arXiv:2611.28623v1 [math.OC] 21 Nov 2026

¨通过Yasue作用量构建神经薛定谔桥及其在生成建模中的应用

YAN-HAN CHEN*、ABHISHEK HALDER* 和 HAILIANG LIU†

Abstract. 我们提出一种新颖的神经求解器，用于推断薛定谔桥问题中的连续状态演化。该求解器基于涉及Yasue作用泛函的鞍点形式。借助这一方法，我们可以通过学习常微分方程的最优速度来实现连续状态演化，而非学习随机微分方程的最优漂移。该求解器仅使用源样本和目标样本，而不直接使用源分布和目标分布，因此尤其适用于生成建模中的高维应用。我们通过在低维和高维情形下开展若干数值实验，使用真实数据集和合成数据集，展示了该求解器的有效性。

1. Introduction

薛定谔桥（SB） [36] ——如今已成为生成建模 [15, 49, 1]和随机控制 [14, 12, 7, 6] 中的标准方法——源于这样一种探索：将量子力学重新表述为非平衡统计力学 [47, 48, 63]。沿着这一最初探索的思路，Nelson随机力学 [39] 和Yasue最小作用量原理 [65] 是两项重要的后续发展；后者通过引入在扩散路径上最小化作用量泛函，推广了前者。在 [65], ，Yasue指出：“显然，这一最小作用量原理与经典力学中的Hamilton原理非常相似。”这些思想推动了量子力学、最小作用量原理和随机控制 [21, 8, 67, 43, 62, 31, 66, 53]交叉领域的诸多发展。

直观地说，薛定谔桥（SB）可以理解为一个最小能量随机插值过程，即在两个给定时刻之间连接两个给定分布的最优测度值演化。在本文中，我们提出了一种通过 *Yasue* 作用量计算薛定谔桥（*SB*）动力学的新型神经求解器。

受生成建模应用的启发，我们的求解器假设只能获得端点分布的样本，而无法获得相应的分布本身。该方法的一个有趣特点是，通过计算与常微分方程（ODE）相关联的确定性速度场 来实现所得到的测度动力学。这与薛定谔桥（SB）的标准计算方法形成对比，后者涉及与随机微分方程（SDE）相关联的漂移和

本研究部分得到了美国国家科学基金会（NSF）奖项2111688的支持。H. Liu感谢西蒙斯基金会通过其数学家旅行支持项目提供的支持。

*爱荷华州立大学航空航天工程系，艾姆斯，爱荷华州50011，美国。
†爱荷华州立大学数学系，艾姆斯，爱荷华州50011，美国。

涉及与随机微分方程（随机微分方程）相关的漂移和扩散的薛定谔桥方法。

我们的具体贡献如下。

- 我们提出了一种神经求解器，用于学习薛定谔桥问题中的连续状态演化，该方法仅使用源样本和目标样本（ $\mathbb{R}^d$中的散布点云）。所提出的求解器无需进行空间离散化。该求解器基于一种鞍点表述，我们证明了其一致性。
- 我们通过在低维和高维设置下，对合成数据集和真实数据集开展大量数值实验，展示了所提出求解器的有效性。
- 除了经典能量泛函外，所提出的求解器还可应用于一般的拉格朗日函数。

相关工作。 已有多种计算方法可用于求解 SB 问题及其推广形式，且不使用神经网络 [29, 44, 7, 45]。然而，对于生成建模等高维应用，近年来神经求解器已成为标准方法。

为了计算用于生成建模的薛定谔桥，De Bortoli 等人 [15] 采用基于分数的扩散来近似著名的迭代比例拟合过程 [18, 29]。出于类似的动机，Chen 等人 [9]采用前向-后向随机微分方程，以对数似然目标训练一对神经网络。对于图像到图像转换，Su 等人[52]提出将源与潜变量、潜变量与目标分别串联，构造薛定谔桥¨。另请参见 [34, 26]。此外，还提出了用于胶体自组装[40], 采样 [32], 以及单细胞扰动预测 [13]的神经SB求解器。这些文献仅具代表性，并非详尽无遗，因为该领域的研究仍在快速发展。

现有的薛定谔桥求解器——无论是神经网络方法还是非神经网络方法——学习的对象要么是随机微分方程中的最优控制漂移，要么是由最优性一阶条件导出的偏微分方程组的解，要么是似然，要么是静态熵势。与这些方法不同，所提出的神经SB求解器通过涉及Yasue作用量的薛定谔桥问题鞍点重构，学习确定性速度场。

记号。 我们用 $\mathbb{E}$ 表示期望算子，用 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得二范数，用 I 表示适当维度的单位矩阵，并用 $X \sim \rho$ 表示随机变量 X具有密度 ρ。符号 ∇、$\nabla\cdot$和 Δ 分别表示标准欧几里得梯度、散度和拉普拉斯算子，均相对于底层空间变量而言。符号 $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ 表示均值向量为 μ 、协方差矩阵为（正定） Σ 的多元高斯密度。

组织结构。本文其余部分安排如下。第2节介绍薛定谔桥和Yasue作用量的必要背景，并明确说明本文关注的学习问题。第3节基于鞍点重构和分数动力学，提出相应的求解方法。此外，我们还将说明如何自然地扩展所提出的方法，以求解具有更一般代价的SB问题。

第4节通过合成数据和真实数据基准，介绍四个数值案例研究。第5节总结全文。证明和其他数值实验收录于附录中。

2. Schrödinger Bridge Problem and Yasue Action

2.1. 背景。 SB 问题旨在学习连续时间内从源密度 ρ_{src} 到目标密度 ρ_{tg}的最小能量随机演化[1] $t \in [0,1]$ ，其中源密度和目标密度都支撑在 $\mathbb{R}^d$（的子集）上。这可以表述为以下随机最优控制问题：

$$\inf_{u\in\mathcal{U}} \mathbb{E}\int_0^1 \frac{1}{2}\left\|u\big(X(t),t\big)\right\|^2 \mathrm{d}t, \tag{2.1a}$$

$$\mathrm{d}X(t) = u\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t + \sigma\,\mathrm{d}B(t), \tag{2.1b}$$

$$X(0)\sim\rho_{\mathrm{src}},\quad X(1)\sim\rho_{\mathrm{tg}}, \tag{2.1c}$$

其中， $\mathbb{E}$ 表示关于 X的分布律t的期望，符号 B（t）表示 $\mathbb{R}^d$中的标准布朗运动，而 X（t）是待确定的 Itô 扩散过程，其分布律在固定时间范围 $[0,1]$内从 ρ_{src} 插值到 ρ_{tg} 。

在（2.1）中，标量扩散系数 $\sigma>0$ 固定， $\mathcal{U}$ 表示取值于 $\mathbb{R}^d$且具有有限能量的反馈控制策略集合。具体而言，

$$\mathcal{U} := \left\{u:\mathbb{R}^d\times[0,1]\to\mathbb{R}^d \mid \mathbb{E}\int_0^1 \frac{1}{2}\left\|u\big(X(t),t\big)\right\|^2\mathrm{d}t<\infty\right\}. \tag{2.2}$$

（2.1）中的最优控制策略决定了受控布朗运动 X（t）。

我们将 (2.1) 中的 $X(t)$ 视为粒子在 $\mathbb{R}^d$ $t\in[0,1]$时刻的（随机）状态，并旨在学习其在 $0\le t\le 1$内沿轨迹的密度。Itˆo 随机微分方程 (2.1b) 描述了该粒子状态的微观演化。问题 (2.1) 具有以下等价的宏观表述：

$$\inf_{u,\rho}\int_0^1\int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{2}\|u(x,t)\|^2\rho(x,t)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t, \tag{2.3a}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\nabla\cdot(u\rho)+\frac{\sigma^2}{2}\Delta\rho, \tag{2.3b}$$

$$\rho(\cdot,0)=\rho_{\mathrm{src}}(\cdot),\ \rho(\cdot,1)=\rho_{\mathrm{tg}}(\cdot), \tag{2.3c}$$

其中 $X(t)\sim\rho(\cdot,t)$。事实上，问题 (2.3) 和问题 (2.1) 确定了相同的最优密度流 [12, 第4节。5]

我们假设 ρ_{src} 和 ρ_{tg} 具有有限二阶矩[2]。在此假设下，问题（2.3）（等价地，问题（2.1））的解的存在唯一性得到保证 [25, 定理 3.2], [63, 节 10]。此外，在这一假设下，对于（2.2）中的给定控制，

[1]单位时间区间 $[0,1]$ 的选择不失一般性。可以使用任意固定的紧时间区间。[2]对于我们的情况，这一假设是成立的，因为可以获得来自 ρ_{src} 和 ρ_{tg} 的有限个样本。这是因为具有紧支集足以保证二阶矩有限。

问题（2.3）中的任意可行 $\rho(\cdot,\ t)$ 均可保证对所有 $t \in [0,1]$ 几乎处处为正。

2.2. **Yasue作用量**。 我们将当前速度场定义为[3]

$$v(x,t) := u(x,t) - \frac{\sigma^2}{2}\nabla \log \rho(x,t). \tag{2.4}$$

直接计算可知，容易验证问题 (2.3) 可改写为以下形式 [11]:

$$\inf_{v,\rho} \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2}\|v(x,t)\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|\nabla \log \rho(x,t)\right\|^2\right] \rho(x,t)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t, \tag{2.5a}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (v\rho)\,, \tag{2.5b}$$

$$\rho(\cdot,0) = \rho_{\mathrm{src}}(\cdot), \quad \rho(\cdot,1) = \rho_{\mathrm{tg}}(\cdot). \tag{2.5c}$$

特别地，项 $\int_{\mathbb{R}^d}\|\nabla \log\ \rho(x,t)\|^2\rho(x,t)\mathrm{d}x$ 是众所周知的 Fisher信息 泛函 [60, p. 279]。Fisher信息正则化目标 (2.5a) 是 Yasue作用量 [11, p. 683]。向量场（非自治） ∇log $\rho(x,t)$通常称为得分函数 [23]。

这里我们说明，只要薛定谔桥 (2.3) 中的极小化对 (u,ρ) 存在，(2.5a) 中的极小化对 $(v,\ \rho)$ 就存在，例如，在我们关于 $\rho_{\mathrm{src}}, \rho_{\mathrm{tg}}$ 具有有限二阶矩的基本假设下。于是，(2.3a) 和 (2.5a) 的最小值相等且有限。因此，(2.5a) 中的极小化 v 必为有限能量，即必须属于 (2.2) 中的集合 $\mathcal{U}$。因此，将问题 (2.5) 的可行 v 限制在集合 $\mathcal{U}$内并不失一般性。

问题 (2.5) 具有如下微观层面或粒子层面的等价形式:

$$\inf_{v} \int_0^1 \mathbb{E}_{X(t)\sim\rho}\left[\frac{1}{2}\|v\left(X(t),t\right)\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|\nabla \log \rho\left(X(t),t\right)\right\|^2\right] \mathrm{d}t, \tag{2.6a}$$

$$\mathrm{d}X(t) = v\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t, \tag{2.6b}$$

$$X(0) \sim \rho_{\mathrm{src}}, \quad X(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}}. \tag{2.6c}$$

