arXiv:2303.10251v1 [cs.LG] 17 Mar 2023

三角剖分曲面上的共形生成建模

Victor Dorobantu [1] **Charlotte Borcherds** [1] **Yisong Yue** [1]

摘要

我们提出共形生成建模，这是一个用于对由离散三角网格近似的二维曲面进行生成建模的框架。我们利用离散共形几何领域的最新进展，构建从源三角网格到简单流形（如球面）上的目标三角网格的映射。在考虑网格离散化带来的误差后，我们可以将任何针对简单流形开发的生成建模方法作为即插即用的子程序使用。我们在多个复杂流形和多种生成建模子程序上展示了该框架，结果表明，我们的方法能够根据样本学习网格上分布的良好估计，也能够同时从同一底层流形上的多个不同网格中学习。

1. 引言

近年来，人们对学习表达能力强的生成模型越来越感兴趣，这得益于连续归一化流（Rezende & Mohamed，2015年；Dinh 等人，2016；Papamakar- ios 等人，2021年）和扩散模型（Sohl-Dickstein 等人，2015年；Song 等人，2020）等方法的兴起。这类模型既能够高效地从学习到的分布中抽取样本，也能够计算输入空间上的精确概率，因此在科学与工程的诸多领域都有用武之地，从实验设计（Song 等人，2022）到逆问题（Gao 等人，2021年；Song 等人，2021年）。

许多领域面临的一项关键挑战是，待估计的分布位于复杂的流形上，而非欧几里得空间中。例如，分子活动建模（Chen 等人，2012；Shapovalov &Dunbrack Jr，2011）、机器人运动（Feiten 等人，2013）、高能物理（Brehmer &Cranmer，2020）以及脑活动（Gerber 等人，2010）。此外，许多领域使用真实流形的离散近似（例如三角网格）。

我们的目标是针对复杂二维曲面开发生成建模方法，其中训练数据以离散网格近似表示。现有的黎曼生成建模通常在球面、环面、双曲空间和矩阵李群等典范流形上进行（De Bortoli 等人，2022；Mathieu & Nickel，2020；Lou 等人，2020；Katsman 等人，2021年），或者需要借助学习得到的隐式曲面表示进行不可控的近似（Rozen 等人，2021）。如何直接在复杂网格上学习生成模型，仍是一个尚未解决的问题。

我们的贡献。我们提出共形生成建模，这是一种在由离散三角网格近似的黎曼流形上进行生成建模的框架。我们的方法基于在源网格与目标网格之间建立共形变换，目标网格近似于球面等简单流形（Springborn 等人，2008）。这种变换相当于两个流形之间的微分同胚，同时需考虑网格离散化带来的近似误差。之后，可以将任何适用于简单流形的生成模型作为即插即用子程序使用；我们在八种复杂流形上进行了实证演示（这一数量显著超过其他黎曼生成建模方法所展示的数量）。我们的实现可在 github.com/vdorbs/spherical-generative-modeling.git获取。

共形生成建模的另一个优势是，它能够同时利用来自同一底层流形的多个不同网格的数据进行学习。这一优势源于能够在单位球面上建立这些网格的共形变换之间的对齐关系（例如，Baden 等人(2018年); Wang 等人(2006），如图1所示。我们通过实证展示了这一能力：使用多个不同网格的数据训练单个生成模型，使其能够在未见过的网格上生成数据。

2. 预备知识与问题陈述

我们的方法利用与简单流形的拓扑等价（例如，没有“洞”的闭二维黎曼流形是拓扑球面）。我们首先介绍用于描述这些概念的符号，然

[1]加利福尼亚理工学院计算与数学科学系，美国加利福尼亚州帕萨迪纳。通信作者：Victor Dorobantu <vdoroban@caltech.edu>。

预印本。

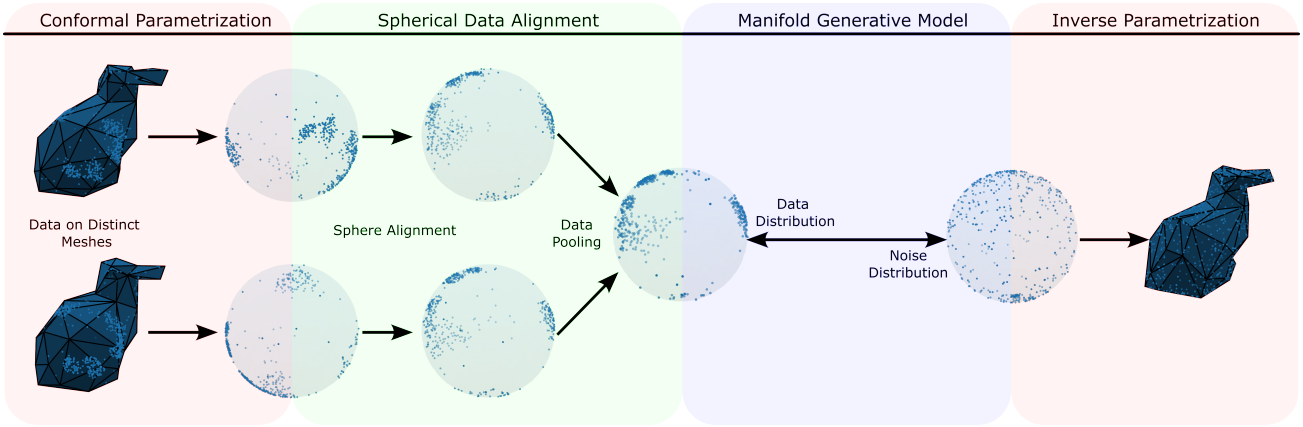


图*1.* 我们方法的概览。从左到右，原始数据样本从多个网格中采集，并通过离散共形变换映射到单位球面上（红色）。通过旋转使球面与参考网格对齐，从而最大化共形因子的对数（原始网格的几何特征）之间的相关性。随后，数据被汇集到一个球面上（绿色）。生成模型沿正向将球面上的数据分布变换为球面上的噪声分布（蓝色）。然后，所得噪声分布通过离散共形变换映射到参考网格上。此处，参考网格上的噪声分布是均匀的。为更清楚地区分不同网格，图中对网格进行了简化；完整网格请参见图 5。

后给出问题陈述。

2.1. 符号、定义与约定

基础知识。 我们用 S^2表示单位二维球面。对于流形$\mathcal{M}$，我们用 $T_p\mathcal{M}$表示其在任意 $p \in \mathcal{M}$ 处的切空间。对于流形 $\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{N}$，以及光滑映射 $f\colon \mathcal{M} \to \mathcal{N}$，我们用 $df_p\colon T_p\mathcal{M} \to T_{f(p)}\mathcal{N}$表示 f 在 $p \in \mathcal{M}$ 处的微分；这是切空间之间的线性映射。

三角网格与顶点嵌入。一个（欧几里得）三角网格由三元组 $\mathrm{T} = (\mathrm{V}, \mathrm{E}, \mathrm{F})$ 和顶点嵌入 $\mathrm{f}\colon \mathrm{V} \to \mathbb{R}^d$ 描述，其中 V 是顶点集合，E 是由有序顶点对组成的边集合，F 是由有序顶点三元组组成的面集合，而 $\mathrm{f}_i \in \mathbb{R}^d$ 表示顶点 $i \in \mathrm{V}$ 在空间中的位置。作为一个单纯复形，对于 F 中的每个面，其每对顶点都必须属于边集合 E（顶点顺序可以相反）。本文将只考虑流形三角网格；在这种情况下，每条边恰好属于两个面，但边界边（若存在）除外，每条边界边恰好属于一个面。这种三角网格配备有离散度量（黎曼度量的离散类比）$\ell\colon \mathrm{E} \to \mathbb{R}_{++}$:

$$\ell_{ij} = \|\mathrm{f}_i - \mathrm{f}_j\|_2. \tag{1}$$

该离散度量必须满足三角不等式:

$$\ell_{ij} + \ell_{jk} \le \ell_{ki}, \quad \ell_{jk} + \ell_{ki} \le \ell_{ij}, \quad \ell_{ki} + \ell_{ij} \le \ell_{jk}, \tag{2}$$

