

CẢI THIỆN HÀM MỤC TIÊU SCORE FLOW MATCHING VỚI VẬN CHUYỂN TỐI ƯU

Nguyễn Quốc Thanh, Trần Thanh Bình

Khoa Khoa học ứng dụng, Trường Đại học Bách Khoa TP.HCM
nqthanh.sdh241@hcmut.edu.vn, ttbinh.sdh241@hcmut.edu.vn

TÓM TẮT— Score-Flow Matching (SFM) kết hợp Flow Matching (FM) và Score Matching (SM) nhằm tận dụng đồng thời động lực học toàn cục của trường vận tốc và tín hiệu hiệu chỉnh cục bộ từ gradient log-mật-độ. Tuy nhiên, SFM thường chịu ảnh hưởng bởi (i) bất ổn tối ưu do ước lượng score có phương sai lớn và (ii) suy giảm hình học trên các phân phối đa-mode khi đường đi xác suất gây “chéo nhau” trong không gian trạng thái. Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất SFM tăng cường bằng OT (OT-SFM): sử dụng minibatch entropic optimal transport (OT) coupling để ghép cặp giữa phân phối khởi đầu đơn giản và phân phối dữ liệu, từ đó cảm sinh một OT-Gaussian bridge path có hình học trơn hơn, giảm giao cắt và giúp trường vận tốc dễ học hơn. Trên nền OT-SFM, chúng tôi mở rộng hai cơ chế điều chuẩn Fisher đã đề xuất trước đây: OT-SFM-FFR (Full-Fisher Regularizer) và OT-SFM-PFR-VR (Projected Fisher Regularizer với giảm phương sai), nhằm đồng thời tăng ổn định tối ưu và nâng chất lượng khớp phân phối. Thực nghiệm trên dữ liệu mô phỏng 2D đa-mode cho thấy OT-SFM cải thiện ổn định và cho sai khác phân phối thấp hơn so với SFM chuẩn, đặc biệt trong các cấu hình hình học phi tuyến.

Từ khóa— Mô hình tạo sinh, Score Flow Matching, Flow Matching, vận chuyển tối ưu, Fisher regularization.

I. GIỚI THIỆU

Hai hướng tiếp cận chủ đạo trong mô hình sinh hiện đại là score-based (học $\nabla_x \log p_t(x)$) và flow-based (học trường vận tốc/véc-tơ ánh xạ các biên phân phối theo thời gian). Score-based diffusion/SDE cho chất lượng mẫu cao nhưng thường tốn nhiều bước mô phỏng; Flow Matching và Conditional Flow Matching cho phép huấn luyện “simulation-free” ổn định hơn thông qua hồi quy trường vận tốc mục tiêu. Score-Flow Matching (SFM) kết hợp hai nhánh này nhưng gặp nút thắt: ước lượng score đòi hỏi tính toán đạo hàm bậc hai (hoặc xấp xỉ Hutchinson) dễ gây nhiễu/variance; đồng thời, chất lượng học flow phụ thuộc mạnh vào đường đi xác suất (probability path) được lựa chọn. Trước đó, T. Nguyen và D. Le [1] đã đề xuất hai biến thể điều chuẩn Fisher: SFM-FFR và SFM-PFR-VR, nhằm giảm bất ổn tối ưu và cải thiện “geometric fit” của phân phối mô hình. Tuy nhiên, một hạn chế quan trọng vẫn tồn tại: đường đi Gaussian/linear bridge với ghép cặp ngẫu nhiên giữa nhiễu và dữ liệu có thể gây crossing (các quỹ đạo “chéo” nhau), khiến trường vận tốc khó học và dẫn đến méo hình học trong các phân phối đa-mode.

Đóng góp chính:

- Chúng tôi đề xuất SFM tăng cường bằng OT (OT-SFM): dùng minibatch entropic OT để tạo coupling giữa p_0 (nhiều) và p_1 (dữ liệu), từ đó định nghĩa OT-Gaussian bridge path giảm chéo nhau.
- Mở rộng điều chuẩn Fisher thành OT-SFM-FFR và OT-SFM-PFR-VR.
- Thực nghiệm 2D cho thấy OT-SFM cải thiện độ ổn định và metrics (MMD/SWD/Energy) so với SFM không điều chuẩn trong nhiều cấu hình hình học phi tuyến/đa-mode.

II. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU

Trong các mô hình tạo sinh hiện đại, hai hướng tiếp cận chủ đạo là diffusion/score-based và flow-based. Score matching là một hướng học mô hình mật độ không chuẩn hoá bằng cách khớp score $\nabla_x \log p_t(x)$ thông qua Fisher divergence, tránh phải tính hằng số chuẩn hoá; công thức cổ điển của Hyvärinen đặt nền tảng lý thuyết và thực hành cho nhóm phương pháp này [2]. Trong bối cảnh mô hình sinh hiện đại, score được sử dụng như trường gradient điều khiển các động lực học ngược thời gian trong khuôn khổ SDE, dẫn đến họ mô hình score-based/diffusion có chất lượng sinh mẫu cao và lý thuyết chặt chẽ [4]. Tuy nhiên, score matching “đúng” thường cần tính vết Jacobian/divergence; do đó, các biến thể dùng phép chiếu ngẫu nhiên như sliced score matching giúp mở rộng quy mô bằng ước lượng vết theo kiểu Hutchinson và giảm chi phí tính toán [3]. Song song với score-based methods, Continuous Normalizing Flows (CNFs) học phép biến đổi liên tục dựa trên ODE. Gần đây, Flow Matching (FM) đề xuất cách huấn luyện CNFs “simulation-free” bằng hồi quy trường vận tốc mục tiêu trên các đường dẫn xác suất có điều kiện (conditional probability paths), đem lại tính ổn định và khả năng mở rộng rất mạnh [5]. Các khung hợp nhất như nội suy ngẫu nhiên (Stochastic Interpolants) chỉ ra cách nhìn thống nhất giữa flow (ODE) và diffusion (SDE) bằng cách đặc trưng hoá drift/score như nghiệm tối ưu của các bài toán bình phương tối thiểu, đồng thời tạo cầu nối tới các mô hình cầu Schrödinger [6]. Ngoài ra, Rectified Flow nhấn mạnh việc học các quỹ đạo “thẳng và nhanh” giữa hai phân phối, cho phép mô phỏng hiệu quả và có liên hệ trực tiếp tới tối ưu hoá chi phí vận chuyển [7]. Optimal Transport cung cấp hình học tự nhiên trên không gian phân phối xác suất và trở thành công cụ nền tảng trong học máy hiện đại, đặc biệt nhờ các phương pháp giải xấp xỉ quy mô lớn. Entropic OT và Sinkhorn algorithm cho phép tính OT hiệu quả bằng matrix scaling, tạo ra các khoảng cách/độ đo khả dụng trong thực nghiệm [8]. Tổng quan hệ thống và các ứng dụng (từ thị giác máy tính tới học máy) được trình bày đầy đủ

trong chuyên khảo của Peyré & Cuturi [9]. Trong mô hình sinh, OT xuất hiện từ góc nhìn khoảng cách Wasserstein và các biến thể đối kháng, tiêu biểu là Wasserstein GAN giúp cải thiện ổn định học và giảm mô hình sụp đổ (mode collapse) trong nhiều thiết lập [11]. Một nhánh khác phân tích mô hình sinh như bài toán OT giữa phân phối dữ liệu và phân phối mô hình, làm rõ vai trò của encoder/ probabilistic coupling trong các mô hình có biến ẩn [12]. Schrödinger bridge (SB) có thể xem như một biến thể “OT có nhiễu/ entropy” (entropic OT trong không gian đường đi), và đã được khai thác để cải thiện/ diễn giải các mô hình diffusion/ score-based. Đặc biệt, Diffusion Schrödinger Bridge (DSB) kết nối SB với score matching và đưa ra thuật toán dựa trên ước lượng score để giải bài toán bridge, cho phép kiểm soát tốt hơn quỹ đạo và/ hoặc tăng tốc trong một số bối cảnh [10]. Những mối liên hệ SB-flow-diffusion này cũng được thảo luận trong các khung hợp nhất như nội suy ngẫu nhiên (Stochastic Interpolants) [6]. Trên nền FM/SFM và các biến thể score matching (exact hoặc VR), bài báo này phát triển hướng SFM được tăng cường bởi OT bằng cách đưa OT vào coupling/ path (thay vì “cắm trực tiếp” vào công thức score), nhằm giảm crossing và cải thiện hình học của quỹ đạo khi học trường vận tốc. Đồng thời, nghiên cứu kế thừa và mở rộng các biến thể điều chuẩn Fisher đã đề xuất trước đó (FFR, PFR-VR) trong công trình trước đây [1] để nâng ổn định tối ưu và giảm phương sai ước lượng divergence.