注意，虽然 (2.3b) 是一个对流-扩散（即 Fokker-Planck）偏微分方程，但 (2.5b) 只是一个对流（即 Liouville）偏微分方程。换言之，重写后的形式 (2.5) 使我们能够将粒子运动学描述从随机微分方程 (2.1b) 转换为常微分方程 (2.6b)。这种运动学上的简化，是以在目标函数 (2.5a) 中增加 Fisher 信息正则化项为代价的。

问题 (2.6) 的结构促使我们推广先前工作中提出的鞍点表述 [10], ；在该工作中，我们将一个最优传输[4] 问题重新表述为极小极大问题，从而推动了神经求解器的开发。然而，该工作的研究并非针对目标函数 (2.5a)，而且在这一 Yasue 作用量框架下如何循类似路径推进，远非显而易见。

[3]由于前面提到的 ρ 为正，这一定义良好。[4]已知最优传输是薛定谔桥的零噪声极限，即对应于 (2.3) 或 (2.5) 中的 $\sigma = 0$情形。在这种情况下， $X(t)$ 运动学 (2.1b) 已经简化为一个常微分方程。

尽管如此，正如下一节所示，通过用当前速度场刻画分数动力学，我们能够将约束变分问题 (2.6) 重述为一个鞍点问题。进而，我们只需源密度和目标密度的样本，即可学习两个对抗参数化函数： ρ_{src} 和 ρ_{tg}。

将源样本记为 Z，目标样本记为 Y，现在可以将问题明确表述如下。

问题表述。给定 $Z \sim \rho_{\mathrm{src}}$ 和 $Y \sim \rho_{\mathrm{tg}}$，学习最优流速场 v^* 以求解问题 (2.6)，进而推断 $X(t) \sim \rho(\cdot,\ t),\ t \in [0,1]$。

该问题表述与生成建模息息相关，其目标是从仅能通过样本获取的目标分布中抽取新样本。一种常见策略是学习将易于采样的简单参考（即源）分布映射到目标（即目标）分布。在我们的框架中，参考分布为 ρ_{src}，目标分布为 ρ_{tg}。

在接下来的第3节中，我们将提出一种计算方法和算法来解决上述问题。

3. Method and Algorithm

在第3节.1中，我们详细介绍所提出的鞍点重构。第3节.2基于分数动力学构建所提出的算法。在第3节.3中，我们说明如何将所提出的方法推广到具有更一般代价的 SB 问题。

3.1. 鞍点重构。令 $\phi \in C_b(\mathbb{R}^d;\mathbb{R})$ 表示从 $\mathbb{R}^d$ 到 $\mathbb{R}$ 的所有连续有界函数构成的向量空间。首先注意到，两个随机变量 $X(1)$ 和 Y 具有相同的分布（因而具有相同的密度 ρ_{tg}），当且仅当 [24, 定理 18。1], [4, 定理 1。2]

$$\mathbb{E}\left[\phi\left(X(1)\right)\right] = \mathbb{E}\left[\phi\left(Y\right)\right] \quad \forall \phi \in C_b(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}). \tag{3.1}$$

将 (3.1) 视为等式约束，我们注意到，问题 (2.6) 等价于以下问题：

$$\inf_{v} \mathbb{E} \int_0^1 \left[\frac{1}{2}\|v\left(X(t),t\right)\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|\nabla \log \rho\left(X(t),t\right)\right\|^2\right] \mathrm{d}t$$

$$+ \text{上确界}_{\phi} \left(\mathbb{E}\left[\phi(X(1))\right] - \mathbb{E}\left[\phi\left(Y\right)\right]\right), \tag{3.2a}$$

$$\mathrm{d}X(t) = v\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t, \tag{3.2b}$$

$$X(0) \sim \rho_{\mathrm{src}}. \tag{3.2c}$$

为说明 (3.2) 与 (2.6) 之间的等价性，注意到如果 (3.1) 中的等式不成立，则 (3.2a) 中的上确界等于 $+\infty$。

另一方面，如果 (3.1) 中的等式成立（即 $Y \sim \rho_{\mathrm{tg}}$），那么上确界等于零。由于 (3.2a) 中的第一项与 ϕ 无关，因此我们可以将 (3.2) 等价地写为

$$\inf_{v}\sup_{\phi} \quad \mathbb{E} \int_0^1 \left[\frac{1}{2}\|v\left(X(t),t\right)\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|\nabla \log \rho\left(X(t),t\right)\right\|^2\right] \mathrm{d}t$$

$$+\left(\mathbb{E}\left[\phi\left(X(1)\right)\right]-\mathbb{E}\left[\phi\left(Y\right)\right]\right), \tag{3.3a}$$

$$\mathrm{d}X(t)=v\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t, \tag{3.3b}$$

$$X(0)\sim\rho_{\mathrm{src}}. \tag{3.3c}$$

在下面的命题 3.1（证明见附录 A）中，我们将问题 (3.3) 的解与问题 (2.6) 的解联系起来。

命题 3.1。 如果问题 (3.3) 存在一个鞍点 $(v^*、\ \phi^*)$，则 v^* 可解问题(2.6)。

(3.3a) 的形式使人联想到生成对抗网络（GAN）的框架 [19]。受此启发，我们分别使用两个神经网络 v_θ 和 ϕ_ω 对 actor v 和 critic ϕ 进行参数化。众所周知 [16], 神经网络能够很好地逼近连续函数。

在我们的情形下， v_θ 通过对常微分方程 (2.6b) 进行离散化，进一步得到轨迹 $X(t) = X_\theta(t)$ 的参数化，具体如下：

$$X(t_{j+1})=X(t_j)+\frac{v_\theta\left(X(t_j),t_j\right)}{N}, \tag{3.4}$$

其中，时间区间 $[0,1]$ 被等分为 N 个子区间，时间戳为$t_j = \frac{j}{N}$和 $j \in \{0,1,\ldots,N\}$。我们将 (3.4) 中的 $X(0) = Z \sim \rho_{\mathrm{src}}$ 设定为，以满足初始约束 (3.3c)。

3.2. **分数动力学与所提算法**。 为了开发一种求解 (3.3) 的计算方法，我们作出以下关键观察：对于满足 (2.5b) 的当前速度 v，沿粒子轨迹 $X(t)$ 演化的得分函数 $\nabla\log\ \rho$，可由下文命题 3.2 中给出的常微分方程完全刻画（证明见附录 B）。

命题 3.2。 给定初始随机状态 $X(0) \sim \rho(\cdot,0)$ 及其动力学$\dot{X}(t) = v\left(X(t)\ t\right)$，沿粒子轨迹 $X(t)$ 演化的得分函数 $s(x,t) := \nabla\log\ \rho(x,t)$ 几乎必然满足以下常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s\left(X(t),t\right)=-\left[\nabla v\left(X(t),t\right)\right]^\top s(X(t),t)-(\nabla\nabla\cdot v)(X(t),t), \tag{3.5}$$

其中，雅可比矩阵 ∇v 中的第 (i,j) 个元素为 $\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$。 —

备注 3.3。 我们澄清，动力学 (3.5) 是常微分方程而非偏微分方程，因为它描述了 s 沿轨迹 $X(t)$ 的演化。

利用 (3.5) 中的 v_θ，我们将得分函数 $s(X(t)\ t) = s_\theta(X(t)\ t)$ 沿粒子轨迹的演化近似为

$$\begin{aligned}s\left(X(t_{j+1}),t_{j+1}\right)=s\left(X(t_j),t_j\right)-\frac{1}{N}\Big(&\left[\nabla v_\theta\left(X(t_j),t_j\right)\right]^\top s\left(X(t_j),t_j\right)\\&+\nabla\nabla\cdot v_\theta\left(X(t_j),t_j\right)\Big),\end{aligned} \tag{3.6}$$

其中 $s(X(0),\ 0) = \nabla\log\ \rho_{\mathrm{src}}(X(0)) = \nabla\log\ \rho_{\mathrm{src}}(Z)$。

算法1 用于求解问题（3.7）的训练过程。

要求： 样本 $Z \sim \rho_{\mathrm{src}}$ 和 $Y \sim \rho_{\mathrm{tg}}$；噪声水平 σ；时间步 N；初始分数 ∇当 ρ_{src} 已知时为 log $\rho_{\mathrm{src}}(\cdot)$，否则为 $s_\psi(\cdot)$（通过去噪得分匹配网络进行预训练-ing）

网络。 $v_\theta: \mathbb{R}^d \times [0,1] \to \mathbb{R}^d$; $\phi_\omega: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$

子程序 ROLLOUT(θ, Z)

$X^{(0)} \leftarrow Z$; $s^{(0)} \leftarrow \nabla$日志 $\rho_{\mathrm{src}}(Z)$ 或 $s_\psi(Z)$

对于 $j = 0, \ldots, N-1$ **执行**

  $v^{(j)} \leftarrow v_\theta(X^{(j)}, t_j)$

  $a^{(j)} \leftarrow (\nabla_x v_\theta)^\top s^{(j)}$

  $b^{(j)} \leftarrow \nabla_x(\nabla_x \cdot v_\theta)$

  $X^{(j+1)} \leftarrow X^{(j)} + \frac{1}{N} v^{(j)}$; $s^{(j+1)} \leftarrow s^{(j)} - \frac{1}{N}(a^{(j)} + b^{(j)})$ ▷ (3.4) and (3.6)

返回 $\{X^{(j)}, v^{(j)}, s^{(j)}\}_{j=0}^{N}$

训练

对 $k = 1$ **循环** $, \ldots, N_v$ **do**

  绘制 $\{Z_i\}_{i=1}^n \sim \rho_{\mathrm{src}}$, $\{Y_i\}_{i=1}^n \sim \rho_{\mathrm{tg}}$

  (a) 评论家上升 — 上确界$_\omega$ *in (3.7a)*

  对于 $\ell = 1, \ldots, N_\phi$ **执行**

    $\{X_i^{(N)}\}_{i=1}^n \leftarrow$ ROLLOUT(θ, Z_i) **无梯度**

    $\mathcal{L}_\omega \leftarrow -\left(\frac{1}{n}\sum_i \phi_\omega\left(X_i^{(N)}\right) - \frac{1}{n}\sum_i \phi_\omega(Y_i)\right)$

    通过下降 ω $\mathcal{L}_\omega$进行更新。

  （*b*）在 θ 中的下降—下确界$_\theta$ 见（*3.7a*）

  $\{X_i^{(j)}, v_i^{(j)}, s_i^{(j)}\}_{i,\,j} \leftarrow$ ROLLOUT(θ, Z_i)

  $\mathcal{L}_\theta \leftarrow \frac{1}{nN}\sum_j \sum_i \left[\frac{1}{2}\left\|v_i^{(j)}\right\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|s_i^{(j)}\right\|^2\right] + \frac{1}{n}\sum_i \phi_\omega\left(X_i^{(N)}\right)$

  通过下降 θ $\mathcal{L}_\theta$进行更新。

返回 v_θ, ϕ_ω

在 ρ_{src} 已知的情况下（例如，标准高斯分布），初始分数可以通过解析方式获得（$s(X(0), 0) = -Z$ 适用于标准高斯分布）。然而，当只有样本 $Z \sim \rho_{\mathrm{src}}$ 可用时，我们可以预训练另一个神经网络 s_ψ，从样本中学习其得分函数；例如参见 [51, 61]。

