arXiv:2303.01751v3 [stat.ML] 5 Oct 2023

深度多边际动量薛定谔桥

Tianrong Chen、Guan-horng Liu、Molei Tao、Evangelos A.Theodorou佐治亚理工学院，美国{tianrong.chen,ghliu,mtao,evangelos.theodorou}@gatech.edu

摘要

如何利用粗粒度时间间隔下各分布的无标签样本重建群体动力学，是一项关键挑战。近期方法，如基于流的模型或薛定谔桥（SB）模型，虽展现出令人瞩目的性能，但推断出的样本轨迹要么未能考虑底层随机性，要么过于僵化。本文将 [1] 中的方法扩展到连续空间，并提出深度动量多边际薛定谔桥（DMSB），这是一种新颖的计算框架，可为满足跨时间位置边缘约束的随机系统学习平滑的测度值样条。通过改进著名的 Bregman 迭代，并将迭代比例拟合扩展至相空间，我们能够高效处理高维多边际轨迹推断任务。合成数据集和真实世界单细胞 RNA 测序数据集上的实验表明，我们的算法显著优于基线方法。此外，当存在无法获取的真实速度时，所提出的方法仅凭位置快照，也能合理地重建速度分布的演变。

1 引言

我们研究多边际轨迹推断问题，即根据在零星时间点拍摄的静态快照，阐明无法辨识个体的动力学与反应。由于无法追踪每个个体，研究者转而考察群体统计分布的演变。该问题受到广泛关注，相关应用遍及多个科学领域，例如估计细胞动力学[2, 3], 预测气象演变 [4], 以及医疗健康统计追踪 [5]。 [6,7] 利用神经网络构建了一个与经验观察最吻合的能量景观。 [8, 9] 学习正则化的神经常微分方程 [10] ，以编码此类势能景观。值得注意的是，在上述研究中，样本轨迹以确定性方式表示。相比之下， [11, 12] 采用薛定谔桥（SB），在个体样本轨迹也受到环境随机性影响的情况下，确定样本在边缘分布之间最可能的演变。然而，由于采用了专门的神经网络架构和计算框架，这些方法在状态维度较高时扩展性较差。

薛定谔桥（SB）可以被视为熵正则化最优传输问题的解。薛定谔桥旨在寻找一个非线性随机微分方程，使其在两个任意分布之间产生一条直线路径测度。这种直线性意味着实现了运输成本（即 2-瓦瑟斯坦距离（W_2））最小化的最优性。我们注意到，薛定谔桥通常与基于分数的生成模型（SGM）相关联；二者都可以通过构造连接数据分布与易处理先验分布（即两个边缘分布）的特定随机微分方程（SDE）来进行生成建模。SGM 首先通过预先指定的线性随机微分方程将数据扩散至先验分布，同时学习一个神经网络来近似分数函数。然后利用该分数近似器逆转这一扩散过程，从而实现生成。临界阻尼

第37届神经信息处理系统会议（NeurIPS 2023）。

表1：不同模型在最优性和边界分布方面的比较 p_0和 p_1。我们的 DMSB 将标准薛定谔桥扩展到相空间；标准薛定谔桥将超越高斯先验的 SGM 推广到了类似 CLD 的情形。然而，与 CLD 不同，DMSB 联合学习相空间分布，即 $p_\theta(x,\ v) = p_{\mathcal{A}}(x)q_\theta(v|x)$ 和 $p_\phi(x,\ v) = p_{\mathcal{B}}(x)q_\phi(v|x)$。换言之，DMSB 仅给定状态分布即可推断潜在的相态动力学。

模型	最优性	$p_0(\cdot)$	$p_1(\cdot)$
SGM [20]	✗	$p_{\mathcal{A}}(x)$	$\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma})$
CLD [13]	✗	$p_{\mathcal{A}}(x) \otimes \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma})$	$\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}) \otimes \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma})$
薛定谔桥 [14]	$\downarrow W_2$ →折点	$p_{\mathcal{A}}(x)$	$p_{\mathcal{B}}(x)$
DMSB（我们的方法）	$\downarrow W_2$ →平滑	$p_{\mathcal{A}}(x)q_\theta(v\|x)$	$p_{\mathcal{B}}(x)q_\phi(v\|x)$

朗之万扩散（CLD） [13] 通过引入一个在初始时刻和终止时刻均服从易处理高斯分布的辅助速度变量，将得分生成模型随机微分方程扩展到相空间。由于随机性仅注入速度空间，所得位置空间中的轨迹更加平滑；此外，得益于临界阻尼随机微分方程的结构，经验性能和样本效率也得到提升。SGM 与薛定谔桥之间的联系已在 [14, 15]中得到阐述，并提出了可扩展的均值匹配迭代比例拟合算法（IPF），以便在高维情形下高效估计薛定谔桥。薛定谔桥的应用，例如图像到图像转换[16, 17], RNA轨迹推断 [11], 求解平均场博弈[18], 黎曼插值[19],，展示了薛定谔桥在各个领域中的有效性。

在这项工作中，我们从相空间中的薛定谔桥（称为动量薛定谔桥，简称 mSB）出发，进一步研究位置空间中存在多个经验边缘约束的 mSB，并在 [1] 中将其表述为多边缘动量薛定谔桥（mmmSB）。这避免了昂贵的空间离散化，因为这种离散化难以扩展到高维情形。我们还通过策略性地划分和重组约束集，解决连续空间设定中复杂的几何平均问题。此外，我们采用半桥迭代比例拟合方法，提高了算法的计算效率。薛定谔桥中运输成本的最优性会产生直线轨迹；若求解 N 个双边缘薛定谔桥问题，并将所得轨迹连接起来以匹配 N+1 个边缘分布，则连接后的轨迹会在所有连接点处出现折角。相反，在 mmmSB 中，运输成本的最优性会在状态空间上产生平滑的测度样条，同时也能插值经验边缘分布。因此，该方法非常适用于源自物理系统的问题，和／或需要平滑轨迹的问题，例如单细胞RNA测序中的轨迹推断。我们的研究将重点放在高维情形下高效求解 mmmSB 上（因此，该方法不同于开创性工作[1]中的方法；见第4节）。表1展示了我们的算法与先前工作的差异，我们的主要贡献有以下四点：

- 我们将均值匹配迭代比例拟合扩展至相空间，从而实现可扩展的 mSB 计算。

- 我们提出并针对动量多边缘薛定谔桥定制了 Bregman 迭代 [21]，使其兼容相空间均值匹配目标函数，从而能够高效计算高维动量多边缘薛定谔桥。

- 我们展示了如何克服训练数据中缺少速度变量时对其进行采样的挑战，从而提升模型的适用性。

- 我们展示了所提出的算法 DMSB 在包含复杂分叉与合并现象的玩具数据集上的表现。在真实的高维（100 维）单细胞 RNA 测序（scRNA-seq）数据集上，无论从视觉效果还是定量指标来看，DMSB 生成的轨迹质量都显著优于基线方法。我们还展示了，与真实值相比，DMSB 能够捕捉合理的速度分布，而其他基线方法则无法做到。

2 预备知识

2.1 动态薛定谔桥问题

动力学薛定谔桥问题在过去几十年中得到了广泛研究。薛定谔桥问题的目标是求解以下优化问题:

$$\min_{\pi\in\Pi(\rho_0,\rho_T)} D_{KL}\left(\pi||\xi\right), \tag{1}$$

其中，$\pi \in \Pi(\rho_0,\ \rho_T)$ 属于一组路径测度，其在 $t=0$ 和 T 处的边缘密度分别为 ρ_0 和 ρ_T。ξ 是参考路径测度（即，[14] 将 ξ 设为从 ρ_0 开始的维纳过程）。问题（1）的最优性由一组偏微分方程（3）刻画。

定理 2.1 （[22]）。问题（*1*）中的最优路径测度 π 可表示为前向和后向随机过程

$$\mathrm{d}\mathbf{x}_t = [2\,\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi_t]\mathrm{d}t + \sqrt{2}\mathrm{d}\mathbf{w}_t, \quad \mathbf{x}_0\sim\rho_0, \tag{2a}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{x}_t = [-2\,\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}_t]\mathrm{d}t + \sqrt{2}\,\mathrm{d}\widehat{\mathbf{w}}_t, \mathbf{x}_T\sim\rho_T. \tag{2b}$$

其中，Ψ、$\widehat{\Psi}\in C^{1,\ 2}$ 是以下耦合偏微分方程的解，

$$\begin{gathered}\frac{\partial\Psi_t}{\partial t} = -\Delta\Psi_t, \quad \frac{\partial\widehat{\Psi}_t}{\partial t} = \Delta\widehat{\Psi}_t \\ s.t.\ \Psi(0,\cdot)\widehat{\Psi}(0,\cdot) = \rho_0(\cdot),\ \Psi(T,\cdot)\widehat{\Psi}(T,\cdot) = \rho_T(\cdot),\end{gathered} \tag{3}$$

（2a）和（2b）中的薛定谔桥随机过程在 $\forall t\in[0,T]$，$p_t^{(2a)}\equiv p_t^{(2b)}\equiv p_t^{SB}$ 的意义下等价。这里，p_t^{SB}表示薛定谔桥在时间 t 的边缘分布，同时也表示由任一式（2）诱导的随机过程的边缘密度。势函数 Ψ_t 和 Ψ_t 经指数变换 [14] 后，分别明确表示福克-普朗克方程（FPE）和哈密顿-雅可比-贝尔曼方程（HJB）的解，其中 FPE 描述样本密度的演化，而 HJB 则刻画式（1）的最优性。此外，边缘密度还满足 $p_t^{SB}=\Psi_t\widehat{\Psi}_t$ 的因式分解。薛定谔桥的这些丰富结构将在后文用于构建对数似然目标函数（定理 B.1）以及速度的朗之万采样器（第 4.4 节）。

为了解决薛定谔桥问题，先前工作主要采用半桥优化技术，也称为迭代比例拟合（IPF）；在该方法中，通过固定两个边界条件中的一个，迭代求解优化问题 [14, 15, 23],

$$\pi^{(d+1)} := \underset{\pi\in\Pi(\cdot,\rho_1)}{\arg\min}\, D_{KL}(\pi||\pi^{(d)}) \quad \rightleftarrows \quad \pi^{(d+2)} := \underset{\pi\in\Pi(\rho_0,\cdot)}{\arg\min}\, D_{KL}(\pi||\pi^{(d+1)}) \tag{4}$$

其初始路径测度为 $\pi^{(0)}:=\xi$。反复执行上述优化，直到算法收敛，即可获得薛定谔桥解，表示为 $\pi^{SB}\equiv\lim_{d\to\infty}\pi^{(d)}$ [24]。此外，[25] 表明，薛定谔桥问题中的漂移项也可以解释为随机最优控制（SOC）问题的解，即采用最优控制策略 $\mathbf{z}^*=2\,\nabla_{\mathbf{x}}\log\,\Psi(t,\mathbf{x}_t)$:

$$\mathbf{z}^*(\mathbf{x})\in\underset{\mathbf{z}\in\mathcal{Z}}{\arg\min}\,\mathbb{E}\left[\int_0^T\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2\mathrm{d}t\right] \quad s.t \quad \begin{cases}\mathrm{d}\mathbf{x}_t = \mathbf{z}_t\mathrm{d}t + \sqrt{2}\mathrm{d}\mathbf{w}_t \\ \mathbf{x}_0\sim\rho_0, \quad \mathbf{x}_1\sim\rho_T.\end{cases}$$

该表述将在后文用于构造第 3 节中的相空间似然目标函数。关于半桥问题的求解，文献中已有大量关于上述标准 Schrödinger 桥的研究结果 [14, 15, 23], , 但我们将求解一个不同的薛定谔桥问题；其形式化定义见命题 4.1，解法见第 4 节。

2.2 多重约束的布雷格曼迭代

Bregman 迭代 [21] 可以被视为迭代比例拟合的多边缘推广，并广泛用于求解带有多个约束的熵正则化最优传输问题 [1] 。该算法可以高效地求解以下形式的问题:

$$\inf_{\pi\in\mathcal{K}} KL\left(\pi|\xi\right),$$

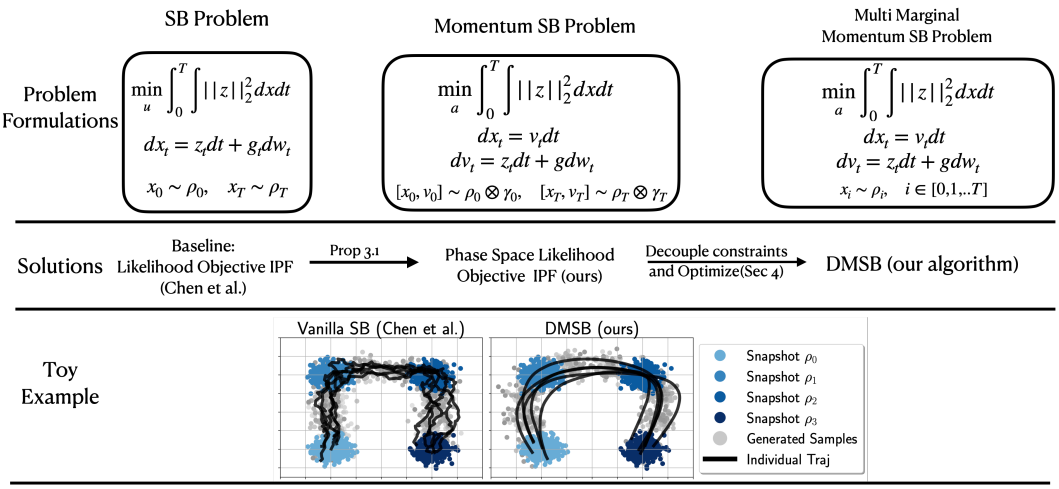


图 1：各种薛定谔桥问题及其对应算法的总结。第 3 行中的玩具示例说明，标准 Schrödinger 桥在成对经验边缘分布之间确定“直线”路径（因噪声产生的波动除外），而我们的多边际动量薛定谔桥方法则在位置空间的边缘分布之间建立平滑的测度样条（尽管路径仍具有随机性，但由于噪声被添加到速度上，因此任意一对相邻边缘分布之间的路径都是平滑的；按照设计，不同相邻边缘分布对之间的路径也同样平滑）。

