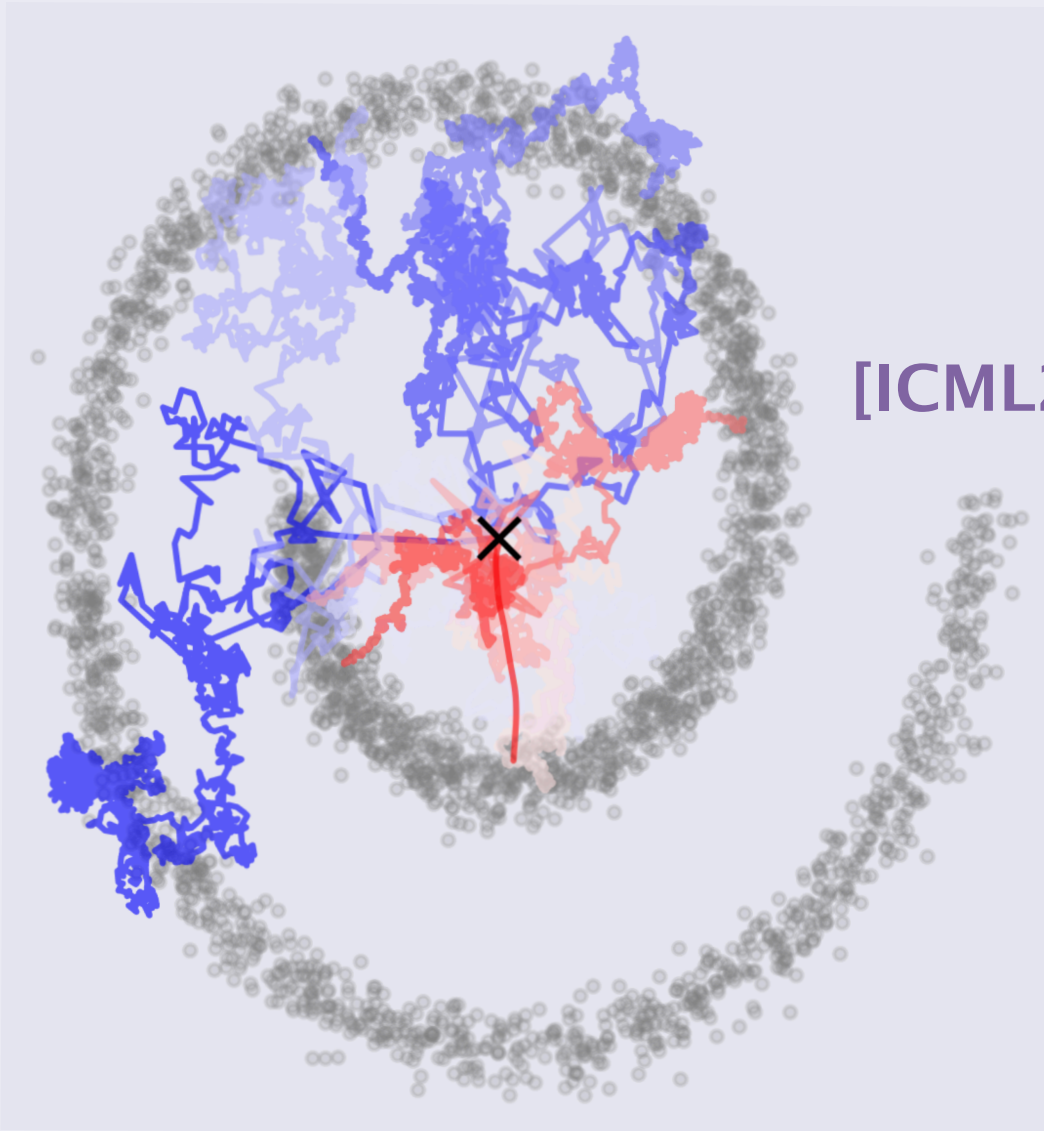


拡散モデルと 経路積分

[ICML2024, arXiv:2403.11262]



広野雄士 (大阪大学)

共同研究者: 田中章詞(RIKEN), 福嶋健二(東京大)

最近の研究トピック

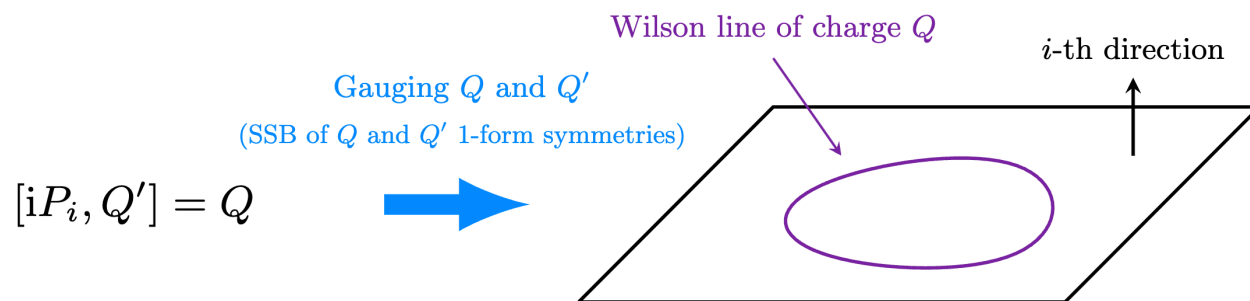
一般化対称性と物質の相構造

[arXiv:2501.07781]

[SciPost Phys. 16, 050 (2024)]

[Phys. Rev. B 105, 205109 (2022)]

[Phys. Rev. Lett. 126, 071601 (2021)]



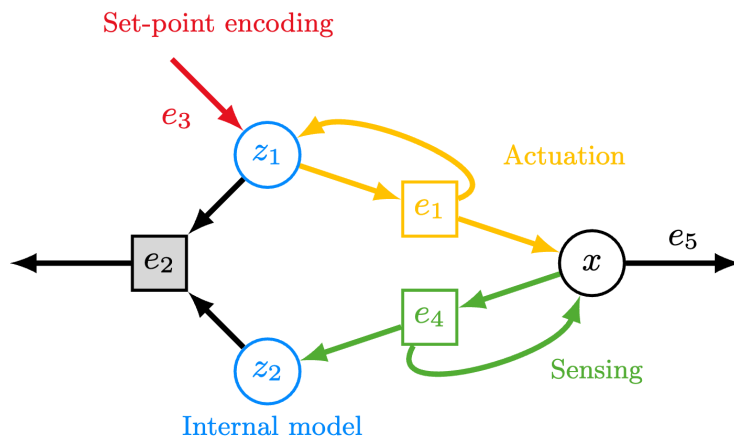
化学反応ネットワークの制御・縮約

[arXiv:2307.07444]

[arXiv:2302.01270]

[J. Stat. Phys. 190, 86 (2023)]

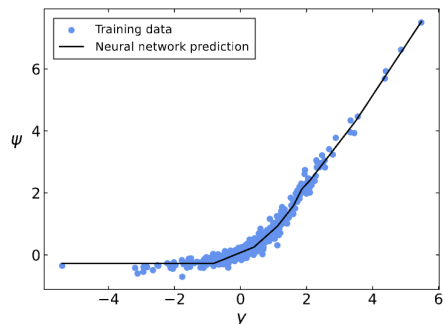
[Phys. Rev. Research 3, 043123 (2021)]



最近の研究トピック: 機械学習×物理

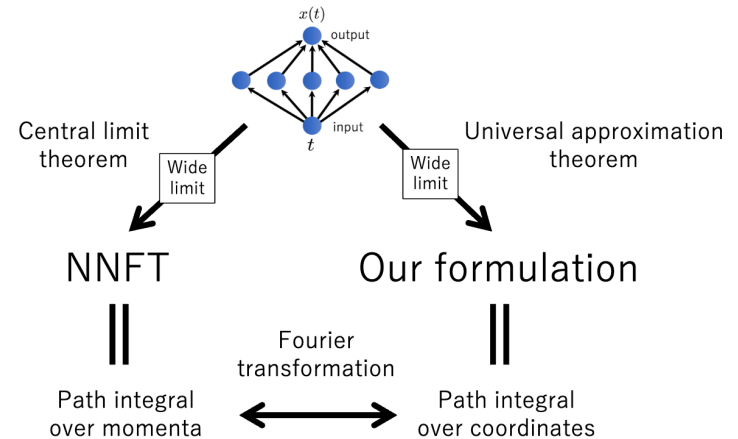
ニューラルネットワークを用いた データ駆動型の自己相似性の同定

[arXiv:2406.03896, Phys. Rev. E, in press]



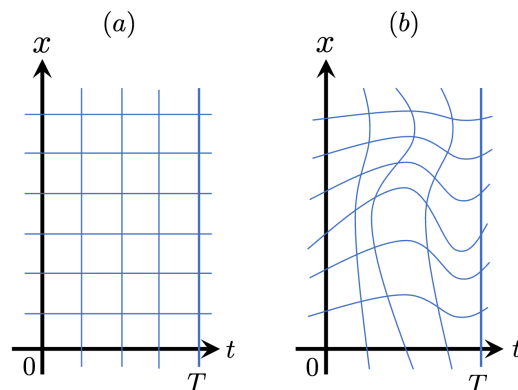
ニューラルネットワークと量子系の対応

[Mach. Learn.: Sci. Technol. 5 045039]