III. CƠ SỞ LÝ THUYẾT

Phần này trình bày nền tảng toán học cho phương pháp đề xuất: (i) nền tảng cho mô hình Score-Flow Matching (SFM); (ii) học trường score theo thời gian thông qua các cơ chế điều chuẩn Fisher gồm FFR (Full Fisher Regularization) và PFR-VR (Projected Fisher Regularization with Variance Reduction); và (iii) cơ chế ghép cặp endpoint dựa trên Optimal Transport (OT) nhằm thay đổi phân phối huấn luyện trên các biên p_t .

A. SCORE-FLOW MATCHING (SFM)

Xét không gian \mathbb{R}^d với phân phối dữ liệu đích p_{data} và một phân phối khởi đầu đơn giản p_0 (thường chọn Gaussian chuẩn). Mục tiêu là xây dựng một họ phân phối theo thời gian $\{p_t\}_{t \in [0,1]}$ sao cho $p_0 = p_0$ và $p_1 = p_{\text{data}}$.

Giả sử tồn tại một trường véc-tơ phụ thuộc thời gian $u_t: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ điều khiển động lực xác định theo ODE:

$$\frac{dX_t}{dt} = u_t(X_t), \quad X_0 \sim p_0 \quad (1)$$

Khi X_t tuân theo (1), mật độ p_t của X_t phải thỏa **phương trình liên tục** (continuity equation), thể hiện bảo toàn xác suất dưới dòng chảy do u_t tạo ra:

$$\partial_t p_t(x) + \nabla \cdot (p_t(x) u_t(x)) = 0 \quad (2)$$

Để đưa (2) về các mục tiêu học máy khả tích, ta xét một **đường dẫn có điều kiện** được chỉ mục bởi biến ẩn z .

Định nghĩa 2.1 (Đường dẫn xác suất có điều kiện). Một họ phân phối $\{p_t(\cdot | z)\}_{t \in [0,1]}$ được gọi là đường dẫn có điều kiện nếu phân phối biên được sinh bởi phép chập theo z :

$$p_t(x) = \int p_t(x | z) p(z) dz \quad (3)$$

Trong bài này, chúng tôi sử dụng **đường dẫn Gaussian có điều kiện** với các hàm $\alpha(t), \beta(t)$ trơn theo t :

$$X_t | z \sim \mathcal{N}(\alpha(t)z, \beta(t)^2 I) \Leftrightarrow X_t = \alpha(t)z + \beta(t)\varepsilon, \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, I) \quad (4)$$

Lựa chọn α, β được đặt để khớp điều kiện biên (tại $t = 0, \alpha(0) = 0, \beta(0) = 1$ và $\alpha(1) = 1, \beta(1) = 0$ khi $t = 1$, trong một cấu hình phổ biến), từ đó p_0 và p_{data} được nối bởi $\{p_t\}$.

Giả sử với mỗi z tồn tại một trường vận tốc có điều kiện $u_t^*(x | z)$ sao cho $p_t(x | z)$ thỏa phương trình liên tục có điều kiện:

$$\partial_t p_t(x | z) + \nabla \cdot (p_t(x | z) u_t^*(x | z)) = 0 \quad (5)$$

Khi đó, trường vận tốc biên có thể biểu diễn dưới dạng kỳ vọng có điều kiện:

$$u_t(x) = \mathbb{E}[u_t^*(x | z) | X_t = x] \quad (6)$$

Dưới các điều kiện trơn đều cho phép hoán đổi đạo hàm và tích phân, (6) đảm bảo rằng p_t trong (3) thỏa (2). Nói cách khác, mô tả động lực ở mức có điều kiện đủ để suy ra động lực ở mức biên.

Ưu điểm quan trọng của đường dẫn Gaussian (4) là cả **vector field có điều kiện** và **score có điều kiện** đều có dạng khép kín.

- **Score có điều kiện.** Vì $p_t(x | z)$ là Gaussian, ta có

$$\nabla_x \log p_t(x | z) = -\frac{x - \alpha(t)z}{\beta(t)^2} \quad (7)$$

Biểu thức (7) cho thấy score có điều kiện đóng vai trò như một “denoiser” tuyến tính theo thành phần nhiễu; score biên $\nabla_x \log p_t(x)$ thu được bằng phép chập theo z trong (3).

- **Vector field có điều kiện.** Với $X_t = \alpha(t)z + \beta(t)\varepsilon$, tồn tại công thức đóng cho $u_t^*(x | z)$ (tuyến tính theo x và z), cho phép huấn luyện bằng hồi quy MSE mà không cần giải ODE trong quá trình tối ưu.

Bên cạnh động lực xác định (ODE), ta có thể xét động lực ngẫu nhiên bằng cách bổ sung khuếch tán:

$$dX_t = b_t(X_t) dt + \sigma_t dW_t \quad (8)$$

trong đó W_t là chuyển động Brown. Mật độ của nghiệm SDE tuân theo phương trình Fokker–Planck; đặc biệt, khi $\sigma_t \equiv 0$ thì (8) suy biến về ODE và nghiệm mật độ quay về phương trình liên tục (2).

Trong SFM, ta dùng score để “hướng” động lực ngẫu nhiên, tạo thành SDE kiểu Langevin-guided:

$$dX_t = (u_\theta(X_t, t) + 1/2 \sigma_t^2 s_\phi(X_t, t)) dt + \sigma_t dW_t \quad (9)$$

Hàm mục tiêu SFM

Thay vì tối ưu trực tiếp các mục tiêu biên (khó khả tích), SFM tối ưu các mục tiêu **có điều kiện** nhờ các đích đóng của đường dẫn Gaussian.

- **Conditional Flow Matching (CFM).** Gọi $u_\theta(x, t)$ là mạng xấp xỉ trường vận tốc. Ta khớp nó với vector field có điều kiện mục tiêu $u_t^*(x | z)$ bằng:

$$\mathcal{C}_{\text{CFM}}(\theta) = \mathbb{E}[\|u_\theta(x, t) - u_t^*(x | z)\|^2] \quad (10)$$

- **Conditional Score Matching (CSM).** Gọi $s_\phi(x, t)$ là mạng score. Ta khớp nó với score có điều kiện $\nabla_x \log p_t(x | z)$ bằng:

$$\mathcal{C}_{\text{CSM}}(\phi) = \mathbb{E}[\|s_\phi(x, t) - \nabla_x \log p_t(x | z)\|^2] \quad (11)$$

Hai loss (10)–(11) đồng quy (tới hằng số/đổi biến kỹ thuật) với các loss biên tương ứng, nhưng thuận lợi về mặt thực nghiệm vì các mục tiêu có dạng đóng và có thể lấy mẫu trực tiếp từ đường dẫn.

