最適輸送と非平衡熱力学: 拡散モデルへの応用

「学習物理学の創成」領域セミナー

伊藤創祐, 理学系研究科附属生物普遍性研究機構, 東京大学

2025.1/30

Universal Biology Institute

アウトライン

- イントロダクション: 拡散現象における最適輸送理論と非平衡熱力学
- 非平衡熱力学/最適輸送理論の入門: 拡散現象における散逸と最適な輸送
- 非平衡熱力学と最適輸送の手法による, 拡散生成モデルへの応用

K. Ikeda, T. Uda, D. Okanohara and SI, arXiv:2407.04495.

拡散現象のメゾスコピックな記述: Brown運動

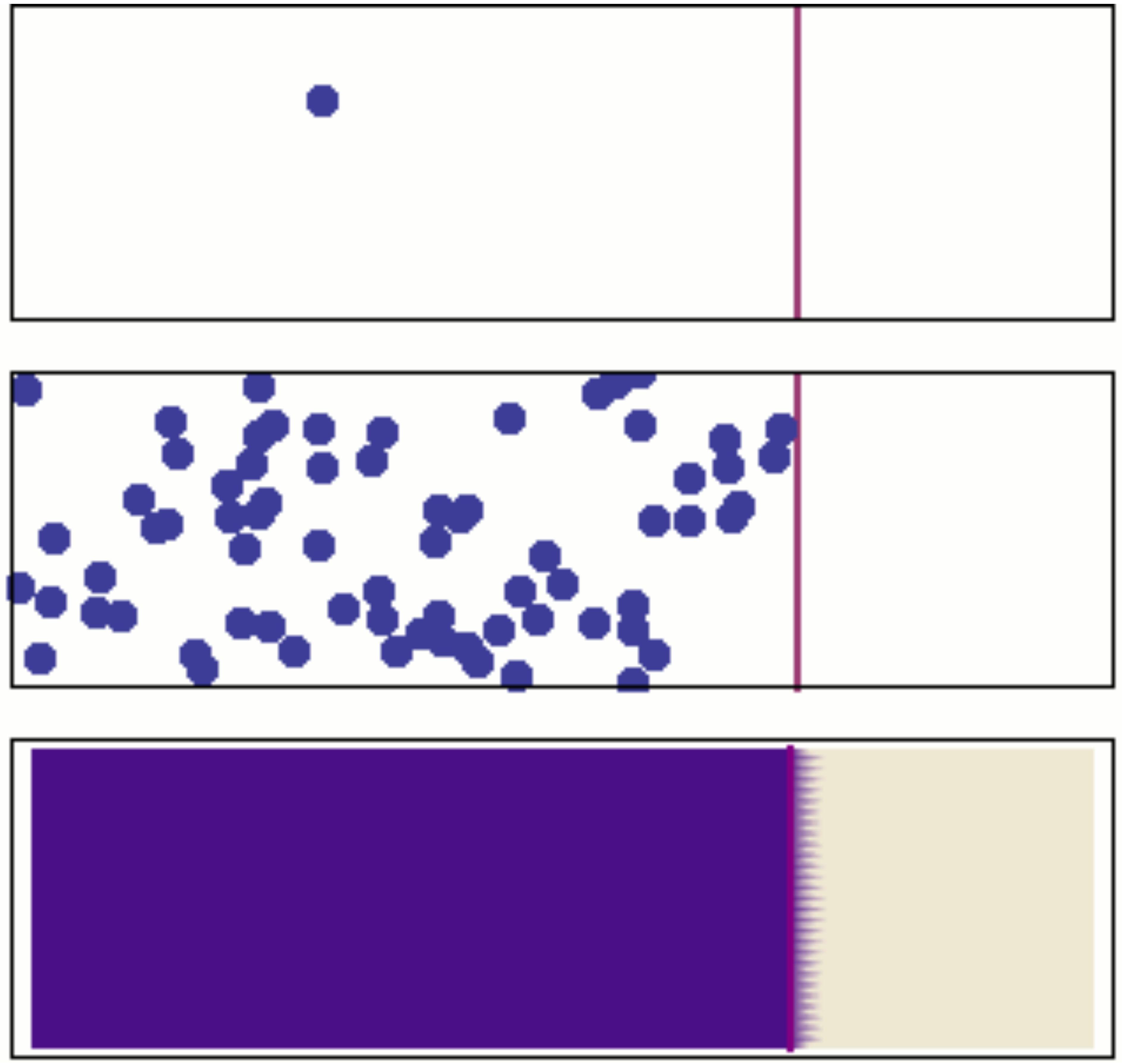
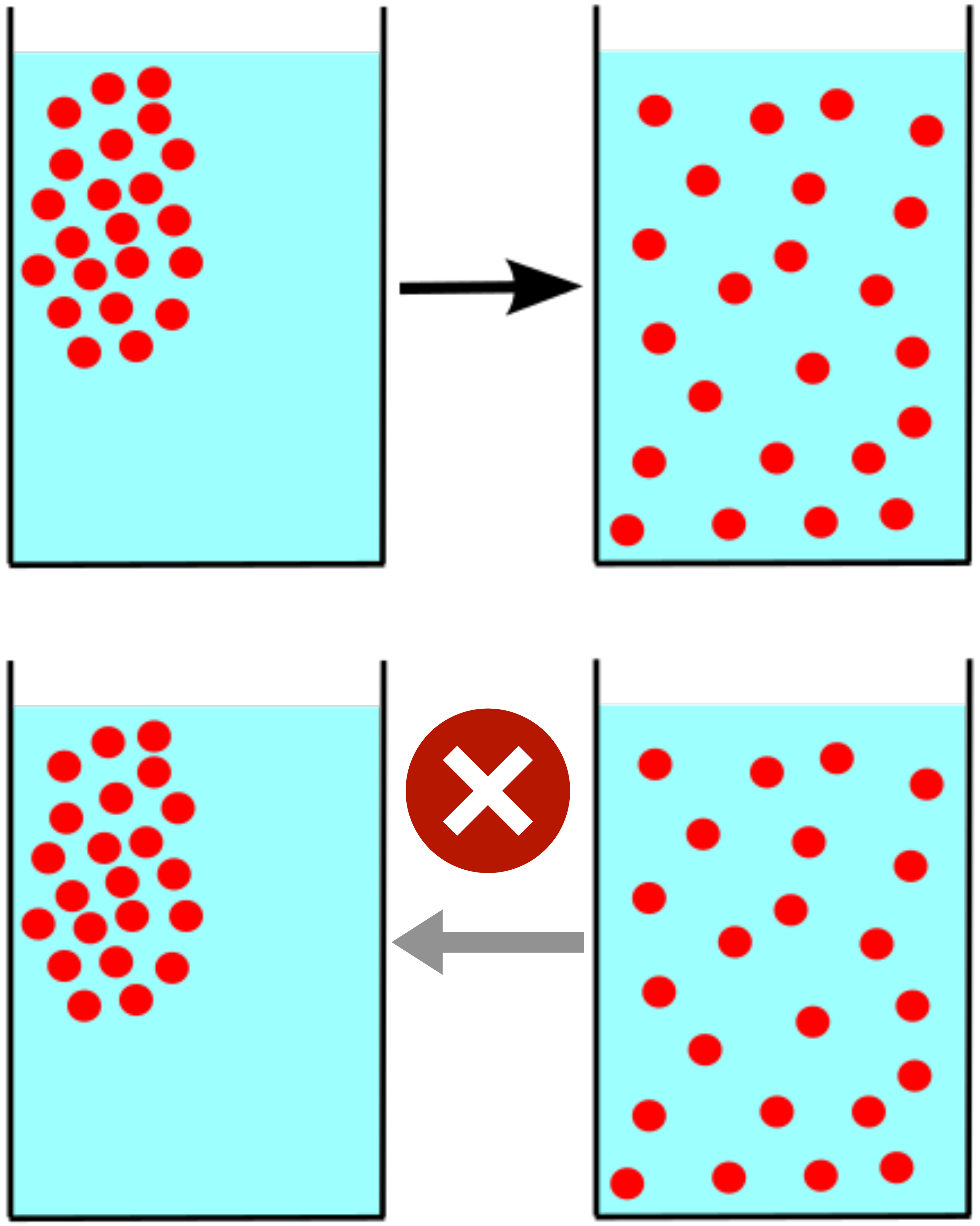