最后，采用神经网络参数化的 v_θ、ϕ_ω 以及近似式 (3.4)、(3.6)，我们得到如下针对问题 (3.3) 的学习形式（进而通过命题 3.1 得到问题 (2.6) 的学习形式）：

$$\min_\theta \max_\omega \quad \mathbb{E}\int_0^1 \left[\frac{1}{2}\left\|v_\theta\left(X(t),t\right)\right\|^2 + \frac{\sigma^4}{8}\left\|s_\theta\left(X(t),t\right)\right\|^2\right] \mathrm{d}t$$

$$+ \left(\mathbb{E}\left[\phi_\omega(X(1))\right] - \mathbb{E}\left[\phi_\omega(Y)\right]\right), \tag{3.7a}$$

$$\dot{X}(t) = v_\theta\left(X(t),t\right), \tag{3.7b}$$

$$\dot{s}_\theta\left(X(t),t\right) = -\left[\nabla v_\theta\left(X(t),t\right)\right]^\top s_\theta\left(X(t),t\right) - \left(\nabla\nabla\cdot v_\theta\right)\left(X(t),t\right), \tag{3.7c}$$

其中 $X(0) = Z$和 $s_\theta(X(0), 0) = \nabla\log\rho_{\mathrm{src}}(Z)$。用于求解该极小极大问题的算法如算法1所述。

对于生成建模的应用，我们根据（3.7b），通过将新样本 $Z \sim \rho_{\mathrm{src}}$ 映射到 $X(1)$，并使用学习得到的速度 v_{θ^*}，从 ρ_{tg} 中生成一个新样本。该生成过程既不需要随机微分方程，也不需要得分网络。

注 3.4。 实现算法1并不要求从 ρ_{src}和 ρ_{tg} 中抽取的样本集具有相同大小，也不要求样本成对对应。其原因在于，（3.7a）中第二项的两个期望可以分别计算。

3.3. **推广到一般代价**。 我们的方法可以自然地推广到具有一般代价 $L(x、\ u、\ t)$ 的 SB问题，即推广到以下形式的问题

$$\begin{aligned} &\inf_{u\in\mathcal{U}} \quad \mathbb{E}\int_0^1 L\left(X(t), u\left(X(t),t\right), t\right)\mathrm{d}t, \\ &\mathrm{d}X(t) = u\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t + \sigma\,\mathrm{d}B_t, \\ &X(0)\sim\rho_{\mathrm{src}},\ X(1)\sim\rho_{\mathrm{tg}}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

注意，选择 $L(x、\ u、\ t) = \frac{1}{2}\|u\|^2$后，问题便退化为经典的 SB 问题（2.1）。形式为（3.8）的问题自然出现在随机控制 [54, 55, 57, 56] 和学习[28, 33, 2, 5, 17]中。

沿用我们将问题（2.3）转写为问题（2.6）时对当前速度场 $v(x,t)$ 所采用的方法，我们可以针对问题（3.8）考虑如下“Yasue作用量重构”:

$$\begin{aligned} &\inf_{v} \quad \mathbb{E}\int_0^1 L\Big(X(t), v\left(X(t),t\right) + \frac{\sigma^2}{2}\nabla\log\rho\left(X(t),t\right), t\Big)\mathrm{d}t, \\ &\mathrm{d}X(t) = v\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t, \\ &X(0)\sim\rho_{\mathrm{src}},\ X(1)\sim\rho_{\mathrm{tg}}. \end{aligned} \tag{3.9}$$

与之前一样，问题（3.8）和（3.9）确定了共同的最优密度流。此外，按照第3.1节和第3.2节中的相同步骤，对应于问题（3.9）的神经学习 formulation 为

$$\min_\theta\max_\omega \quad \mathbb{E}\int_0^1 L\Big(X(t), v_\theta\left(X(t),t\right) + \frac{\sigma^2}{2}s_\theta\left(X(t),t\right), t\Big)\mathrm{d}t$$

$$+\left(\mathbb{E}\left[\phi_\omega\left(X(1)\right)\right] - \mathbb{E}\left[\phi_\omega(Y)\right]\right), \tag{3.10a}$$

$$\dot{X}(t) = v_\theta\left(X(t),t\right), \tag{3.10b}$$

$$\dot{s}_\theta\left(X(t),t\right) = -\left[\nabla v_\theta\left(X(t),t\right)\right]^\top s_\theta\left(X(t),t\right) - \left(\nabla\nabla\cdot v_\theta\right)\left(X(t),t\right), \tag{3.10c}$$

其中 $X(0) = Z$且 $s_\theta(X(0),0) = \nabla\log\rho_{\mathrm{src}}(Z)$。因此，所提出的算法1可以在（3.10）中作相应调整后应用。

4. 数值实验

在本节中，我们在合成数据集和真实数据集、低维数据集和高维数据集上评估所提出的算法1。具体而言，第 4.1 节展示了所提出的方法在

合成高斯源到高斯混合目标案例研究中的应用。第 4.2 节、第 4.3 节和第 4.4 节分别展示了所提出的方法在 MNIST [30], 具有高斯源的 MNIST，以及 Fashion-MNIST 数据集上的表现。附录 C 报告了使用 CelebA 数据集 [35] 进行的另一项数值实验。在第4.5节中，我们将所提出的神经SB求解器与其零噪声（$\sigma = 0$）情形，即最优传输极限进行性能比较。第4.6节对报告的结果进行了评论。

在所有数值实验中，我们将噪声设为 $\sigma = 1$。更新式 (3.6) 中的得分函数涉及两个在高维情况下计算开销很大的项：$\nabla \cdot v_\theta$ 和$\nabla_x v_\theta$。对于 $\nabla \cdot v_\theta$，我们仿照 [20] 及许多其他研究，采用 Skilling–Hutchinson迹估计器 [22, 50], ；对于较大的 d，该方法所需的计算量要低得多，代价是引入少量随机噪声。对于 $\nabla_x v_\theta$，由于只需要计算其与向量的乘积，我们使用向量–雅可比乘积（VJP），避免计算完整的雅可比矩阵。

该算法使用 PyTorch [42] 实现。两个神经网络 v_θ 和 ϕ_ω 均使用 RMSprop优化器 [58], 进行训练，梯度通过 PyTorch 的 `autograd` 引擎 [41]采用反向模式自动微分计算。所有实验均在爱荷华州立大学的 Nova高性能计算集群上使用 NVIDIA GPU 运行。网络架构和训练超参数的详细信息见附录D。

4.1. 高斯混合。 在这个 $d = 2$ 维合成实验中，我们将源密度 ρ_{src} 设为标准二维高斯分布，将目标密度 ρ_{tg}设为由四个高斯分量等权混合而成的高斯混合。具体而言，

$$\rho_{\mathrm{tg}} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} \mathcal{N}(\mu_i, 0.5I), \quad \mu_i \in \{-5, 5\}^2 \quad \forall i = 1, 2, 3, 4.$$

图 1 展示了学习得到的轨迹。为验证我们的神经算法，我们在选定的时间切片上，将本方法生成的样本云与非神经方法在 [7]和 [54] 中计算得到的密度等高线进行比较。比较结果见图 2 第一行；同一图的第二行以箭头图形式展示了学习得到的时变速度场 v_{θ^*} 的快照。图 3 展示了该实验中神经网络的训练历史。我们仅报告这一示例的训练历史，因为它具有代表性：后续实验中对应的训练历史也呈现相似趋势。

4.2. MNIST。 接下来，我们将算法应用于 MNIST手写数字数据集[30], ，该数据集也提供了一个高维基准。每个数字都表示为一幅（28×28）灰度图像，因此也可表示为 $\mathbb{R}^{784}$中的一个向量。具体而言，我们学习将数字 9（表示 ρ_{src}）映射到数字 6（表示 ρ_{tg}）的当前速度场。由于此设置中无法获得算法1所需的真实源分布得分，我们使用去噪得分匹配 [61]预训练评分函数 $s(X(0), 0)$。

图4展示了使用算法1从数字（9）样本生成的数字（6）样本。图5展示了学习到的速度场 v_{θ^*} 所诱导的变换。

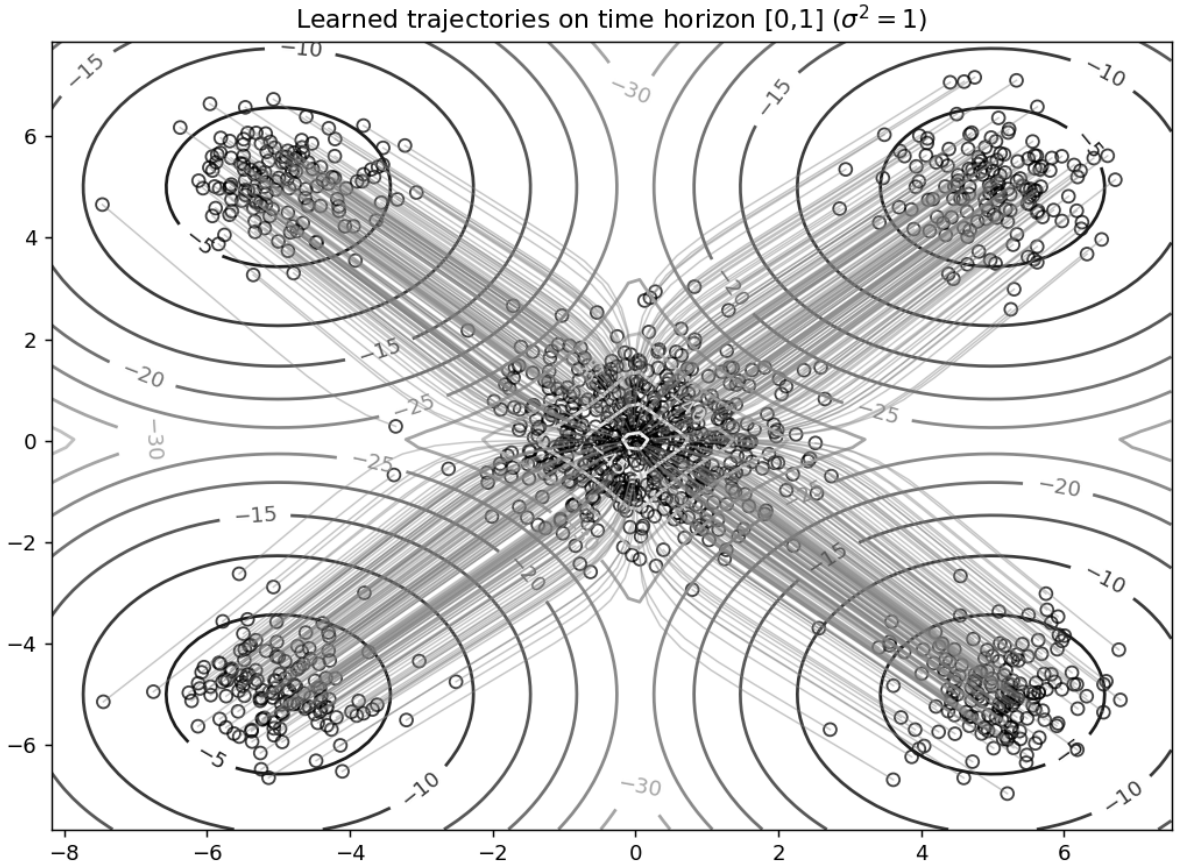

FIGURE 1. 标准正态源分布的样本 ρ_{src}（中心处为空心圆标记）被传输到高斯混合分布 ρ_{tg}的四个众数所在位置。每条灰线表示通过我们提出的算法1获得的学习轨迹。等高线表示 ρ_{tg}的真实对数密度。

