arXiv:2304.04049v1 [cs.LG] 8 Apr 2023

基于后向随机微分方程的深度生成建模

Xingcheng Xu*†

2023年4月11日

摘要

本文提出了一种新颖的深度生成模型，称为***BSDE-Gen***，该模型结合了后向随机微分方程（反向随机微分方程）的灵活性与深度神经网络的强大能力，用于生成高维复杂目标数据，尤其是在图像生成领域。将随机性和不确定性融入生成建模过程，使 BSDE-Gen 成为生成高维数据的一种有效且自然的方法。本文为 BSDE-Gen 提供了理论框架，描述了其模型架构，介绍了用于训练的最大均值差异（MMD）损失函数，并报告了实验结果。

关键词：后向随机微分方程、前向后向随机微分方程、BSDE-Gen、基于后向随机微分方程的生成模型、高维学习、图像生成

1 引言

生成模型是旨在学习数据集的概率分布，从而生成与原始数据相似的新数据的统计模型。近年来，深度生成式扩散模型凭借生成高质量数据的能力而日益流行，这些数据与真实数据十分相似。扩散模型的著名示例包括 GLIDE、DALL-E 2、Imagen 和 Stable Diffusion 等。

*上海人工智能实验室。电子邮箱：xingcheng.xu18@gmail.com

†我们将在研究完成后于 GitHub上公开我们的代码，网址为https://github.com/xingchengxu/BSDE-Gen 如果您感兴趣，但暂时无法访问，请发送电子邮件申请访问权限。

本文提出了一种开发深度生成模型的新方法，将反向随机微分方程的灵活性与深度神经网络的强大能力相结合。我们的模型称为 BSDE-Gen，它利用反向随机微分方程描述随机过程从给定终端条件出发随时间反向演化的优势，以及深度神经网络对复杂高维数据进行建模的能力。

BSDE-Gen模型从一个服从高维标准正态分布的随机初始输入开始，逐步演化至代表目标数据分布的最终值。使用损失函数完成训练后，优化后的参数可通过前向方案生成新样本。在训练过程中，模型通过最小化基于反向随机微分方程动力学推导出的最大均值差异损失函数，学习给定数据集的概率分布。因此，模型能够生成与原始数据集高度相似的新数据。

我们的方法基于严谨的数学原理和理论。这项工作的成果可能对多个依赖生成模型来模拟或生成新数据的领域产生重要影响，例如计算机视觉、生物学和药物发现。将反向随机微分方程融入深度生成模型，可为利用不确定动力学和不完备信息对复杂系统建模提供一种新工具。

本文结构安排如下：第2 节回顾扩散模型和反向随机微分方程的相关文献。第3节介绍一种基于反向随机微分方程的深度生成模型，并说明所采用的模型架构和损失函数。第 4 节展示在 MNIST 和 FashionMNIST 数据集上进行的实验结果，以证明基于反向随机微分方程的生成模型的有效性。第5节讨论模型的局限性以及未来研究的潜在方向。最后，第6 节总结全文。

2 相关工作

本节回顾与我们工作相关的深度生成模型和反向随机微分方程领域的文献。回顾内容涵盖利用深度神经网络进行生成建模的扩散模型，以及反向随机微分方程、深度 BSDE 方法、它们的应用和相关主题。

2.1 扩散模型

基于扩散的生成模型使用（离散/连续）随机微分方程来生成复杂数据，并因能够生成高质量且多样化的图像而在图像生成领域广受欢迎。

这些模型中有两个主要的扩散过程。前向扩散过程通过多个步骤逐渐向高质量图像添加高斯噪声，生成一系列带噪图像。而反向扩散过程则从噪声向量中去除噪声，以生成高质量图像。多年来，人们提出了多种基于扩散的生成模型，包括扩散概率模型（Sohl-Dickstein 等，2015年） [38], 噪声条件评分网络（NCSN；Song 和 Ermon，2019） [39], 以及去噪扩散概率模-

模型（去噪扩散概率模型；Ho 等人，2020年） [19]。在训练过程中，模型学习移除噪声的变换，同时保留图像的底层结构。

在数据集上训练生成模型时，通常会生成以类别标签或描述性文本为条件的样本。最近，Dhariwal 和 Nichol（2021年） [8] 证明，在这方面扩散模型优于生成对抗网络。该领域其他值得关注的工作包括引导扩散模型（GLIDE；Nichol 等，2022年） [28], ，以及 DALL-E 2（Ramesh 等，2022年） [34], 、Imagen（Saharia 等，2022年） [36], 和潜在扩散模型/Stable Diffusion（Rombach 等，2022年） [35], 等。

关于生成式扩散模型方法及应用的全面综述，请参阅相关综述论文，例如 [3, 7, 44]。

我们的工作通过利用扩散过程提出了一种新颖的生成建模方法，这与传统的扩散模型有所不同。我们不依赖去噪，而是采用深度神经网络（DNN）求解反向随机微分方程。虽然我们的框架目前尚未纳入引导模型，但我们认为，未来的研究可以探索整合引导模型，以进一步提升生成数据的性能和质量。

2.2 反向随机微分方程与深度反向随机微分方程方法

线性后向随机微分方程最初由 Bismut 于 1973 [2] 提出，作为随机最优控制问题的伴随方程。1990年，Pardoux 和 Peng [29] 证明了满足 Lipschitz条件的非线性后向随机微分方程的存在性与唯一性，推动了后续研究，以及其在随机最优控制和数理金融等领域的应用。当后向随机微分方程与前向随机微分方程（随机微分方程）耦合时，便构成前向后向随机微分方程（FBSDE），参见例如 [20, 27], 。研究人员也对其进行了广泛研究，并将其应用于各种场景。

反向随机微分方程在数理金融中有众多应用，包括资产定价、投资组合优化和风险管理。具体而言，它们广泛用于对衍生品进行建模和定价；衍生品是其价值取决于标的资产价值的金融工具。反向随机微分方程的使用使得构建描述标的资产及其相关衍生品的动态模型成为可能，从而推导出与资产行为一致的价格，参见例如 [4, 11]。该技术已应用于各种资产类别，例如股票、债券、货币和大宗商品，因此成为金融行业中一种有价值的工具。

深度反向随机微分方程方法是一种创新方法，将经典反向随机微分方程理论与深度神经网络相结合，以近似方程中的未知函数。该方法在求解具有高维状态空间的正向-反向随机微分方程和偏微分方程（偏微分方程）方面展现出了良好的效果，参见例如 [10, 16, 17, 18, 21, 24], 这些问题此前被认为在计算上难以处理。该方法已应用于随机最优控制和金融领域的各种问题，例如投资-消费问题、期权定价和投资组合优化；与传统方法相比，它在准确性和计算效率方面都有显著提升。相关文献的一些例子包括 [6, 22, 41, 45, 46]。深度反向随机微分方程方法代表了正向-反向随机微分方程和偏微分方程研究中的一个新方向，并且它已经

势函数 t 可应用于物理学、工程学和机器学习等多种领域 g.