ニューラルODEにおける冗長性とdiffeomorphism

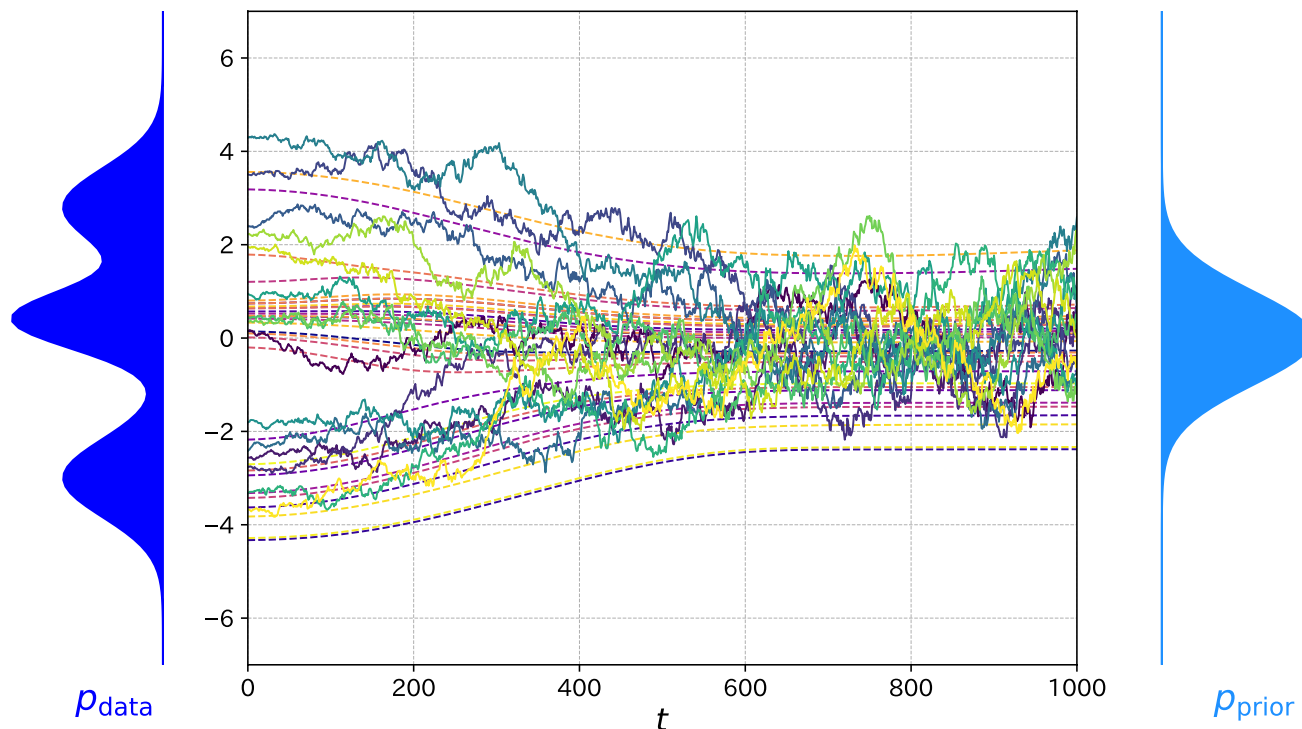
[Mach. Learn.: Sci. Technol. 5 025079 (2024)]



拡散モデルと経路積分

- **拡散モデル**: 新しい画像や動画を作ることのできるAI
 - 用途: テキストに基づく画像生成、画像補完、高画質化
- 拡散モデルを量子力学の定式化の一つである**経路積分法**を用いて記述
 - 物理の手法に基づいて、機械学習モデルを理解

[広野・田中・福嶋, ICML'24]



拡散モデルによる画像生成の例

“A family of lions in a cozy ramen shop”

(居心地の良いラーメン屋にいるライオンの家族)



“A set of sushi that look like dogs”

(犬みたいな寿司のセット)



拡散モデルによる動画生成の例

“There is a family of lions in a cozy ramen shop. They eat noodles with chopsticks”

(居心地の良いラーメン屋にいるライオンの家族が、箸でラーメンを食べる)



拡散モデルによる動画生成の例

“A family of **real majestic** lions in a cozy ramen shop. They use chopsticks to eat noodles.”

(居心地の良いラーメン屋にいるリアルで立派なライオンの家族が、箸でラーメンを食べる)



目次

1. 拡散モデルの仕組み
2. 経路積分により拡散モデルを理解する

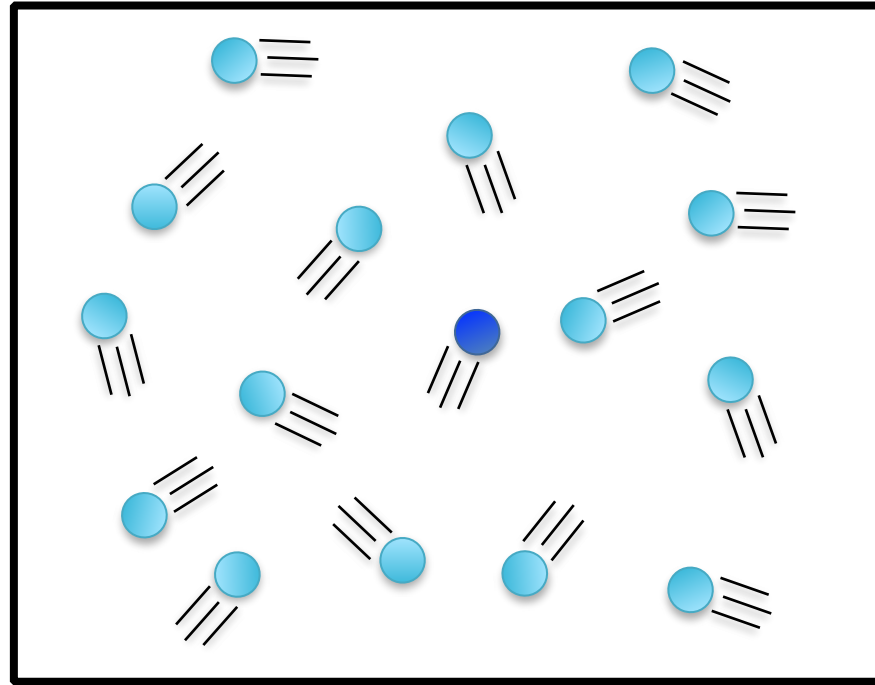
1. 拡散モデルの仕組み

拡散現象



https://www.youtube.com/watch?v=_Owb7Nbhhkg

拡散現象



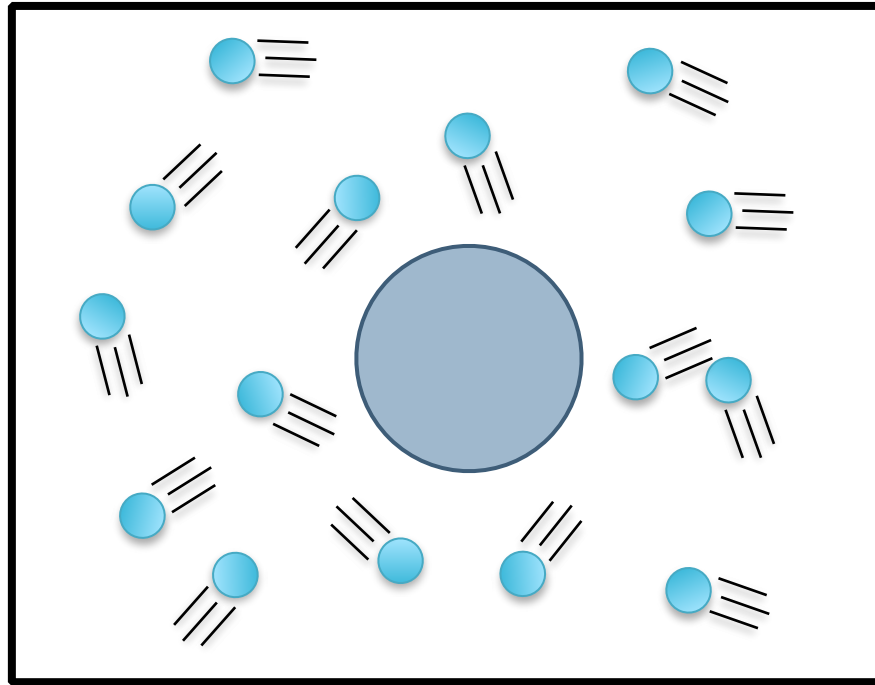
- 流体中のインク分子の運動方程式

$$\mathbf{x}_{t+dt} = \mathbf{x}_t + \underline{d\mathbf{w}_t}$$

ランダムな力

ランジュバン方程式

ブラウン運動による原子の存在の検証



アボガドロ定数 N_A の見積もり

$$\langle (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0)^2 \rangle = 2Dt$$

