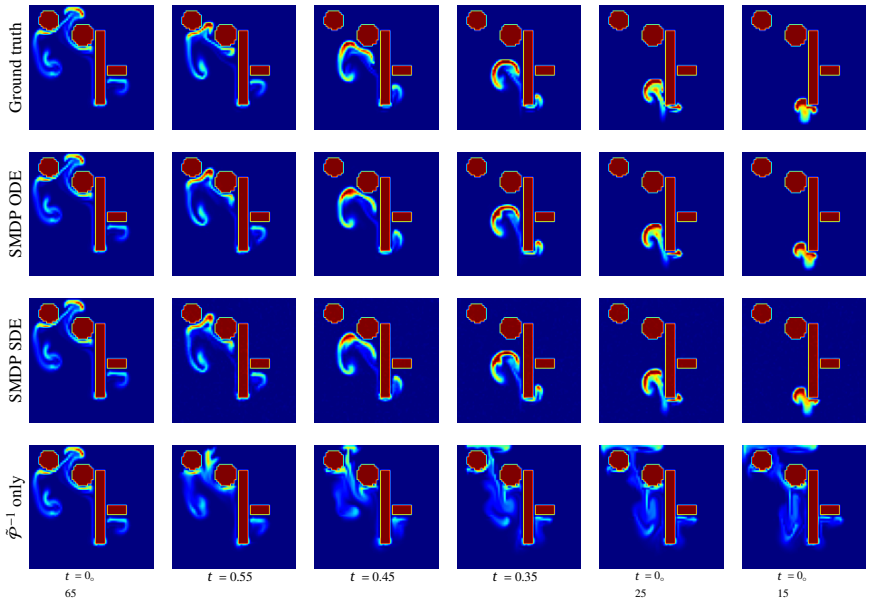
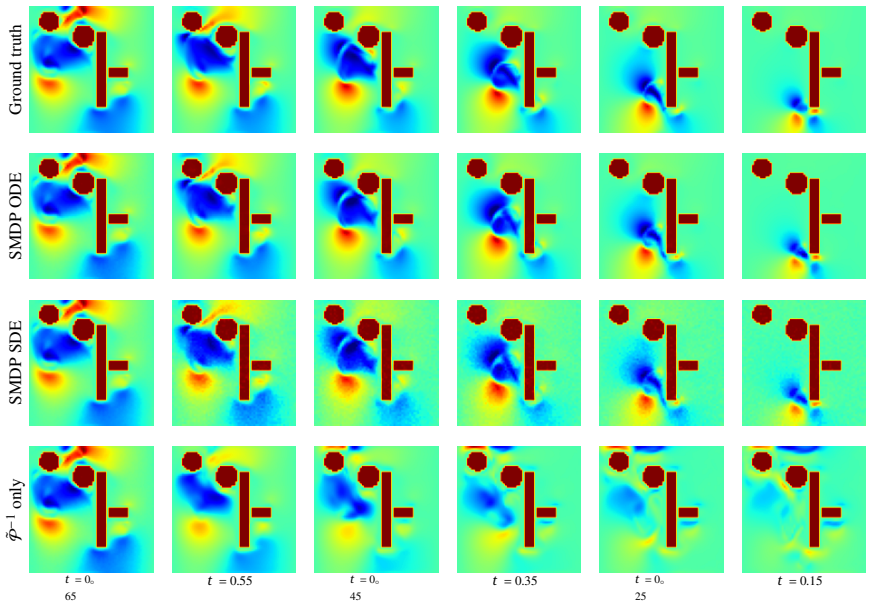