4.3. **以高斯源分布处理 MNIST**。 在本实验中，我们再次考虑第 4.2 节中的 MNIST 数据集，但此次使用标准高斯分布 ρ_{src}。本实验的动机是，将高斯分布传输至数字 9，比将数字 6 传输至数字 9 更具挑战性（因为两者的形状相似）。在这种情况下，源分布得分可以通过解析方式得到，具体如下：

$$s(Z) = -Z,$$

因此无需进行近似或预训练。

图6报告了通过学习到的速度场 v_{θ^*}，利用所提出的算法1将从标准高斯分布中抽取的样本进行传输后得到的生成的数字 6。图 7展示了由 v_{θ^*}诱导的变换。

4.4. **Fashion MNIST**。作为进一步的真实数据实验，我们在 Fashion-MNIST数据集 [64], 上测试了我们的方法，该数据集由 70,000 张尺寸为（28×28）的灰度图像组成。我们学习了一个传输映射，将“运动鞋”（代表 ρ_{src}）的分布映射到

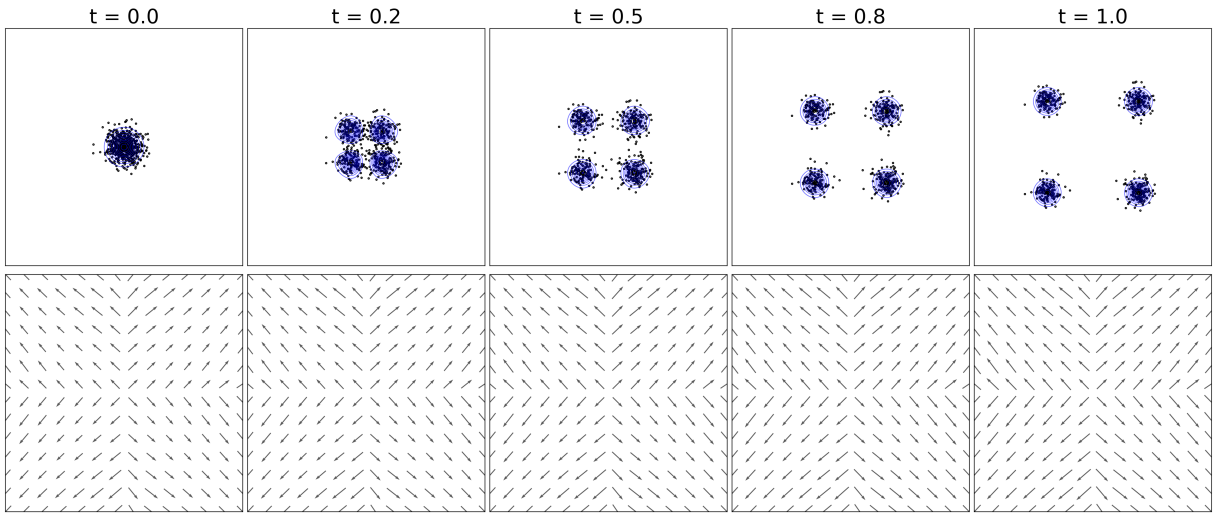

FIGURE 2. 第一行：在选定的时间切片上，我们的方法生成的样本云（空心圆形标记）与使用 [7] 和 [54] 中的非神经方法得到的密度等高线相吻合。第二行：在选定的时间切片上学习到的时变速度场。