对于每个面 $(i,\ j,\ k) \in \mathrm{F}$。

分片线性曲面。我们通常需要考虑由顶点嵌入生成的分片线性曲面，即将三角形顶点放置在每个面的顶点位置上。我们通常将这样的曲面记为 M；并假设可用的训练数据属于此类曲面。

拓扑等价。 网格 T 是一个拓扑球面，当且仅当它没有边界且具有欧拉示性数$|\mathrm{F}| - |\mathrm{E}| + |\mathrm{V}| = 2$（即没有“孔洞”）。这仅意味着 T 具有球面的连通性（拓扑信息），但其几何形状不一定是球面。如果 T 是一个拓扑球面，并且 对于每个顶点$i \in \mathrm{V}$ 都满足 $\mathrm{f}_i \in S^2$，我们还将考虑球面三角网格，它们将球面划分为球面三角形。

如果一个黎曼流形与球面同胚，即存在一个到球面的连续双射，且其逆映射连续，那么它就是一个拓扑球面。

2.2. 问题陈述

考虑一个二维黎曼流形 $\mathcal{M}$，它是一个拓扑球面。我们的目标是估计概率密度函数 $\rho\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}_+$，该函数使用从 $\mathcal{M}$上的某个底层分布中独立同分布生成的训练样本。我们通常关注复杂流形（示例见图 1和4）。此外，我们假设训练样本表示在 $\mathcal{M}$的三角网格近似上。

具体而言，假设我们可以访问 n 个三角网格 $\mathrm{T}^{(1)}$、……、$\mathrm{T}^{(n)}$，它们近似于 $\mathcal{M}$，并分别具有顶点嵌入 $\mathrm{f}^{(1)}$、……、$\mathrm{f}^{(n)}$ 以及分片线性曲面 $\mathrm{M}^{(1)}$、……、$\mathrm{M}^{(n)}$。我们假设顶点嵌入将这些顶点放置在 $\mathcal{M}$ 上。我们还可以访问 n 个数据集，$\mathcal{D}^{(1)} \subset \mathrm{M}^{(1)}$、……、$\mathcal{D}^{(n)} \subset \mathrm{M}^{(n)}$，其中每个 $\mathcal{D}^{(n)}$ 都由从 $\mathcal{M}$ 上的底层分布独立同分布抽取的样本组成，但这些样本在空间上表示于 $\mathrm{M}^{(1)}$、……、$\mathrm{M}^{(n)}$ 上。图1（左侧/红色）展示了收集到的训练数据

on 斯坦福兔子曲面上的两个不同网格 ace.

3. 共形生成建模

我们的共形生成建模框架基于这样一种思路：为每个源网格找到一个到单位球面的可逆变换。[1] 给定这样的变换，每个网格上的训练样本都可以有效地转换，从而在单位球面上形成一个汇集的（加权）训练样本集。之后，可以采用任何现有的黎曼生成建模方法来估计球面上的概率密度函数（Lou 等人，2020；Mathieu & Nickel，2020；Rozen 等人，2021年；De Bortoli 等人，2022）。随后，可以对该变换求逆，从而在任意一个网格上生成输出。图1展示了我们框架的总体示意图。

我们首先概述关键步骤，然后介绍共形几何、球面参数化和 M¨obius 配准（第3.1 &3.2节）所需的技术工具，以说明该方法的完整技术细节（第3.3节和算法1）。

共形变换与共形因子。我们将使用的具体变换类型是离散共形变换(Springborn 等人，2008)。形式上，共形变换是最大限度保角的[2] 两个网格之间的映射（例如，源流形与球面）。换言之，对于任意两条共享同一顶点的边，它们之间的夹角都能得到尽可能的保留。由此直接推得，网格上每个面的形状在变换中也能得到近似保留。然而，重要的是，共形变换可能会扭曲微分面积。为此，共形变换通过每个顶点处的共形因子对边长进行缩放。

对齐多个网格。为了汇集来自多个网格的训练数据，有必要将它们变换后的网格对齐到球面上，这相当于为每个网格确定一个旋转（第3.1.3节）。如果我们只使用一个网格进行学习，则可以跳过这一步。

在球面上创建训练样本。 为了在球面上生成合适的训练样本，还需要两个额外步骤。首先，共形变换拉伸或压缩了源网格的不同部分，因此必须对训练样本重新加权，才能将原始测度传递到球面上。直观地说，数据点在

[1]原则上，可以计算映射到欧拉数更高的其他简单流形（例如环面）的变换。不过，框架中的某些算法步骤会变得更具挑战性，例如对齐不同的网格。[2]完全保角会对允许的变换类别限制过多，只能得到刚性等距变换。更多讨论请参见 Crane (2020)。

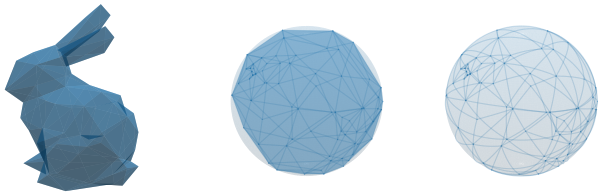


图2. 分片线性曲面与单位球面的对应关系：左侧为原始网格，中间为球面参数化后的网格（显示为内接于单位球面），右侧为球面划分为球面三角形后的结果。

Alg法 1共形生成模型

g 输入 三角网格 $\mathrm{T}^{(1)},\ldots,\mathrm{T}^{(n)}$ 及对应的分片线性曲面 $\mathrm{M}^{(1)},\ldots,\mathrm{M}^{(n)}$ 输入 训练集 $\mathcal{D}^{(1)}\subset\mathrm{M}^{(1)},\ldots,\mathcal{D}^{(n)}\subset\mathrm{M}^{(n)}$1: 将每个网格共形变换到单位球面（第 3.1.2 节），得到 $\mathrm{M}^{(1)}$ inscr . . . , $\mathrm{M}^{(n)}$ inscr 2：通过最大相关旋转将 $\mathrm{M}^{(2)}$ inscr . . . , $\mathrm{M}^{(n)}$ inscr 与 $\mathrm{M}^{(1)}$ inscr 对齐（公式（ 5 ））3：将数据映射到对齐后的球面，得到 $\tilde{\mathcal{D}}^{(1)},\ldots,\tilde{\mathcal{D}}^{(n)}$4：根据投影计算面积变化的对数（公式（11））， 并计算每个数据点在每个 $\tilde{\mathcal{D}}^{(1)},\ldots,\tilde{\mathcal{D}}^{(n)}$ 中的三角形面积比5：在球面上训练基于似然的生成模型，并在损失函数（公式（17））中从对数概率密度中减去面积变化的对数6：返回球面生成模型，以及映射到各个 $\mathrm{M}^{(1)},\ldots,\mathrm{M}^{(n)}$ 的逆共形变换

拉伸区域应获得较高的权重，而收缩区域应获得较低的权重。

第二步是将线性三角形曲面转换为球面三角形曲面。图2展示了这一步：中间是一个被单位球面包围的分片线性网格（所有边都位于球面内），右侧则是将每个三角形曲面转换为球面曲面的结果。将此变换与共形变换组合起来十分简单。在第3.1.2节中，我们将介绍球面参数化；在第3.2 节中，我们将推导面积变化带来的额外可微变化，以便在转换为球面网格时为训练样本计算额外的权重因子。