Figure from https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion

非平衡熱力学: “時間の矢”に関する学問



「覆水盆に返らず」

“覆水盆に返らなさ”

=エントロピー生成(率)

Figure from https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion

Brown運動のメゾスコピックな物理的記述

1粒子の運動に対する記述 = Langevin方程式

(ボルツマン定数とmoblityを1にしている)

$$\dot{x}(t) = \boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}(t)) + \sqrt{2T_t}\boldsymbol{\xi}(t)$$

$$\langle\{\boldsymbol{\xi}(t)\}_i\rangle = 0 \quad \langle\{\boldsymbol{\xi}(t)\}_i\{\boldsymbol{\xi}(t')\}_j\rangle = \delta_{ij}\delta(t-t')$$

$\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}(t))$: Brown粒子に加わる外力

T_t: 溶媒の温度 = 拡散係数

(Einsteinの関係式)

粒子の確率に対する記述 = Fokker-Planck方程式

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla\cdot(\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})P_t(\boldsymbol{x}))$$

$$\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) - T_t\nabla\ln P_t(\boldsymbol{x})$$

1粒子

粒子の確率

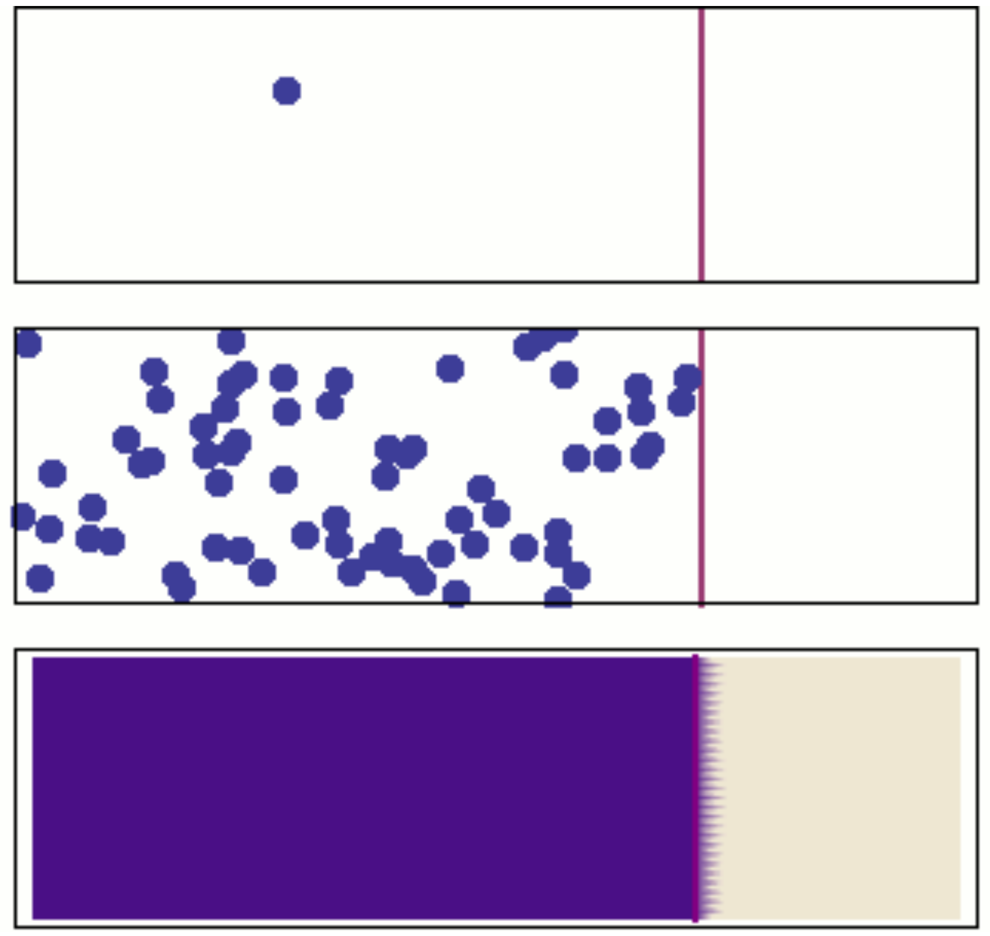


Figure from https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion

最適輸送理論

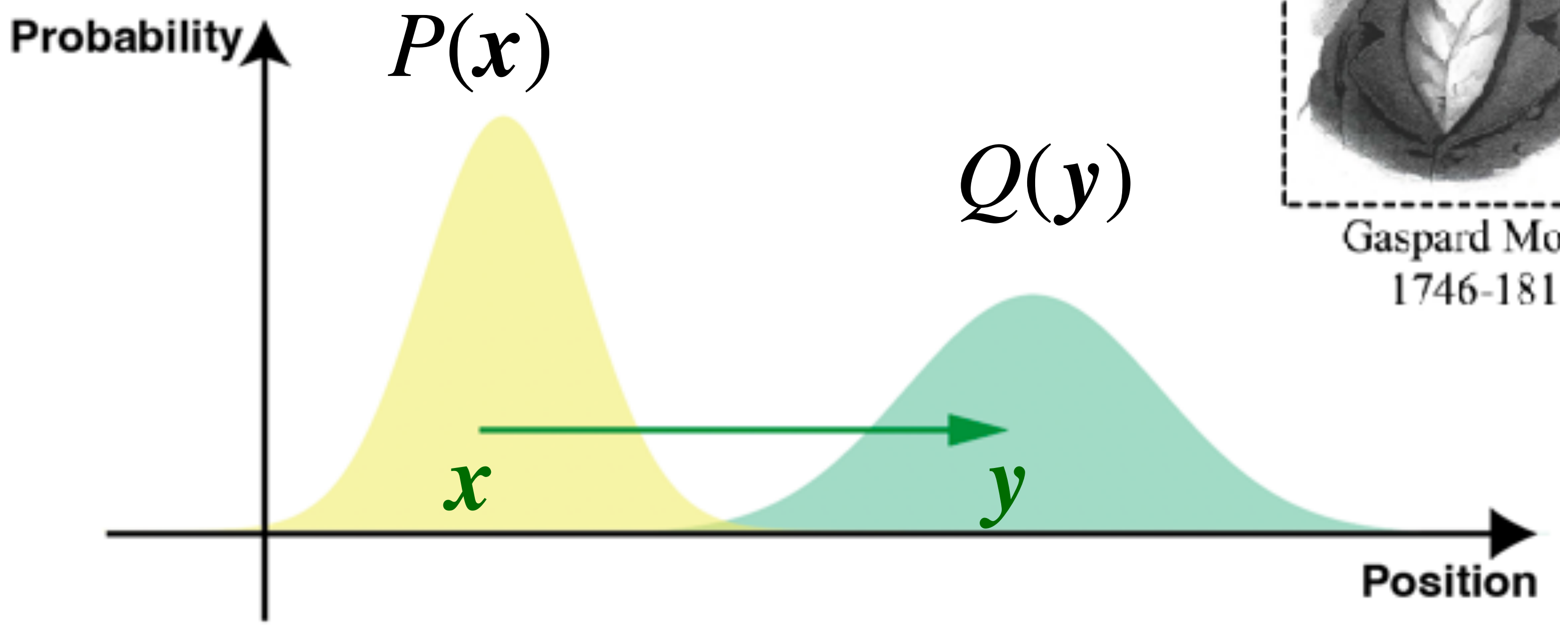
Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

Monge問題 (1781)

ある分布の山$P(\boldsymbol{x})$を別の分布の山$Q(\boldsymbol{y})$に輸送する問題を考える.

輸送には移動距離に応じたコスト$c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$がかかる.