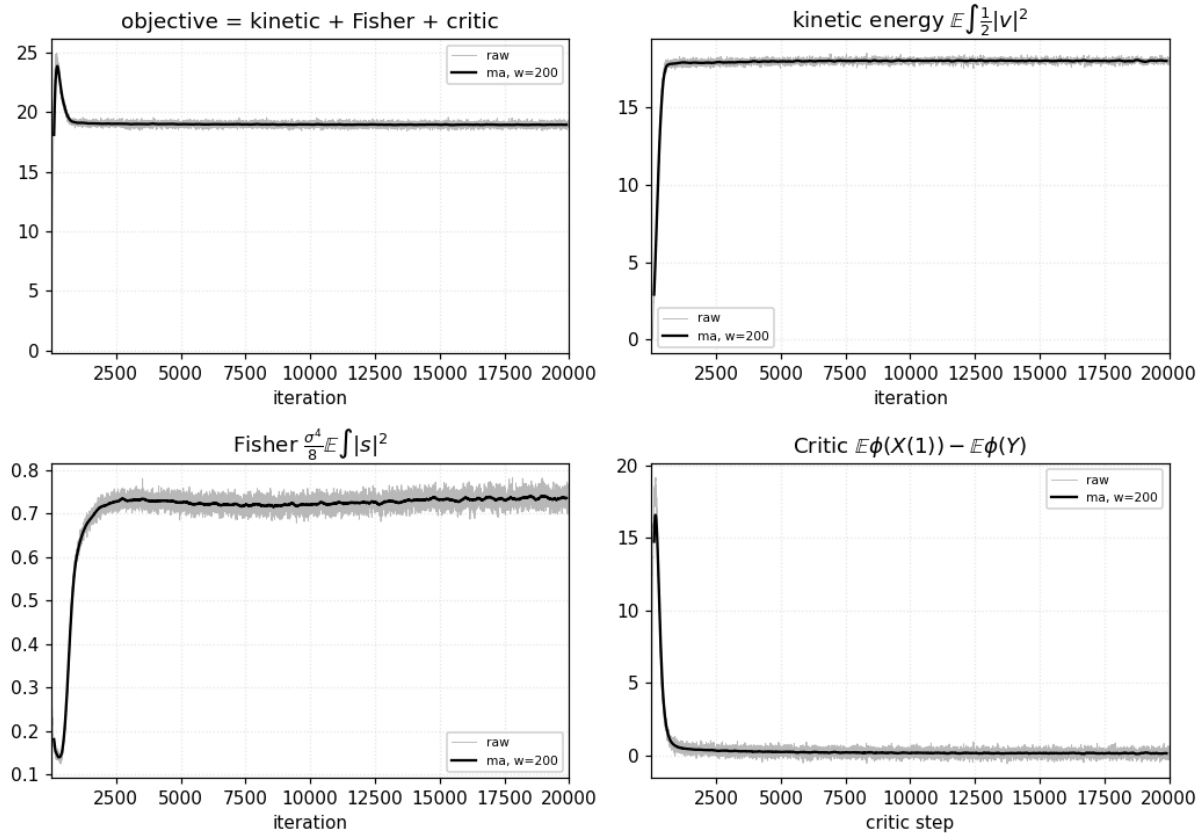

FIGURE 3. 高斯混合示例的训练过程历史，展示了目标函数（3.7a）及其三个组成项。实线是对浅灰色原始数值取移动平均后得到的，窗口大小为 200 步。

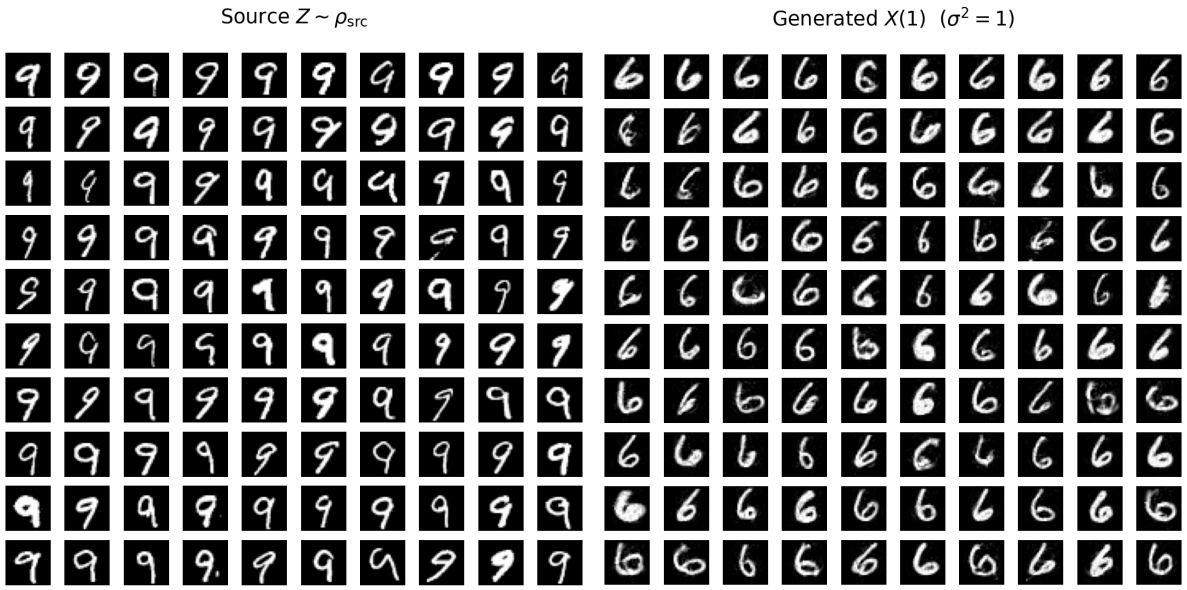

FIGURE 4. 左图：源分布 ρ_{src}（数字9）的100个样本。右图：左图中的传输样本，旨在匹配目标分布 ρ_{tg}（数字6）。

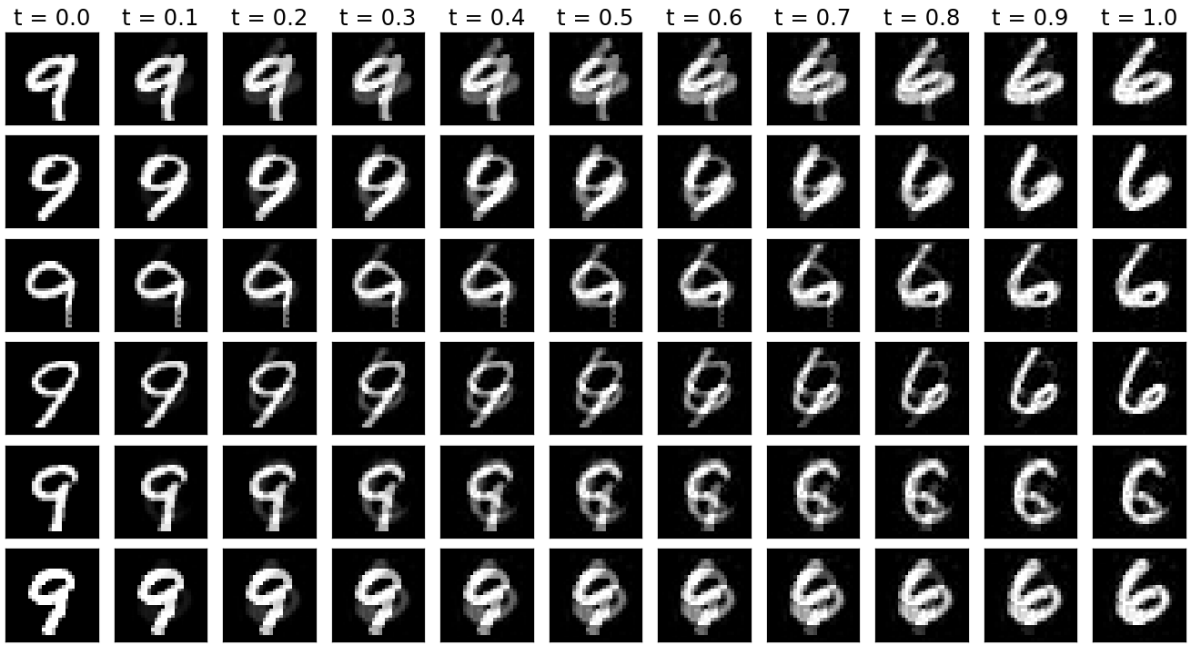

FIGURE 5. 变换过程 $X(t)$ 的选定时间切片。

“短靴”（代表 ρ_{tg}）。由于无法获得真实的源分布得分，我们再次使用去噪得分匹配对其进行估计。

图 8 展示了由运动鞋样本生成的踝靴样本，而图9 展示了由学习到的速度场 v_{θ^*} 所引发的变换。

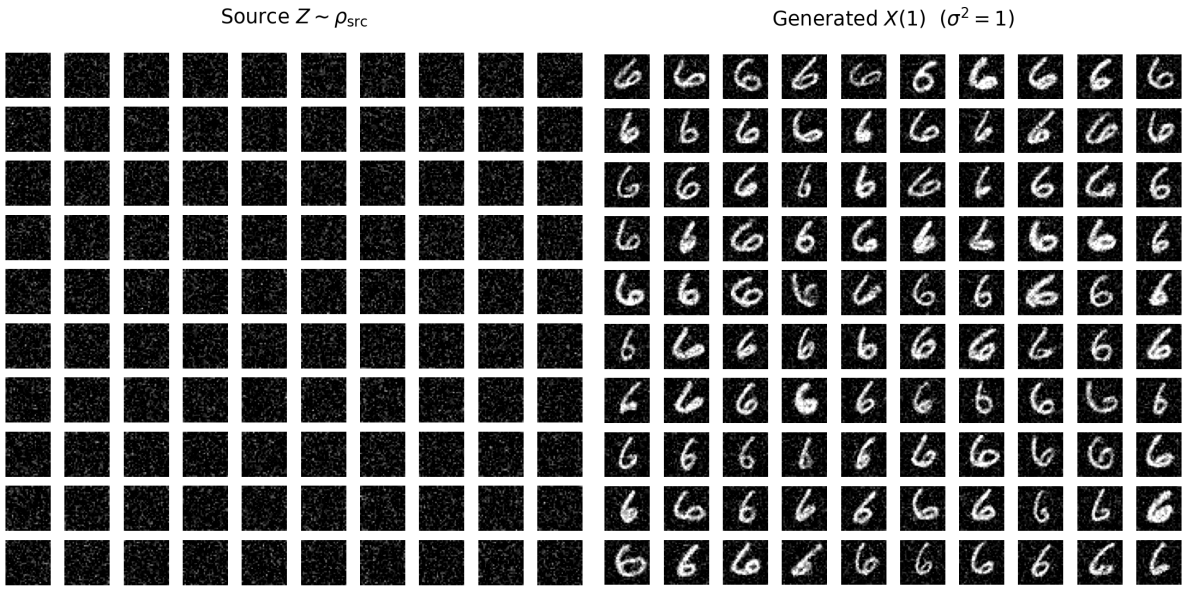

FIGURE 6. 左图：源分布中的100个样本 $\rho_{\text{src}} = \mathcal{N}(0, I)$。右图：左图中的传输样本，旨在匹配目标分布 ρ_{tg}（数字6）。

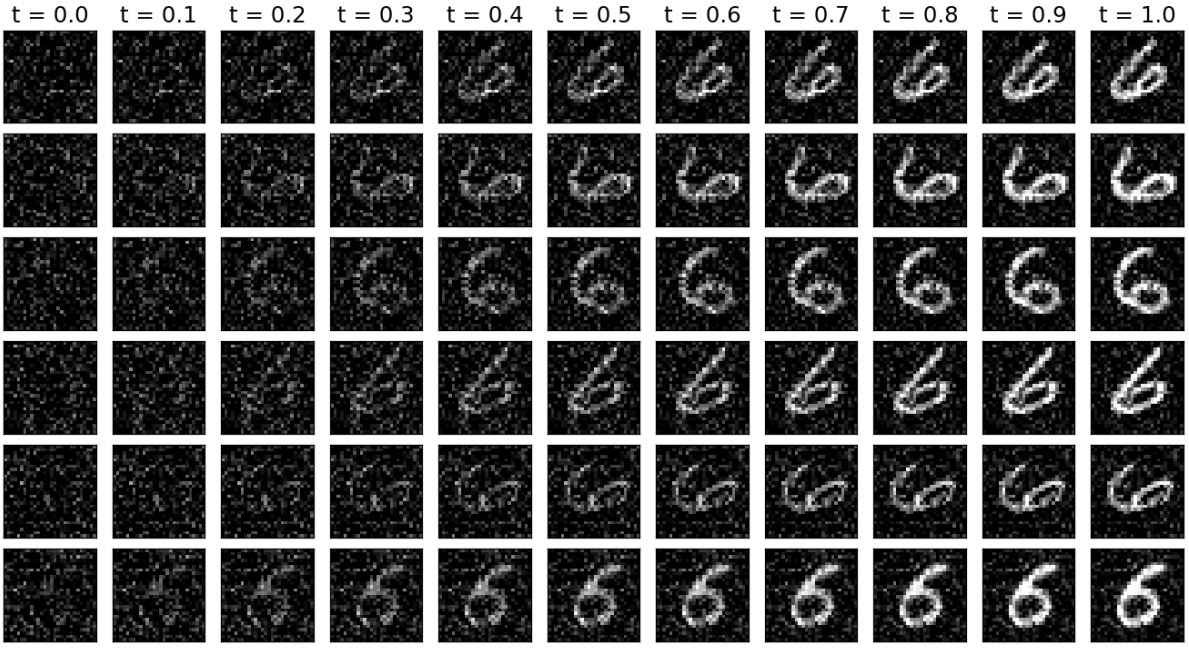

FIGURE 7. 变换过程的选定时间切片 $X(t)$。

4.5. **与最优传输的比较**。值得注意的是，在 $\sigma^2 = 0$ 情况下，SB 问题简化为 Benamou 和 Brenier 的最优传输公式

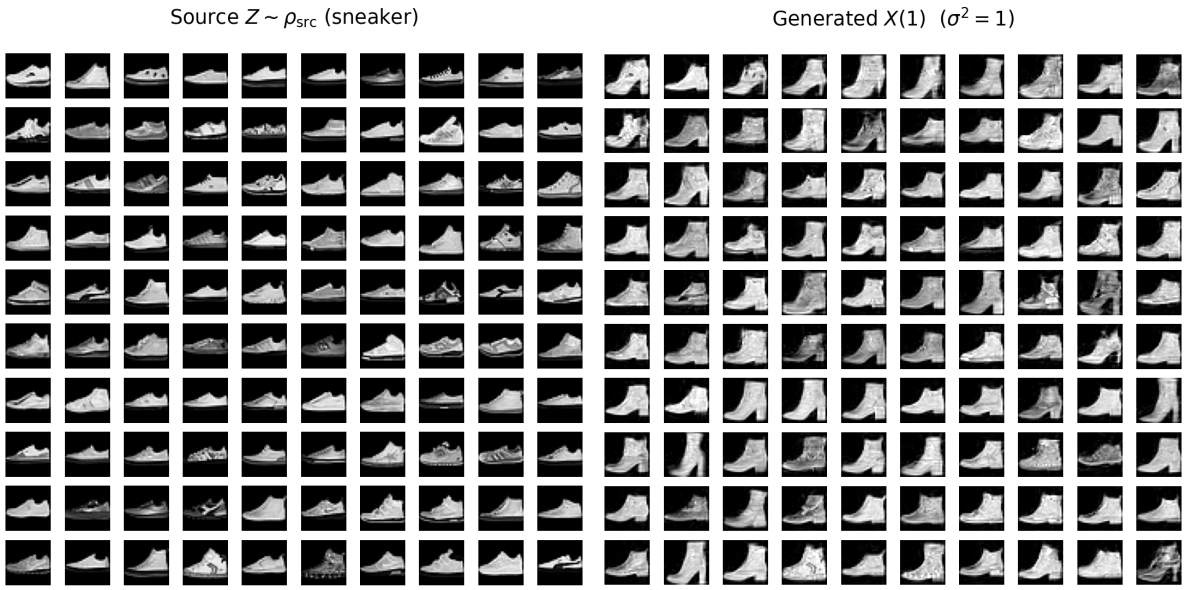

FIGURE 8.左图：源分布 ρ_{src}（运动鞋）中的 100 个样本。右图：由左图传输而来的样本，旨在与目标分布 ρ_{tg} （短靴）相匹配。

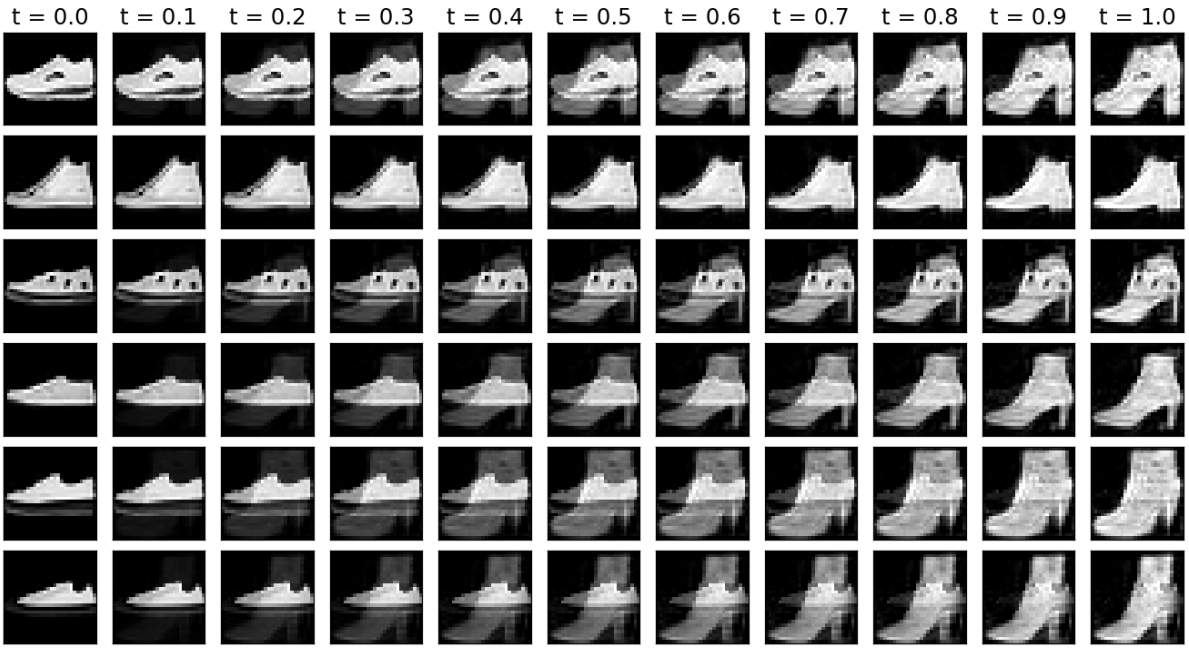

FIGURE 9. 变换过程 X（t）中的选定时间切片。

（OT） [3]:

$$\inf_{v} \quad \mathbb{E}\int_0^1 \frac{1}{2}\left\|v\big(X(t),t\big)\right\|^2 \mathrm{d}t,$$
$$\mathrm{d}X(t) = v\left(X(t),t\right)\mathrm{d}t,$$

