拡散生成モデルの基礎：物理学的な視点から

田中 章詞（RIKEN AIP / iTHEMS
Keio

レビュー論文（"Generative Diffusion Models: Principles and Applications"
J. Phys. Soc. Jpn. 94, 031004 (2025) に基づく）

はじめに

生成AI

- ChatGPT / Gemini / Claude / …

  自己回帰モデル

  → [A][B][C][?] の [?] を出力

  主にテキストを生成

- Suno / Udio / …

  ???モデル

  音楽を生成

- Stable Diffusion / MidJourney / DALL·E 3 / …

  拡散モデル　今日のターゲット

  主に画像を生成

本日の内容

- 1. 生成モデルとは?

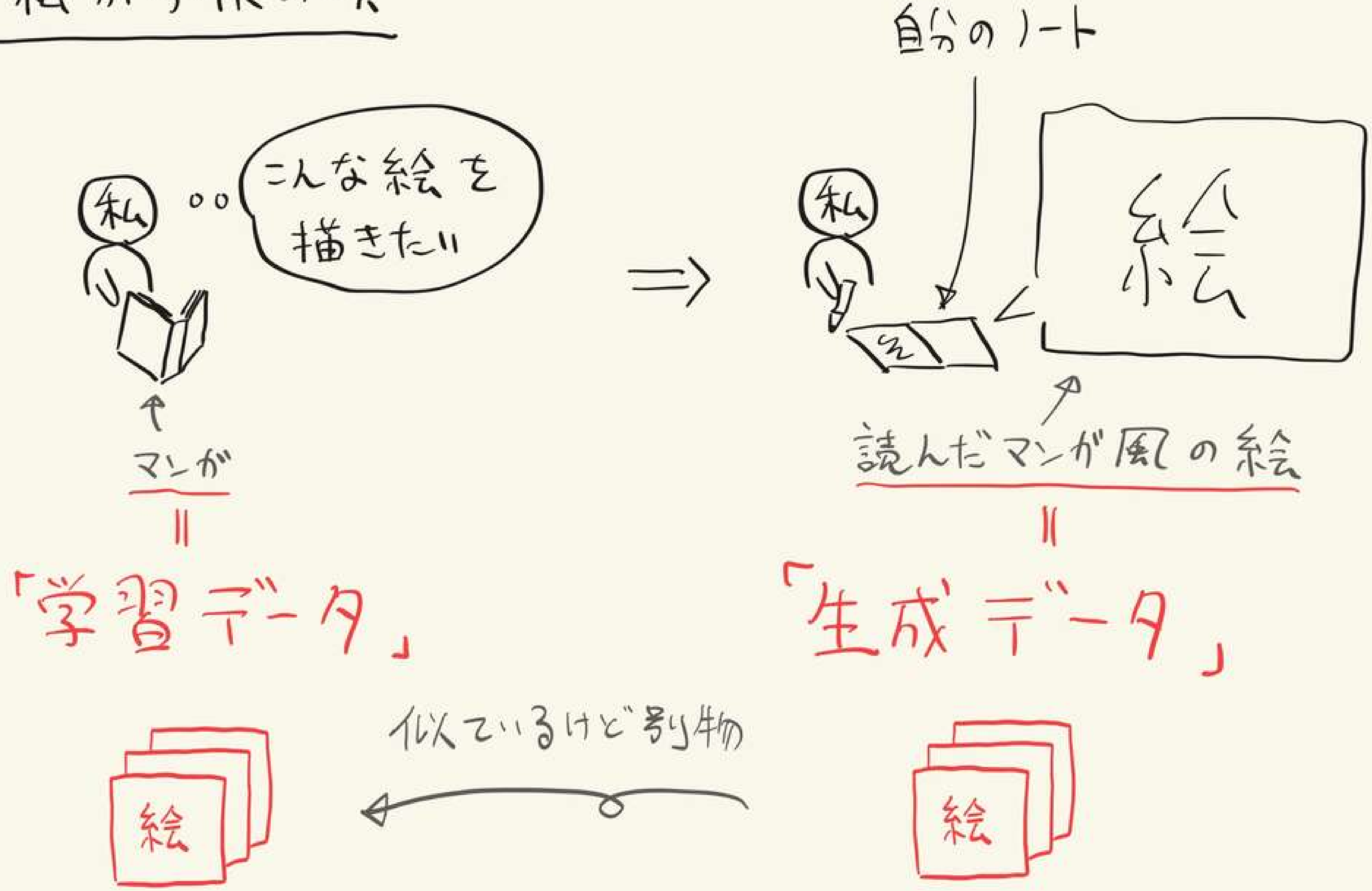
- 2. 拡散モデルとは

- 3. 粒子と分布の対応（その1）

- 4. 粒子と分布の対応（その2）

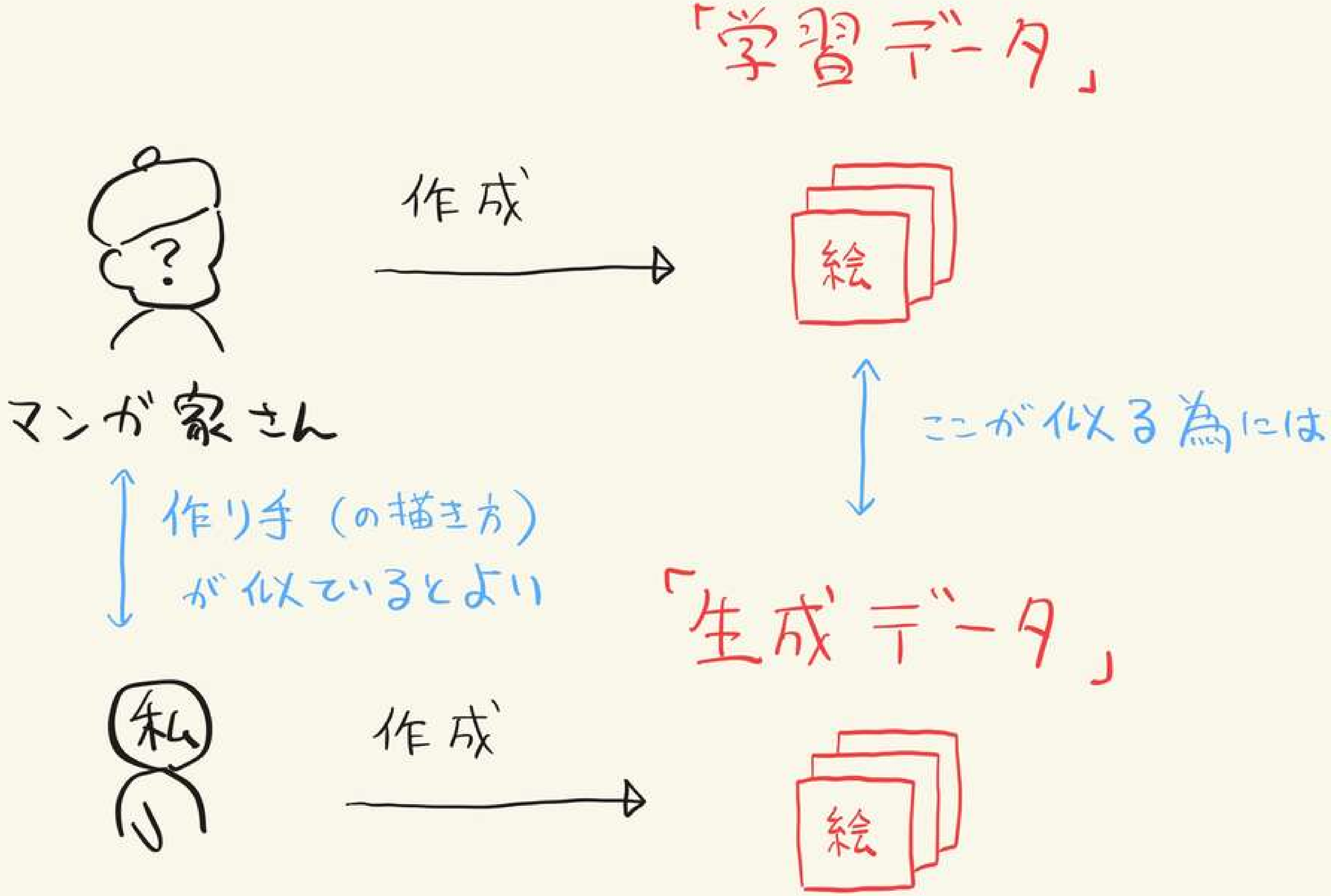
1. 生成モデルとは?

例：私が子供の頃



1. 生成モデルとは？

例：私が子供の頃



1. 生成モデルとは?

生成モデルの"定義"

P(x)の値は未知なことが多い

「学習データ」

$\cancel{P(x)} \xrightarrow{\text{標本抽出}} x_1, x_2, x_3, \cdots$

~~確率分布~~

どうやって似せるか
=
「学習」

ここが似る為には

分布
が似ているとより

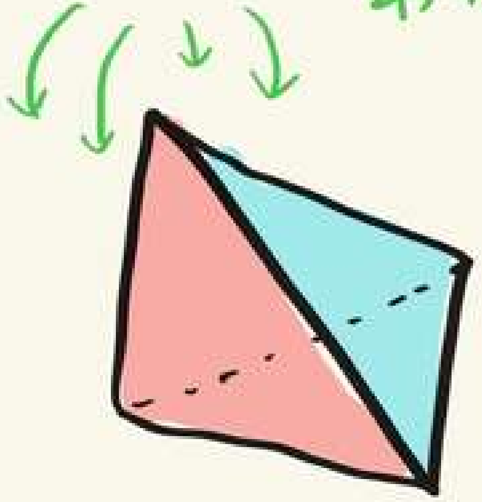
「生成データ」

生成モデル ⇒ $Q(y) \xrightarrow{\text{標本抽出}} y_1, y_2, y_3, \cdots$

1. 生成モデルとは?

例

どの面がどれ位出るか
わからない



(てきとうな形の)4面サイコロ

振る

「学習データ」

出た面 (x)				
出た回数	3	1	6	0

$\frac{\text{出た回数}}{\text{振った回数}}$

なぜこれで
良いか?

「生成データ」

出た面 (x)				
Q(x)	$\frac{3}{10}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{6}{10}$	0

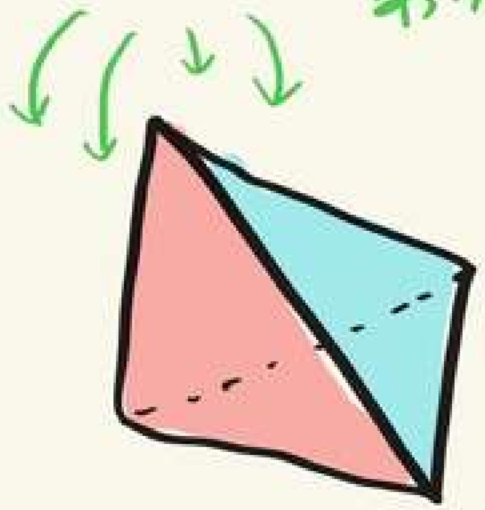
プログラムなど

出た面 (x)				
出た回数	2	1	7	0

1. 生成モデルとは？

例

どの面がどれ位出るか
わからない



(てきとうな形の)4面サイコロ

振る

「学習データ」

出た面(x)	●	●	●	●
出た回数	3	1	6	0

$$\frac{\text{出た回数}}{\text{振った回数}}$$

なぜこれで良いか？

Q(x)の値を決めたい

→ Q(x)で面が出ていると仮定

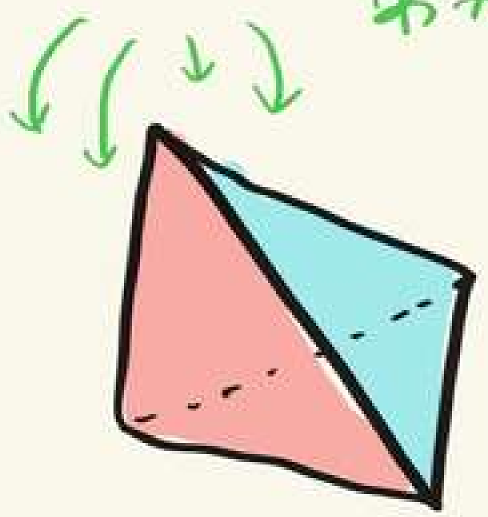
→ 確率Q(●)の事象がN回起こる確率 $= \overbrace{Q(\bullet)\times Q(\bullet)\times\cdots\times Q(\bullet)}^{Q(\bullet)^N}$

→「学習データ」が出てくる確率 $\propto Q(\bullet)^3\times Q(\bullet)^1\times Q(\bullet)^6\times Q(\bullet)^0$

1. 生成モデルとは？

例

どの面がどれ位出るか
わからない



(てきとうな形の)4面サイコロ

振る →

「学習データ」

出た面(x)	●	●	●	●
出た回数	3	1	6	0

$$\frac{\text{出た回数}}{\text{振った回数}}$$

なぜこれで良いか？

Q(x) の値を決めたい

→「学習データ」が出てくる確率 $\propto Q(●)^3 \times Q(●)^1 \times Q(●)^6 \times Q(●)^0$

3. これが出てくる！

2. この値を大きくしたい

Q(x)は確率なので：$Q(●) + Q(●) + Q(●) + Q(●) = 1$

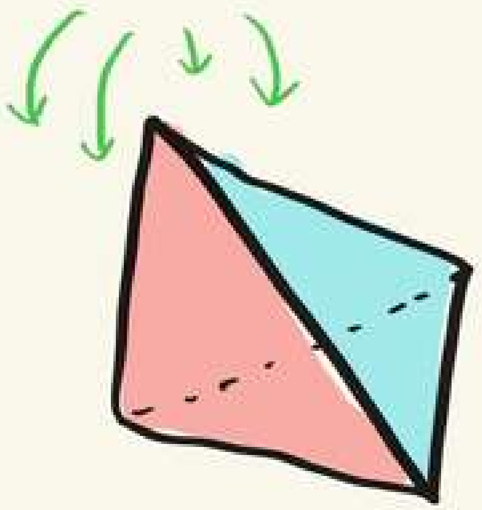
1. この制約を満たしつつ

最尤推定 (Maximum Likelihood Estimation, MLE) という.

1. 生成モデルとは？

一般化

面 x が出る確率 P(x)



(てきとうな形の) 4面サイコロ

N回 振る ⟶

「学習データ」

出た面 (x)	●	●	●	●
出た回数	$n_{●}$	$n_{●}$	$n_{●}$	$n_{●}$

重要な性質

- KL (P‖Q) ≥ 0
- 等号は P = Q のときのみ成立

Q(x) の値を決めたい

→「学習データ」が出てくる確率

組み合わせの数

$$= {}_N C_{n_{●}\, n_{●}\, n_{●}\, n_{●}} \times Q(●)^{n_{●}} \times Q(●)^{n_{●}} \times Q(●)^{n_{●}} \times Q(●)^{n_{●}}$$

$$\xrightarrow{(N\to\infty)} e^{N\times\left(-\boxed{\sum_{x\in\{●●●●\}} P(x)\log\frac{P(x)}{Q(x)}}\right)}$$

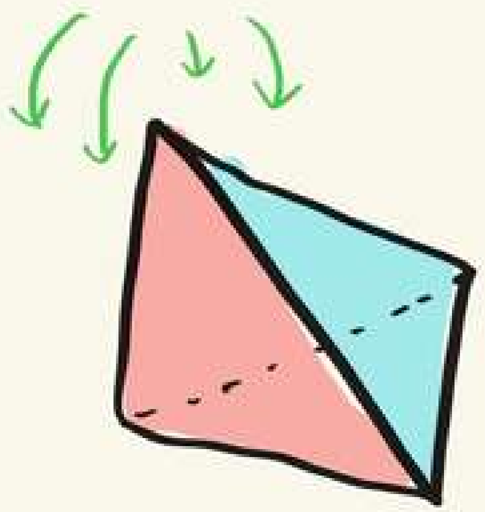
KL(P‖Q)

"Kullback-Leibler ダイバージェンス"

■ 1、生成モデルとは？

一般化

面 x が出る確率 $P(x)$



(てきとうな形の)4面サイコロ

N回 振る ⟶

「学習データ」

出た面(x)	●	●	●	●
出た回数	$n_{●}$	$n_{●}$	$n_{●}$	$n_{●}$

$Q(●)^{n_●} \times Q(●)^{n_●} \times Q(●)^{n_●} \times Q(●)^{n_●}$

を大きくするくらいしかできない。

⇕

$\frac{n_●}{N}\log\frac{1}{Q(●)} + \frac{n_●}{N}\log\frac{1}{Q(●)} + \frac{n_●}{N}\log\frac{1}{Q(●)} + \frac{n_●}{N}\log\frac{1}{Q(●)}$

を小さくする

$(N\to\infty)$

本当は

$KL(P\,\|\,Q) \geq 0$

を小さくしたい

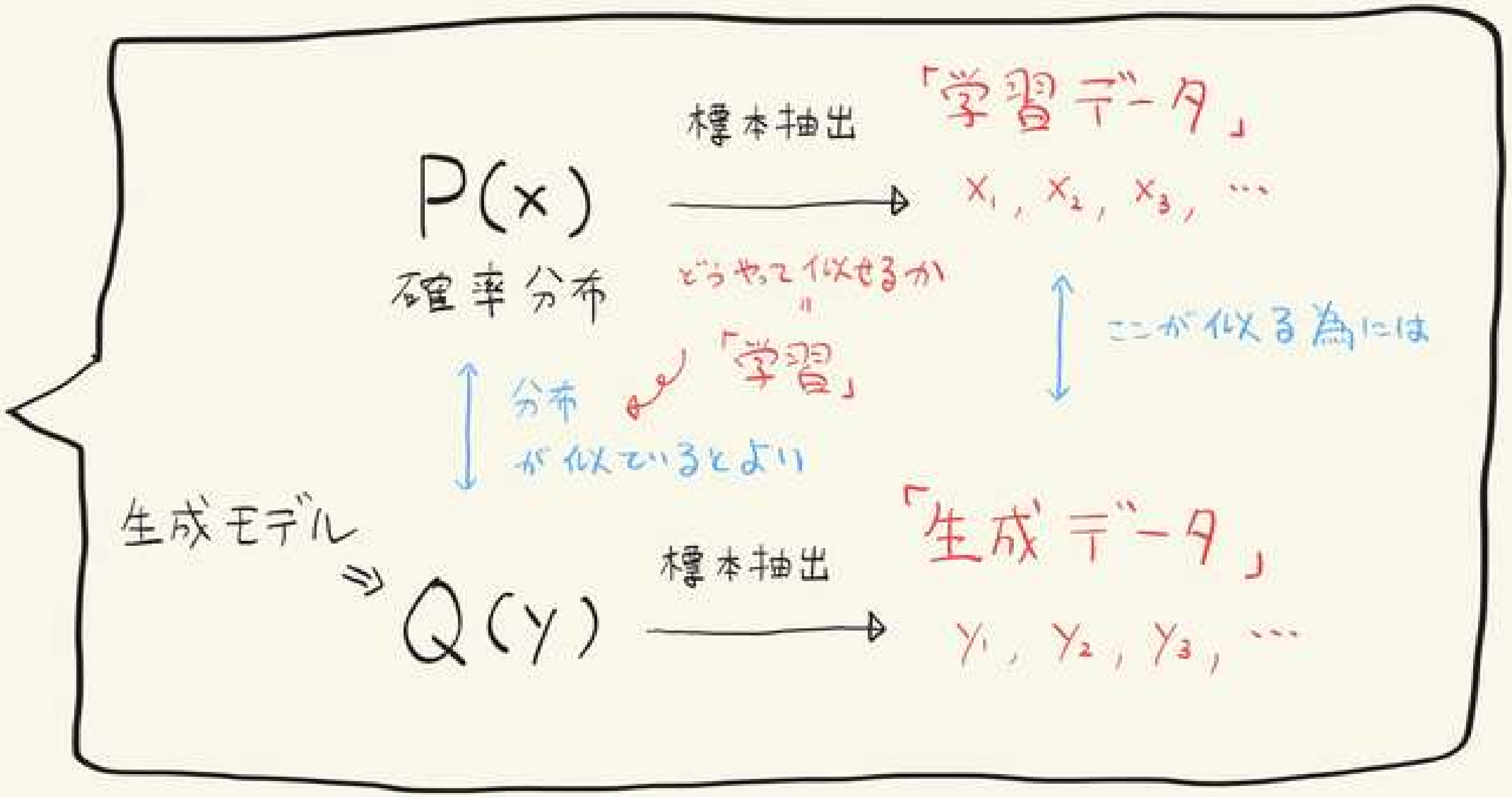
(0でP=Qになる)