其中， $\mathcal{K}$ 是多个闭凸约束集 $\mathcal{K}_l$的交集： $\mathcal{K} = \cap_{l=1}^{L} \mathcal{K}_l$. 布雷格曼投影（BP）定义为相对于其中一个约束 $\mathcal{K}_l$进行优化：

$$P_{\mathcal{K}_l}^{KL}(\xi) := \arg\min_{\pi \in \mathcal{K}_l} KL(\pi|\xi),$$

并且第 d 个 Bregman 迭代（Bregman 迭代）通过递归地对 $\mathcal{K}$ 中的所有约束执行 Bregman 投影来进行计算：

$$\forall 0 < n \leq L, \quad \pi^{(d,n)} := P_{\mathcal{K}_l^n}^{KL}(\pi^{(d,n-1)}),$$

第 $d+1$ 个 Bregman 迭代的初始条件为 $\pi^{(d+1,0)} = \pi^{(d,L)}$。在某些条件下（例如参见 [24]），有 $\pi^{(d,L)}$ 收敛到唯一解：

$$\pi^{(d,L)} \to P_{\mathcal{K}}^{KL}(\xi) \quad \text{as} \quad d \to +\infty$$

注 2.2。一次 Bregman 迭代通过多次 Bregman 投影遍历所有约束，每个 Bregman 投影求解一个包含一个约束的优化问题。可以注意到，通过定义 $L = 2$、$\mathcal{K}_1 = \Pi(\rho_0, \cdot)$ 、 $\mathcal{K}_2 = \Pi(\cdot, \rho_1)$，Bregman 迭代将变成前述的迭代比例拟合过程，用于求解薛定谔桥问题 (1)。

表 2：数学符号。

记号	定义	记号	定义
$\mathbf{x}$	位置变量	ρ	位置分布 $\rho(\mathbf{x})$
$\mathbf{v}$	速度变量	γ	速度分布 $\gamma(\mathbf{v})$
$\mathbf{m}$	拼接 $[\mathbf{x}, \mathbf{v}]^\mathsf{T}$	μ	$\mu(\mathbf{x},\mathbf{v})$的分布

3 动量薛定谔桥

我们首先介绍如何在相空间中进行半桥迭代比例拟合训练，该方法可用于求解具有两个边缘分布约束的动量薛定谔桥（mSB）问题。随后，我们将把这种可扩展的相空间半桥技术应用于多边缘情形（第 4 节）。图 1 展示了我们如何基于 [14] 开发算法。后续各节使用的记号列于表 2 中。mSB 将薛定谔桥问题扩展到了相空间，该空间同时包含位置和速度。

我们首先考虑同时依赖于 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{v}$ 的边界分布，不过最终我们将把它作为一个模块，用于求取仅依赖于位置 $\mathbf{x}$ 的两个分布之间的传输映射，因为速度 $\mathbf{v}$ 是为获得平滑传输而人为引入的辅助变量。从概念上讲，作为一个熵正则化最优传输问题，薛定谔桥试图在带有加性噪声的位置 $\mathbf{x}$ 的经验边缘分布之间获得最直的路径；而 mSB 旨在寻找 $\mathbf{x}$ [26] 的经验边缘分布之间的平滑插值，并以边界速度分布为条件（见图 1）。这种位置空间中的平滑测度值样条通过相空间中的优化问题 [1] 获得：

$$\min_{\pi\in\Pi(\mu_0,\mu_T)} KL(\pi|\xi) \quad s.t \quad \pi=\text{Law}(\mathbf{x},\mathbf{v}): \underbrace{\begin{pmatrix}\mathrm{d}\mathbf{x}_t\\ \mathrm{d}\mathbf{v}_t\end{pmatrix}}_{\mathrm{d}\mathbf{m}_t}=\underbrace{\begin{pmatrix}\mathbf{v}_t\\ \mathbf{0}\end{pmatrix}}_{\boldsymbol{f}(\mathbf{v},t)}\mathrm{d}t+\underbrace{\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&g_t\end{pmatrix}}_{\mathbf{g}(t)}\underbrace{\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \mathbf{z}_t\end{pmatrix}}_{\mathbf{Z}(t)}\mathrm{d}t+\underbrace{\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&g_t\end{pmatrix}}_{\mathbf{g}(t)}\mathrm{d}\mathbf{w}_t,$$

类似于定理 2.1，可以利用势函数 $\Psi(t、\mathbf{x}、\mathbf{v})$ 和$\breve{}\Psi(t、\mathbf{x}、\mathbf{v})$ 推导出一组偏微分方程，随后应用迭代比例拟合程序求解该问题。相空间偏微分方程的表达式见附录 B.2。这种 mSB 的偏微分方程表示带来了一种简单直接却颇具创新性的对数似然训练方法，从而实现对迭代比例拟合的高效优化。

命题 3.1（似然界）。相空间中的半桥迭代比例拟合

$$\pi^{(d+1)}:=\underset{\pi\in\Pi(\mu_0,\cdot)}{\arg\min}\ D_{KL}(\pi||\pi^{(d)}) \quad \rightleftarrows \quad \pi^{(d+2)}:=\underset{\pi\in\Pi(\cdot,\mu_T)}{\arg\min}\ D_{KL}(\pi||\pi^{(d+1)})$$

表示似然的界，并给出近似的似然训练：

$$\mathbf{Z}_t:=\underset{\mathbf{Z}_t}{\arg\min}-\log p(\mathbf{m}_0,0) \quad \rightleftarrows \quad \widehat{\mathbf{Z}}_t:=\underset{\widehat{\mathbf{Z}}_t}{\arg\min}-\log p(\mathbf{m}_T,T).$$

$$\textit{where} \quad \log p(\mathbf{m}_0,0)\propto\int_0^T\mathbb{E}_{\widehat{\mathbf{m}}_t}\left[\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t+\mathbf{z}_t-g\nabla_{\mathbf{v}}\log\hat{p}_t\|^2\right]\mathrm{d}t.$$

$$\textit{and } \widehat{\mathbf{m}}_t \textit{ samples from:} \quad \mathrm{d}\widehat{\mathbf{m}}_t=\left[\boldsymbol{f}-\mathbf{g}\widehat{\mathbf{Z}}_t\right]\mathrm{d}t+\mathbf{g}(t)\mathrm{d}\mathbf{w}_t, \quad \widehat{\mathbf{m}}_T\sim\mu_T \tag{5}$$

$\breve{}\mathbf{Z}_t\triangleq\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \breve{}\mathbf{z}_t\end{pmatrix}$ 和 $\widehat{p}_t$ 是在时间 t由式5诱导的路径测度的密度。通过类似的推导，可以得到$\log(\mathbf{m}_T,T)$的类似结果。

证明：见附录 B.1。 □

$\breve{}$**注 3.2**。优化$\mathbf{Z}_t$后，参考路径测度变为式 (5)，这意味着 $\pi\in\Pi(\cdot,\mu_T)$，即满足半桥迭代比例拟合中的约束。路径测度 π可由$\mathbf{Z}_t$或$\breve{}\mathbf{Z}_t$诱导。如注 2.2 所述，一次半桥迭代比例拟合本质上包含一次 Bregman 投影，而一次迭代比例拟合就是一次 Bregman 迭代。命题 3.1 提供了一种便捷方法，可通过在约束 $\mathcal{K}$ 和参考路径测度 π下最大化对数似然，以$\pi:=\arg\min_{\pi\in\mathcal{K}_l}D_{KL}(\pi||\bar{\pi})$的形式执行一次 Bregman 投影。

命题 3.1 提供了另一种执行 Bregman 迭代的方法，该方法将在动量多边缘薛定谔桥第 3 节中大量使用，并且在参数化和离散化后（第 4.4 节）计算效率很高。

4 深度动量多边缘薛定谔桥

我们首先给出动量多边缘薛定谔桥（mmmSB）的问题表述。不同于此前的双边缘情形，我们考虑在时间 t_i处存在 $N+1$ 概率测度 μ_{t_i} 的场景。此外，速度分布不一定已知。

命题 4.1（[1]）。具有多个边缘约束的动态动量多边缘薛定谔桥表示为：

$$\min_{\pi}\mathcal{J}(\pi):=\sum_{i=0}^{N-1}KL\left(\pi_{t_i:t_{i+1}}|\xi_{t_i:t_{i+1}}\right), \quad s.t \quad \pi\in\mathcal{K}:=\cap_{i=0}^{N}\mathcal{K}_{t_i} \tag{6}$$

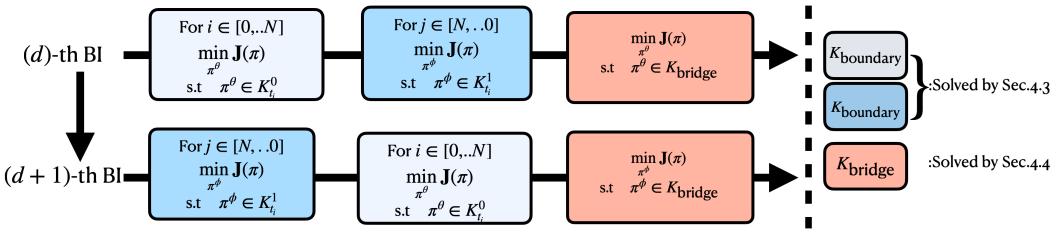


图 2：该流程详细展示了 DMSB 中采用的 Bregman 迭代（BI）。灰色和蓝色方块分别表示在 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$ 约束下针对前向策略和后向策略执行的 Bregman 投影（BP）步骤。红色方块表示在 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 约束下执行的 BP 步骤。训练和采样算法见附录.D。

$$\begin{aligned}
\textit{where:}\quad \mathcal{K}_{t_0} &= \left\{ \int \pi_{t_0:t_1} \mathbf{dm}_{t_1} = \mu_{t_0}, \int \mu_{t_0} \mathbf{dv}_{t_0} = \rho_{t_0} \right\} \\
\mathcal{K}_{t_N} &= \left\{ \int \pi_{t_{N-1}:t_N} \mathbf{dm}_{t_{N-1}} = \mu_{t_N}, \int \mu_{t_N} \mathbf{dv}_{t_N} = \rho_{t_N} \right\} \\
\mathcal{K}_{t_i} &= \left\{ \int \pi_{t_i:t_{t+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} = \mu_{t_i}, \int \pi_{t_{i-1}:t_i} \mathbf{dm}_{t_{i-1}} = \mu_{t_i}, \int \mu_{t_i} \mathbf{dv}_{t_i} = \rho_{t_i} \right\}, \qquad (7)
\end{aligned}$$

并且 $\mathcal{K}$ 是 $\mathcal{K}_{t_i}$的闭凸集的交集。

命题 4.1 中描述的问题可以通过结合 Sinkhorn 方法 [1] 的经典 BI算法求解。然而，由于维数灾难以及不理想的几何显式解，BP 无法直接应用于高维连续状态空间。为应对这些困难，我们使用一对神经网络对前向和后向策略 $\mathbf{z}_t$ 和 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 进行参数化。此外，我们进一步解耦并重新组合这些约束，从而实现可扩展似然 IPF，并避免 mmmSB 背景下的几何平均问题。

4.1 解耦与重新组合约束

我们将约束集 (7) 分解为

$$\mathcal{K}_{t_i} = \cap_{r=0}^{2} \mathcal{K}_{t_i}^{r}, \quad \text{where} \quad \begin{aligned} \mathcal{K}_{t_i}^{0} &= \left\{ \int \pi_{t_i:t_{t+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} = \hat{\mu}_{t_i}, \int \hat{\mu}_{t_i} \mathbf{dv}_{t_i} = \rho_{t_i} \right\} \\ \mathcal{K}_{t_i}^{1} &= \left\{ \int \pi_{t_{i-1}:t_i} \mathbf{dm}_{t_{i-1}} = \mu_{t_i}, \int \mu_{t_i} \mathbf{dv}_{t_i} = \rho_{t_i} \right\} \\ \mathcal{K}_{t_i}^{2} &= \left\{ \int \pi_{t_i:t_{t+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} = \int \pi_{t_{i-1}:t_i} \mathbf{dm}_{t_{i-1}} \right\}. \end{aligned} \qquad (8)$$

可以注意到， $\mathcal{K}_{t_i}^{0}$ 和 $\mathcal{K}_{t_i}^{1}$ 与更简单的边界边缘条件$\mathcal{K}_{t_0}$ 和 $\mathcal{K}_{t_N}$具有相似的结构，因此我们可以摆脱臭名昭著的几何平均（参见 [1]中的第4节）。值得注意的是，这类约束为利用命题 3.1进行优化提供了机会，但$\mathbf{x}$ 和$\mathbf{v}$ 的联合分布仍然缺失。我们将约束分为两类:

$$\mathcal{K}_{\text{boundary}} = \left\{ \cap_{i=1}^{N-1} \mathcal{K}_{t_i}^{r} \cap \mathcal{K}_{t_0} \cap \mathcal{K}_{t_N} | \forall r \in \{0,1\} \right\}, \quad \mathcal{K}_{\text{bridge}} = \left\{ \cap_{i=1}^{N-1} \mathcal{K}_{t_i}^{2} \right\}.$$

遵循 Bregman 迭代（第2.2节），我们针对（6）执行优化，同时迭代地将解投影到$\mathcal{K}_{\text{boundary}}$ 或 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 的子集上。示意图见图2。接下来的章节将详细介绍如何获得联合分布 μ，以及如何在每个约束集内进行优化。

下文中，我们仅演示在由固定后向策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$驱动的参考路径测度$\bar{\pi}$ 下，对前向策略$\mathbf{z}_t$ 进行优化。该过程同样适用于 $\hat{}\mathbf{z}_t$，反之亦然。

4.2 在集合 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$中的优化

我们首先展示如何根据目标函数 (6) 优化前向策略 $\mathbf{z}_t$ w.r.t. 参考 pa
径度量$\bar{\pi}$，在固定的后向策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 驱动下，针对 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$ 的一个子集优化前向策略，目标函数为（6）。

命题 4.2（关于 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$）。 给定由后向策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 驱动、在反向时间方向上从边界 $\mu_{t_{i+1}}$ 出发的参考路径测度 $\bar{\pi}$，以下问题在正向时间方向上的最优路径测度

$$\min_{\pi} \mathcal{J}(\pi) := \sum_{i=0}^{N-1} KL\left(\pi_{t_i:t_{i+1}} | \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}\right), \quad s.t \quad \pi \in \left\{ \int \pi_{t_i:t_{i+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} = \mu_{t_i}, \int \mu_{t_i} \mathbf{dv}_{t_i} = \rho_{t_i} \right\}$$

$$is: \qquad \pi^*_{t_i:t_{i+1}} = \frac{\rho_{t_i}\bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}}{\int \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} \mathbf{dv}_{t_i}}.$$