我们的工作以深度 BSDE 方法为基础，重点关注生成建模，尤其是图像生成。虽然此前深度 BSDE 方法已用于求解高维正向-反向随机微分方程或偏微分方程，但我们的方法有所不同：我们将其用于生成建模。与 Han、Jentzen 和 E（2018年）的工作相比，[16], 我们的框架使用单个神经网络来表示控制过程Z，并在不同时间步之间共享参数。此外，我们采用最大均值差异（MMD）损失，而非他们工作中使用的均方误差（MSE）损失。我们模型的另一项区别在于，前向过程以随机输入而非确定性点作为初始条件。这要求我们使用深度神经网络生成初始值Y_0, ，而不是依赖固定的模型参数。这些差异体现了我们的框架在图像生成和深度 BSDE 方法方面的独特思路。

3 方法论

反向随机微分方程是包含终端条件并随时间反向演化的随机微分方程。它描述随机过程随时间反向演化的过程，与描述过程随时间正向演化的正向随机微分方程相反。反向随机微分方程适用于对具有不确定动力学和不完备信息的复杂系统进行建模和分析。

本节将介绍一种基于反向随机微分方程的深度生成模型、模型架构，以及我们使用的最大均值差异损失函数。

3.1 基于后向随机微分方程的生成模型

令 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 为一个完备的概率空间，W_t: $[0,T]\times\Omega\to\mathbb{R}^{d_W}$ 是给定常数 $T>0$ 下的标准 d_W 维布朗运动。对于任意 $t\in[0,T]$，将 $\mathcal{F}_t=\sigma\{W_s,\ 0\le s\le t\}$ 记为由标准布朗运动生成的自然滤过。考虑前向后向随机微分方程（FBSDE）

$$\begin{aligned} X_t &= \zeta + \int_0^t b(s,X_s)ds + \int_0^t \sigma(s,X_s)dW_s, \\ Y_t &= \xi + \int_t^T f(s,X_s,Y_s,Z_s)ds - \int_t^T Z_s dW_s, \end{aligned} \tag{3.1}$$

其中，$t\in[0,T], X_t\in\mathbb{R}^{d_X}$是前向过程，$Y_t\in\mathbb{R}^{d_Y}$是反向过程，$Z_t\in\mathbb{R}^{d_Y\times d_W}$是控制过程。漂移函数 $b(t,x)$ 和扩散函数 $\sigma(t,x)$ 定义了前向过程 X_t的动力学，而生成元函数 $f(t,x,y,z)$ 则描述了前向过程与反向过程 Y_t之间的关系。上述正倒向随机微分方程中的映射如下：

$$b:[0,T]\times\mathbb{R}^{d_X}\to\mathbb{R}^{d_X},$$

$$\sigma:[0,T]\times\mathbb{R}^{d_X}\to\mathbb{R}^{d_X\times d_W},$$

$$f : [0,T] \times \mathbb{R}^{d_X} \times \mathbb{R}^{d_Y} \times \mathbb{R}^{d_Y \times d_W} \to \mathbb{R}^{d_Y}.$$

$X_0 = \zeta$ 是给定的初始条件，$Y_T = \xi$ 是终端条件。Y_T 可以是 X_T 的函数，即 $Y_T = \varphi(X_T)$。这种情形称为马尔可夫型正倒向随机微分方程。对于非马尔可夫型正倒向随机微分方程，终端条件为 $Y_T = \varphi(X_{0\le t\le T})$，也就是说，终端条件是 X_t 整条路径的泛函。我们假设前向过程的初始输入 ζ 服从正态分布，例如 $\mathcal{N}(0, I_{d_X})$，而反向过程的终端值 ξ 服从目标数据分布。

求解一个前向后向随机微分方程涉及寻找 $\mathcal{F}_t$-适应随机过程 (X_t, Y_t, Z_t) 对所有 $t \in [0,T]$ 而言，在给定函数 b σ、f、布朗运动 W_t、初始条件 ζ 和终端条件 ξ 的情况下，在满足上述方程的适当空间中。关于非线性后向随机微分方程解的存在性和唯一性的首批结果由 Pardoux 和 Peng（1990年）给出 [29]。此后，许多研究人员研究了耦合或完全耦合的正向-反向随机微分方程的存在性、唯一性及其应用，参见例如 [20, 27]。

在适当条件下，FBSDEs 可通过 Feynman-Kac 公式与半线性抛物型偏微分方程相联系（例如参见 [30, 31]）。过程 Y_t 和 Z_t 取决于时间变量 t 和前向过程 X_t，而非 X 的完整路径。具体而言，$Y_t = u(t, X_t)$ 和 $Z_t = \nabla u(t, X_t)^T \sigma(t, X_t)$，其中 $u(t,x)$ 满足相应的偏微分方程。这一性质有利于设计用于求解 FBSDE 模型的深度神经网络。