$Q(x)$ プログラムなど ⟶

出た面(x)	●	●	●	●
出た回数	–	–	–	–

▨ 本日の内容

▨ 1. 生成モデルとは？



▨ 2. 拡散モデルとは

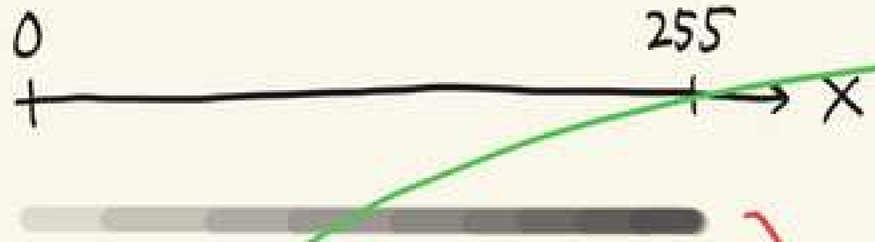
▨ 3. 粒子と分布の対応（その1）

▨ 4. 粒子と分布の対応（その2）

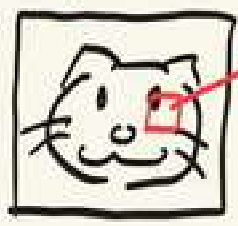
2. 拡散モデルとは

画像＝高次元空間上の点

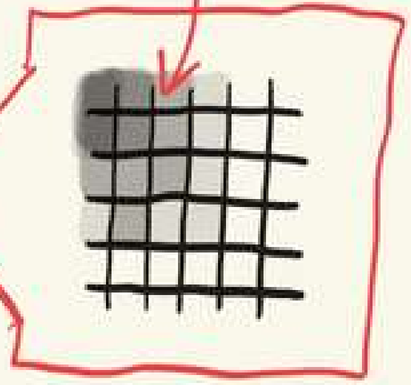
白黒の濃さ



箱の中に0~255の値



拡大すると

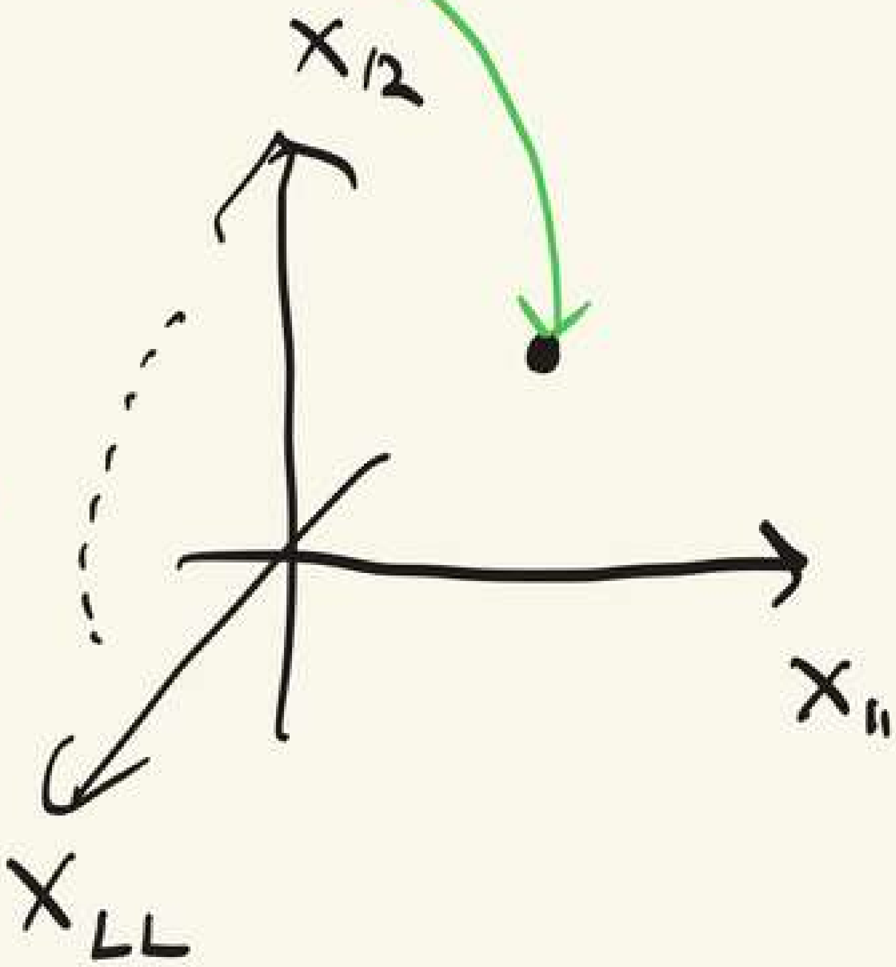


画像は L×L 次元空間上の一点に対応

$$
\begin{matrix}
x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots & x_{1L} \\
x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots & x_{2L} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
x_{L1} & x_{L2} & x_{L3} & \cdots & x_{LL}
\end{matrix}
= (x_{11}, \cdots, x_{21}, \cdots, x_{L1}, \cdots)
$$

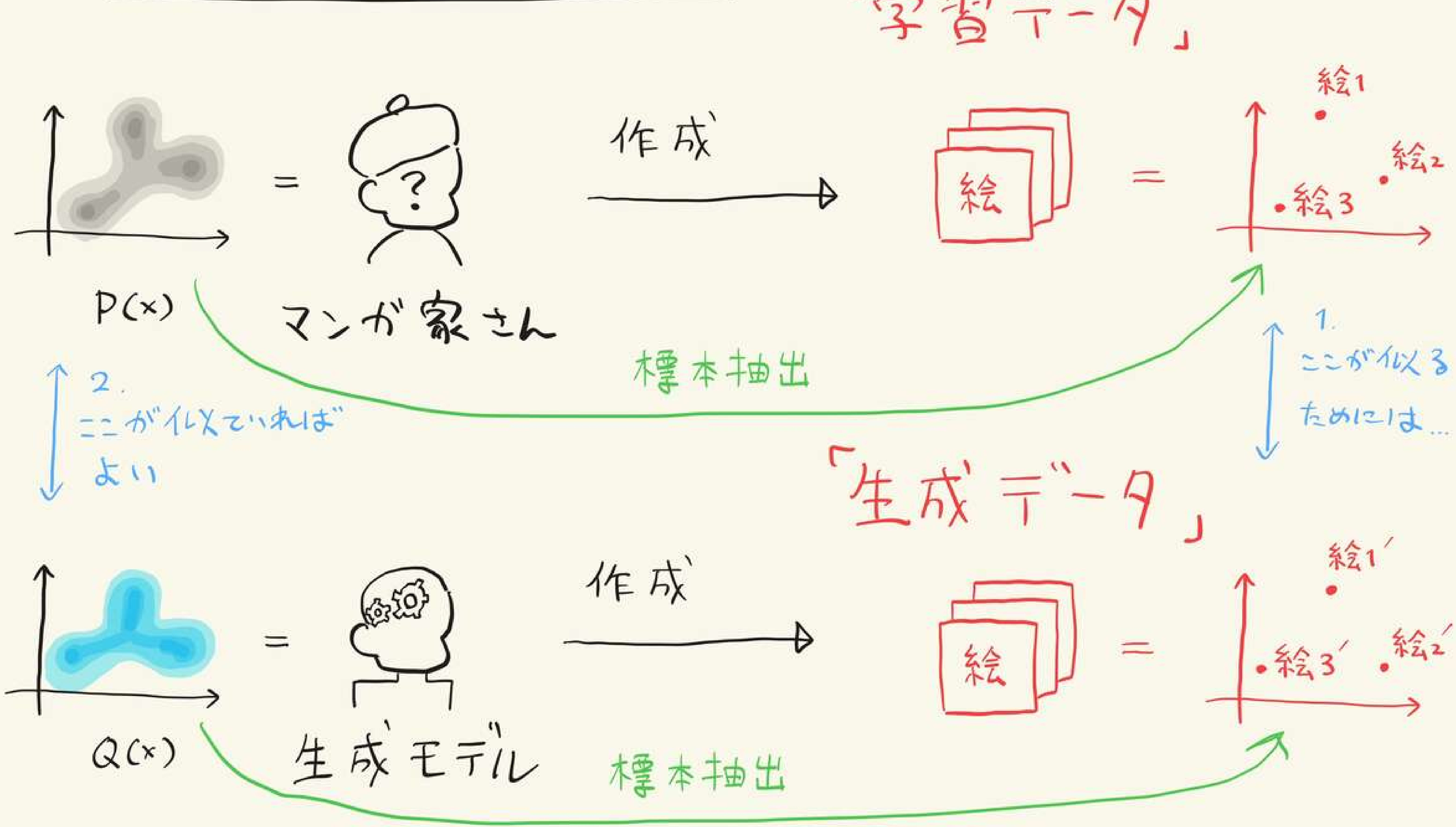
$\Updownarrow$

(x, y, z) の一般化



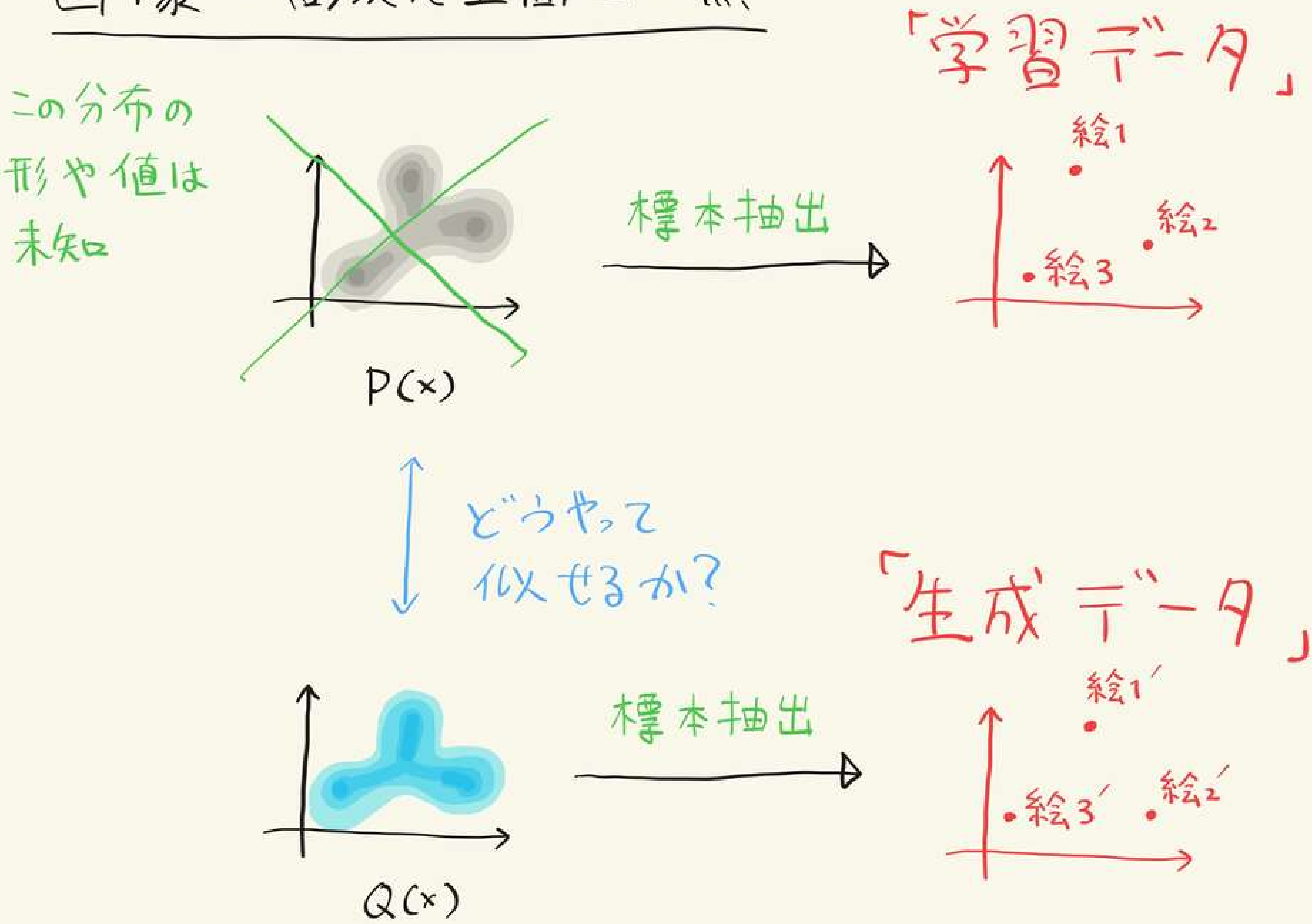
2. 拡散モデルとは

画像 = 高次元空間上の点



2. 拡散モデルとは

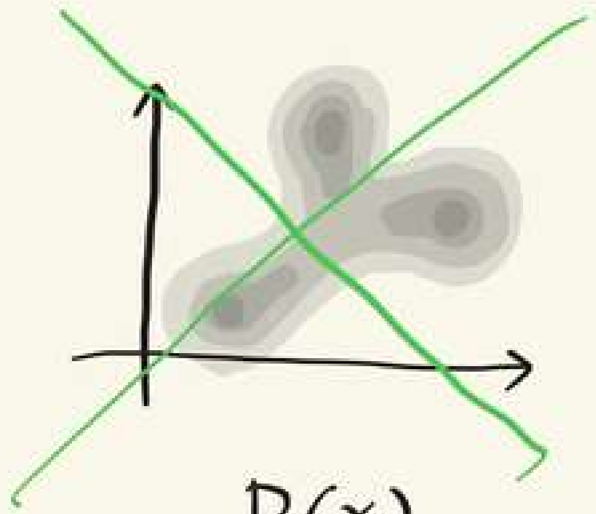
画像＝高次元空間上の点



2. 拡散モデルとは

最尤推定 (MLE)

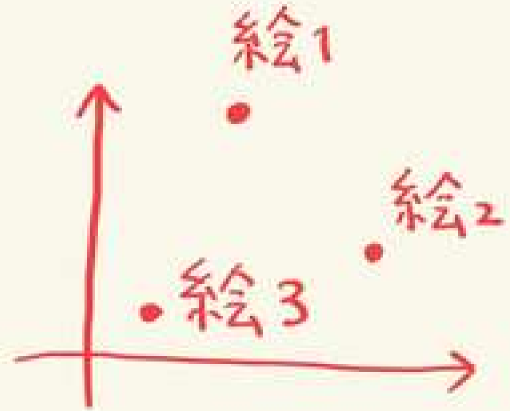
この分布の形や値は未知



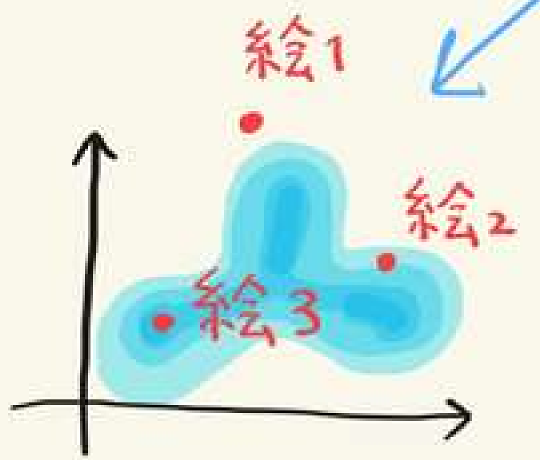
$P(x)$

標本抽出

「学習データ」

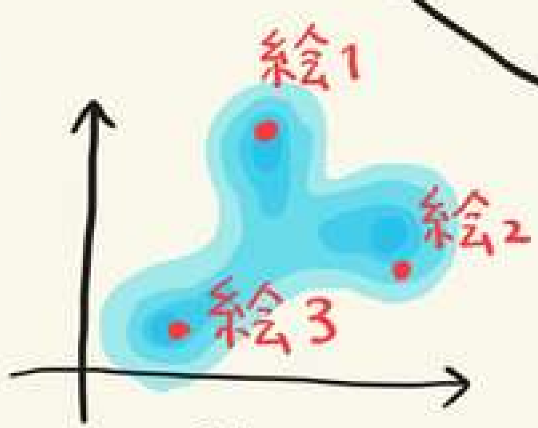


1.「学習データ」を「重ねる」



$Q(x)$

2. 山を変形



$\tilde{Q}(x)$

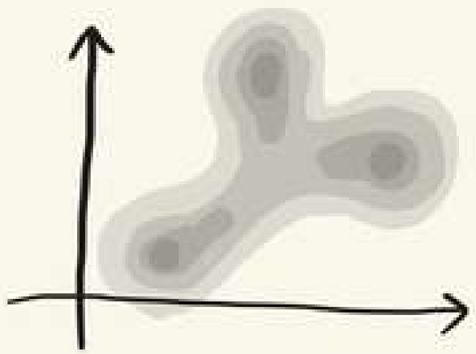
一見良さそうだが.
ここが難しい
なぜなら

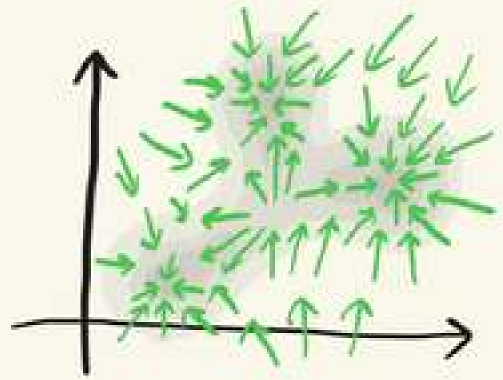
$$1 = \int Q(x)dx$$

を保たないといけないから.

▨ 2. 拡散モデルとは

拡散モデルのヒナ型





$$P(x) = \frac{e^{-V(x)}}{Z}$$

ポテンシャルエネルギー → $-\nabla_x V(x) = F(x)$ は「力」

ここを合わせるようにすると

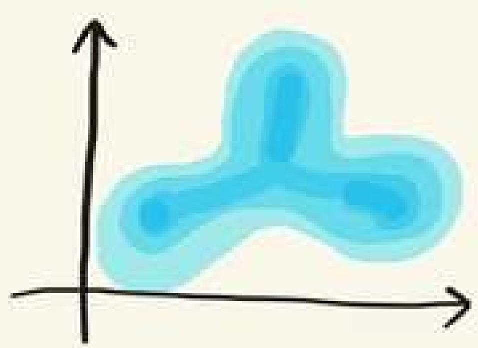
$$1 = \int Q(x)dx$$

を考えなくて良くなる！

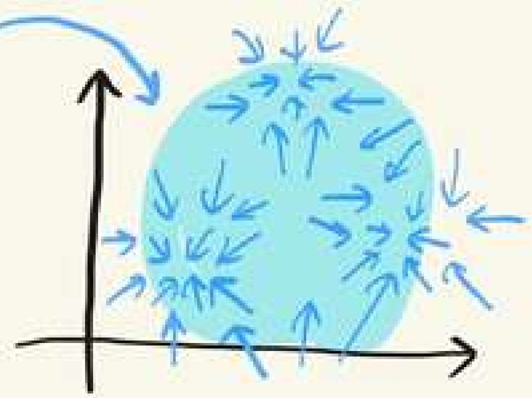
なぜか？

1. 積分して1になるように分布をおく

2. 各点をベクトル場で flow させる（流す）



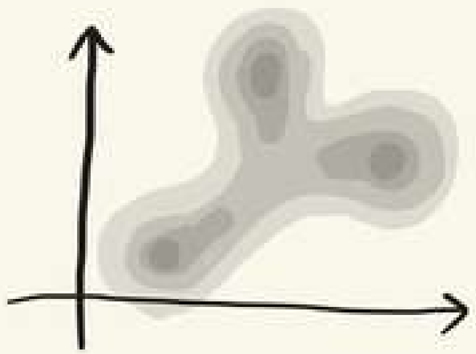
$Q(x)$



ベクトル場 $S(x)$

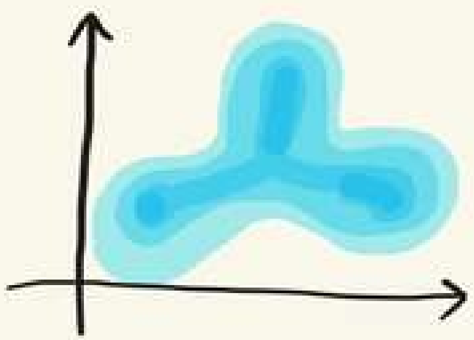
2. 拡散モデルとは

拡散モデルのヒナ型



$$P(x) = \frac{e^{-V(x)}}{Z}$$

ポテンシャルエネルギー



$Q(x)$

具体的には

$$\int P(x)\left(S(x) + \nabla_x V(x)\right)^2 dx \downarrow \text{ を考える.}$$

$$= \int P(x)\left\{S(x)^2 + 2S(x)\cdot \underbrace{\nabla_x V(x)}_{\text{部分積分}}\right\}dx + \text{定数}$$

$$= \int P(x)\left\{S(x)^2 + 2\nabla_x \cdot S(x)\right\} + \text{定数}$$

$\downarrow$ 近似

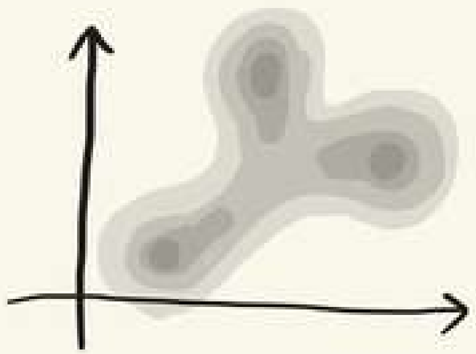
スコアマッチング

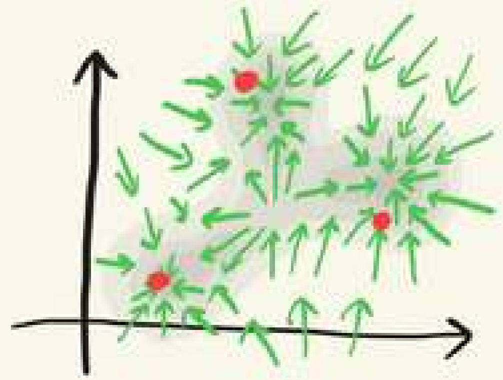
$$\boxed{\frac{1}{N}\sum_{\text{学習データ}}\left\{S(x_{\text{学習データ}})^2 + 2\nabla_x \cdot S(x_{\text{学習データ}})\right\}\downarrow}$$