当 $\pi_{t_i:\ t_{i+1}} \equiv \pi^*_{t_i:\ t_{i+1}}$ 时，以下方程需要成立 $\forall t \in [t_i, t_{i+1}]$:

$$\|\mathbf{z}_t + \widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log \hat{p}_t\|_2^2 = 0, \tag{9a}$$

$$p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) \equiv \hat{q}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}), \tag{9b}$$

其中，$\hat{}p_t$ 和 $\hat{}q_t$ 分别表示参考路径测度在时间 t处的边缘密度和条件速度分布。

证明。见附录 B.5 □

备注 4.3。当速度 γ_{t_i} 的真实分布已知时，由于此时联合分布 μ_t 可用，只需从 γ_{t_i} 中采样即可。为了在 KL 散度意义下匹配参考路径测度，需要同时匹配中间路径测度（式 9a）和边界条件（式 9b）。在传统的双边界薛定谔桥情形中，由于数据分布已预先设定或先验易于处理，通常会忽略对边界条件的匹配。然而，在我们的具体情形中，由于速度并非预先设定，因此必须处理这一问题，并通过应用朗之万动力学对其进行优化。

4.3 在集合 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$中优化

$\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 下的优化形式与上一节类似，但边界条件（式 10b）有所不同:

命题 4.4 （关于 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$）。 给定由后向策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 从边界 μ_{t_N} 沿反向时间方向驱动的参考路径测度 $\bar{\pi}$，对于以下问题，沿正向时间方向的最优路径测度

$$\min_{\pi} \mathcal{J}(\pi) := \sum_{i=0}^{N-1} KL\left(\pi_{t_i:t_{i+1}}|\bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}\right), \quad s.t \quad \pi \in \mathcal{K}_{bridge} = \left\{\cap_{i=1}^{N-1}\mathcal{K}^2_{t_i}\right\}$$

$$is: \quad \pi^*_{t_0:t_N} = \frac{q_{t_0}\bar{\pi}_{t_0:t_N}}{\int \bar{\pi}_{t_0:t_N} \mathbf{dm}_{t_N} \mathbf{dv}_{t_0}}.$$

当 $\pi_{t_0:\ t_N} \equiv \pi^*_{t_0:\ t_N}$ 时，以下方程需要成立 $\forall t \in [t_0, t_N]$:

$$\|\mathbf{z}_t + \widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log \hat{p}_t\|_2^2 = 0 \tag{10a}$$

$$p_{t_0}(\mathbf{v}_{t_0}, \mathbf{x}_{t_0}) \equiv \hat{q}_{t_0}(\mathbf{v}_{t_0}, \mathbf{x}_{t_0}) \tag{10b}$$

证明。 参见附录.B.6 □

从概念上讲，上述带有 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 约束的优化目标旨在寻找一个连续的路径测度，使其接近参考路径测度 $\bar{\pi}$，同时不考虑任何中间边缘分布约束。下一次迭代中参考路径测度的边界条件 p_{t_0}（$\mathbf{v}^{t_0}$，$\mathbf{x}^{t_0}$）由式 10b 确定。幸运的是，该分布的经验样本是可用的，尽管分布 $\hat{}q_{t_0}$（$\mathbf{v}^{t_0}$，$\mathbf{x}^{t_0}$）的解析表示未知。因此，我们可以将这些样本用作下一次 Bregman 投影的边界分布 $\hat{}q_{t_0}$（$\mathbf{v}^{t_0}$，$\mathbf{x}^{t_0}$）的经验来源。进一步的解释和直观说明请参见附录。

4.4 参数化与训练目标函数

受先前工作 [14], 的成功启发，我们通过前向策略 $\mathbf{z}^\theta_t$ 或后向策略 $\hat{}\mathbf{z}^\phi_t$ 结合 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$ 或 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 中的一个约束来参数化路径测度（可参见附录中的图 8 了解可视化结果）。我们采用欧拉–丸山离散化，并将时间步长记为 δ_t。值得注意的是，通过最小化命题 3.1 中的相空间负对数似然，可以推出式 9b 和式 10b。这将得到以下目标函数，称为相空间均值匹配目标函数；在时间离散化之后，我们将用它来训练表示 $\mathbf{z}^\theta_t$ 和 $\hat{}\mathbf{z}^\phi_t$ 的神经网络:

$$\mathcal{L}_{MM} = \mathbb{E}\left[||\delta_t \mathbf{z}^\theta_t(\mathbf{m}_{t+\delta_t}) + \delta_t \widehat{\mathbf{z}}^\phi_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_{t+\delta_t}) - \left(\mathbf{m}_t + \delta_t \mathbf{z}^\theta_t - \mathbf{m}_{t+\delta_t}\right)||^2\right].$$

后续 Bregman 投影中参考路径测度的速度边界条件由式 9b 或式 10b 编码，但式 9b 中条件分布的表示尚不明确。我们利用薛定谔桥的优良性质，对此类分布进行参数化并从中采样。

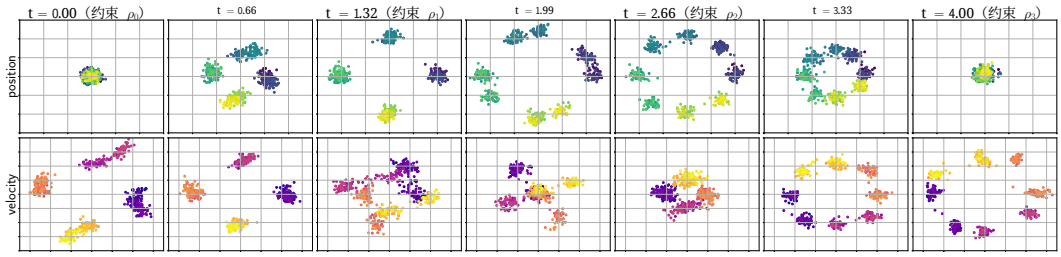


图4：在复杂GMM合成数据集上验证我们的 DMSB 模型。同一样本的位置和速度对应相同的阴影深浅。上方：位置空间中样本的演化。下方：速度空间中学习到的样本演化。

命题4.5 ([27, 28])。 如果 π^θ 和 $\overleftarrow{\pi}^\phi$ 共享相同的路径测度，则

$$\tilde{p}^{\theta,\phi}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i}) \equiv q^{\phi}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i}) \propto q^{\phi}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}), \quad \textit{where:} \quad \nabla_{\mathbf{v}} \log \tilde{p}^{\theta,\phi}_{t} = \left(\mathbf{z}^{\theta}_{t} + \widehat{\mathbf{z}}^{\phi}_{t}\right)/g. \tag{11}$$

命题4.5表明，可以使用 $p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) := \tilde{p}^{\theta,\phi}_{t_i}$ 来推导条件（9b），并通过模拟朗之万动力学从该分布中获取样本。也就是说，我们首先从真实值中采样位置 $\mathbf{x}_{t_i} \sim \rho_{t_i}$，然后使用公式11采样 $\mathbf{v}_{t_i} \sim \tilde{p}^{\theta,\phi}_{t}$。此外，还可以采用相同的正则化 [29] 来满足命题4.5的条件。

4.5 训练方案

这里介绍遍历 Bregman 迭代（见图2）的方案。在一次 Bregman 迭代中，所有约束都必须迭代一次。为了满足 $\mathcal{L}_{\text{MM}}$，参考路径测度应由相反方向诱导。由于参考路径测度方向存在冲突，单次 Bregman 迭代无法递归重复。例如（见图2），在第 d 次 Bregman 迭代结束时，前向策略产生了 π，而第 d 次 Bregman 迭代的第一次 Bregman 投影也在优化前向策略，这违反了 $\mathcal{L}_{\text{MM}}$。因此，我们重新安排优化顺序。具体而言，在第 $(d+1)$ 次 Bregman 迭代中，我们在第一次和最后一次 Bregman 投影时优化后向策略。

5 实验

设置： 我们在二维合成数据集和真实世界的单细胞 RNA 测序数据集 [30]上测试 DMSB。我们选择当前最先进的算法 MIOFlow [9] 和 NLSB [11] 作为基线方法。我们在硬件能力范围内尽可能将这两个模型调至最佳状态。我们选择切片Wasserstein距离（SWD）[31] 和最大均值差异（MMD）[32]，并结合可视化作为评估标准。训练和评估的详细设置见附录C。

合成数据集： Petal [9] 和高斯混合模型（GMM）数据集虽然简单，却颇具挑战性，因为它们模拟了细胞分化过程中出现的自然动力学，包括分叉和合并。我们在图 3 中将我们的算法与 MIOFlow 进行比较。与快照采集时刻的真实分布相比，DMSB 能够推断出更贴合真实分布的轨迹。

在 GMM 实验中（见图 4），我们在初始和终止时间步选择标准高斯分布，并在中间时间步设置四模态 GMM 和八模态高斯混合模型。除了能获得良好的位置轨迹，DMSB 还能学习合理的速度轨迹，而且 无需获取任何真实速度信息，这几乎令人惊喜。这为我们之后对 RNAsc数据集进行速度估计铺平了道路。 **单细胞 RNA-seq 数据集：** 单细胞分析技术的出现促进了高分辨率单细胞数据的获取，使研究者能够表征处于不同发育状态的单个细胞 [7]。然而，由于测量后细胞群体会被消耗，因此人们只能在特定时间步长收集单个样本的统计数据，而这些数据既无法保留

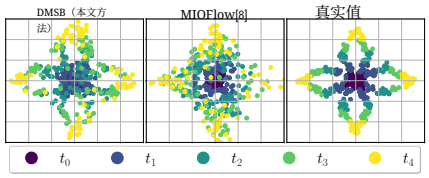


图 3：在具有挑战性的 Petal 数据集上与 MIOFlow 和真实值进行比较。DMSB 能够生成时间边缘分布忠实匹配真实值的轨迹，表现优于先前工作。颜色表示时间。

既不描述随时间变化的任何相关性，也无法获取真实轨迹。胚胎干细胞在胚状体发育后呈现出多样性，包括中胚层、内胚层、

表 3：在 100 维单细胞RNA测序数据集上 MMD 和 SWD 的数值结果，以及在不同观测下留出（LO）边缘分布的结果。对于两种指标和所有留出情况，DMSB 均大幅优于先前工作。3 个随机种子的结果见附录 4。

	最大均值差异 ↓				切片 Wasserstein 距离 ↓			
算法	不留出	LO-t_1	LO-t_2	LO-t_3	无 LO	LO-t_1	LO-t_2	LO-t_3
NLSB[10]	0.66	0.38	0.37	0.37	0.54	0.55	0.54	0.55
MIOFlow[8]	0.23	0.23	0.90	0.23	0.35	0.49	0.72	0.50
DMSB（我们的方法）	**0.03**	**0.04**	**0.04**	**0.04**	**0.20**	**0.20**	**0.19**	**0.18**

神经外胚层和神经嵴，这一过程历时 27 天，由单细胞 RNA 测序数据集展示。细胞快照采集时间为（t_0：第 0 至 3 天，t_1：第 6 至 9 天，t_2：第 12 至 15 天，t_3：第 18 至 21 天，t_4：第 24 至 27 天）。快照数据经过质量控制 [30] 预处理，然后通过主成分分析（PCA）投影到特征空间。我们采用了 [8] 中处理后的数据。我们在 5 维和 100 维主成分分析空间中验证 DMSB，以展示其相较于基线方法在高维问题上的优越性能。我们还进一步表明，在训练和测试期间均缺少真实值的情况下，DMSB 仍能比基线方法更准确地估计速度分布。

我们通过计算完整快照下以及缺少一个快照（LO）时的最大均值差异（MMD）和切片 Wasserstein 距离（SWD）来验证模型的性能。由于该问题相对简单，所有模型都能推断出准确的轨迹，我们将所有模型在 5 维 RNA空间上的比较推迟到附录中（见图 9 和表 6）。表 3 总结了在不同快照时间步长下，估计边际与真实值之间的平均最大均值差异（MMD）和切片 Wasserstein 距离（SWD）。在高维（100 维）场景中，DMSB 大幅优于先前工作。主成分分析空间中的可视化结果（图 5）进一步证明了数值结果的合理性，并突出了 DMSB 生成样本的多样性和质量。

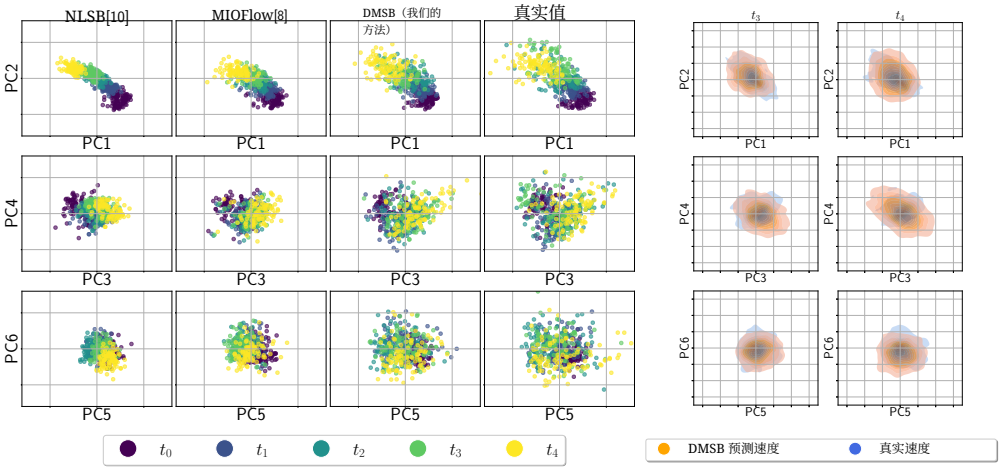


图 5：在使用 MIOFlow、NLSB 和 DMSB 处理单细胞 RNA 测序数据时，对观测时刻 100 维主成分分析空间中的群体级动力学进行比较。我们展示了前 6 个主成分（PC）的图。基线方法只能学习轨迹的基本趋势，而 DMSB 能够在不同维度上沿轨迹匹配目标边际。右图展示了 DMSB 生成样本与真实值在 t_3 和 t_4 处的核密度估计 [33]。所有时间步长下生成的样本以及与基线方法的比较见附录.F。