Định nghĩa 2.2 (Mục tiêu Score–Flow Matching). Mục tiêu tổng của SFM được định nghĩa là:

$$\mathcal{C}_{\text{SFM}}(\theta, \phi) = \mathcal{C}_{\text{CFM}}(\theta) + \lambda \mathcal{C}_{\text{CSM}}(\phi), \quad \lambda > 0 \quad (12)$$

Cơ chế lấy mẫu sau huấn luyện

Sau khi tối ưu (θ, ϕ) , có hai cơ chế lấy mẫu chuẩn:

- **ODE xác suất (probability flow ODE):**

$$\frac{dX_t}{dt} = u_\theta(X_t, t), \quad X_0 \sim p_0 \quad (13)$$

- **SDE có hướng score (Langevin-guided):**

$$dX_t = (u_\theta(X_t, t) + 1/2 \sigma_t^2 s_\phi(X_t, t)) dt + \sigma_t dW_t \quad (14)$$

Về mặt lý thuyết, khi mô hình hoàn hảo và mô phỏng liên tục chính xác, các lựa chọn $\sigma_t \geq 0$ thích hợp có thể dẫn đến cùng họ phân phối biên $\{p_t\}$. Trong triển khai, ta thường dùng Euler để xấp xỉ ODE và Euler–Maruyama để xấp xỉ SDE.

B. FISHER REGULARIZATION CHO SFM: FFR VÀ PFR-VR

FFR. Xét mô hình mật độ chưa chuẩn hoá $q_\phi(x, t)$ (không cần biết hằng số chuẩn hoá). Gọi score của mô hình trên biên t là $q_\phi(x, t) = \nabla_x \log q_\phi(x, t)$. Mục tiêu là học $s_\phi(x, t)$ xấp xỉ score đúng của biên, tức $\nabla_x \log q_t(x)$. Theo chuẩn Fisher–Hyvärinen, có thể đưa bài toán khớp score về một hàm mục tiêu chỉ phụ thuộc vào s_ϕ (tới một hằng số không phụ thuộc ϕ) với các giả thiết trơn và điều kiện biên phù hợp.

$$R_{\text{FFR}}(\phi) = E_{t \sim U(0,1), x \sim p_t} \left[\frac{1}{2} \|s_\phi(x, t)\|^2 + \nabla \cdot s_\phi(x, t) \right] \quad (15)$$

Trong thực hành, dữ liệu huấn luyện cho regularizer này được lấy mẫu từ các biên của đường đi xác suất. Ở FFR, hạng divergence $\nabla \cdot s_\phi$ thường được tính trực tiếp bằng vi phân tự động theo từng toạ độ (khi d nhỏ), không cần xấp xỉ ngẫu nhiên.

Dưới các giả thiết biên chuẩn, tồn tại hằng số C không phụ thuộc ϕ sao cho:

$$R_{\text{FFR}}(\phi) = E_{t, x \sim p_t} \left[\frac{1}{2} \|s_\phi(x, t)\|^2 \right] + C \quad (16)$$

PFR-VR: trong không gian chiều cao, việc tính divergence chính xác có thể tốn kém. Ta sử dụng đồng nhất thức hutchinson để ước lượng vết theo chiều ngẫu nhiên $v \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ (hoặc rademacher), từ đó thay divergence toàn phần bởi một ước lượng không chệch.

$$R_{\text{PFR}}(\phi) = E_{t, x, v} \left[\frac{1}{2} \|s_\phi(x, t)\|^2 + v^T \nabla_x (v^T s_\phi(x, t)) \right] \quad (17)$$

$$R_{\text{PFR-VR}}(\phi) = E_{t, x} \left[\frac{1}{2} \|s_\phi(x, t)\|^2 + \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K v_k^T \nabla_x (v_k^T s_\phi(x, t)) \right] \quad (18)$$

Trong triển khai, hạng $v^T \nabla_x (v^T s_\phi)$ được tính bằng tích Hessian–vector thông qua autograd, không cần dựng Hessian đầy đủ; khi K tăng, phương sai giảm xấp xỉ theo $1/K$.

C. OPTIMAL TRANSPORT (OT) VÀ ENTROPIC OT

Optimal Transport nghiên cứu cách ghép cặp (coupling) giữa hai phân phối sao cho chi phí vận chuyển kỳ vọng là nhỏ nhất. Trong bối cảnh minibatch, OT cung cấp một kế hoạch ghép cặp giúp các cặp điểm gần nhau theo hình học, hữu ích để giảm hiện tượng crossing khi nội suy giữa hai biên.

$$\pi^* = \arg \min_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} E_{(x, y) \sim \pi} [c(x, y)] \quad (19)$$

Để tính toán hiệu quả, entropic regularization thêm một hạng entropy/KL vào bài toán OT, dẫn tới nghiệm có dạng ổn định và có thể giải bằng lặp Sinkhorn.

$$\pi^*_{\varepsilon} = \arg \min_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \langle \pi, C \rangle + \varepsilon KL(\pi \parallel \mu \otimes \nu) \quad (20)$$

IV. PHƯƠNG PHÁP ĐỀ XUẤT

Trong Score-Flow Matching (SFM), chất lượng học trường vận tốc và độ ổn định lấy mẫu phụ thuộc mạnh vào cách xây dựng đường dẫn xác suất nối từ phân phối khởi đầu đơn giản p_0 đến phân phối dữ liệu p_{data} . Khi các điểm $x_0 \sim p_0$ và $x_1 \sim p_{\text{data}}$ được ghép cặp ngẫu nhiên (independent coupling), các quỹ đạo nội suy dễ giao cắt (crossing), nhất là với phân phối đa-mode; điều này làm trường vận tốc mục tiêu trở nên đa trị về mặt trung bình và gây bất ổn khi tối ưu. Chúng tôi ghép cặp ngẫu nhiên (random coupling) bằng ghép cặp dựa trên Optimal Transport (OT) ở mức minibatch để ghép các cặp điểm endpoints gần nhau theo hình học, từ đó làm mượt đường đi, giảm crossing và giúp trường vận tốc trung bình dễ học hơn.

A. GHÉP CẶP MINIBATCH ENTROPIC OT VÀ ĐƯỜNG DẪN OT-GAUSSIAN BRIDGE

Cho hai minibatch độc lập $\{x_0^i\}_{i=1}^B \sim p_0$ và $\{x_1^j\}_{j=1}^B \sim p_{\text{data}}$. Ta định nghĩa ma trận chi phí vận chuyển bình phương Euclid:

$$C_{ij} = \|x_0^i - x_1^j\|_2^2, \quad i, j = 1, \dots, B. \quad (21)$$

Kế hoạch ghép cặp tối ưu được tìm bằng bài toán OT entropic (entropic regularization) trên đa diện vận chuyển $\Pi(a, b) = \{P \in \mathbb{R}_+^{B \times B} : P\mathbf{1} = a, P^T\mathbf{1} = b\}$ với hai biên đều $a = b = 1/B \mathbf{1}_B$:

$$P^* = \arg \min_{P \in \Pi(a, b)} \langle P, C \rangle + \varepsilon_{\text{OT}} KL(P \parallel ab^T), \quad \varepsilon_{\text{OT}} > 0. \quad (22)$$