2. 拡散モデルとは

拡散モデルのヒナ型

直観的な説明

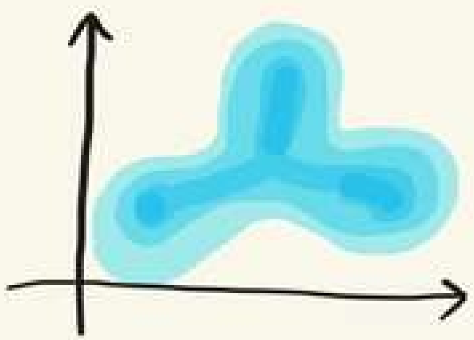




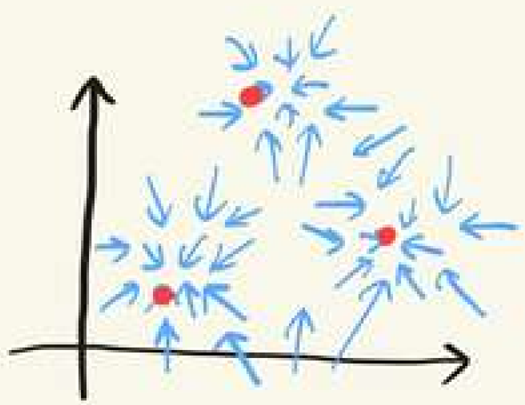
$$P(x) = \frac{e^{-V(x)}}{Z}$$

ポテンシャルエネルギー → $-\nabla_x V(x) = F(x)$

2.「学習データ」上の「力」↗と
モデル↗を合わせる



$Q(x)$

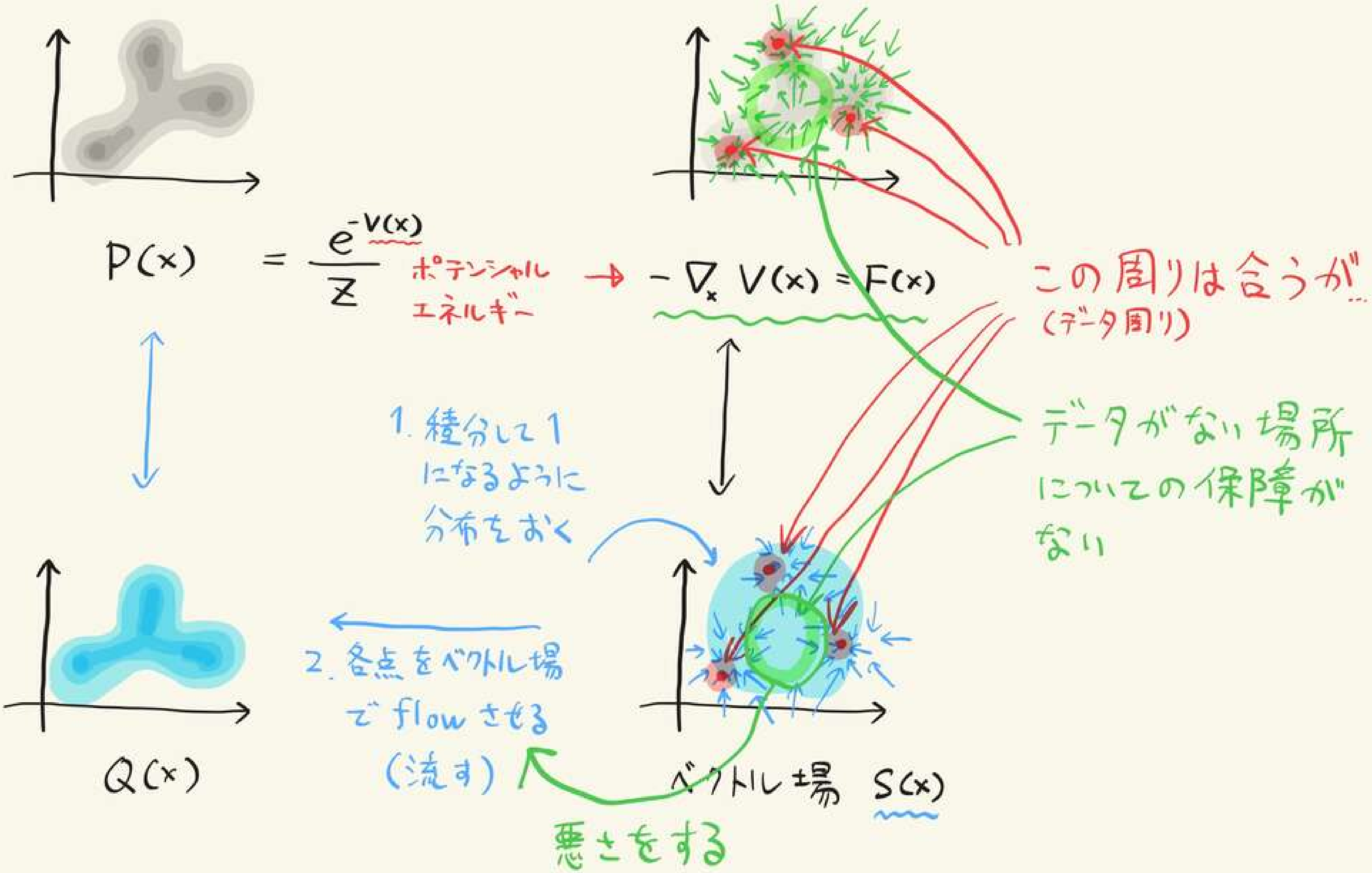


ベクトル場 $S(x)$

← 1. ある程度の連続性を仮定

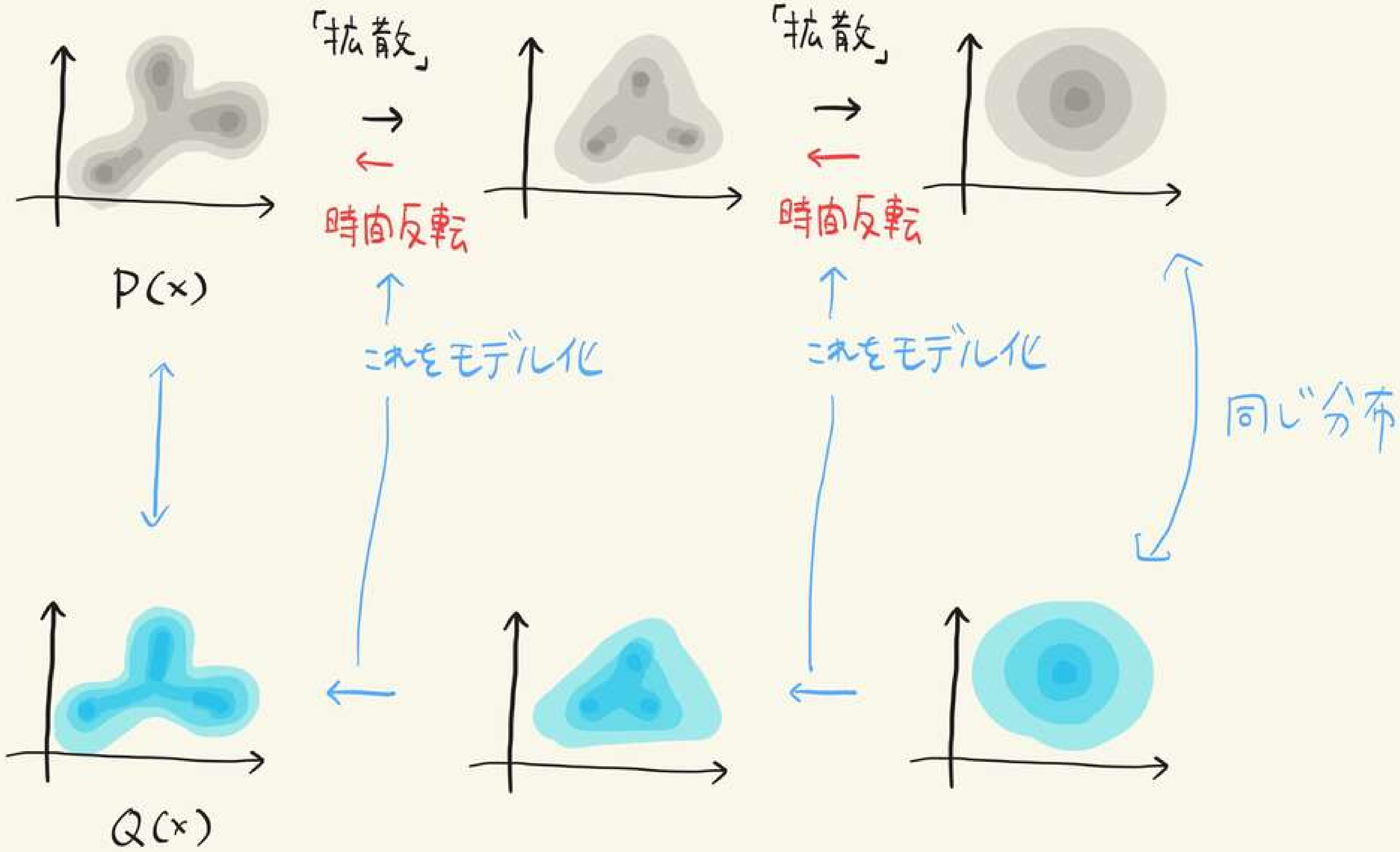
2. 拡散モデルとは

素朴なやり方の弱点



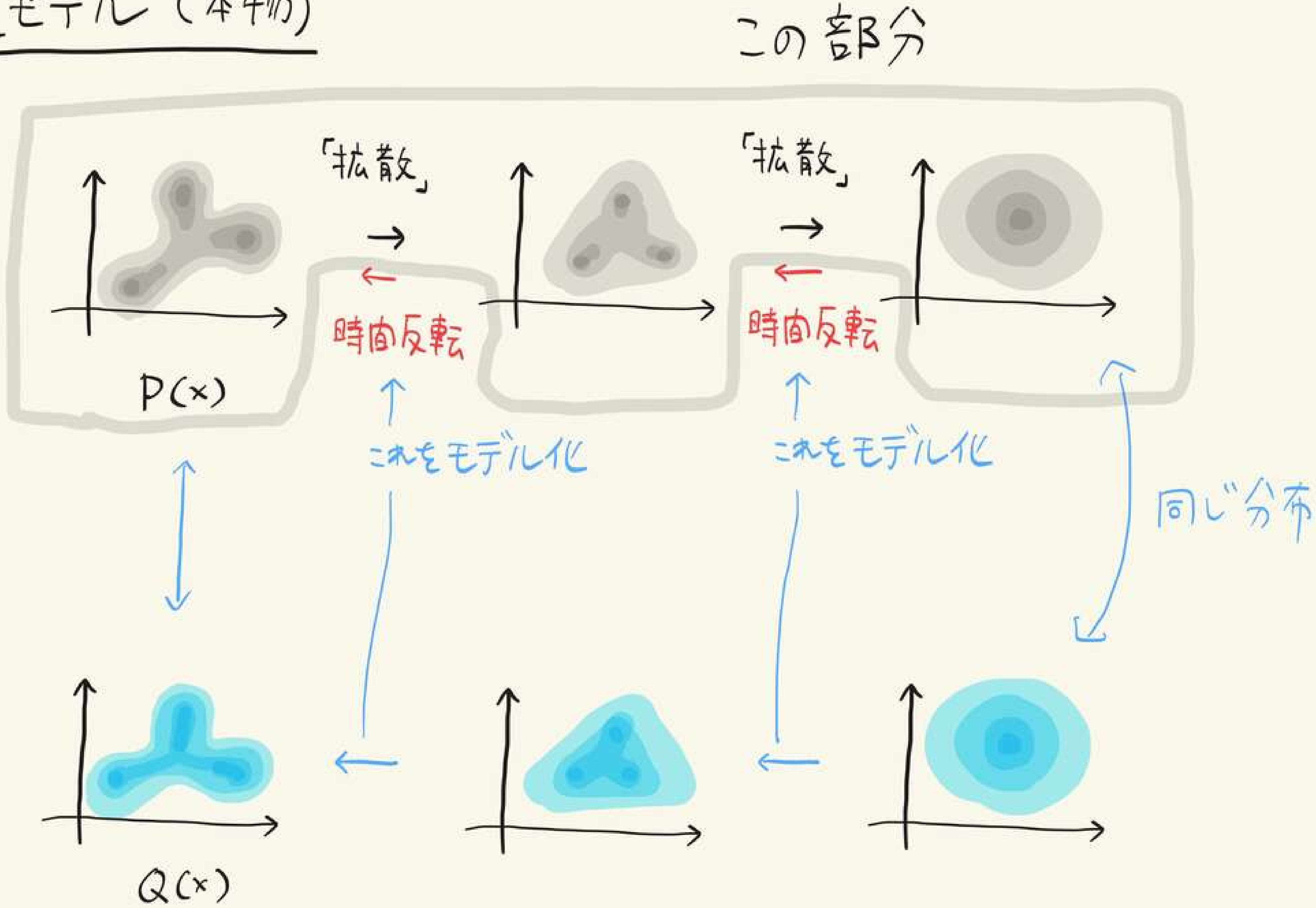
2. 拡散モデルとは

拡散モデル（本物）



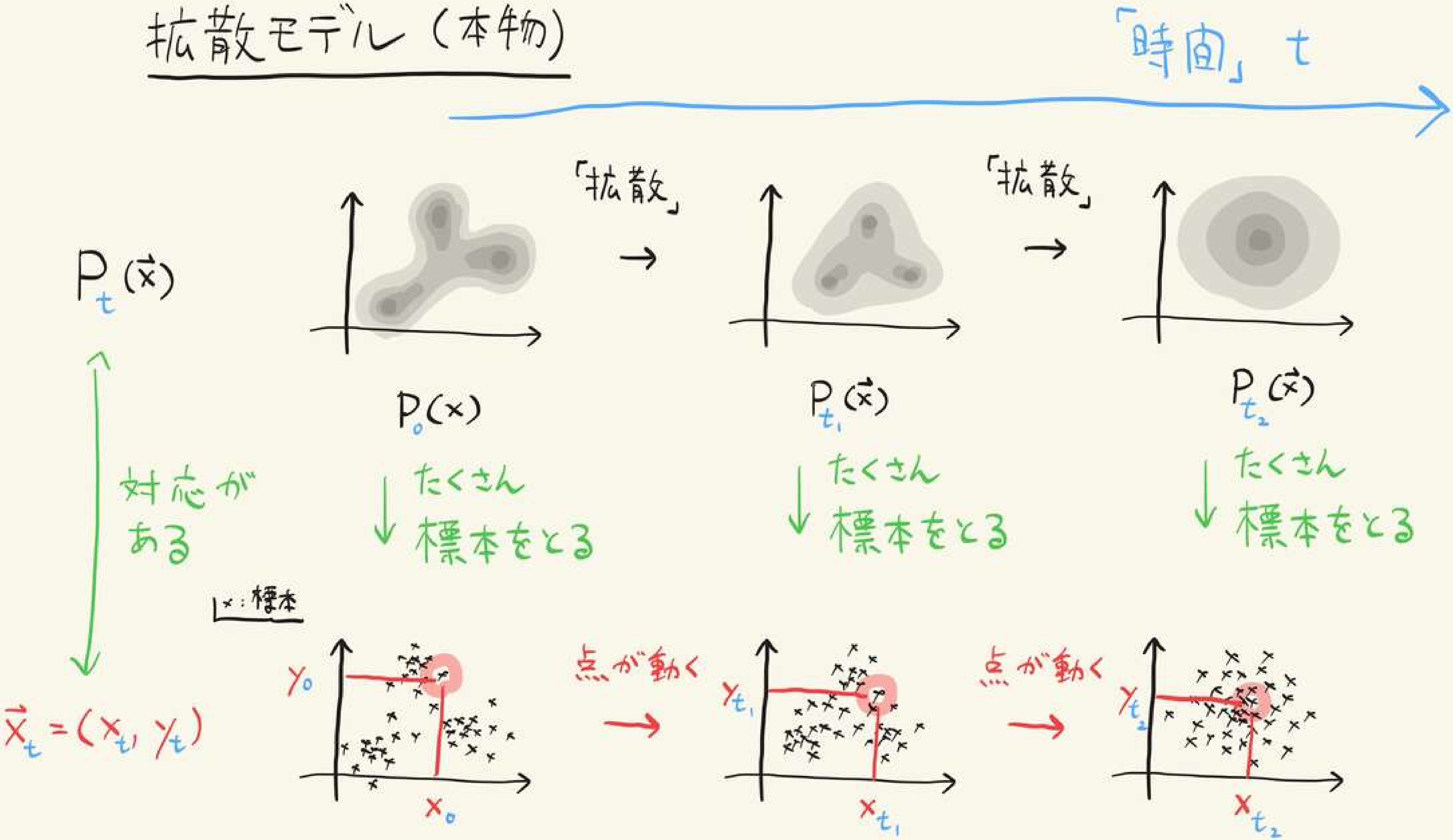
2. 拡散モデルとは

拡散モデル（本物）



2. 拡散モデルとは

拡散モデル（本物）

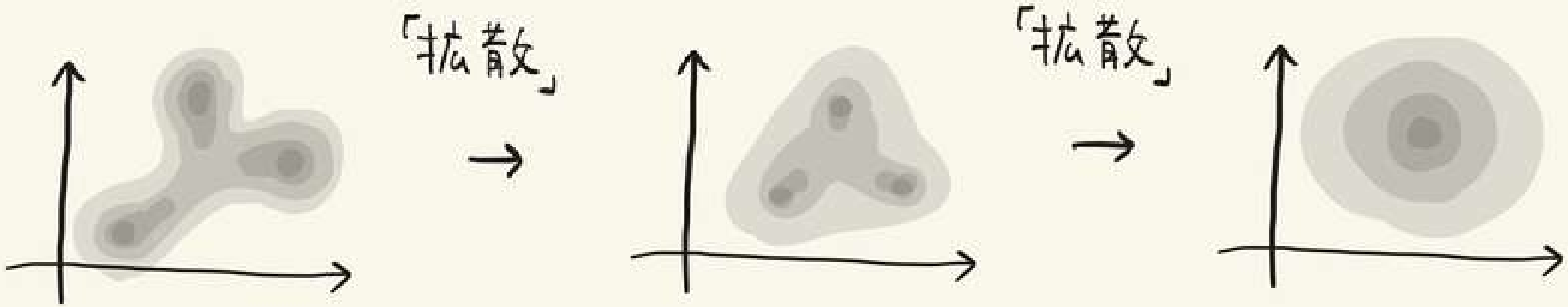


2. 拡散モデルとは

拡散モデル（本物）

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



分布の方程式
=
「連続の方程式」

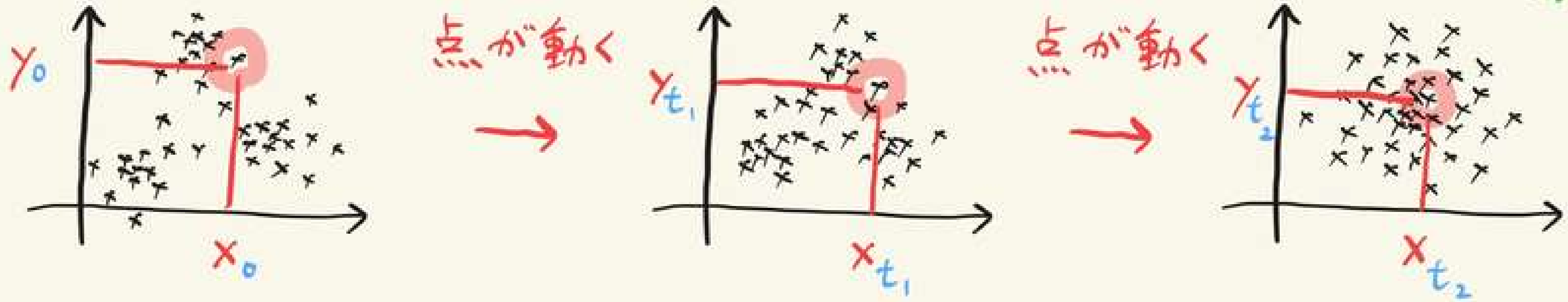
$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{V}_t(\vec{x}) \right)$$

ここを定めると
拡散のしかたが
決まる

対応がある

x：標本

$\vec{X}_t = (x_t, y_t)$



粒子の方程式

$$d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)dt + g_t d\vec{W}_t$$

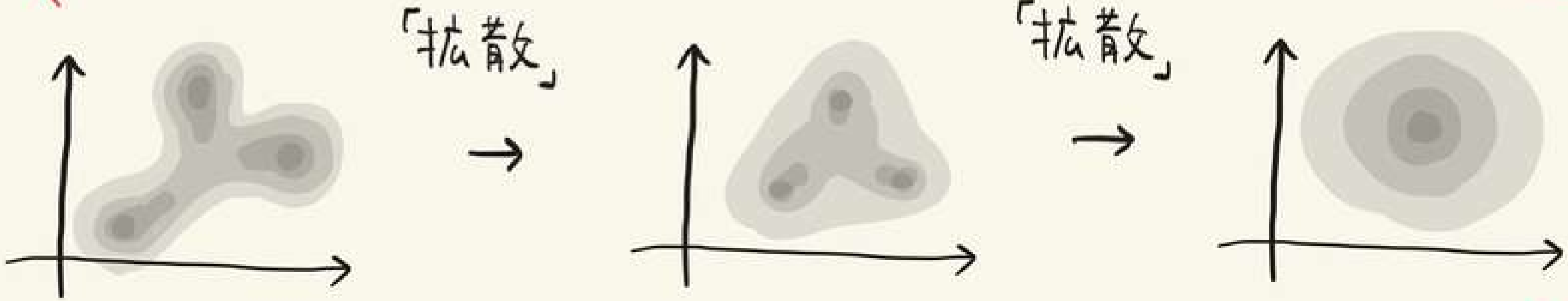
ここを定めると決まる

2. 拡散モデルとは

拡散モデル（本物）

「時間反転」

$P_t(\vec{x})$



対応がある

分布の方程式
=
「連続の方程式」

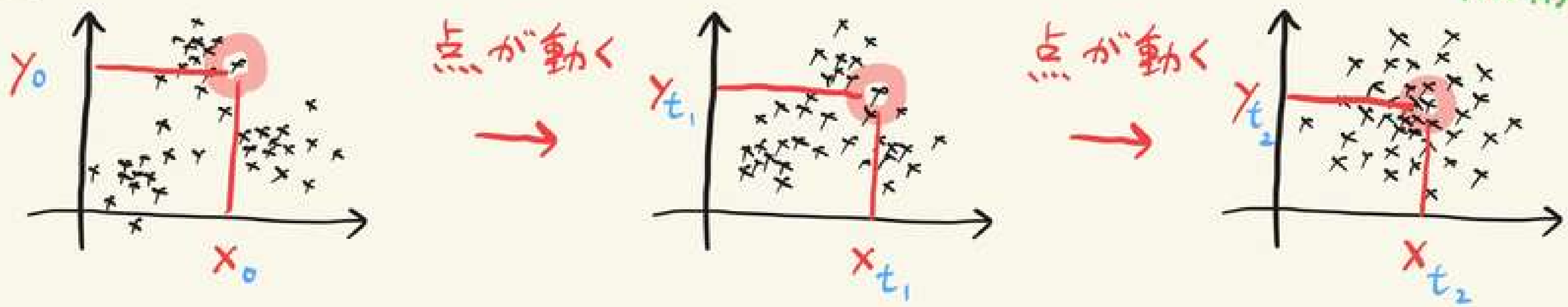
$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x})\, \vec{V}_t(\vec{x})\right)$$