3.1. 共形几何背景

3.1.1. 共形等价

共形映射在局部保持角度和方向。˜设 $\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{M}$ 为黎曼流形，其对应的黎曼度量分别为 g 和 $\tilde{g}$。若光滑的˜局部嵌入 $f\colon\mathcal{M}\to\mathcal{M}$ 保持方向，且存在一个共形

映射并满足 u： $\mathcal{M} \to \mathbb{R}$

ying:

$$\tilde{g}_{f(p)}(df_p(v), df_p(w)) = e^{2u(p)} \cdot g_p(v, w), \qquad (3)$$

对于所有点 $p \in \mathcal{M}$ 和切向量 v， $w \in T_p\mathcal{M}$。函数 u 称为对数共形因子。直观地说，我们可以等价地通过微分df_p 将 v 和 w 向前推，并在$f(p)$处的切空间中计算它们的内积；或者，我们也可以在 p 处的切空间中计算 v 和 w 的内积，再将该内积乘以 $e^{2u(p)}$。

类似地，考虑一个欧几里得三角网格 T $=\tilde{}$(V，E，F)，它具有两个嵌入 f 和 f (例如，一个对应源流形，另一个对应球面)，分别对应于˜离散度量 ℓ和 ℓ。若存在一个函数，则称这两个度量（离散）共形等价 (Springborn 等人，2008)： $u : \mathsf{V} \to \mathbb{R}$ 满足：

$$\tilde{\ell}_{ij} = e^{(u_i+u_j)/2} \cdot \ell_{ij}, \qquad (4)$$

对于所有边 $(i,\ j) \in \mathsf{E}$。与连续情形一样，函数 u 也称为对数共形因子。直观地说， $e^{2u_i} \in \mathbb{R}_{++}$ 描述了顶点 $i \in \mathsf{V}$ 从 f_i 映射到 f_i时，微分面积˜如何（按乘法）变化。

离散共形等价的两个重要性质是传递性和在 M¨obius 变换下的不变性。首先，假设 ℓ_1、 ℓ_2 和 ℓ_3 是同一三角网格上的离散度量。若 ℓ_1 与 ℓ_2 离散共形等价，且对数共形因子为 u_1，并且 ℓ_2 与 ℓ_3 离散共形等价，对数共形因子为 u_2，那么ℓ_1 与 ℓ_3 离散共形等价，对数共形因子为 $u_1 + u_2$。其次，如果对应于同一网格的两个顶点嵌入通过 M¨obius 变换（包括欧几里得变换、球面反演和立体投影）相关联，那么对应的离散度量便是离散共形等价的（Springborn 等人，2008）。

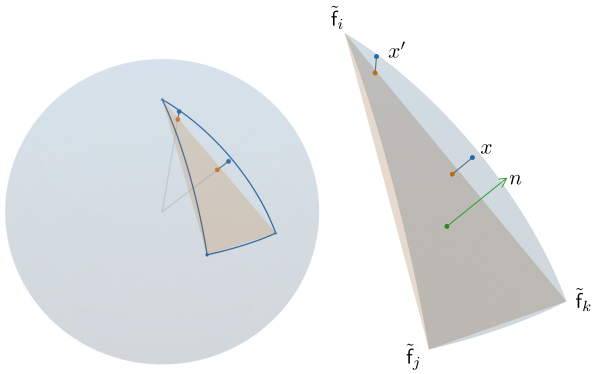


图*3*。内接欧几里得三角形与其对应球面三角形之间的对应关系。球面上的点以蓝色表示，投影点（投影到内接三角形上）以橙色表示，内接三角形的法向量以绿色表示。

3. 从 V 中移除 i^*，并从 E 中移除所有与其关联的边，从 F 中移除所有与其关联的面（从而得到一个拓扑圆盘），4. 通过凸优化计算一个离散共形等价的平坦度量，同时保持边界顶点之间的距离不变，5. 根据新的平坦度量所确定的边长，将顶点嵌入平面 $\mathbb{R}^2$，6. 将顶点立体投影到单位球面 S^2 上（经过北极），同时保持度量的离散共形等价，7. 将 i^* 重新置于北极，并恢复移除的边和面，8. 应用将球面映射到自身的 M¨obius 变换（洛伦兹变换），将顶点位置的中心移至原点，同时再次保持度量的离散等价。

3.1.2. 球面参数化

考虑一个三角网格 = (V，E，F)，它近似于一个球面，其顶点嵌入为f，离散度量为 ℓ。通常，这种网格外接于球面，也就是说，顶点位于球面上，而边位于球面内部。我们的目标是将T中的每个线性三角形面转换为球面三角形（图3）。我们采用以下过程（Springborn 等人，2008；Bobenko 等人，2016），˜该过程返回T的新嵌入f，将顶点映射到球面 S^2，并对应于一个与 ℓ离散共形等价的离散度量：

1. 选择一个任意顶点 $i^* \in \mathsf{V}$ 并将其移除，
2. 改变离散度量，使 i^* 的每个邻点到 i^* 的距离相等（此度量与 ℓ 离散共形等价），

通过球面参数化，我们建立了三个曲面之间的对应关系：由f描述的分片线性曲面、内接于˜单位球面且由f描述的分片线性曲面，以及单位球面本身。这些对应关系如图2所示。附录A 详细介绍了这一过程。其核心思路是：(i) 使用凸能量公式计算平坦度量（步骤4）；(ii) 在球面上对共形因子进行插值。

3.1.3. M ¨OBIUS 配准

为了完整地关联同一流形上的两个网格（例如，汇集它们的训练数据），我们必须对齐它们的表示。根据第3.1.2节的结果，同一网格的两个球面参数化只会相差一个

旋转（Baden 等人，2018年）。旋转集合比洛伦兹变换集合容易处理得多。可以通过调和分析求得这个旋转。

对于球面上的两个复值函数 f，$g: S^2 \to \mathbb{C}$，我们可以在旋转群 $SO(3)$ 上定义相关函数 $C: SO(3) \to \mathbb{C}$：

$$C(R) = \int_{S^2} f(x)\overline{g(R^\top x)}\,\mathrm{d}x, \tag{5}$$

对于所有旋转矩阵 $R \in SO(3)$。若 f 和 g 均为实值，则 C也为实值，因此我们可以求其全局最大值点。球谐变换（Kostelec & Rockmore，2008）可得如下系数：

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \hat{f}_{lm} Y_l^m(x), \\ g(x) &= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{\ell} \hat{g}_{lm} Y_l^m(x), \end{aligned} \tag{6}$$

对于所有 $x \in S^2$，其中 $Y_l^m: S^2 \to \mathbb{C}$ 表示次数为 l、阶数为 m的球谐函数。C 的 $SO(3)$ 傅里叶变换可用 f 和 g的球谐变换表示为：

$$C(R) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{m'=-l}^{l} \hat{f}_{lm}\overline{\hat{g}_{lm'}} \cdot \overline{D^l_{mm'}(R)}, \tag{7}$$

对于所有旋转 $R \in SO(3)$，其中 $D^l_{mm'}$表示一个 Wigner$D$ 函数（Kostelec &Rockmore，2008）。直观而言，公式（7）中的系数是按次数计算的外积，由构成 f 和 g的球谐变换各阶系数组成。