粒子の平均二乗変位

拡散係数 $D = \frac{RT}{N_A \gamma}$

R : 気体定数

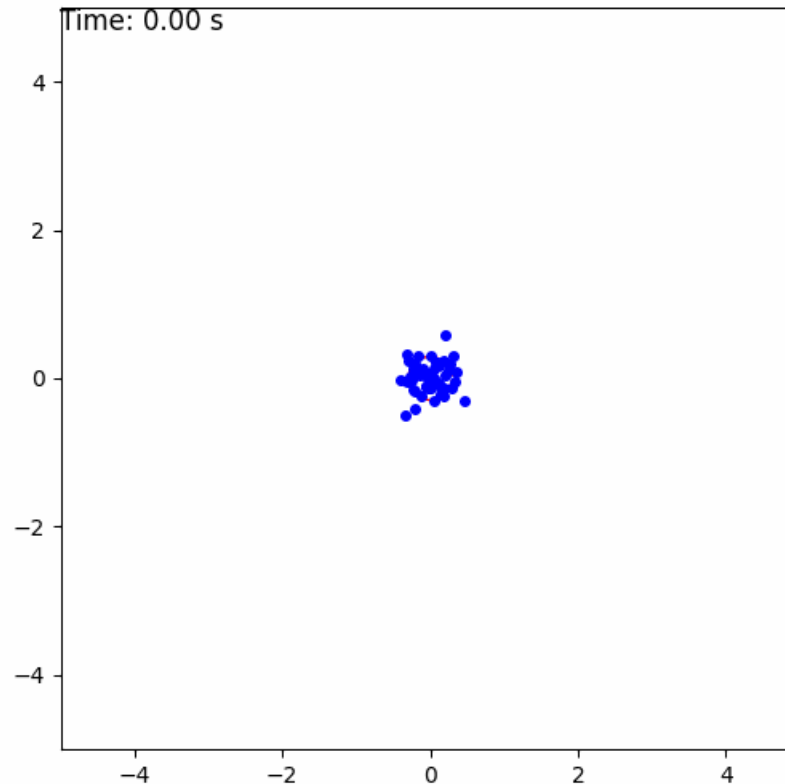
T : 温度

$$\gamma = 6\pi a \eta$$

η : 粘性係数

a : 粒子の半径

ブラウン運動による原子の存在の検証



アボガドロ定数 N_A の見積もり

$$\langle (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0)^2 \rangle = 2Dt$$

粒子の平均二乗変位

拡散係数 $D = \frac{RT}{N_A \gamma}$

R : 気体定数

T : 温度

$$\gamma = 6\pi a \eta$$

η : 粘性係数

a : 粒子の半径

拡散モデルによる画像生成



[<https://arxiv.org/abs/2011.13456>]



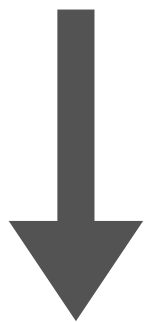
拡散モデルは、ランジュバン方程式(確率微分方程式)を利用している

学習済みの拡散モデルは、**ノイズを除去**していくことにより画像を生成

拡散モデルはなぜ綺麗な画像を作れるのか？

- 画像を部屋の様子へ対応付けて考えてみる

ノイジーな画像



実際にありそうな画像

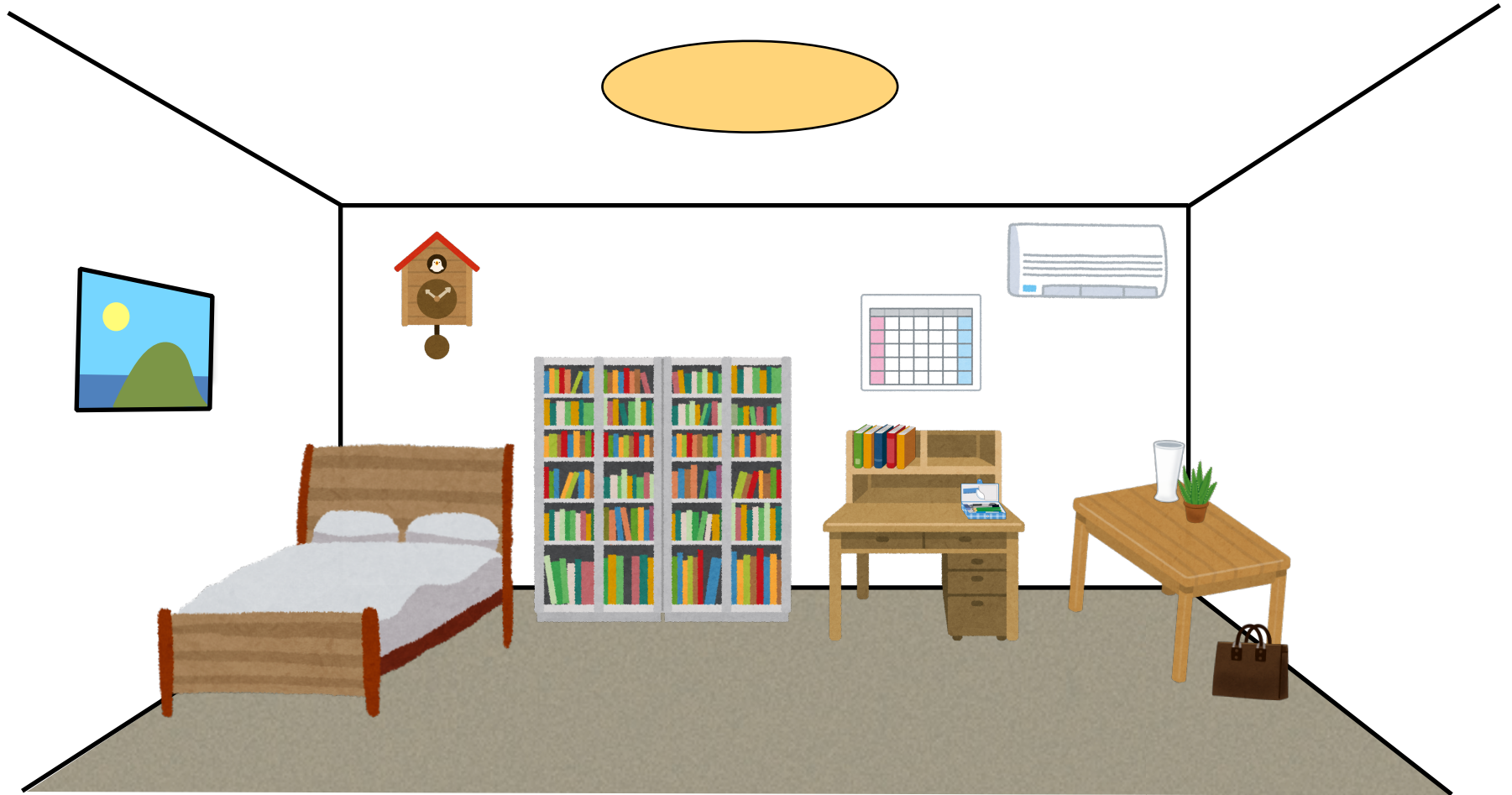
散らかった部屋



片付いた部屋

拡散モデルは「プロ片付け屋」

片付いた部屋(≈綺麗な画像)



散らかった部屋(≈ノイジーな画像)