これが学習できればよい

ここを定めると拡散のしかたが決まる

x：標本

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



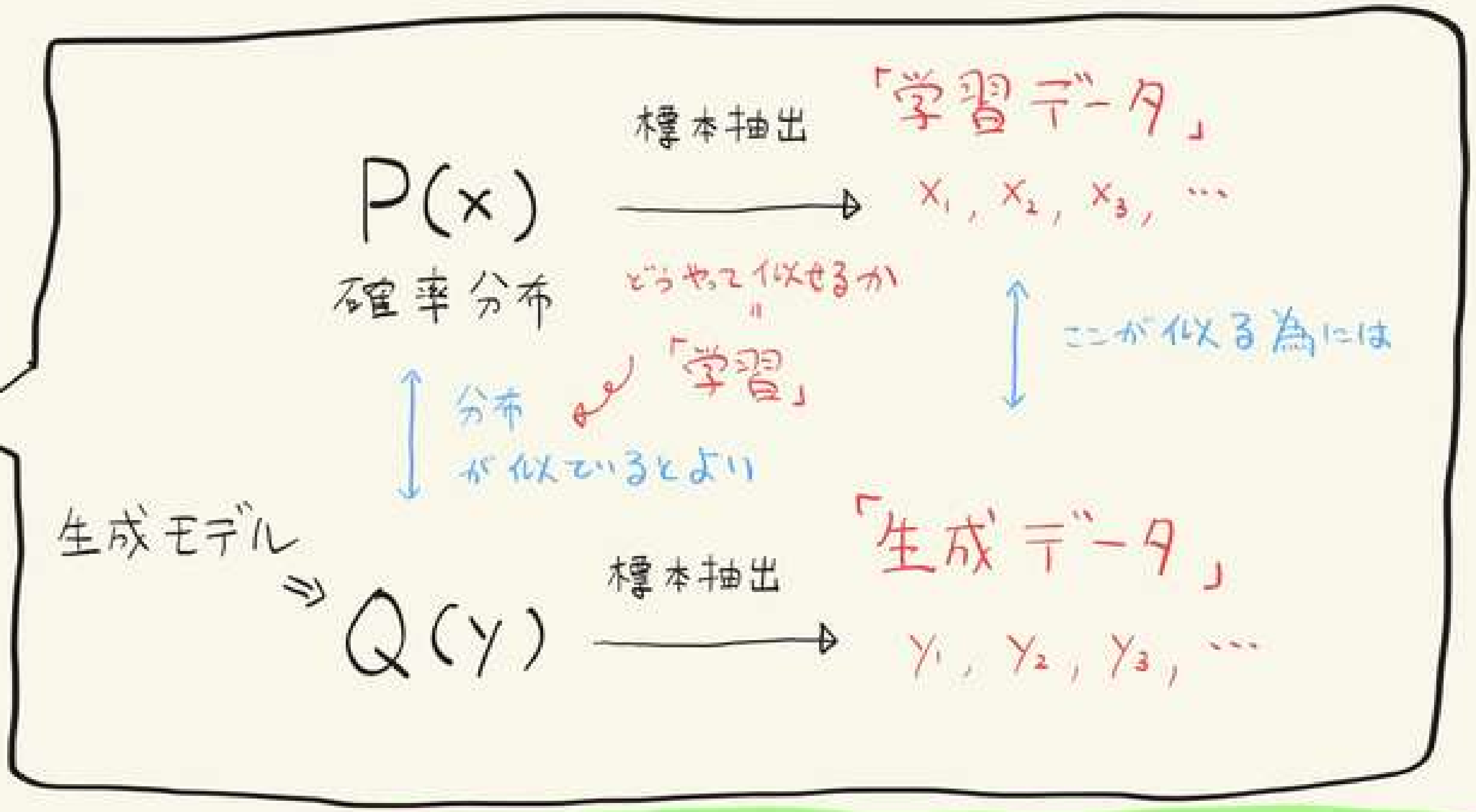
粒子の方程式

$$d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)\,dt + g_t\, d\vec{w}_t$$

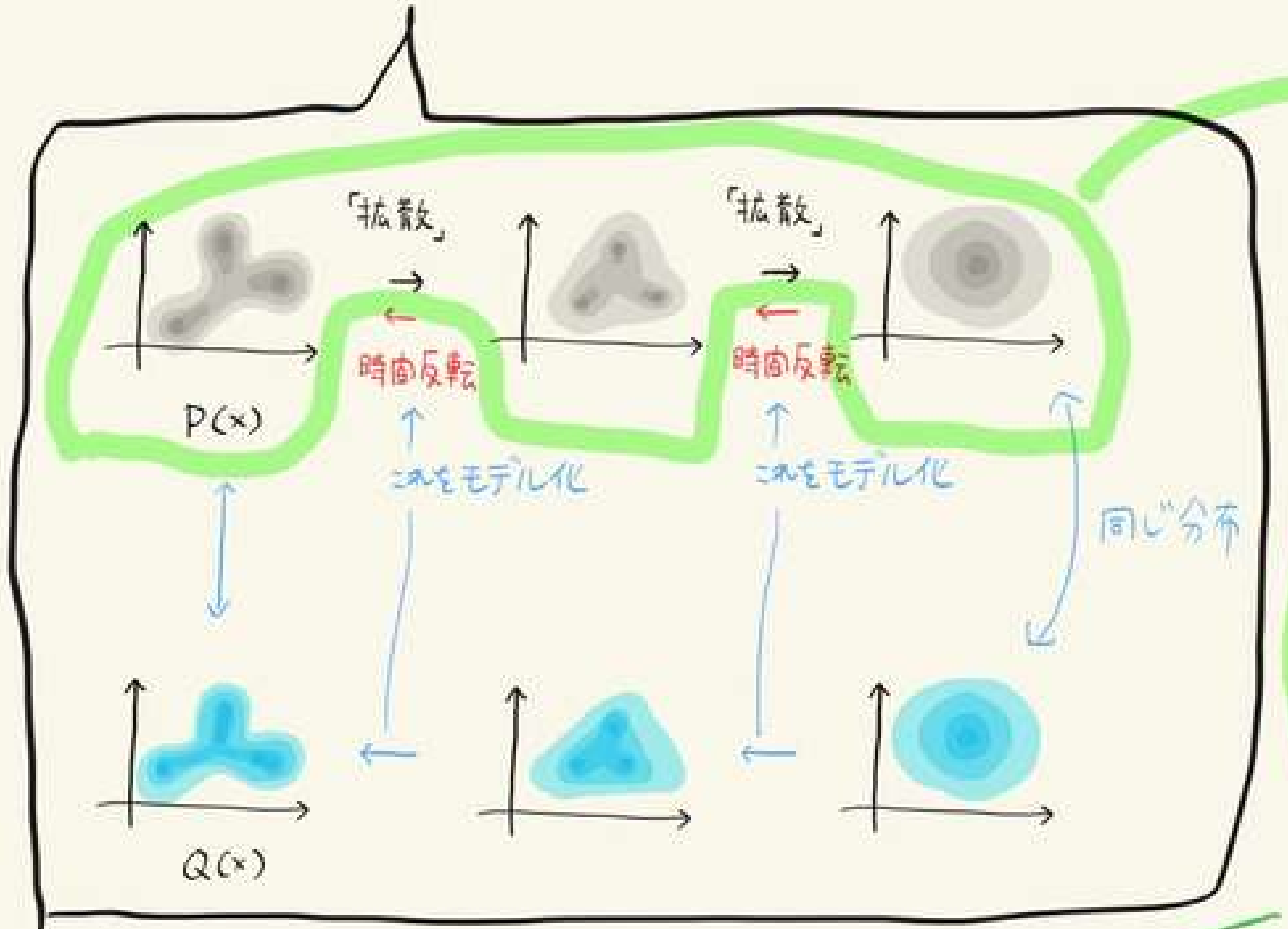
ここを定めると決まる

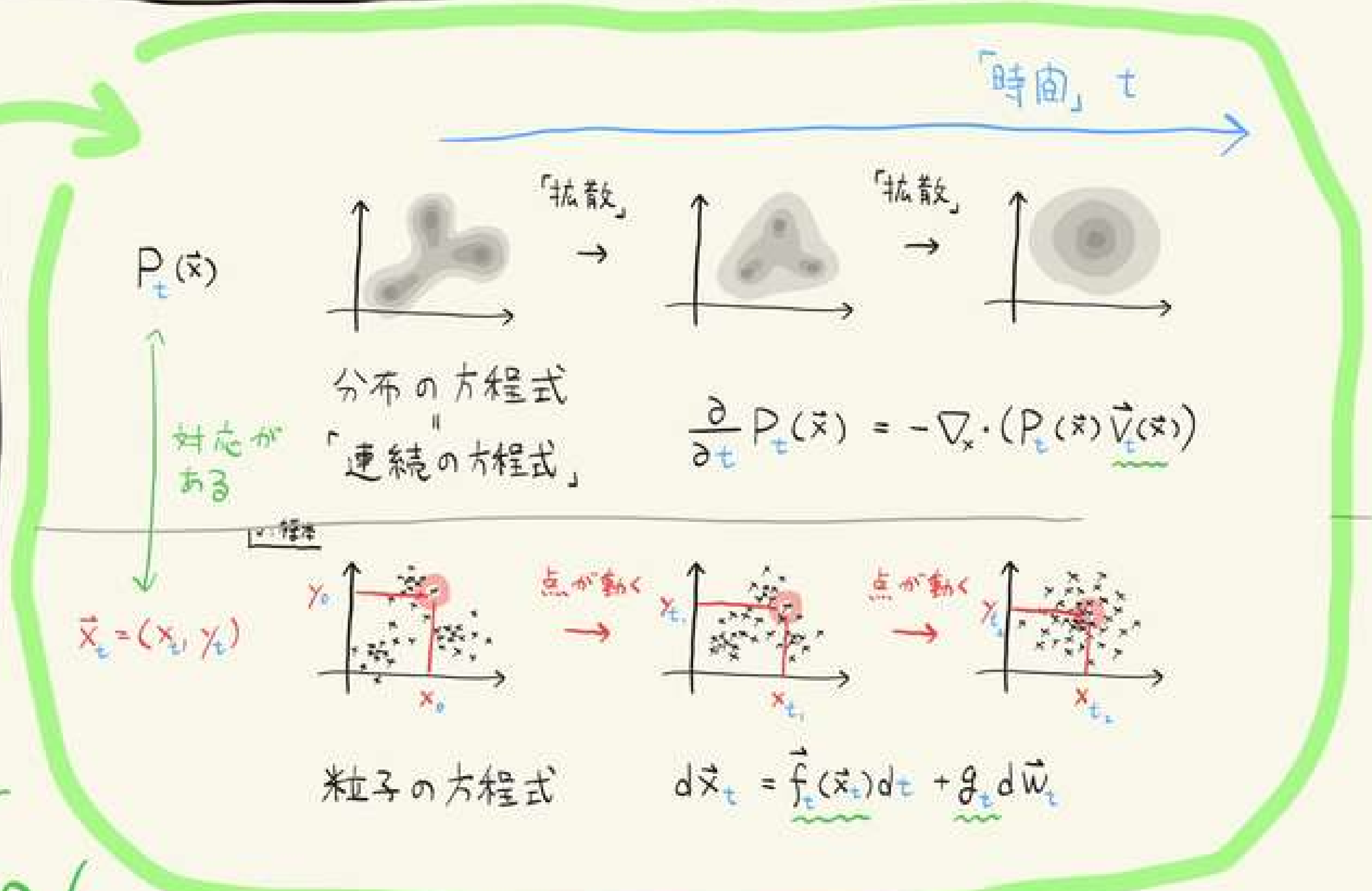
本日の内容

1. 生成モデルとは?



2. 拡散モデルとは





$g_t \neq 0$　　$g_t = 0$

3. 粒子と分布の対応(その1)

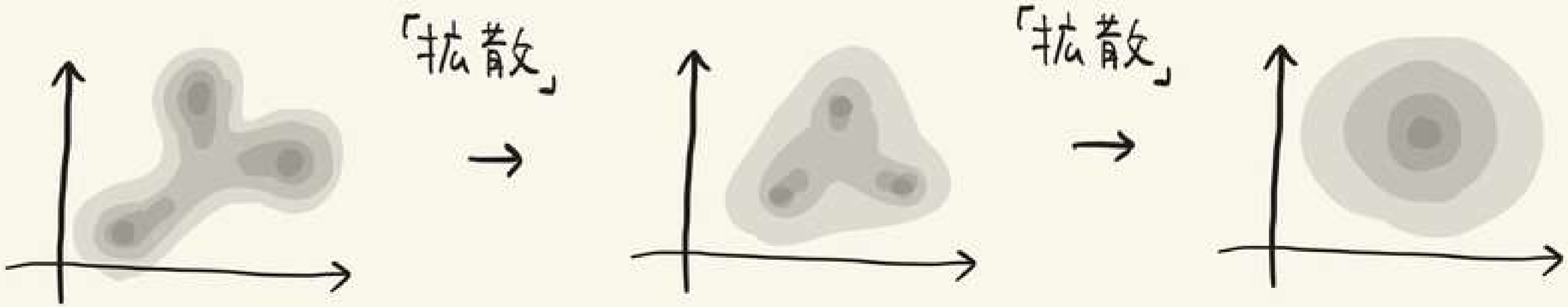
4. 粒子と分布の対応(その2)

▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

拡散モデル (本物)

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



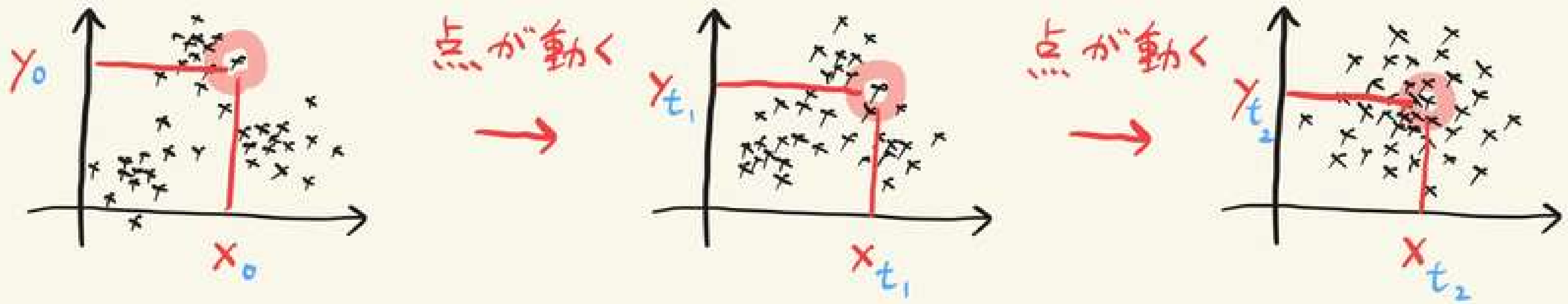
対応がある

分布の方程式
=
「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x})\, \vec{v}_t(\vec{x})\right)$$

×:標本

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



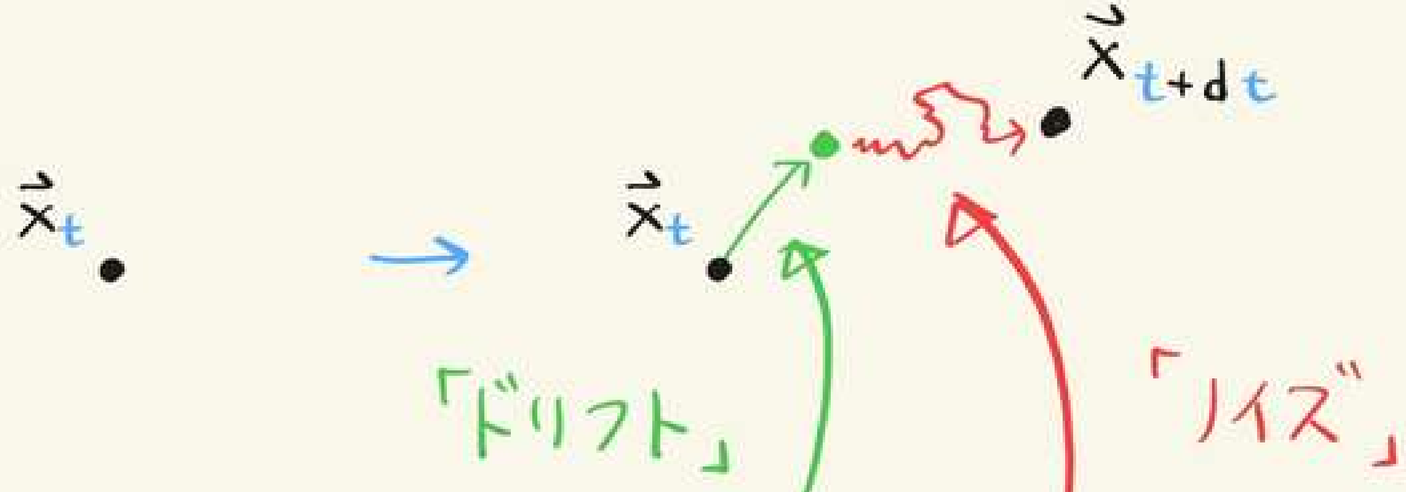
粒子の方程式

$$d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)\,dt + g_t\, d\vec{w}_t$$

この対応を導く。

▨ 3. 粒子と分布の対応（その1）

確率微分方程式（SDE）



$$d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)\,dt + g_t \boxed{d\vec{w}_t}$$

だいたい $\sqrt{dt} \times \vec{\varepsilon}_t$ と思ってよい

$\vec{\varepsilon}_t \sim N(0, I)$

（ガウスノイズ）

$\Updownarrow$（だいたい）

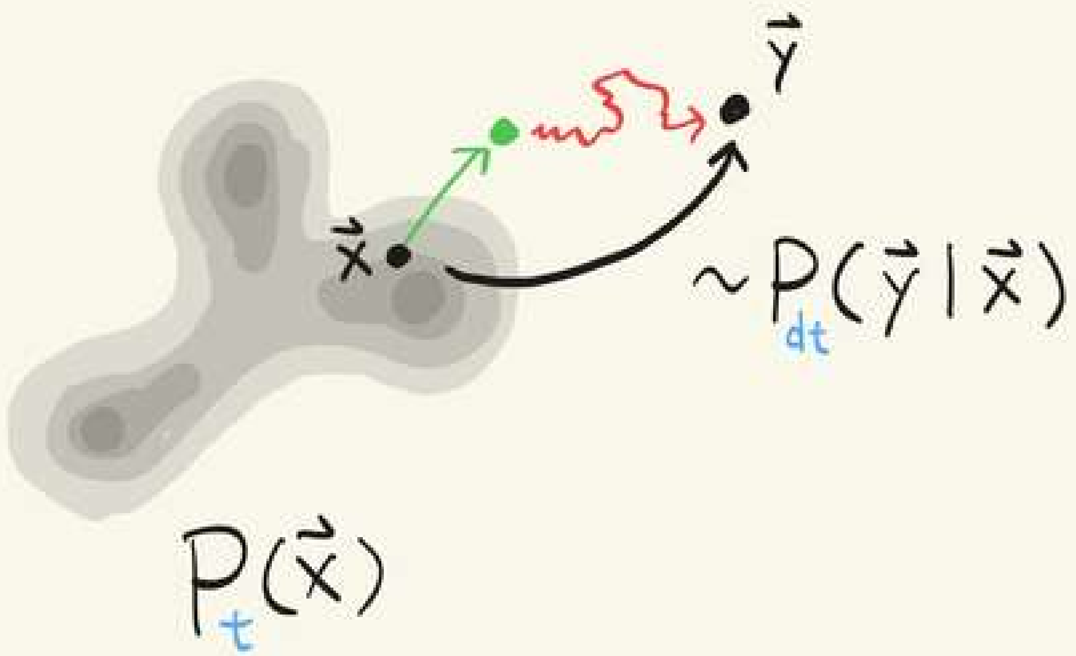
$$\vec{x}_{t+dt} = \underbrace{\vec{x}_t + \vec{f}_t(\vec{x}_t)\,dt}_{\vec{\mu}_{t,dt}(\vec{x}_t)} + \underbrace{g_t\sqrt{dt}}_{\sigma_{t,dt}}\,\vec{\varepsilon}_t$$

$$\sim N(\vec{x}_{t+dt} \mid \vec{\mu}_{t,dt}(\vec{x}_t),\ \sigma_{t,dt} I) =: P_{dt}(\vec{x}_{t+dt} \mid \vec{x}_t)$$

$(t+dt \leftarrow t)$の時間発展

3. 粒子と分布の対応 (その1)

SDE → $P_t(\vec{x})$ の方程式



全ての $\vec{x}$ からの影響を加味

$\vec{x}$ について積分

↓

$P_{t+dt}(\vec{y})$ になるはず

$$P_{t+dt}(\vec{y}) = \int P_{t+dt}(\vec{y}|\vec{x})\, P_t(\vec{x})\, d\vec{x}$$

↓ dt が小さいとして1次まで Taylor 展開

Fokker-Planck 方程式

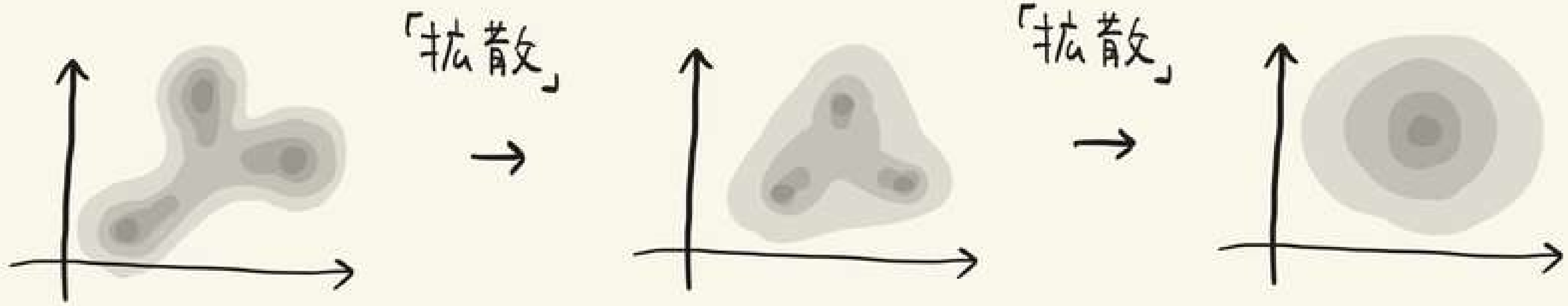
$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

SDE → $P_t(\vec{x})$ の方程式

「時間」 t

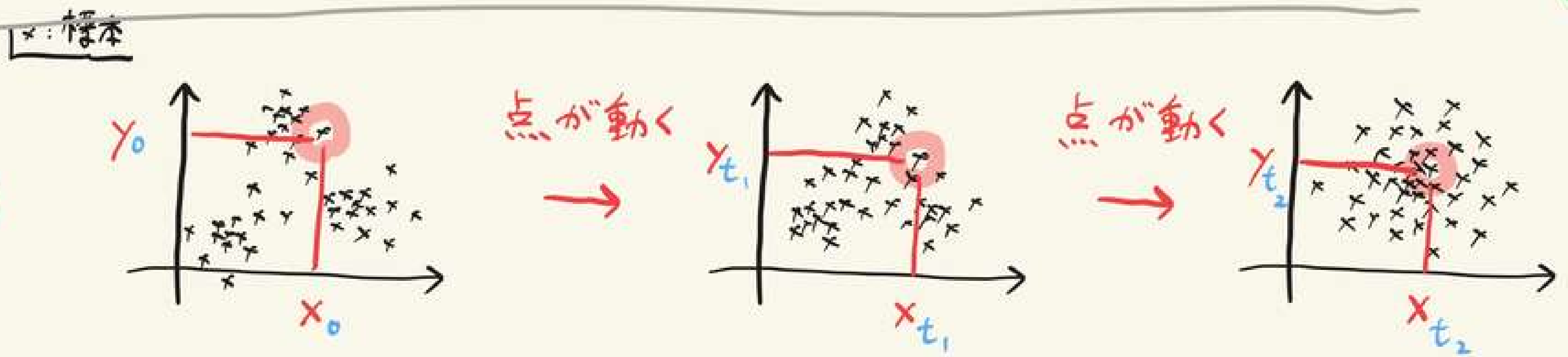
$P_t(\vec{x})$



対応がある

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



粒子の方程式 $d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)dt + g_t d\vec{w}_t$

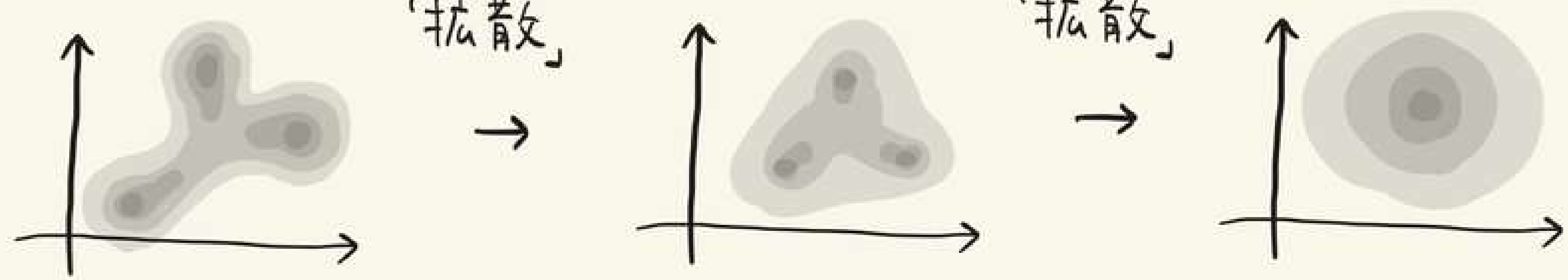
この対応を付けた！

3. 粒子と分布の対応 (その1)

時間反転?