图 15：浮力驱动流在$t = 0.36$时的 SMDP 随机微分方程预测结果与真实值的比较。

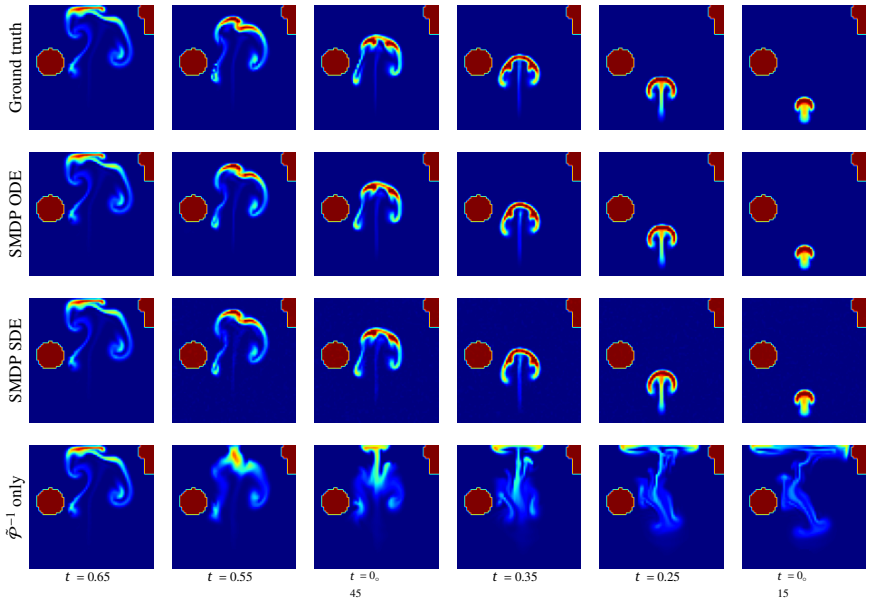


(a) 标记场

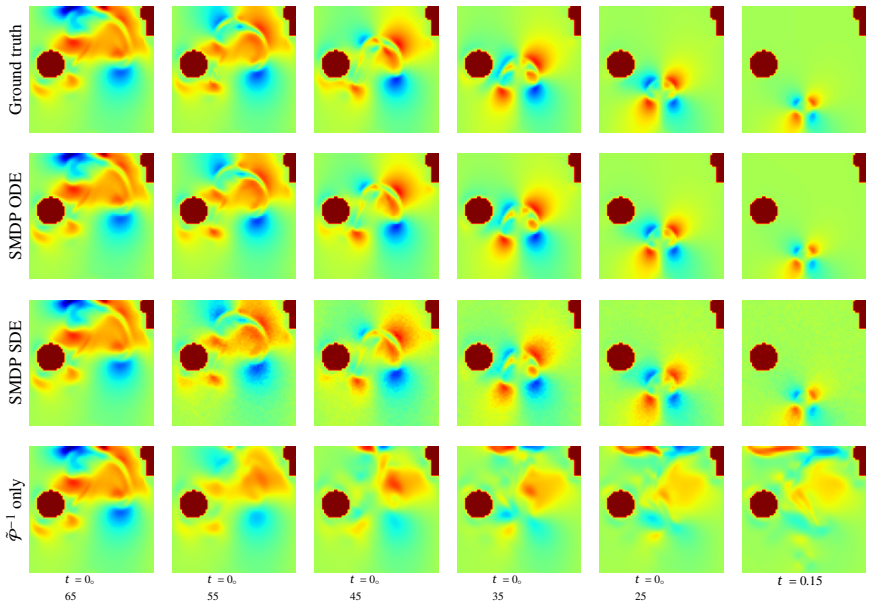


(b) 速度场（x方向）

图16：含障碍物的浮力驱动流预测（示例 1，共 2 个）。



(a) 标记场



(b) 速度场（x方向）

图17：含障碍物的浮力驱动流的预测（示例2/2）。

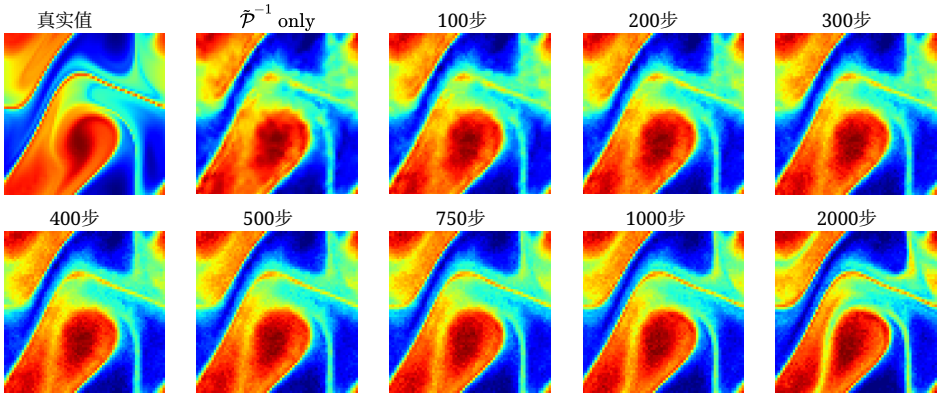


图18： $\epsilon = 2 \times 10^{-5}$的朗之万动力学步骤。

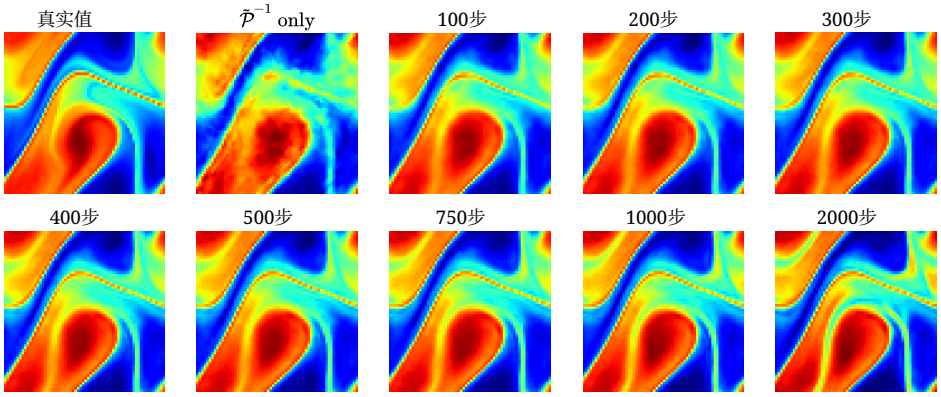


图19： $\epsilon = 2 \times 10^{-5}$ 的朗之万动力学步骤，以及使用 $\Delta t\, s_\theta(\mathbf{x}\ t)$进行的额外一步，该步骤可平滑图像。

F 各向同性湍流

训练 对于物理代理模型 $\tilde{\mathcal{P}}^{-1}$，我们采用 FNO 神经网络（见附录 B），批量大小为 20。我们使用 Adam 优化器训练 FNO 500 轮，学习率为 10^{-3}，并每 100 轮将其降低至原来的 0.5。我们采用 ResNet 架构训练 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$（见附录 B），训练 250 轮，学习率为 10^{-4}，每 50 轮将其降低至原来的 0.5，批量大小为 6。

使用朗之万动力学进行细化 由于训练好的网络 $s_\theta(\mathbf{x}\ t)$ 近似于得分$\nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$，因此可用于后处理策略 [WT11; SE19]。我们基于朗之万动力学，在单个时间点进行不动点迭代，具体如下：

$$\mathbf{x}_t^{i+1} = \mathbf{x}_t^i + \epsilon \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x}_t^i) + \sqrt{2\epsilon} z_t \tag{68}$$

对于若干步 T和 $\epsilon = 2 \times 10^{-5}$，参见图18和图19。对于先验分布 π_t，$\mathbf{x}_t^0 \sim \pi_t$ 并通过迭代式（68），$\mathbf{x}_t^T$的分布等于 p_t，其中 $\epsilon \to 0$ 和 $T \to \infty$。这里有一些理论上的注意事项，即需要在式（68）中加入 Metropolis-Hastings 更新，并且还需满足一些额外的正则性条件 [SE19]。

