Föllmer 過程とノイズ除去拡散確率モデル

小池 祐太 *

近年, 生成 AI が脅威的な進歩を遂げており, 実社会においても欠かせないインフラとなりつつあるが, その成功の背景にある数理的な仕組みに対する理解は十分とはいえない. 本講演では, 主に画像生成の分野において大きな成功を収めている拡散モデルの代表例である, ノイズ除去拡散確率モデル (Denoising Diffusion Probabilistic Model, DDPM) と, 関数不等式や高次元中心極限定理の研究において近年多数の応用がなされている, Föllmer 過程の関連について説明する.

拡散モデルは, 訓練データに徐々にノイズを加えてほぼ完全なノイズに変換する過程を逆向きに辿る方法を学習することで, 完全なノイズから訓練データと似た分布に従うデータを生成する方法である. 画像生成において同様のタスクを実行する方法として, 敵対的生成ネットワーク (GAN) や変分オートエンコーダー (VAE) などがあるが, 拡散モデルはこれらの既存の手法と比較して, 生成されるデータの質や多様性の点で優れていることが実証的に示されている. 他方, 学習済みの拡散モデルから新規にデータを生成する際には反復計算が必要であり, 計算コストが高いという難点がある. そのため, 拡散モデルから新規に生成されたデータの分布が, 反復計算の回数に応じて, 学習元データの分布とどの程度乖離するかを評価する問題 (サンプリング誤差解析) は重要な課題である.

データに付加していくノイズの分散を決める数列を分散スケジュールと呼ぶ. Song *et al.* [4] は, 分散スケジュールが一様に小さければ, ノイズ除去拡散確率モデルは, Ornstein–Uhlenbeck 過程の時間反転が満たす確率微分方程式 (SDE) の離散化と近似的に同等であることを示した. この研究は, SDE の数値解析において利用される手法が, ノイズ除去拡散確率モデルのサンプリング誤差の解析に適用可能であることを示唆しており, 後続の研究に大きな影響を与えた.

$\mathbb{R}^d$ 上の確率分布 P^* に対して, 次の 2 条件を満たす d 次元確率過程 $X = (X_t)_{t\in[0,1]}$ を, P^* に付随する Föllmer 過程と呼ぶ: (i) $X_1 \sim P^*$. (ii) X_1 で条件付けた下で, X は 0 から X_1 への Brownian bridge となる. Föllmer 過程がある SDE の解となることは, (P^*

* 東京大学大学院数理科学研究科

に対する適当な正則条件の下で) 古くから知られている [1, 2]. この SDE は, Ornstein–Uhlenbeck 過程の時間反転が満たす SDE と非常によく似た形を持つため, Föllmer 過程の離散化もノイズ除去拡散確率モデルと関係があるのではないかということが自然に推測される. 実際, Föllmer 過程が満たす SDE の離散化は, ノイズ除去拡散確率モデルと正確に対応することが容易に確認できる. 本講演では, この対応関係のサンプリング誤差解析への応用について, 既存研究との対応も含めて説明する. 特に, Föllmer 過程の離散化は, 一様に小さいという条件を満たさない分散スケジュールに対しても正当化できるため, 応用上よく利用されるコサインスケジュール [3] などを含む, より広いクラスの分散スケジュールに対してサンプリング誤差解析が実行できるという利点がある. その他, 近年の関数不等式への Föllmer 過程の応用において得られた理論的結果を援用できるという利点についても述べる.

参考文献

[1] Föllmer, H. (1986). Time reversal on Wiener space. In S. A. Albeverio, P. Blanchard & L. Streit, eds., *Stochastic processes - mathematics and physics*, vol. 1158 of *Lecture Notes in Math.* Springer, pp. 119–129.

[2] Jamison, B. (1975). The Markov processes of Schrödinger. *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete* **32**, 323–331.

[3] Nichol, A. Q. & Dhariwal, P. (2021). Improved denoising diffusion probabilistic models. In M. Meila & T. Zhang, eds., *Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning*, vol. 139 of *Proceedings of Machine Learning Research*. PMLR, pp. 8162–8171.

[4] Song, Y., Sohl-Dickstein, J., Kingma, D. P., Kumar, A., Ermon, S. & Poole, B. (2021). Score-based generative modeling through stochastic differential equations. In *International Conference on Learning Representations*.