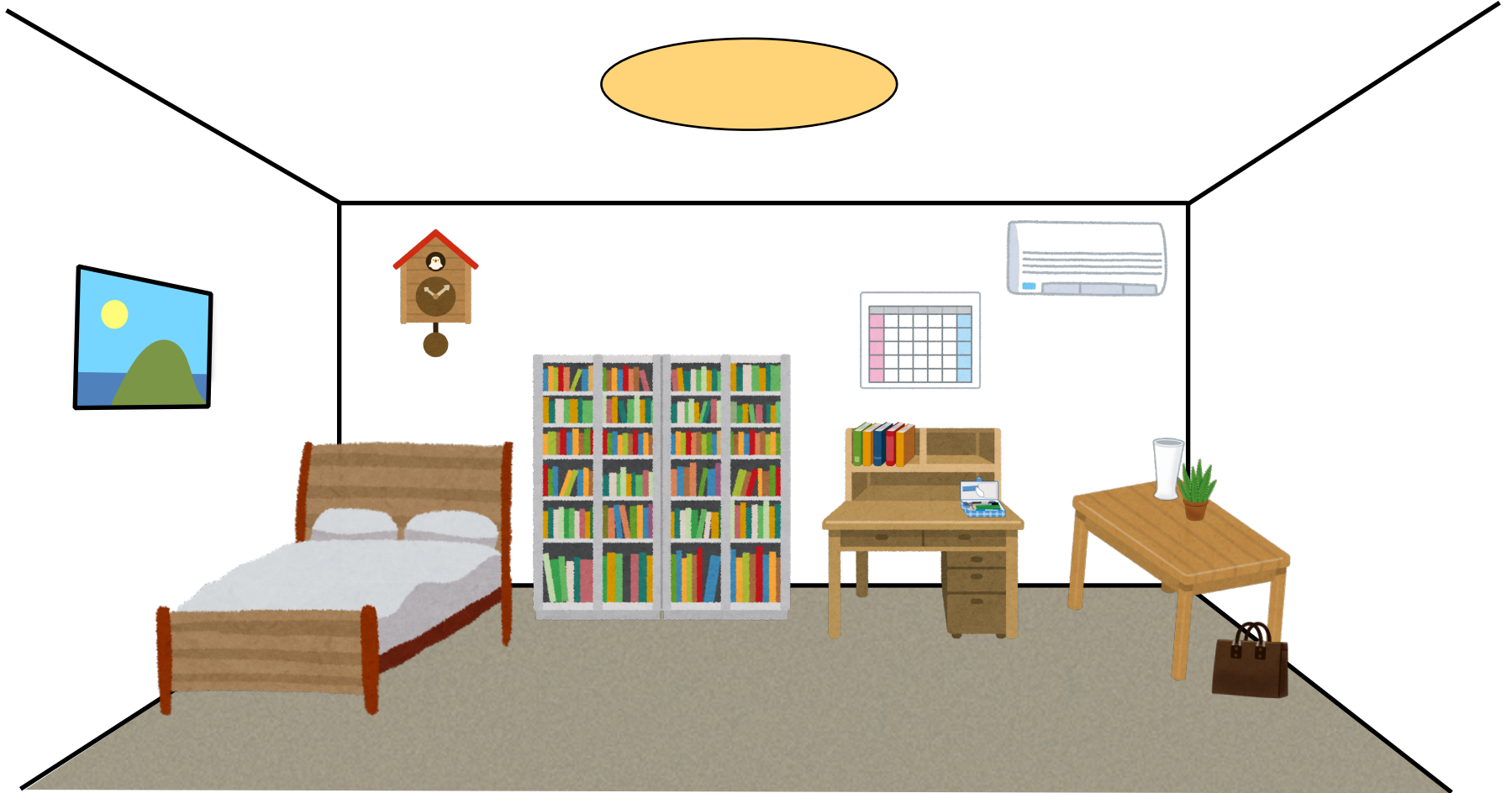


拡散モデルの学習

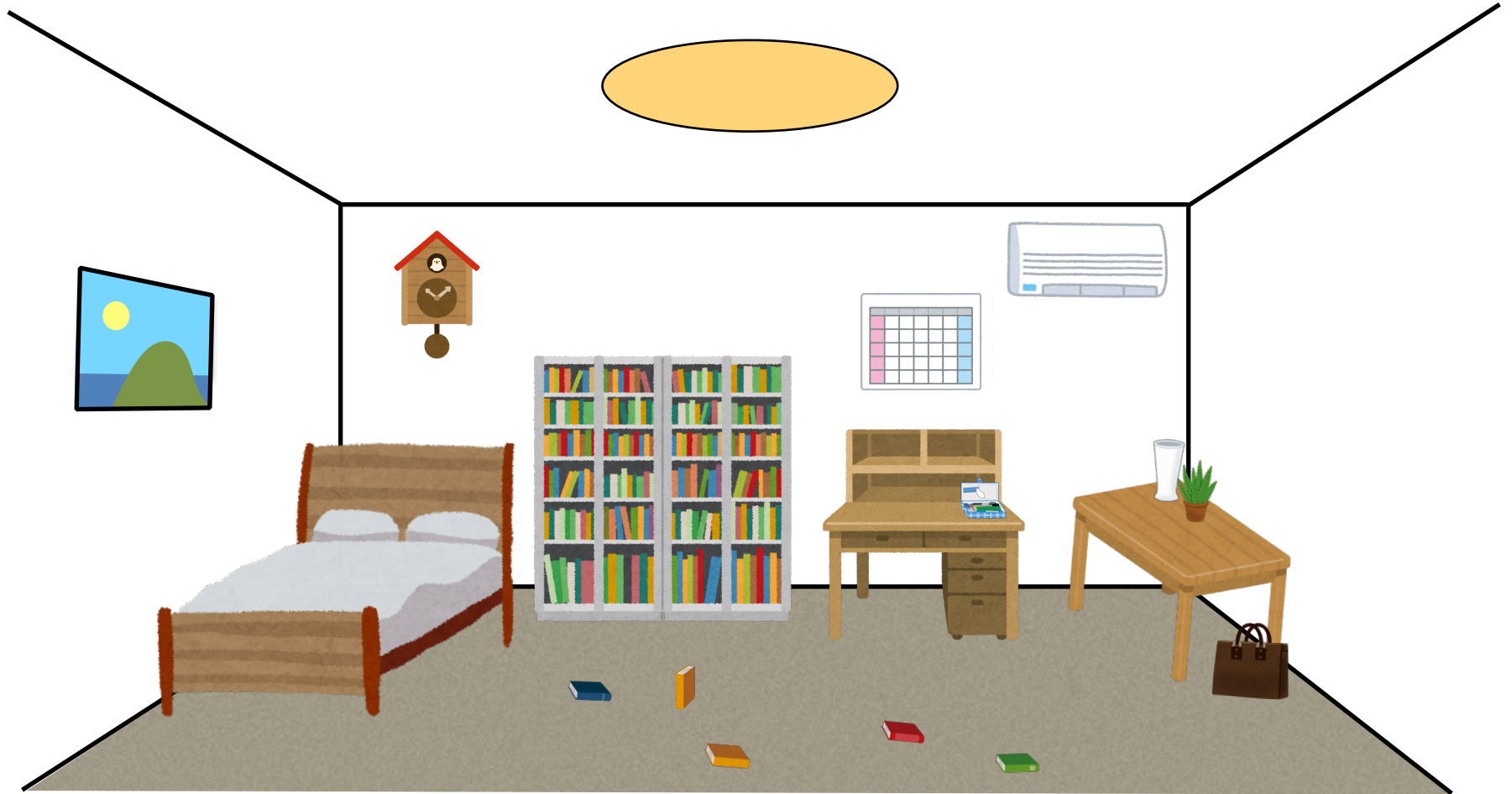
画像にノイズを少しだけ加えて、どのようなノイズが加えられたのかを当てさせる

部屋を少し散らかして、どこが散らかったのかを当てさせる

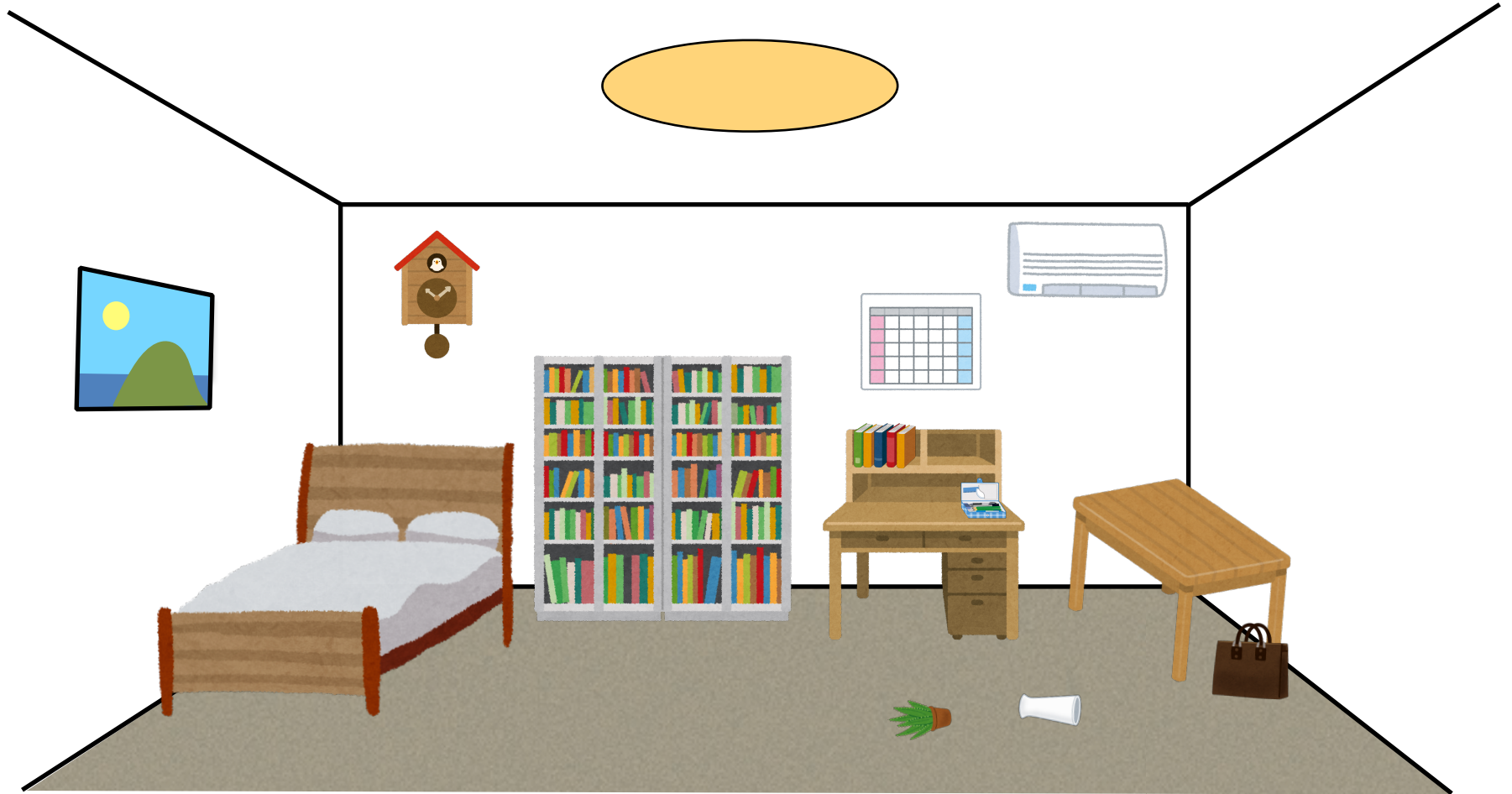
片付いた部屋を少しだけ散らかす



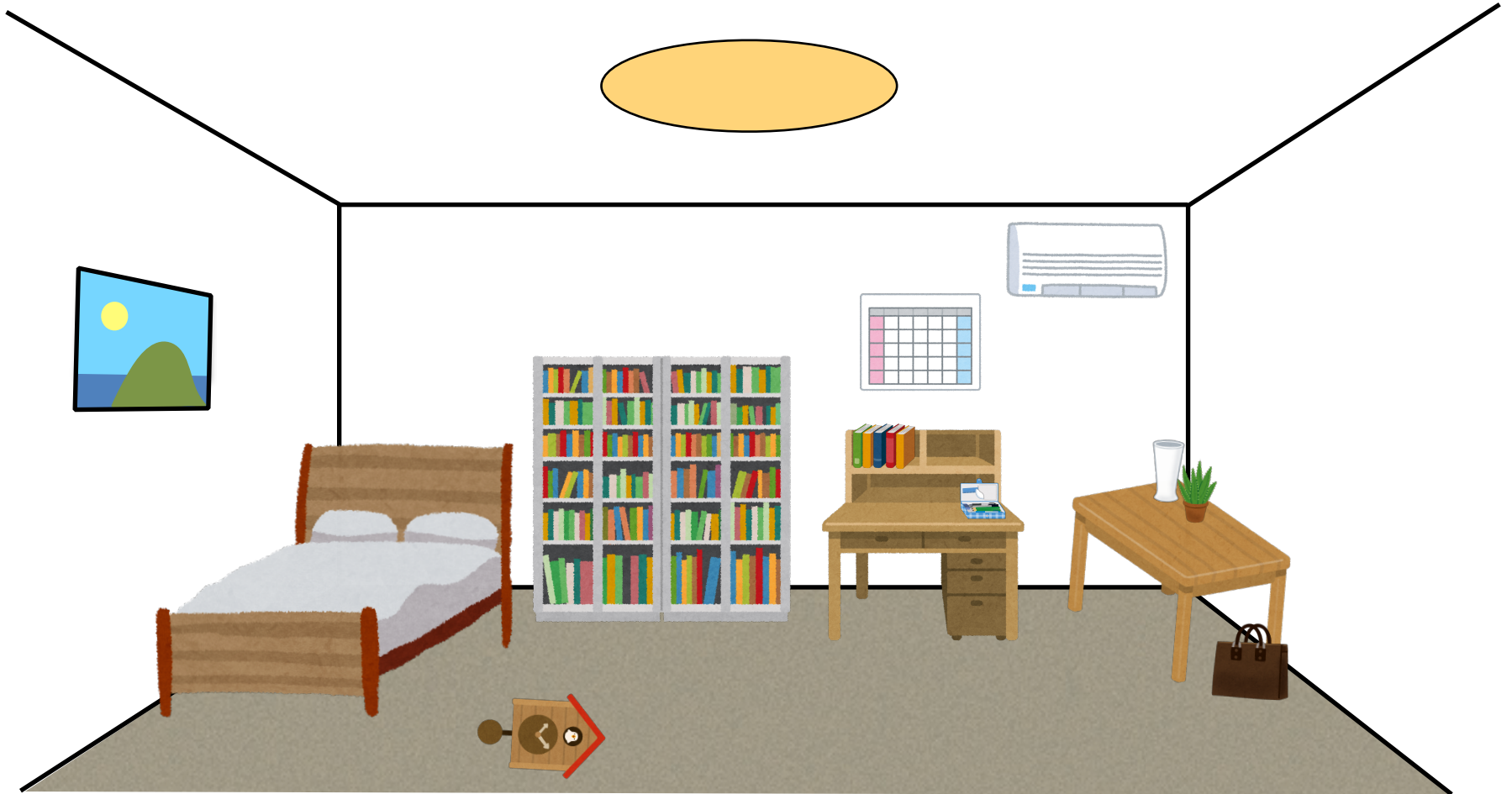
片付いた部屋を少しだけ散らかす



片付いた部屋を少しだけ散らかす



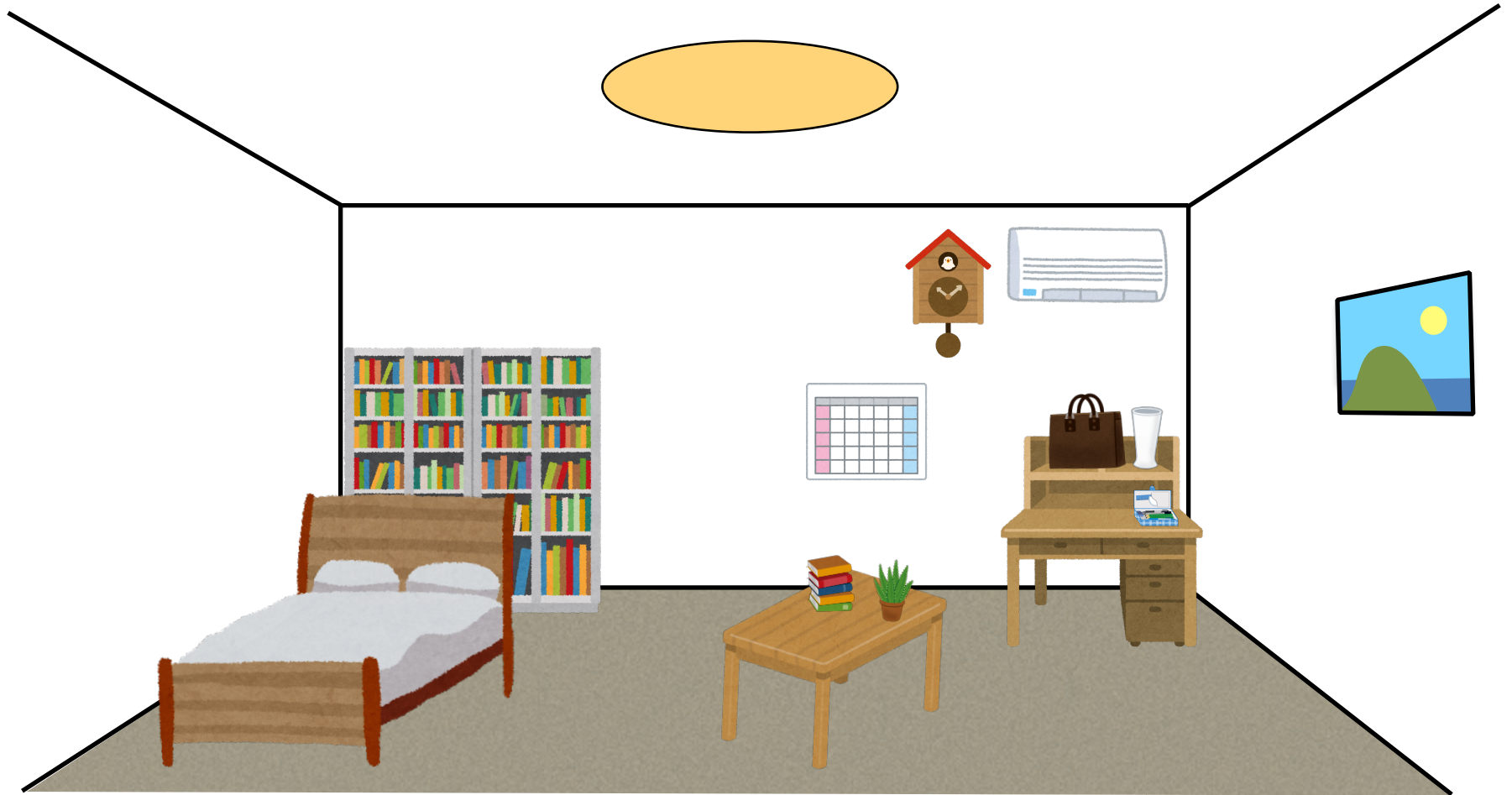
片付いた部屋を少しだけ散らかす



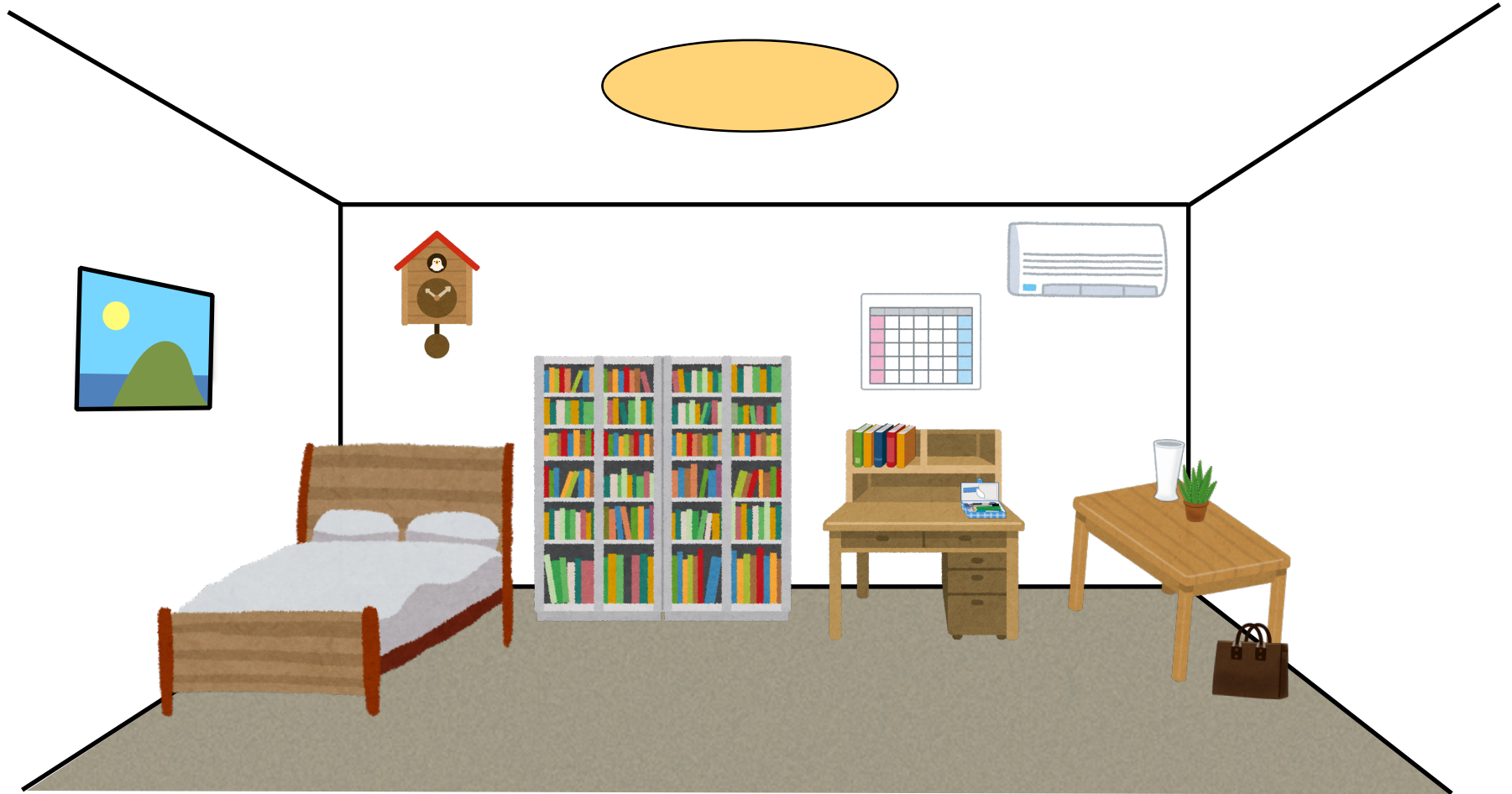
どこが散らかったのかがわかるようになれば、
メチャクチャな部屋を片付けることができる



片付けた部屋



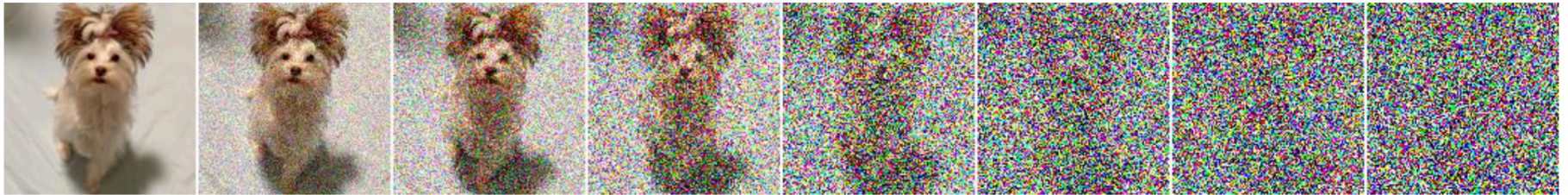
片付いた部屋(別パターン)