Nghiệm của bài toán entropic có dạng nhân ma trận (matrix-scaling) và được tính hiệu quả bằng lặp Sinkhorn. Đặt nhân Gibbs $K = \exp(-C/\varepsilon_{\text{OT}})$ (lấy theo từng phần tử) và hai véc-tơ tỉ lệ $u, v \in \mathbb{R}_+^B$, khởi tạo $v^{(0)} = \mathbf{1}_B$. Tại mỗi vòng lặp ℓ :

$$u^{(\ell+1)} = \frac{a}{K v^{(\ell)}}, \quad v^{(\ell+1)} = \frac{b}{K^T u^{(\ell+1)}}, \quad (23)$$

trong đó phép chia hiểu theo từng phần tử. Sau L vòng lặp, kế hoạch vận chuyển xấp xỉ là:

$$P^* = \text{diag}(u^{(L)}) K \text{diag}(v^{(L)}). \quad (24)$$

Chuẩn hoá P^* thành phân phối rời rạc trên các chỉ số (i, j) ta thu được OT-coupling π_{OT} ; lấy mẫu cặp endpoint theo:

$$(x_0, x_1) \sim \pi_{\text{OT}}, \quad \Pr[(i, j)] = B P_{ij}^*. \quad (25)$$

Từ mỗi cặp endpoint $(x_0, x_1) \sim \pi_{\text{OT}}$, ta định nghĩa đường dẫn cầu Gaussian có điều kiện (OT-Gaussian bridge) bằng nội suy tuyến tính cộng nhiều đẳng hướng:

$$x_t = (1-t)x_0 + tx_1 + \sigma \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, I), \quad t \sim \mathcal{U}(0, 1). \quad (26)$$

Kỳ vọng có điều kiện (quỹ đạo trung bình) và đạo hàm theo thời gian của nó là:

$$\mu_t \triangleq \mathbb{E}[x_t | x_0, x_1] = (1-t)x_0 + tx_1, \quad \dot{\mu}_t = \frac{d\mu_t}{dt} = x_1 - x_0. \quad (27)$$

Do nhiễu có phương sai cố định, mật độ có điều kiện của x_t là Gaussian:

$$p_t(x | x_0, x_1) = \mathcal{N}(x; \mu_t, \sigma^2 I). \quad (28)$$

Hai đại lượng đích cho việc huấn luyện đều có dạng đóng. Trường vận tốc có điều kiện (theo nghĩa quỹ đạo trung bình) bằng đúng véc-tơ dịch chuyển giữa hai endpoint:

$$u_t(x | x_0, x_1) = \dot{\mu}_t = x_1 - x_0, \quad (29)$$

còn score có điều kiện là hàm tuyến tính của phần dư so với trung bình:

$$\nabla_x \log p_t(x | x_0, x_1) = -\frac{x - \mu_t}{\sigma^2}. \quad (30)$$

Theo lập luận chấp biên (marginalization), trường vận tốc và score ở mức biên thu được dưới dạng kỳ vọng có điều kiện trên đường đi:

$$u_t(x) = \mathbb{E}[x_1 - x_0 | x_t = x], \quad s_t(x) = \mathbb{E}\left[-\frac{x - \mu_t}{\sigma^2} \mid x_t = x\right]. \quad (31)$$

Vai trò của OT thể hiện ở đây: vì π_{OT} cực tiểu hoá chi phí $\mathbb{E}_\pi \|x_1 - x_0\|^2$, kỳ vọng độ dài quỹ đạo giảm, các véc-tơ dịch chuyển $x_1 - x_0$ trở nên ít xung đột hơn trên những vùng x_t chồng lấn, nhờ đó hàm trung bình $u_t(x)$ ít đa trị và dễ hội quy hơn so với independent coupling. Đồng thời, do hai biên của π_{OT} vẫn là p_0 và p_{data} , các phân phối biên $\{p_t\}$ tại $t = 0, 1$ được bảo toàn, nên việc thay coupling không làm sai lệch bài toán sinh mẫu mà chỉ thay đổi phân phối huấn luyện trên đường dẫn.

B. HÀM MỤC TIÊU HUẤN LUYỆN: OT-SFM-FFR VÀ OT-SFM-PFR

Trên nền OT-coupling và OT-bridge ở trên, ta huấn luyện đồng thời nhánh flow u_θ và nhánh score s_ϕ . Nhánh flow được học bằng hồi quy bình phương tối thiểu trường vận tốc đích (OT-Conditional Flow Matching):

$$\mathcal{L}_{OT-CFM}(\theta) = \mathbb{E}_{t, (x_0, x_1) \sim \pi_{OT}, \varepsilon} [\|u_\theta(x_t, t) - (x_1 - x_0)\|^2]. \quad (32)$$

Nhánh score được học bằng Conditional Score Matching với đích là score có điều kiện dạng đóng:

$$\mathcal{L}_{OT-CSM}(\phi) = \mathbb{E}_{t, (x_0, x_1), \varepsilon} [\|s_\phi(x_t, t) + \sigma^{-2}(x_t - \mu_t)\|^2]. \quad (33)$$

Để tăng ổn định và bám score đúng của biên, ta bổ sung điều chuẩn Fisher. Biến thể Full-Fisher Regularizer (FFR) dùng đồng nhất thức Fisher–Hjv arinen với hạng divergence tính trực tiếp:

$$\mathcal{R}_{FFR}(\phi) = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1), x \sim p_t} [1/2 \|s_\phi(x, t)\|^2 + \nabla \cdot s_\phi(x, t)]. \quad (34)$$

Trong không gian chiều cao, hạng divergence được thay bằng ước lượng Hutchinson theo K hướng chiếu ngẫu nhiên $v_k \sim \mathcal{N}(0, I)$, cho biến thể giảm phương sai (PFR-VR):

$$\mathcal{R}_{PFR-VR}(\phi) = \mathbb{E}_{t, x} [1/2 \|s_\phi(x, t)\|^2 + 1/K \sum_{k=1}^K v_k^T \nabla_x (v_k^T s_\phi(x, t))], \quad (35)$$

trong đó tích Hessian–véc-tơ $v_k^T \nabla_x (v_k^T s_\phi)$ được tính bằng vi phân tự động mà không cần dựng Hessian đầy đủ; khi K tăng, phương sai ước lượng giảm xấp xỉ theo $1/K$. Tổng hợp lại, hai phương pháp đề xuất tương ứng với hai hàm mục tiêu:

$$\mathcal{C}_{OT-SFM-FFR}(\theta, \phi) = \mathcal{L}_{OT-CFM}(\theta) + \lambda \mathcal{L}_{OT-CSM}(\phi) + \gamma \mathcal{R}_{FFR}(\phi), \quad (36)$$

$$\mathcal{C}_{OT-SFM-PFR-VR}(\theta, \phi) = \mathcal{L}_{OT-CFM}(\theta) + \lambda \mathcal{L}_{OT-CSM}(\phi) + \gamma \mathcal{R}_{PFR-VR}(\phi), \quad (37)$$

với $\lambda > 0$ cân bằng giữa nhánh flow và nhánh score, còn $\gamma > 0$ kiểm soát cường độ điều chuẩn Fisher. Hai phương pháp chia sẻ cùng cơ chế OT-augmented coupling/path để cải thiện nhánh flow, và chỉ khác nhau ở dạng điều chuẩn nhánh score: FFR tính divergence toàn phần (phù hợp chiều thấp), còn PFR-VR dùng ước lượng chiếu giảm phương sai (phù hợp chiều cao). Thủ tục huấn luyện hoàn chỉnh được tóm tắt trong Thuật toán 1.

Thuật toán 1. Huấn luyện OT-SFM (OT-SFM-FFR / OT-SFM-PFR-VR)

Đầu vào: phân phối dữ liệu p_{data} ; phân phối khởi đầu p_0 ; cỡ batch B ; tham số entropic ε_{OT} ; số vòng Sinkhorn L ; độ lệch nhiễu σ ; trọng số λ, γ ; số hướng chiếu K ; tốc độ học η ; số epoch E .

Đầu ra: tham số mạng flow θ và mạng score ϕ .

