arXiv:2304.02637v1 [cs.LG] 5 Apr 2023

GENPHYS：从物理过程到生成模型

刘子明、罗迪、徐逸伦、托米·亚科拉、马克斯·泰格马克麻省理工学院{zmliu,diluo,ylxu,jaakkola,tegmark}@mit.edu

摘要

由于扩散模型（DM）以及较新的泊松流生成模型（PFGM）都受到物理过程的启发，因此提出这样的问题是合理的：**物理过程能否带来更多新的生成模型?**我们表明答案是**可以**。我们引入了一个通用的模型族，即由**物**理**过程**生成模型（**GenPhys**），在这一框架中，我们将描述物理过程的偏微分方程（PDE）转换为生成模型。我们表明，可以从*s*-生成 偏微分方程（*s* 表示光滑）构造生成模型。GenPhys 包含现有的两种生成模型（DM和PFGM），甚至还能产生新的生成模型族，例如受弱相互作用启发的"汤川生成模型"。另一方面，一些物理过程默认并不属于 GenPhys 模型族，例如波动方程和薛定谔方程，但经过一些修改后可以纳入 GenPhys 模型族。我们通过GenPhys 所要实现的目标，是探索并拓展生成模型的设计空间。

1 引言

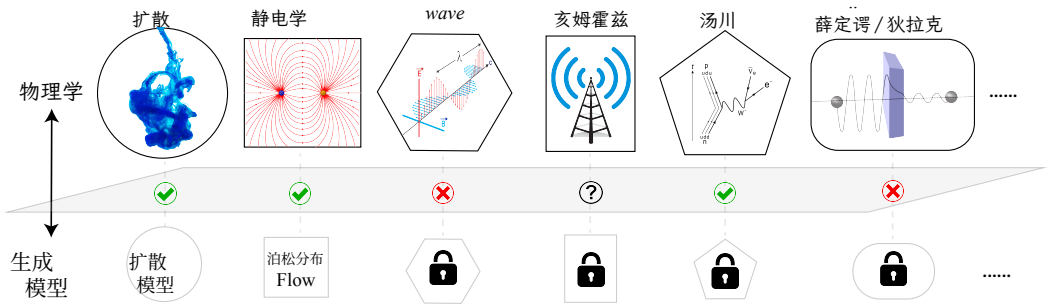


图1：物理学与生成模型之间的二元性。目前，文献中仅发现了扩散模型和泊松流模型。我们还能解锁更多吗?

最近，我们见证了受物理学启发的深度生成模型的成功，例如基于热力学的扩散模型（DM）（Sohl-Dickstein 等，2015；Ho 等，2020；Song 等，2020；Karras 等，2022）以及源自静电学的泊松流生成模型（PFGM）（Xu 等，2022；2023）。扩散模型的思想是逆转墨水在水中扩散的过程，而 PFGM 将数据点视为带电粒子，并让它们在电场中运动。如图 1所示，物理学与生成模型之间似乎存在一种二元性，即一种物理现象可以产生一个生成模型，反之亦然。这种二元性真的存在吗？我们将表明，答案是**是**，尽管对物理过程存在一些限制。这种二元性带来了扩展生成模型设计空间的可能性，几乎无需付出额外努力，只需利用各种物理结构的底层动力学，包括分子、恒星、星系、行星，甚至人类自身。

物理学与生成模型之间的联系可能相当深刻。我们的宇宙可以说就是一个生成模型（Tegmark，1996；Lin 等人，2017）：从我们早期的波函数开始

宇宙最初是一个简单的多元高斯分布，对应于具有微小量子涨落的空间均匀场，而我们的宇宙不断演化，逐渐“生成”越来越丰富和复杂的现象。然而，驱动这种演化的动力学由（简单而优雅的）偏微分方程（PDE）描述。对于利用连续物理过程的生成模型，情况也是如此：尽管从潜变量到数据分布的整个变换可能相当复杂，但其在每一步的运动都很简单，易于由深度神经网络学习。

本研究聚焦于受连续物理过程启发的生成模型，其理念与 DM 和 PFGM 非常相似，但旨在构建一个更统一的框架。由于连续物理过程由偏微分方程描述，我们将交替使用这两个术语。我们提出了一个可将物理偏微分方程转化为生成模型的框架，称为**由**物理过程生成的**生成**模型（**GenPhys**）。具体而言，对于偏微分方程 p[1]，我们将相应的生成模型记为 p- GenPhys。例如，扩散模型和泊松流生成模型分别利用扩散方程和泊松方程，因此在 GenPhys 框架下分别称为扩散-GenPhys 和泊松-GenPhys。我们将证明，若偏微分方程 p-GenPhys 是一个生成模型，则该偏微分方程 p 是s-生成(s 表示光滑），即满足以下两个条件：

(C1) p 等价于一个密度流；

(C2) p 的解会随着时间推移变得更加“平滑”。

尽管（**C2**）是较为粗略的，但可以借助色散关系使其变得严谨（见第4节），其主要思想是，“平滑化”意味着高频模态比低频模态衰减得更快。借助这两个条件，我们因此可以将 p 分为三类——s-生成、有条件的 s-生成（取决于偏微分方程中的某些系数），或非 s-生成：

(1) p是 s-生成的。示例： $p =$ 扩散、泊松、汤川（屏蔽泊松）、双调和、分形扩散、高阶扩散。**(2)** p 是条件 s-生成的。示例： $p =$ 耗散波、亥姆霍兹。**(3)** p 不是 s-生成的。示例： $p =$ 理想波、薛定谔、狄拉克。

本文其余部分的组织如下：第 2 节介绍将物理过程转换为生成模型的 GenPhys 框架。第 3 节介绍常见的物理过程，并在这些偏微分方程上演示 GenPhys 框架。第4节提出使用严格的判据——色散关系——来确定偏微分方程是否光滑。第5 节回顾相关工作，随后在第 6 节给出结论并展开讨论。

2 从物理过程到生成模型（GENPHYS）

本节揭示了连续物理过程与生成模型之间的联系。关键在于匹配它们相关的偏微分方程：每个物理过程由一个偏微分方程描述，而每个生成模型与一个密度流（也是一个偏微分方程）相关联。要将物理过程转换为生成模型，我们需要以下转换步骤：

$$\boxed{\text{Physical process}} \xrightarrow[\text{Sec 2.2}]{(a)} \boxed{\text{Physical PDE (Eq.5)}} \xrightarrow[\text{Sec 2.3}]{(b)} \boxed{\text{Density flow (Eq.4)}} \xrightarrow[\text{Sec 2.1}]{(c)} \boxed{\text{Generative model}} \tag{1}$$

第 (a) 步和第(c) 步在第2.2 和 2.1节中已有讨论，相对来说较为直接。简而言之，第 (a)步成立，是因为偏微分方程（数学对象）只是物理过程（物理实体）的抽象。事实上，可以从任意偏微分方程出发，而不论其含义是什么，尽管我们关注的是具有物理意义的偏微分方程。第 (c)步很直接，因为我们关注的是生成模型的数学结构，而忽略其实现细节。下文中，我们将不再区分“物理过程”和“物理偏微分方程”，也不再区分“密度流”和“生成模型”。剩下的唯一挑战是第 (b) 步，即将物理偏微分方程转换为密度流，这将在第2.3节中讨论。

[1]本文讨论的所有偏微分方程均配备自由边界条件。

算法 1：基于物理过程的生成模型（GenPhys）ˆ 输入：偏微分方程 $L\phi(\mathrm{x}\ t) = 0$, 数据分布 $p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})$ 输出：生成的样本 x 1 (1) 将 ˆ $L\phi(\mathrm{x}\ t)$ 改写为形式 $\frac{\partial p}{\partial t}(\mathrm{x}\ t) + \nabla \cdot [p(\mathrm{x}\ t)\mathrm{v}(\mathrm{x}\ t)] - R(\mathrm{x}\ t)$，使得 $p = p(\phi, \phi_t, \nabla\phi, \cdots)$，$\mathrm{v} = \mathrm{v}(\phi, \phi_t, \nabla\phi, \cdots)$，$R = R(\phi, \phi_t, \nabla\phi, \cdots)$；ˆ ˆ 2 (2) 求解 $L\phi(\mathrm{x}\ t) = \overline{p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})}\delta(t)$。若 L 是线性的，我们可以用格林函数 $G(\mathrm{x}\ t; \mathrm{x}')$ 表示 $\phi(\mathrm{x}\ t)$：$\phi(\mathrm{x}\ t) = \int G(\mathrm{x}\ t; \mathrm{x}')p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x}')d^N\mathrm{x}'$，其中 ˆ $LG(\mathrm{x}\ t; \mathrm{x}') = \delta(\mathrm{x} - \mathrm{x}')\delta(t)$；3 (3) 利用 (1) 中的关系和 (2) 中的解，得到 $p(\mathrm{x}\ t)$，$\mathrm{v}(\mathrm{x}\ t)$，$R(\mathrm{x}\ t)$；4 (4) 训练神经网络 $\mathrm{s}_\theta(\mathrm{x}\ t)$ 以拟合 $\mathrm{v}(\mathrm{x}\ t)$，使得 $\mathrm{s}_\theta(\mathrm{x}\ t) \approx \mathrm{v}(\mathrm{x}\ t)$。训练另一个神经网络 $W_\alpha(\mathrm{x}\ t)$ 以拟合 $R(\mathrm{x}\ t)$，使得 $W_\alpha(\mathrm{x}\ t) \approx R(\mathrm{x}\ t)$；5 (5) 抽取 $\mathrm{x}(T) \sim p(\mathrm{x}\ T)$，利用分支过程 $W_\alpha(\mathrm{x}\ t)$，从 $t = T$ 到 $t = 0$ 模拟 $\frac{d\mathrm{x}(t)}{dt} = \mathrm{s}_\theta(\mathrm{x}\ t)$。输出 x(0)。

——

2.1 生成模型作为密度流

给定概率分布 $p_{\mathrm{data}}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ 的独立同分布数据样本，生成模型的目标是从 $p_{\mathrm{data}}(\mathbf{x})$ 中获取新样本。连续物理过程 $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}\ t)$ 可以将概率分布 $p(\mathbf{x}\ t)$ 演化为如下形式。

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)] = 0, \tag{2}$$

被称为概率流方程，或连续性方程。这里 p 和 v 分别被解释为概率分布和速度场。概率分布从数据分布 $p(\mathrm{x}, 0) = p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})$ 开始，演化到一个（希望简单的）最终分布 $p(\mathrm{x}\ T)$。要从 $p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})$ 生成样本，可以首先从最终分布 $p_{\mathrm{prior}}(\mathrm{x}) \equiv p(\mathrm{x}\ T)$ 抽取样本，然后从 $t = T$ 到 $t = 0$ [2] 反向运行过程 $\frac{d\mathbf{x}}{dt}$。

尽管式（2）假设守恒，但更一般地，我们可以允许存在非守恒项：

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)] - R(\mathbf{x}, t) = 0, \tag{3}$$