最小な輸送方法$T(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}$は何か. (また最小化されたコストの期待値は何か)



Gaspard Monge
1746-1818

Monge-Kantorovich問題 (L. Kantorovichによる拡張, 1942)

$$\inf_\pi \langle c \rangle_\pi \quad \text{such that} \quad \int dy \pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = P(\boldsymbol{x}) \quad \int dx \pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = Q(\boldsymbol{y}) \quad \pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \geq 0$$

周辺化で確率分布$P(\boldsymbol{x})$, $Q(\boldsymbol{y})$を与える同時確率分布$\pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$を変えながら,
輸送コストの期待値$\langle c \rangle_\pi$を最小化する問題
(Monge問題は$\pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \delta(\boldsymbol{y} - T(\boldsymbol{x}))P(\boldsymbol{x})$に限定された状況に相当)

$$\langle c \rangle_\pi = \int d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{y} c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$$

分布間の距離の指標:
p-Wasserstein距離

Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

p-Wasserstein距離 (Euclid距離をコストとしたMonge-Kantrovich問題の解を用いた分布間の距離)

$$\mathscr{W}_p(P,Q) = (\inf_{\pi} \langle ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||^p \rangle_\pi)^{\frac{1}{p}} = \left(\inf_{\pi} \int d\boldsymbol{x} \int d\boldsymbol{y}\, ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||^p \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\text{such that} \quad \int d\boldsymbol{y}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = P(\boldsymbol{x}) \quad \int d\boldsymbol{x}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = Q(\boldsymbol{y}) \quad \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \geq 0$$

距離の公理を満たす

① $\mathscr{W}_p(P,Q) \geq 0$ ② $\mathscr{W}_p(P,Q) = 0 \Leftrightarrow P = Q$ ③ $\mathscr{W}_p(P,Q) = \mathscr{W}_p(Q,P)$

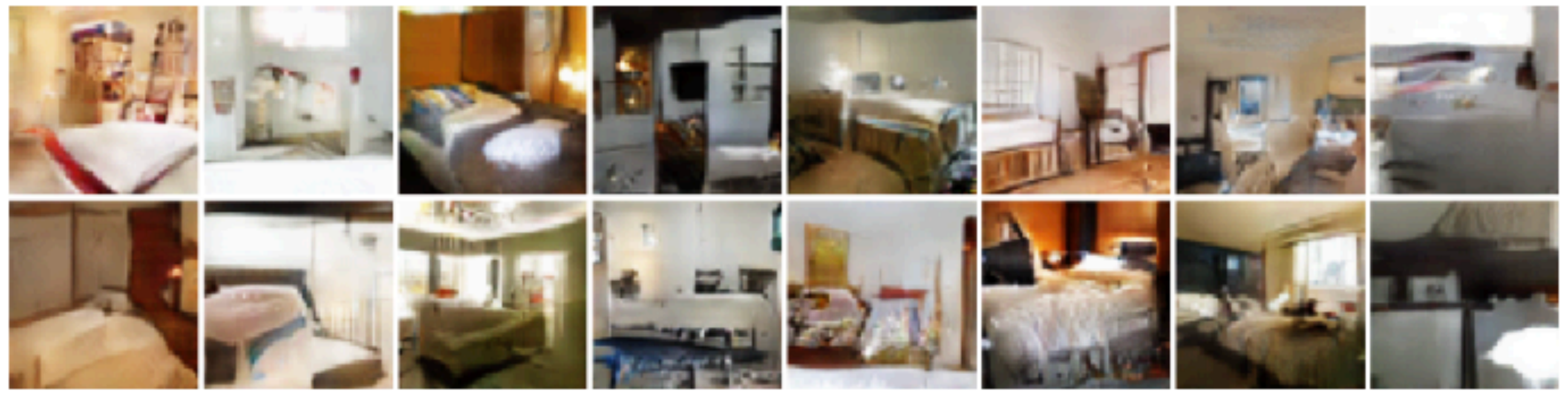
④ $\mathscr{W}_p(P,R) + \mathscr{W}_p(R,Q) \geq \mathscr{W}_p(P,Q)$

Hölderの不等式の帰結として以下を満たす.

$$p \geq q \geq 1 \Rightarrow \mathscr{W}_p(P,Q) \geq \mathscr{W}_q(P,Q)$$

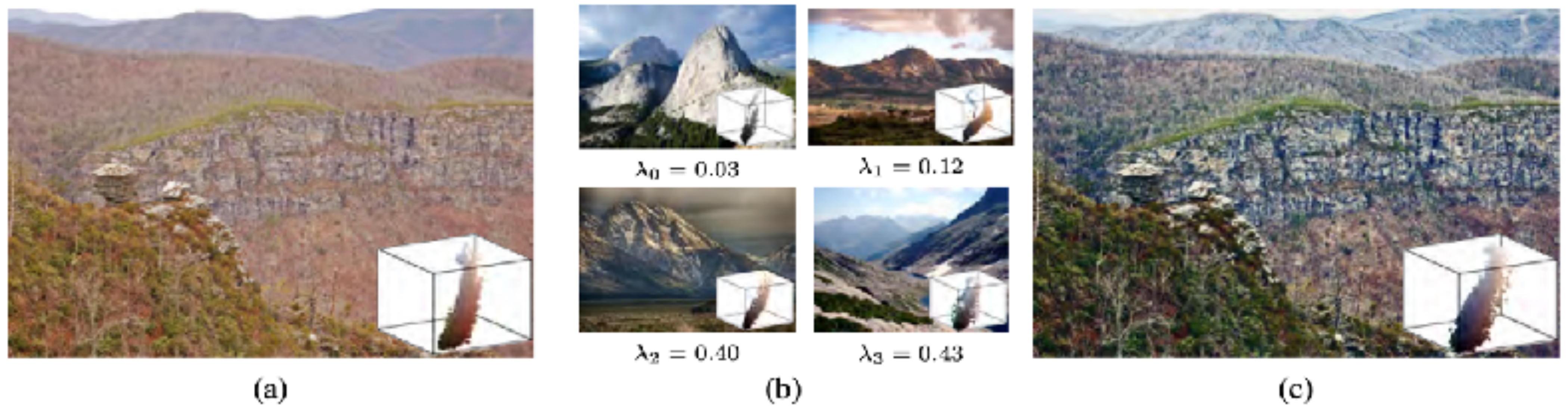
p-Wasserstein距離の機械学習への応用

▶ 生成AI (Wasserstein GAN)