例如，前向过程 X_t 可以取为一个从标准正态分布出发的 d_W 维布朗运动，即

$$X_t = \zeta + W_t, \tag{3.2}$$

或者取为一个从平稳分布出发的 d_W 维 Ornstein-Uhlenbeck（OU）过程，即

$$X_t = \zeta - \int_0^t \Lambda X_s ds + \Sigma W_t.$$

在适当条件下，OU 过程有唯一解：

$$X_t = e^{-\Lambda t}\zeta + \int_0^t e^{-\Lambda(t-s)}\Sigma dW_s. \tag{3.3}$$

假设 Λ 是一个正定矩阵。那么，X 有唯一的平稳分布，该分布是均值为 0、协方差为 $\int_0^\infty e^{-\Lambda s}\Sigma\Sigma^T e^{-\Lambda^T s} ds$ 的高斯分布。初始值 ζ 可以从前向过程 X_t 的平稳分布中随机选取。

反向过程 Y_t 可以建模为例如

$$Y_t = \xi + \int_t^T (AX_s + BY_s + \kappa|Z_s|)ds - \int_t^T Z_s dW_s, \tag{3.4}$$

其中生成元函数关于 X_t、Y_t 呈线性，关于 Z_t 呈非线性，给定矩阵 A, B 以及 κ，以及 $|z| := (\sum_{j=1}^{d_W} |z_{ij}|)_{i=1,2,\cdots,d_Y}$。

通常，给定时间区间 $[0,T]$ 的划分： $0=t_0<t_1<\cdots<t_N=T$，对正向过程和反向过程均使用朴素的 欧拉前向离散格式，我们有

$$\begin{aligned} X_{t_{n+1}} &\approx X_{t_n}+b(t_n,X_{t_n})\Delta t_n+\sigma(t_n,X_{t_n})\Delta W_{t_n} \\ Y_{t_{n+1}} &\approx Y_{t_n}-f(t_n,X_{t_n},Y_{t_n},Z_{t_n})\Delta t_n+Z_{t_n}\Delta W_{t_n} \end{aligned} \tag{3.5}$$

其中 $\Delta t_n=t_{n+1}-t_n$，且 $\Delta W_{t_n}=W_{t_{n+1}}-W_{t_n}$。

3.2 模型架构

给定前向过程的漂移函数 b(t, x) 和扩散函数 σ(t, x)，以及生成元函数 f (t, x, y, z)，根据欧拉前向离散格式 (3.5)，我们需要学习的前向后向随机微分方程（FBSDE）相关内容是反向过程 Y_0 的初始值和控制过程 Z_t。由于在适当的数学条件下，Y_t 和 Z_t 是时间变量 t 与前向过程 X_t的函数，因此我们可以使用两个深度神经网络 $\mathcal{N}^{\theta_{Y_0}}(X_0)$ 和 $\mathcal{N}^{\theta_Z}(t_n, X_{t_n})$，分别近似初始值 Y_0 和控制过程 Z_t。也就是说，

$$Y_0\approx\mathcal{N}^{\theta_{Y_0}}(X_0),\ \ Z_{t_n}\approx\mathcal{N}^{\theta_Z}(t_n,X_{t_n}), \tag{3.6}$$

其中 t 本文实验中使用的深度神经网络如下 :

$$\mathcal{N}^{\theta}(x):=\phi\circ\mathcal{L}_H\circ\tilde{\sigma}_{H-1}\circ\mathcal{L}_{H-1}\circ\cdots\circ\tilde{\sigma}_1\circ\mathcal{L}_1(x),$$

其中 H 表示神经网络的深度， $\mathcal{L}_h(x_h)=w_hx_h+\tilde{}b_h$ 表示线性变换，$\tilde{\sigma}_h$ 表示非线性激活函数，例如 ReLU、Tanh、Sigmoid、GELU 等，而 ϕ 表示到状态空间的映射函数。作为一种额外的正则化技术，我们在神经网络中使用丢弃法。

BSDE-Gen 模型的整体架构如图 3.1 所示，其设计依据是欧拉前向离散格式 (3.5)。BSDE-Gen 模型首先初始化随机输入 X_0 和 N 个离散时间步上的一组布朗运动 W_t。通过对 X_t采用离散格式，得到前向过程 X_t。初始值 Y_0由深度神经网络 $\mathcal{N}^{\theta_{Y_0}}(X_0)$ 得到，该网络以 X_0作为输入；控制过程 Z_t则由另一个深度神经网络 $\mathcal{N}^{\theta_Z}$(t, X_t) 得到，它是时间变量 t 和前向过程 X_t的函数。结合这些要素，我们可以通过对 Y_t 采用欧拉前向离散格式 (3.5)，经过 N 个扩散步骤得到 Y_t。最后，在最终时刻 T 得到生成图像 Y_T。参数 $\theta=\{\theta_{Y_0},\theta_Z\}$ 可以通过优化下一小节给出的损失函数进行训练。

3.3 最大均值差异损失

一种可能的候选损失函数是最大均值差异（MMD）。假设存在一个特征映射 $\psi\colon\mathcal{X}\to\mathcal{H}$，将原空间 $\mathcal{X}$ 映射到希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，且其关联的核函数是一个函数 $K\colon\mathcal{X}\times\mathcal{X}\to\mathbb{R}$，满足 $\langle\psi(x)\ \psi(y)\rangle_{\mathcal{H}}=K(x,y)$，对于所有属于 $\mathcal{X}$ 的 x 和 y 均成立。最大均值差异通过特征的均值嵌入之间的距离来计算概率分布之间的距离。

通过再生核希尔伯特空间 (再生核希尔伯特空间) $\mathcal{H}$。设 $\mathbb{P}$ 和 $\mathbb{Q}$ 是空间 $\mathcal{X}$上随机元素的两个概率分布，最大均值差异定义为

$$\mathrm{MMD}^2(\mathbb{P},\mathbb{Q}) = \|\mu_{\mathbb{P}} - \mu_{\mathbb{Q}}\|^2_{\mathcal{H}},$$

其中 $\mu_{\mathbb{P}} = \mathbb{E}_{X\sim\mathbb{P}}[\psi(X)]$和 $\mu_{\mathbb{Q}} = \mathbb{E}_{Y\sim\mathbb{Q}}[\psi(Y)]$分别是概率 $\mathbb{P}$和 $\mathbb{Q}$在再生核希尔伯特空间中的均值嵌入 $\mathcal{H}$。它是一种基于核的统计检验，用于判断给定的两个概率分布是否相同。在适当条件下，当且仅当 $^2(\mathbb{P},\mathbb{Q}) = 0$ 时，最大均值差异$\mathbb{P} = \mathbb{Q}$。有关最大均值差异的更多详情，请参阅 Gretton 等人（2012年） [15]；有关最大均值差异优化，请参阅 Dziugaite 等人（2015年） [9]。