在计算 C 在任意旋转下的取值时，计算上十分困难，Kostelec 和 Rockmore (2008) 提供了一种利用欧拉角网格的快速方法。该方法利用快速球谐变换，将 f 和 g 采样到球面网格上。我们发现，对于我们的实验而言，64×64 球面网格（带宽为32）已经足够。

3.2. 面积微分变化

对于 $l \in \{1, \ldots, n\}$，考虑一个数据点 $x \in \tilde{\mathcal{D}}^{(l)}$。数据点 x 分三个阶段从球面映射到 $\mathbf{M}^{(l)}$（逆变换）：首先 x 被映射到 $\tilde{\mathbf{M}}$的一个欧几里得三角形上$^{(l)}$ 内接，然后通过逆旋转 ${R^{(l)}}^\top$ 旋转，使其位于 $\mathbf{M}^{(l)}$ 内接上，最后移动到 $\mathbf{M}^{(l)}$ 上对应面中具有相同重心坐标的点。该旋转是等距的，不会引起面积变化；从 $\mathbf{M}^{(l)}$ 内接 到 $\mathbf{M}^{(l)}$ 的最终映射是分片线性的，其面积的乘法变化等于对应三角形的面积比（原三角形面积除以内接三角形面积）。

然而，第一个映射是非线性的。为计算相应的面积变化，设 x 位于由（i、j、k）$\in \mathbf{F}^{(l)}$所刻画的球面三角形中，其中 $\mathbf{F}^{(l)}$ 是 $\mathbf{T}^{(l)}$中的面集合。令 n 表示该面中边向量的归一化叉积（得到一个单位法向量），则：

$$n = \frac{(\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})}{\|(\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})\|_2}. \tag{8}$$

由方程（19）可得，x 映射为：

$$y = \frac{n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}}{n^\top x} \cdot x, \tag{9}$$

其雅可比矩阵为：

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{(n^\top x)(n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})I_3 - (n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})xn^\top}{(n^\top x)^2}. \tag{10}$$

现在，考虑球面 $v \in \mathbb{R}^3$ 上的任意切向量，其中 $x^\top v = 0$。此外，假设 v 的模长为 1。叉积 $x \times v$ 是另一个切向量，它是在切平面内将 v 逆时针旋转四分之一圈得到的。向量对 $(v,\ x \times v)$ 构成切平面的标准正交基，而三元组 $(v,\ x \times v,\ x)$ 构成 $\mathbb{R}^3$的右手标准正交基。由 v和 $x \times v$ 张成的平行四边形是面积为 1 的正方形，因此，只需计算通过雅可比矩阵 $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x$ 将 v 和 $x \times v$ 推前后所形成的平行四边形的面积，即可求出将 x 映射到 y 所造成的面积的乘法变化。该面积为：

$$\begin{aligned} &\left\| \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \cdot v\right) \times \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \cdot (x \times v)\right) \right\|_2 \\ &= \frac{(n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})^2}{(n^\top x)^4} \cdot \Big\| \big((n^\top x)v - (n^\top v)x\big) \\ &\qquad \times \big((n^\top x)(x \times v) - n^\top (x \times v)x\big) \Big\|_2 \\ &= \frac{(n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})^2}{|n^\top x|^3} \cdot \big\|(x^\top n)x + ((x \times v)^\top n)(x \times v) \\ &\qquad + (v^\top n)v\big\|_2 \\ &= \frac{(n^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})^2}{|n^\top x|^3}. \end{aligned} \tag{11}$$

最后一个等式成立，是因为范数内的项正是 n 在 x、$x \times v$ 和 v上的投影之和；由于这三个向量构成标准正交基，因此所得的和具有单位范数。由于：

$$((\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}))^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)} = (\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} \times \tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)})^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}, \tag{12}$$

我们可以将方程（11）中的最终表达式写为：

$$\frac{((\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} \times \tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)})^\top \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})^2 \cdot \|(\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)})\|_2}{|((\tilde{\mathbf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathbf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathbf{f}}_i^{(l)}))^\top x|^3}, \tag{13}$$

其中，分子中的范数是由 $(i,\ j,\ k)$ 确定的内接三角形的面积。

总而言之，从球面映射 x 到$\mathsf{M}^{(l)}$ 时，面积的微分变化可表示为一个乘法因子，即方程（14）与面(i,j,k)在$\mathsf{M}^{(l)}$ 和$\mathsf{M}^{(l)}{}_{\text{inscr}}$中所表示的面积之比的乘积。根据方程（13）中关于范数的观察，该面积微分变化为：

$$\Delta^{(\ell)} \triangleq \frac{((\tilde{\mathsf{f}}_j^{(l)} \times \tilde{\mathsf{f}}_k^{(l)})^\top \tilde{\mathsf{f}}_i^{(l)})^2 \|(\mathsf{f}_j^{(l)} - \mathsf{f}_i^{(l)}) \times (\mathsf{f}_k^{(l)} - \mathsf{f}_i^{(l)})\|_2}{|((\tilde{\mathsf{f}}_j^{(l)} - \tilde{\mathsf{f}}_i^{(l)}) \times (\tilde{\mathsf{f}}_k^{(l)} - \tilde{\mathsf{f}}_i^{(l)}))^\top x|^3}, \tag{14}$$

此时，分子中的范数表示原始网格中由（i,j,k）所确定的三角形的面积。

3.3. 我们解决方案的技术描述

现在，我们可以完整地实例化算法1。在步骤1中，我们对每个分片线性曲面进行球面参数化，得到内接于单位球面内的分片线性曲面 $\mathsf{M}^{(1)}{}_{\text{inscr}}\ \cdots,\ \mathsf{M}^{(n)}{}_{\text{inscr}}$ 以及对数共形因子的插值函数 $\bar{u}^{(1)}, \ldots, \bar{u}^{(n)}\colon S^2 \to \mathbb{R}$。对于 $i \in \{2, \ldots, n\}$，我们近似求出最大相关旋转矩阵 $R^{(i)} \in SO(3)$，使相关函数最大化：

$$C^{(i)}(R) = \int_{S^2} \bar{u}^{(1)}(x)\bar{u}^{(i)}(R^\top x)\, \mathrm{d}x, \tag{15}$$

对所有旋转矩阵 $R \in SO(3)$。使用恒等旋转 $R^{(1)} = I_3$，我们将每个内接曲面按相应的旋转进行旋转，得到旋转后的曲面$\tilde{\mathsf{M}}^{(1)}{}_{\text{内接曲面}}\ \cdots,\ \tilde{\mathsf{M}}^{(n)}{}_{\text{内接曲面}}$。在步骤2中，我们将每个 $\mathcal{D}^{(i)}$ 上的每个数据点映射到 $\tilde{\mathsf{M}}^{(i)}{}_{\text{内接曲面}}$，并将结果归一化至单位球面上，从而得到球面数据集 $\tilde{\mathcal{D}}^{(i)}$。

现在，我们可以汇总球面数据集，并使用所得数据集训练生成模型（步骤3）。然而，要在原始曲面 $\mathsf{M}^{(1)}$、.....、$\mathsf{M}^{(n)}$上通过最大似然估计训练此类模型，我们还需要计算每个映射到单位球面的过程中相应的面积变化（步骤4）。通过球面上的生成模型评估对数概率密度时，随后必须减去面积变化的对数，以计算原始曲面上的对数概率密度（相当于将概率密度除以面积变化）。