有趣的是，图 4 表明，DMSB 能够重建出合理的速度分布演化，而该演化过程对于算法而言原本是不可获取的。我们进一步在 100-D RNAsc 数据集上验证了这一性质。在训练和测试过程中，所有模型都无法获取真实速度。我们在 100-D 和 5-D RNAsc 数据集上进行了实验，并计算了跨快照时间的真实速度与估计速度之间差异的平均值。数值结果列于表 7 和表 6 中。速度和位置的图示见图 9 和图 10。图中显示，尽管所有模型都能够学习到合理的轨迹，但只有 DMSB 能够估计出可信的速度分布。即使对于

100-D RNA 数据集（见图 5、11、12），这一性质依然成立。值得注意的是，尽管 DMSB 估计的速度并不能与真实值完全匹配，但需要指出，所提出的相空间随机微分方程和最优传输的最优性均是人为设定的，未必能够代表实际的 RNA 演化。此外，由于无法追踪个体的演化，因此无法辨别诸如 {A→A, B→B} 与 {A→B, B→A} 这样的可能性，这使得精确的速度恢复几乎不可能。

6 结论与局限性

本文提出了 DMSB，这是一种可扩展的算法，可学习随时间拟合不同边缘分布的轨迹。我们将均值匹配目标扩展到相空间，从而能够高效计算 mSB。我们提出了一种新颖的训练方案，在不违反 Bregman 迭代（BI）的前提下拟合均值匹配目标，而这正是求解 mmmSB 问题的核心。我们展示了 DMSB 相较于现有算法的优越效果。
本工作的一个主要局限是，引入神经网络近似后，尚未量化其收敛到实际 mmmSB 的速率。尽管 [15] 从理论上分析了均值匹配迭代的收敛性，并支持其出色表现， [14], 但由于实际应用中的神经网络估计误差在 BI 过程中不断累积，该迭代仍无法 [34] 精确收敛到实际的薛定谔桥。不过，近期研究 [35] 表明，即使存在训练误差，薛定谔桥仍能收敛。此外，DMSB 无法模拟细胞死亡与出生的过程，而这一过程可以通过非平衡最优传输来描述 [36]。

7 致谢

本研究由 ARO 奖项 # W911NF2010151 和美国国防部基础研究办公室奖项 HQ00342110002 资助。

参考文献

[1] Yongxin Chen、Giovanni Conforti、Tryphon T Georgiou 和 Luigia Ripani。多边际薛定谔桥。载于国际几何信息科学会议，第 725–732 页。Springer，2019 年。[2] Geoffrey Schiebinger、Jian Shu、Marcin Tabaka、Brian Cleary、Vidya Subramanian、Aryeh Solomon、Joshua Gould、Siyan Liu、Stacie Lin、Peter Berube 等。单细胞基因表达的最优传输分析揭示了重编程中的发育轨迹。*Cell*，176 (4):928–943，2019 年。[3] Karren D Yang 和 Caroline Uhler。利用生成对抗网络实现可扩展的非平衡最优传输。*arXiv* 预印本 *arXiv:1810.11447*，2018年。[4] Mike Fisher、Jorge Nocedal、Yannick Trémolet 和 Stephen J Wright。天气预报中的数据同化：偏微分方程约束优化案例研究。优化与工程，10(3):409–426，2009 年。[5] Kenneth G Manton、XiLiang Gu 和 Gene R Lowrimore。美国老年人口健康预期寿命的队列变化：基于 1982–2004 年全国长期护理调查的经验。老年学期刊 *B* 系列：心理科学与社会科学，63(5):S269–S281，2008 年。[6] Tatsunori Hashimoto、David Gifford 和 Tommi Jaakkola。利用生成式循环神经网络学习群体层面扩散过程。载于国际机器学习会议，第 2417–2426 页。PMLR，2016 年。[7] Charlotte Bunne、Laetitia Papaxanthos、Andreas Krause 和 Marco Cuturi。群体动力学的近端最优传输建模。载于国际人工智能与统计学会议，第 6511–6528 页。PMLR，2022 年。[8] Alexander Tong、Jessie Huang、Guy Wolf、David Van Dijk 和 Smita Krishnaswamy。Trajector ynet：用于建模细胞动力学的动态最优传输网络。载于国际机器学习会议，第 9526–9536 页。PMLR，2020 年。[9] Guillaume Huguet、Daniel Sumner Magruder、Oluwadamilola Fasina、Alexander Tong、Manik Kuchroo、Guy Wolf 和 Smita Krishnaswamy。用于轨迹推断的流形插值最优传输流。*arXiv* 预印本 *arXiv:2206.14928*，2022 年。[10] Tian Qi Chen、Yulia Rubanova、Jesse Bettencourt 和 David K Duvenaud。神经常微分方程。载于神经信息处理系统进展，第 6572–6583 页，2018 年。[11] Takeshi Koshizuka 和 Issei Sato。神经拉格朗日薛\"定谔桥。*arXiv* 预印本 *arXiv:2204.04853*，2022 年。[12] Lénaïc Chizat、Stephen Zhang、Matthieu Heitz 和 Geoffrey Schiebinger。通过路径空间中的均值场朗之万过程进行轨迹推断。*arXiv* 预印本 *arXiv:2205.07146*，2022 年。[13] Tim Dockhorn、Arash Vahdat 和 Karsten Kreis。基于分数的生成建模与临界阻尼朗之万扩散。*arXiv* 预印本 *arXiv:2112.07068*，2021 年。[14] Tianrong Chen*、Guan-Horng Liu* 和 Evangelos A Theodorou。基于前向-后向随机微分方程理论的薛定谔桥似然训练。*arXiv* 预印本 *arXiv:2110.11291*，2021 年。[15] Valentin De Bortoli、James Thornton、Jeremy Heng 和 Arnaud Doucet。扩散薛定谔桥及其在基于分数的生成建模中的应用。*arXiv* 预印本 *arXiv:2106.01357*，2021 年。[16] Yuyang Shi、Valentin De Bortoli、George Deligiannidis 和 Arnaud Doucet。利用扩散薛定谔桥进行条件模拟。载于人工智能中的不确定性，第 1792–1802 页。PMLR，2022 年。

[17] Guan-Horng Liu、Arash Vahdat、De-An Huang、Evangelos A Theodorou、Weili Nie 和 Anima Anandkumar。I 2 sb：图像到图像薛定谔桥。*arXiv* 预印本 *arXiv:2302.05872*，2023年。[18] Guan-Horng Liu、Tianrong Chen、Oswin So 和 Evangelos A Theodorou。深度广义薛定谔桥。*arXiv* 预印本 *arXiv:2209.09893*，2022年。[19] James Thornton、Michael Hutchinson、Emile Mathieu、Valentin De Bortoli、Yee Whye Teh 和 Arnaud Doucet。黎曼扩散薛定谔桥。*arXiv* 预印本 *arXiv:2207.03024*，2022年。[20] Yang Song、Jascha Sohl-Dickstein、Diederik P Kingma、Abhishek Kumar、Stefano Ermon 和 Ben Poole。通过随机微分方程进行基于分数的生成建模。*arXiv* 预印本 *arXiv:2011.13456*，2020年。[21] Lev M Bregman。寻找凸集公共点的松弛方法及其在凸规划问题求解中的应用。苏联计算数学与数学物理，7(3)：200–217，1967年。[22] Michele Pavon 和 Anton Wakolbinger。关于自由能、随机控制和薛定谔过程。载于不确定性系统的建模、估计与控制，第334–348页。施普林格，1991年。[23] Francisco Vargas。经验薛定谔桥问题的机器学习方法。技术报告，剑桥大学计算机实验室，2021年。[24] Jean-David Benamou、Guillaume Carlier、Marco Cuturi、Luca Nenna 和 Gabriel Peyré。用于正则化运输问题的迭代布雷格曼投影。*SIAM* 科学计算期刊，37(2)：A1111–A1138，2015年。[25] Paolo Dai Pra。互易扩散过程的随机控制方法。应用数学与优化，23(1)：313–329，1991年。[26] Jean-David Benamou、Thomas O Gallouët 和 François-Xavier Vialard。最优传输的二阶模型与Wasserstein空间上的三次样条。计算数学基础，19(5)：1113–1143，2019年。[27] Brian DO Anderson。反向时间扩散方程模型。随机过程及其应用，12(3)：313–326，1982年。[28] Edward Nelson。布朗运动的动力学理论，第106卷。普林斯顿大学出版社，2020年。[29] Hung-Yu Tseng、Lu Jiang、Ce Liu、Ming-Hsuan Yang 和 Weilong Yang。在有限数据条件下对生成对抗网络进行正则化。载于*IEEE/CVF* 计算机视觉与模式识别会议论文集，第7921–7931页，2021年。[30] Kevin R Moon、David van Dijk、Zheng Wang、Scott Gigante、Daniel B Burkhardt、William S Chen、Kristina Yim、Antonia van den Elzen、Matthew J Hirn、Ronald R Coifman 等。可视化高维生物数据中的结构与转变。《自然·生物技术》，37(12)：1482–1492，2019年。[31] Nicolas Bonneel、Julien Rabin、Gabriel Peyré 和 Hanspeter Pfister。测度的切片与 Radon Wasserstein 重心。数学成像与视觉期刊，51：22–45，2015年。[32] Arthur Gretton、Karsten M Borgwardt、Malte J Rasch、Bernhard Schölkopf 和 Alexander Smola。核两样本检验。机器学习研究期刊，13(1)：723–773，2012年。[33] Murray Rosenblatt。关于密度函数的某些非参数估计的评论。数学统计年刊，第832–837页，1956年。[34] David Lopes Fernandes、Francisco Vargas、Carl Henrik Ek 和 Neill DF Campbell。射杀薛定谔的猫。载于近似贝叶斯推断进展第四届研讨会，2021年。

[35] Yu Chen、Wei Deng、Shikai Fang、Fengpei Li、Nicole Tianjiao Yang、Yikai Zhang、Kashif Rasul、Shandian Zhe、Anderson Schneider 和 Yuriy Nevmyvaka。具有可证明收敛性的薛定谔桥及其在概率时间序列插补中的应用。*arXiv* 预印本 *arXiv:2305.07247*，2023年。[36] Yongxin Chen、Tryphon T Georgiou 和 Michele Pavon。扩散粒子与消失粒子最可能的演化：具有非平衡边缘分布的薛定谔桥。*SIAM* 控制与优化期刊，60(4)：2016–2039，2022年。[37] Yang Song、Conor Durkan、Iain Murray 和 Stefano Ermon。基于分数的扩散模型的最大似然训练。*arXiv* 电子论文，第 arXiv–2101 页，2021年。[38] Jiongmin Yong 和 Xun Yu Zhou。随机控制：哈密顿系统与 *HJB* 方程，第43卷。施普林格科学与商业媒体，1999年。[39] Kenneth Caluya 和 Abhishek Halder。薛定谔桥问题的 Wasserstein 近端算法：具有非线性漂移的密度控制。*IEEE* 自动控制汇刊，2021年。[40] Ioannis Exarchos 和 Evangelos A Theodorou。通过前向和后向随机微分方程及重要性采样实现随机最优控制。*Automatica*，87：159–165，2018年。[41] Tianrong Chen、Ziyi O Wang、Ioannis Exarchos 和 Evangelos Theodorou。大规模多智能体深度前向-后向随机微分方程。载于国际机器学习会议，第 1740–1748页。PMLR，2021年。[42] Tianrong Chen、Ziyi Wang 和 Evangelos A Theodorou。用于意见动态随机控制的深度图形 FBSDE。载于*2022* 年 *IEEE* 第 *61* 届决策与控制会议（*CDC*），第4652–4659页。IEEE，2022年。[43] Hopf Eberhard。偏微分方程 ut+ uux= μxx。纯粹与应用数学通讯，3(3)：201–230，1950年。[44] Julian D Cole。空气动力学中出现的一类拟线性抛物型方程。应用数学季刊，9(3)：225–236，1951年。[45] Ilya Loshchilov 和 Frank Hutter。解耦权重衰减正则化。*arXiv* 预印本 *arXiv:1711.05101*，2017年。

A 附录

B 第 3 节和第4节的证明

在陈述证明之前，我们先给出全文中使用的假设。这些假设取自用于 SGM [27, 37, 38], 薛定谔桥 [39], 和前向-后向随机微分方程 [40–42]的随机分析。

(i) μ_{t_i} 对所有 t_i具有有限的二阶矩。(ii) $\boldsymbol{f}$ 和 g 是连续函数，并且 $|g(t)|^2 > 0$ 关于 t 一致有下界。(iii) $\forall t \in [0, T]$，我们有 $\nabla_{\mathbf{v}} \log p_t(\mathbf{m}_t, t)$ $\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi(\cdot, \cdot, \cdot)$ $\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi(\cdot, \cdot, \cdot)$、$Z(\cdot, \cdot, \cdot; \theta)$，以及$\widehat{Z}(\cdot, \cdot, \cdot; \phi)$关于 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{v}$ 满足利普希茨条件且至多线性增长。(iv) Ψ, $\widehat{\Psi} \in C^{1,2}$.

(v) $\exists k > 0 : p_t^{SB}(\mathbf{m}) = \mathcal{O}(\exp^{-\|\mathbf{m}\|_k^2})$ as $\mathbf{m} \to \infty$.