其中，$R(\mathrm{x}\ t)$对应于出生/死亡。$R > 0\,(R < 0)$表示粒子在前向过程中出生（死亡），而在反向过程中死亡（出生）[3]。在这种情况下，$p(\mathrm{x}\ t)$是密度分布，而不是概率分布，因此我们将方程（3）称为密度流方程。密度流的扩展已在机器学习中得到广泛应用，例如用于对单细胞动力学和领域自适应进行建模的不平衡最优传输方法（Mroueh & Rigotti, 2020；Fatras et al., 2021），以及用于概率建模的贝叶斯推断（Lu et al., 2019a）。在实践中，带有出生/死亡动力学的密度流可以高效地进行模拟。例如，在扩散蒙特卡洛中，出生/死亡过程可以作为分支过程纳入，并在 $R(\mathrm{x}\ t)$上进行种群控制（Martin et al., 2016；Lu et al., 2019b）。

我们的目标是设计式（3）中的 $p(\mathrm{x}\ t)$、$\mathrm{v}(\mathrm{x}\ t)$ 和 $R(\mathrm{x}\ t)$，使其满足初始和最终边界条件：（1）$p(\mathrm{x}, 0) = p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})$；（2）$p_{\mathrm{prior}}(\mathrm{x}) \equiv p(\mathrm{x}\ T)$ 在 $T \to \infty$ 时渐近地独立于 $p_{\mathrm{data}}(\mathrm{x})$。这种设计过程极具挑战性（Lipman 等，2022），主要是因为边界条件复杂，而且通常缺乏解析解。我们将说明，物理学能够为设计过程提供启发并使其更加容易：首先，边界条件可以用物理学的语言清晰地解释，并归结为色散关系这一物理学中的重要概念（见第 4 节）。其次，许多物理过程都有解析解。出于下文即将阐明的原因，将初始条件作为源项纳入

[2]请注意，在物理学和机器学习应用中，时间通常被定义为相反的方向：我们的宇宙随着时间向前推进而生成复杂结构，而使用例如扩散的生成模型则会随着时间推移使事物变得更加简单，并通过随时间向后演化来生成复杂性。[3]在时间区间 $[t, t + dt]$ 内，位于$\mathbf{x}$ 处的前向粒子在 $R > 0/R < 0$ 时有 $|R|dt$ 的概率转变为两个/零个粒子。

式（3）的右端，并将左端定义为一个作用于 $\hat{M}$ 的微分算子 $p(\mathbf{x}\ t)$、$\mathbf{v}(\mathbf{x}\ t)$ 以及$R(\mathbf{x}\ t)$:

$$\boxed{\hat{M}(p,\mathbf{v},R) \equiv \frac{\partial p(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \nabla\cdot[p(\mathbf{x},t)\mathbf{v}(\mathbf{x},t)] - R(\mathbf{x},t) = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t) \quad \text{(Density Flow)}} \tag{4}$$

2.2 物理过程和物理偏微分方程

连续物理过程由偏微分方程描述。

$$\boxed{\hat{L}\phi \equiv F(\phi,\phi_t,\phi_{tt},\nabla\phi,\nabla^2\phi,...) = f(\mathbf{x},t) \quad \text{(Physical PDE)}} \tag{5}$$

其中，$\phi(\mathbf{x}\ t)$ 是定义在 $\mathbb{R}^N\times\mathbb{R}^+$ 上的标量函数，$\hat{L}$ 是作用于 $\phi(\mathbf{x}\ t)$ 的微分算子，$f(\mathbf{x}\ t)$ 是源项，下标表示偏导数，例如 $\phi_t \equiv \frac{\partial\phi}{\partial t}$、$\phi_{tt} \equiv \frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}$。为简便起见，我们主要讨论在空间和时间上均具有对称性的线性偏微分方程[4]，即 F 不显式依赖于 $\mathbf{x}$ 或 t。线性性质和对称性通常使 $\phi(\mathbf{x}\ t)$ 可解析求解，这些解在许多数理物理教材中都有介绍（Kirkwood, 2018；Guenther 和 Lee，1996）。

对于线性偏微分方程，解 $\phi(\mathbf{x}\ t)$ 可以表示为格林函数 $G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}',t')$ 与源项 $f(\mathbf{x}\ t)$ 的卷积，即，$\phi(\mathbf{x}\ t) = \int G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}',t')f(\mathbf{x}',t')d^N\mathbf{x}'dt$(Courant & Hilbert, 2008)。格林函数 $G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}',t')$ 定义为 $\hat{L}G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}',t') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')$ 的解，其中当 $t<t'$ 时，$G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}',t') = 0$。

2.3 将物理偏微分方程转换为密度流

回顾一下，我们的目标是，给定 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，设计$(p,\mathbf{v}\ R)$，使得密度流方程 (4) 成立。由于物理偏微分方程（方程5）已得到充分研究并具有良好性质，如果我们能够将物理偏微分方程的解转换为密度流的解，那将非常方便。一个希望是，如果左端和右端都匹配，密度流和物理偏微分方程实际上就是同一个方程。右端的匹配很容易，只需设置 $f(\mathbf{x}\ t) = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t)$。左端的匹配则并不简单，需要让$(p,\mathbf{v}\ R)$以巧妙的方式依赖于 ϕ，使得在方程 (4) 中设置 $p = p(\phi,\phi_t,\nabla\phi,\cdots)$、$\mathbf{v} = \mathbf{v}(\phi,\phi_t,\nabla\phi,\cdots)$ 和 $R = R(\phi,\phi_t,\nabla\phi,\cdots)$ 后，得到方程(5) 中的 $F(\phi,\phi_t,\cdots)$。为确保 $(p,\mathbf{v}\ R)$ 定义了一个密度流，我们应检查

(C1) 良态密度流：$p(\mathbf{x}\ t)$ 是一个密度分布，即 $p(\mathbf{x}\ t)\geq 0$。此外，$(p,\mathbf{v}\ R)$ 应当具有良好的性质（例如，不能是不连续的或存在奇点等）。

然而，**(C1)** 对于生成模型来说还不够。在实践中，我们希望生成模型具有一个先验分布 $p_{\text{prior}}(\mathbf{x}) \equiv p(\mathbf{x}\ T)$，且该先验分布独立于 $p(\mathbf{x},0) \equiv p_{\text{data}}(\mathbf{x})$。直观而言，这要求 $p(\mathbf{x}\ t)$ 随着 t 增大而变得“更加平滑”，从而使初始细节被“隐藏”或“模糊化”。我们可以非正式地将这一条件表述为：

(C2) 平滑偏微分方程：当 $T\to\infty$ 时，最终分布 $p(\mathbf{x}\ T)$ 渐近地独立于初始分布 $p(\mathbf{x}\ t=0)$ $= p_{\text{data}}(\mathbf{x})$。

若一个偏微分方程同时满足**(C1)** 和**(C2)**，我们称其为*s*-生成，其中s 代表光滑。

如何判断偏微分方程是否为 s-生成？ 要检验 **(C1)**，我们需要使物理偏微分方程与密度流相匹配。尽管匹配过程取决于具体情形，但通常只需稍作构造即可轻松完成。下面我们将通过两个已知案例来演示：扩散方程和泊松方程。要检验**(C2)**，通常凭借物理直觉就足以判断偏微分方程是否平滑。在第 3 节中，我们将展示平滑和非平滑偏微分方程的示例，其中格林函数的图示清楚地体现了平滑性。关于 **(C2)** 的严谨讨论将留待第 4 节，我们将在那里证明 **(C2)** 等价于对.....的一个约束

[4]这意味着$\hat{L}$ 在以下变换下保持不变：(1) 时间平移 $t\to t+\delta t$，(2)空间平移 $\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}$，以及 (3)空间旋转 $\mathbf{x}\to\mathbf{R}\mathbf{x}$。

偏微分方程的色散关系 [5]。综合起来，算法 1 总结了利用物理偏微分方程生成样本的“算法”。

示例 1：扩散模型 我们旨在将扩散方程 $\phi_t - \nabla^2\phi = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t)$转换为密度流 $\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\mathbf{v}) - R = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t)$：

$$\phi_t - \nabla^2\phi = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi(-\nabla \log \phi)) - 0 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\mathbf{v}) - R = 0 \tag{6}$$

比较两边可得：

$$p = \phi, \quad \mathbf{v} = -\nabla \log \phi, \quad R = 0 \tag{7}$$

扩散方程的解 ϕ 为：

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}', \quad G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi t)^{N/2}} \exp(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{2t}) \tag{8}$$

结合方程（7）和方程（8）可得

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) &= \int G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}' = \frac{1}{(2\pi t)^{N/2}} \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}') \exp(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{2t})d^N\mathbf{x}' \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= -\nabla \log \phi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{p(\mathbf{x}, \mathbf{t})} \int \nabla G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}' = \mathbb{E}_{p_t(\mathbf{x}'|\mathbf{x})}\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{t}\right) \\ R(\mathbf{x}, t) &= 0 \end{aligned} \tag{9}$$

其中 $p_t(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) \propto p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}') \sim p_{\text{data}}(\mathbf{x}')\exp(-|\mathbf{x}\ -\mathbf{x}'|^2/(2t))$。注意，$-\mathbf{v}(\mathbf{x}\ t)$可还原（Song & Ermon，2019；Song 等，2020）中的得分函数，即 $\nabla_{\mathbf{x}} \log\ p(\mathbf{x}\ t)$】【。

为检验**(C2)** 是否成立，我们定义 F 来衡量最终分布对初始条件的独立性：

$$F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', T) \equiv \int \sqrt{p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}_1')}\sqrt{p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}_2')}d^N\mathbf{x} = \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^2}{8T}\right), \tag{10}$$

其中 $F = 1$ 表示独立性，$F = 0$ 表示依赖性。我们有 $\lim_{T\to\infty} F(\mathbf{x}_1',\ \mathbf{x}_2',\ T) \to \mathbf{1}$，这意味着数据无关先验。

示例2：泊松流生成模型我们的目标是将泊松方程 $-(\phi_{tt} + \nabla^2\phi) = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t)$ 转换为密度流 $\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\mathbf{v}) - R = p_{\text{data}}(\mathbf{x})\delta(t)$：—

$$-(\phi_{tt} + \nabla^2\phi) = \frac{(\partial -\phi_t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[-\phi_t\left(\frac{\nabla\phi}{\phi_t}\right)\right] - 0 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\mathbf{v}) - R = 0 \tag{11}$$

比较两边可得：

$$p = -\phi_t, \quad \mathbf{v} = \frac{\nabla\phi}{\phi_t}, \quad R = 0 \tag{12}$$

注意，我们将物理学家视为其中一个 $N + 1$ 空间维度的变量重新解释为时间。对于 $N > 2$，泊松方程的解 ϕ 为：

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}', \quad G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = \frac{1}{A_N} \frac{1}{(t^2 + |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2)^{\frac{N-1}{2}}} \tag{13}$$