进一步阐述这一点，假设我们选择一个定义在球面上的生成模型，其概率密度为 $\rho\colon S^2 \to \mathbb{R}_{+}$。对于由对齐的球面数据集组成的数据集 $\tilde{\mathcal{D}}^{(1)} \cup \cdots \cup \tilde{\mathcal{D}}^{(n)}$，其数据对数似然（根据球面概率密度计算）为：

$$\sum_{l=1}^{n} \sum_{x \in \tilde{\mathcal{D}}^{(l)}} \log \rho(x). \tag{16}$$

而校正后的数据对数似然（在相应的网格概率密度下）则为：

$$\sum_{l=1}^{n} \sum_{x \in \tilde{\mathcal{D}}^{(l)}} \left(\log \rho(x) - \log \Delta^{(l)}(x) \right), \tag{17}$$

其中，$\Delta^{\ell}(x)$ 表示针对数据点 $x \in \tilde{\mathcal{D}}^{(l)}$，由公式（14）得到的面积变化。请注意，对于这种通过似然最大化训练的生成模型，面积变化项只需在训练开始时计算一次；无法预先计算的项只有 ρ，因为该概率密度会在训练过程中不断变化。

剩下的步骤 5 是选择一个合适的生成模型来在球面上训练，接下来我们将对此进行讨论。

3.4. 选择基础生成模型

算法1中的步骤 5，原则上，可以选择任意一种在单位球面等标准流形上训练的黎曼生成模型。本文通过两种方法实例化我们的框架：黎曼连续归一化流（CNF）（Mathieu & Nickel，2020）和 Moser 流（Rozen 等人，2021年），我们将在第 B 节中详细讨论。

我们遇到的一个问题是，如何将欧几里得梯度（许多基于流的生成模型采用的原生梯度表示）良好地投影到球面上。糟糕的投影可能导致数值不稳定性，并增加计算成本。对于所有基础生成模型，我们都采用了Rozen 等人（2021年）提出的方法，使用第B.1节讨论的归一化技巧。

4. 实验

我们首先展示无需球面对齐的方法。我们在 8 个不同的网格上展示我们的方法（见表 1），数量显著多于其他黎曼生成建模方法通过实验证明的数量。我们在每个网格上训练连续归一化流和 Moser流。所用的网格和数据来自 ContactDB 数据集（Brahmbhatt 等人，2019年）。其次，我们展示我们的方法如何使来自不同网格、且这些网格近似于同一底层流形的数据得以共享。我们生成 5 个相似但不同的网格（由`stanford-bunny`生成），以展示如何使用多个对应于同一底层流形的网格训练单个生成模型。我们表明，即使数据来自不同网格，随着数据量增加，在留出网格上测试的对数似然也会提高。我们还展示如何同时使用全部 5个网格，在每个网格上生成数据。所有实验均在单块 NVIDIA RTX A6000 GPU 上运行。在所有实验中，噪声概率分布在球面上均匀分布。我们的代码可在 github.com/vdorbs/spherical-generative-modeling.git获取。

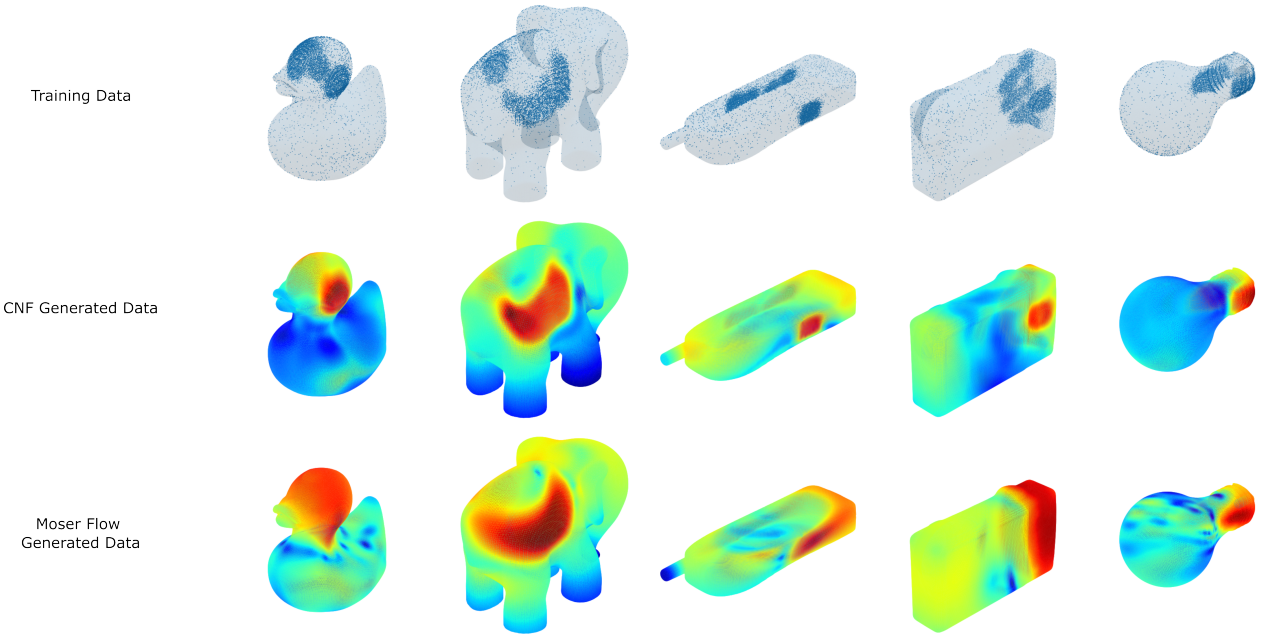


图 *4.* 展示五个网格：训练数据（顶排）、学习得到的 CNF 密度（中排）和学习得到的 Moser 流密度（底排）。网格从左至右依次为橡皮鸭、大象、手机、相机和灯泡。

4.1. 训练数据

ContactDB（Brahmbhatt 等人，2019年）是一个用于人机交互应用的抓握与操作数据集合。研究人员通过热成像采集数据：在人类受试者抓握 3D打印家居物品后，对其进行热成像。我们研究 8 件物品，每件均由一名参与者操作。数据以三角网格的形式呈现，每个顶点都有一个特征（强度），表示传递到物品上的热能。与（Brahmbhatt 等人，2019年）一样，我们将强度输入 Sigmoid函数来处理接触图，将最大强度映射为 0.999 的概率，将最小强度映射为0.001 的概率。与（Rozen 等人，2021年）一样，我们对每个面上的对应概率取平均，从而得到面上的非归一化概率分布。随后，我们从每个网格中抽取 10000 个样本：先根据非归一化分布抽取一个面，再在抽中的面上均匀抽取一个点，作为每个样本。

4.2. 分布建模结果

我们进行了5 次试验，针对每个8 个网格，分别训练 CNF 和 Moser流。验证结果列于表 1中。两种情况下，我们都使用了 5000 个训练样本和 5000个验证样本。CNF向量场和 Moser流通量场均采用具有 3个隐藏层的神经网络进行参数化，隐藏维度为 32，并使用 tanh 非线性函数。两个神经网络的输入都是 $\mathbb{R}^3$中的向量，其中 CNF 还额外输入时间。两个模型

表 *1.* 8 个网格的对数似然（越高越好），按每个网格的 5 次运行结果取平均值，并给出正负一个标准差。

MESH	CNF	MOSER 流
相机	4 ± 0.01703	3.726 ± 0.1048
斯坦福兔	4.354 ± 0.0435	4.168 ± 0.1937
灯泡	4.44 ± 0.04114	4.239 ± 0.07521
大象	4.472 ± 0.01215	4.462 ± 0.0361
鼠标	4.769 ± 0.009795	4.726 ± 0.06756
手机娱乐主管	5.465 ± 0.01964	5.302 ± 0.1207
橡皮鸭	5.75 ± 0.007362	5.368 ± 0.1799
香蕉	6.591 ± 0.02889	6.318 ± 0.1723