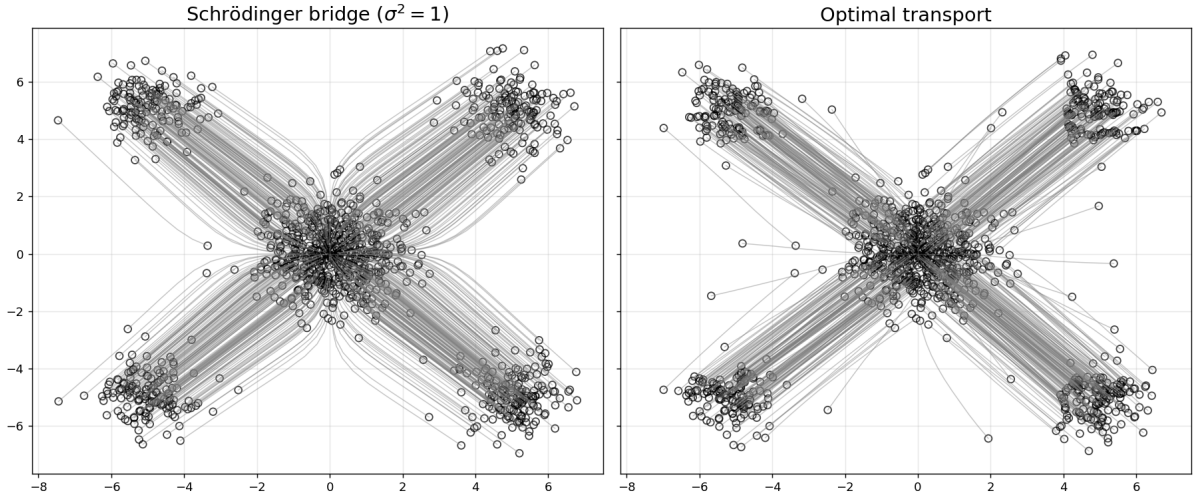

FIGURE 10. 左图：从图 1 复制的已学习薛定谔桥轨迹。右图：已学习的最优传输（$\sigma^2 = 0$）轨迹。

$$X(0) \sim \rho_{\mathrm{src}},\, X(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}},$$

也可以使用本文提出的类似极小极大神经算法求解；由于不存在扩散项，因此无需进行分数近似。然而，从实际计算来看，将噪声视为分数正则化最终有助于获得质量更高的生成样本。为说明这一点，在图 10 中，我们将本文对高斯混合示例（第 4.1 节）学习得到的轨迹与 [10], 中的结果进行比较，后者从源样本和目标样本中学习参数化最优传输轨迹。从相同的源样本集出发，我们可以看到，右图中的最优传输轨迹为直线，其中一些点无法很好地归类到 4 个高斯分量中的任何一个，而是落在众数之间；相比之下，左图中学习得到的薛定谔桥轨迹没有表现出这种模式。

4.6. **对数值结果的评论**。 我们的方法的有效性得到了以下结果的支持：如图 1 第一行所示，由我们学习得到的当前速度v_θ 生成的样本云与通过求解 [7] 和 [54], 中的对偶偏微分方程组获得的密度等高线相一致。此外，图 3 中判别器值的收敛表明，终端分布与目标分布相匹配。

数值结果的一个显著特点是，变换沿着低成本轨迹进行，同时保留源样本的基本结构。例如，如图5第五行所示，数字 9 的“C”形笔画在整个变换过程中都得以保留，即使样本逐渐演变成数字 6。附录 C 提供的人脸图像数值实验也呈现出类似模式。对比第 4.2 节和第 4.3 节两个 MNIST 实验中的不同源分布可以发现，从标准高斯分布出发的演化似乎沿着一条带有噪声的路径流向目标（图 7），而从无噪声状态出发的演化则没有呈现这种模式（图5）。我们发现，Schr¨odinger桥模型生成的目标样本质量优于最优传输模型生成的样本；后者被许多流匹配模型采用。

5. Concluding Remarks

我们提出了一种用于求解 Schr¨odinger 桥问题的新型神经求解器。该求解器基于涉及 Yasue 作用泛函的鞍点表述，可通过常微分方程（而非随机微分方程）学习支配样本演化的最优当前速度。所提出的求解器仅需提供端点样本，并将轨迹上的分数演化纳入考虑。我们阐释了所提出的表述，并详细介绍了如何通过标准演员-评论家架构实现该求解器。我们通过涉及真实数据集和合成数据集的若干数值实验，展示了所提出求解器的有效性。

Conflict of interest

作者声明不存在利益冲突。

References

[1] Michael Albergo、Nicholas M. Boffi 和 Eric Vanden-Eijnden。随机插值：统一流与扩散过程的框架。机器学习研究杂志，26(209):1–80，2025。[2] Hamidreza Behjoo 和 Michael Chertkov。调和路径积分扩散。*IEEE Access*，13:42196– 42213，2025。[3] Jean-David Benamou 和 Yann Brenier。针对 Monge-Kantorovich 质量传输问题的一种计算流体力学解。*Numerische Mathematik*，84(3):375–393，2000。[4] Patrick Billingsley。概率测度的收敛，第 2 卷。wiley，纽约，1999。[5] Nazar Buzun、Daniil Shlenskii、Maksim Bobrin 和 Dmitry Dylov。HOTA：用于最优传输平流的哈密顿框架。发表于国际学习表征会议，第 2026 卷，第 85119–85141 页，2026。[6] Kenneth F Caluya 和 Abhishek Halder。带反射的薛定谔桥：具有路径约束的密度控制。发表于*2021* 年美国控制会议 *(ACC)*，第 1137–1142 页。IEEE，2021。[7] Kenneth F Caluya 和 Abhishek Halder。薛定谔桥问题的 Wasserstein 近端算法：具有非线性漂移的密度控制。*IEEE* 自动控制汇刊，67(3):1163– 1178，2021。[8] Eric A Carlen。保守扩散过程。数学物理通讯，94(3):293–315，1984。[9] Tianrong Chen、Guan-Horng Liu 和 Evangelos Theodorou。利用前向-后向随机微分方程理论进行薛定谔桥的似然训练。发表于国际学习表征会议，2022。[10] Yan-Han Chen 和 Hailiang Liu。用于 Wasserstein 测地线和最优传输动力学的神经求解器。科学计算杂志，108(2):39，2026。[11] Yongxin Chen、Tryphon T Georgiou 和 Michele Pavon。关于最优传输与薛定谔桥之间的关系：随机控制视角。优化理论与应用杂志，169(2):671–691，2016。[12]Yongxin Chen、Tryphon T Georgiou 和 Michele Pavon。随机控制联结：Richard Sinkhorn 在薛定谔桥上遇见 Gaspard Monge。*SIAM*评论，63(2):249–313，2021。[13] Changxi Chi、Yufei Huang、Jun Xia、Jiangbin Zheng、Yunfan Liu、Zelin Zang 和 Stan Z Li。Departures：利用神经薛定谔桥进行单细胞扰动预测的分布传输。发表于*AAAI*人工智能会议论文集，第 40 卷，第 20544– 20552 页，2026。[14] Paolo Dai Pra。一种研究互易扩散过程的随机控制方法。应用数学与优化，23(1):313–329，1991。

[15] Valentin De Bortoli、James Thornton、Jeremy Heng 和 Arnaud Doucet。用于基于分数的生成建模的扩散薛定谔桥。神经信息处理系统进展，34:17695–17709，2021。[16] Tim De Ryck、Samuel Lanthaler 和 Siddhartha Mishra。关于 tanh 神经网络对函数的逼近。网络，143:732–750，2021。[17] Yuanqi Du、Michael Plainer、Rob Brekelmans、Chenru Duan、Frank No´e、Carla P. Gomes、Al´an Aspuru-Guzik 和 Kirill Neklyudov。Doob 拉格朗日量：一种用于过渡路径采样的高效样本变分方法。载于 A. Globerson、L. Mackey、D. Belgrave、A. Fan、U. Paquet、J. Tomczak 和 C. Zhang 编，神经信息处理系统进展，第 37 卷，第 65791– 65822 页。Curran Associates, Inc.，2024。[18] Robert Fortet。施罗丁格方程组的求解。纯粹与应用数学杂志，19(1-4):83–105，1940。[19] Ian J Goodfellow、Jean Pouget-Abadie、Mehdi Mirza、Bing Xu、David Warde-Farley、Sherjil Ozair、Aaron Courville 和 Yoshua Bengio。生成对抗网络。发表于神经信息处理系统进展，第 27 卷。Curran Associates, Inc.，2014。[20]Will Grathwohl、Ricky TQ Chen、Jesse Bettencourt、Ilya Sutskever 和 David Duvenaud。Ffjord：用于可扩展可逆生成模型的自由形式连续动力学。arXiv 预印本 arXiv:1810.01367，2018。[21] Francesco Guerra 和 Laura M Morato。动力系统的量子化与随机控制理论。Physical Review D，27(8):1774，1983。[22] Michael F Hutchinson。拉普拉斯平滑样条影响矩阵迹的随机估计量。Communications in Statistics – Simulation and Computation，18(3):1059–1076，1989。[23] Aapo Hyv¨arinen 和 Peter Dayan。通过得分匹配估计非归一化统计模型。机器学习研究杂志，6(4):695，2005。[24] Jean Jacod 和 Philip Protter。概率基础。Springer Science & Business Media，2004。[25] Benton Jamison。互易过程。概率论及相关领域杂志，30(1):65–86，1974。[26] Beomsu Kim、Gihyun Kwon、Kwanyoung Kim 和 Jong Chul Ye。通过神经薛定谔桥实现无配对图像到图像转换。发表于国际学习表征会议，第 2024 卷，第 19312–19331 页，2024。[27] Alexander Korotin、Nikita Gushchin 和 Evgeny Burnaev。轻量薛定谔桥。发表于第十二届国际学习表征会议，2024。[28] Takeshi Koshizuka 和 Issei Sato。神经拉格朗日薛定谔桥：用于种群动力学的扩散建模。发表于第十一届国际学习表征会议，2023。[29] Solomon Kullback。具有给定边缘分布的概率密度。《数理统计年刊》，39(4):1236–1243，1968。[30] Yann LeCun、L´eon Bottou、Yoshua Bengio 和 Patrick Haffner。应用于文档识别的基于梯度的学习。Proceedings of the IEEE，86(11):2278–2324，1998。[31] Flavien L´eger。正则化最优传输的几何视角。动力学与微分方程杂志，31(4):1777–1791，2019。[32] Guan-Horng Liu、Jaemoo Choi、Yongxin Chen、Benjamin K Miller 和 Ricky TQ Chen。伴随薛定谔桥采样器。神经信息处理系统进展，38:15673–15708，2026。[33]Guan-Horng Liu、Yaron Lipman、Maximilian Nickel、Brian Karrer、Evangelos Theodorou 和 Ricky TQ Chen。广义薛定谔桥匹配。发表于国际学习表征会议，第 2024 卷，第 14527–14552 页，2024。[34] Guan-Horng Liu、Arash Vahdat、De-An Huang、Evangelos A. Theodorou、Weili Nie 和 Anima Anandkumar。I2SB：图像到图像薛定谔桥。发表于第 40 届国际机器学习会议论文集，ICML'23。JMLR.org，2023。[35] Ziwei Liu、Ping Luo、Xiaogang Wang 和 Xiaoou Tang。野外人脸属性的深度学习。发表于国际计算机视觉会议论文集（ICCV），2015 年 12 月。