其中 A_N 是单位 N-球面的表面积。结合公式（12）和公式（13）得到

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, t) = -\phi_t(\mathbf{x}, t) &= \int -G_t(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}' \\ &= \frac{N - 1}{2A_N} \int \frac{t}{(t^2 + |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2)^{\frac{N+1}{2}}} p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}' \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\nabla\phi(\mathbf{x}, t)}{\phi_t(\mathbf{x}, t)} &= \frac{1}{p(\mathbf{x}, \mathbf{t})} \int \nabla G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')p_{\text{data}}(\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}' = \mathbb{E}_{p_t(\mathbf{x}'|\mathbf{x})}\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{t}\right) \\ R(\mathbf{x}, t) &= 0 \end{aligned} \tag{14}$$

[5]对于线性偏微分方程而言，该等价关系成立，这也是本文的重点。对于非线性偏微分方程，条件会更加复杂。

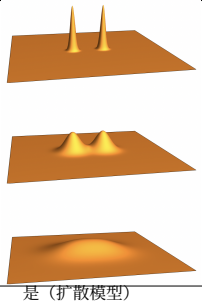
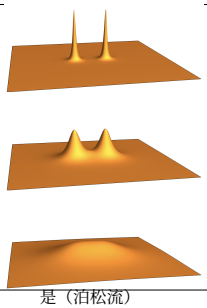
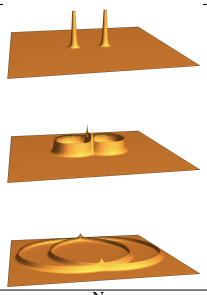
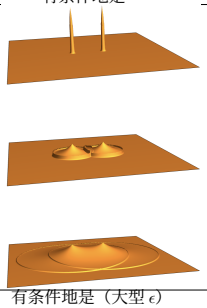
方程	扩散方程	泊松方程	理想波动方程	耗散波动方程
偏微分方程 $L\phi=0$	$\phi_t - \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + 2\epsilon\phi_t - \nabla^2\phi = 0$
重写	$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\phi(-\nabla\log\phi)) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(-\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t-2\epsilon\phi)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t-2\epsilon\phi)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t+2\epsilon\phi})) = 0$
p	ϕ	$-\phi_t$	$-\phi_t$	$-(\phi_t+2\epsilon\phi)$
$\mathbf{v}$	$-\nabla$日志ϕ	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$-\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t+2\epsilon\phi}$
R	0	0	0	0
$G(r,\ t)$	$\frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{r^2}{4t})$	$\frac{1}{(t^2+r^2)^{\frac{N-1}{2}}}$	$\frac{1}{\sqrt{t^2-r^2}}\Theta(t-r)$ (2D)	$\frac{e^{-\epsilon t}\cos(\epsilon\sqrt{r^2-t^2})}{\sqrt{t^2-r^2}}\Theta(t-r)$ (2D)
$\tilde{G}(k,\ t)$	$\exp(-k^2t)$	$\exp(-kt)$	$\exp(\pm ikt)$	$\exp(-\epsilon t + i\sqrt{k^2-\epsilon^2}t)$ $(k>\epsilon)$ $\exp(-(\epsilon+\sqrt{k^2-\epsilon^2})t)$ $(k\le\epsilon)$
(C1)	Yes	Yes	No	有条件地是
(C2)	Yes	Yes	No	有条件地是
示意图 ϕ				
s-生成?	是（扩散模型）	是（泊松流）	No	有条件地是（大型 ϵ）

表1：物理偏微分方程与生成模型之间的联系。 $r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$，其中 $\mathbf{x}'$ 和$\mathbf{x}$分别是源点和场点。

其中 $p_t(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) \propto p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}') \sim p_{\text{data}}(\mathbf{x}')/(t^2 + |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2)^{(N+1)/2}$。请注意，$\mathbf{v}(\mathbf{x}\ t)$ 可恢复 (Xu et al., 2022) 中的泊松场。

我们检验**(C2)** 成立。尽管 $F(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2,\ t) \equiv \int \sqrt{p(\mathbf{x}\ T;\mathbf{x}'_1)}\sqrt{p(\mathbf{x}\ T;\mathbf{x}'_2)}d^N\mathbf{x}$ 对于任何 $t > 0$ 都可能没有闭式解，我们注意到对于较大的 T：

$$p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}') \sim \frac{1}{(1 + \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{T^2})^{\frac{N+1}{2}}} \approx \exp(-\frac{(N+1)|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{2T^2}), \tag{15}$$

因此我们可以证明 $\lim_{T\to\infty} F(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2,\ T) \to 1$ 与扩散方程的情况类似，这意味着先验分布与数据无关。

3 哪些物理过程可以转换为 GENPHYS?

在本节中，我们将考察若干物理偏微分方程，将其重写并解释为生成模型。我们还将使用两个条件**(C1)** 和**(C2)** 来确定这些偏微分方程是否属于 s-生成。我们的主要结果及示例（针对一个玩具双点分布）如下所示，并汇总于表1和2中，推导细节见附录A。

理想波动方程（非 s-生成）为 $\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$，描述声波、光波等的传播（Soodak & Tiersten, 1993）。波动方程保留信息，具体而言，波前以恒定速度远离源头传播。想象一块石头落入水中。将其重写为 $\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(-\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) - 0 = 0$，我们得到 $p = -\phi_t$，$\mathbf{v} = -\frac{\nabla\phi}{\phi_t}, R = 0$。$N = 2$[6] 的格林函数为 $G(t; \mathbf{x}) = \Theta(t-r)/\sqrt{t^2 - r^2}$ 其中 Θ 是阶跃函数，$r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$。(C1) 不成立：$\mathbf{v}$ 在“波前”处发散（$r = t$）。(C2) 不成立：波前在传播过程中保留初始信息，因此最终分布取决于初始分布。这就是声波可用于通信的原因。总之，理想波动方程不是 s-生成。

耗散波动方程（条件 s-生成） 是 $\phi_{tt} + 2\epsilon\phi_t - \nabla^2\phi = 0$ 其中 ϵ是阻尼系数（Aleixo & Capelas de Oliveira,2008）。它描述了带有耗散的波传播。耗散减缓了波的传播，导致行为在波和扩散之间“插值”：$\epsilon \to 0$ 恢复理想波，而 $\epsilon \to \infty$ 恢复扩散。重写为 $\frac{\partial(-\phi_t-2\epsilon\phi)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t - 2\epsilon\phi)(-\frac{\nabla\phi}{\phi_t+2\epsilon\phi})) - 0 = 0$，我们有 $p = -\phi_t - 2\epsilon\phi$，$\mathbf{v} = -\nabla\phi/(\phi_t +$

[6]请参阅附录 A 以了解一般信息 N。

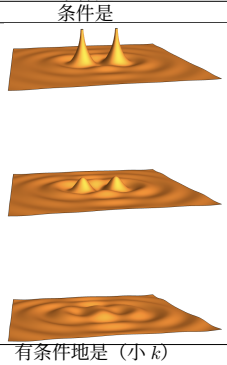
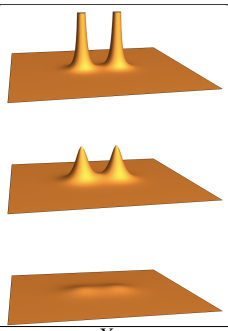
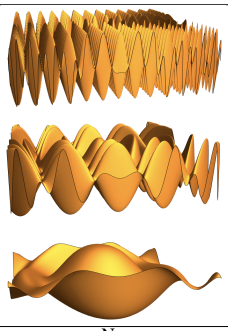
方程	亥姆霍兹方程	屏蔽泊松方程（汤川方程）	薛定谔方程
PDE $\hat{L}\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi + k_0^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi - m^2\phi = 0$	$i\phi_t + \nabla^2\phi = 0$
重写	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) - k_0^2\phi = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) + m^2\phi = 0$	$\frac{\partial\lvert\phi\rvert^2}{\partial t} + \nabla\cdot(\lvert\phi\rvert^2(2\mathrm{Im}\nabla\log\phi)) = 0$
p	$-\phi_t$	$-\phi_t$	$\lvert\phi\rvert^2$
$\mathbf{v}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$2\mathrm{Im}\nabla\log\phi$
R	$k_0^2\phi$	$-m^2\phi$	0
$G(r,t)$	$(\frac{k_0}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}} H^{(1)}_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2+r^2})$	$(\frac{m}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}} K_{\frac{N-1}{2}}(m\sqrt{t^2+r^2})$	$\frac{1}{(4\pi i t)^{\frac{N}{2}}}\exp(\frac{ir^2}{4t})$
$\hat{G}(k,t)$	$\exp(-i\sqrt{k_0^2-k^2}t)$ $(k \le k_0)$ $\exp(-\sqrt{k^2-k_0^2}t)$ $(k > k_0)$	$\exp(-\sqrt{k^2+m^2}t)$	$\exp(ik^2t)$
(C1)	条件是	Yes	No
(C2)	条件是	Yes	No
图示 ϕ 或 $\mathrm{Re}\phi$			
s-生成?	有条件地是（小 k）	Yes	No

表2：（续表1）物理偏微分方程与生成模型之间的联系。 $r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$，其中$\mathbf{x}'$和$\mathbf{x}$分别是源点和场点。

$2\epsilon\phi$)， $R = 0$。如表1 最后一列所示，与理想波相比，耗散会减小波前的幅度。在波前之后，波的行为更类似于扩散（尽管采用的是非高斯核）。选择足够大的 ϵ 将使该过程在数量上类似于扩散，因此这两个条件应当（近似地）成立。未来还需要开展更多研究，以确定 ϵ的确切条件，但暂时我们可以将耗散波动方程归类为有条件的 s-生成。

亥姆霍兹方程（有条件地具有 s-生成性）$(\nabla^2_{\tilde{\mathbf{x}}} + k_0^2)\phi = 0$ 是单频波动方程，它解释了其格林函数中的波动行为（见表2）。可以想象由周期性源驱动的水波涟漪（而不是单次扰动，例如一块石头落入水中）。与泊松方程类似，我们设定 $\tilde{\mathbf{x}} = [t, \mathbf{x}]$。重写为 $\frac{\partial_{(-\phi_t)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left[(-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})\right] - k_0^2\phi = 0$后，我们可以匹配 $p = -\phi_t$、$\mathbf{v} = \nabla\phi/\phi_t$ 和 $R = k_0^2\phi$。**(C1)** 有条件地成立。 $p = -\phi_t$ 通常不是适当的密度分布，因为它可能为负。尽管如此，p 在局部区域 $r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \ll \frac{2\pi}{k_0}$ 内仍为正，因此足够小的 k_0 可以使**(C1)**成立。事实上， $k_0 \to 0$ 还原为泊松方程，因此足够小的 k_0 也应能（至少近似地）使**(C1) & (C2)** 成立。未来还需进一步研究，以确定 k_0的确切条件；目前我们暂将亥姆霍兹方程归类为有条件的 s-生成方程。