两个样本的最大均值差异经验估计 $X = \{X1,\cdots,X_m\}$ 和 $Y = \{Y1,\cdots,Y_n\}$如下所示：

$$\widehat{\mathrm{MMD}}^2(X,Y) = \frac{1}{m(m-1)}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i}^{m} K(X_i,X_j) + \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j\neq i}^{n} K(Y_i,Y_j) - \frac{2}{mn}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} K(X_i,Y_j). \tag{3.7}$$

核函数 $K(x,y)$ 可以取径向基函数（RBF）核、多尺度核等。我们的 BSDE-Gen 模型的最大均值差异损失函数为

$$L(\theta) = \widehat{\mathrm{MMD}}^2(Y_T,\xi), \tag{3.8}$$

其中Y_T 是通过欧拉前向离散格式计算得到的最终值（3.5）。在训练过程中，损失通过批量大小 n_{batch} 个生成图像Y_T 和目标图像 ξ计算。

前向后向随机微分方程动力学始于一个 d_X维初始输入 ζ，该输入服从高维标准正态分布，并演化为最终值 ξ，代表目标 ˆ 数据分布。获得优化后的参数 θ 后，可以使用欧拉前向离散格式生成新样本（3.5）。

3.4 训练策略

BSDE-Gen模型有两种训练策略：仅解码器风格（如图 3.2（a）所示）和编码器-解码器风格（如图 3.2（b）所示）。仅解码器风格是训练生成模型，将噪声向量转换为逼真图像，这与传统的生成对抗网络（GAN；Goodfellow 等人，2014年）类似 [14]。相比之下，编码器-解码器风格则是向图像中添加噪声，这与扩散模型类似（例如[19, 38, 39]）。然而，在本文中，这样做的目的并非模拟逆向过程，而是增强 BSDE-Gen 模型输入与目标图像之间的映射。我们可以通过向图像添加噪声来实现这一点，例如 $\xi^{noisy} = \alpha\xi + (1-\alpha)\varepsilon$，其中 ξ是真实图像，$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0,I)$ 且 $0 < \alpha < 1$。也可以使用编码器作为替代方案。在这种情况下，损失可以组合为损失 $=$最大均值差异 $+\beta\times$均方误差。