补充结果 我们展示真实值和重建轨迹的更多可视化结果，见图20和图21。

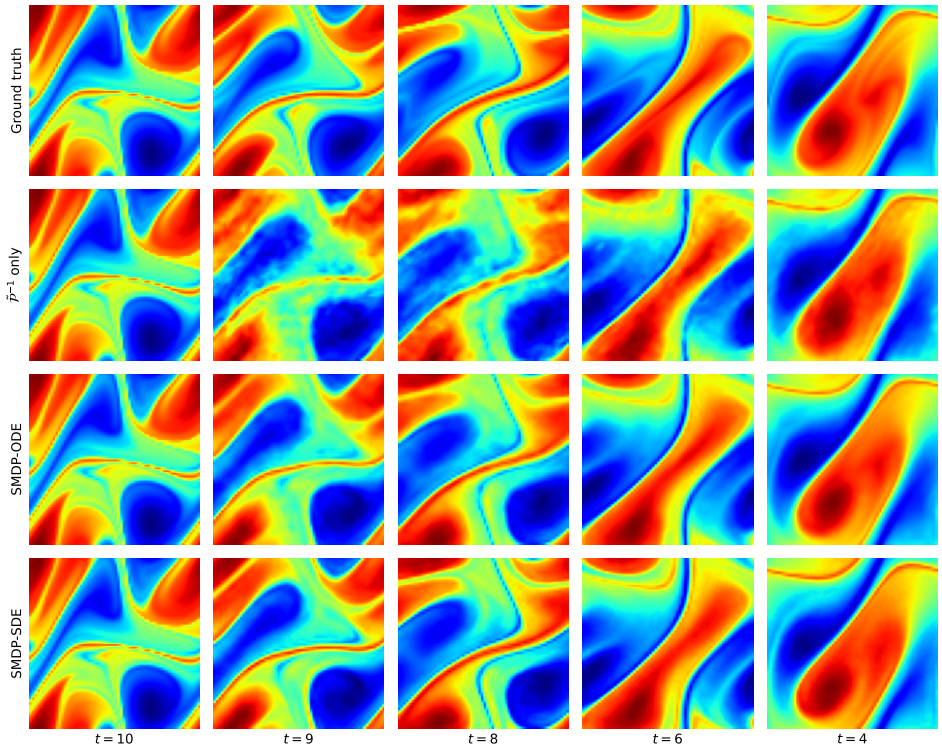


图20：各向同性湍流的预测（示例 1/2）。

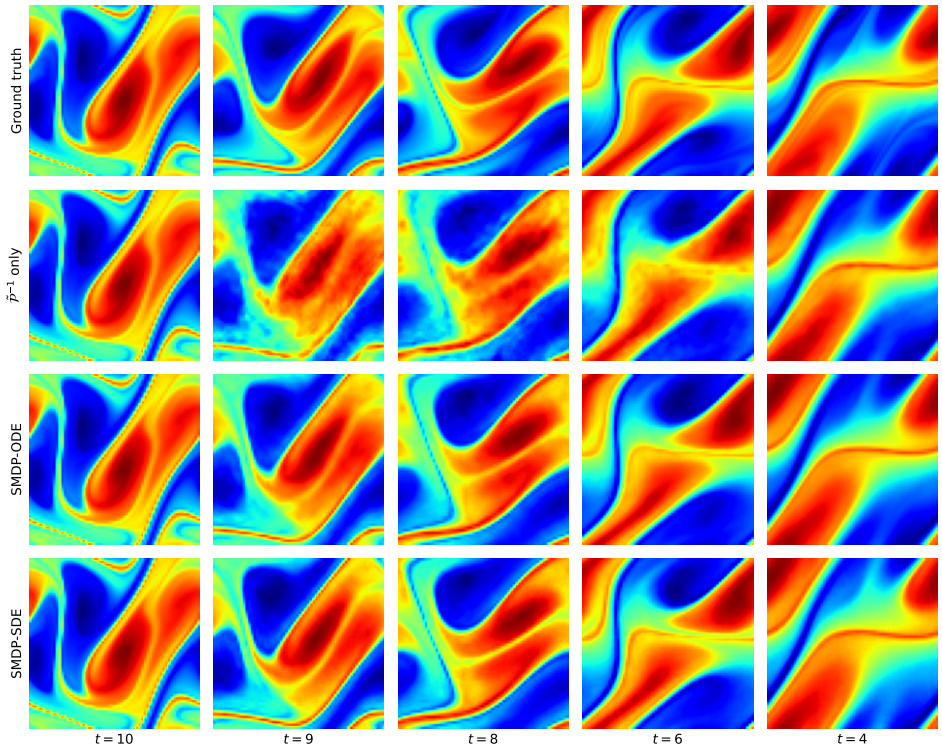


图21：各向同性湍流的预测（示例 2/2）。

参考值

[And82] B. Anderson. “反向时间扩散方程模型”。载于：随机过程及其应用 12.3 (1982)，第 313–326 页。[Chu+23] H. Chung、J. Kim、M. T. McCann、M. L. Klasky 和 J. C. Ye。“用于一般含噪逆问题的扩散后验采样”。载于：第十一届国际学习表征会议。OpenReview.net，2023。网址：https://openreview. net/pdf?id=OnD9zGAGT0k。[HJA20] J. Ho、A. Jain 和 P. Abbeel。“去噪扩散概率模型”。载于：神经信息处理系统进展。2020。网址：https: //proceedings. neurips . cc / paper / 2020 / hash / 4c5bcfec8584af0d967f1ab10179ca4b - Abstract.html。[Hol+20] P. Holl、V. Koltun、K. Um 和 N. Thuerey。“phiflow：一种通过物理模拟进行深度学习的可微PDE求解框架”。载于：NeurIPS研讨会。第2卷。2020。[Hyv05] A. Hyvärinen。“通过分数匹配估计非归一化统计模型”。载于：机器学习研究期刊 6 (2005)，第 695–709 页。网址：http://jmlr.org/papers/ v6/hyvarinen05a.html。[JKB95] N. L. Johnson、S. Kotz 和 N. Balakrishnan。《连续单变量分布》，第2卷。第289卷。John wiley & sons，1995。[KB15] D. P. Kingma 和 J. Ba。“Adam：一种随机优化方法”。载于：第3届国际学习表征会议。2015。网址：http://arxiv. org/abs/1412.6980。[Ker+20] H. Kersting、N. Krämer、M. Schiegg、C. Daniel 等。“用于快速反演‘无似然’动力系统的可微似然”。载于：第37届国际机器学习会议论文集（ICML 2020），2020年7月13日至18日，线上会议。第119卷。机器学习研究论文集。PMLR，2020，第5198–5208页。网址：http://proceedings.mlr.press/v119/kersting20a.html。[Klo+92] P. E. Kloeden、E. Platen、P. E. Kloeden 和 E. Platen。《随机微分方程》。Springer，1992。[Li+21] Z. Li、N. B. Kovachki、K. Azizzadenesheli、B. Liu 等。“用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子”。载于：第9届国际学习表征会议（ICLR 2021），线上会议，奥地利，2021年5月3日至7日。