- 1: Khởi tạo tham số θ, ϕ
- 2: for epoch = 1 ... E do
- 3: Lấy minibatch $\{x_0^i\} \sim p_0$ và $\{x_1^i\} \sim p_{data}$, $i, j = 1 \dots B$
- 4: Tính ma trận chi phí $C_{ij} = \|x_0^i - x_1^j\|^2$
- 5: $K \leftarrow \exp(-C / \varepsilon_{OT})$; $u \leftarrow \mathbf{1}_B$; $v \leftarrow \mathbf{1}_B$
- 6: for $\ell = 1 \dots L$ do ▷ lặp Sinkhorn
- 7: $u \leftarrow a \oslash (Kv)$; $v \leftarrow b \oslash (K^T u)$
- 8: end for
- 9: $P^* \leftarrow \text{diag}(u) \cdot K \cdot \text{diag}(v)$; chuẩn hoá thành π_{OT}
- 10: Lấy cặp endpoint $(x_0, x_1) \sim \pi_{OT}$
- 11: Lấy $t \sim U(0,1)$, $\varepsilon \sim N(0, I)$
- 12: $x_t \leftarrow (1-t)x_0 + tx_1 + \sigma\varepsilon$; $\mu_t \leftarrow (1-t)x_0 + tx_1$
- 13: Đích vận tốc: $u^* \leftarrow x_1 - x_0$; đích score: $s^* \leftarrow -(x_t - \mu_t) / \sigma^2$
- 14: $L_{CFM} \leftarrow \|u_\theta(x_t, t) - u^*\|^2$; $L_{CSM} \leftarrow \|s_\phi(x_t, t) - s^*\|^2$
- 15: if dùng FFR then $R \leftarrow 1/2 \|s_\phi\|^2 + \nabla \cdot s_\phi$
- 16: else $R \leftarrow 1/2 \|s_\phi\|^2 + (1/K) \sum_k v_k^T \nabla_x (v_k^T s_\phi)$ ▷ PFR-VR
- 17: end if
- 18: $C \leftarrow L_{CFM} + \lambda \cdot L_{CSM} + \gamma \cdot R$
- 19: $(\theta, \phi) \leftarrow \text{Adam}(\nabla_{\{\theta, \phi\}} C, \eta)$ ▷ cập nhật tham số
- 20: end for
- 21: return θ, ϕ

V. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ BÀN LUẬN

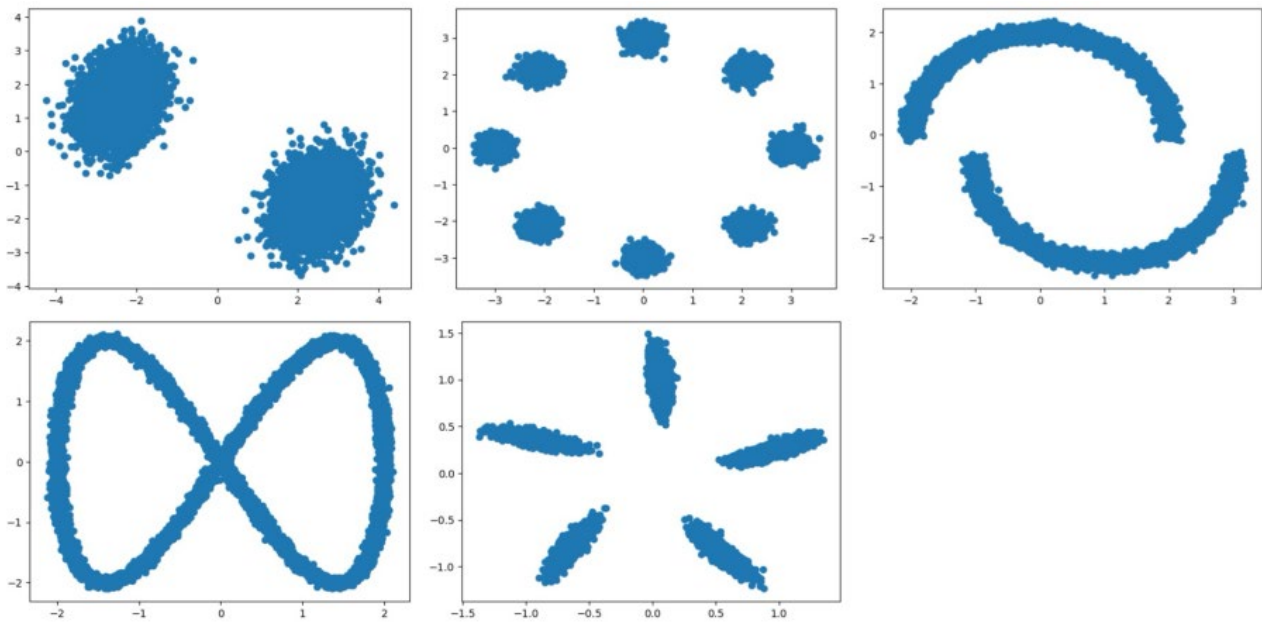
A. THIẾT LẬP THÍ NGHIỆM VÀ TIÊU CHÍ ĐÁNH GIÁ

Chúng tôi tiến hành đánh giá định lượng trên 5 bộ dữ liệu 2D tổng hợp (ký hiệu lv1–lv5) có độ phức tạp tăng dần: lv1 (hai Gaussian đối xứng), lv2 (8 Gaussian phân bố theo vòng tròn – đa mode mạnh), lv3 (two-moons), lv4 (dạng “vô cực” có tự giao), và lv5 (dạng “bông hoa” nhiều nhánh). Mỗi phương pháp được chạy nhiều lần độc lập và báo cáo theo dạng giá trị trung bình \pm độ lệch chuẩn.

Chúng tôi huấn luyện và đánh giá mô hình trên bộ dữ liệu tổng hợp 2D Lv5_Flower (10,000 mẫu). Mỗi cấu hình sinh 2,000 mẫu để tính các chỉ số MMD, SWD (256 projections) và Energy Distance.

Trong toàn bộ thí nghiệm, hệ số cân bằng giữa hai thành phần loss của SFM được cố định $\lambda = 0.1$ và số hướng chiếu/ước lượng cho biến thể giảm phương sai được cố định $K = 1$. Huấn luyện dùng Adam với learning rate 10^{-3} , chạy 1000 epochs, và lặp lại $n_{\text{runs}} = 3$ để báo cáo mean \pm std.

Đối với thiết lập OT, chúng tôi dùng entropic OT với $\epsilon_{\text{OT}} = 0.05$, 50 vòng lặp Sinkhorn, và OT-Gaussian bridge với $\sigma = 0.1$. Sampling theo thời gian rời rạc trên $[0,1]$ với 100 bước.



Hình 1. Dữ liệu thực nghiệm

Các phương pháp so sánh gồm: FM, SFM, SFM-FFR, SFM-PFR-VR, và hai biến thể đề xuất OT-SFM-FFR, OT-SFM-PFR-VR. Trong đó, điểm khác biệt cốt lõi của nhóm “OT-” là thay random coupling bằng OT coupling để sinh cặp endpoint (x_0, x_1) , từ đó thay đổi phân phối huấn luyện trên toàn bộ đường dẫn $\{p_t\}$ phục vụ huấn luyện flow và trường score/điều chuẩn.

Chất lượng mẫu sinh được đánh giá bằng ba thước đo khoảng cách giữa phân phối mẫu sinh và mẫu thật: MMD, SWD, và ED (Energy Distance). Với cả ba chỉ số, giá trị càng nhỏ càng tốt, phản ánh mức độ khớp phân phối cao hơn.

B. KẾT QUẢ ĐỊNH LƯỢNG VÀ PHÂN TÍCH

Kết quả thực nghiệm cho thấy hiệu năng của các phương pháp phụ thuộc mạnh vào đặc trưng hình học của dữ liệu, đặc biệt là mức độ đa mode và phi tuyến của các phân phối trung gian.