屏蔽泊松方程，又称汤川（s-生成）$(\nabla^2_{\tilde{\mathbf{x}}} - m^2)\phi = 0$，其中 m表示“屏蔽”。与泊松势（泊松方程的解）相比，屏蔽泊松势的作用范围更短，其长度尺度为 m^{-1}，这是由于屏蔽效应所致。当 $N = 3$时， ϕ 是众所周知的汤川势（汤川与坂田，1937年）。注意， $m = 0$ 恢复了泊松方程。对于泊松方程，我们设$\tilde{\mathbf{x}} = [t, \mathbf{x}]$。重写为 $\frac{\partial -\phi_t}{\partial t} + \nabla\cdot\left[(-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})\right] + m^2\phi = 0$后，我们可以匹配 $p = -\phi_t$、$\mathbf{v} = \nabla\phi/\phi_t$、 $R = m^2\phi$。屏蔽泊松方程的格林函数为 $G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}') = (\frac{m}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}} K_{\frac{N-1}{2}}(m\sqrt{t^2+r^2})$，其中 K是第二类修正贝塞尔函数。其解在性质上与泊松方程的解相似，但随距离增加而衰减得更快。我们可以检验 (C1) 和 (C2) 成立。

薛定谔方程（非 s-生成）是 $i\phi_t = -\nabla^2\phi + V(\mathbf{x})\phi$，其中 ϕ 是（复值）波函数。它描述了量子粒子的演化（Griffiths & Schroeter，2018）。

薛定¨谔方程描述了粒子的波动性，这基于波粒二象性的思想。对于 $V(\mathbf{x}) = 0$，自由粒子偏微分方程意味着 $\frac{\partial|\phi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left[|\phi|^2(2\mathrm{Im}\nabla\log\phi)\right] = 0$（详情请参见附录 A），因此 $p = |\phi|^2$, $\mathbf{v} = 2\,\mathrm{Im}\nabla\log\phi$ 以及 $R = 0$。格林函数$G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}') = \frac{1}{(4it)^{N/2}}\exp(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{4it})$。（C1）不成立。尽管 $p \equiv |\phi|^2$ 是概率分布，但它可能由于干涉而出现零点，从而导致 v 发散。（C2）不成立。 $p(\mathbf{x}\ T)$即使在 T 较大时也不停振荡，并且取决于初始分布。总之，薛定¨谔方程不是s-生成的。然而，为了使最终分布独立于初始分布，可以考虑薛定¨谔演化下的子系统量子动力学，使其热化，或者在开放量子系统表述中达到稳态。

说明：在 GenPhys 之间进行插值可得到一系列 GenPhys。通过在两个 GenPhys 之间插值，可以得到一系列 GenPhys。例如，要在 DM 和 PFGM 之间插值，可以研究偏微分方程 $a\phi_{tt} - b\phi_t + \nabla^2\phi = 0\,(a \geq 0, b \geq 0)$。注意，$(a, b) = (1, 0)$ 和 $(a, b) = (0, 1)$ 分别还原出 PFGM 和 DM。该偏微分方程可重写为 $\frac{\partial}{\partial t}(-a\phi_t+b\phi) = -\nabla \cdot ((-a\phi_t + b\phi)(\frac{\nabla\phi}{a\phi_t-b\phi}))$，因此 $p \equiv -a\phi_t + b\phi$ and $\mathbf{v} \equiv \frac{\nabla\phi}{a\phi_t-b\phi}$。我们可以验证，(C1) 和 (C2) 均成立，因此插值得到的 GenPhys 也是有效的。然而，对于一般的 a, b，格林函数 ϕ 可能不存在闭式解（见附录 B）。

4 色散关系作为判据

检查**(C2)** 取决于具体情况，通常数学性很强，正如我们在附录A中所展示的。在本节中，我们将展示**(C2)** 可以归结为对偏微分方程的色散关系施加限制，因此色散关系是验证甚至构建 GenPhys 的一种便捷且有原则的工具。

色散关系将波的波数 k 与其频率 ω 联系起来。所有线性偏微分方程 $\hat{L}\phi(\mathbf{x}\ t) = 0$ 都有波解：$\phi(\mathbf{x}\ t) \propto \exp(-i\omega t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})$。将波试探解代入偏微分方程可得色散关系 $\omega(\mathbf{k})$。例如，扩散方程 $\phi_t - \nabla^2\phi = 0$ 有 $\omega = -ik^2(k \equiv |\mathbf{k}|)$，其中 w 是纯虚数，因此时间因子 $\exp(-i\omega t) \sim \exp(-k^2 t)$ 会随时间衰减。相比之下，波动方程 $\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$ 有 $\omega(k) = \pm k$，其中 ω 是实数，因此时间因子 $\exp(\pm ikt)$ 会随时间振荡而不衰减。

表 3：物理偏微分方程的色散关系 $\omega(k)$。

物理学	PDE	色散关系	s-生成
扩散	$\phi_t - \nabla^2\phi = 0$	$\omega = -ik^2$	Yes
泊松	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi = 0$	$\omega = \pm ik$	Yes
理想波	$\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$	$\omega = \pm k$	No
耗散波	$\phi_{tt} + 2\epsilon\phi_t - \nabla^2\phi = 0$	$\omega = \begin{cases} i(-\epsilon \pm \sqrt{\epsilon^2 - k^2}) & k \leq \epsilon \\ i\epsilon \pm \sqrt{k^2 - \epsilon^2} & k > \epsilon \end{cases}$	有条件地是（大 ϵ）
亥姆霍兹	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi + k_0^2\phi = 0$	$\omega = \begin{cases} \pm\sqrt{k_0^2 - k^2} & k \leq k_0 \\ \pm i\sqrt{k^2 - k_0^2} & k > k_0 \end{cases}$	条件是（小 k_0^2）
屏蔽泊松	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi - m^2\phi = 0$	$\omega = \pm i\sqrt{k^2 + m^2}$	Yes
薛¨定谔	$i\phi_t + \nabla^2\phi = 0$	$\omega = k^2$	No

偏微分方程是光滑的 = 色散准则 在表 3中，我们列出了色散关系 $\omega(k)$ 上述讨论的若干偏微分方程。最后一列列出该偏微分方程是否为s-生成。色散关系与是否为s-生成之间存在完美相关性：（1）s-生成方程具有纯虚 ω 对所有 k，（2）条件s-生成方程具有纯虚 ω 对某些 k 范围，以及（3）非s-生成方程具有 k 具有纯虚的范围 ω。我们可以证明（参见附录 C）该**(C2)** 实际上等价于以下条件：

$$\boxed{\mathrm{Im}\ \omega(k) < \mathrm{Im}\ \omega(0), \quad \text{for all } k > 0} \tag{16}$$

请注意，尽管色散关系可能有多个分支，但我们只要求其中一个分支满足方程 (16)。例如，泊松方程的色散关系有两个分支

$\omega = \pm ik$，其中一个（$\omega = -ik$）满足方程 (16)。直观而言，(C2) 要求初始分布的细节随时间推移而逐渐平滑，这意味着高频模式应比低频模式衰减得更快。方程 (16) 指出，非零频率模式应比零频率模式衰减得更快。如果我们将 p(x) 的空间傅里叶变换定义为 $\hat{p}$(k)，这一条件简单来说意味着，具有 $k \equiv |\mathbf{k}| > 0$ 的空间振荡比总概率/质量 $\hat{p}(\mathbf{k} = 0, t) = \int p(\mathbf{x}\ t)d^N\mathbf{x}$ 衰减得更快。

通过色散关系构建生成模型现在，我们只需构建色散关系满足限制条件方程（16）的偏微分方程，即可构建GenPhys。例如，表4 中列出的四个偏微分方程满足色散关系限制条件，因此相应的 GenPhys 值得在未来进一步研究。

表4：色散关系表明了新的 GenPhys

物理学	PDE	色散关系
混合扩散泊松方程	$a\phi_{tt} - b\phi_t + \nabla^2\phi = 0\ (a > 0, b > 0)$	$\omega = \frac{i}{2a}(b \pm \sqrt{b^2 + 4ak^2})$
分数阶扩散	$\phi_t + (-\Delta)^\beta\phi = 0\ (\beta > 0)$	$\omega = -ik^{2\beta}$
三阶“扩散”	$\phi_{ttt} - \Delta u = 0$	$\omega = (-i,\ e^{i\frac{\pi}{6}},\ e^{i\frac{5\pi}{6}})k^{\frac{2}{3}}$
弹性（双调和）	$\phi_t + \nabla^2\nabla^2\phi = 0$	$\omega = -ik^4$

5 相关工作

机器学习领域一系列受物理学启发的代表性生成模型，可以追溯到基于能量的模型（EBM）（LeCun et al., 2006）。EBM 将生成过程视为通过模拟朗之万动力学（Parisi, 1981）寻找低能量状态。为避免 EBM 训练期间代价高昂的 MCMC 采样，分数匹配（Hyv¨arinen, 2007; Vincent, 2011）估计能量函数的梯度（分数），而非直接对能量建模。为解决分数匹配在低维数据流形上的不稳定性，Song & Ermon（2019）将退火朗之万动力学与不同高斯噪声水平下扰动分布的分数相结合。随后，Song et al.（2020）表明，退火朗之万动力学分数匹配和采用离散马尔可夫链的扩散模型（Sohl-Dickstein et al., 2015; Ho et al., 2020）均可纳入连续随机微分方程（SDE）框架，其中生成过程等价于对固定的前向扩散过程进行逆转。该框架已应用于多种任务，包括文本生成图像（Rombach et al., 2021; Saharia et al., 2022）、3D 生成（Poole et al., 2022; Zeng et al., 2022）和分子生成（Hoogeboom et al., 2022）。

较新的泊松流生成模型（PFGM）（Xu 等人，2022；2023）源于静电学，在图像生成方面可与扩散模型相媲美。PFGM 将数据视为电荷，并通过在增广空间中沿电场线演化样本来进行生成建模。研究表明，与扩散模型相比，这种方法能够生成质量更高的样本，且鲁棒性更强。另一项受物理学启发的研究（Rissanen 等人，2022）通过在图像的二维平面上迭代求解热方程的逆过程来生成样本。

6 结论与讨论

我们提出了一个框架，可将任意 s-生成偏微分方程转换为生成模型。我们关注具有物理意义的方程，并将由此得到的生成模型称为**源于物理过程的生成模型（GenPhys）**。除现有的两种 GenPhys——扩散模型和泊松流生成模型——外，我们的框架还支持自动生成更多 GenPhys。本文旨在指出更多 GenPhys 的存在；下一步将分析并测试它们在实践中的表现。一个价值百万美元的问题是：这些新的 GenPhys 能否在理论保证和实际性能方面胜过现有模型?