拡散モデルの訓練と生成

ノイズを加える過程
(訓練)

$$\mathbf{x}_{t+dt} = \mathbf{x}_t + d\mathbf{w}_t$$



[<https://arxiv.org/abs/2011.13456>]

ノイズの除去過程
(画像の生成)

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t+dt} + \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}_t, t) dt + d\mathbf{w}_t$$

「スコア関数」

訓練したニューラルネットワークを使う

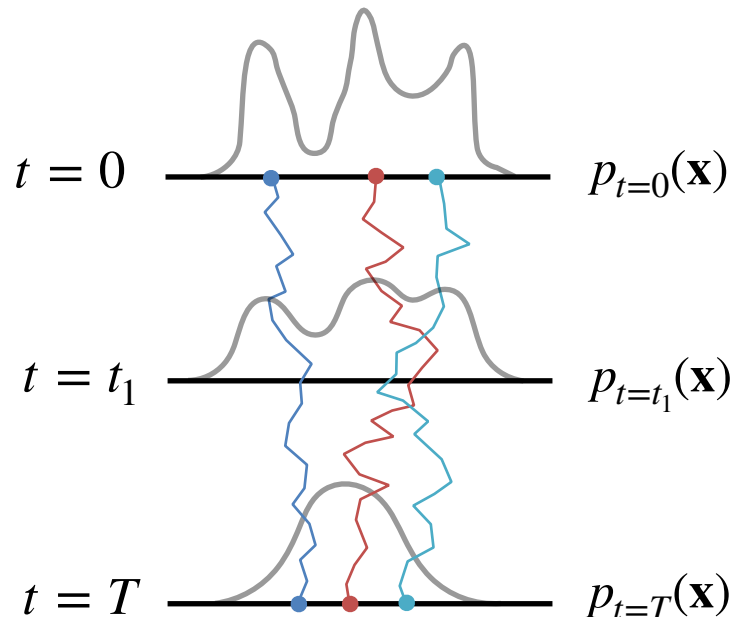
確率微分方程式とFokker-Planck方程式

- ランジュバン方程式は、数学では確率微分方程式(stochastic differential equation, SDE)と呼ばれ、以下のように書かれる