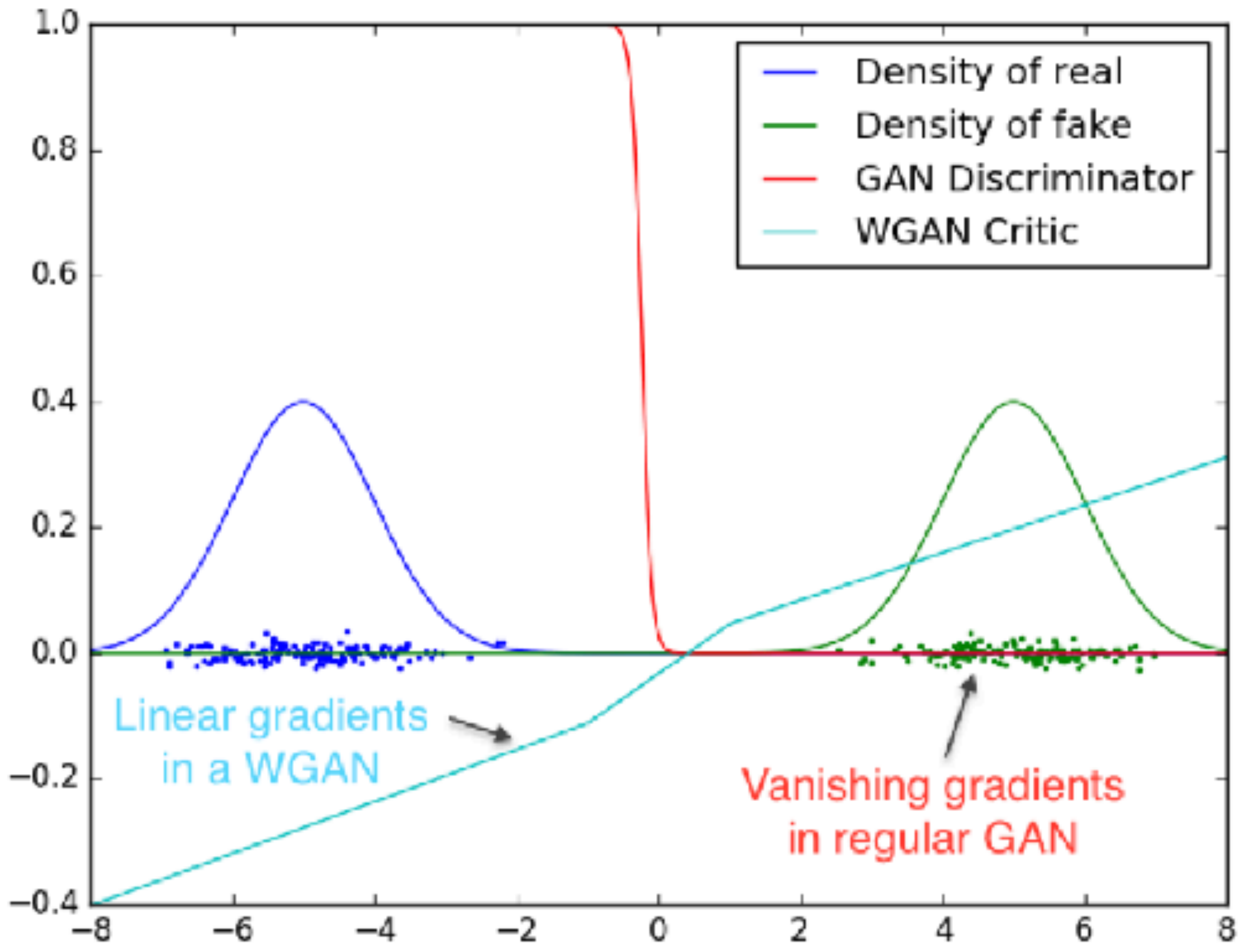


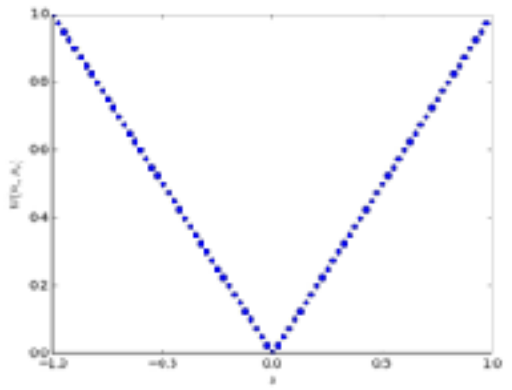
Arjovsky, Martin, et al. *International conference on machine learning*. PMLR, (2017).

▶ カラーグレーディング (Wasserstein barycenter)

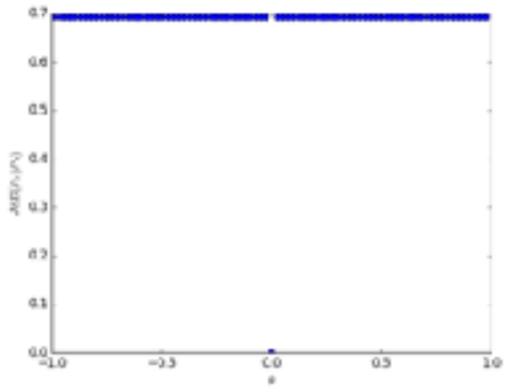


Bonneel, Nicolas, et al. *ACM Trans. Graph.* 35, 71 (2016).