Trên lv1 (hai Gaussian đối xứng), FM đạt kết quả tốt nhất đồng thời trên cả ba thước đo (MMD 0.001984 ± 0.001661 , SWD 0.174851 ± 0.057914 , ED 0.004141 ± 0.000992). Các biến thể dựa trên SFM (kể cả có OT) không cải thiện mà có xu hướng suy giảm, nhất là ở SWD và ED. Điều này phù hợp với trực giác: lv1 có cấu trúc đơn giản, đường vận chuyển “prior \rightarrow data” gần tuyến tính và ít xung đột mode; vì vậy hồi quy trường vận tốc trong FM đã đủ chính xác, trong khi việc bổ sung trường score và điều chuẩn Fisher có thể làm bài toán tối ưu hóa “dư ràng buộc”, dẫn đến hội tụ kém hoặc tăng dao động.

Ngược lại, trên các bộ dữ liệu phức tạp hơn (lv2–lv5), hai biến thể đề xuất có gắn OT thể hiện lợi thế rõ rệt, đặc biệt khi kết hợp PFR-VR. Trên lv2 (8 Gaussian trên vòng tròn – đa mode mạnh), OT-SFM-PFR-VR đạt tốt nhất trên cả ba chỉ số (MMD 0.018610 ± 0.008937 , SWD 0.179044 ± 0.017773 , ED 0.008226 ± 0.003067), vượt trội so với các

baseline (FM/SFM) và các biến thể không OT. Đây là bằng chứng trực tiếp cho luận điểm trung tâm của bài báo: trong bối cảnh đa mode, random coupling dễ ghép các endpoint không tương thích (prior rơi vào mode này, data thuộc mode khác), khiến các điểm trung gian x_t đi qua vùng mật độ thấp và xuất hiện quỹ đạo giao cắt; khi thay bằng OT coupling, các cặp endpoint trở nên “hợp lý” hơn theo chi phí vận chuyển, làm phân phối huấn luyện trên $\{p_t\}$ ổn định hơn và giúp cả thành phần flow lẫn thành phần score/ điều chuẩn học chính xác hơn. Đồng thời, cơ chế PFR-VR phát huy tác dụng trong môi trường đa mode nhờ giảm phương sai ước lượng, thể hiện qua khoảng cách giữa OT-SFM-PFR-VR và OT-SFM-FFR.

Trên lv3 (two-moons), phương pháp tốt nhất là OT-SFM-FFR (MMD 0.005406 ± 0.002583 , SWD 0.104907 ± 0.030009 , ED 0.006122 ± 0.003165). Khác với lv2, two-moons mang tính “manifold cong” và mức độ đa mode không tách rời quá mạnh; do đó điều chuẩn kiểu FFR (đầy đủ) có thể cung cấp tín hiệu hình học toàn cục mạnh hơn để bám theo cấu trúc cong của phân phối, trong khi cơ chế chiếu/ giảm phương sai của PFR-VR đôi khi làm suy giảm độ sắc nét ở các hướng quan trọng. Kết quả này cho thấy FFR và PFR-VR không “thống trị” lẫn nhau, mà phù hợp với những lớp hình học dữ liệu khác nhau.

Trên lv4 (dạng “vô cực” có tự giao) và lv5 (dạng “bông hoa” nhiều nhánh), OT-SFM-PFR-VR tiếp tục đạt kết quả tốt nhất một cách nhất quán (lv4: MMD 0.010689 ± 0.000868 , SWD 0.100420 ± 0.013184 , ED 0.005709 ± 0.001083 ; lv5: MMD 0.011478 ± 0.000856 , SWD 0.082271 ± 0.012801 , ED 0.005374 ± 0.000950). Hai bộ dữ liệu này vừa có tính phi tuyến mạnh, vừa có biến thiên theo nhiều hướng và vùng cong lớn; do đó, sự kết hợp giữa OT (ổn định coupling và tránh “đi tắt” qua vùng mật độ thấp) với PFR-VR (ổn định ước lượng bằng giảm phương sai) tạo ra lợi thế bền vững.

Tổng hợp trên lv1–lv5 cho thấy ba xu hướng chính. (i) OT-augmentation mang lại cải thiện rõ nhất khi dữ liệu có đa mode/ đa nhánh hoặc khi phân phối trung gian dễ xuất hiện quỹ đạo không tự nhiên (lv2, lv4, lv5), trong khi không nhất thiết cải thiện trên bài toán đơn giản (lv1). (ii) FFR có xu hướng phù hợp hơn với cấu trúc “manifold cong vừa” (lv3), còn PFR-VR phù hợp hơn khi phương sai ước lượng cao và cấu trúc phân phối biến thiên mạnh theo nhiều hướng (lv2, lv4, lv5). (iii) Quan trọng nhất, lợi thế của các biến thể đề xuất đến từ việc đổi distribution training thông qua OT coupling (tức thay đổi cách sinh (x_0, x_1) và kéo theo thay đổi p_t), chứ không chỉ do tăng độ phức tạp mô hình; điều này thể hiện qua việc các biến thể không OT (SFM-FFR, SFM-PFR-VR) nhìn chung không tạo cải thiện nhất quán, nhưng khi bật OT thì chất lượng và độ ổn định được nâng lên đáng kể.

C. BÀN LUẬN, HẠN CHẾ VÀ HƯỚNG KIỂM CHỨNG BỔ SUNG

Mặc dù kết quả cho thấy hiệu quả rõ rệt của OT-augmentation trên đa số bộ dữ liệu phức tạp, vẫn tồn tại một số hạn chế cần thảo luận.

Thứ nhất, trên lv1, phương pháp đề xuất không vượt FM. Đây là một điểm quan trọng về mặt phương pháp luận: khi bài toán đủ đơn giản, việc bổ sung cơ chế phức tạp (score/ điều chuẩn Fisher và/hoặc OT coupling) có thể không mang lại lợi ích, thậm chí gây suy giảm do khó tối ưu hơn. Do đó, phương pháp đề xuất nên được định vị là lựa chọn phù hợp cho các tình huống có đa mode hoặc hình học trung gian khó.

Thứ hai, kết quả gợi ý cần thực hiện ablation study có hệ thống để làm rõ các cơ chế đóng góp: (i) ảnh hưởng của ot_reg và ot_iters (mức độ “gắn OT” của coupling), (ii) ảnh hưởng của số particles K trong PFR-VR (trade-off giữa giảm phương sai và chi phí tính toán), và (iii) ảnh hưởng của tham số sigma của bridge và số bước mô phỏng khi sampling (ảnh hưởng tới sai số rời rạc). Các ablation này sẽ giúp định lượng rõ “khi nào OT là yếu tố quyết định” và “khi nào điều chuẩn Fisher là yếu tố quyết định”.

Thứ ba, các đánh giá hiện tại chủ yếu dựa trên MMD/SWD/ED. Để tăng sức thuyết phục, cần bổ sung (i) minh họa trực quan scatter plot cho các mẫu sinh theo từng phương pháp, (ii) đường cong hội tụ theo epoch (loss curve) để chứng minh OT giúp giảm dao động tối ưu, và (iii) phân tích độ nhạy tham số để đánh giá tính ổn định.

Tóm lại, chương thực nghiệm xác nhận rằng việc gắn OT vào SFM ở mức coupling là một cơ chế hiệu quả để cải thiện distribution training trên đường dẫn $\{p_t\}$, từ đó nâng cao chất lượng mô hình trên các bài toán đa mode và hình học phi tuyến, đồng thời làm rõ sự hỗ trợ lẫn nhau giữa hai cơ chế điều chuẩn Fisher (FFR và PFR-VR) trong các bối cảnh dữ liệu khác nhau.