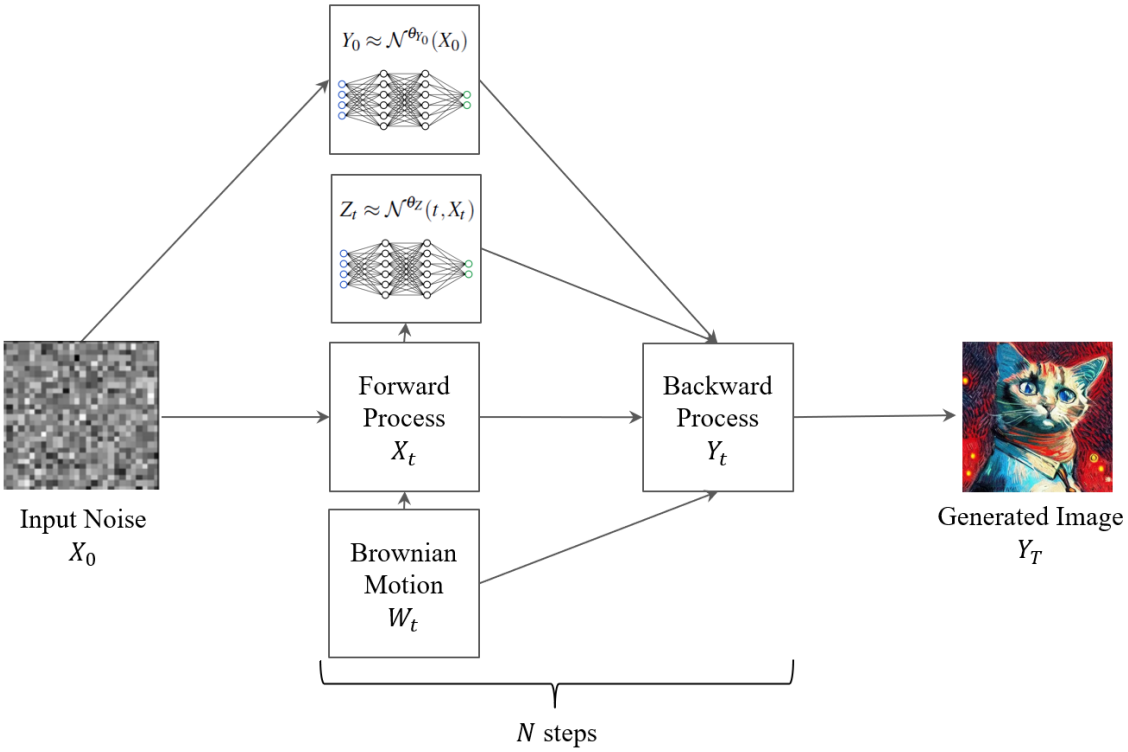

图 3.1：BSDE-Gen 的模型架构

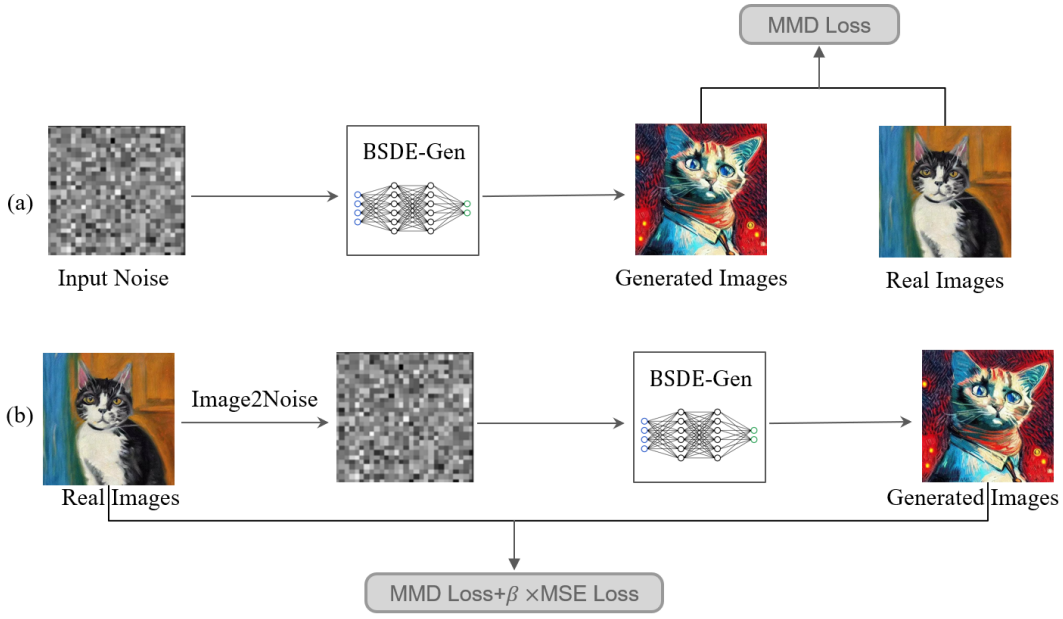

图3.2：BSDE-Gen 的训练策略

4 实验

本节展示实验结果，以证明我们基于随机微分方程的生成模型的有效性。这些模型在两个经典图像数据集上训练，分别是 MNIST 和 FashionMNIST，每个数据集均包含 60,000 张灰度图像，大小为 28×28像素。MNIST 数据集包含手写数字图像，而 FashionMNIST 数据集包含各类时尚商品图像。

在我们的实验中，正向状态过程 X_t 被建模为平稳的 Ornstein-Uhlenbeck（OU）过程，其初始状态取自 $d_X = 32$ 维标准正态分布 $\zeta \sim \mathcal{N}(0, I_{d_X})$，漂移函数 $b(t, x) = -x$，扩散函数 $\sigma(t, x) = \sqrt{2}I_{d_X}$。反向过程 Y_t 的生成元函数 f 定义为 $f(t,x,y,z) = Ax + By + \kappa|z|$，其中 $|z| := (\sum_{j=1}^{d_W} |z_i j|)_{i=1,2,\cdots,d_Y}$，且 A、B κ为给定值。也就是说，

$$
\begin{aligned}
X_t &= \zeta - \int_0^t X_s ds + \sqrt{2} W_t. \\
Y_t &= \xi + \int_t^T (AX_s + BY_s + \kappa|Z_s|) ds - \int_t^T Z_s dW_s.
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

文献中已经研究了类似的反向随机微分方程，例如 [4, 5]中所介绍的那些反向随机微分方程。在我们的实验中，我们将时间步长设为 $N = 200$，并将时间范围设为 $T = 1$。

对于深度神经网络 $\mathcal{N}^{\theta_{Y_0}}(X_0)$和 $\mathcal{N}^{\theta_Z}(t_n, X_{t_n})$，我们采用具有三个隐藏层的架构，使用 GELU 激活函数，并以概率 $p = 0.2$ 进行丢弃法正则化。最后的映射函数 ϕ 是线性的。

我们使用RMSprop优化器训练了基于 BSDE 的深度生成模型，学习率为1e-4，批量大小为 512，并在 PyTorch 框架下使用 8 个 NVIDIAA100GPU进行了20,000个训练周期，使- 用仅解码器风格和编码器-解码器风格。我们使用多尺度核函数作为最大均值差异损失函数。我们还尝试了几种不同的超参数，例如前向过程、生成元函数f、激活函数、丢弃率、批量大小、学习率和优化器。然而，模型的最终性能仍然保持一致。这也为我们采用基于 BSDE 的模型提供了灵活性。

本研究使用 BSDE-Gen模型开展的实验展现了其在生成建模方面的潜力。生成图像展示于图 4.1 和 4.2中，并且这些图中的模型均采用仅解码器风格进行训练。图 4.3 展示了训练损失：上方两个面板使用批量大小为 512 的设置进行训练，下方两个面板则使用 3,750 的大批量大小进行训练。左侧面板对应 FashionMNIST，右侧面板对应 MNIST。这些图仅展示了前 1,000 次迭代。由图可见，BSDE-Gen模型生成了与训练数据集相似的图像，但生成图像的视觉质量仍有提升空间。未来的研究可以探索对模型进行潜在的改进，包括设计编码器，以及采用更优的模型架构（例如 U-Net）来增强视觉质量；我们目前正在研究这一方向。下一节将更详细地讨论这些未来研究方向。



图 4.1：BSDE-Gen 模型在 FashionM-NIST 数据集上使用 RMSprop优化器训练得到的生成图像（仅解码器风格），批量大小为 512，学习率为 0.0001。