「時間反転」

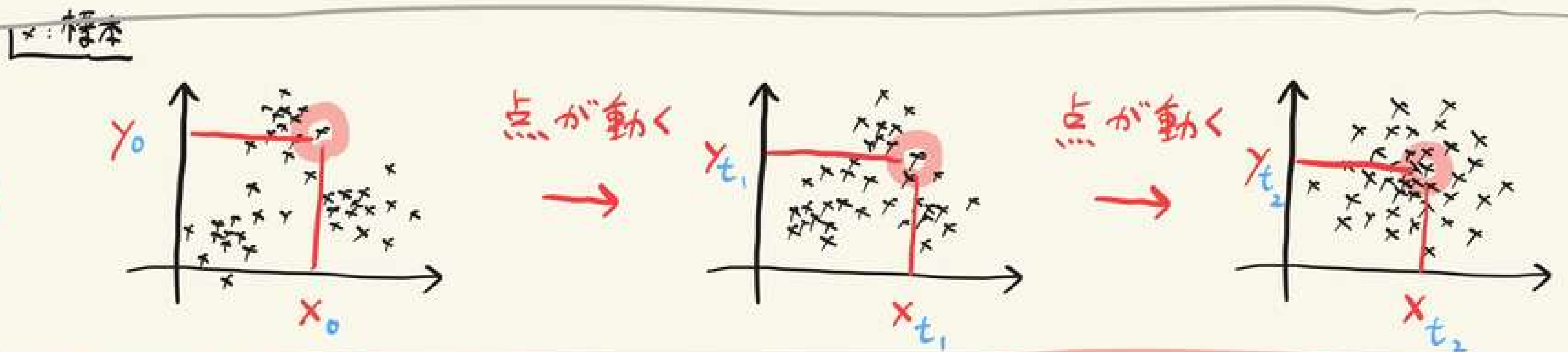
$P_t(\vec{x})$



対応がある

$$\boxed{1.\quad \frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

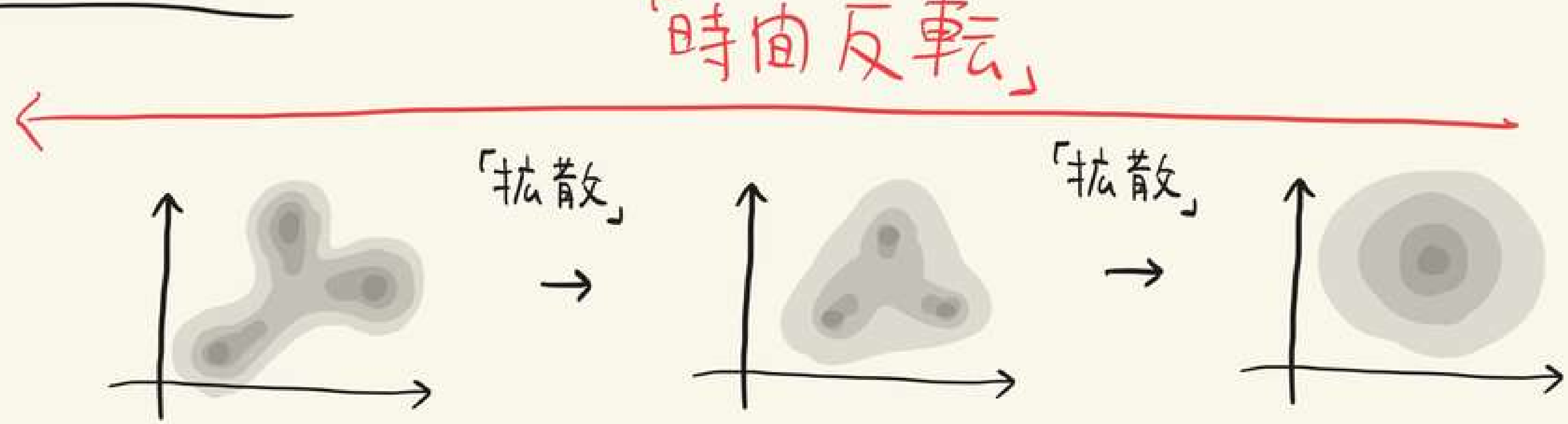
$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



$$\boxed{2.\quad \text{粒子の方程式} \qquad d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)dt + g_t d\vec{w}_t}$$

3. 粒子と分布の対応（その1）

時間反転？



$P_t(\vec{x})$

$$\boxed{1.\quad \frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}}\cdot\left(P_t(\vec{x})\vec{f}_t(\vec{x})\right) + \frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

$\bar{t} := -t \Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} P_t(\vec{x}) = +\nabla_{\vec{x}}\cdot\left(P_t(\vec{x})\vec{f}_t(\vec{x})\right) - \frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

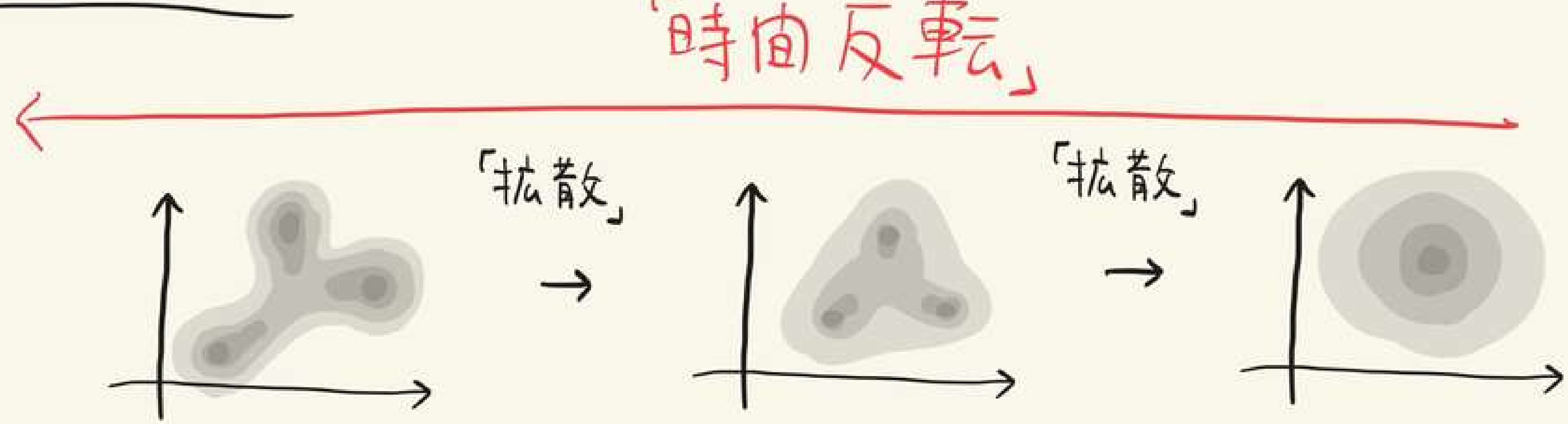
ここの符号はこっちに吸収できる

ここの符号は正でないとFokker-Planck方程式にならない

■ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

時間反転?

$P_t(\vec{x})$



$$\boxed{1.\ \frac{\partial}{\partial t}P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}}\cdot\left(P_t(\vec{x})\vec{f}_t(\vec{x})\right) + \frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

$\bar{t} := -t \Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}}P_t(\vec{x}) = +\nabla_{\vec{x}}\cdot\left(P_t(\vec{x})\vec{f}_t(\vec{x})\right) \boxed{-\frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

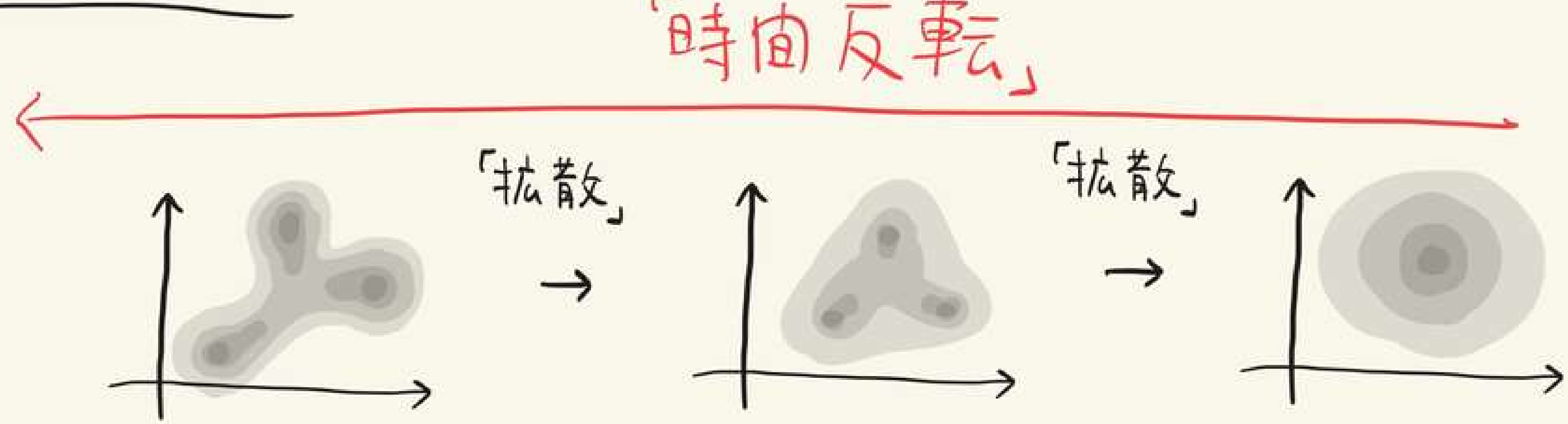
$$\boxed{-\frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})} \quad + \frac{g_t^2}{2}\nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

合わせる

▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

時間反転?

$P_t(\vec{x})$



$$\boxed{1.\quad \frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

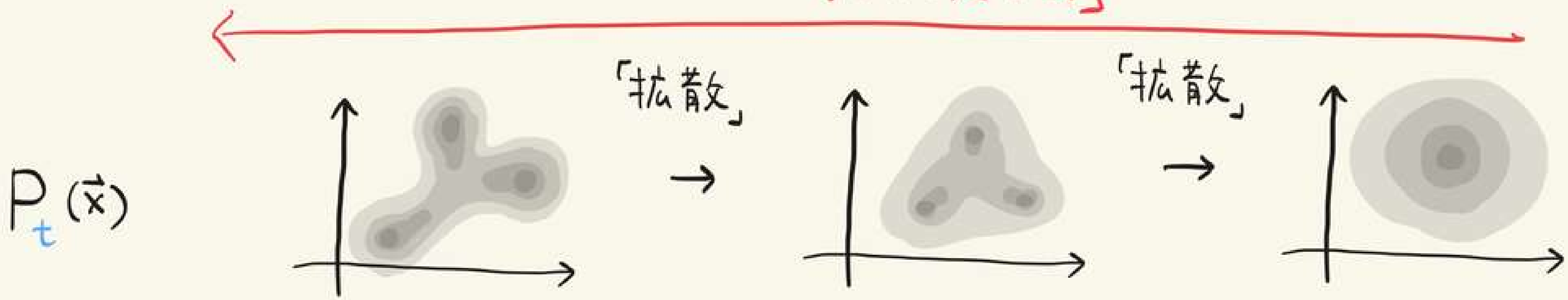
$\bar{t} := -t \quad \Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} P_t(\vec{x}) = +\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) \boxed{- g_t^2 \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})} + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

$$-\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x})\, g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) \right)$$

▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

時内反転?



$$1.\quad \frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

$\bar{t} := -t \implies$

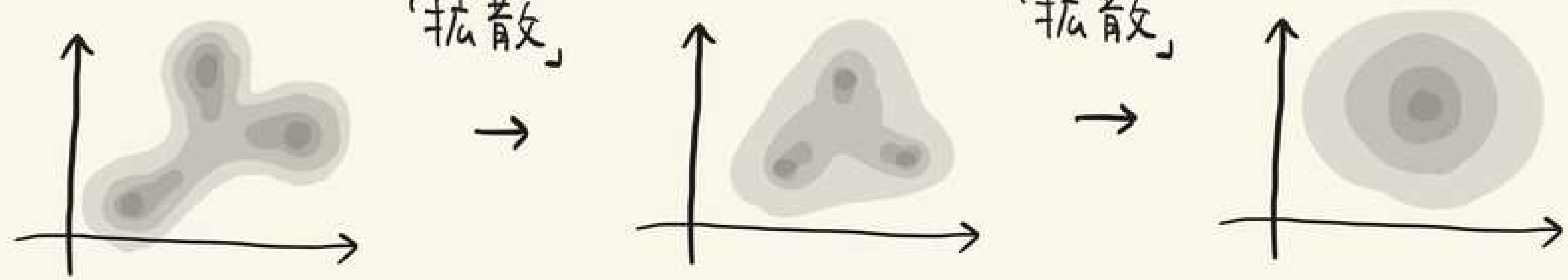
$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \left\{ g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x}) \right\} \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

3. 粒子と分布の対応 (その1)

時間反転？

「時間反転」

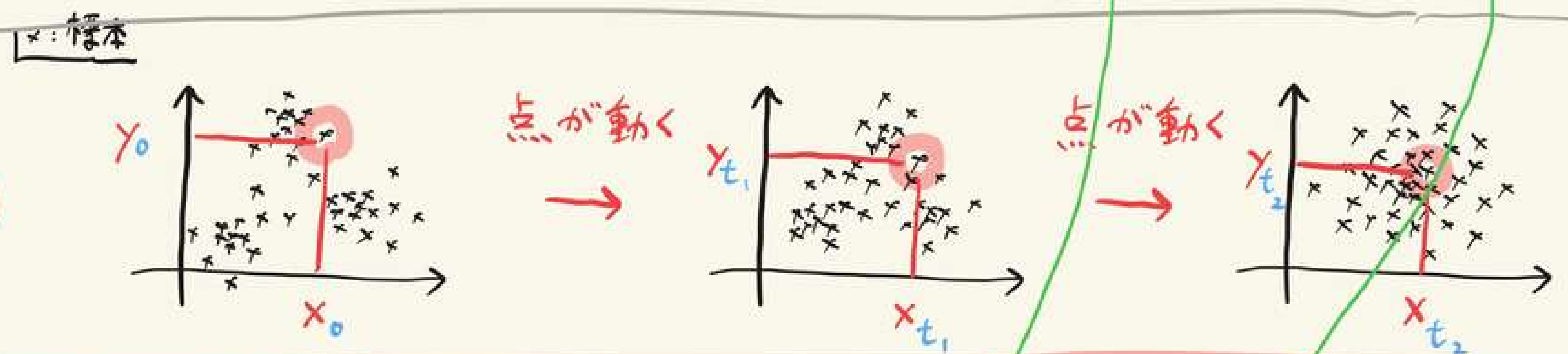
$P_t(\vec{x})$



対応がある

$$1.\quad \frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \underbrace{\left\{ g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x}) \right\}} \right) + \underbrace{\frac{g_t^2}{2}} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



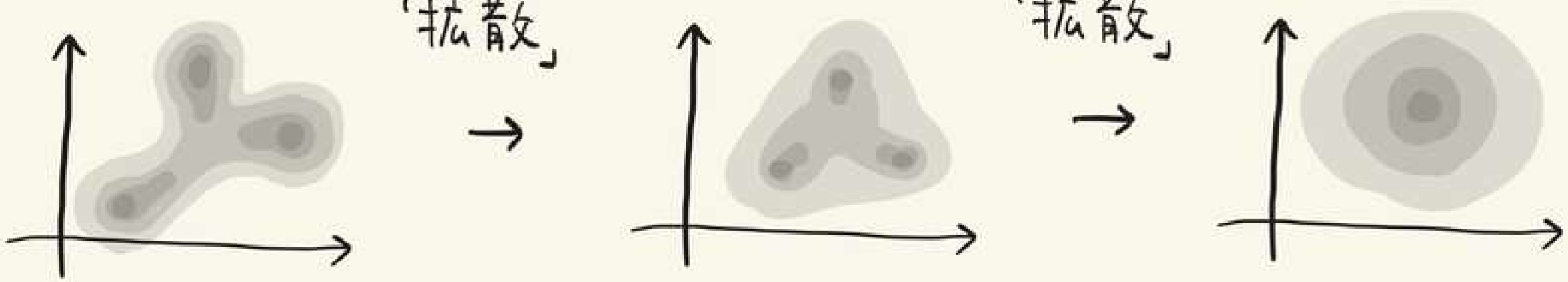
$$2.\quad \text{粒子の方程式} \qquad d\vec{x}_t = \vec{f}_t(\vec{x}_t)dt + g_t d\vec{w}_t$$

3. 粒子と分布の対応 (その1)

時間反転？

「時間反転」

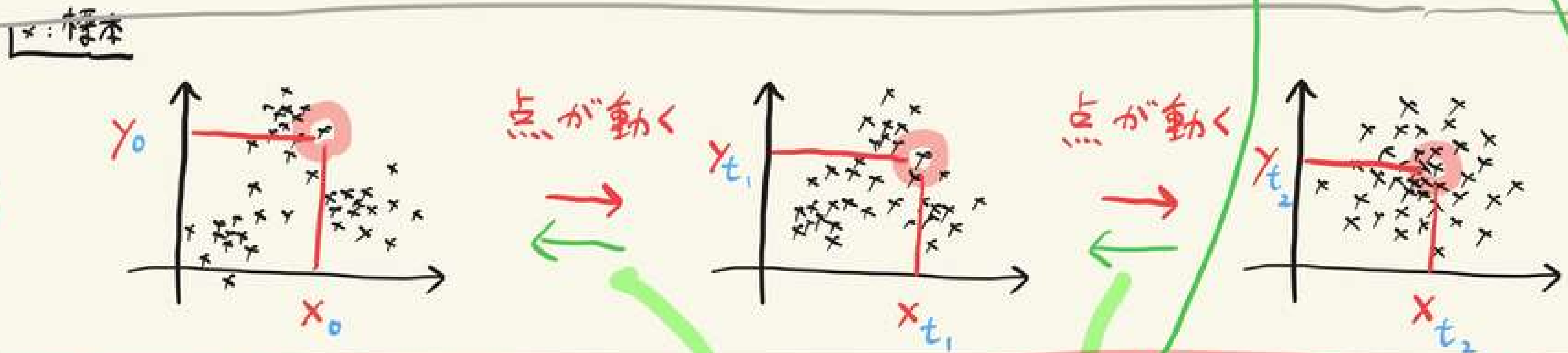
$P_t(\vec{x})$



対応がある

1. $$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \left\{ g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x}) \right\} \right) + \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})$$