我们的框架指出了一种从物理过程构建生成模型的方法，但仍有许多该框架尚未涵盖的绝佳机会。例如：（1）我们只利用了平滑型偏微分方程，却无法充分利用非平滑型偏微分方程。存在非

s-生成模型也能实现有用的生成建模，例如量子机器学习中基于薛定谔方程和量子电路动力学的情形。¨（2）我们只讨论了线性偏微分方程，但非线性偏微分方程也可能启发生成模型，例如纳维–斯托克斯方程、反应扩散方程和玻色–爱因斯坦凝聚等。鉴于这些非线性物理现象在我们的物理世界中普遍存在，探究它们能否启发生成模型将尤为有趣。（3）我们只讨论了具有平移或旋转对称性、且格林函数可解析求解的偏微分方程，但不具备此类对称性的一般偏微分方程或许能提供更强的能力和灵活性。例如，具有位置依赖势的薛定谔方程的虚时间演化，会在密度流中产生出生/死亡过程。（4）我们只考虑了与时间无关的偏微分方程，而含时偏微分方程则提供了更通用的框架。这使得我们能够与自然界中更广泛的动力学过程建立联系，例如非平衡动力学、淬火实验和退火。例如，众所周知，绝热量子动力学能够实现通用量子计算（Aharonov 等人，2008），可将其用于一般概率建模。

致谢

我们谨向 Zhuo Chen、HongyeHu 和 Catherine Liang 致谢，感谢他们提供的宝贵讨论。YX 和 TJ 感谢 MIT-DSTA 新加坡合作项目、NSF Expeditions 资助项目（奖项编号 1918839）“通过代码理解世界”以及MIT-IBMGrand Challenge 项目的支持。ZL 和 MT 得到基础问题研究所（Foundational Questions Institute）和 Rothberg 家庭认知科学基金的支持。DL 得到美国能源部科学办公室国家量子信息科学研究中心量子优势协同设计中心（C2QA）的支持，合同编号为 DE-SC0012704。ZL、MT 和 DL得到IAIFI 通过 NSF 资助项目 PHY-2019786 提供的支持。

参考文献

Dorit Aharonov、Wim Van Dam、JuliaKempe、Zeph Landau、Seth Lloyd 和 OdedRegev。绝热量子计算等价于标准量子计算。*SIAM* 评论，50(4)：755–787，2008 年。

Rafael Aleixo 和 Edmundo Capelas de Oliveira. 损耗波动方程的格林函数. *Revista Brasileirade Ensino de F´ısica*, 30:1302.1–1302.5, 01 2008. doi: 10.1590/ S1806-11172008000100003.

理查德·柯朗和大卫·希尔伯特。数理物理方法：偏微分方程。约翰·威利父子公司，2008年。

Kilian Fatras, Thibault S'ejourn'e, Nicolas Courty, and R´emi Flamary. 不平衡小批量最优传输；领域自适应应用. *ArXiv*, abs/2103.03606, 2021.

David J Griffiths and Darrell F Schroeter. 量子力学导论. 剑桥大学出版社, 2018.

Ronald B Guenther 和 John W Lee。 数理物理的偏微分方程与积分方程。Courier Corporation, 1996。

Jonathan Ho、Ajay Jain 和 Pieter Abbeel。去噪扩散概率模型。神经信息处理系统进展，33:6840–6851，2020。

Emiel Hoogeboom、Victor Garcia Satorras、Cl'ementVignac 和 Max Welling。用于 3D 分子生成的等变扩散。*arXiv*，abs/2203.17003，2022。

Mark Viola (https://math.stackexchange.com/users/218419/mark viola)。高维空间中的亥姆霍兹方程基本解。Mathematics Stack Exchange。网址https://math.stackexchange.com/q/2255877。网址：https://math.stackexchange.com/q/2255877（版本：2017-04-30）。

Aapo Hyv¨arinen。评分匹配的一些扩展。计算统计与数据分析，51:2499–2512，2007。

Tero Karras、Miika Aittala、Timo Aila 和 Samuli Laine。《阐明基于扩散的生成模型的设计空间》。*arXiv* 预印本 *arXiv:2206.00364*，2022 年。

James Kirkwood。 数理物理与偏微分方程。 Academic Press，201 8.

Yann LeCun、SumitChopra、RaiaHadsell、Aurelio Ranzato和 Fu Jie Huang。《能量基学习教程》。2006 年。

HenryWLin、MaxTegmark和 David Rolnick。为什么深度廉价学习效果如此之好？《统计物理学杂志》，168:1223–1247，2017。

Yaron Lipman、Ricky TQ Chen、Heli Ben-Hamu、Maximilian Nickel 和 Matt Le。用于生成建模的流匹配。*arXiv* 预印本 *arXiv:2210.02747*，2022 年。

Yulong Lu、JianfengLu 和 James Nolen。使用出生-死亡加速朗之万采样。*arXiv*，abs/1905.09863, 2019a。

Yulong Lu, Jianfeng Lu 和 James Nolen. 用出生-死亡加速朗之万采样. *arXiv* 预印本 *arXiv:1905.09863*, 2019b.

Richard M. Martin、Lucia Reining 和 David M. Ceperley。《相互作用电子：理论与计算方法》。剑桥大学出版社，2016年。doi：10.1017/CBO9781139050807。Youssef Mroueh 和 Mattia Rigotti。非平衡索博列夫下降。《*arXiv*》，abs/2009.14148，2020 年。Giorgio Parisi。关联函数与计算机模拟（II）。《《核物理》》，205：337–344，1981 年。

Ben Poole、Ajay Jain、Jonathan T. Barron 和 Ben Mildenhall。DreamFusion：使用二维扩散的文本转三维。*ArXiv*，abs/2209.14988，2022。

Severi Rissanen、Markus Heinonen 和 A. Solin。使用逆热耗散的生成建模。ArXiv，abs/2206.13397，2022。Robin Rombach、A. Blattmann、Dominik Lorenz、Patrick Esser 和 Bj¨orn Ommer。使用潜在扩散模型的高分辨率图像合成。2022 IEEE/CVF 计算机视觉与模式识别会议 (CVPR)，第 10674–10685 页，2021。Chitwan Saharia、William Chan、Saurabh Saxena、Lala Li、Jay Whang、Emily L. Denton、Seyed Kamyar Seyed Ghasemipour、Burcu Karagol Ayan、Seyedeh Sara Mahdavi、Raphael Gontijo Lopes、Tim Salimans、Jonathan Ho、David J. Fleet 和 Mohammad Norouzi。具有深度语言理解的逼真文本到图像扩散模型。ArXiv，abs/2205.11487，2022。Jascha Sohl-Dickstein、Eric Weiss、Niru Maheswaranathan 和 Surya Ganguli。使用非平衡热力学的深度无监督学习。载于《国际机器学习会议》，第 2256–2265 页。PMLR，2015。Yang Song 和 Stefano Ermon。通过估计数据分布梯度进行生成建模。ArXiv，abs/1907.05600，2019。Yang Song、Jascha Sohl-Dickstein、Diederik P Kingma、Abhishek Kumar、Stefano Ermon 和 Ben Poole。通过随机微分方程的基于分数的生成建模。arXiv 预印本 arXiv:2011.13456，2020。Harry Soodak 和 Martin S Tiersten。n 维中的尾流和波。《美国物理杂志》，61(5):395–401，1993。Max Tegmark。宇宙实际上是否几乎不包含信息？arXiv 预印本 quant-ph/9603008，1996。Pascal Vincent。分数匹配与去噪自编码器之间的联系。《神经计算》，23:1661–1674，2011。维基百科贡献者。格林函数 — 维基百科，自由的百科全书。https: //en.wikipedia.org/w/index.php?title=Green%27s_function&oldid=1134903008，2023。 [在线；访问于 22-January-2023]。Yilun Xu、Ziming Liu、Max Tegmark 和 Tommi Jaakkola。泊松流生成模型。arXiv 预印本 arXiv:2209.11178，2022。Yilun Xu、Ziming Liu、Yonglong Tian、Shangyuan Tong、Max Tegmark 和 T. Jaakkola。PFGM++：释放物理启发生成模型的潜力。ArXiv，abs/2302.04265，2023。Hideki YUKAWA 和 Shoichi SAKATA。关于基本粒子相互作用 II。《日本物理数学学会会刊》第 3 系列，19:1084–1093，1937。Xiaohui Zeng、Arash Vahdat、Francis Williams、Zan Gojcic、Or Litany、Sanja Fidler 和 Karsten Kreis。Lion：用于三维形状生成的潜在点扩散模型。ArXiv，abs/2210.06978，2022。

附录

格林函数回顾

A.1 数学基础

傅里叶变换许多偏微分方程的格林函数可以通过傅里叶变换求得。对于标量函数 $\phi(\mathbf{x}\ t)$，$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$，我们定义傅里叶变换

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\phi] \equiv \int \phi(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^N\mathbf{x}, \tag{17}$$

以及逆傅里叶变换

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\phi}] \equiv \frac{1}{(2\pi)^N} \int \tilde{\phi}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^N\mathbf{k}. \tag{18}$$

傅里叶变换的一个优点是，$\mathbf{x}$ 空间中的导数会变成$\mathbf{k}$ 空间中的乘法，即,

$$\mathcal{F}[\nabla\phi] = -i\mathbf{k}\tilde{\phi},\ \mathcal{F}[\nabla^2\phi] = -|\mathbf{k}|^2\tilde{\phi} \tag{19}$$

因此，在$\mathbf{k}$ 空间中求解偏微分方程可能比在 $\mathbf{x}$ 空间中简单得多。尽管如此，通过逆傅里叶变换将$\phi(\mathbf{k}\ t)$变换回 $\phi(\mathbf{x}\ t)$可能很难。

高维空间中的体积和表面积 n维单位球 $\mathcal{B}_N = \{\mathbf{x} : \sum_{i=1}^N x_i^2 \leq 1\}$ $_n$的体积为 $V_N = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n+1}{2})}$，表面积为 $A_{N-1} = nV_n = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})}$。用球坐标表示的 N维体积元 $d^N\mathbf{x}$ 为

$$d^N\mathbf{x} = r^{N-1}dr \prod_{i=1}^{N-2} \left[(\sin\theta_i)^{N-1-i}\, d\theta_i\right] d\varphi \tag{20}$$

其中 $r \equiv |\mathbf{x}|$, $\theta_i \in [0, \pi]$, 对于 $i = 1, \cdots, N-2$, $\varphi \in [0, 2\pi)$. 通常人们感兴趣的是计算积分 $\int f(\mathbf{x})d^N\mathbf{x}$, 因此如果 $f(\mathbf{x})$ 除了 θ_1 之外具有轴向对称性, 即 $f(\mathbf{x})$ 独立于 $\theta_i (i \geq 2)$ 和 ϕ, 该 $\mathbb{R}^N$ 空间可以基于 θ_1 和 r 被切成“环”, 并且位于 $(\theta_1 \to \theta_1 + d\theta_1, r \to r + dr)$ 的环具有体积

$$d^N\mathbf{x} = 2\pi A_{N-2}(r\sin\theta_1)^{N-2} r d\theta_1 dr. \tag{21}$$

A.2 扩散方程

扩散方程的格林函数 $G(\mathbf{x}\ t)$ 对于 $(\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N)$ 满足:

$$G_t - \nabla^2 G = \delta(\mathbf{x})\delta(t), \tag{22}$$

其中，为简便起见，我们假设源点 $\mathbf{x}' = \mathbf{0}$。使用傅里叶变换式（17），变换后的偏微分方程变为:

$$\tilde{G}_t + |\mathbf{k}|^2\tilde{G} = \delta(t), \tag{23}$$

这等价于

$$\tilde{G}_t + |\mathbf{k}|^2\tilde{G} = 0\ (t > 0),\ \tilde{G}(\mathbf{k}, 0) = 1. \tag{24}$$