使用 Adam 优化器进行训练（Kingma &Ba，2014）。CNF 的训练轮数为100，批次大小为 256，学习率为 10^{-2}。Moser流的训练轮数为4000，批次大小为 256，学习率为 10^{-4}。这些结果表明，我们的方法能够以多个黎曼生成模型作为子程序，可靠地对多个流形上的分布建模。

4.3. 球面对齐

接下来，我们展示在能够获取不同网格上的数据时所采用的方法。对于单个网格，我们按照第4.1节的方法采样数据。我们通过随机采样5 组顶点，生成5 个不同的网格，每组仅包含原始网格中1% 的顶点。随后，我们对每个点云进行泊松曲面重建（Kazhdan 等人，2006）以获得网格。

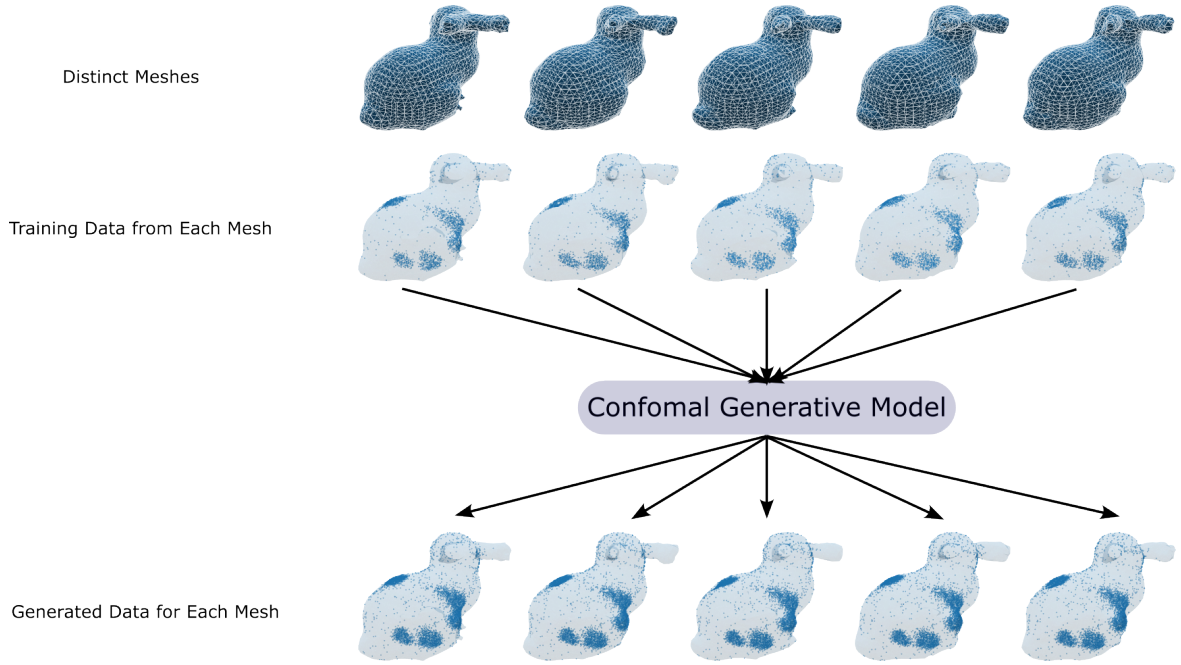


图*5.* 不同的网格（顶行）、每个网格上的训练数据（第二行）以及从学习得到的模型生成的样本（底行）。使用同一个模型在五个网格上生成数据，该模型使用从所有网格汇总的数据进行训练。

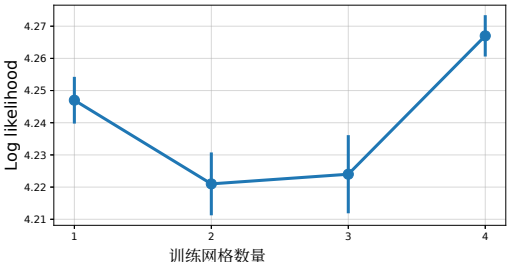


图*6.*随着加入更多网格和数据，生成模型在留出网格上的性能变化。

由于重建需要点云中每个点的法向量，因此我们使用从原始网格推导出的各点顶点法向量，而非根据最近邻切平面估算法向量。随后，将原始网格上的数据划分为 5 个相等的子集，并将每个子集投影到相应的重建网格上。

首先，我们从一个网格中留出数据，并进行 20 次试验，使用来自 1、2、3 个网格以及剩余网格的全部数据，训练 CNF。每个网格有 2000 个训练数据样本；我们只使用每个网格的前 1000 个。留出网格上数据的对数似然如图 6 所示。所用的 CNF 与第 4.2 节中的训练配置相同。

其次，我们训练了一个单一的共形生成模型，使其能够在五个网格中的每一个上生成数据。我们使用数据来自这五个网格中的每一个来训练模型，再次使用 1000 个训练样本，以及来自每个网格的1000 个验证样本。生成的样本见图5。所用的 CNF 采用相同的训练配置。这些结果表明，不同网格之间可以共享数据以改进训练，而且这类模型能够轻松地在定性相似但未见过的网格上生成数据。

5. 其他相关工作

网格上的生成建模。 同期开展的工作Chen &Lipman (2023) 采用流匹配方法，在黎曼流形上进行生成建模，并将三角网格作为一种特殊情况。在这一范式中，训练一个向量场，使其匹配条件向量场的加权平均值（权重由数据分布决定）；这些条件向量场的选择依据是它们相对简单。对于三角网格，条件向量场通过核函数构造，这些核函数用于编码近似谱距离。无论是训练还是使用训练好的模型进行生成，都需要直接在网格上求解常微分方程，这对于复杂几何形状而言可能颇具难度。

隐式曲面上的生成建模。 在复杂流形上进行生成建模的另一种方法是使用学习得到的有符号距离函数（SDF）（Rozen 等人，2021年），该函数定义了一个隐式曲面（即，点位于曲面上时，SDF 为零）。一般来说，

学习符号距离函数可能相当复杂，也会导致对原始流形产生不可控的近似。相比之下，我们的框架利用计算几何工具绕开了这一问题。

共形嵌入流。 在流形假设下，共形变换也被应用于高维生成建模问题（Ross 和 Cresswell，2021年）。在这种情况下，必须将一个从低维潜在空间到高维数据空间的（左）可逆映射与归一化流联合学习。嵌入必须是共形的，才能以可处理的方式计算相应的密度变化；这对流形学习所用的架构施加了限制。此外，与学习符号距离函数一样，若对原始流形进行不受控制的近似，流形学习也会变得复杂。

共形预测。 “共形”一词也用于共形预测领域（Shafer 和 Vovk，2008）。共形预测和共形几何都使用一种度量来衡量某个点在变换下的共形程度——前者关注统计校准，后者关注几何校准。除此之外，这两条研究路线彼此无关。