Bảng 1. Kết quả nghiên cứu thực nghiệm

Dataset	Method	MMD ↓	SWD ↓	ED ↓
Lv1_2Gaussians	FM	0.001984 ± 0.001661	0.174851 ± 0.057914	0.004141 ± 0.000992
	SFM	0.005875 ± 0.003262	0.191072 ± 0.041953	0.006425 ± 0.003122
	SFM-FFR	0.007882 ± 0.008228	0.332621 ± 0.177790	0.014616 ± 0.015428
	SFM-PFR-VR	0.011827 ± 0.003414	0.320843 ± 0.082242	0.012092 ± 0.002658

	OT-SFM-FFR	0.005414 ± 0.001257	0.287911 ± 0.063946	0.005483 ± 0.000917
	OT-SFM-PFR-VR	0.015173 ± 0.007286	0.306649 ± 0.061281	0.009640 ± 0.004570
Lv2_8Gaussians	FM	0.101935 ± 0.003691	0.276788 ± 0.015067	0.031014 ± 0.003505
	SFM	0.103572 ± 0.007999	0.271091 ± 0.018353	0.031145 ± 0.005407
	SFM-FFR	0.114145 ± 0.027006	0.316076 ± 0.050974	0.043932 ± 0.018803
	SFM-PFR-VR	0.101004 ± 0.004982	0.281097 ± 0.015635	0.031399 ± 0.004333
	OT-SFM-FFR	0.035058 ± 0.008797	0.270273 ± 0.037519	0.019732 ± 0.006102
	OT-SFM-PFR-VR	0.018610 ± 0.008937	0.179044 ± 0.017773	0.008226 ± 0.003067
Lv3_2Moons	FM	0.017429 ± 0.001051	0.136352 ± 0.009802	0.010235 ± 0.000864
	SFM	0.014522 ± 0.001399	0.114429 ± 0.006184	0.007086 ± 0.000915
	SFM-FFR	0.013554 ± 0.004612	0.130217 ± 0.009758	0.008429 ± 0.001878
	SFM-PFR-VR	0.013818 ± 0.001964	0.120504 ± 0.020012	0.007625 ± 0.002290
	OT-SFM-FFR	0.005406 ± 0.002583	0.104907 ± 0.030009	0.006122 ± 0.003165
	OT-SFM-PFR-VR	0.010469 ± 0.002954	0.132974 ± 0.013848	0.009322 ± 0.007010
Dataset	Method	MMD ↓	SWD ↓	ED ↓
Lv4_Infinity	FM	0.024328 ± 0.009725	0.130944 ± 0.019851	0.010709 ± 0.003302
	SFM	0.031346 ± 0.007624	0.172422 ± 0.014545	0.017704 ± 0.004197
	SFM-FFR	0.028152 ± 0.000413	0.166042 ± 0.008150	0.015480 ± 0.002540
	SFM-PFR-VR	0.016274 ± 0.002487	0.100471 ± 0.003440	0.006219 ± 0.000761
	OT-SFM-FFR	0.011416 ± 0.001581	0.103852 ± 0.003588	0.006528 ± 0.000381
	OT-SFM-PFR-VR	0.010689 ± 0.000868	0.100420 ± 0.013184	0.005709 ± 0.001083
Lv5_Flower	FM	0.026692 ± 0.012601	0.112278 ± 0.018407	0.010027 ± 0.003834
	SFM	0.030426 ± 0.015206	0.120460 ± 0.004974	0.009814 ± 0.003438
	SFM-FFR	0.048080 ± 0.035592	0.128471 ± 0.019275	0.014563 ± 0.008550
	SFM-PFR-VR	0.016518 ± 0.002484	0.100353 ± 0.002113	0.006319 ± 0.000607
	OT-SFM-FFR	0.016062 ± 0.002496	0.099866 ± 0.014369	0.008180 ± 0.001734
	OT-SFM-PFR-VR	0.011478 ± 0.000856	0.082271 ± 0.012801	0.005374 ± 0.000950

VI. KẾT LUẬN

A. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đề xuất khung OT-augmented Score Flow Matching (OT-SFM) nhằm cải thiện chất lượng học mô hình sinh thông qua thay đổi cơ chế coupling khi xây dựng đường dẫn xác suất $\{p_t\}$. Thay vì ghép cặp ngẫu nhiên giữa phân phối khởi đầu đơn giản p_0 (Gaussian chuẩn) và phân phối dữ liệu p_{data} , phương pháp đề xuất sử dụng entropic Optimal Transport ở mức minibatch để tạo OT-coupling (trong triển khai: `sample_ot_endpoints`) nhằm sinh các cặp endpoint (x_0, x_1) “hợp lý” theo chi phí vận chuyển. Từ các cặp này, các mẫu trung gian x_t (trong triển khai: `marginal_sample`) phản ánh quỹ đạo chuyển dịch phù hợp hơn về mặt hình học, giúp giảm crossing, đồng thời làm quá trình học flow và score (kèm điều chuẩn Fisher) ổn định hơn.

Trên các bộ dữ liệu 2D tổng hợp từ lv1 đến lv5, kết quả định lượng theo ba thước đo MMD/ SWD/ ED cho thấy OT-augmentation mang lại cải thiện rõ rệt ở phần lớn các phân phối phức tạp, đặc biệt với các trường hợp đa mode/ đa nhánh hoặc hình học phi tuyến mạnh như lv2, lv4 và lv5. Đáng chú ý, các biến thể OT-SFM thường đạt các giá trị MMD/SWD/ED nhỏ hơn đáng kể so với các phiên bản SFM không gắn OT, cho thấy việc “điều chỉnh phân phối huấn luyện trên đường dẫn” (distribution training) thông qua coupling là một cơ chế hiệu quả, thay vì chỉ can thiệp cục bộ ở mức loss.

Ngoài ra, kết quả cũng gợi ý sự hỗ trợ giữa hai biến thể điều chuẩn Fisher: FFR có xu hướng phù hợp trong một số thiết lập có cấu trúc manifold tương đối trơn và cong vừa, trong khi PFR-VR thường ổn định và nhất quán hơn ở các tình huống biến thiên mạnh theo nhiều hướng và dễ phát sinh phương sai ước lượng (đặc biệt trên các dataset phức tạp như lv2/ lv4/ lv5). Tổng thể, các kết quả thực nghiệm xác nhận rằng gắn OT vào SFM ở mức coupling là một hướng tiếp cận hứa hẹn để nâng cao chất lượng mô hình sinh, đặc biệt khi hình học phân phối dữ liệu phức tạp.

B. HẠN CHẾ

Mặc dù đạt kết quả khả quan, nghiên cứu vẫn có một số hạn chế:

- Lợi ích không đồng đều trên bài toán đơn giản. Với các phân phối đơn giản (ví dụ lv1), baseline có thể đã đủ tốt; khi đó OT-augmentation và/ hoặc regularization không nhất thiết mang lại cải thiện rõ rệt. Điều này cho thấy phương pháp đề xuất phù hợp hơn với các bài toán có hình học phức tạp hoặc đa mode rõ rệt.
- Chưa có ablation study hệ thống. Các tham số quan trọng như ϵ_{OT} (ot_reg), số vòng Sinkhorn (ot_iters), σ của bridge, số bước mô phỏng ODE/ SDE, và số hướng chiếu K chưa được khảo sát đầy đủ; do đó chưa định lượng rõ trade-off giữa chất lượng mẫu – độ ổn định – chi phí tính toán.
- Giới hạn ở dữ liệu 2D tổng hợp. Thực nghiệm hiện tại mới dừng ở không gian 2D, chưa phản ánh đầy đủ thách thức khi mở rộng sang dữ liệu chiều cao hoặc dữ liệu thực.
- Chi phí OT và độ nhạy theo minibatch. OT ở mức minibatch làm tăng chi phí tính toán so với random coupling, đồng thời có thể nhạy với batch size và số vòng Sinkhorn; ảnh hưởng này cần được đánh giá sâu hơn trong các thiết lập lớn hơn.