假设 (i)、(ii)、(iii) 是随机分析中的标准条件，用于确保随机微分方程的存在唯一性；因此，这些条件也出现在 SGM 分析中 [37]。假设 (iv) 允许应用伊藤公式，并在前向-后向随机微分方程理论中适当地定义后向随机微分方程。最后，假设 (v) 确保分部积分时的指数极限行为。无损一般性地，记作$\boldsymbol{f} = [\mathbf{v}\ \ \mathbf{0}]^{\mathsf{T}}$。

B.1 命题3.1的证明

命题 3.1 的结果是命题B.4 的部分结果，后者给出了前向和后向似然目标的结果。

定理B.1。优化问题

$$\min \int_0^1 \int \frac{1}{2} \|\mathbf{a}\|_2^2 \mu \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}t, \tag{12}$$

$$s.t \quad \begin{cases} \frac{\partial \mu(\mathbf{m}_t)}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{m}} \cdot \{[(\boldsymbol{f} + g\mathbf{u})]\, \mu\} + \frac{1}{2} g^2 \Delta_{\mathbf{v}} \mu, \\ \mu_0 = p(0, \mathbf{x}, \mathbf{v}), \quad \mu_1 = p(T, \mathbf{x}, \mathbf{v}), \end{cases} \tag{13}$$

将导出耦合偏微分方程，

$$\frac{\partial \mu(\mathbf{m}_t)}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{m}} \cdot \left[\left(\boldsymbol{f} + g^2 \nabla_{\mathbf{v}} \phi \right) \mu \right] + \frac{1}{2} g^2 \Delta_{\mathbf{v}} \mu, \tag{14}$$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{m}_t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \|g \nabla_{\mathbf{v}} \phi\|_2^2 - \mathbf{v}^{\mathsf{T}} \nabla_{\mathbf{x}} \phi - \frac{1}{2} g^2 \Delta_{\mathbf{v}} \phi, \tag{15}$$

以及该问题的最优控制为

$$\mathbf{a}^* = g \nabla_{\mathbf{v}} \phi.$$

证明。 通过引入拉格朗日乘子 ϕ，可以写出拉格朗日函数:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\mu,\mathbf{a},\phi) &= \int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|_2^2\mu\mathbf{dxdv}dt + \int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\phi\frac{\partial\mu}{\partial t}\mathbf{dvdx}dt\\
&+\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\phi\left\{-\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{m}}\mu+\nabla_{\mathbf{m}}\cdot\left[\left(\boldsymbol{f}+g\mathbf{u}\right)\mu\right]\right\}\mathbf{dvdx}dt\\
&=\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|_2^2\mu\mathbf{dxdv}dt-\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\mu\frac{\partial\phi}{\partial t}\mathbf{dvdx}dt\\
&+\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\phi\nabla_{\mathbf{m}}\cdot\left[\left(\boldsymbol{f}+g\mathbf{u}\right)\mu\right]-\phi\left[\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{m}}\mu\right]\mathbf{dvdx}dt\\
&=\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|_2^2\mu\mathbf{dxdv}dt-\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\mu\frac{\partial\phi}{\partial t}\mathbf{dvdx}dt\\
&+\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}-\nabla_{\mathbf{m}}\phi^{\mathsf{T}}\left[\left(\boldsymbol{f}+g\mathbf{u}\right)\right]\mu-\mu\left[\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{m}}\phi\right]\mathbf{dvdx}dt\\
&=\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\left\{\frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|_2^2-\frac{\partial\phi}{\partial t}-\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi-\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi-g\nabla_{\mathbf{v}}\phi^{\mathsf{T}}\mathbf{a}\right\}\mu\ \mathbf{dvdx}dt
\end{aligned}$$

对括号内进行最小化，可得最优控制为:

$$\mathbf{a}^*=g\nabla_{\mathbf{v}}\phi$$

将其代回后，上述问题的最优性可表述为:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\mu(\mathbf{m}_t)}{\partial t}&=-\nabla_{\mathbf{v}}\cdot\left[\left(\boldsymbol{f}+g^2\nabla_{\mathbf{v}}\phi\right)\mu\right]+\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\mu,\\
\frac{\partial\phi(\mathbf{m}_t)}{\partial t}&=-\frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2-\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi-\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi,
\end{aligned}$$

□

定理 B.2。 最优前向和反向过程表示为:

$$\mathrm{d}\mathbf{m}_t=\left[\boldsymbol{f}+g\mathbf{u}_t^{f*}\right]\mathrm{d}t+g(t)\mathrm{d}\mathbf{w}_t\quad\textit{(forward)}\tag{16}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{m}_s=\left[\boldsymbol{f}+g\mathbf{u}_s^{b*}\right]\mathrm{d}t+g(t)\mathrm{d}\mathbf{w}_s\quad\textit{(Backward)}\tag{17}$$

其中 $\boldsymbol{f}=[\mathbf{v}\ \mathbf{0}]^{\mathsf{T}}$。最优控制表示为:

$$\mathbf{u}_t^{f*}:=\mathbf{Z}_t\equiv\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \mathbf{z}_t\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ g\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi_t\end{pmatrix}\tag{18}$$

$$\mathbf{u}_t^{b*}:=\widehat{\mathbf{Z}}_t\equiv\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ \widehat{\mathbf{z}}_t\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}\mathbf{0}\\ g\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}_t\end{pmatrix}\tag{19}$$

$\widehat{\ }$其中 Ψ和 Ψ是下列偏微分方程的解，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\Psi_t}{\partial t}=-\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\Psi_t-\nabla_{\mathbf{x}}\Psi_t^{\mathsf{T}}\mathbf{v}\\
&\frac{\partial\widehat{\Psi}_t}{\partial t}=\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\widehat{\Psi}_t-\nabla_{\mathbf{x}}\widehat{\Psi}_t^{\mathsf{T}}\mathbf{v}\\
&s.t\quad\Psi(\mathbf{x},\mathbf{v},0)\widehat{\Psi}(\mathbf{x},\mathbf{v},0)=p(\mathbf{x},\mathbf{v},0),\quad\Psi(\mathbf{x},\mathbf{v},T)\widehat{\Psi}(\mathbf{x},\mathbf{v},T)=p(\mathbf{x},\mathbf{v},T)
\end{aligned}\tag{20}$$

证明。 由引理 B.1 可知，最优控制为:

$$\mathbf{a}^*=g\nabla_{\mathbf{v}}\phi.$$

利用 Hopf-Cole [43, 44] 变换，我们在此定义

$$\begin{aligned}
\Psi&=\exp\left(\phi\right),\\
\widehat{\Psi}&=\mu\exp\left(-\phi\right).
\end{aligned}$$

于是我们可以得到以下表达式：

$$
\begin{aligned}
\nabla\Psi &= \exp(\phi)\nabla\phi \\
\Delta\Psi &= \nabla\cdot(\nabla\Psi) \\
&= \sum_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{m}_i}\left[\exp\left(\phi\right)\nabla\phi\right] \\
&= \left[\nabla\phi^{\mathsf{T}}\left(\exp\left(\phi\right)\frac{\partial\phi_i}{\partial \mathbf{m}_i}\right) + \exp\left(\phi\right)\frac{\partial(\nabla\phi)_i}{\partial \mathbf{m}_i}\right] \\
&= \exp\left(\phi\right)\left[\|\nabla\phi\|_2^2 + \Delta\phi\right] \\
\nabla\widehat{\Psi} &= \mu\exp\left(-\phi\right)\left(-\nabla\phi\right) + \exp(-\phi)\nabla\mu \\
&= \exp(-\phi)(-\mu\nabla\phi + \nabla\mu) \\
\Delta\widehat{\Psi} &= \nabla\cdot\left(\nabla\widehat{\Psi}\right) \\
&= \sum_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{m}_i}\left[\exp\left(-\phi\right)\left(-\mu\nabla\phi + \nabla\mu\right)\right] \\
&= \sum_i \left[\left(-\mu\nabla\phi + \nabla\mu\right)^{\mathsf{T}}\left(\exp\left(-\phi\right)\frac{-\partial[\nabla\phi]_i}{\partial \mathbf{m}_i}\right)\right. \\
&\left. + \exp\left(-\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{m}_i}[\nabla\mu]_i - \mu\frac{\partial}{\partial \mathbf{m}_i}[\nabla\phi]_i - \nabla\phi^{\mathsf{T}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{m}_i}[\nabla\mu]_i\right)\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[\mu\|\nabla\phi\|_2^2 - \nabla\mu^{\mathsf{T}}\nabla\phi + \Delta\mu - \mu\Delta\phi - \nabla\phi^{\mathsf{T}}\nabla\mu\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[\mu\|\nabla\phi\|_2^2 - 2\nabla\mu^{\mathsf{T}}\nabla\phi + \Delta\mu - \mu\Delta\phi\right]
\end{aligned}
$$

因此，我们有。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \exp\left(\phi\right)\frac{\partial\phi}{\partial t} \\
&= \exp\left(\phi\right)\left(-\frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 - \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi - \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi\right) \\
&= -\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\Psi - \nabla_{\mathbf{x}}\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} \\
\frac{\partial\widehat{\Psi}}{\partial t} &= \exp\left(-\phi\right)\frac{\partial\mu}{\partial t} - \mu\exp\left(-\phi\right)\frac{\partial\phi}{\partial t} \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left(\frac{\partial\mu}{\partial t} - \mu\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[-\nabla_{\mathbf{m}}\cdot\left\{\left[\left(\boldsymbol{f} + g\mathbf{u}\right)\mathbf{I}_d\right]\mu\right\} + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{m}}\mu + \mu\left(\frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 + \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi\right)\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[-\nabla_{\mathbf{v}}\cdot\left(g^2\mu\nabla_{\mathbf{v}}\phi\right) - \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\mu + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\mu + \frac{\mu}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 + \mu\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi + \mu\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[-g^2\nabla_{\mathbf{v}}\mu^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\phi - g^2\mu\Delta_{\mathbf{v}}\phi - \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\mu + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\mu + \frac{\mu}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 + \mu\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi + \mu\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[-g^2\nabla_{\mathbf{v}}\mu^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\phi - \mu\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi - \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\mu + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\mu + \frac{\mu}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 + \mu\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi\right] \\
&= \exp\left(-\phi\right)\left[\frac{\mu}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}}\phi\|_2^2 - g^2\nabla_{\mathbf{v}}\mu^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\phi - \mu\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\phi + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\mu - \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\mu + \mu\mathbf{v}^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{x}}\phi\right] \\
&= \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\hat{\Psi} - \nabla_{\mathbf{x}}\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v}
\end{aligned}
$$

那么，我们可以将最优控制表示为:

$$\mathbf{u}_t^{f*} := \mathbf{Z}_t \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{z}_t \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$\equiv \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}}\phi \end{pmatrix} \overset{\text{Hopf-Cole}}{=} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi_t \end{pmatrix} \tag{22}$$

因此，此类 mSB 的解由以下前向随机微分方程刻画:

$$\mathrm{d}\mathbf{m}_t = \left[\boldsymbol{f} + g\mathbf{u}_t^{f*}\right] \mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}\mathbf{w}_t, \tag{23}$$

由于霍普夫-科尔变换的结构，可以得到

$$p_t^{SB} = p_t^{eq.(23)} = \Psi_t \widehat{\Psi}_t \tag{24}$$

根据 [27, 28], 此类随机微分方程（式 23）的反向漂移$\mathbf{u}_t^{b*}$应满足,

$$\mathbf{u}_t^{f*} + \mathbf{u}_t^{b*} = \mathbf{g}\nabla_{\mathbf{v}} \log p_t^{SB} \tag{25}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi_t \end{pmatrix} + \mathbf{u}_t^{b*} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi_t + g\nabla_{\mathbf{v}} \log \widehat{\Psi}_t \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$\mathbf{u}_t^{b*} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}} \log \widehat{\Psi}_t \end{pmatrix} \tag{27}$$

由此得到反向最优控制

$$\mathbf{u}_t^{b*} := \widehat{\mathbf{Z}}_t \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \widehat{\mathbf{z}}_t \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ g\nabla_{\mathbf{v}} \log \widehat{\Psi}_t \end{pmatrix} \tag{28}$$

因此，最优的前向和反向过程为

$$\mathrm{d}\mathbf{m}_t = \left[\boldsymbol{f} + g\mathbf{u}_t^{f*}\right] \mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}\mathbf{w}_t \tag{29}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{m}_s = \left[\boldsymbol{f} + g\mathbf{u}_s^{b*}\right] \mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}\widehat{\mathbf{w}}_s \tag{30}$$

$\widehat{\ }$并且 Ψ和 Ψ 满足以下偏微分方程,

$$\frac{\partial \Psi_t}{\partial t} = -\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\Psi_t - \nabla_{\mathbf{x}}\Psi_t^{\mathsf{T}}\mathbf{v}$$

$$\frac{\partial \widehat{\Psi}_t}{\partial t} = \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\widehat{\Psi}_t - \nabla_{\mathbf{x}}\widehat{\Psi}_t^{\mathsf{T}}\mathbf{v}$$

□

引理 B.3. 通过指定 $\boldsymbol{f} = [\mathbf{v}\ \mathbf{0}]^{\mathsf{T}}$，式 *(20)* 中所示的偏微分方程可表示为以下随机微分方程

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}\mathbf{x} \\ \mathrm{d}\mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ -g^2\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi \end{pmatrix} \mathrm{d}t + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & g \end{pmatrix} \mathrm{d}\mathbf{w} \tag{31}$$

$$\mathrm{d}\mathbf{y} = \frac{1}{2}\|\mathbf{z}\|^2 \mathrm{d}t + \mathbf{z}^{\mathsf{T}}\mathrm{d}\mathbf{w}_t \tag{32}$$

$$\mathrm{d}\widehat{\mathbf{y}} = \left[\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}\|^2 + \mathbf{z}^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\widehat{\mathbf{z}}\right] \mathrm{d}t + \widehat{\mathbf{z}}^{\mathsf{T}}\mathrm{d}\mathbf{w}_t \tag{33}$$

$$\boldsymbol{s.t}: \exp\left(\mathbf{y}_0 + \widehat{\mathbf{y}}_0\right) = p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, 0), \quad \exp\left(\mathbf{y}_T + \widehat{\mathbf{y}}_T\right) = p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, T) \tag{34}$$

其中:

$$\mathbf{y} \equiv \mathbf{y}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}, t) = \log \Psi(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t), \quad \mathbf{z} \equiv \mathbf{z}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = g\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t)$$

$$\widehat{\mathbf{y}} \equiv \widehat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = \log \widehat{\Psi}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t), \quad \widehat{\mathbf{z}} \equiv \widehat{\mathbf{z}}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = g\nabla_{\mathbf{v}} \log \widehat{\Psi}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t)$$

证明。 可以写成

$$\begin{aligned}\frac{\partial \log \Psi}{\partial t} &= \frac{1}{\Psi}\left(-\nabla_{\mathbf{x}}\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} - \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\Psi\right)\\ &= -\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} - \frac{1}{2}g^2\frac{\Delta_{\mathbf{v}}\Psi}{\Psi}\\ &= -\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} - \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\Psi}\nabla_{\mathbf{v}}^2\Psi\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \log \widehat{\Psi}}{\partial t} &= \frac{1}{\widehat{\Psi}}\left(-\nabla_{\mathbf{x}}\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\widehat{\Psi}\right)\\ &= -\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} - \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\widehat{\Psi}}\nabla_{\mathbf{v}}^2\widehat{\Psi}\right]\end{aligned}$$