这个初值问题的解为

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, t) = \exp(-|\mathbf{k}|^2 t) \tag{25}$$

这是$\mathbf{k}$ 空间中的高斯分布。现在变换回$\mathbf{x}$ 空间:

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{x},t) &= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{G}] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \exp(-|\mathbf{k}|^2 t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{k} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \exp(-k^2 t)\exp(ikx\cos\theta)A_{N-2}(k\sin\theta)^{N-2}k dk d\theta \quad (k\equiv|\mathbf{k}|, x\equiv|\mathbf{x}|) \quad \text{(invoke Eq. 21)} \\
&= \frac{A_{N-2}}{(2\pi)^N}\int_{k=0}^{\infty} dk k^{N-1}\exp(-k^2 t)\int_{\theta=0}^{\pi}\exp(ikx\cos\theta)(\sin\theta)^{N-2}d\theta,
\end{aligned}
\tag{26}
$$

且 θ 的积分为:

$$
\int_{\theta=0}^{\pi}\exp(ikx\cos\theta)(\sin\theta)^{N-2}d\theta = \sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})_0\tilde{\Gamma}_1(\frac{N}{2},-\frac{(kx)^2}{4}),
\tag{27}
$$

˜其中 ${}_0\Gamma_1(b,z)$ 是正则化超几何函数。因此

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{x},t) &= \frac{A_{N-2}\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{(2\pi)^N}(\int_{k=0}^{\infty}k^{N-1}\exp(-k^2t)_0\tilde{\Gamma}_1(\frac{N}{2},-\frac{(kx)^2}{4})) \\
&= \frac{A_{N-2}\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{(2\pi)^N}(\frac{1}{2}\exp(-\frac{x^2}{4t})t^{\frac{N}{2}}) \\
&= \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{r^2}{4t}) \\
&= \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4t})
\end{aligned}
\tag{28}
$$

这是一个均值为零、方差为 $2t$的高斯分布。实际上，有一种更简单的方法来计算逆傅里叶变换，即注意到 k 的分量是可分离的:

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{x},t) &= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{G}] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \exp(-|\mathbf{k}|^2 t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{k} \\
&= \prod_{i=1}^{N}(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-k_i^2 t)\exp(ik_i x_i)dk_i) \\
&= \prod_{i=1}^{N}(\frac{\exp(-\frac{x_i^2}{4t})}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-t(k_i-\frac{ix_i}{2t})^2)dk_i) \\
&= \prod_{i=1}^{N}(\frac{\exp(-\frac{x_i^2}{4t})}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{t}}) \\
&= \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4t})
\end{aligned}
\tag{29}
$$

然而，更困难的推导更为通用，并且在我们尝试在 DMs 和 PFGMs 之间进行插值时很有用（参见附录 B）。对于一般的$\mathbf{x}'$，因此我们有

$$
G(\mathbf{x},t;\mathbf{x}') = \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{4t})
\tag{30}
$$

对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，我们有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}'$。现在我们检查这三个条件:

(C1) holds. $p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}') = \phi(\mathbf{x},t;\mathbf{x}') \geq 0$.

(C2)成立。我们有

$$F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', T) \equiv \int \sqrt{p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}_1')}\sqrt{p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}_2')} d^N\mathbf{x} = \exp(-\frac{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^2}{8T}), \tag{31}$$

因此 $\lim_{T\to\infty} F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', T) \to 1$，这意味着采用数据无关先验。

A.3 泊松方程

泊松方程的格林函数 $\phi(\mathbf{x})$ 在 $(\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N)$ 下满足：

$$\nabla^2 G = \delta(\mathbf{x}) \tag{32}$$

为简单起见，我们假设源点 $\mathbf{x}' = \mathbf{0}$。注意，（到目前为止）$G(\mathbf{x})$ 不依赖时间 t，因为泊松方程在物理上描述的是定态（与时间无关）。为了纳入时间 t这一概念，PFGM（Xu 等人，2022）将 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$ 扩展为$\tilde{\mathbf{x}} \equiv (\mathbf{x}\ t) \in \mathbb{R}^{N+1}$ [7]，其中 $\mathbf{x}$ 表示数据点，而 t 表示扩展维度。将 $\mathbf{x}$和 t明确拆分后，泊松方程变为：

$$G_{tt} + \nabla^2 G = 0, \quad G(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x}). \tag{33}$$

利用傅里叶变换方程（17），变换后的偏微分方程为：

$$\tilde{G}_{tt} - |\mathbf{k}|^2\tilde{G} = 0, \quad \tilde{G}_t(\mathbf{k}, 0) = 1, \tag{34}$$

其通解为 $\tilde{G} = \frac{1}{|\mathbf{k}|}(A\exp(-|\mathbf{k}|t) + B\exp(|\mathbf{k}|t))$，其中 $-A + B = 1$。考虑自由边界条件，即当 $t \to \infty$，$G \to 0$时，我们有 $A = -1$，$B = 0$。因此$\tilde{G} = -\frac{1}{|\mathbf{k}|}\exp(-|\mathbf{k}|t)$。现在变换回$\mathbf{x}$空间：

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x}, t) &= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{G}] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k}|}\exp(-|\mathbf{k}|t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{k} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{k}\exp(-kt)\exp(ikx\cos\theta)A_{N-2}(k\sin\theta)^{N-2}kdkd\theta \quad (k \equiv |\mathbf{k}|, x \equiv |\mathbf{x}|) \quad \text{(invoke Eq. 21)} \\
&= \frac{A_{N-2}}{(2\pi)^N}\int_{k=0}^{\infty} dk k^{N-2}\exp(-kt)\int_{\theta=0}^{\pi}\exp(ikx\cos\theta)(\sin\theta)^{N-2}d\theta, \\
&= \frac{A_{N-2}\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{(2\pi)^N}(\int_{k=0}^{\infty} k^{N-2}\exp(-kt){}_0\tilde{\Gamma}_1(\frac{N}{2}, -\frac{(kx)^2}{4})) \\
&= \frac{2}{(4\pi)^{\frac{N}{2}}}(\frac{2^{N-2}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(t^2+x^2)^{\frac{N-1}{2}}}) \\
&= \frac{\Gamma(\frac{N-1}{2})}{2\pi^{\frac{N+1}{2}}}\frac{1}{(t^2+x^2)^{\frac{N-1}{2}}} \\
&= \frac{\Gamma(\frac{N-1}{2})}{2\pi^{\frac{N+1}{2}}}\frac{1}{(t^2+|\mathbf{x}|^2)^{\frac{N-1}{2}}},
\end{aligned} \tag{35}$$

这是 PFGM 中的泊松核（Xu 等人，2022）。对于一般的$\mathbf{x}'$，我们有

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}) = \frac{\Gamma(\frac{N-1}{2})}{2\pi^{\frac{N+1}{2}}}\frac{1}{(t^2+|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2)^{\frac{N-1}{2}}} \tag{36}$$

对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，我们有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}')d^N\mathbf{x}'$。现在我们来检查这三个条件：

(C1) 成立。

[7] 原始 PFGM（Xu 等，2022）使用 z 而不是 t。

(C2) 成立。尽管对于任意 $t > 0$, $F(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, t)$ 可能没有闭式解，但我们注意到，当 T 很大时：

$$p(\mathbf{x}, T; \mathbf{x}') \sim \frac{1}{(1 + \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{T^2})^{\frac{N+1}{2}}} \approx \exp(-\frac{(N+1)|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{2T^2}), \tag{37}$$

因此，我们可以证明 $\lim_{T\to\infty} F(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, T) = \int \sqrt{p}(\mathbf{x}\ T; \mathbf{x}'_1)\sqrt{p}(\mathbf{x}\ T; \mathbf{x}'_2)d^N\mathbf{x} \to 1$ 与扩散方程的情况类似。

A.4 波动方程

波动方程的格林函数 $G(\mathbf{x}\ t)$ 对于 $(\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N)$ 满足：

$$G_{tt} - \nabla^2 G = \delta(\mathbf{x})\delta(t), \tag{38}$$

为简便起见，我们假设源点 $\mathbf{x}' = \mathbf{0}$。对方程（17）使用傅里叶变换后，变换后的偏微分方程为：

$$\tilde{G}_{tt} + |\mathbf{k}|^2\tilde{G} = 0, \quad \tilde{G}_t(\mathbf{k}, 0) = 1, \quad \tilde{G}(\mathbf{k}, 0) = 0 \tag{39}$$

其解为 $\tilde{G} = {}_{|}{}^{1}{}_{\mathbf{k}}(\sin(|\mathbf{k}|t)$。现在变换回 $\mathbf{x}$ 空间：

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, t) &= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{G}] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k}|}\sin(|\mathbf{k}|t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{k} \\ &= \frac{A_{N-2}\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{(2\pi)^N}(\int_{k=0}^{\infty} k^{N-2}\sin(kt)_0\tilde{\Gamma}_1(\frac{N}{2}, -\frac{(kx)^2}{4})) \end{aligned} \tag{40}$$

进行积分并不容易，但我们请读者参阅Soodak & Tiersten (1993)，以了解任意 N 维度下的理想波解，并参阅 Aleixo & Capelas de Oliveira(2008)，以了解耗散波。这里我们总结 Soodak & Tiersten (1993) 中的主要结果。我们将 N维度中的格林函数记为 ϕ_n，那么相差 2 个维度的解之间存在如下关系（$r \equiv |\mathbf{x}|$）：

$$G_{N+2}(r, t) = -\frac{1}{2\pi r}\frac{\partial G_N(r, t)}{\partial r} \tag{41}$$

关于 $N \leq 5$ 的解列出如下（$\tau \equiv t - r$）：

$$\begin{aligned} G_1 &= \frac{1}{2}\Theta(\tau) \\ G_2 &= \frac{1}{2\pi}\frac{\Theta(\tau)}{\sqrt{t^2 - r^2}} \\ G_3 &= \frac{1}{4\pi}\frac{\delta(\tau)}{r} \\ G_4 &= \frac{1}{4\pi^2}(\frac{\delta(\tau)}{r(t^2 - r^2)^{\frac{1}{2}}} - \frac{\Theta(t-r)}{(t^2 - r^2)^{\frac{3}{2}}}) \\ G_5 &= \frac{1}{8\pi^2}(\frac{\delta(\tau)}{r^3} + \frac{\delta'(\tau)}{r^2}) \end{aligned} \tag{42}$$