$$d\mathbf{x}_t = \mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t)dt + g(t)d\mathbf{w}_t \quad \mathbf{w}_t \text{ はWiener過程}$$

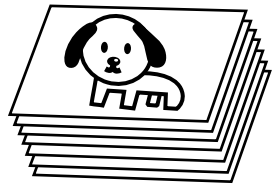
- 上記の確率過程は、以下の Fokker-Planck 方程式と等価

$$\partial_t p_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right]$$

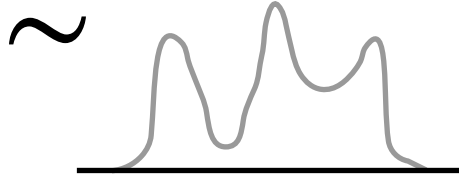


拡散モデルの仕組み

[Song et. al., ICML'21]



訓練データ

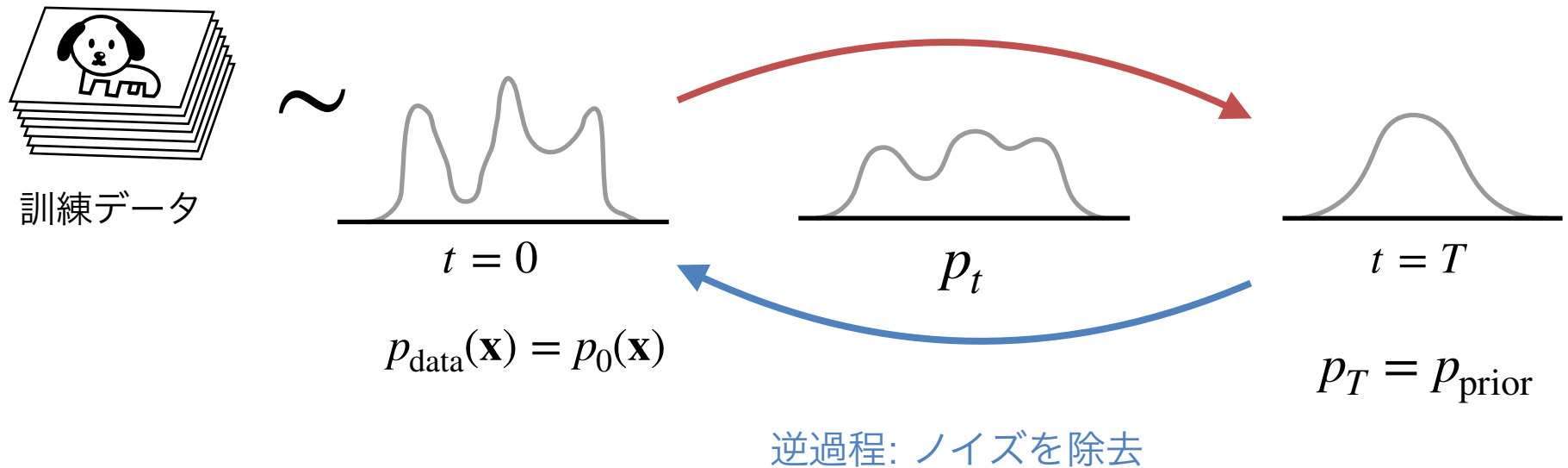


$p_{\text{data}}(\mathbf{x})$

- データ分布 p_{data} からサンプルしたい
 - p_{data} は未知である
 - p_{data} を知っていたとしても、多峰性である場合、マルコフ連鎖モンテカルロによるサンプリングの効率が悪い