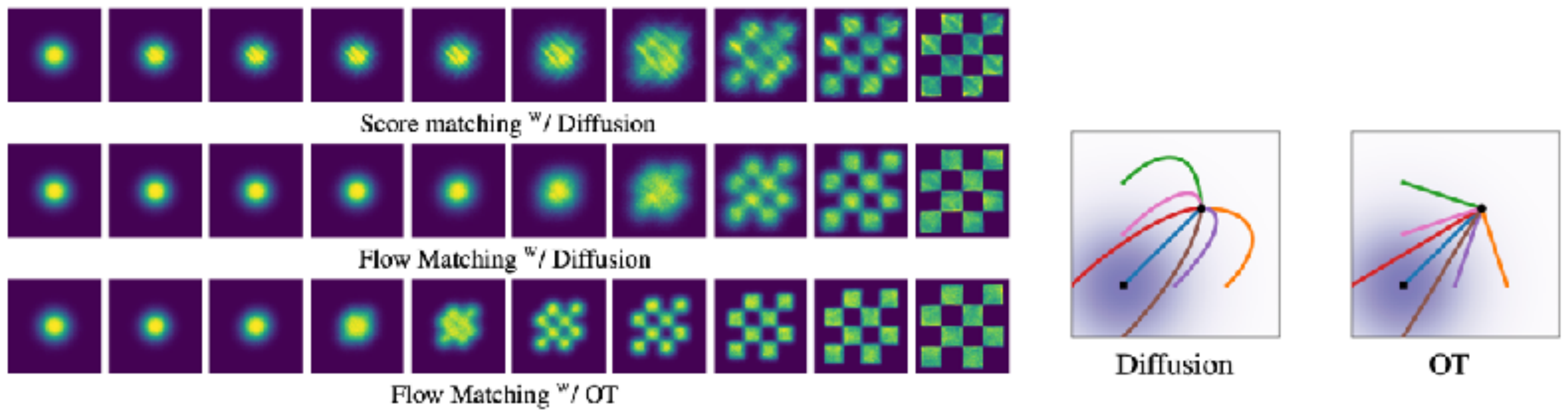


1-Wasserstein距離



Jensen-Shannonダイバージェンス

▶ 生成AI (拡散モデル, flow-based modeling)



Y. Lipman, R. T. Chen, H. Ben-Hamu, M. Nickel, and M. Le, International Conference on Learning Representations (2022).

拡散過程における
2-Wasserstein距離と非平衡熱力学との接点

拡散過程(Fokker-Planck方程式)は
自由エネルギーと2-Wasserstein距離を用いた最適化問題の解として記述できる

Jordan, R., Kinderlehrer, D., & Otto, F. *SIAM journal on mathematical analysis*, *29*(1), 1-17 (1998).

拡散過程(Fokker-Planck方程式)における最小散逸(最小エントロピー生成)との関係

Aurell, Erik, et al. *Journal of statistical physics* 147, 487-505 (2012).

拡散過程(Fokker-Planck方程式)における散逸(エントロピー生成/エントロピー生成率)と
状態変化速度の間のトレードオフ関係 [我々の研究]

Nakazato, M., & Ito, S. *Physical Review Research 3*, 043093 (2021).
Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. *Physical Review Research 4*, L012034 (2022).

(1-Wasserstein距離とトレードオフ関係との密接な関係)

R. Nagayama, K. Yoshimura, A. Kolchinsky and SI. arXiv: 2311.16569.
R. Nagayama, K. Yoshimura, and SI .arXiv:2412.20690.

アウトライン

- なぜ非平衡熱力学か？ 拡散現象における最適輸送理論との接点
- 非平衡熱力学と最適輸送: 拡散現象における散逸と最適な輸送
- 非平衡熱力学と最適輸送の手法による, 拡散生成モデルへの応用

K. Ikeda, T. Uda, D. Okanohara and SI, arXiv:2407.04495.

拡散過程における熱力学:
熱力学第一法則

Review: U. Seifert, Reports on progress in physics, 75, 126001 (2012).
Textbook: K. Sekimoto, Stochastic energetics (Springer, 2012)

Fokker-Planck方程式

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x}))$$

$$\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) - T_t \nabla \ln P_t(\boldsymbol{x})$$

ポテンシャル力で駆動する場合について考える $\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla U_t(\boldsymbol{x})$

エネルギー期待値 $\langle U_t \rangle = \int d\boldsymbol{x} U_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x})$ に対する熱力学第一法則

$$\partial_t \langle U_t \rangle = \delta_t Q_t + \delta_t W_t$$

仕事: $\delta_t W_t = \int d\boldsymbol{x} [\partial_t U_t(\boldsymbol{x})] P_t(\boldsymbol{x})$

熱: $\delta_t Q_t = \int d\boldsymbol{x} U_t(\boldsymbol{x}) [\partial_t P_t(\boldsymbol{x})]$

拡散過程における熱力学:
エントロピー生成率と熱力学第二法則

Review: U. Seifert, Reports on progress in physics, 75, 126001 (2012).
Textbook: K. Sekimoto, Stochastic energetics (Springer, 2012)

エントロピー生成率 $\dot{S}_t^{\mathrm{tot}}$

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} = \partial_t S_t - \frac{\delta_t Q_t}{T_t}$$