一个有趣的观察是，偶数维和奇数维中的解存在定性差异。当 $N = 1,3,5, ...$为奇数时，解只包含 $\delta(\tau)$ 及其导数（唯一的例外是 $N = 1$），这意味着只有波前 $t = r$ 受到激发，其他所有位置的解均为零。相反，当 $N = 2,4,...$为偶数时，解包含阶跃函数 $\Theta(\tau)$，它对$t > r$不为零，被称为“尾波”（Soodak & Tiersten, 1993）。对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，我们有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}')d^N\mathbf{x}'$。

(C1) 不成立。在表 1中，我们匹配 $p \equiv -\phi_t$，但 p 是有效的概率密度分布吗？我们检查二维情况

$$p \equiv -\phi_t = \frac{1}{2\pi}(\frac{t\Theta(t-r)}{(t^2 - r^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{\delta(t-r)}{\sqrt{t^2 - r^2}}). \tag{43}$$

第二项为负。在波前之外 $r > t$, $p = 0$, 因此 $\mathbf{v} = \frac{\nabla\phi}{p}$ 未定义。 —

(C2) 不成立。对于 $\mathbf{x}'_1 \neq \mathbf{x}'_2$，即使 $p(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}'_1)$ 和 $p(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}'_2)$ 的支集也不匹配。

A.5 亥姆霍兹方程

亥姆霍兹方程是 $(\nabla^2 + k_0^2)\,\phi = 0$。很容易看出，$k_0 = 0$ 可恢复出泊松方程。从物理学角度来看，亥姆霍兹方程可以解释为单频波动方程，或单能量薛定谔方程。

与波动方程的关系波动方程为 $\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$。通常研究（时间上的）周期解 $\phi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})\,e^{-ik_0 t}$，其角频率为 k_0。将试探解代入波动方程得到 $(\nabla^2 + k_0^2)f = 0$，这就是亥姆霍兹方程。

与薛定谔方程的关系~~**方程**~~ 自由粒子的薛定谔方程为 $i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi$ 其中 ϕ 是波函数。通常研究定态很有意义，使得 $\phi(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}$。将定态试探解代入薛定谔方程得到 $(\nabla^2 + \frac{2mE}{\hbar^2})f = 0$，这就是亥姆霍兹方程，其中 $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$。

格林函数是下列方程的解（为简单起见，我们设$\mathbf{x}' = \mathbf{0}$）：

$$\nabla^2 G(\mathbf{x}) + k_0^2 G(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \tag{44}$$

解答可见于 (https://math.stackexchange.com/users/218419/mark viola)：

$$G(\mathbf{x}) = \frac{i}{4}\left(\frac{k_0}{2\pi r}\right)^{\frac{N}{2}-1} H^{(1)}_{\frac{N}{2}-1}(k_0 r), \quad r \equiv |\mathbf{x}| \tag{45}$$

其中，$H^{(1)}$ 是第一类汉克尔函数。$H^{(1)}_n \equiv J_n + iY_n$ 其中，J_n 和 Y_n 分别是第一类和第二类贝塞尔函数。当 $k \to 0$、$kr \to 0$、$H^{(1)}_{\frac{n}{2}-1}(k_0 r) \approx_{_} i\Gamma(\frac{N}{2}-1)\,\pi\,(\frac{2}{k_0 r})^{\frac{N}{2}-1}$时，因此 $\phi(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{r^{N-2}}$，这就是泊松方程的格林函数。与泊松方程类似，我们将$\mathbf{x}$ 中的一个维度确定为时间 t，并改变 $N \to N+1$、$\mathbf{x} \to \mathbf{x}' = [\mathbf{x}\ t]$。这意味着该方程

$$G_{tt} + \nabla^2 G + k_0^2 G = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \tag{46}$$

有解

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = \frac{i}{4}\left(\frac{k_0}{2\pi\sqrt{t^2 + r^2}}\right)^{\frac{N-1}{2}} H^{(1)}_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2 + r^2}), \quad r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|. \tag{47}$$

为简单起见，我们只考虑实部（它仍然是亥姆霍兹方程的一个解）：

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = -\frac{1}{4}\left(\frac{k_0}{2\pi\sqrt{t^2 + r^2}}\right)^{\frac{N-1}{2}} Y_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2 + r^2}), \quad r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|. \tag{48}$$

对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，我们有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}')d^N\mathbf{x}'$.

(C1) 有条件地成立。注意，对于较小的 (t, r)，G 是 t 的递减函数，因为 $\frac{k_0}{2\pi\sqrt{t^2+r^2}}$ 随着 t 的增加而减小；对于某个范围 $k_0\sqrt{t^2 + r^2} \le r_c$，$-Y_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2 + r^2})$是 t 的递减（正）函数，其中 r_c 是 $Y_{\frac{N-1}{2}}$ 的第一个零点。因此，对于$k_0\sqrt{t^2} + r^2 \le r_c$，$p(\mathbf{x}\ t, \mathbf{x}') \equiv -\phi_t(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}') \ge 0$。当 $k_0\sqrt{t^2 + r^2} > r_c$时，$Y_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2 + r^2})$会振荡并可能改变符号。对于人们所关注的 (t, r) 区域，只需选择 $k_0 \le \frac{r_c}{(\sqrt{t^2+r^2})_{\max}}$，以确保 p 是有效的密度分布。

(C2) 有条件成立。只要 k_0 足够小（等价地说，相空间经过了适当裁剪），p 就定义了一个密度分布。

A.6 屏蔽泊松方程

屏蔽泊松方程为$(\nabla^2 - m^2)\phi = 0$。屏蔽泊松方程与亥姆霍兹方程非常相似，唯一的区别在于括号内的符号。$m = 0$ 可还原为泊松方程。m 可解释为屏蔽强度，如托马斯-费米屏蔽或德拜屏蔽；或者 m 可解释为玻色子的质量，如汤川势。

与克莱因-戈登方程的关系 克莱因-戈登 (KG) 方程是 $\phi_{tt} - \nabla^2\phi + m^2\phi = 0$。KG 的时间无关解（因此 $\phi_{tt} = 0$）是屏蔽泊松方程。

格林函数是（为简单起见，我们已设置$\mathbf{x}' = \mathbf{0}$）的解：

$$\nabla^2 G(\mathbf{x}) - m^2 G(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \tag{49}$$

解可见于 维基百科贡献者 （2023）：

$$G(\mathbf{x}) = -\frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}(\frac{m}{r})^{\frac{N}{2}-1} K_{\frac{N}{2}-1}(mr), \quad r \equiv |\mathbf{x}| \tag{50}$$

其中 K_n 是第二类修正贝塞尔函数。当 $x \ll 1, K_n(x) \sim \frac{1}{x^n}$。当 $m \to 0, K_{\frac{N}{2}-1}(mr) \sim (mr)^{\frac{N}{2}-1}$，因此 $G(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{r^{N-1}}$ 可还原为泊松核。

与泊松方程类似，我们将$\mathbf{x}$ 中的一个维度视为时间 t，并将 $N \to N+1, \mathbf{x} \to \mathbf{x}' = [\mathbf{x}\ t]$。这意味着该方程

$$G_{tt} + \nabla^2 G - m^2 G = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \tag{51}$$

的解为

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N+1}{2}}}(\frac{m}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}} K_{\frac{N-1}{2}}(m\sqrt{t^2+r^2}), \quad r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \tag{52}$$

对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}') G(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}') d^N \mathbf{x}'$

（C1）成立。 $p(\mathbf{x}\ t; \mathbf{x}') \equiv -\phi_t > 0$，因为 $(\frac{m}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N+1}{2}}$ 和 $K_{\frac{N-1}{2}}(m\sqrt{t^2+r^2})$ 都是关于 t 的正递减函数。

(C2) 成立，因为色散关系 $\omega(k) = -i\sqrt{m^2+k^2}$ 满足平滑条件。

A.7 薛定谔方程

薛定谔方程为 $i\phi_t = -\nabla^2 \phi + V(\mathbf{x})\phi$，其中 ϕ 是（复）波函数。它描述量子粒子的演化（Griffiths & Schroeter，2018）。对于 $V(\mathbf{x}) = 0$，自由粒子的薛定谔方程为 $i\phi_t = -\nabla^2 \phi$。注意，由于 ϕ 是一个复标量函数，因此它不是有效的概率分布。事实上，量子力学将 $|\phi|^2$ 解释为概率分布。现在我们要根据薛定谔方程计算 $\frac{\partial |\phi|^2}{\partial t}$：

$$i\phi_t + \nabla^2 \phi = 0 \tag{53}$$

取复共轭得

$$-i\phi_t^* + \nabla^2 \phi^* = 0 \tag{54}$$

将 ϕ^* 乘以式（53），并将 ϕ 乘以式（54），再将两式相减，得到：

$$i(\phi^* \phi_t + \phi \phi_t^*) + \phi^* \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi^* = 0. \tag{55}$$

注意，

$$\phi^* \phi_t + \phi \phi_t^* = \frac{\partial |\phi|^2}{\partial t}, \phi^* \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi^* = \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*), \tag{56}$$

方程（55）可简化为

$$i\frac{\partial |\phi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) = i\frac{\partial |\phi|^2}{\partial t} + i\nabla \cdot (|\phi|^2 (2\text{Im}\nabla \log \phi)) = 0. \tag{57}$$

与方程（4）比较可得 $p = |\phi|^2$，$\mathbf{v} = 2\text{Im}\nabla \log \phi$ 以及 $R = 0$。格林函数$G(\mathbf{x}\ t;\ \mathbf{x}') = \frac{1}{(4it)^{N/2}} \exp(-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{4it})$，只需在扩散核中 $t \to it$ 即可得到。对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')\ G(\mathbf{x}\ t;\ \mathbf{x}')\ d^N \mathbf{x}'$。

（C1）不成立。 $p \equiv |\phi|^2$ 是概率分布，但由于干涉可能出现零点，导致$\mathbf{v}$发散。

(C2) 失败。 $p(\mathbf{x}\ T)$ 即使对于大的 T 也持续振荡，并且依赖于初始分布。

B 在 DM 和 PFGM 之间进行插值

让我们来研究这个偏微分方程:

$$a\phi_{tt} - b\phi_t + \nabla^2\phi = \delta(\mathbf{x})\delta(t), \tag{58}$$

其中 $(a,b) = (1,0)$ 和 $(a,b) = (0,1)$ 分别还原泊松方程和扩散方程。傅里叶变换方程（17）将偏微分方程转换为

$$a\tilde{\phi}_{tt} - b\tilde{\phi}_t - |\mathbf{k}|^2\tilde{\phi} = \delta(t), \tag{59}$$