通过应用伊藤引理,

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\log\Psi &= \frac{\partial\log\Psi}{\partial t}\mathrm{d}t + \left[\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + g^2\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi\|_2^2 + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\log\Psi\right]\mathrm{d}t + \left[\nabla_{\mathbf{m}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\right]g\mathrm{d}\mathbf{w}_t\\ &= \left[-\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} - \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\Psi}\nabla_{\mathbf{v}}^2\Psi\right]\right]\mathrm{d}t\\ &+ \left[\nabla_{\mathbf{x}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + g^2\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi\|_2^2 + \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\Psi}\nabla_{\mathbf{v}}^2\Psi - \frac{1}{\Psi^2}\nabla_{\mathbf{v}}\Psi\nabla_{\mathbf{v}}\Psi^{\mathsf{T}}\right]\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\\ &= \left[g^2\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi\|_2^2 - \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\Psi^2}\nabla_{\mathbf{v}}\Psi\nabla_{\mathbf{v}}\Psi^{\mathsf{T}}\right]\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\\ &= \left[\frac{1}{2}g^2\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi\|_2^2\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\end{aligned}$$

同样地，可以得到,

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\log\widehat{\Psi} &= \frac{\partial\log\widehat{\Psi}}{\partial t}\mathrm{d}t + \left[\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + g^2\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi} + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\right]\mathrm{d}t + \left[\nabla_{\mathbf{m}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\right]g\mathrm{d}\mathbf{w}_t\\ &= \left[-\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\widehat{\Psi}}\nabla_{\mathbf{v}}^2\widehat{\Psi}\right]\right]\mathrm{d}t\\ &+ \left[\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + g^2\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi} + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\end{aligned}$$

注意到:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\widehat{\Psi}}\nabla_{\mathbf{v}}^2\widehat{\Psi} + \nabla_{\mathbf{v}}^2\log\widehat{\Psi}\right] &= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\Psi}\nabla_{\mathbf{v}}^2\widehat{\Psi} - \frac{1}{2}\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\|^2\right]\\ &= \frac{1}{2}\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\|^2 + \Delta_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\end{aligned}$$

根据上述推导，可得,

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\log\widehat{\Psi} &= \left[-\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + \frac{1}{2}g^2\,\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{\widehat{\Psi}}\nabla_{\mathbf{v}}^2\widehat{\Psi}\right]\right]\mathrm{d}t\\ &+ \left[\nabla_{\mathbf{x}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\mathbf{v} + g^2\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi} + \frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\\ &= \left[g^2\nabla_{\mathbf{v}}\log\Psi^{\mathsf{T}}\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi} + \frac{1}{2}g^2\|\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\|^2 + 2\frac{1}{2}g^2\Delta_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}\right]\mathrm{d}t + g\left[\nabla_{\mathbf{v}}\log\widehat{\Psi}^{\mathsf{T}}\right]\mathrm{d}\mathbf{w}_t\end{aligned}$$

定义

$$\mathbf{y} \equiv \mathbf{y}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}, t) = \log \Psi(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t), \quad \mathbf{z} \equiv \mathbf{z}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = g\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t)$$
$$\widehat{\mathbf{y}} \equiv \widehat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = \log \widehat{\Psi}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t), \quad \widehat{\mathbf{z}} \equiv \widehat{\mathbf{z}}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t) = g\nabla_{\mathbf{v}} \log \widehat{\Psi}(\mathbf{x}_t, \mathbf{v}_t, t)$$

由此可得结论。

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \mathrm{d}\mathbf{x} \\ \mathrm{d}\mathbf{v} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ -g^2\nabla_{\mathbf{v}} \log \Psi \end{pmatrix} \mathrm{d}t + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & g \end{pmatrix} \mathrm{d}\mathbf{w} \\
\mathrm{d}\mathbf{y} &= \frac{1}{2}\|\mathbf{z}\|^2 \mathrm{d}t + \mathbf{z}^{\mathsf{T}} \mathrm{d}\mathbf{w}_t \\
\mathrm{d}\widehat{\mathbf{y}} &= \left[\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}\|^2 + \mathbf{z}^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\widehat{\mathbf{z}}\right] \mathrm{d}t + \widehat{\mathbf{z}}^{\mathsf{T}} \mathrm{d}\mathbf{w}_t \\
\textbf{s.t}: \exp\left(\mathbf{y}_0 + \widehat{\mathbf{y}}_0\right) &= p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, 0), \quad \exp\left(\mathbf{y}_T + \widehat{\mathbf{y}}_T\right) = p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, T)
\end{aligned}$$

□

命题 B.4. 数据点$\mathbf{m}_0$ 处的对数似然可表示为

$$\begin{aligned}
\log p(\mathbf{m}_0, 0) &= \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (17)}\left[\log p(\mathbf{m}_T, T)\right] - \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (17)}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 \mathrm{d}t + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 + \mathbf{z}_t^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}}_t + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\widehat{\mathbf{z}}_t\right] \mathrm{d}t \\
&= \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (17)}\left[\log p(\mathbf{m}_T, T)\right] - \\
&\quad \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (17)}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 + \underbrace{\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(17)} + \mathbf{z}_t\|^2}_{\textit{mean matching objective}} - \frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(17)} - \mathbf{z}_t\|^2\right] \mathrm{d}t \\
&\propto \quad \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (17)}\left[\underbrace{\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(17)} + \mathbf{z}_t\|^2}_{\textit{mean matching objective}}\right] \mathrm{d}t \\
\log p(\mathbf{m}_T, T) &= \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (16)}\left[\log p(\mathbf{m}_0, 0)\right] - \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (16)}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 \mathrm{d}t + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 + \mathbf{z}_t^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}}_t + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\mathbf{z}_t\right] \mathrm{d}t \\
&= \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (16)}\left[\log p(\mathbf{m}_0, 0)\right] - \\
&\quad \int_0^T \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (16)}\left[\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 + \underbrace{\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(16)} + \mathbf{z}_t\|^2}_{\textit{mean matching objective}} - \frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(16)} - \widehat{\mathbf{z}}_t\|^2\right] \mathrm{d}t \\
&\propto \mathbb{E}_{\mathbf{m}_t \sim (16)}\left[\underbrace{\frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{(16)} + \mathbf{z}_t\|^2}_{\textit{mean matching objective}}\right] \mathrm{d}t
\end{aligned}$$

通过依次在时刻 $t = 0$ 和 $t = T$ 最大化对数似然，$(\mathbf{z}_t, \widehat{\mathbf{z}}_t)$ 将收敛到相空间 *SB* 的解。

证明。根据引理 B.3，可以得到：

$$
\begin{aligned}
\log p(\mathbf{m}_0, 0) &= \mathbb{E}\left[\mathbf{y}_0 + \widehat{\mathbf{y}}_0\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{y}_T + \widehat{\mathbf{y}}_T\right] - \int_0^T \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 \mathrm{d}t + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 + \mathbf{z}_t^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}}_t + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\widehat{\mathbf{z}}_t\right] \mathrm{d}t \\
&= \mathbb{E}\left[\log p(\mathbf{m}_T, T)\right] - \int_0^T \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 + \mathbf{z}_t^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}}_t + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot g\widehat{\mathbf{z}}_t\right] \mathrm{d}t \\
&= \mathbb{E}\left[\log p(\mathbf{m}_T, T)\right] - \int_0^T \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t\|^2 - \widehat{\mathbf{z}}_t^{\mathsf{T}}\left(g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{SB}\right) + \mathbf{z}_t^{\mathsf{T}}\widehat{\mathbf{z}}_t\right] \mathrm{d}t \\
&= \mathbb{E}\left[\log p(\mathbf{m}_T, T)\right] \\
&\quad - \int_0^T \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\|\mathbf{z}_t\|^2 + \frac{1}{2}\|\widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{SB} + \mathbf{z}_t\|^2 - \frac{1}{2}\|g\nabla_{\mathbf{v}} \log p^{SB} - \mathbf{z}_t\|^2\right] \mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

对于 log $p(\mathbf{m}_T, T)$，也可以得到类似的结果。
可以看出，似然目标是 [15], 提出的均值匹配目标的连续时间类比，而在 $logp(\mathbf{m}_0, 0)$ 与 log $p(\mathbf{m}_T,\ T)$ 之间进行迭代优化，则是迭代比例拟合的连续类比。因此，收敛性证明仍然成立（参见[15]中的命题 4）。 □

迭代比例拟合中的 KL 散度优化与似然优化之间的等价性已在 [14, 15, 18] 中得到广泛分析。目标函数最终会归结为上述命题 B.4 中给出的均值匹配目标。

命题 B.5 (关于 的最优性 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$)。 。给定由策略 $\widehat{\ }\mathbf{z}_t$ 在反向时间方向上从边界 $\mu_{t_{i+1}}$ 驱动的参考路径测度 $\bar{\pi}$，以下问题在正向时间方向上的最优路径测度

$$
\min_{\pi} \mathcal{J}(\pi) := \sum_{i=0}^{N-1} KL\left(\pi_{t_i:t_{i+1}} | \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}\right), \quad s.t \quad \pi \quad \in \left\{\int \pi_{t_i:t_{i+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} = \mu_{t_i}, \int \mu_{t_i} \mathbf{dv}_{t_i} = \rho_{t_i}\right\}
$$

$$
is: \qquad \pi^*_{t_i:t_{i+1}} = \frac{\rho_{t_i} \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}}{\int \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} \mathbf{dv}_{t_i}}.
$$

当 $\pi_{t_i:\ t_{i+1}} \equiv \pi^*_{t_i:\ t_{i+1}}$ 时，以下方程需要成立 $\forall t \in [t_i, t_{i+1}]$:

$$
\|\mathbf{z}_t + \widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log \hat{p}_t\|_2^2 = 0, \tag{35a}
$$

$$
p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i} | \mathbf{x}_{t_i}) \equiv \hat{q}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i} | \mathbf{x}_{t_i}), \tag{35b}
$$

其中，$\widehat{\ }p_t$ 和 $\widehat{\ }q_t$ 分别表示参考路径测度在时间 t 和 t_i处的边缘密度和条件速度分布。

证明。 由于 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$的优化过程相似，下一个路径测度的闭式解为（详情请参见 [1]中的第4节）：

$$
\pi^*_{t_i:t_{i+1}} = \frac{\rho_{t_i} \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}}{\int \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}} \mathbf{dm}_{t_{i+1}} \mathbf{dv}_{t_i}}.
$$

记由后向策略 $\widehat{\ }\mathbf{z}_t$ 驱动的参数化随机微分方程的转移核为 $q(\cdot|\cdot)$，并通过 EM 离散化将 t_i 与 t_{i+1} 之间的时间范围离散为 S 个区间。于是可以

get

$$
\begin{aligned}
&\pi^*_{t_i:t_{i+1}} \\
&= \frac{\rho_{t_i}\bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}}{\int \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}} \mathrm{d}\mathbf{m}_{t_{i+1}} \mathrm{d}\mathbf{v}_{t_i}} \\
&= \frac{p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_i}(\mathbf{m}_{t_i}|\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i})} \\
&= \frac{p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}, \mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t}) q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t})} \\
&= \frac{p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}, \mathbf{v}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t})} \\
&= \frac{p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{x}_{t_i}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t})} \\
&= p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i+\delta_t}, \mathbf{v}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{x}_{t_i}) \frac{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+2\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t})} \\
&= p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i}) \frac{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+2\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t})} \\
&= p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i}) \frac{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+2\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}) \cdots q_{t_{i+1}-\delta_t}(\mathbf{m}_{t_{i+1}-\delta_t}|\mathbf{m}_{t_{i+1}}) \mu_{t_{i+1}}(\mathbf{m}_{t_{i+1}})}{q_{t_{i+\delta_t}}(\mathbf{m}_{t_i+2\delta_t})}
\end{aligned} \tag{36}
$$

递归计算公式36

$$
\begin{aligned}
&= p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{m}_{t_i+\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i}) \prod_{s=1}^{S-1} q_s(\mathbf{m}_{t_i+(s+1)\cdot\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+s\cdot\delta_t}) \\
&= p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) q(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) \prod_{s=0}^{S-1} q_s(\mathbf{m}_{t_i+(s+1)\cdot\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+s\cdot\delta_t})
\end{aligned}
$$

根据 [15], , 给定策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$, 转移核 $q_s(\mathbf{m}_{t_i+(s+1)\cdot\delta_t}|\mathbf{m}_{t_i+s\cdot\delta_t})$ 可通过 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 进行估计（参见 [15] 中的命题3）, 并且对于所有 s, 都可以将其视为前向策略$\mathbf{z}_t$ 的标签。因此, 如果 $\pi_{t_i t_{i+1}}$ 与 $\pi^*_{t_i t_{i+1}}$对齐, 那么可以为策略$\mathbf{z}_t$构造如下目标函数:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \sum_t \|\underbrace{\mathbf{m}_t + \delta_t \mathbf{Z}_t(\mathbf{m}_t)}_{①} - (\mathbf{m}_t + \underbrace{\mathbf{m}_{t+\delta_t} + \delta_t \widehat{\mathbf{Z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_{t+\delta_t})}_{②} - (\underbrace{\mathbf{m}_t + \delta_t \widehat{\mathbf{Z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_t)}_{③}))\|_2^2 && (37) \\
&= \sum_t \|\delta_t \mathbf{Z}_t(\mathbf{m}_t) + \delta_t \widehat{\mathbf{Z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_t) - (\mathbf{m}_{t+\delta_t} - \mathbf{m}_t - \delta_t \widehat{\mathbf{Z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_{t+\delta_t}))\|_2^2 && (38) \\
&\approx \sum_t \|\mathbf{Z}_t(\mathbf{m}_t) + \widehat{\mathbf{Z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_t) - \nabla_{\mathbf{v}} \log p_t^{(17)}\|_2^2 && (39) \\
&\quad \textbf{due to the special structure of } \mathbf{Z}_t \textbf{ and } \widehat{\mathbf{Z}}_t && (40) \\
&= \sum_t \|\mathbf{z}_t(\mathbf{m}_t) + \widehat{\mathbf{z}}_{t+\delta_t}(\mathbf{m}_t) - \nabla_{\mathbf{v}} \log p_t^{(17)}\|_2^2 && (41)
\end{aligned}
$$