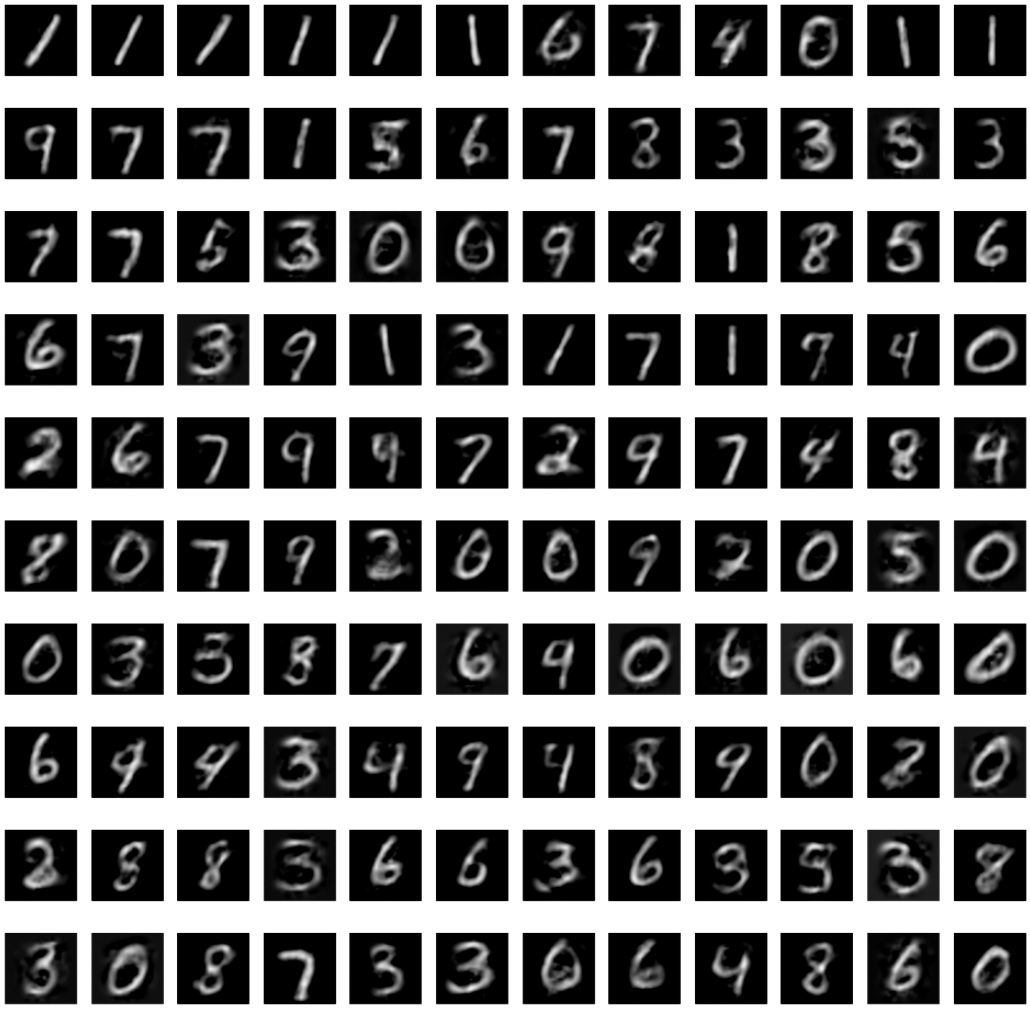

图 4.2：BSDE-Gen 模型使用 RMSprop优化器在 MNIST 上训练（仅解码器风格）后生成的图像，批量大小为 512，学习率为 0.0001。

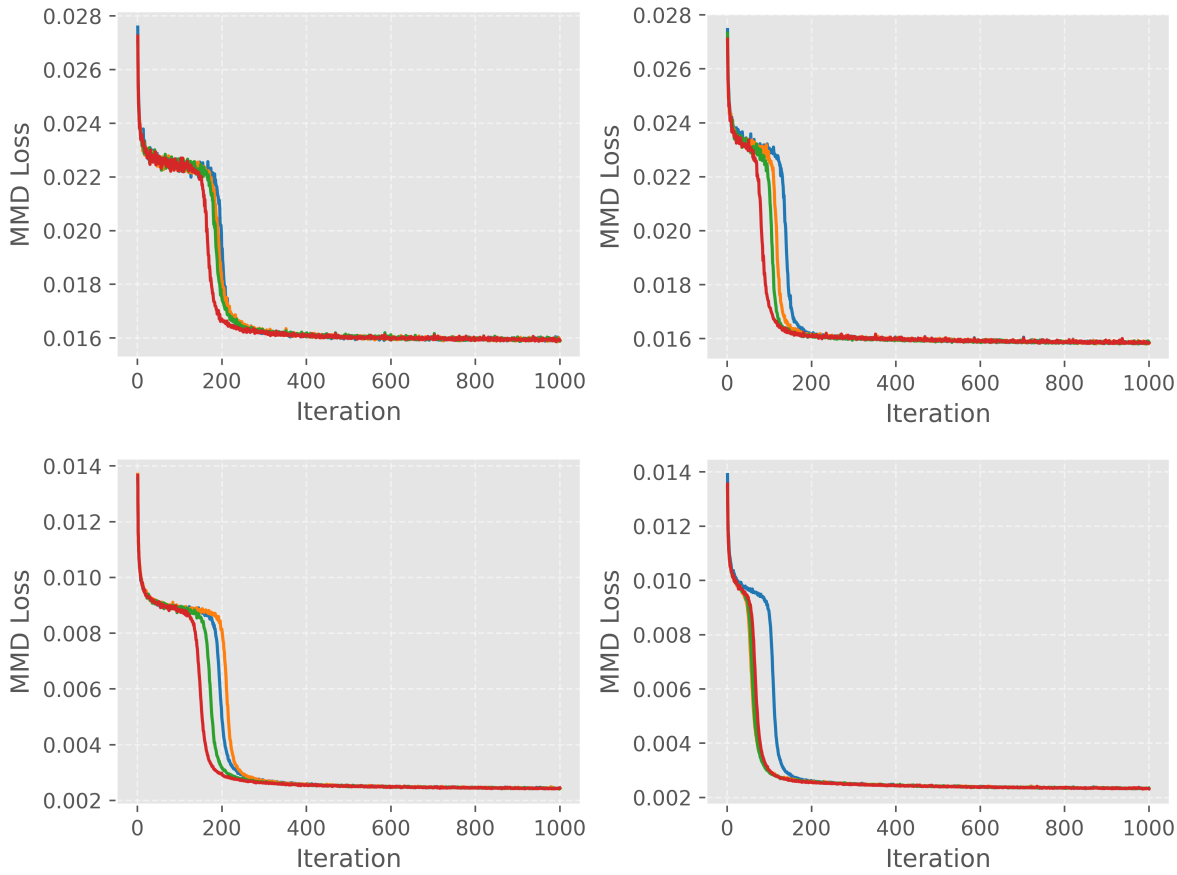

图 4.3：训练损失：我们为每个面板运行了四次训练（以四种不同的颜色表示），且未固定随机种子。使用学习率为 0.0001 的 RMSprop优化器。上面的两个面板采用批量大小为 512 的（仅解码器风格）进行训练，下面的两个面板则采用 3,750 的大批量大小进行训练。左侧面板对应 FashionMNIST，右侧面板对应 MNIST。这些图中仅展示了最初的 1,000 次迭代。