参考文献

Baden, A.、Crane, K. 和 Kazhdan, M. 莫比乌斯配准。载于《计算机图形学论坛》，第37卷，第211–220页。Wiley在线图书馆，2018年。Bobenko, A. I.、Sechelmann, S. 和 Springborn, B. 离散共形映射：边值问题、圆域、福克斯群与肖特基一致化。载于《离散微分几何进展》，第1–56页。施普林格，柏林、海德堡，2016年。Brahmbhatt, S.、Ham, C.、Kemp, C. C. 和 Hays, J. Contactdb：通过热成像分析并预测抓取接触。载于*IEEE/CVF*计算机视觉与模式识别会议论文集，第8709–8719页，2019年。Brehmer, J. 和 Cranmer, K. 用于流形学习与概率密度估计的联合流。神经信息处理系统进展，33:442–453，2020。Chen, M.、Tu, B. 和 Lu, B. 一种保留分子表面拓扑的三角剖分流形网格生成方法。《分子图形学与建模杂志》，38:411–418，2012年。Chen, R. T. 和 Lipman, Y. 一般几何上的黎曼流匹配。*arXiv*预印本 *arXiv:2302.03660*，2023年。Chen, R. T.、Rubanova, Y.、Bettencourt, J. 和 Duvenaud, D. K. 神经常微分方程。神经信息处理系统进展，31，2018年。Crane, K. 单纯曲面的共形几何。载于应用数学研讨会论文集。美国数学学会，2020。De Bortoli, V.、Mathieu, E.、Hutchinson, M.、Thornton, J.、Teh, Y. W. 和 Doucet, A. 基于分数的黎曼生成建模。*arXiv*预印本 *arXiv:2202.02763*，2022年。Dinh, L.、Sohl-Dickstein, J. 和 Bengio, S. 使用 Real NVP 进行概率密度估计。*arXiv*预印本 *arXiv:1605.08803*，2016年。Feiten, W.、Lang, M. 和 Hirche, S. 使用投影高斯混合估计刚体运动。载于第*16*届国际信息融合会议论文集，第1465–1472页。IEEE，2013年。Gao, A.、Castellanos, J.、Yue, Y.、Ross, Z. 和 Bouman, K. DeepGEM：用于盲反演的广义期望最大化。神经信息处理系统进展，34:11592–11603，2021年。Gerber, S.、Tasdizen, T.、Fletcher, P. T.、Joshi, S.、Whitaker, R.、Initiative, A. D. N. 等。脑群体分析的流形建模。医学图像分析，14(5):643–653，2010年。Gillespie, M.、Springborn, B. 和 Crane, K. 多面体曲面的离散共形等价。《*ACM*图形学汇刊》，40(4)，2021年。Katsman, I.、Lou, A.、Lim, D.、Jiang, Q.、Lim, S. N. 和 De Sa, C. M. 等变流形流。神经信息处理系统进展，34:10600–10612，2021年。Kazhdan, M.、Bolitho, M. 和 Hoppe, H. 泊松曲面重建。载于第四届*Eurographics*几何处理研讨会论文集，第7卷，2006年。Kingma, D. P. 和 Ba, J. Adam：一种随机优化方法。*arXiv*预印本 *arXiv:1412.6980*，2014年。Kostelec, P. J. 和 Rockmore, D. N. 旋转群上的快速傅里叶变换。傅里叶分析与应用期刊，14 (2):145–179，2008年。

Lou, A.、Lim, D.、Katsman, I.、Huang, L.、Jiang, Q.、Lim, S. N. 和 De Sa, C. M. 神经流形常微分方程。神经信息处理系统进展，33:17548–17558，2020。

Mathieu, E. 和 Nickel, M. 黎曼连续归一化流。神经信息处理系统进展，33:2503–2515，2020。

Papamakarios, G.、Nalisnick, E. T.、Rezende, D. J.、Mohamed, S. 和 Lakshminarayanan, B. 用于概率建模与推断的归一化流。机器学习研究杂志，22(57):1–64，2021。Rezende, D. 和 Mohamed, S. 使用归一化流进行变分推断。载于国际机器学习会议，第 1530–1538 页。PMLR，2015。Ross, B. 和 Cresswell, J. 使用共形嵌入流在学习得到的流形上进行可处理的概率密度估计。神经信息处理系统进展，34:26635–26648，2021。Rozen, N.、Grover, A.、Nickel, M. 和 Lipman, Y. Moser流：基于散度的流形生成建模。神经信息处理系统进展，34:17669–17680，2021。Shafer, G. 和 Vovk, V. 共形预测教程。机器学习研究杂志，9(3)，2008。Shapovalov, M. V. 和 Dunbrack Jr, R. L. 一种通过自适应核密度估计和回归从蛋白质中导出的平滑的骨架依赖型旋转异构体库。*Structure*，19(6):844–858，2011。Sohl-Dickstein, J.、Weiss, E.、Maheswaranathan, N. 和 Ganguli, S. 使用非平衡热力学进行深度无监督学习。载于国际机器学习会议，第 2256–2265 页。PMLR，2015。Song, J.、Yu, L.、Neiswanger, W. 和 Ermon, S. 无似然贝叶斯优化的一般方法。载于国际机器学习会议，第 20384–20404 页。PMLR，2022。Song, Y.、Sohl-Dickstein, J.、Kingma, D. P.、Kumar, A.、Ermon, S. 和 Poole, B. 通过随机微分方程进行基于分数的生成建模。载于国际学习表征会议，2020。Song, Y.、Shen, L.、Xing, L. 和 Ermon, S. 使用基于分数的生成模型求解医学成像中的逆问题。*arXiv* 预印本 *arXiv:2111.08005*，2021。Springborn, B.、Schr¨oder, P. 和 Pinkall, U. 三角网格的共形等价。载于*ACM SIGGRAPH 2008* 论文，第 1–11 页。2008。Wang, S.、Wang, Y.、Jin, M.、Gu, X. 和 Samaras, D. 使用共形几何进行三维表面匹配与识别。载于*2006 IEEE*计算机学会计算机视觉与模式识别会议 *(CVPR'06)*，第 2 卷，第 2453–2460 页。IEEE，2006。

A. 球面参数化的详细说明

这里我们将进一步介绍第 3.1.2 节中概述的球面参数化过程。

为计算平坦度量并实现平面顶点嵌入，我们最小化 Springborn 等人（2008）方程 7 中的凸能量，该能量是相应共形因子的对数的函数。我们采用二阶优化（牛顿法）最小化该能量，其中能量的梯度直接衡量每个顶点周围角度之和相对于 2π （对于边界顶点则为 π ）的偏差，而海森矩阵是三角网格的（余切）拉普拉斯矩阵。当梯度为 0 时，每个内部顶点周围的角度之和恰好为 2π，这就是平坦曲面所需的曲率。优化过程中施加0 边界条件后，边界边长保持不变。

凸能量优化所涉及的定义域包含对应于违反三角不等式的离散度量的共形因子的对数，这意味着可能找到一种无法用于将顶点嵌入平面的解。（Springborn 等人，2008）提出在检测到此类违规时翻转边，许多后续研究进一步探讨了这一问题；完整讨论和解决方案请参见（Gillespie 等人，2021年）。不过，我们在实验中并未遇到此类问题。

顶点位置中心的莫比乌斯变换¨可以通过以下任一方法计算：（Bobenko 等人，2016）或（Baden 等人，2018年）；我们采用了后者，该方法根据原始网格中对应的三角形面积，为顶点位置赋予权重。

˜ ˜将对应于 f 的离散度量记为 ℓ。作为该过程的副产物，我们还得到了对数共形˜ ˜因子 u，它建立了 ℓ 与 ℓ 之间的离散共形等价。我们将 f 称为 T 的球面参数化。

通过球面参数化，我们建立了三个曲面之间的对应关系：由 ˜ 描述的分片线性曲面 f、由 f 描述的内接于单位球面的分片线性曲面，以及单位球面本身。这些对应关系如图 2 所示。我们通过每个面内的重心坐标，在分片线性曲面之间进行映射（此变换也是分片线性的）。要从内接于球面的曲面映射到球面本身，只需将点归一化，使其具有单位范数。反向映射（从球面到内接于球面的曲面）时，我们计算从原点沿查询点方向发出的射线与内接曲面的交点。具体而言，若 $x \in S^2$ 是一个位于由$(i,\ j,\ k) \in$F所确定的球面三角形中的查询点，则交点 $\alpha x \in \mathbb{R}^3$（其中标量 $\alpha \in [0,1]$）与内接曲面满足：

$$((\tilde{\mathsf{f}}_j - \tilde{\mathsf{f}}_i) \times (\tilde{\mathsf{f}}_k - \tilde{\mathsf{f}}_i))^\top (\alpha x - \tilde{\mathsf{f}}_i) = 0, \tag{18}$$