其中 1 、 2 、 3 分别对应 F_k, B_k和 B_{k+1} 在 [15] 中。此外，我们需要求出一个密度函数 $p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}^{t_i})$，使其满足

$$
\begin{aligned}
p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) &\equiv p_{t_i}(\mathbf{x}_{t_i}) \hat{q}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) \\
p_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i}) &\equiv \hat{q}_{t_i}(\mathbf{v}_{t_i}|\mathbf{x}_{t_i})
\end{aligned}
$$

作为新的边界条件。 □

命题B.6（关于 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$ 的最优性）。 给定由策略 $\hat{}\mathbf{z}_t$ 从反向时间方向上的边界 μ_{t_N} 驱动的参考路径测度 $\bar{\pi}$，以下问题在正向时间方向上的最优路径测度

$$\min_{\pi} \mathcal{J}(\pi) := \sum_{i=0}^{N-1} KL\left(\pi_{t_i:t_{i+1}} | \bar{\pi}_{t_i:t_{i+1}}\right), \quad s.t \quad \pi \in \mathcal{K}_{bridge} = \left\{\cap_{i=1}^{N-1} \mathcal{K}_{t_i}^2\right\}$$
$$is: \quad \pi^*_{t_0 t_N} = \frac{q_{t_0} \bar{\pi}_{t_0:t_N}}{\int \bar{\pi}_{t_0:t_N} \mathbf{dm}_{t_N} \mathbf{dv}_{t_0}}.$$

当 $\pi_{t_0 t_N} \equiv \pi^*_{t_0 t_N}$ 时，需要满足以下方程 $\forall t \in [t_0, t_N]$:

$$\|\mathbf{z}_t + \widehat{\mathbf{z}}_t - g\nabla_{\mathbf{v}} \log \hat{p}_t\|_2^2 = 0 \tag{42a}$$
$$p_{t_0}(\mathbf{v}_{t_0}, \mathbf{x}_{t_0}) \equiv \hat{q}_{t_0}(\mathbf{v}_{t_0}, \mathbf{x}_{t_0}) \tag{42b}$$

证明。与 B.5 的证明相同。 □

注 B.7。 此类问题的优化器可以表示为

$$\pi^* = \mu_{t_N} \bar{\pi}_{\cdot|t_N} \tag{43}$$

也可以表示为:

$$\pi^* = \int \bar{\pi} \mathrm{d}\mu_{t_N} \cdot \left(\bar{\pi}_{\cdot|t_N}\right)^R \tag{44}$$

其中，记号 R 表示时间反演。命题 4.4 基本上使用神经网络$\mathbf{Z}_t^\theta$ 来近似式 44。

C 实验详情

我们在二维合成数据集和真实的单细胞 RNA 测序数据集 [30]上测试 DMSB。对于所有数据集，我们使用基于残差的网络对$\mathbf{z}(t,\ \mathbf{m};\ \theta)$和$\hat{}\mathbf{z}(t,\ \mathbf{m};\ \phi)$进行参数化（见图 6）。该网络采用位置编码，并使用 AdamW[45] 在一块 Nvidia 3090 Ti GPU 上进行训练。为简化起见，我们使用常数 g(t)，但该框架也可以采用随时间变化的函数 g(t)。我们设置时间范围$T = t_N = 1 \cdot N$和区间 $\delta_t = 0.01$。全文始终采用 EM 离散化。对于单细胞 RNA 测序数据集，我们将数据划分为训练集和测试集（85% 和 15 %）。所有实验结果均通过从时间 $t = t_0$的初始数据点进行全步推进来模拟。

MIOFlow 和 NLSB 设置： 我们使用 NLSB 和 MIOFlow 的官方实现。对于 MIOFlow，我们报告所有实验中使用 GAE（或 AE）嵌入和不使用 GAE（或 AE）嵌入时的最佳性能。对于 NLSB，我们将神经网络的规模扩大到 GPU 容量所允许的最大程度，以处理一个 100 维的单细胞 RNA 测序数据集，并报告训练期间的最佳性能。

我们通过 NLSB 这一随机微分方程模型在各时间步$t = \{1, 2, 3, 4, 5\}$处的估计漂移项来评估其速度。由于带有 GAE 的 MIOFlow 在潜在空间中模拟轨迹，因此我们先将潜在编码映射回原始空间，再使用离散化为 $1E-3$ 秒的前向有限差分法估计速度。我们在 100 维和 5 维 RNAsc 数据集上进行实验，并计算快照时间范围内真实速度与估计速度之间的差异均值。数值结果列于表 7 和表 6 中。速度和位置的图示见图 9 和图 10。**我们无意低估任何先前工作，并已尽力调优先前工作。如果有人能在实验部分复现出更好的结果，欢迎与第一作者交流；我们愿意对此进行更新。**

指标与评估1-瓦瑟斯坦距离严重受到维数灾难的影响。在主论文中，对于 100 维 RNA 数据集，我们使用切片Wasserstein距离（SWD）和最大均值距离作为评判标准。下面的玩具代码给出了一个示例。可以注意到，W_1 严重受到维数灾难的影响；两个高斯样本之间的距离甚至大于高斯样本与零向量之间的距离（见下面的代码截取）。因此，即使一些论文报告了 W_1，该指标也不适用于高维（≥ 100）数据集评估。为了更好地将我们的模型与基线方法进行比较，我们使用 W_1、能量距离、最大切片Wasserstein距离、切片Wasserstein距离和最大均值差异。我们的指标改编自 Geoloss（W_1 和 $Energy$）、POT（切片 Wasserstein 距离和最大切片 Wasserstein 距离）以及此代码库（最大均值差异）。

轨迹缓存 与先前工作类似 [14, 15], , 我们也需要缓存轨迹以用于训练。我们为每次布雷格曼投影缓存 4096 条轨迹。

NLSB 的特别说明

我们通过 NLSB 作为随机微分方程模型在时间步$t = \{1, 2, 3, 4, 5\}$处的估计漂移项来评估其速度。将漂移项视为真实速度可能并不合理，但它确实能够描绘随机微分方程的变化趋势，因此我们仍在此提供结果。

```
1 from ot . sliced import sliced_wasserstein_distance 2 a=torch . randn (1000 ,100) #
10
ra
a
{}
间
```

图 1：使用 SWD 距离计算 1000 个样本和 100 个维度下的距离。

```
from geomloss import SamplesLoss 2 a=torch . randn (1000 ,100) # 1000 个维度为 100
的
ra
6
离
c
```

列表 2：使用距离计算得到的距离，包含 1000 个样本和 100 个维度。

训练：我们使用指数移动平均（EMA），衰减率为 0.999。表 7 详细列出了每个数据集所使用的超参数。所有数据集的学习率均设置为 2e-4，训练批次大小为 256。为提高计算效率，我们从参考轨迹中缓存大批量经验样本，并从缓存数据中采样训练批次大小的样本。超参数见表 7。

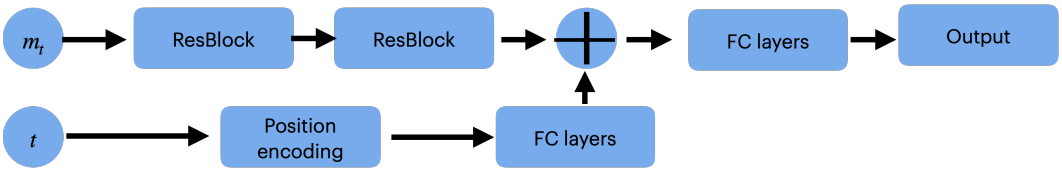


图 6：所有实验所使用的神经网络架构。不同任务的网络规模（# 参数）有所不同。

图 7：训练超参数

数据集	时间步	# BI	$g(t)$	# 参数	T	SNR	#$\mathbf{v}_t$ 朗之万
半圆	15	2000	0.2	1.21M	3	0.15	1
Petal	30	2000	0.2	1.21M	2	0.15	1
GMM	15	2000	0.2	1.21M	4	0.15	1
单细胞 RNA（100 维）	15	4000	0.4	1.34M	4	0.15	1

朗之万采样：速度的朗之万采样过程总结见 2。给定预先设定的信噪比 r（我们在所有实验中均设为 snr =0.15），每个时间步 t 和每个校正步 i 的朗之万噪声尺度 σ 计算如下：

$$\sigma_t = \frac{2r^2 g^2 \|\epsilon\|^2}{\|\mathbf{z}(t, \mathbf{m}_t) + \widehat{\mathbf{z}}(t, \mathbf{m}_t)\|^2}, \tag{45}$$

D 算法

算法 1 DMSB采样过程

输入：策略 z(·, ·; θ) 和 ^z(·, ·; ϕ)；总采样步数 $S = \frac{t_N}{\delta_t}$；数据分布 ρ_{t_i}。若初始速度分布 $\gamma_{t_i} = \mathcal{N}$(0, I) 不可用，则进行初始化。对于 $s = 0$ 到 $S - 1$，如果 s==0，则从 ρ_{t_0} 中采样位置数据 x^{t_0}。如果真实速度分布 γ_{t_0} 可用，则从 γ_{t_0} 中采样速度数据 v^{t_0}；否则，在以 x^{t_0} 为条件的情况下，通过朗之万模拟采样速度数据 v^{t_0}。（算法.2）结束条件判断。$\mathrm{m}_{t_0} = [\mathrm{x}^{t_0}, \mathrm{v}_{t_0}]^\mathsf{T}$。模拟动力学：$\mathrm{dm}_t = [\boldsymbol{f}(\mathrm{m}_t, t) + g(t)\mathrm{Z}_t]\,\mathrm{d}t + g(t)\mathrm{dw}_t$（公式.16）。结束循环。返回 $\mathrm{m}^{t\in[t_0,t_N]}$

算法 2 朗之万采样器，在 t_i 边缘约束下

输入：策略 z(·, ·; θ) 和 ^z(·, ·; ϕ)，前一时间步的预测速度 v^{t_i}。从真实值 $\mathrm{x}_{t_i} \sim \rho_{t_i}$中采样位置。对于 $step = 0$ 到 # 个朗之万步数，执行：采样 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$。构造新的 $\mathrm{m}_{t_i} = [\mathrm{x}^{t_i}, \mathrm{v}_{t_i}]^\mathsf{T}$。使用 $\nabla_\mathrm{v} \log \tilde{p}^{\theta,\phi}_{t_i} \approx$ [z(t_i, m^{t_i})+^z(t_i, m^{t_i})]/g计算。使用式 (45) 计算 σ_t。朗之万采样 $\mathrm{v}_{t_i} \leftarrow \mathrm{v}_{t_i} + \sigma_{t_i}\nabla_\mathrm{v} \log \tilde{p}^{\theta,\phi}_{t_i} + \sqrt{2\sigma_t}\,\epsilon$。结束循环。返回 $\mathrm{m}_{t_i} = [\mathrm{x}^{t_i}, \mathrm{v}_{t_i}]^\mathsf{T}$

算法 3 DMSB 训练

输入： $N+1$ 边缘位置分布 ρ_{t_i}，$i \in [0, N]$。参数化策略 $\mathbf{z}(\cdots;\theta)$ 和 $\hat{\mathbf{z}}(\cdots;\phi)$。Bregman 迭代的次数 B。初始化时间步 t_i 的位置和速度：$\bar{\mathbf{m}}^{t_i} := None$ 对于第一次迭代。

如果 使用真实速度**则**

设置先验速度：$\gamma_{t_i} = \gamma_{t_i}$

else

设置初始速度 $\gamma_{t_i} = \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$

结束 if

对于 $b = 0$ **到** $B-1$，**执行**

对于 $k = N$ **到**1 **执行**

$\mathbf{z}^{\phi}, _ = OptSubSet(t_k, t_{k-1}, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\theta}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\phi}, \eta = \phi, \bar{\mathbf{m}} = None)$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$]

结束循环

对于 $k = 0$ **至** $N-1$，**执行**

$\mathbf{z}^{\theta}, _ = OptSubSet(t_k, t_{k+1}, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\phi}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\theta}, \eta = \theta, \bar{\mathbf{m}} = None)$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$]

结束循环

$\mathbf{z}^{\phi}, \hat{\mathbf{m}} = OptSubSet(t_N, t_0, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\theta}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\phi}, \eta = \phi, \bar{\mathbf{m}} = \bar{\mathbf{m}})$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$]

对于 $k = 0$ **至** $N-1$，**执行**

$\mathbf{z}^{\theta}, _ = OptSubSet(t_k, t_{k+1}, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\phi}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\theta}, \eta = \theta, \bar{\mathbf{m}} = \bar{\mathbf{m}})$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$]

结束循环

对于 $k = N$ **到**1，**执行**

$\mathbf{z}^{\phi}, _ = OptSubSet(t_k, t_{k-1}, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\theta}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\phi}, \eta = \phi, \bar{\mathbf{m}} = None)$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$]

结束循环

$\mathbf{z}^{\phi}, \hat{\mathbf{m}} = OptSubSet(t_0, t_N, \mathbf{z}^{ref} = \mathbf{z}^{\phi}, \mathbf{z}_{opt} = \mathbf{z}^{\theta}, \eta = \theta, \bar{\mathbf{m}} = \bar{\mathbf{m}})$ [优化 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$]

结束循环

算法 4 函数 OptSubSet（子集优化）输入：初始时刻 t_i 和终止时刻 t_j。参考路径测度边界条件 ρ_{t_i}。参考路径测度驱动项 $\mathbf{z}^{ref}$。待优化的策略 $\mathbf{z}^{opt}$ 及对应的参数 η。来自上一次迭代的经验样本 $\hat{\mathbf{m}}$。输出：$\mathbf{z}^{opt}$，来自参考路径测度的样本 $\hat{\mathbf{m}}^{t_j}$。如果 $\hat{\mathbf{m}}$ 为 None，则从 ρ_{t_i}采样位置数据 $\mathbf{x}^{t_i}$。如果速度分布 γ_{t_i} 可用，则采样条件速度数据 $\mathbf{v}^{t_i}$，来自 γ_{t_i}；否则，通过朗之万模拟在给定 $\mathbf{x}^{t_i}$的条件下采样速度数据 $\mathbf{v}^{t_i}$。（见算法 2。）结束如果 $\mathbf{m}_{t_i} = [\mathbf{x}^{t_i}, \mathbf{v}_{t_i}]^{\mathsf{T}}$否则$\bar{\mathbf{m}}^{t_i} = \mathbf{m}$ 结束如果 使用 $\mathbf{z}^{ref}$从 $\mathbf{m}^{t_i}$ 采样轨迹 $\mathbf{m}^{t \in [t_i, t_j]}$ 计算 $\mathcal{L} = \alpha \mathcal{L}_{\text{MM}} + (1-\alpha)\mathcal{L}_{reg}$（SB 正则化 L_{reg}[29] 为可选项）更新 η