5 讨论

本节将讨论 BSDE-Gen模型的局限性以及未来研究的潜在方向。尽管该模型为生成高维复杂数据提供了一种颇具前景的方法，但仍存在一些需要解决的局限性。首先，在处理大型数据集时，模型的计算复杂度可能成为瓶颈，因此，优化模型以提高效率是未来的一个重要方向。另一个局限性是，BSDE-Gen模型需要选择一些超参数，例如前向过程以及反向过程的生成元函数f。

未来对 BSDE-Gen模型的研究可以着重开发更高效的算法，以降低计算复杂度，并探索不同的编码器架构，从而改善 BSDE-Gen模型输入与目标图像之间的映射。此外，研究 BSDE-Gen 模型在不同领域中的潜在应用，并将其性能与其他生成模型进行比较，可以进一步加深我们对该模型能力与局限性的理解。除了当前的模型架构之外，探索替代架构（例如融入 U-Net 架构）可能会进一步提升生成数据的质量。此外，在 BSDE-Gen模型领域，引入引导模型也是一个令人振奋的未来研究方向，可以通过向生成模型提供额外信息或约束来改善生成数据的性能。

5.1 扩散过程选择

BSDE-Gen 模型是一个复杂模型，需要选择各种超参数才能实现最佳性能。最关键的决策之一是选择前向过程，以及反向过程的生成元函数f 。前向过程规定了状态的动态变化，而反向过程的生成元函数则规定了如何从目标数据分布中生成样本。

选择合适的超参数对于确保模型性能并生成高质量数据至关重要。因此，需要进行全面分析和大量实验，才能确定 BSDE-Gen 模型在特定应用中的最佳设置。

5.2 U-Net 架构

在多种生成模型中，引入 U-Net 架构已展现出提升生成数据质量的潜力，因为它能够捕捉图像中的局部和全局特征。因此，探索在 BSDE-Gen 模型中实现这一架构，或许能够进一步提升生成数据的质量。未来的研究可着重评估采用 U-Net 架构的 BSDE-Gen 模型在更大规模数据集上的表现，并优化其实现方式，以进一步提升性能。

5.3 条件 BSDE-Gen 模型

将引导模型融入 BSDE-Gen模型，是该领域一条令人振奋的未来研究方向，因为在经典扩散模型中，这种方法已展现出提升生成数据性能与质量的良好前景。将引导模型融入我们框架的一种可行方法，是采用条件概率方法，将引导信息纳入生成过程。例如，在图像生成中，引导信息可以是分割图、草图或描述性文本，用于对图像生成过程进行条件约束。这需要训练生成模型，使其根据给定的引导信息，从数据的条件分布中生成样本，而不是从无条件分布中生成样本。

6 结论

总之，本文介绍了一种名为 BSDE-Gen 的新型深度生成模型。该模型结合了深度神经网络的强大能力与反向随机微分方程的灵活性，用于生成复杂的高维目标数据，并重点关注图像生成。将随机性和不确定性融入生成建模过程，使模型能够生成与原始数据集高度相似的数据。本文为 BSDE-Gen 奠定了理论基础，介绍了其模型架构，并报告了实验结果。BSDE-Gen 在计算机视觉、生物学和药物发现等多个领域具有重要的潜在应用价值，因为它为在不确定动力学和不完备信息条件下对高维复杂系统建模提供了一种新工具。本文为生成建模、深度 BSDE 方法和高维学习领域作出了贡献，并有望激发这些领域的进一步研究。

致谢。我们感谢 Zhenyao Sun 就这一主题进行了许多讨论。此外，我们感谢 ChatGPT 在本文研究过程中协助润色写作、编写代码和调试。我们也感谢 Google Colab 提供了有助于开展研究的工具和资源。

参考文献

[1] Archibald, Richard 等.《用于深度学习不确定性量化的反向随机微分方程方法》。Discrete & Continuous Dynamical Systems-Series S 15.10（2022年）。[2] Bismut, Jean-Michel.《最优随机控制中的共轭凸函数》。Journal of Mathematical Analysis and Applications 44.2（1973年）：384-404。[3]Cao, Hanqun 等.《生成式扩散模型综述》。arXiv 预印本 arXiv:2209.02646（2022年）。

[4] Chen, Zengjing 和 Larry Epstein.《连续时间下的模糊性、风险与资产收益》。Econometrica 70.4（2002）：1403-1443。[5] Chen, Zengjing、Shuhui Liu、Zhongmin Qian 和 Xingcheng Xu.《一类非线性后向随机微分方程及其节点集的显式解》。Probability, Uncertainty and Quantitative Risk 7.4（2022年）：283-300。[6] Chen, Yangang 和 Justin WL Wan.《基于后向随机微分方程的深度神经网络框架：高维美式期权的定价与对冲》。Quantitative Finance 21.1（2021年）：45-67。[7] Croitoru, Florinel-Alin 等.《视觉中的扩散模型：综述》。arXiv 预印本 arXiv:2209.04747（2022年）。[8] Dhariwal, Prafulla 和 Alexander Nichol.《扩散模型在图像合成方面胜过生成对抗网络》。Advances in Neural Information Processing Systems 34（2021年）：8780-8794。[9] Dziugaite, Gintare Karolina、Daniel M. Roy 和 Zoubin Ghahramani.《通过最大均值差异优化训练生成式神经网络》。第三十一届不确定性人工智能会议论文集。2015年。[10] E, Weinan、Jiequn Han 和 Arnulf Jentzen.《基于深度学习的高维抛物型偏微分方程和后向随机微分方程数值方法》。Communications in Mathematics and Statistics 4.5（2017）：349-380。[11] El Karoui, Nicole、Shige Peng 和 Marie Claire Quenez.《金融中的后向随机微分方程》。Mathematical Finance 7.1（1997）：1-71。[12] Gao, Chengfan 等.《反向深度反向随机微分方程方法的收敛性及其在最优停止问题中的应用》。arXiv 预印本 arXiv:2210.04118（2022年）。[13] Ghimire, Sandesh 等.《基于得分的生成模型的几何性质》。arXiv 预印本 arXiv:2302.04411（2023年）。[14] Goodfellow, Ian 等.《生成对抗网络》。arXiv:1406.2661（2014年）；Communications of the ACM 63.11（2020年）：139-144。[15] Gretton, Arthur 等.《核函数双样本检验》。The Journal of Machine Learning Research 13.1（2012年）：723-773。[16] Han, Jiequn、Arnulf Jentzen 和 Weinan E.《利用深度学习求解高维偏微分方程》。Proceedings of the National Academy of Sciences 115.34（2018年）：8505-8510。[17] Han, Jiequn 和 Jihao Long.《耦合正倒向随机微分方程的深度反向随机微分方程方法的收敛性》。Probability, Uncertainty and Quantitative Risk 5（2020年）：1-33。