系のエントロピー: $S_t = -\int d\boldsymbol{x} P_t(\boldsymbol{x}) \ln P_t(\boldsymbol{x})$

$$\begin{aligned}
\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} &= \frac{1}{T_t}\int d\boldsymbol{x}(U_t(\boldsymbol{x}) - T_t \ln P_t(\boldsymbol{x}))\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) \\
&= -\frac{1}{T_t}\int d\boldsymbol{x}(U_t(\boldsymbol{x}) - T_t \ln P_t(\boldsymbol{x}))\nabla\cdot(\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})P_t(\boldsymbol{x})) \\
&= \frac{1}{T_t}\int d\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x}) \quad \geq 0
\end{aligned}$$

熱力学第二法則 $\quad \partial_t S_t \geq \dfrac{\delta_t Q_t}{T_t}$

拡散過程における熱力学:
エントロピー生成率と状態変化の尺度

Review: U. Seifert, Reports on progress in physics, 75, 126001 (2012).
Textbook: K. Sekimoto, Stochastic energetics (Springer, 2012)

カノニカル分布 $P_t^{\mathrm{can}}(\boldsymbol{x})$

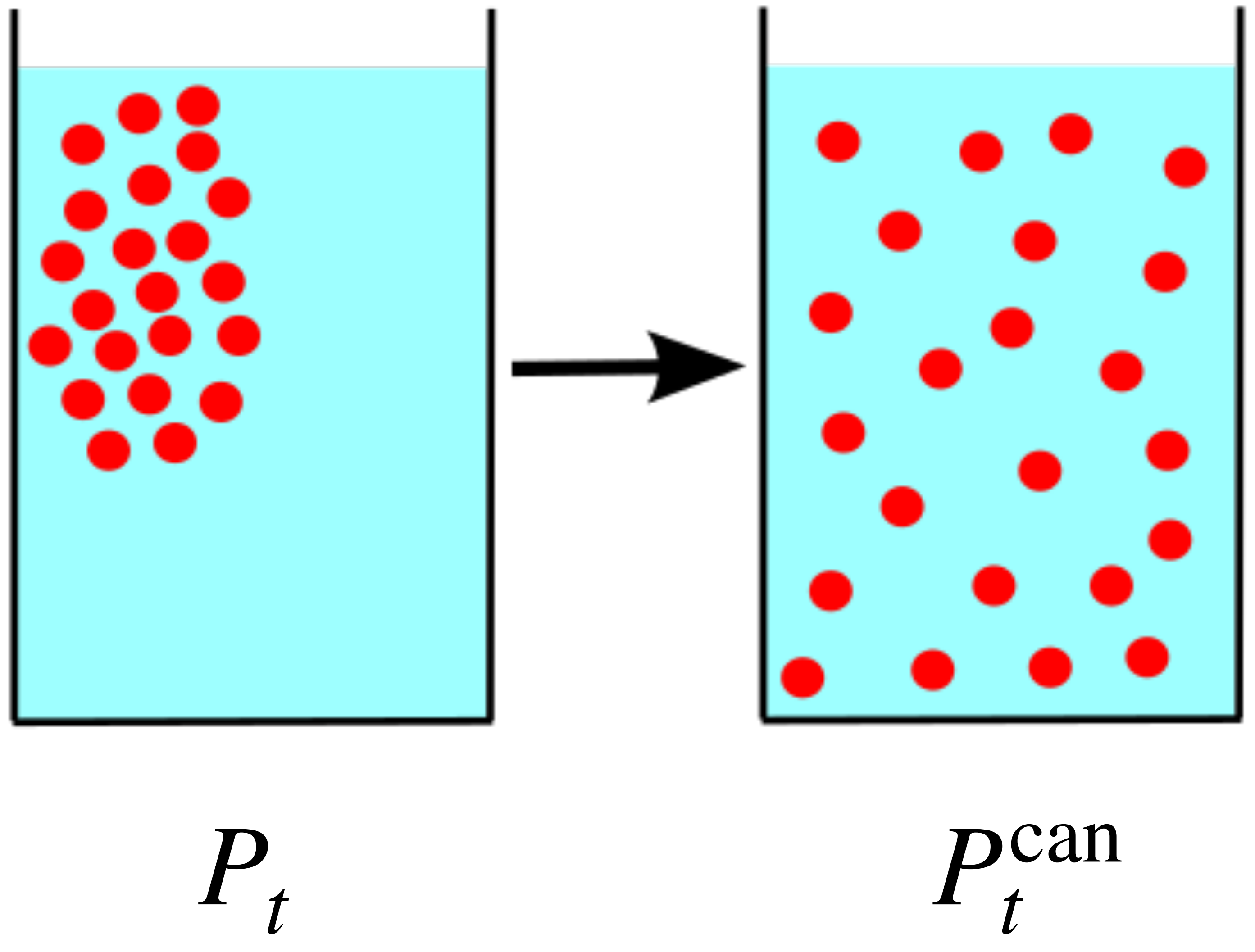
$$P_t^{\mathrm{can}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\exp(-U_t(\boldsymbol{x})/T_t)}{\int d\boldsymbol{x} \exp(-U_t(\boldsymbol{x})/T_t)}$$

エントロピー生成率

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{T_t}\int d\boldsymbol{x}(U_t(\boldsymbol{x}) - T_t \ln P_t(\boldsymbol{x}))\partial_t P_t(\boldsymbol{x})$$

$$= \int d\boldsymbol{x}(\ln P_t^{\mathrm{can}}(\boldsymbol{x}) - \ln P_t(\boldsymbol{x}))\partial_t P_t(\boldsymbol{x})$$

$$= -\partial_t D_{\mathrm{KL}}(P_t \| P_s^{\mathrm{can}})\Big|_{s=t} \quad \geq 0$$