[36] Christian L´eonard. 关于薛定谔问题及其与最优传输若干联系的综述。《离散与连续动力系统》，34(4):1533–1574，2014。[37] Toshio Mikami. 通过 h-路径过程的零噪声极限求解带二次代价的莫涅问题。《概率论及相关领域》，129(2):245–260，2004。[38] Takeru Miyato、Toshiki Kataoka、Masanori Koyama 和 Yuichi Yoshida。生成对抗网络的谱归一化。载于《国际学习表征会议》，2018。[39] Edward Nelson。《布朗运动动力学理论》，第3卷。普林斯顿大学出版社，1967。[40] Iman Nodozi、Charlie Yan、Mira Khare、Abhishek Halder 和 Ali Mesbah。采用 Sinkhorn 损失的神经薛定谔桥：在胶体自组装的数据驱动最小努力控制中的应用。《IEEE 自动控制汇刊》，32(3):960–973，2023。[41] Adam Paszke、Sam Gross、Soumith Chintala、Gregory Chanan、Edward Yang、Zachary DeVito、Zeming Lin、Alban Desmaison、Luca Antiga 和 Adam Lerer。PyTorch 中的自动微分。载于 NIPS-W，2017。[42] Adam Paszke、Sam Gross、Francisco Massa、Adam Lerer、James Bradbury、Gregory Chanan、Trevor Killeen、Zeming Lin、Natalia Gimelshein、Luca Antiga 等。PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库。《神经信息处理系统进展》，32，2019。[43]Michele Pavon。随机力学中的 Hamilton原理。《数学物理杂志》，36(12):6774–6800，1995。[44] Michele Pavon、Giulio Trigila 和 Esteban G Tabak。数据驱动的薛定谔桥。《纯粹与应用数学通讯》，74(7):1545–1573，2021。[45] Aram-Alexandre Pooladian 和 Jonathan Niles-Weed。薛定谔桥的插件估计。《SIAM 数据科学数学杂志》，7(3):1315–1336，2025。[46] Robin Rombach、Andreas Blattmann、Dominik Lorenz、Patrick Esser 和 Bjorn Ommer。利用潜在扩散模型进行高分辨率图像合成。载于《2022年 IEEE/CVF 计算机视觉与模式识别会议（CVPR）》，第10674–10685页。IEEE 计算机学会，2022年6月。.[47] Erwin Schr¨odinger. 自然定律的逆转。科学院出版社，Walter De Gruyter u. Company 代理发行，1931。[48] Erwin Schr¨odinger. 论电子的相对论理论及量子力学的诠释。载于《亨利·庞加莱研究所年刊》，第2卷，第269–310页，1932。[49] Yuyang Shi、Valentin De Bortoli、Andrew Campbell 和 Arnaud Doucet。扩散薛定谔桥匹配。《神经信息处理系统进展》，36:62183–62223，2023。[50] John Skilling。超高维矩阵的特征值。载于《最大熵与贝叶斯方法：英国剑桥，1988》，第455–466页。Springer，1989。[51] Yang Song、Sahaj Garg、Jiaxin Shi 和 Stefano Ermon。切片得分匹配：一种可扩展的密度与得分估计方法。载于 Ryan P. Adams 和 Vibhav Gogate 编，《第35届人工智能不确定性会议论文集》，《机器学习研究论文集》第115卷，第574–584页。PMLR，2020年7月22–25日。[52] Xuan Su、Jiaming Song、Chenlin Meng 和 Stefano Ermon。用于图像到图像转换的双重扩散隐式桥。载于第十一届国际学习表征会议，2023。[53] Alexis M. H. Teter、Abhishek Halder、Michael D. Schneider、Alexx S. Perloff、Jane Pratt、Conor M. Artman 和 Maria Demireva。控制仿射薛定谔桥与广义玻姆势。《IEEE 控制系统快报》，9:2453–2458，2025。[54] Alexis M. H. Teter、Wenqing Wang 和 Abhishek Halder。带二次状态代价的薛定谔桥可精确求解。《IEEE 自动控制汇刊》，71(5):2903–2917，2026。[55] Alexis M.H. Teter 和 Abhishek Halder。关于控制仿射薛定谔桥的霍普夫–科尔变换。《IEEE 自动控制汇刊》，第1–8页，2026。[56] Alexis MH Teter、Iman Nodozi 和 Abhishek Halder。概率兰伯特问题：与最优质量传输、薛定谔桥和反应扩散偏微分方程的联系。《SIAM 应用动力系统杂志》，24(1):16–43，2025。[57]Alexis MH Teter、Wenqing Wang 和 Abhishek Halder。韦尔演算与带二次状态代价的可精确求解薛定谔桥。载于《2024年第60届阿勒顿通信、控制与计算年会》，第1–8页。IEEE，2024。

[58] Tijmen Tieleman。讲座6.5-RMSProp：用梯度除以其近期幅值的运行平均值。*Coursera*：机器学习神经网络，4(2):26，2012。[59] Arash Vahdat、Karsten Kreis 和 Jan Kautz。潜在空间中的基于分数的生成建模。神经信息处理系统进展，34:11287–11302，2021。[60] C´edric Villani。最优传输专题，第58卷。美国数学会，2021。[61] Pascal Vincent。分数匹配与去噪自编码器之间的联系。神经计算，23(7):1661–1674，2011。[62] Igor G Vladimirov 和 Ian R Petersen。线性随机系统中的最小相对熵状态转移：连续时间情形。*arXiv* 预印本 *arXiv:1208.3981*，2012。[63] A Wakolbinger。1931年至1991年的薛定谔桥。载于第四届拉丁美洲概率与数理统计大会论文集，墨西哥城，第61–79页，1990。[64] Han Xiao、Kashif Rasul 和 Roland Vollgraf。Fashion-MNIST：用于机器学习算法基准测试的新型图像数据集。*arXiv* 预印本 *arXiv:1708.07747*，2017。[65] Kunio Yasue。随机变分法。《泛函分析杂志》，41(3):327–340，1981。[66] Vasil Yordanov。由量子力学随机最优控制原理推导狄拉克方程。《科学报告》，14(1):6507，2024。[67] Jean-Claude Zambrini。变分过程与力学的随机版本。《数学物理杂志》，27(9):2307–2330，1986。

Appendix A. Proof of Proposition 3.1

W我们证明问题 (2.6) 和问题 (3.3) 具有相同的最优值 e:

$$\inf_{v}\sup_{\phi:C_b(\mathbb{R}^d)} f_1(v)+f_2(v,\phi)=\inf_{v:X_v(1)\sim\rho_{\mathrm{tg}}} f_1(v).$$

这里,

$$\begin{aligned}
X_v(t) &:= Z+\int_0^t v\left(X_v(t),t\right)\mathrm{d}t,\\
f_1(v) &:= \int_0^1 \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\|v\left(X_v(t),t\right)\|^2+\frac{\sigma^4}{8}\left\|\nabla\log\rho_v\left(X_v(t),t\right)\right\|^2\right]\mathrm{d}t,\\
f_2(v,\phi) &:= \mathbb{E}\left[\phi\left(X_v(1)\right)\right]-\mathbb{E}\left[\phi(Y)\right],
\end{aligned}$$

其中 $\rho_v(\cdot,\ t)$ 表示 $X_v(t)$ 的密度。所有下确界均取遍使轨迹和目标函数定义良好的可容许速度场。

若 $X_v(1)\ \sim\ \rho_{\mathrm{tg}}$，则对每个 $\phi\in C_b(\mathbb{R}^d)$，均有 $f_2(v,\ \phi)\ =\ 0$ 。否则，由于有界连续函数能够区分概率测度，存在 $\phi_0\in C_b(\mathbb{R}^d)$ 使得$f_2(v,\ \phi_0)\ \neq\ 0$。如有必要，将 ϕ_0 替换为 $-\phi_0$，我们可以假设 $f_2(v,\ \phi_0)\ >\ 0$。根据线性,

$$f_2(v,\lambda\phi_0)=\lambda f_2(v,\phi_0)\longrightarrow+\infty\qquad\text{as }\lambda\to+\infty.$$

因此,

$$\sup_{\phi\in C_b(\mathbb{R}^d)} f_2(v,\phi)=\begin{cases}0, & X_v(1)\sim\rho_{\mathrm{tg}},\\ +\infty, & \text{otherwise.}\end{cases}$$

对 v 取下确界即可证明所述等式。

此外，假设（$v^*,\ \phi^*$）是 $L(v,\ \phi)\ :=\ f_1(v)+f_2(v,\ \phi)$ 的鞍点，其中 $f_1(v^*)\ <\ \infty$。鞍点不等式给出

$$L(v^*,\phi)\le L(v^*,\phi^*)\le L(v,\phi^*)\qquad\text{for all admissible } v \text{ and } \phi\in C_b(\mathbb{R}^d).$$

第一个不等式及上述刻画意味着 $X_{v^*}(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}}$：事实上，设 ϕ 是 $C_b(\mathbb{R}^d)$ 中的任意函数。那么， $\phi^* + \phi$ 和 $\phi^* - \phi$ 都属于 $C_b(\mathbb{R}^d)$。具体而言，由于 $\phi^* + \phi$ 通常并不是优化器 ϕ^*，

$$f_1(v^*) + f_2(v^*, \phi^* + \phi) \le f_1(v^*) + f_2(v^*, \phi^*),$$

这进一步意味着

$$\mathbb{E}\Big[\phi\left(X_{v^*}(1)\right)\Big] - \mathbb{E}\left[\phi(Y)\right] \le 0,$$

对 $\phi^* - \phi$ 应用与上文相同的论证，可得

$$\mathbb{E}\Big[\phi\left(X_{v^*}(1)\right)\Big] - \mathbb{E}\left[\phi(Y)\right] \ge 0.$$

因此，对于所有 $\phi \in C_b(\mathbb{R}^d)$，我们有

$$f_2(v^*, \phi) = \mathbb{E}\Big[\phi\left(X_{v^*}(1)\right)\Big] - \mathbb{E}\left[\phi(Y)\right] = 0,$$

这进一步表明 v^* 的可行性，即 $X_{v^*}(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}}$ 和

$$f_1(v^*) \ge \inf_{v: X_v(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}}} f_1(v). \tag{1.1}$$

对于任意可行的 v， $f_2(v^*, \phi^*)$ 和 $f_2(v, \phi^*)$ 均为零。因此，第二个不等式给出

$$f_1(v^*) \le f_1(v).$$

因此， v^* 满足约束问题，并且我们有

$$f_1(v^*) \le \inf_{v: X_v(1) \sim \rho_{\mathrm{tg}}} f_1(v). \tag{1.2}$$

结合 (1.1) 和 (1.2)，即可完成证明。 ■

Appendix B. Proof of Proposition 3.2

我们推导沿连续性方程所对应的轨迹演化的得分函数 $s = \nabla \log \rho$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (v\rho) = 0, \tag{2.1}$$