[18] Han, Jiequn、Ruimeng Hu 和 Jihao Long。《学习具有一般分布依赖性的高维 McKean-Vlasov 前向后向随机微分方程》。arXiv 预印本 arXiv:2204.11924（2022年）。[19] Ho, Jonathan、Ajay Jain 和 Pieter Abbeel。《去噪扩散概率模型》。神经信息处理系统进展 33（2020年）：6840-6851。[20] Hu, Ying 和 Shige Peng。《前向后向随机微分方程的解》。概率论及相关领域 103（1995年）：273-283。[21] Ji, Shaolin、Shige Peng、Ying Peng 和 Xichuan Zhang。《通过深度学习求解高维完全耦合正倒向随机微分方程的三种算法》。IEEE 智能系统 35.3（2020年）：71-84。[22] Ji, Shaolin、Shige Peng、Ying Peng 和 Xichuan Zhang。《一种求解由完全耦合正倒向随机微分方程驱动的随机最优控制问题的深度学习方法》。arXiv 预印本 arXiv:2204.05796（2022年）。[23] Jia, Junteng 和 Austin R. Benson。《神经跳跃随机微分方程》。神经信息处理系统进展 32（2019年）。[24] Jiang, Yifan 和 Jinfeng Li。《非 Lipschitz 系数下前向后向随机微分方程的深度反向随机微分方程方法的收敛性》。概率、不确定性与定量风险 6.4 （ 2021 年）：391-408。[25] Kapllani, Lorenc 和 Long Teng。《求解高维非线性后向随机微分方程的深度学习算法》。arXiv 预印本 arXiv:2010.01319（2020年）。[26] Kwon, Dohyun、Ying Fan 和 Kangwook Lee。《基于分数的生成建模暗中最小化 Wasserstein 距离》。arXiv 预印本 arXiv:2212.06359（2022年）。[27] Ma, Jin、Philip Protter 和 Jiongmin Yong。《显式求解前向后向随机微分方程——一种四步方案》。概率论及相关领域 98.3（1994年）：339-359。[28] Nichol, Alex 等。《GLIDE：通过文本引导扩散模型实现逼真图像生成与编辑》。arXiv 预印本 arXiv:2112.10741（2021年）。[29] Pardoux, Etienne 和 Shige Peng。《后向随机微分方程的适应解》。系统与控制快报 14.1（1990年）：55-61。[30] Pardoux, Etienne 和 Shige Peng。《后向随机微分方程与拟线性抛物型偏微分方程》。载于《随机偏微分方程及其应用：IFIP WG 7/1 国际会议论文集》，北卡罗来纳大学夏洛特分校，北卡罗来纳州，1991年6月6日至8日。柏林、海德堡：Springer Berlin Heidelberg，2005年。

[31] Pardoux, Etienne 和 Shanjian Tang。“前向后向随机微分方程与拟线性抛物型偏微分方程。”《概率论及相关领域》114（1999）：123-150。[32]Poole, Ben 等。“Dreamfusion：使用二维扩散进行文本到三维生成。”arXiv 预印本 arXiv:2209.14988（2022）。[33] Raissi, Maziar。“前向后向随机神经网络：高维偏微分方程的深度学习。”arXiv 预印本 arXiv:1804.07010（2018）。[34] Ramesh, Aditya 等。“利用 CLIP 潜变量进行分层文本条件图像生成。”arXiv 预印本 arXiv:2204.06125（2022）。[35] Rombach, Robin 等。“使用潜在扩散模型进行高分辨率图像合成。”IEEE/CVF 计算机视觉与模式识别会议论文集。2022年。[36] Saharia, Chitwan 等。“具备深度语言理解能力的照片级真实感文本到图像扩散模型。”arXiv 预印本 arXiv:2205.11487（2022）。[37] Singer, Uriel 等。“Make-a-video：无需文本-视频数据的文本到视频生成。”arXiv 预印本 arXiv:2209.14792（2022）。[38] Sohl-Dickstein, Jascha 等。“使用非平衡热力学进行深度无监督学习。”国际机器学习会议。PMLR，2015年。[39] Song, Yang 和 Stefano Ermon。“通过估计数据分布的梯度进行生成建模。”《神经信息处理系统进展》32（2019）。[40] Song, Yang 等。“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）。[41] Wang, Yutian 和 Yuan-Hua Ni。“深度 BSDE-ML 学习及其在无模型最优控制中的应用。”arXiv 预印本 arXiv:2201.01318 （2022）。[42] Wang, Wansheng 等。“用于高维全非线性偏微分积分方程及带跳跃的耦合正倒向随机微分方程的深度学习数值方法。”arXiv 预印本 arXiv:2301.12895（2023）。[43]Weng, Lilian。《什么是扩散模型？》，Lil’Log，（2021）。https://lilianweng.github.io/posts/2021-07-11-diffusion-models/。[44] Yang, Ling 等。“扩散模型：方法与应用综述。”arXiv 预印本 arXiv:2209.00796（2022）。[45] Yu, Bing、Xiaojing Xing 和 Agus Sudjianto。“基于深度学习的障碍期权数值 BSDE 方法。”arXiv 预印本 arXiv:1904.05921（2019）。[46] Yu, Yajie、Narayan Ganesan 和 Bernhard Hientzsch。“反向深度 BSDE 方法及其在非线性问题中的应用。”《风险》11.3（2023）：61。