拡散モデルの仕組み

[Song et. al., ICML'21]



- 順過程として、以下のようなプロセスを採用

$$\partial_t p_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right], \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = -\beta \mathbf{x}, \quad g(t) = \sqrt{\beta}$$

定常分布はガウス分布: $p_{\text{ss}}(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{1})$

逆過程のSDEは？

[Song et. al., ICML'21]

- 順過程

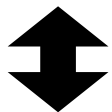
$$\partial_t p_t(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right]$$

- p_{data} は不明なので、上記と等価なSDEにより訓練画像にノイズを付加する

$$d\mathbf{x}_t = \mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t) dt + g(t) d\mathbf{w}_t$$

- FP方程式を時間について逆方向に解いたときのSDEは？

$$\begin{aligned} \partial_t p_t(\mathbf{x}) &= -\nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) + \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right] \\ &= -\nabla \cdot \left[(\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \nabla \log p_t(\mathbf{x})) p_t(\mathbf{x}) + \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right] \end{aligned}$$



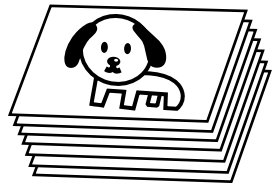
$$d\mathbf{x}_t = \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t) - g(t)^2 \nabla \log p_t(\mathbf{x}_t) \right] dt + g(t) d\tilde{\mathbf{w}}_t$$

逆過程を表すSDE

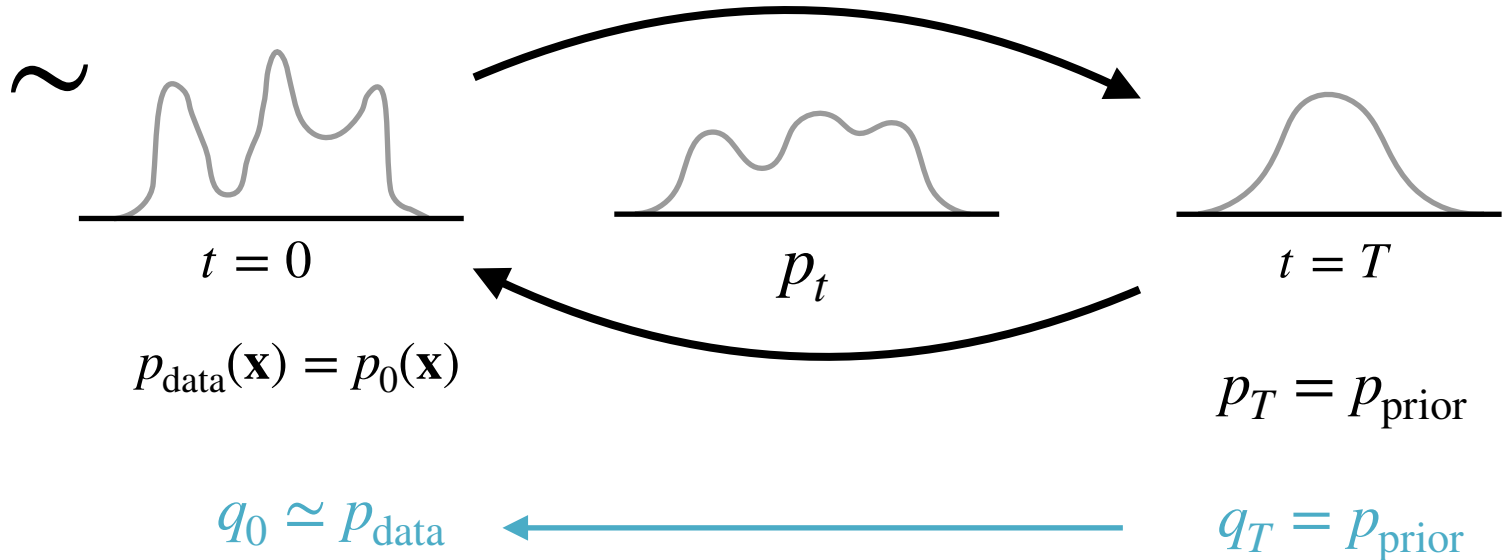
拡散モデルの仕組み

[Song et. al., ICML'21]

順過程: ノイズを付加 $d\mathbf{x}_t = \mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t)dt + g(t)d\mathbf{w}_t$



訓練データ



スコア関数

逆過程: 画像生成 $d\mathbf{x}_t = \left[\mathbf{f}(t, \mathbf{x}_t) - g(t)^2 \frac{\nabla \log p_t(\mathbf{x}_t)}{\simeq s_\theta(\mathbf{x}_t, t)} \right] dt + g(t)d\tilde{\mathbf{w}}_t$

訓練時の損失関数

- $\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t)$ は以下の損失関数を最小化するように学習

$$\mathcal{L}(\theta) = \int_0^T \frac{g(t)^2}{2} \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_t} \left[\left\| \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}_t, t) - \nabla \log p_t(\mathbf{x}_t) \right\|^2 \right] dt$$

- この損失関数は、 $D_{\text{KL}}(p_0 \parallel q_0)$ のバウンドを与える: [Song et. al., NeurIPS'21]

$$D_{\text{KL}}(p_0 \parallel q_0) \leq D_{\text{KL}}(p_T \parallel q_T) + \mathcal{L}(\theta)$$

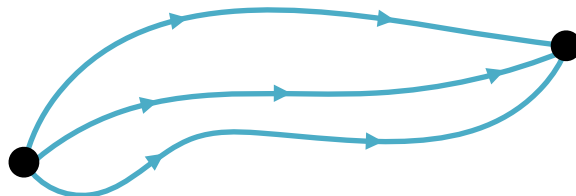
2. 経路積分により拡散モデルを理解する

量子力学における経路積分

- 経路積分: 量子力学・場の量子論の定式化のひとつ
- 観測量 $\mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]})$ の期待値は次のように表現できる

$$\langle \mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) \rangle = N \sum_{\text{paths}} e^{i\mathcal{A}[\{\mathbf{x}_t\}]/\hbar} \mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]})$$

$\mathcal{A}[\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}]$: 「作用」



- 古典力学: 作用を最小化する経路 $\delta\mathcal{A}[\{\mathbf{x}_t\}] = 0$

経路積分による拡散モデルの定式化

- SDE $d\mathbf{x}_t = \mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t)dt + g(t)d\mathbf{w}_t$ に従う \mathbf{x}_t からなる観測量 $\mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\})$ の期待値は、以下のように経路積分表示できる:

$$\mathbb{E} [\mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\})] = \int [D\mathbf{x}_t] \mathcal{O}(\{\mathbf{x}_t\}) \underbrace{p_0(\mathbf{x}_0) e^{-\mathcal{A}}}_{=: P(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) \text{ 経路の実現確率}}$$

作用

$$\mathcal{A} := \int_0^T \frac{1}{2g(t)^2} \left\| \dot{\mathbf{x}}_t - \mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t) \right\|^2 dt$$

Onsager-Machlup 関数として知られる

[Onsager-Machlup, Phys. Rev., 1953]

経路積分による逆過程の導出

- 逆過程のSDE:
$$d\mathbf{x}_t = \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t)dt + g(t)d\tilde{\mathbf{w}}_t$$

$$\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t) := \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \nabla \log p_t(\mathbf{x})$$

- 経路の実現確率は以下のように書ける

$$P(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = p_0(\mathbf{x}_0)e^{-\mathcal{A}} = e^{-\tilde{\mathcal{A}}} p_T(\mathbf{x}_T)$$

逆過程における作用

$$\tilde{\mathcal{A}} =: \int_0^T \frac{1}{2g(t)^2} \left\| \dot{\mathbf{x}}_t - \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{x}_t, t) \right\|^2 dt$$

経路積分による損失関数の導出

- データ拡散における経路の実現確率 $P(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = e^{-\tilde{\mathcal{A}}} p_T(\mathbf{x}_T)$

- モデルにおける経路の実現確率 $Q(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = e^{-\tilde{\mathcal{A}}_\theta} q_T(\mathbf{x}_T)$

$$\tilde{\mathcal{A}}_\theta := \int_0^T \frac{1}{2g(t)^2} \left\| \dot{\mathbf{x}}_t - \tilde{\mathbf{f}}_\theta(\mathbf{x}_t, t) \right\|^2 dt, \quad \tilde{\mathbf{f}}_\theta(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t)$$