OpenReview.net，2021。网址：https://openreview.net/forum?id=c8P9NQVtmnO。[LN89] D. C. Liu 和 J. Nocedal。“关于用于大规模优化的有限内存BFGS方法”。载于：数学规划 45.1-3 (1989)，第503–528页。数字对象唯一标识符：10 . 1007 / BF01589116。网址：https://doi.org/10.1007/BF01589116。[Mue+22] M. Mueller、R. Greif、F. Jenko 和 N. Thuerey。“利用贝叶斯神经网络的随机预测进行流体模拟”。载于：arXiv预印本 arXiv:2205.01222 (2022)。[Øks03] B. Øksendal。“随机微分方程”。载于：《随机微分方程》。Springer，2003，第65–84页。[Pas+19] A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer 等。“PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库”。载于：神经信息处理系统进展。2019，第8024–8035页。网址：https://proceedings.neurips.cc/paper/2019/hash/bdbca288fee7f92f2bfa9f7012727740-Abstract.html。[RHS22] S. Rissanen、M. Heinonen 和 A. Solin。“通过逆热耗散进行生成建模”。载于：arXiv:2206.13397 (2022)。[SE19] Y. Song 和 S. Ermon。“通过估计数据分布的梯度进行生成建模”。载于：神经信息处理系统进展。2019，第11895–11907页。网址：https : / / proceedings . neurips . cc / paper / 2019 / hash / 3001ef257407d5a371a96dcd947c7d93-Abstract.html。[Son+19] Y. Song、S. Garg、J. Shi 和 S. Ermon。“切片得分匹配：一种可扩展的密度与分数估计方法”。载于：第35届人工智能不确定性会议论文集。第115卷。机器学习研究论文集。AUAI出版社，2019，第574–584页。网址：http://proceedings.mlr.press/ v115/song20a.html。

[Sta+21] K. Stachenfeld、D. B. Fielding、D. Kochkov、M. Cranmer 等。“用于湍流的学习型模拟器”。载于：国际学习表征会议。2021年。[Vin11] P. Vincent。“分数匹配与去噪自编码器之间的联系”。载于：神经计算23.7 (2011)，第1661–1674页。[WT11] M. Welling 和 Y. W. Teh。“通过随机梯度朗之万动力学进行贝叶斯学习”。载于：第*28*届国际机器学习会议（*ICML 2011*），美国华盛顿州贝尔维尤，*2011*年*6*月*28*日至*7*月*2*日。Omnipress，2011，第681–688页。