E 其他示意图

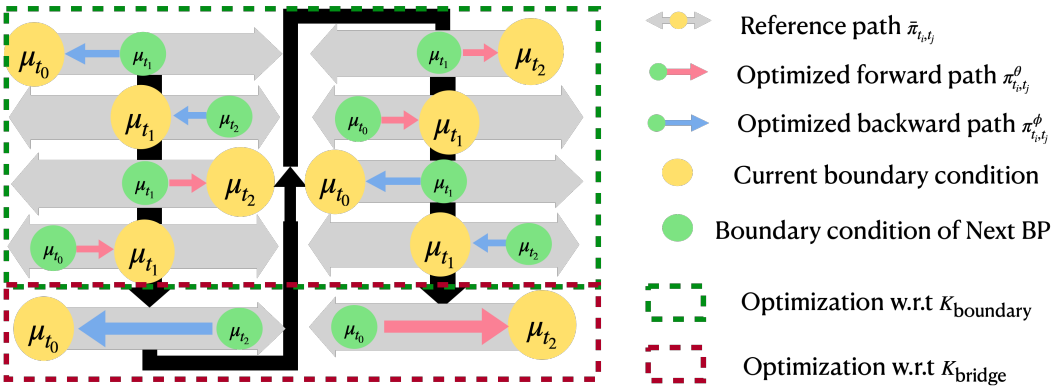


图 8：图 2 的详细示例示意图。我们展示了一个包含 3 个边缘分布的示例。该训练方案可以轻松扩展到一般的 N 个边缘分布情形。该图由两个训练顺序不同的 Bregman 迭代组成。给定参考路径测度，我们首先在 $\mathcal{K}_{\text{boundary}}$ 的子集内依次执行布雷格曼投影（BP），最终得到约束 $\mathcal{K}_{\text{bridge}}$。

F 其他实验

表 4：我们的算法在 3 个随机种子上的结果。在 100 维单细胞 RNA 测序数据集上，给出了最大均值差异和切片 Wasserstein 距离的数值结果，以及在不同观测时刻留出边缘分布的结果。对于所有指标和留出情形，DMSB 均以较大幅度优于先前工作。

LO	指标	t_1	t_2	t_3	t_4	Avg
不含 LO	MMD↓	0.021±1E-3	0.029±5E-3	0.038±2E-3	0.034±2E-3	0.032±3E-3
	SWD↓	0.114±5E-2	0.155±2E-2	0.19±3E-2	0.155±1E-2	0.16±2E-2
带 LO-t_1	MMD↓	0.09±1E-3	0.019±1E-2	0.032±2E-2	0.029±2E-2	0.042±2E-2
	SWD↓	0.140±2E-2	0.155±1E-2	0.19±2E-2	0.155±1E-2	0.153±3E-2
搭配 LO-t_2	MMD↓	0.021±1E-3	0.065±5E-3	0.032±2E-3	0.02±2E-3	0.033±3E-3
	SWD↓	0.100±5E-2	0.202±2E-2	0.13±3E-2	0.191±1E-2	0.155±2E-2
含 LO-t_3	MMD↓	0.025±2E-3	0.026±2E-2	0.075±1E-2	0.029±2E-2	0.040±2E-2
	SWD↓	0.124±2E-2	0.14±1E-2	0.27±2E-2	0.18±1E-2	0.179±3E-2

表 5：使用 500 个生成样本和 500 个真实数据样本，在 5 维单细胞 RNA 测序数据集的**位置** 上计算的 Wasserstein-1(W_1)、最大均值差异、能量距离和最大切片Wasserstein距离（MWD）的数值结果。

维度=5	能量 ↓	最大均值差异 ↓	W_1 ↓	切片 Wasserstein 距离↓	MWD ↓
NLSB	0.04	0.10	0.74	0.24	0.48
MIOFLOW	0.09	0.28	0.79	0.388	0.66
DMSB（我们的方法）	**0.03**	**0.06**	**0.67**	**0.22**	**0.41**

表 6：使用 500 个生成样本和 500 个真实数据，在 5 维单细胞 RNA 测序数据集的**速度** 上计算的 Wasserstein-1（W_1）、最大均值差异、能量距离和最大切片Wasserstein距离（MWD）的数值结果。

维度=5	能量 ↓	最大均值差异 ↓	W_1 ↓	切片 Wasserstein 距离↓	MWD ↓
NLSB[1]	0.44	1.37	1.75	0.83	**1.40**
MIOFLOW	0.68	2.11	1.88	0.94	1.54
DMSB（我们的方法）	**0.40**	**0.85**	**1.67**	**0.74**	1.43

[1]有关速度生成的 NLSB，请参阅特别说明（附录C）

表 7：使用 500 个生成样本和 500 个真实数据样本，在 100 维单细胞 RNA 测序数据集的**速度** 上计算的 Wasserstein-1(W_1)、最大均值差异、能量距离和最大切片Wasserstein距离（MWD）的数值结果。

维度=100	能量 ↓	最大均值差异↓ 切片 Wasserstein 距离↓		MWD ↓
NLSB[2]	2.12	1.6	0.94	1.27
MIOFLOW	9.18	2.41	1.89	5.66
DMSB（我们的方法）	**0.36**	**0.18**	**0.39**	**0.78**

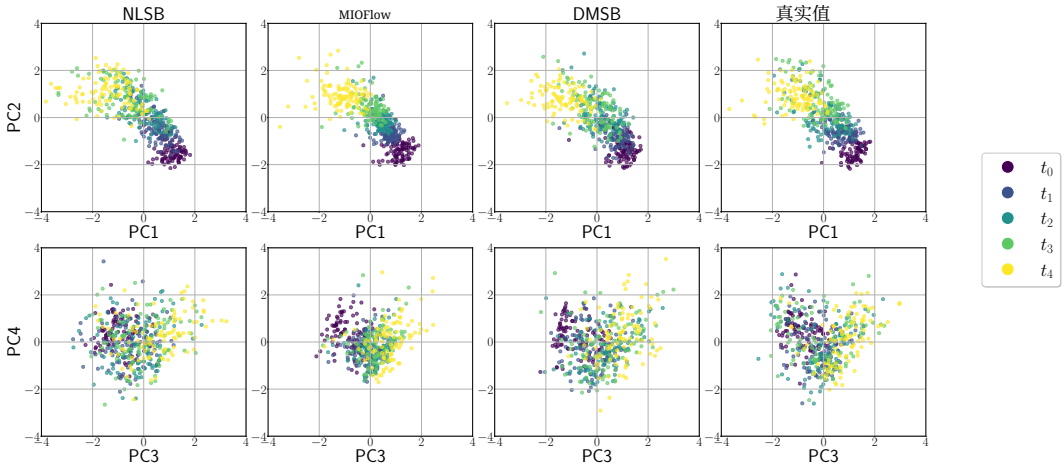


图9：使用 MIOFlow、NLSB 和 DMSB 比较 scRNA-seq 数据在观测时刻于 5 维主成分分析空间中的群体级动力学。我们展示了前 4 个主成分（PC）的图。所有方法在该实验设置下均表现良好。

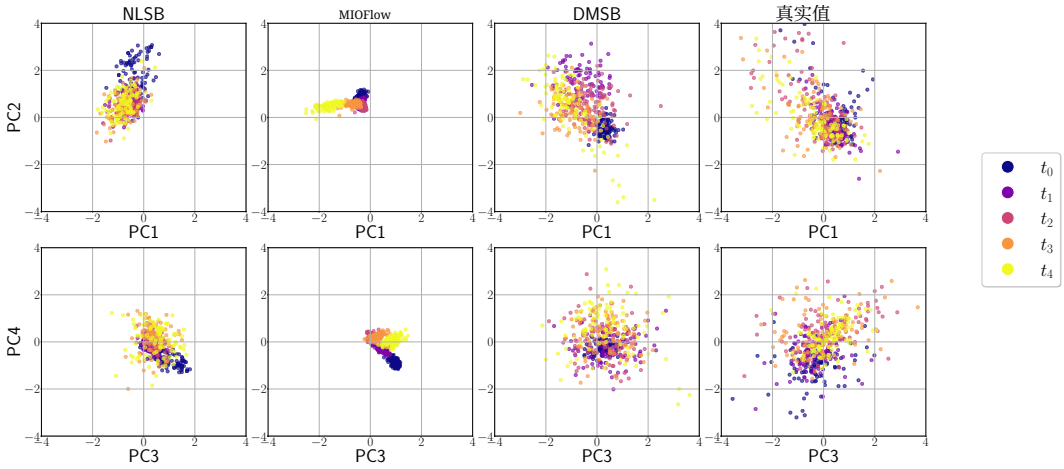


图10：使用 MIOFlow、NLSB 和 DMSB 比较 scRNA-seq 数据在观测时刻于 5 维主成分分析空间中的估计速度。我们展示了前 4 个主成分（PC）的图。关于 NLSB 的结果，请参见附录C中对 NLSB 的特别说明。

[2]请参见特别说明（附录C）中关于所生成速度的说明 LSB

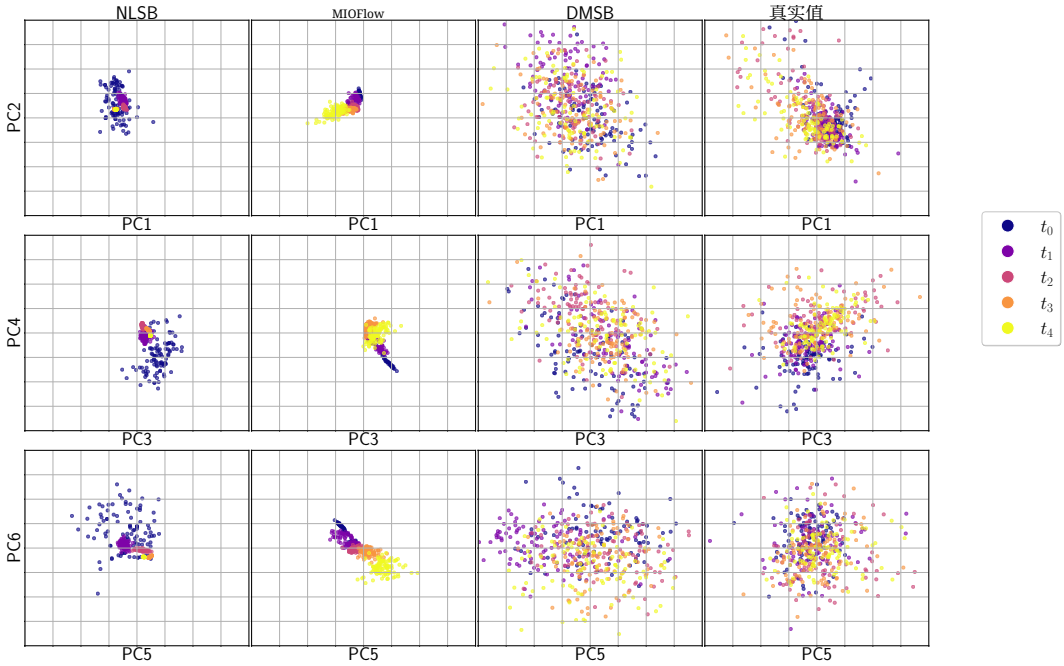


图11：使用 MIOFlow、NLSB 和 DMSB 对单细胞 RNA 测序数据在观测时刻的 100 维主成分分析空间中的估计速度进行比较。我们展示了前 6 个主成分（PC）的绘图。有关 NLSB 的结果，请参见附录C中对 NLSB 的特别说明

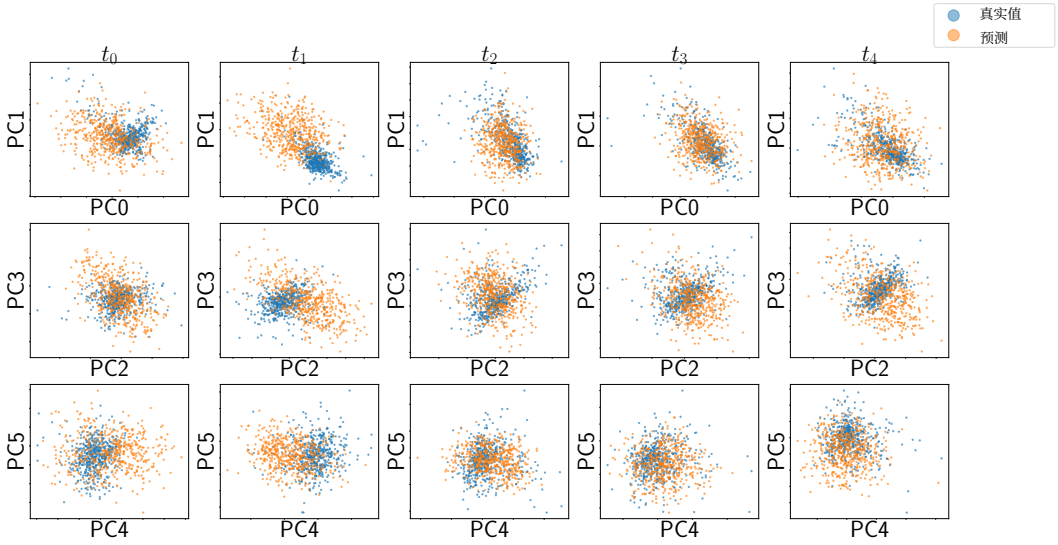


图12：使用 DMSB 与真实值对单细胞 RNA 测序数据在观测时刻的 100 维主成分分析空间中的估计速度进行比较。我们展示了前 6 个主成分（PC）的绘图。

G 复杂度

下面给出我们算法的复杂度。

表8：关于维度（# 边缘分布=5）的时间复杂度

# 维度	5	10	50	100
训练采样	24分钟 1sec	25分钟 1.6秒	33分钟 2.0秒	44分钟 2.02秒

表9：关于边缘分布数量的时间复杂度（维度=100）

# 边际	2	3	4	5
训练采样	32分钟 2.02秒	25分钟 1.6秒	33分钟 2.0 秒	44分钟 2.02秒