或者等价地,

$$a\tilde{G}_{tt} - b\tilde{G}_t - |\mathbf{k}|^2\tilde{G} = 0, \quad (a\tilde{G}_t - b\tilde{G})(\mathbf{k},0) = 1. \tag{60}$$

将试探方程 $G = A\exp(-\omega t)$代入上式得到

$$a\omega^2 + b\omega - |\mathbf{k}|^2 = 0, -\omega aA - bA = 1 \tag{61}$$

二次方程的解为 $\omega_\pm = \frac{1}{2a}(-b \pm \sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2})$，其中只有 w_+ 与自由边界条件一致（$\tilde{\phi} \to 0$, 当 $t \to \infty$）。因此 $\omega \equiv \omega_+ = \frac{1}{2a}(-b + \sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2})$，以及 $A = -\frac{1}{\omega a + b} = -\frac{2}{b+\sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2}}$,

$$\tilde{G}(\mathbf{k},t) = -\frac{2}{b+\sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2}}\exp(-\frac{1}{2a}(\sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2} - b)t) \tag{62}$$

现在我们尝试变换回$\mathbf{x}$ 空间:

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x},t) &= \mathcal{F}^{-1}[\tilde{G}] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^N}\int_{\mathbf{k}} -\frac{2}{b+\sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2}}\exp(-\frac{1}{2a}(\sqrt{b^2+4|\mathbf{k}|^2} - b)t)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{k} \\
&= -\frac{A_{N-2}}{(2\pi)^N}\int_{k=0}^{\infty} dk\frac{k^{N-1}}{b+\sqrt{b^2+4k^2}}\exp(-\frac{1}{2a}(\sqrt{b^2+4k^2} - b)t)\int_{\theta=0}^{\pi}\exp(ikx\cos\theta)(\sin\theta)^{N-2}d\theta \\
&= -\frac{A_{N-2}\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{N-1}{2})}{(2\pi)^N}(\int_{k=0}^{\infty}\frac{k^{N-1}}{b+\sqrt{b^2+4k^2}}\exp(-\frac{1}{2a}(\sqrt{b^2+4k^2} - b)t)_0\tilde{\Gamma}_1(\frac{N}{2}, -\frac{(kx)^2}{4}))
\end{aligned} \tag{63}$$

据我们所知以及 Wolfram Mathematica 的能力，该积分没有一个闭合形式。对于一般的数据分布 $p_{\text{data}}(\mathbf{x})$，我们有 $\phi(\mathbf{x}\ t) = \int p_{\text{data}}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}')d^N\mathbf{x}'$

(C1) 成立。

(C2) 成立。色散关系 $\omega = \frac{i}{2a}(b - \sqrt{b^2+4ak^2})$ 满足方程（16）。

C (C2)和色散关系

定义 $p(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}_i')$ $(i = 1,2)$ 之间的重叠:

$$F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', t) \equiv \frac{\int p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_1')p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_2')d^N\mathbf{x}}{\int p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_1')p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_1')d^N\mathbf{x}}, \tag{64}$$

则 **(C2)** 要求 $\lim_{t\to\infty} F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', t) \to 1$。现在我们尝试用傅里叶基改写式（64），此时应当会出现色散关系。定义

$$\tilde{p}(\mathbf{k},t;\mathbf{x}_i') = \int p(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_i')\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})d^N\mathbf{x}, \quad i = 1,2 \tag{65}$$

注意，$p(\mathbf{x}\ t;\mathbf{x}_i')$（$i = 1,2$）仅相差一个平移，因此它们的傅里叶函数仅相差一个相位。

$$p(\mathbf{k},t;\mathbf{x}_2') = p(\mathbf{k},t;\mathbf{x}_1')\exp(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2')) \tag{66}$$

由于傅里叶变换的幺正性，对$\mathbf{x}$ 的积分可以转换为对$\mathbf{k}$的积分，因此

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', t) &= \frac{\int p^*(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_2') d^N\mathbf{k}}{\int p^*(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') d^N\mathbf{k}} \\ &= \frac{\int p^*(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') \exp(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2')) d^N\mathbf{k}}{\int p^*(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') d^N\mathbf{k}} \\ &= \frac{\int |p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1')|^2 \cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2')) d^N\mathbf{k}}{\int |p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1')|^2 d^N\mathbf{k}} \\ &= \langle \cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2')) \rangle_{|p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1')|^2} \end{aligned} \tag{67}$$

其中，是在（未归一化）分布 $|p(\mathbf{k}\ t;\mathbf{x}_1')|^2$上$\cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2'))$ 的期望值。请注意，

$$p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1') = \exp(-i\omega(k)t) p(\mathbf{k}, 0; \mathbf{x}_1') = \exp(-i\mathrm{Re}\,\omega(k)t)\exp(\mathrm{Im}\,\omega(k)t) p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1'), \tag{68}$$

我们有

$$|p(\mathbf{k}, t; \mathbf{x}_1')|^2 = \exp(2\mathrm{Im}\,\omega(k)t) \tag{69}$$

其中我们使用了 $|p(\mathbf{k}, 0; \mathbf{x}_1')|^2 = 1$。定义

$$k^* \equiv \underset{k}{\mathrm{argmax}}\ \mathrm{Im}\,\omega(k), \tag{70}$$

随着 t 增加， $|p(\mathbf{k}\ t;\mathbf{x}_1')|^2$ 的概率越来越集中在 $k = k^*$附近。因此，

$$\lim_{t\to\infty} F(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', t) = \langle \cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1' - \mathbf{x}_2')) \rangle_{|\mathbf{k}| = k^*}, \tag{71}$$

其中平均是在球体 $|\mathbf{k}| = k^*$ 上进行的。当且仅当 $k^* = 0$ 对于 $\mathbf{x}_1' \neq \mathbf{x}_2'$.$k^* = 0$ 等价于时，极限为 1。

$$\boxed{\mathrm{Im}\,\omega(k) < \mathrm{Im}\,\omega(0), \quad \text{for all } k > 0.} \tag{72}$$

物理上的解释是， $k > 0$ 的波应当比 $k = 0$衰减得更快。

D 示例（长表格）

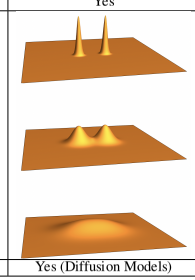
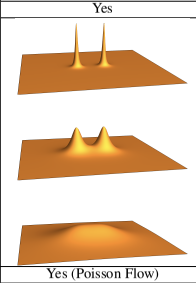
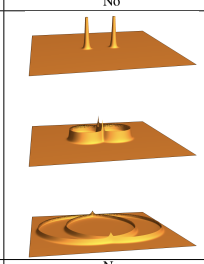
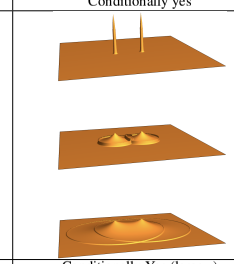
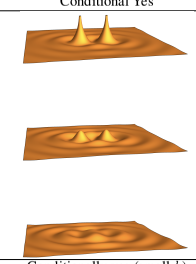
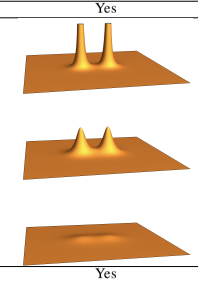
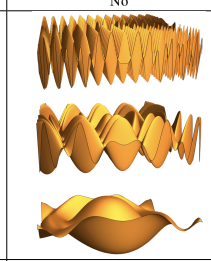
equation	diffusion equation	Poisson equation	ideal wave equation	dissipative wave equation	Helmholtz equation	screened Poisson equation (Yukawa)	Schrödinger equation
PDE $\hat{L}\phi = 0$	$\phi_t - \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} - \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + 2\epsilon\phi_t - \nabla^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi + k_0^2\phi = 0$	$\phi_{tt} + \nabla^2\phi - m^2\phi = 0$	$i\phi_t + \nabla^2\phi = 0$
Rewritten	$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\phi(-\nabla\log\phi)) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(-\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t-2\epsilon\phi)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t-2\epsilon\phi)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t+2\epsilon\phi})) = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) - k_0^2\phi = 0$	$\frac{\partial(-\phi_t)}{\partial t} + \nabla\cdot((-\phi_t)(\frac{\nabla\phi}{\phi_t})) + m^2\phi = 0$	$\frac{\partial\lvert\phi\rvert^2}{\partial t} + \nabla\cdot(\lvert\phi\rvert^2(2\mathrm{Im}\nabla\log\phi)) = 0$
p	ϕ	$-\phi_t$	$-\phi_t$	$-(\phi_t + 2\epsilon\phi)$	$-\phi_t$	$-\phi_t$	$\lvert\phi\rvert^2$
$\mathbf{v}$	$-\nabla\log\phi$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$-\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t+2\epsilon\phi}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$\frac{\nabla\phi}{\phi_t}$	$2\mathrm{Im}\nabla\log\phi$
R	0	0	0	0	$k_0^2\phi$	$-m^2\phi$	0
$G(r,t)$	$\frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{r^2}{4t})$	$\frac{1}{(t^2+r^2)^{\frac{N-1}{2}}}$	$\frac{1}{\sqrt{t^2-r^2}}\Theta(t-r)$ (2D)	$\frac{e^{-\epsilon t}\cosh(\epsilon\sqrt{t^2-r^2})}{\sqrt{t^2-r^2}}\Theta(t-r)$ (2D)	$(\frac{k_0}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}}H^{(1)}_{\frac{N-1}{2}}(k_0\sqrt{t^2+r^2})$	$(\frac{m}{\sqrt{t^2+r^2}})^{\frac{N-1}{2}}K_{\frac{N-1}{2}}(m\sqrt{t^2+r^2})$	$\frac{1}{(4\pi it)^{\frac{N}{2}}}\exp(\frac{ir^2}{4t})$
$\hat{G}(k,t)$	$\exp(-k^2t)$	$\exp(-kt)$	$\exp(\pm ikt)$	$\exp(-\epsilon t + i\sqrt{k^2-\epsilon^2}t)$ $(k>\epsilon)$ $\exp(-(\epsilon+\sqrt{k^2-\epsilon^2})t)$ $(k\le\epsilon)$ $\hat{G}(k,t)$	$\exp(-i\sqrt{k_0^2-k^2}t)$ $(k\le k_0)$ $\exp(-\sqrt{k^2-k_0^2}t)$ $(k>k_0)$	$\exp(-\sqrt{k^2+m^2}t)$	$\exp(ik^2t)$
(C1)	Yes	Yes	No	Conditionally yes	Conditional yes	Yes	No
(C2)	Yes	Yes	No	Conditionally yes	Conditional Yes	Yes	No
Illustration ϕ							
s-generative?	Yes (Diffusion Models)	Yes (Poisson Flow)	No	Conditionally Yes (large ϵ)	Conditionally yes (small k)	Yes	No

表5：物理偏微分方程与生成模型之间的联系。 $r \equiv |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$，其中 $\mathbf{x}'$ 和 $\mathbf{x}$分别为源点和场点。