C. HƯỚNG PHÁT TRIỂN

Từ các hạn chế trên, các hướng phát triển khả thi gồm:

- Ablation study và phân tích độ nhạy tham số. Khảo sát có hệ thống theo ϵ_{OT} , ot_iters, σ , số bước mô phỏng, và K để đưa ra khuyến nghị chọn tham số ổn định và xác định khi nào OT đóng vai trò quyết định.
- Mở rộng sang chiều cao và dữ liệu thực. Áp dụng OT-SFM cho toy high-dim, dữ liệu ảnh đơn giản hoặc dữ liệu thực để kiểm tra khả năng tổng quát và hiệu quả thực tiễn.
- Tối ưu hoá tính toán OT. Nghiên cứu OT xấp xỉ/ nhanh hơn, giảm độ nhạy minibatch, hoặc tái sử dụng transport plan giữa các iteration nhằm giảm chi phí so với Sinkhorn full.
- Coupling thích nghi theo độ khó. Thiết kế cơ chế adaptive coupling (chọn OT hoặc random theo giai đoạn huấn luyện/ độ khó dữ liệu) để tránh tăng độ phức tạp không cần thiết ở bài toán đơn giản nhưng vẫn khai thác được lợi ích OT ở bài toán khó.

Tóm lại, nghiên cứu cung cấp bằng chứng thực nghiệm rằng OT-coupling là một cơ chế hiệu quả để cải thiện SFM trên các phân phối phức tạp. Các hướng phát triển trên sẽ giúp hoàn thiện phương pháp về cả mặt đánh giá, tối ưu tính toán và khả năng mở rộng.

VII. TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] T. Nguyen, D. Le (2025). Optimizing Score-Flow Matching For Density-Estimation-Based Generative Models, *HCMUE Journal of Science*, accepted / in press.
- [2] J. Ho, A. Jain, P. Abbeel (2020). Denoising Diffusion Probabilistic Models, *Proceeding(s) of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2020)*, Dec 6-12, 2020, Vancouver, Canada, Vol. 33, pp.6840-6851.
- [3] Y. Song, J. Sohl-Dickstein, D. P. Kingma, et al. (2021). Score-Based Generative Modeling through Stochastic Differential Equations, *Proceeding(s) of the 9th International Conference on Learning Representations (ICLR 2021)*, May 3-7, 2021, Virtual Event, pp.1-36.
- [4] Y. Lipman, R. T. Q. Chen, H. Ben-Hamu, et al. (2022). Flow Matching for Generative Modeling, arXiv preprint arXiv:2210.02747, pp.1-28.
- [5] V. De Bortoli, J. Thornton, J. Heng, A. Doucet (2021). Diffusion Schrödinger Bridge with Applications to Score-Based Generative Modeling, *Proceeding(s) of the 35th International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2021)*, Dec 6-14, 2021, Virtual Event, Vol. 34, pp.5264-5275.
- [6] A. Hyvärinen (2005). Estimation of non-normalized statistical models by score matching, *Journal of Machine Learning Research (JMLR)*, Vol. 6, No. 4, pp.695-709.
- [7] Y. Song, S. Garg, J. Shi, S. Ermon (2019). Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation, *Proceeding(s) of the 35th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI 2019)*, Aug 22-25, 2019, Tel Aviv, Israel, pp.574-584.

- [8] A.-A. Pooladian, H. Ben-Hamu, C. Domingo-Enrich, et al. (2023). Multisample Flow Matching: Straightening Flows with Minibatch Couplings, *Proceeding(s) of the 40th International Conference on Machine Learning (ICML 2023)*, Jul 23-29, 2023, Honolulu, Hawaii, USA, Vol. 202, pp.28107-28127.
- [9] M. Cuturi (2013). Sinkhorn Distances: Lightspeed Computation of Optimal Transport, *Proceeding(s) of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2013)*, Dec 5-10, 2013, Lake Tahoe, Nevada, USA, Vol. 26, pp.2292-2300.
- [10] A. Gretton, K. Borgwardt, M. Rasch, B. Schölkopf, A. Smola (2012). A Kernel Two-Sample Test, *Journal of Machine Learning Research (JMLR)*, Vol. 13, No. 1, pp.723-773.
- [11] N. Bonneel, J. Rabin, G. Peyré, H. Pfister (2015). Sliced and Radon Wasserstein Barycenters of Measures, *Journal of Mathematical Imaging and Vision*, Vol. 51, No. 1, pp.22-45.
- [12] G. J. Székely, M. L. Rizzo (2013). Energy Statistics: A Class of Statistics Based on Distances, *Journal of Statistical Planning and Inference*, Vol. 143, No. 8, pp.1249-1272.
- [13] R. T. Q. Chen, Y. Rubanova, J. Bettencourt, D. Duvenaud (2018). Neural Ordinary Differential Equations, *Proceeding(s) of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2018)*, Dec 3-8, 2018, Montréal, Canada, Vol. 31, pp.6571-6583.
- [14] R. T. Q. Chen, W. H. Li, R. Grosse, D. Duvenaud (2019). FFJORD: Free-form Continuous Dynamics for Scalable Reversible Generative Models, *Proceeding(s) of the 7th International Conference on Learning Representations (ICLR 2019)*, May 6-9, 2019, New Orleans, Louisiana, USA, pp.1-13.
- [15] G. Peyré, M. Cuturi (2019). Computational Optimal Transport, *Foundations and Trends in Machine Learning*, Vol. 11, No. 5-6, pp.355-607.

IMPROVING THE SCORE FLOW MATCHING OBJECTIVE WITH OPTIMAL TRANSPORT

Nguyen Quoc Thanh, Tran Thanh Binh

ABSTRACT— Score-Flow Matching (SFM) combines Flow Matching (FM) and Score Matching (SM) to simultaneously leverage the global dynamics of the velocity field and local correction signals from the log-density gradient. However, SFM is often affected by (i) optimal instability due to large variance score estimates and (ii) geometric degradation on multimodal distributions when the probability path causes “crossing” in the state space. In this paper, we propose SFM is augmented by OT (OT-SFM): using minibatch entropic optimal transport (OT) coupling to pair the simple initial distribution and the data distribution, thereby inducing a smoother geometric OT-Gaussian bridge path, reducing crossing, and making the velocity field easier to learn. Building upon OT-SFM, we extend two previously proposed Fisher regularization mechanisms: OT-SFM-FFR (Full-Fisher Regularizer) and OT-SFM-PFR-VR (Projected Fisher Regularizer with Variance Reduction), aiming to simultaneously increase optimal stability and improve the quality of the distribution fit. Experiments on multi-mode 2D simulation data show that demonstrate that OT-SFM enhances stability and yields lower distribution differences compared to standard SFM, particularly ear geometric configurations.

Keywords—Generative model; Score Flow Matching; Flow Matching; Optimal transport; Fisher regularization.



Nguyễn Quốc Thanh là học viên cao học ngành Toán ứng dụng, Trường Đại học Bách Khoa TP.HCM; hiện đang quan tâm và theo đuổi các nghiên cứu trong lĩnh vực Toán ứng dụng và Học máy.



Trần Thanh Bình là học viên cao học ngành Toán ứng dụng, Trường Đại học Bách Khoa TP.HCM; hiện đang quan tâm và theo đuổi các nghiên cứu trong lĩnh vực Toán ứng dụng và Học máy.