- データ分布とモデルの作る分布のKLダイバージェンスは上から抑えられる:

$$\begin{aligned} D_{\text{KL}}(p_0 \parallel q_0) &\leq D_{\text{KL}}(P \parallel Q) = \mathbb{E}_P \left[\log \frac{P}{Q} \right] \\ &\quad \text{データ処理不等式} \\ &= D_{\text{KL}}(p_T \parallel q_T) + \underbrace{\mathbb{E}_P [\tilde{\mathcal{A}}_\theta - \tilde{\mathcal{A}}]} \\ &= \int_0^T \frac{g(t)^2}{2} \mathbb{E}_{p_t} \left[\left\| \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}_t, t) - \nabla \log p_t(\mathbf{x}_t) \right\|^2 \right] dt \end{aligned}$$

「古典極限」からWKB近似へ

拡散モデルの生成過程

- 確率的: $d\mathbf{x}_t = [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t)] dt + g(t) d\tilde{\mathbf{w}}_t$

- 決定論的: **確率フロー(Probability Flow, PF) ODE** [Song et. al., ICML'21]

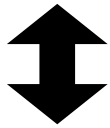
$$d\mathbf{x}_t = \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \right] dt$$

- 上記のサンプリング手法は、学習したスコアが完璧($\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) = \nabla \log p_t(\mathbf{x})$)のときは等価

拡散モデルの生成過程

- パラメータ \mathfrak{h} を導入し, FP方程式を書き換える

$$\begin{aligned}\partial_t p_t(\mathbf{x}) &= -\nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p_t(\mathbf{x}) - \frac{g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) - \frac{\mathfrak{h}g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) + \frac{\mathfrak{h}g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right] \\ &= -\nabla \cdot \left[\left(\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \frac{1 + \mathfrak{h}}{2} g(t)^2 \nabla \log p_t(\mathbf{x}) \right) p_t(\mathbf{x}) + \frac{\mathfrak{h}g^2(t)}{2} \nabla p_t(\mathbf{x}) \right]\end{aligned}$$



$$d\mathbf{x}_t = \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t) - \frac{1 + \mathfrak{h}}{2} g(t)^2 \nabla \log p_t(\mathbf{x}) \right] dt + \sqrt{\mathfrak{h}} g(t) d\tilde{\mathbf{w}}_t$$

$\mathfrak{h} = 1$ 確率的サンプリング

$\mathfrak{h} = 0$ 決定論的サンプリング (PF-ODE)

拡散モデルの生成過程

- 確率的:
$$d\mathbf{x}_t = [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t)] dt + g(t) d\tilde{\mathbf{w}}_t$$
- 決定論的: **確率フロー(Probability Flow, PF) ODE** [Song et. al., ICML'21]

$$d\mathbf{x}_t = \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \right] dt$$

• 利点

- 生成速度が早い
- サンプル \mathbf{x}_0 の対数尤度を「変数変換公式」により評価できる

$$\log p_0(\mathbf{x}_0) = \log p_T(\mathbf{x}_T) + \int_0^T \nabla \cdot \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}_t, t) - \frac{1}{2} g(t)^2 \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}_t, t) \right] dt$$

$\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}$ はPF-ODEの解

- **弱点: 生成画像の品質が劣る**

スコアが不完全である場合、上記2つのサンプリングは等価ではない

「古典極限」からWKB近似へ

- 確率的・決定論的サンプリングの1-パラメータ内挿

$$d\mathbf{x}_t = \tilde{\mathbf{F}}_{\theta, \mathfrak{h}}(\mathbf{x}_t, t)dt + \sqrt{\mathfrak{h}}g(t)d\tilde{\mathbf{w}}_t \quad \mathfrak{h} = 1 \quad \text{確率的}$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_{\theta, \mathfrak{h}}(\mathbf{x}, t) := \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \frac{1 + \mathfrak{h}}{2}g(t)^2\mathbf{s}_{\theta}(\mathbf{x}, t) \quad \mathfrak{h} = 0 \quad \text{決定論的}$$

- モデルにおける経路の確率分布は、

$$Q_{\mathfrak{h}}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = e^{-\frac{1}{\mathfrak{h}}\tilde{\mathcal{A}}_{\theta, \mathfrak{h}}} q_T(\mathbf{x}_T) \longleftrightarrow e^{i\frac{1}{\hbar}\mathcal{A}} \quad \text{in QM}$$

$$\tilde{\mathcal{A}}_{\theta, \mathfrak{h}} := \int_0^T \frac{1}{2g(t)^2} \left\| \dot{\mathbf{x}}_t - \tilde{\mathbf{F}}_{\theta, \mathfrak{h}}(\mathbf{x}, t) \right\|^2 dt$$

- パラメータ \mathfrak{h} はプランク定数 \hbar に対応

「古典極限」からWKB近似へ

- 決定論的サンプリングは、古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ として実現

$$Q_{\hbar}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = e^{-\frac{1}{\hbar} \tilde{\mathcal{A}}_{\theta, \hbar}} q_T(\mathbf{x}_T) \quad \tilde{\mathcal{A}}_{\theta, \hbar} := \int_0^T \frac{1}{2g(t)^2} \left\| \dot{\mathbf{x}}_t - \tilde{\mathbf{F}}_{\theta, \hbar}(\mathbf{x}, t) \right\|^2 dt$$

$$\xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \prod_{t \in [0, T]} \delta \left(\dot{\mathbf{x}}_t - \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}, t) \right) q_T(\mathbf{x}_T) \quad \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}, t) := \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} g(t)^2 \mathbf{s}_{\theta}(\mathbf{x}, t)$$

- $\hbar \neq 0$ の場合に、尤度計算をWKB展開を用いて行うことができる
- 任意の \hbar における対数尤度は以下の関係を満たす:

$$\log q_0^{\hbar}(\mathbf{x}_0) = \log q_T^{\hbar}(\mathbf{x}_T) + \int_0^T \nabla \cdot \left(\tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}_t, t) - \frac{\hbar g(t)^2}{2} [\mathbf{s}_{\theta}(\mathbf{x}_t, t) - \nabla \log q_t^{\hbar}(\mathbf{x}_t)] \right) dt$$

$\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}$ は以下のODEの解

$$\dot{\mathbf{x}}_t = \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}_t, t) - \frac{\hbar g(t)^2}{2} [\mathbf{s}_{\theta}(\mathbf{x}_t, t) - \nabla \log q_t^{\hbar}(\mathbf{x}_t)]$$

「古典極限」からWKB近似へ

- \hbar について展開し、一次まで残す

$$\log q_0^{\hbar}(\mathbf{x}_0) = \log q_0^{\hbar=0}(\mathbf{x}_0) + \hbar \left[\delta \mathbf{x}_T \cdot \nabla \log q_T^{\hbar=0}(\mathbf{x}_T) + \int_0^T \nabla \cdot \delta \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}_t, \delta \mathbf{x}_t, t) dt \right]$$

一次の補正項

$\{\mathbf{x}_t, \delta \mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}$ は初期条件 $\mathbf{x}_{t=0} = \mathbf{x}_0, \delta \mathbf{x}_{t=0} = \mathbf{0}$ のもとでの以下のODEの解

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}}_t = \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}_t, t) \\ \dot{\delta \mathbf{x}}_t = (\delta \mathbf{x}_t \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{f}}_{\theta}^{\text{PF}}(\mathbf{x}_t, t) - \frac{g(t)^2}{2} [\mathbf{s}_{\theta}(\mathbf{x}_t, t) - \nabla \log q_t^{\hbar=0}(\mathbf{x}_t)] \end{cases}$$

ノイズはサンプルの質を上げる

SWISS-ROLL			
SDE (NLL)	t_{ol}	1ST-CORR	ERRORS
SIMPLE (1.39 ± 0.05)	1e-3	-0.31 ± 0.21	0.13 ± 0.00
	1e-5	-0.44 ± 0.38	0.13 ± 0.00
COSINE (1.42 ± 0.02)	1e-3	-1.59 ± 0.57	0.35 ± 0.00
	1e-5	-3.27 ± 1.11	0.37 ± 0.02

25-GAUSSIAN			
SDE (NLL)	t_{ol}	1ST-CORR	ERRORS
SIMPLE (-1.22 ± 0.01)	1e-3	-3.64 ± 0.49	0.31 ± 0.00
	1e-5	-3.61 ± 0.64	0.32 ± 0.01
COSINE (-1.71 ± 0.02)	1e-3	-17.57 ± 5.56	0.70 ± 0.01
	1e-5	-19.65 ± 17.46	0.67 ± 0.03

負の対数尤度 $\mathbb{E}[-\log q_0]$ に対する $O(\mathfrak{h}^1)$ の補正

符号が負 → ノイズがあると品質が上がる

まとめ

- 拡散モデルの経路積分表式を導入
- 拡散モデルの逆過程や損失関数を(物理屋にわかりやすく)導出可能
- PF ODEによる決定論的サンプリングは、古典極限として実現

$$Q_{\hbar}(\{\mathbf{x}_t\}_{t \in [0, T]}) = e^{-\frac{1}{\hbar} \tilde{\mathcal{A}}_{\theta, \hbar}} q_T(\mathbf{x}_T) \longleftrightarrow e^{i\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}} \quad \text{in QM}$$

- WKB展開を用いた尤度評価
- 2024年11月出版の「学習物理学入門」
の中でも解説しています