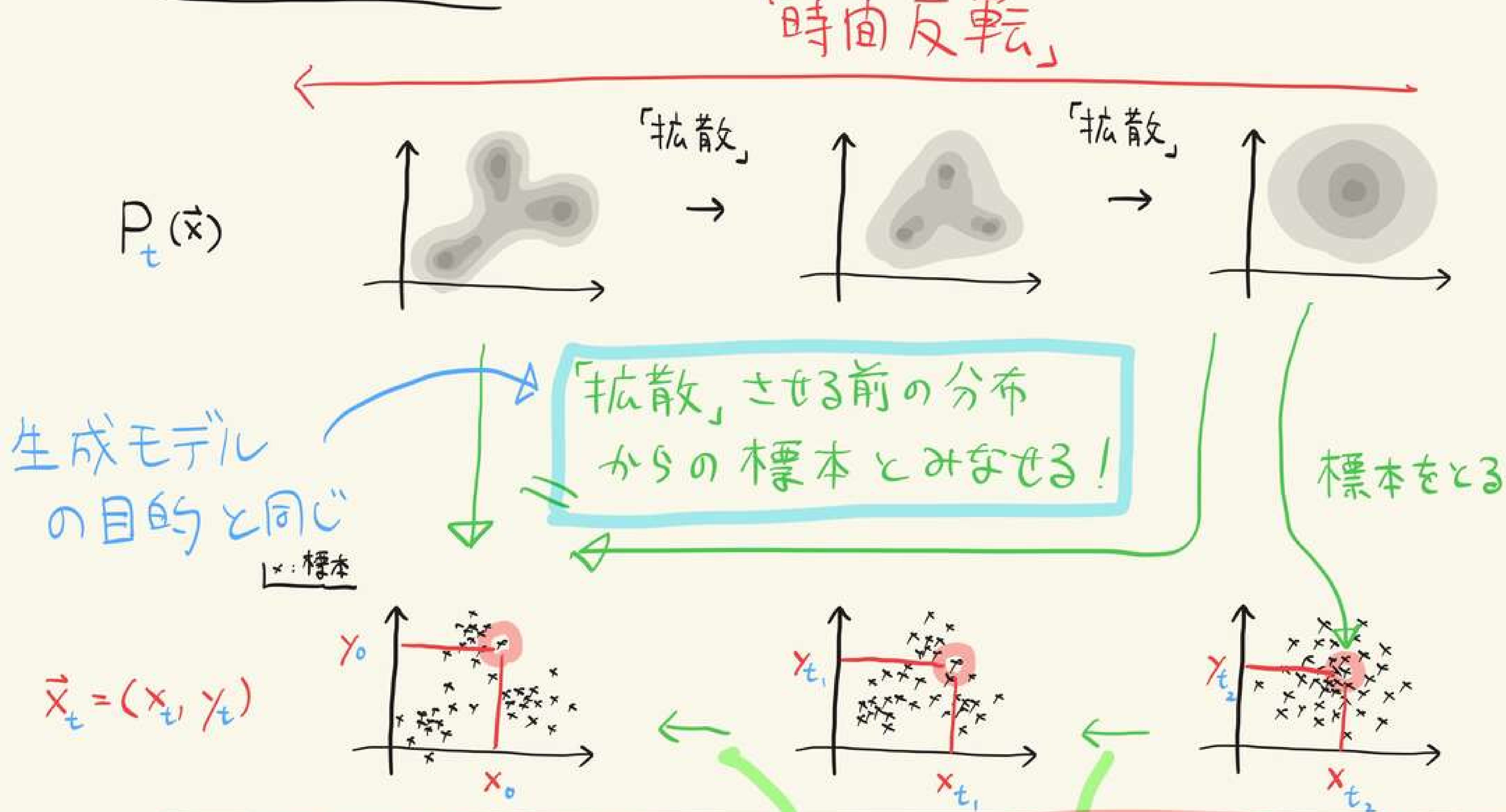
$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



2. 粒子の方程式 $$d\vec{x}_t = \left\{ g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x}) \right\} dt + g_t \, d\vec{w}_t$$

3. 粒子と分布の対応 (その1)

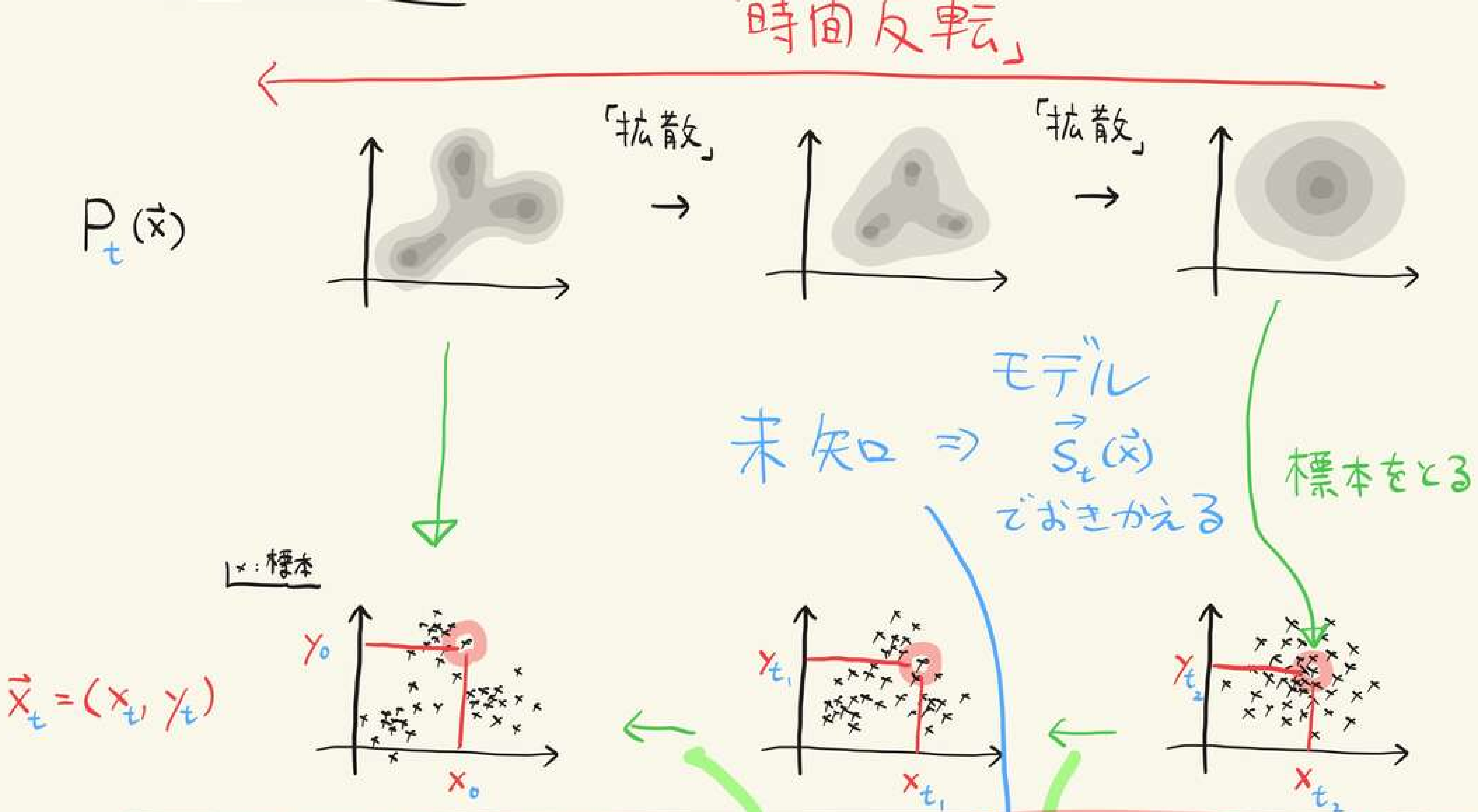
時間反転?



2. 粒子の方程式 $\quad d\vec{x}_t = \{g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x})\} dt + g_t d\vec{w}_t$

3. 粒子と分布の対応 (その1)

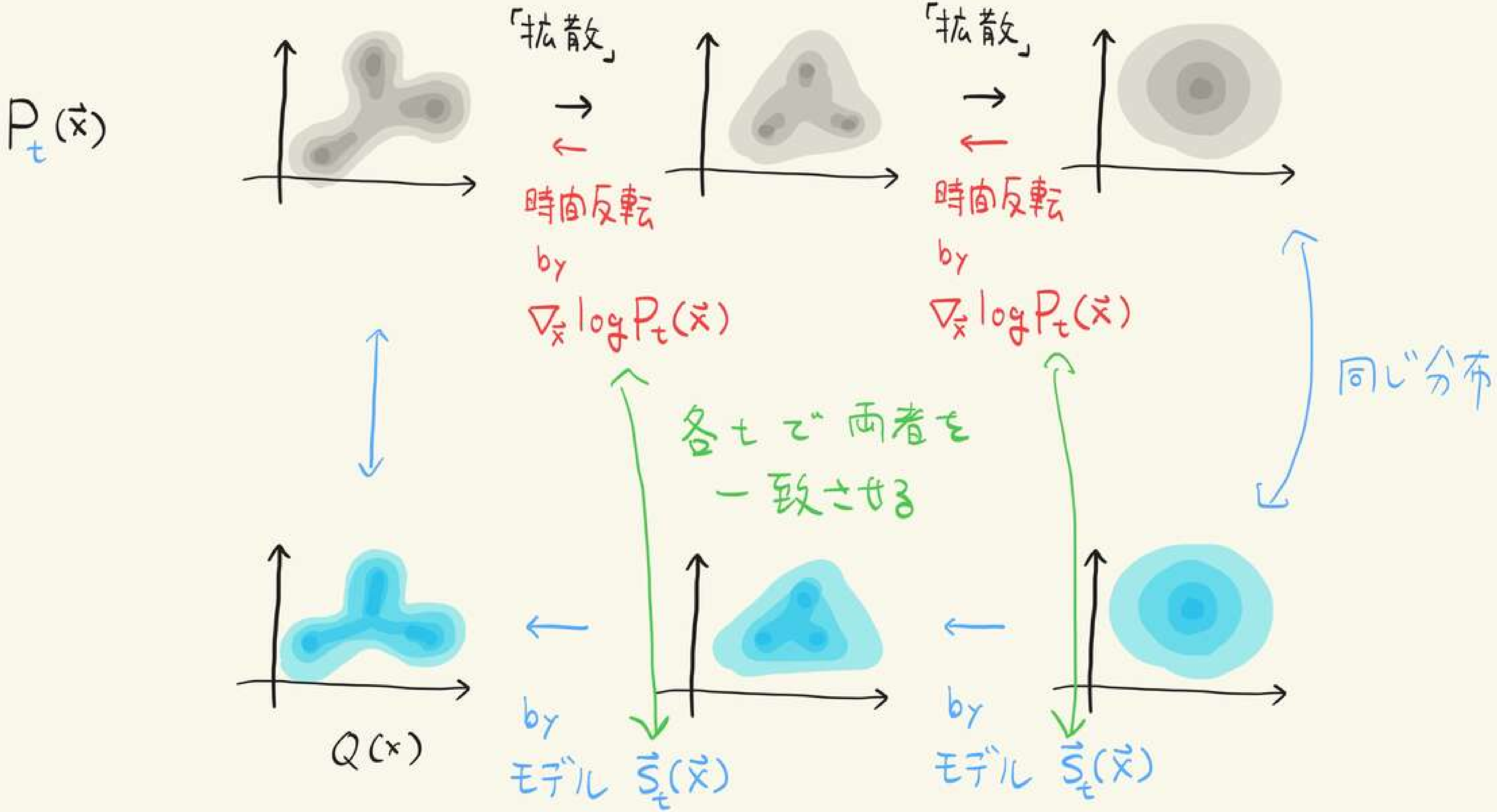
時間反転?



2. 粒子の方程式 $\quad d\vec{x}_t = \left\{ g_t^2 \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) - \vec{f}_t(\vec{x}) \right\} dt + g_t \, d\vec{w}_t$

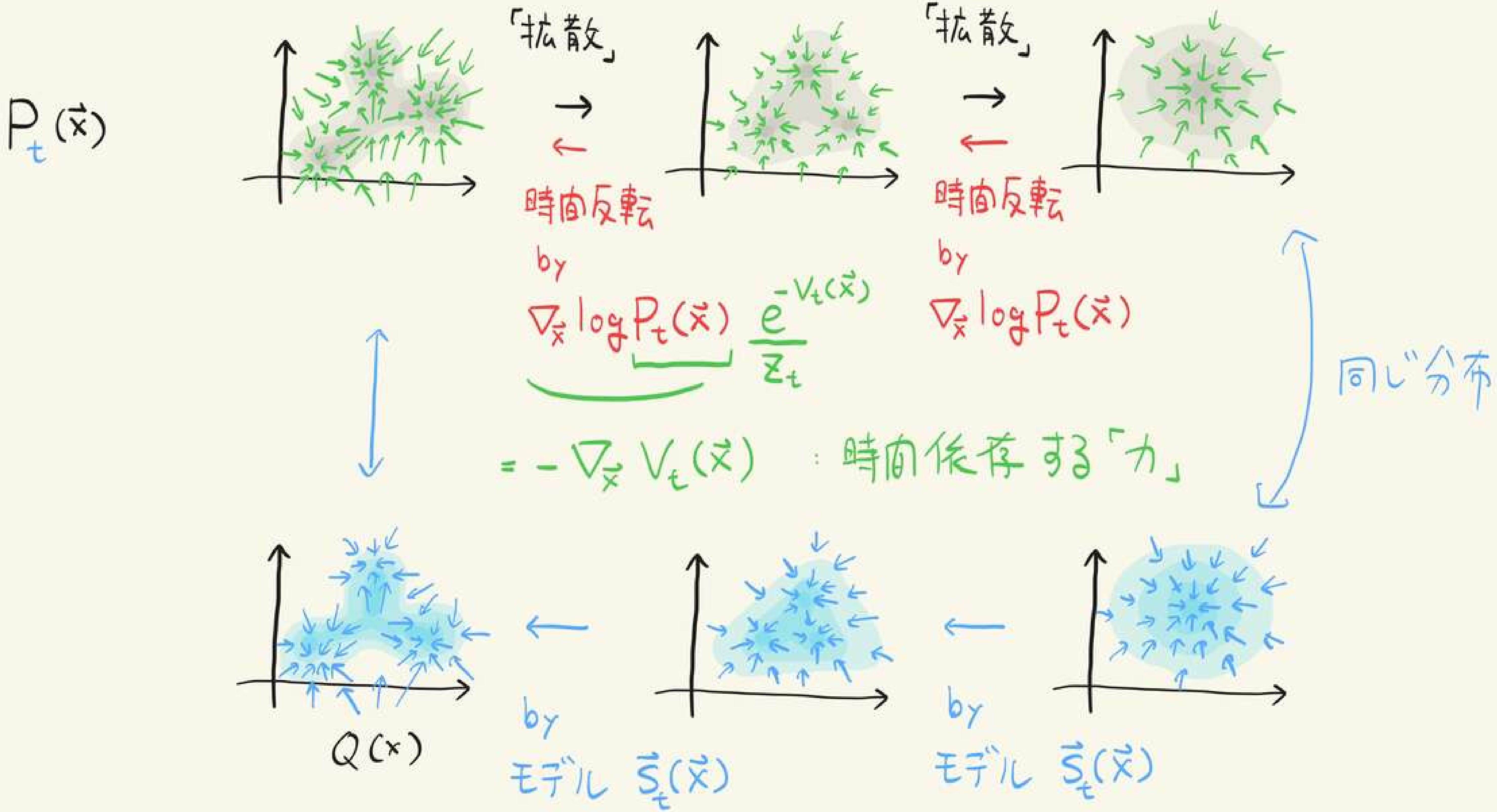
▨ 3. 粒子と分布の対応（その1）

スコアマッチング再び



▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

スコアマッチング再び

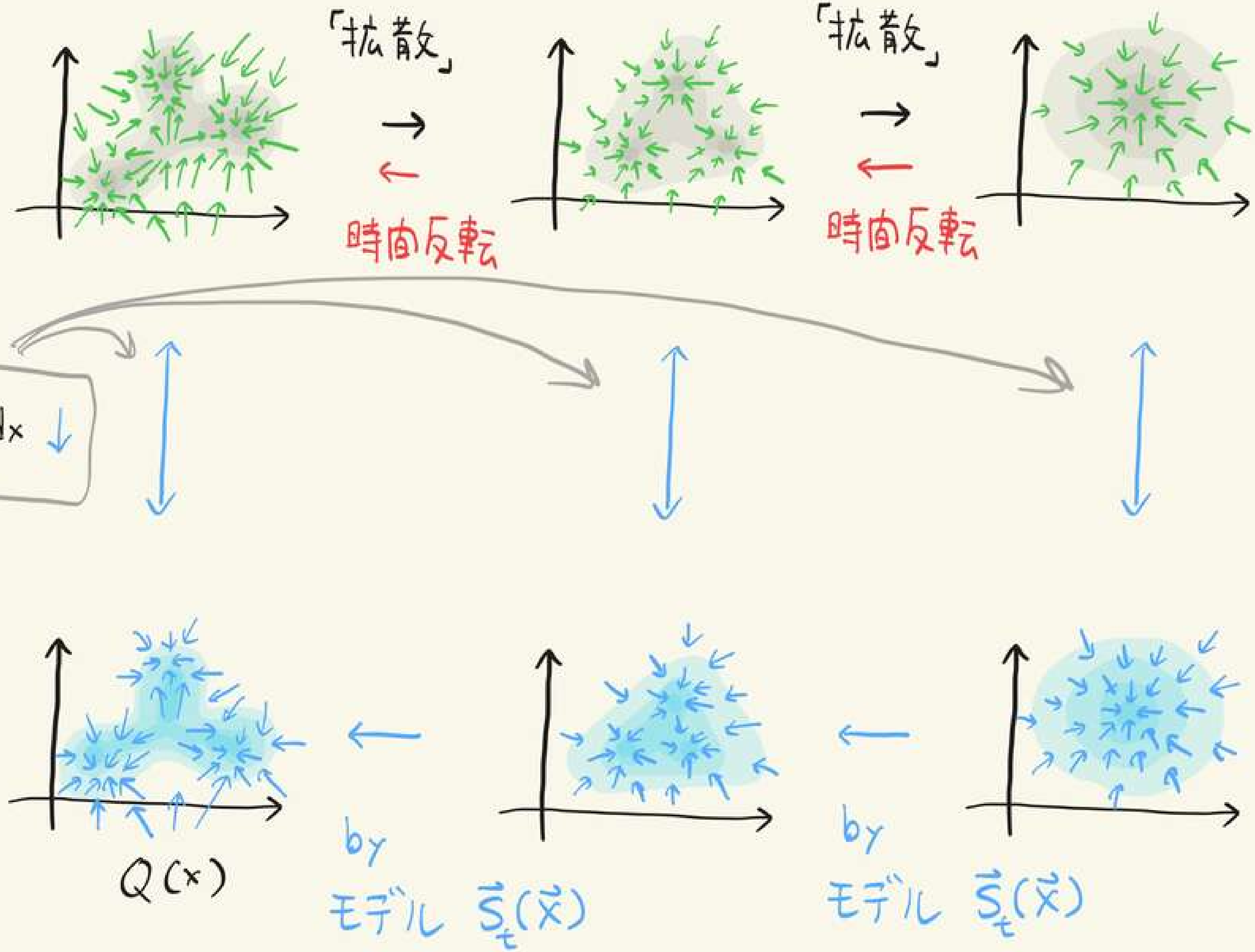


3. 粒子と分布の対応 (その1)

スコアマッチング再び

※実際はその派生形「デノイジング・スコアマッチング」を使うことが多い

$P_t(\vec{x})$

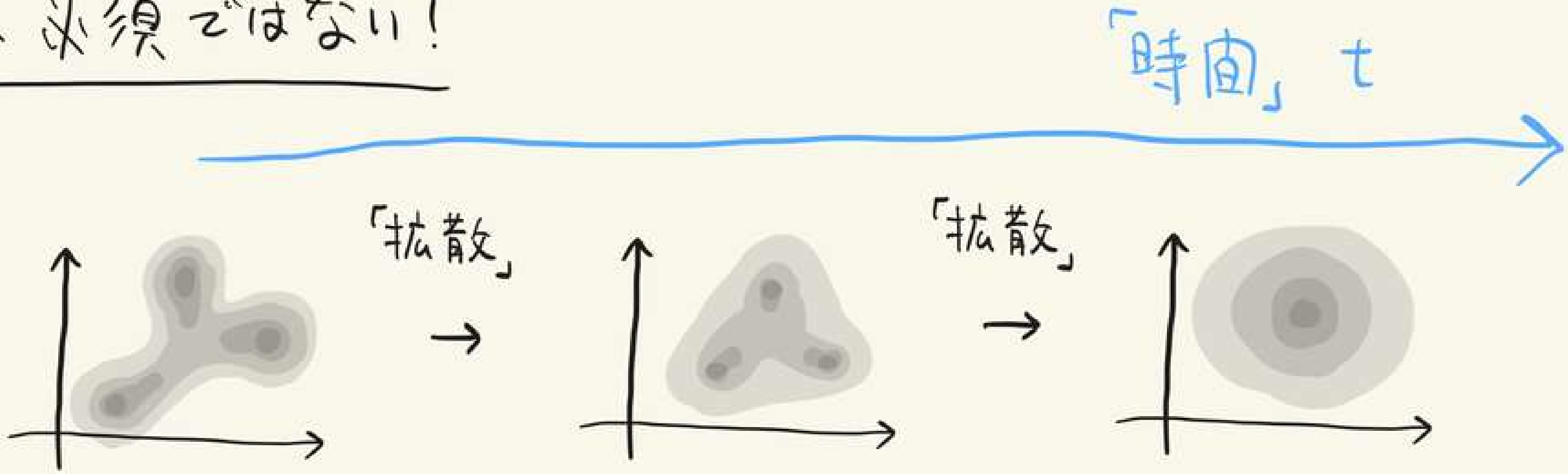


$$\boxed{\int p_t(x)\left(s_t(x) + \nabla_x V_t(x)\right)^2 dx \downarrow}$$

▨ 3. 粒子と分布の対応（その1）

ノイズは必須ではない！

$P_t(\vec{x})$



$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{f}_t(\vec{x}) \right) + \boxed{\frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}}^2 P_t(\vec{x})}$$

$$\nabla_{\vec{x}} \cdot P_t(\vec{x}) \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x})$$

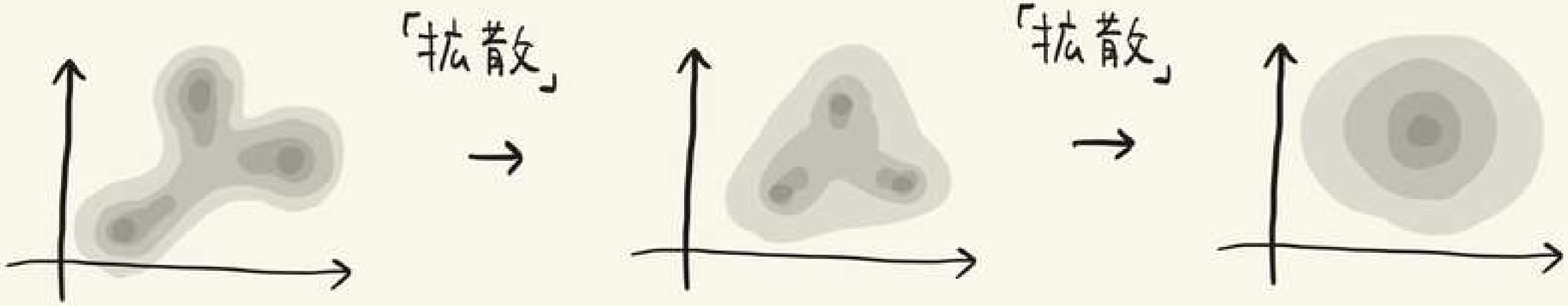
$$= -\nabla_{\vec{x}} \cdot \Bigg(P_t(\vec{x}) \underbrace{\left[\vec{f}_t(\vec{x}) - \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) \right]}_{\text{新しいドリフト項 } \vec{\tilde{f}}_t(\vec{x}) \text{ とみなす}} \Bigg)$$

▨ 3. 粒子と分布の対応 (その1)

ノイズは必須ではない!