˜ ˜ ˜ ˜其中，叉积 $(\mathsf{f}_j - \mathsf{f}_i) \times (\mathsf{f}_k - \mathsf{f}_i)$ 垂直于由 $(i,\ j,\ k)$ 确定的内接欧几里得三角形。重新排列各项，得到：

$$\alpha = \frac{((\tilde{\mathsf{f}}_j - \tilde{\mathsf{f}}_i) \times (\tilde{\mathsf{f}}_k - \tilde{\mathsf{f}}_i))^\top \tilde{\mathsf{f}}_i}{((\tilde{\mathsf{f}}_j - \tilde{\mathsf{f}}_i) \times (\tilde{\mathsf{f}}_k - \tilde{\mathsf{f}}_i))^\top x} = \frac{(\tilde{\mathsf{f}}_j \times \tilde{\mathsf{f}}_k)^\top \tilde{\mathsf{f}}_i}{((\tilde{\mathsf{f}}_j - \tilde{\mathsf{f}}_i) \times (\tilde{\mathsf{f}}_k - \tilde{\mathsf{f}}_i))^\top x}. \tag{19}$$

这种对应关系在图2中有所展示。

建立这些对应关系后，我们分别将这两个分片线性曲面记为 $\mathsf{M} \subset \mathbb{R}^d$ 和 $\mathsf{M}_{\text{inscr}} \subset \mathbb{R}^3$。我们还生成对数共形因子 u 在球面上的插值函数，$\bar{u}: S^2 \to \mathbb{R}$。为计算查询点 $x \in S^2$处的插值值 $\bar{u}(x)$，我们首先使用公式（19）将 x 投影到 $\mathsf{M}_{\text{inscr}}$；然后，使用相应的重心坐标作为插值权重，对相交三角形各顶点处的 u 值进行插值。

B. 基础生成模型详情

B.1. 黎曼连续归一化流

在接下来的章节中，为方便起见，我们采用扩散和基于分数的生成模型所使用的约定（Sohl-Dickstein 等人，2015年；Song 等人，2020）：生成模型的前向方向将数据分布映射为噪声分布。

在欧几里得情形中，连续归一化流（CNF）（Chen 等人，2018年）由一个参数化的时变向量场刻画 f：$\mathbb{R}^d \times [0,1] \to \mathbb{R}^d$。对于初始概率密度 ρ_0：$\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}_+$，时变概率密度

ρ： $\mathbb{R}^d \times [0,1] \to \mathbb{R}_+$ 求解（初始条件为 ρ_0）概率质量连续性方程 n:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho \cdot f) = 0, \tag{20}$$

描述了随机初始条件（按照 ρ_0分布）的概率密度如何在向量场 f的作用下演化。乘积 $\rho \cdot f$是概率质量通量，其散度可展开为:

$$\mathrm{div}(\rho \cdot f) = \nabla \rho^\top f + \rho \cdot \mathrm{div} f. \tag{21}$$

这种形式使我们能够表示由向量场 f支配的确定性轨迹上的（对数）概率密度变化率。也就是说，对于 $x \in \mathbb{R}^d$和满足以下条件的轨迹 γ： $[0,1] \to \mathbb{R}^d$

$$\frac{\mathrm{d}\gamma}{\mathrm{d}t} = f(\gamma(t), t), \tag{22}$$

对于所有 $t \in (0,\ 1)$，根据 Chen 等人 (2018年)，还有:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \log \rho(\gamma(t), t) = -\mathrm{div}(\rho \cdot f)(\gamma(t), t). \tag{23}$$

方程（22）和方程（23）表示的常微分方程可以同时求解。利用这个增广系统，我们可以将数据分布映射到噪声分布（正向求解），或将噪声分布映射到数据分布（反向求解）。训练模型需要查询数据的对数似然；为了计算似然，在方程（22）下向前传播数据，计算相应终端状态（在所选噪声分布下）的对数概率密度，然后在方程（22）和方程（23）下向后传播终端状态和对数概率密度。

从欧几里得梯度到球面梯度。 在球面情形中，向量场指定切向量。也就是说，在点$x \in S^2$处，向量场指定一个切向量 $v \in \mathbb{R}^3$，使得 $x^\top v = 0$。我们可以计算诸如 ∇和 div 这样的微分算子，并通过将定义在球面上的函数扩展为定义在整个 $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ 上的函数来求解常微分方程，如 Rozen 等人 (2021年) 所述。具体而言，对于切向量场 f： $S^2 \times [0,1] \to \mathbb{R}^3$ 和概率密度ρ： $S^2 \times [0,1] \to \mathbb{R}_+$，我们定义如下扩展:

$$\tilde{f}(x,t) = f\left(x/\|x\|_2, t\right), \qquad \tilde{\rho}(x,t) = \rho\left(x/\|x\|_2, t\right), \tag{24}$$

对于所有非零的 $x \in \mathbb{R}^3$以及时刻 $t \in [0,1]$。 f的球面梯度是 $\tilde{f}$的欧几里得梯度。˜ ˜的球面散度以及 f的球面散度 $\rho \cdot f$分别是 f和 $\tilde{\rho} \cdot f$的欧几里得散度。与（Rozen 等人，2021年）一样，我们可以通过将˜方程（22）中的 f替换为 f，并使用任意可微（自适应步长）欧几里得求解器来求解该方程。另一种方法是使用球面图册（Lou 等人，2020）求解方程（22），这些图册在局部用欧几里得空间表示球面和向量场（例如，使用球面指数映射和对数映射）。后一种方法的优点是能以构造方式将方程（22）的解限制在球面上；不过，在我们的实验中，前一种方法能在严格的容差范围内保持与球面的接近。

B.2. Moser流

Rozen 等人 (2021年) 通过直接对概率质量通量建模（而非对向量场 f建模），并限制用于生成数据样本的向量场类别，从而无需求解常微分方程即可查询对数似然。对于数据概率密度 μ： $S^2 \to \mathbb{R}_+$ 和噪声概率密度 ν： $S^2 \to \mathbb{R}_+$，概率质量通量被建模为一个参数化的时不变切向量场 F： $S^2 \to \mathbb{R}^3$，满足:

$$\mu(x) - \nu(x) = -\mathrm{div} F(x), \tag{25}$$

对所有 $x \in S^2$。也就是说，当 ν被选定，同时选取 F的参数时，建模得到的数据密度由方程（25）给出。为了从噪声生成数据样本，使用以下向量场:

$$f(x,t) = \frac{F(x)}{\nu(x) + (1-t) \cdot \mathrm{div} F(x)}, \tag{26}$$

相应的连续性方程的解所对应的概率密度为：

$$\rho(x,t) = (1-t)\mu(x) + t\nu(x), \tag{27}$$

对所有 $x \in S^2$ 以及 $t \in [0,1]$。请注意，该概率密度会在 μ 和 ν.

为确保通量模型对应有效的概率密度，通量场的散度必须积分为 0，且处处大于 $-\nu$。第一个要求可由散度定理推出：将散度的积分替换为边界积分（此处边界为空）。第二个要求必须通过积分约束来强制满足，并使用蒙特卡洛积分进行近似（从原始网格中均匀采样）。