其特征轨迹满足

$$\mathrm{d}x_t = v(x_t, t)\,\mathrm{d}t. \tag{2.2}$$

假设 ρ 和 v 足够光滑，且 $\rho > 0$ 位于所考虑的区域内。全文中，我们采用以下雅可比约定

$$(\nabla v)_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j}.$$

展开（2.1）中的散度可得

$$\partial_t \rho(x,t) + (v \cdot \nabla \rho)(x,t) = -(\rho \nabla \cdot v)(x,t).$$

两边除以 ρ，可得

$$\partial_t \log \rho(x,t) + (v \cdot \nabla \log \rho)(x,t) = -(\nabla \cdot v)(x,t).$$

取空间梯度并令 $s = \nabla \log \rho$，得到

$$\partial_t s(x,t) + (\nabla s(x,t))^T v(x,t) = -(\nabla v(x,t))^T s(x,t) - (\nabla \nabla \cdot v)(x,t),$$

其中我们使用了

$$\nabla(v \cdot s) = (\nabla v)^T s + (\nabla s)^T v$$

将 x_t 代入得分函数 s的空间自变量中，再由 (2.2) 可得 $s(x_t, t)$ 关于 t 的全导数，因此

$$\frac{\mathrm{d}s(x_t, t)}{\mathrm{d}t} = -(\nabla v(x_t, t))^T s(x_t, t) - (\nabla \nabla \cdot v)(x_t, t),$$

这里用到了 $\nabla s = \nabla^2 \log \rho$的对称性。 ■

Appendix C. An additional numerical experiment with CelebA dataset

我们将所提出的方法应用于 CelebA 数据集 [35], ，该数据集包含超过 200,000 张尺寸为 178×218像素的三通道人脸图像，每张图像都标注了 40 个二元属性。我们使用 `Smiling`属性，将不微笑的人脸定义为源分布 ρ_{src}，将微笑的人脸定义为目标分布 ρ_{tg}。

对齐图像经过中心裁剪至 140×140 像素，并调整大小为 64×64，从而得到 $\mathbb{R}^{64\times64\times3} = \mathbb{R}^{12,288}$中的向量。为降低计算代价，我们遵循图像数据领域的成熟方法 [46, 27, 59]，在潜在空间中构造桥。具体而言，Stable Diffusion [46] 的预训练变分自编码器（VAE）将每张图像映射为维度为 $d = 4 \times 8 \times 8 = 256$的潜表示，并在其中训练网络$v_\theta$ 和 ϕ_ω。在整个训练过程中，编码器和解码器均保持冻结；解码器仅用于可视化潜轨迹 $X(t)$。与前面的实验一样，初始得分函数 $s(X(0),0)$ 预先通过去噪得分匹配进行学习，因为源分布 ρ_{src} 只能通过样本获取。

源样本与目标样本是非配对的：没有提供单张人脸之间的对应关系，其耦合由最小化目标函数决定。由于微笑在很大程度上独立于身份、姿态和背景，我们期望一个成功的桥接能够改变表情，同时保持这些特征不变。图 11 展示了来自两个分布的非配对样本，并以 VAE 重建的形式呈现（先编码再解码）。图 12 展示了从不微笑（ρ_{src}）到微笑（ρ_{tg}）人脸的学习变换。

Appendix D. Network architectures and training hyperparameters

由于 $\phi \in C_b(\mathbb{R}^d)$，我们将评论家网络设为以下形式

$$\phi_\omega(x) = \phi_{\max} \tanh\left(L_\phi h_\omega(x)/\phi_{\max}\right),$$

通过谱归一化， h_ω 1-Lipschitz [38], ，因此 $\|\phi_\omega\|_\infty \le \phi_{\max}$ ，且 Lipschitz 常数至多为 L_ϕ。在表1和表2中，我们给出了实验中使用的网络架构及其相关超参数。

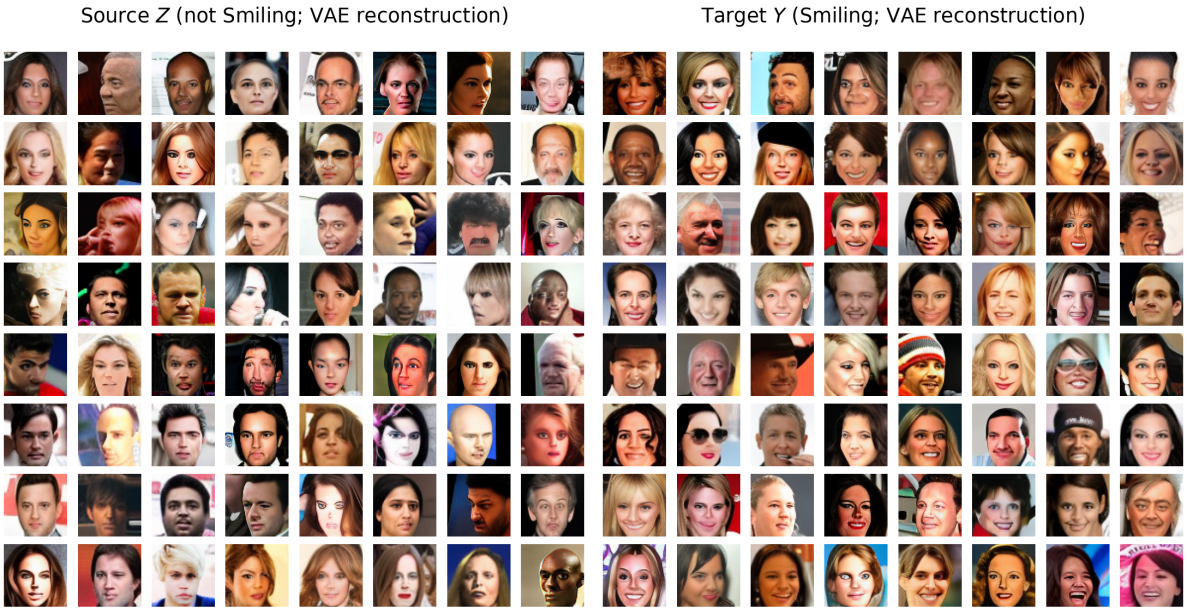

FIGURE 11. 左图：来自标记为 `non-smiling`(ρ_{src}) 的数据集的 64 个样本。
右图：来自标记为 `smiling` (ρ_{tg}) 的数据集的 64 个样本。

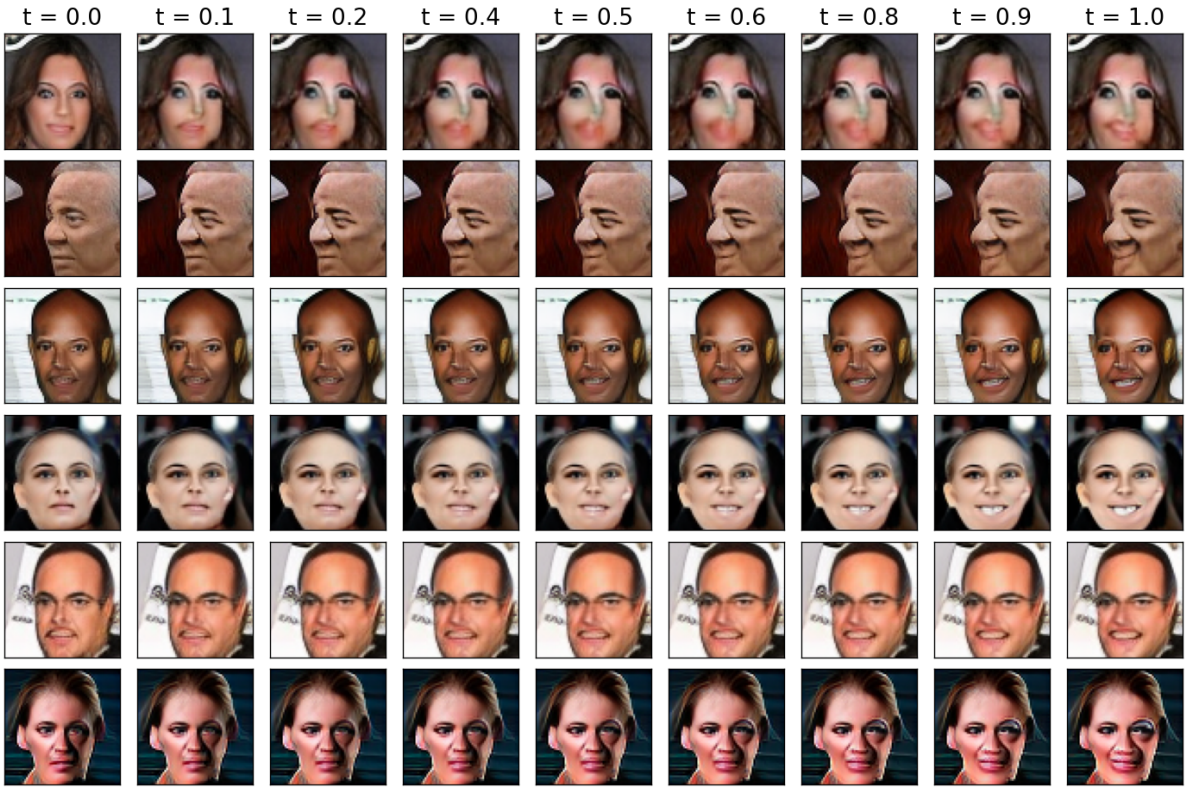

FIGURE 12. 变换过程 $X(t)$ 的选定时间切片。

TABLE 1. 网络架构和训练超参数。

	混合高斯分布	MNIST $9 \to 6$	MNIST $\mathcal{N}(0, I) \to 6$	时尚-MNIST	CelebA 微笑
v_θ					
网络类型	多层感知机				
层数 $\times$宽度	5×128	5×512	5×512	5×512	5×1024
激活函数	Sigmoid 线性单元（SiLU）				
学习率	5×10^{-5}	5×10^{-5}	5×10^{-5}	10^{-4}	5×10^{-5}
ϕ_ω					
网络类型	多层感知机				卷积型†
层数 $\times$宽度	3×128	3×512	3×512	3×512	–
激活函数	LeakyReLU（斜率 0.2）				
学习率	5×10^{-5}	5×10^{-5}	8×10^{-5}	10^{-4}	5×10^{-5}
界限 $\phi_{\max}$	180.0	6797.0	6797.0	394.7	48.6
Lipschitz L_ϕ	21.0	129.0	129.0	31.1	10.9
训练 v_θ 和 ϕ_ω					
批次大小 n	2000	200	200	200	256
时间步 N	10	64	64	64	64
预训练源评分 s_ψ					
层数 $\times$宽度	–	4×512	–	4×512	4×1024
激活函数	LeakyReLU（斜率为 0.2）				
学习率	–	10^{-4}	–	10^{-4}	3×10^{-4}

†见表2。

TABLE 2. CelebA 的卷积评论器，作用于潜变量 $z \in \mathbb{R}^{4\times8\times8}$.

层	卷积核、步幅、填充	输出形状	激活函数
输入 z	–	$4 \times 8 \times 8$	–
Conv	3×3, 1, 1	$64 \times 8 \times 8$	LeakyReLU (0.2)
Conv	4×4, 2, 1	$128 \times 4 \times 4$	LeakyReLU (0.2)
Conv	4×4, 2, 1	$256 \times 2 \times 2$	LeakyReLU (0.2)
展平 + 线性层	–	1	–