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$

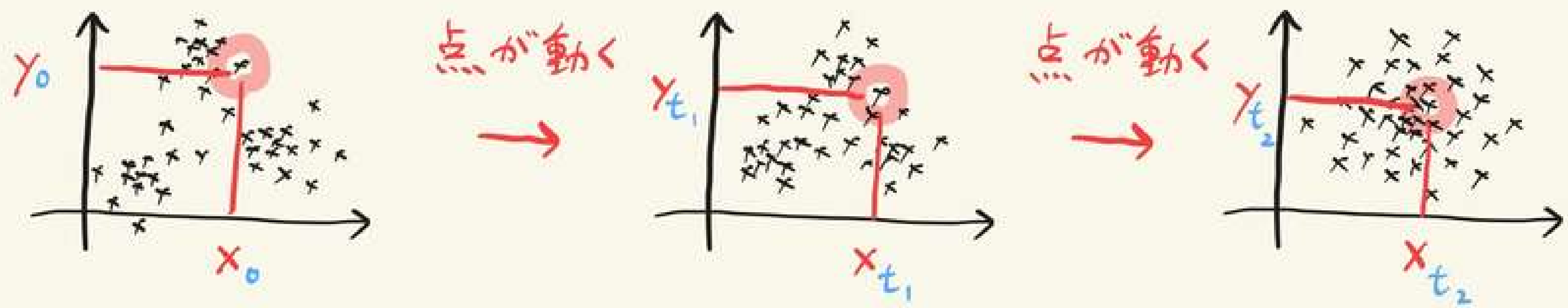


対応がある

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_{\vec{x}} \cdot \Big(P_t(\vec{x}) \underbrace{\Big[\vec{f}_t(\vec{x}) - \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x}) \Big]}_{\tilde{\vec{f}}_t(\vec{x})} \Big)$$

×: 標本

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



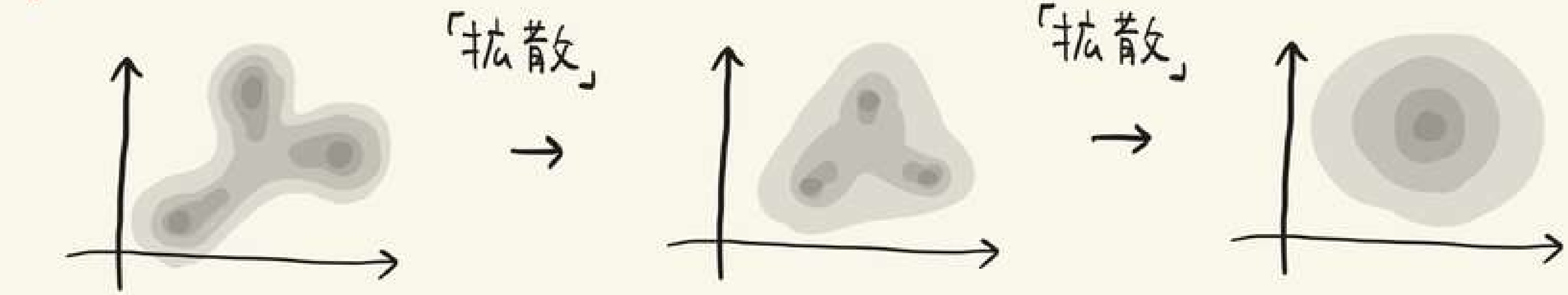
粒子の方程式 $\quad d\vec{x}_t = \tilde{\vec{f}}_t(\vec{x}_t)\,dt + \cancel{g_t\, d\vec{w}_t}$

3. 粒子と分布の対応（その1）

ノイズは必須ではない！

「時間反転」

$P_t(\vec{x})$

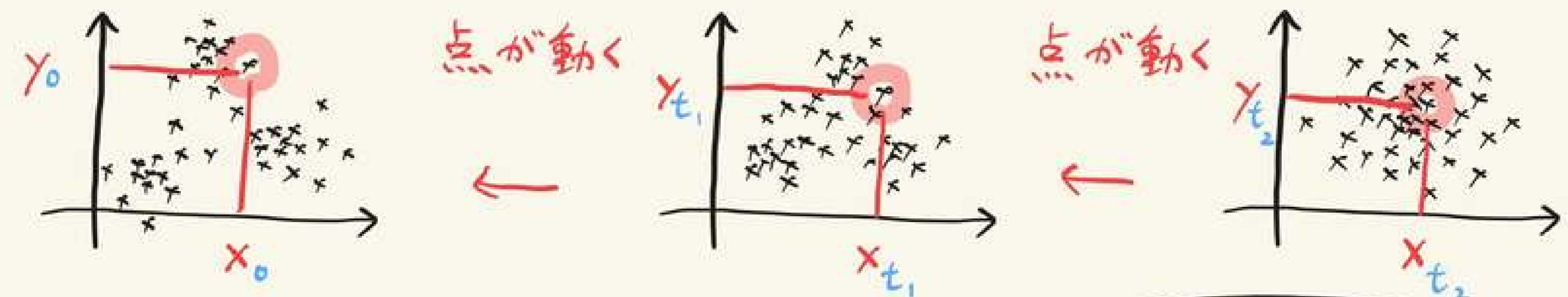


対応がある

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = \underset{\times(-1)}{-} \nabla_{\vec{x}} \cdot \left(P_t(\vec{x}) \left[\underbrace{\vec{f}_t(\vec{x}) - \frac{g_t^2}{2} \nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x})}_{\tilde{\vec{f}}_t(\vec{x})} \right] \right)$$

×：標本

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$

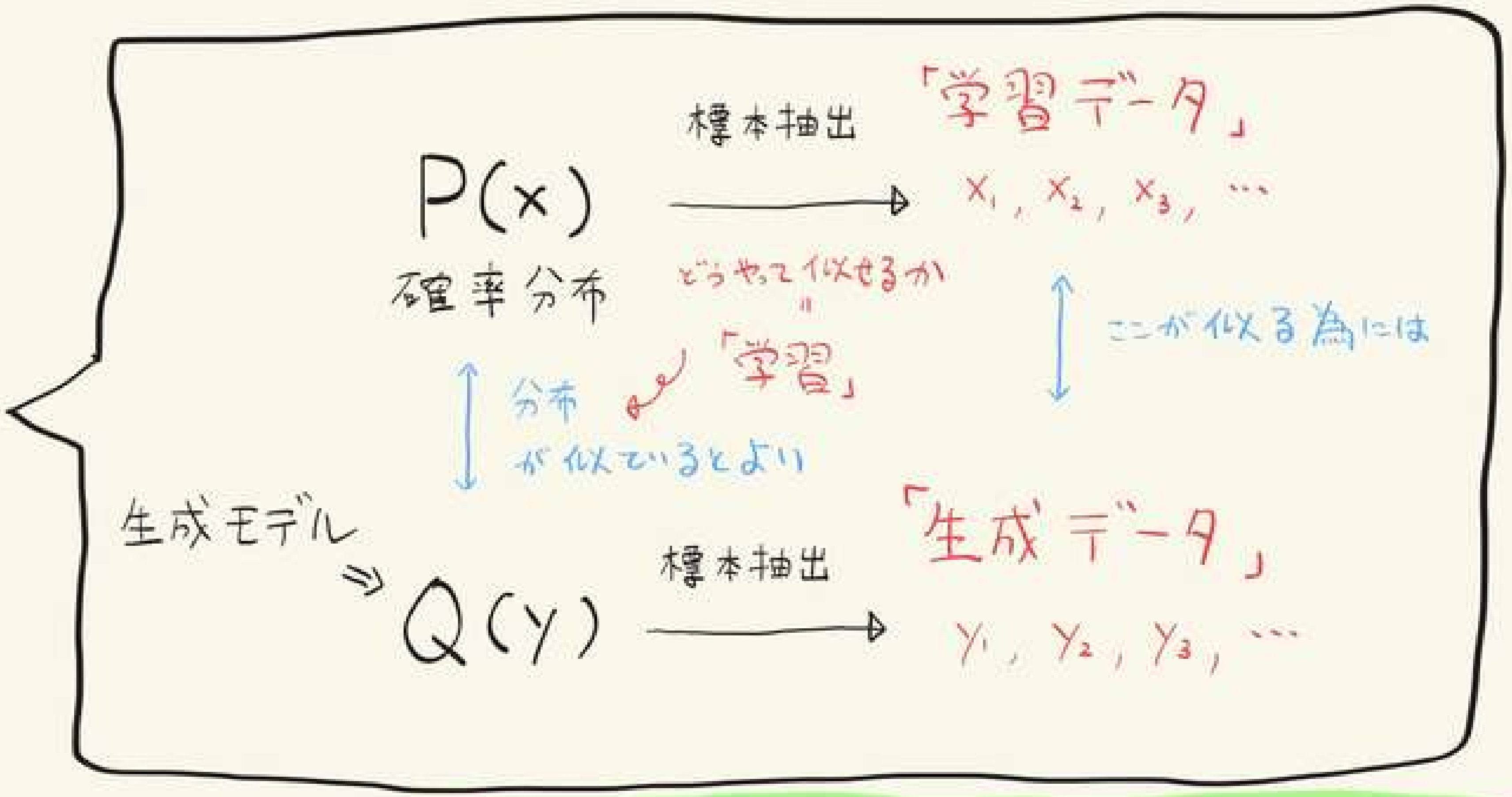


粒子の方程式

$$d\vec{x}_t = \underset{\times(-1)}{\tilde{\vec{f}}_t}(\vec{x}_t)\,dt + \cancel{g_t\, d\vec{W}_t}$$

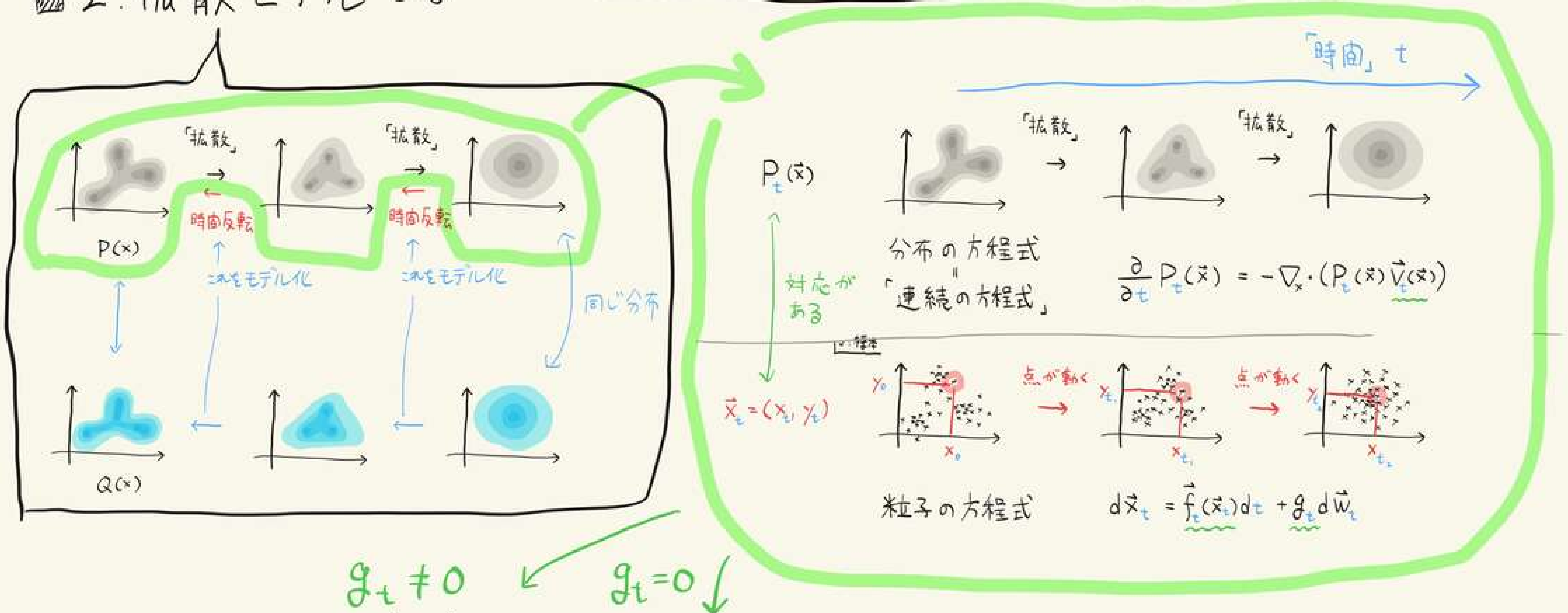
この中の $\nabla_{\vec{x}} \log P_t(\vec{x})$ を モデル $s_t(x_t)$ にしたものも生成に使える。

本日の内容



1. 生成モデルとは？

2. 拡散モデルとは



3. 粒子と分布の対応（その1）

→ スコアマッチング

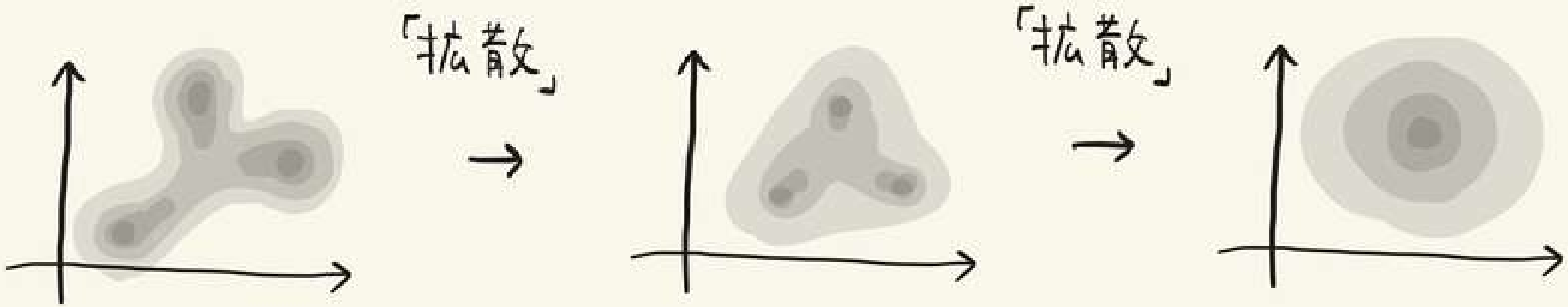
4. 粒子と分布の対応（その2）

4. 粒子と分布の対応（その2）

最初からノイズ無しで考える

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



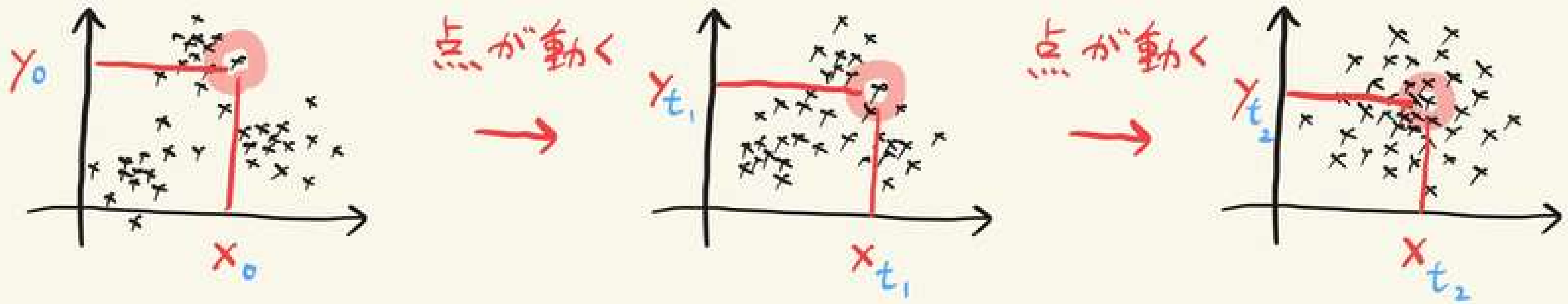
対応がある

分布の方程式
＝
「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{u}_t(\vec{x}) \right)$$

×：標本

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



粒子の方程式

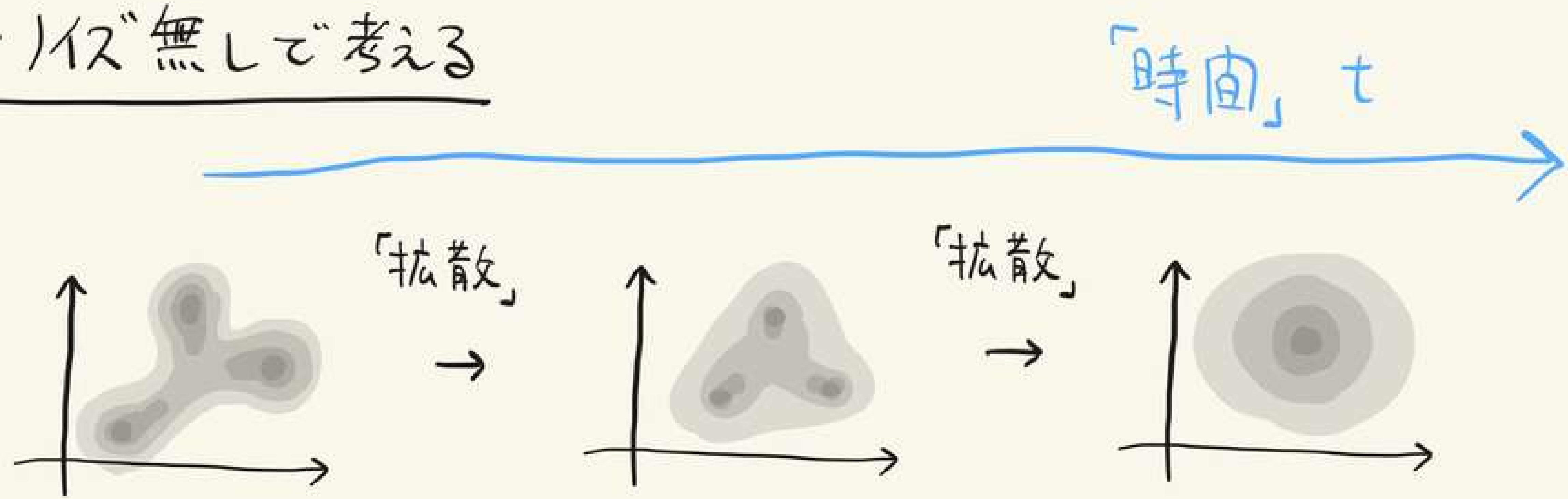
$$d\vec{x}_t = \vec{u}_t(\vec{x}_t)\, dt$$

どう構成すればよいか？

4. 粒子と分布の対応（その2）

最初からノイズ無しで考える

$P_t(\vec{x})$



分布の方程式
=
「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{u}_t(\vec{x}) \right)$$

今まで： $\vec{u}_t(\vec{x}) \Rightarrow P_t(\vec{x})$

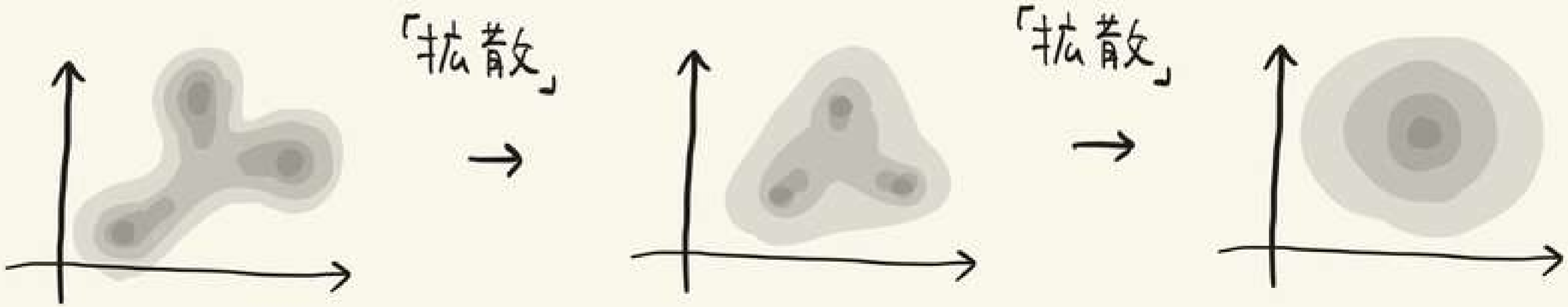
発想を逆転させる： $P_t(\vec{x}) \Rightarrow \vec{u}_t(\vec{x})$

▨ 4. 粒子と分布の対応（その2）

最初からノイズ無しで考える

「時間」t

$P_t(\vec{x})$



$\|$

$$\int P(\vec{y}_0)\tilde{P}(\vec{y}_1)N(\vec{x}\,|\,t\cdot\vec{y}_1+(1-t)\cdot\vec{y}_0,\sigma^2)\,d\vec{y}_0 d\vec{y}_1$$ だとする.

どういう分布か? ⇒ まず t については連続

端でどうなる?

$$P_{t=0}(\vec{x})=\int P(\vec{y}_0)\tilde{P}(\vec{y}_1)N(\vec{x}\,|\,\cancel{t\cdot\vec{y}_1}+\overbrace{(1-t)}^{1}\cdot\vec{y}_0,\sigma^2)\,d\vec{y}_0 d\vec{y}_1$$

先に積分

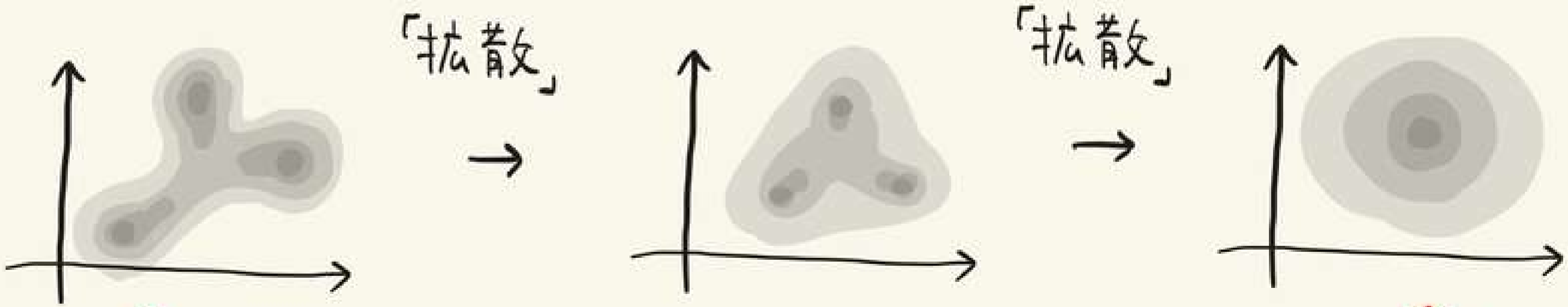
$$=\int P(\vec{y}_0)N(\vec{x}\,|\,\vec{y}_0,\sigma^2)\,d\vec{y}_0$$

4. 粒子と分布の対応 (その2)

<u>最初からノイズ無しで考える</u>

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



$\|$

$$\int P(\vec{y}_0)\tilde{P}(\vec{y}_1)\, N(\vec{x} \mid t\cdot\vec{y}_1 + (1-t)\cdot\vec{y}_0, \sigma^2)\, d\vec{y}_0 d\vec{y}_1$$

だとする.

どういう分布か? ⇒ まず t については連続

端でどうなる?

$$P_{t=0}(\vec{x}) = \int P(\vec{y}_0)\underline{N(\vec{x} \mid \vec{y}_0, \sigma^2)}\, d\vec{y}_0 \approx P(\vec{x})$$

$$P_{t=1}(\vec{x}) = \int \tilde{P}(\vec{y}_1)\underline{N(\vec{x} \mid \vec{y}_1, \sigma^2)}\, d\vec{y}_0 \approx \tilde{P}(\vec{x})$$

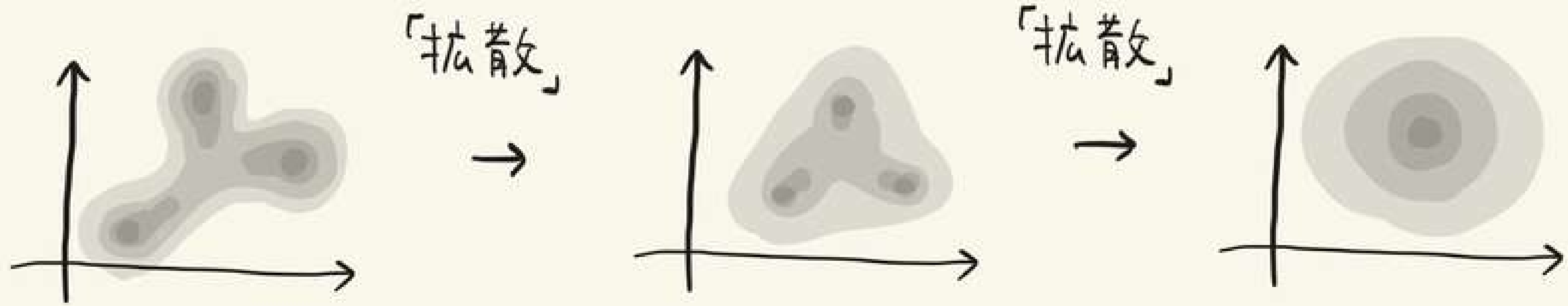
σ^2 小で Diracのデルタ

4. 粒子と分布の対応（その2）

最初からノイズ無しで考える

「時間」 t

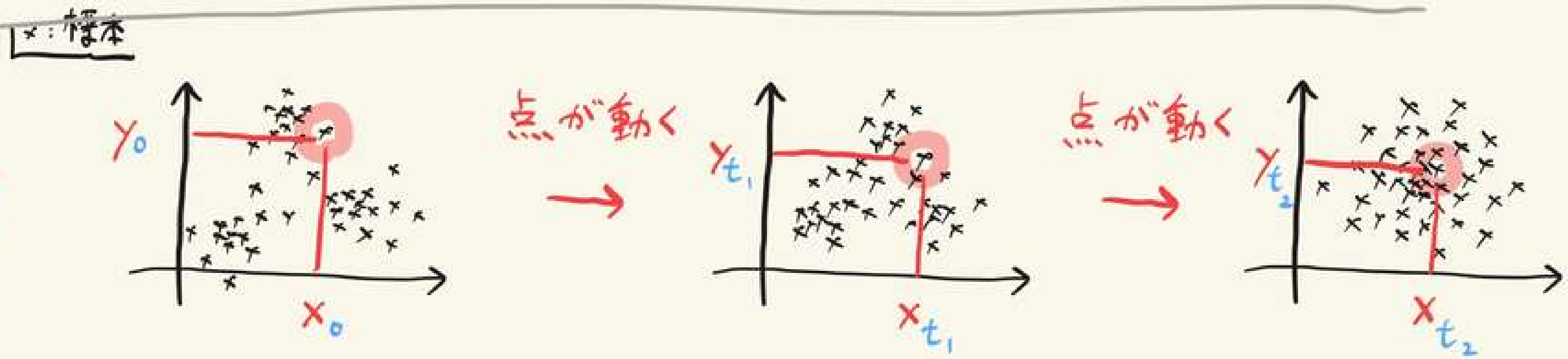
$P_t(\vec{x})$



分布の方程式
=
「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{u}_t(\vec{x}) \right)$$

$\vec{x}_t = (x_t, y_t)$



粒子の方程式

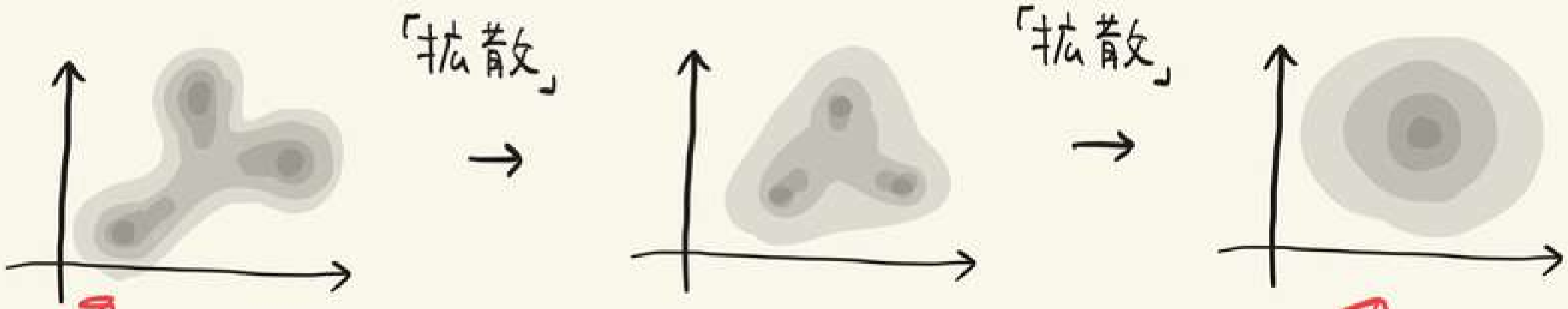
$$d\vec{x}_t = \vec{u}_t(\vec{x}_t)\, dt$$

4. 粒子と分布の対応（その2）

最初からノイズ無しで考える

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



分布の方程式

=

「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t}P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x})\vec{u}_t(\vec{x})\right)$$

$$\vec{u}_t(\vec{x}) = \frac{1}{P_t(\vec{x})}\int P(\vec{y}_0)\tilde{P}(\vec{y}_1)N(\vec{x} \mid t\cdot\vec{y}_1 + (1-t)\cdot\vec{y}_0, \sigma^2)(\vec{y}_1 - \vec{y}_0)\,d\vec{y}_0\,d\vec{y}_1$$

値が未知（のことが多い）！

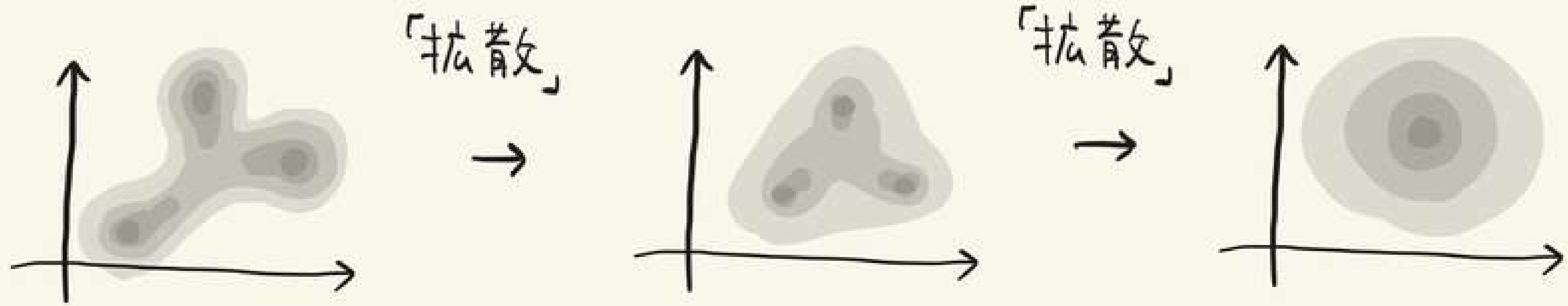
粒子の方程式 $d\vec{x}_t = \vec{u}_t(\vec{x}_t)dt$

4. 粒子と分布の対応（その2）

フローマッチング

「時間」 t

$P_t(\vec{x})$



分布の方程式
＝
「連続の方程式」

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t(\vec{x}) = -\nabla_x \cdot \left(P_t(\vec{x}) \vec{u}_t(\vec{x}) \right)$$

$$\int P_t(\vec{x}) \left(\vec{v}_t(\vec{x}) - \vec{u}_t(\vec{x}) \right)^2 d\vec{x}$$

がモンテカルロ計算可能

モデル

$\vec{v}_t(\vec{x}_t)$

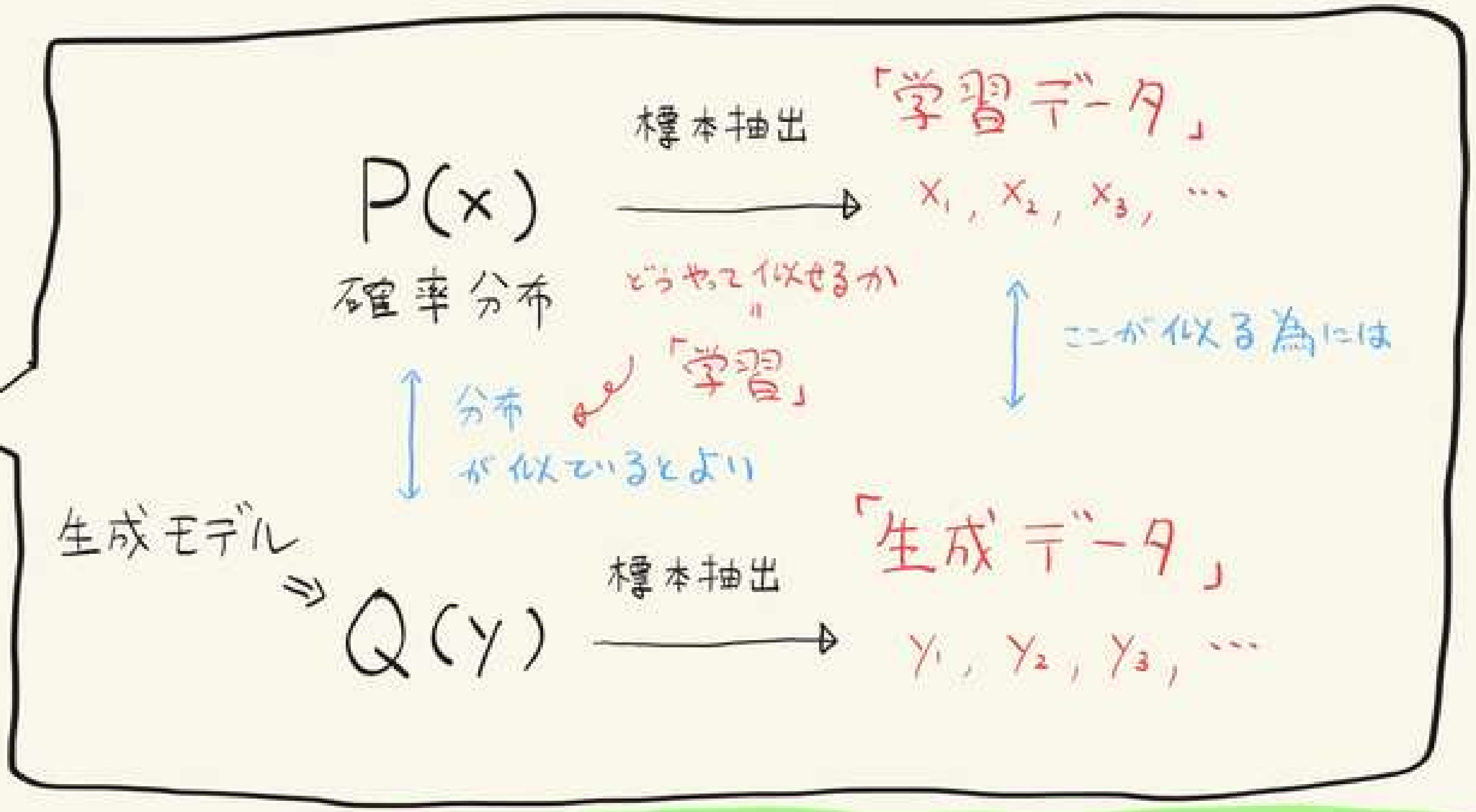
$\approx$ 一致するようにする

粒子の方程式

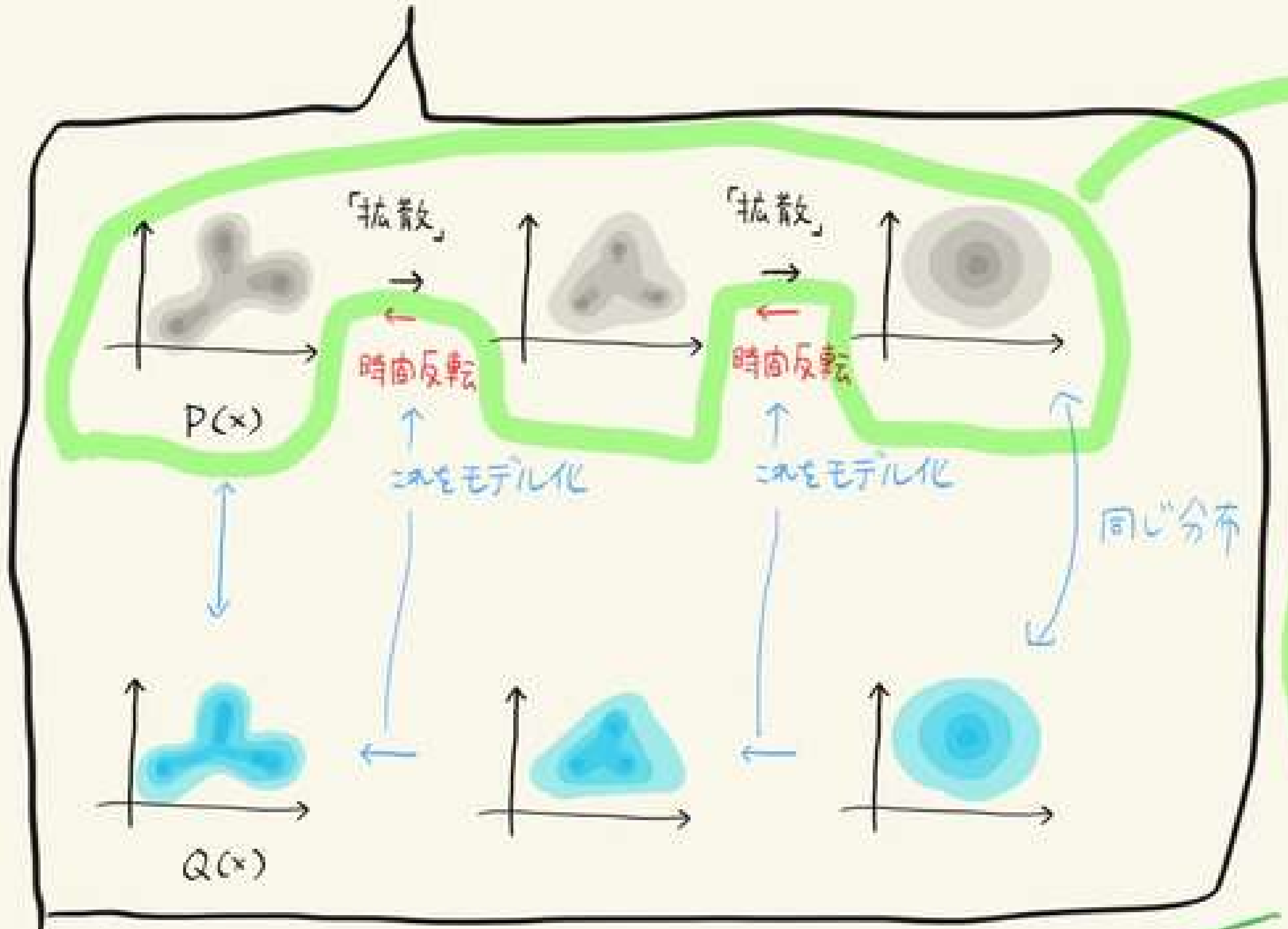
$$d\vec{x}_t = \vec{u}_t(\vec{x}_t)\,dt$$

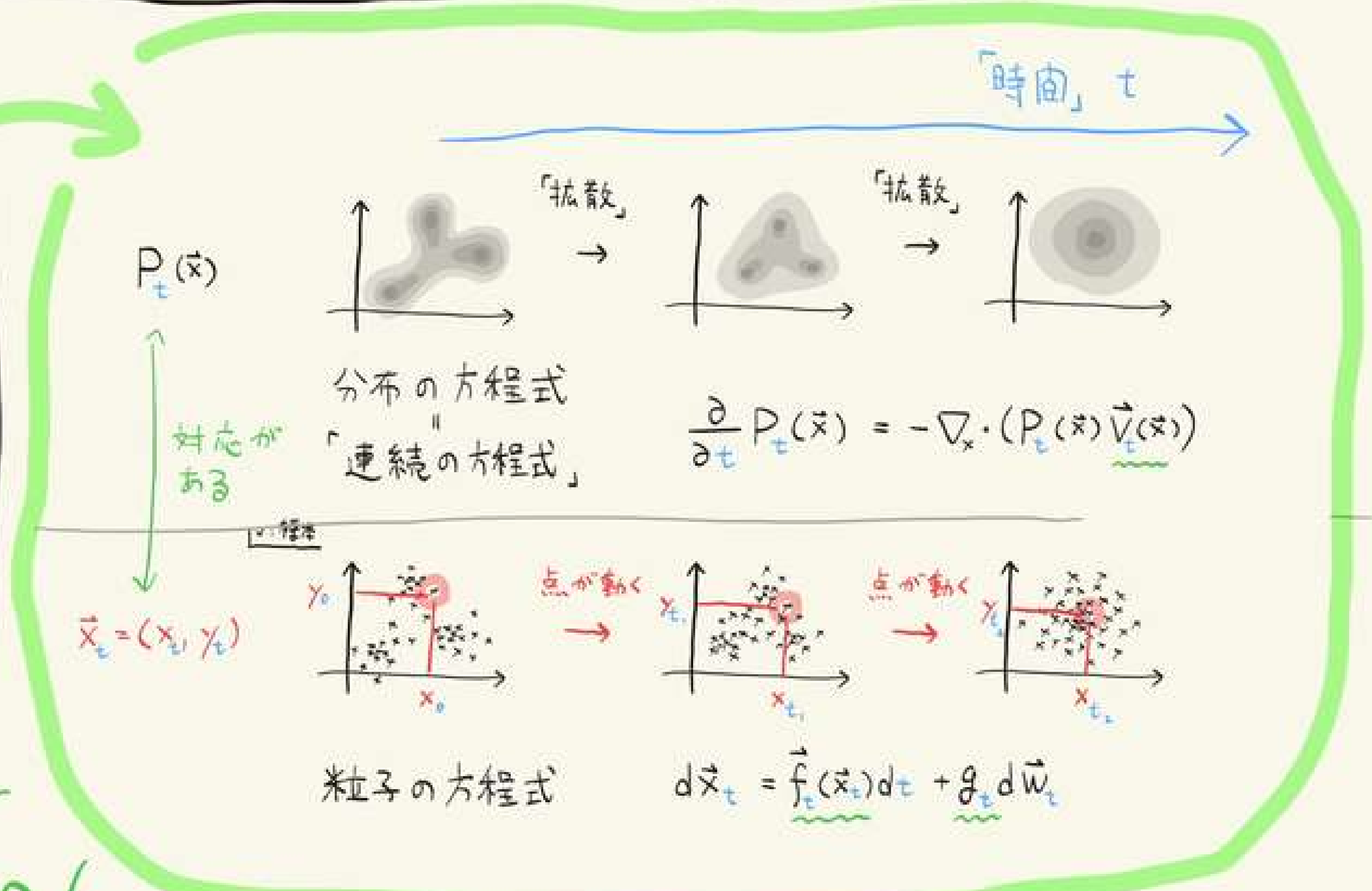
本日のまとめ

1. 生成モデルとは？



2. 拡散モデルとは





$g_t \neq 0$ 　　 $g_t = 0$

3. 粒子と分布の対応（その1）

→ スコアマッチング

4. 粒子と分布の対応（その2）

→ フローマッチング