Kullback-Leiblerダイバージェンス:

$$D_{\mathrm{KL}}(P_t \| P_s^{\mathrm{can}}) = \int d\boldsymbol{x} P_t(\boldsymbol{x}) \ln \frac{P_t(\boldsymbol{x})}{P_s^{\mathrm{can}}(\boldsymbol{x})}$$

拡散過程における熱力学:
一般の場合のエントロピー生成率とエントロピー生成

Review: U. Seifert, Reports on progress in physics, 75, 126001 (2012).
Textbook: K. Sekimoto, Stochastic energetics (Springer, 2012)

Fokker-Planck方程式

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x}))$$

$$\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) - T_t \nabla \ln P_t(\boldsymbol{x})$$

ポテンシャル力で記述されない一般の場合もエントロピー生成率を同様に定義

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{T_t} \int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x})$$

有限時間区間$[0,\tau]$でのエントロピー生成S_τ^{tot}を次のように定義

$$S_\tau^{\mathrm{tot}} = \int_0^\tau dt \frac{1}{T_t} \int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x})$$

最適輸送理論再考: p-Wasserstein距離

Textbook: Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

$$\mathscr{W}_p(P,Q) = (\inf_{\pi} \langle ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||^p \rangle_{\pi})^{\frac{1}{p}} = \left(\inf_{\pi} \int d\boldsymbol{x} \int d\boldsymbol{y} \, ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||^p \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\text{such that} \quad \int d\boldsymbol{y}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = P(\boldsymbol{x}) \quad \int d\boldsymbol{x}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = Q(\boldsymbol{y}) \qquad \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \geq 0$$

特にp=1とp=2がよく使われる.

p=1 ⇒ 最適化問題における双対問題の視点からの計算のしやすさ

p=2 ⇒ 微分幾何学的な視点からの数学的な性質の良さ, 熱力学との関係

最適輸送理論:
1-Wasserstein距離の双対表現 (Kantorovich-Rubinstein双対)

Textbook: Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

1-Wasserstein距離

$$\mathscr{W}_1(P,Q) = \inf_{\pi} \int d\boldsymbol{x} \int d\boldsymbol{y}\, ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||\, \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \quad \text{such that} \quad \int d\boldsymbol{y}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = P(\boldsymbol{x}) \quad \int d\boldsymbol{x}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = Q(\boldsymbol{y}) \quad \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \geq 0$$

1-Wasserstein距離の双対表現 (Kantorovich-Rubinstein双対)

$$\mathscr{W}_1(P,Q) = \sup_{f \in \mathrm{Lip}^1} [\langle f \rangle_P - \langle f \rangle_Q] \qquad \mathrm{Lip}^1 = \{f(\boldsymbol{x}) \,|\, \forall \boldsymbol{x}, ||\nabla f(\boldsymbol{x})||^2 \leq 1\} \qquad \langle f \rangle_P = \int d\boldsymbol{x} f(\boldsymbol{x}) P(\boldsymbol{x})$$

最適輸送理論:
2-Wasserstein距離の別表現 (Benamou-Brenier公式)

Textbook: Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

2-Wasserstein距離

$$\mathscr{W}_2(P,Q) = \left(\inf_{\pi} \int d\boldsymbol{x} \int d\boldsymbol{y}\, ||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||^2 \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{such that} \quad \int d\boldsymbol{y}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = P(\boldsymbol{x}) \quad \int d\boldsymbol{x}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = Q(\boldsymbol{y}) \quad \pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \geq 0$$

2-Wasserstein距離の別表現 (Benamou-Brenier公式)　連続の式に基づく表現

$$\mathscr{W}_2(P,Q) = \sqrt{\inf_{\{\boldsymbol{u}_t, Q_t\}_{0\le t\le \tau}} \tau \int_0^{\tau} dt \int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{u}_t(\boldsymbol{x})\|^2 Q_t(\boldsymbol{x})} \quad \text{such that} \quad \begin{array}{l} \partial_t Q_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla\cdot(\boldsymbol{u}_t(\boldsymbol{x})Q_t(\boldsymbol{x})) \\ Q_0(\boldsymbol{x}) = P(\boldsymbol{x}) \quad Q_\tau(\boldsymbol{x}) = Q(\boldsymbol{x}) \end{array}$$

J-D. Benamou & Y. Brenier. *Numerische Mathematik* 84, 375-393 (2000).

最適解　$\boldsymbol{u}_t^*(\boldsymbol{x}) = \nabla\phi_t(\boldsymbol{x}) \qquad \partial_t\phi_t(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}||\nabla\phi_t(\boldsymbol{x})||^2 = 0$

エントロピー生成と2-Wasserstein距離との関係

エントロピー生成

$$S_\tau^{\mathrm{tot}} = \int_0^\tau dt \frac{1}{T_t} \int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x})$$

Fokker-Planck方程式

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x}))$$

$$\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) - T_t \nabla \ln P_t(\boldsymbol{x})$$

2-Wasserstein距離

$$\mathscr{W}_2(P, Q) = \sqrt{\inf_{\{\boldsymbol{u}_t, Q_t\}_{0 \le t \le \tau}} \tau \int_0^\tau dt \int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{u}_t(\boldsymbol{x})\|^2 Q_t(\boldsymbol{x})} \quad \text{such that} \quad \begin{gathered} \partial_t Q_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{u}_t(\boldsymbol{x}) Q_t(\boldsymbol{x})) \\ Q_0(\boldsymbol{x}) = P(\boldsymbol{x}) \qquad Q_\tau(\boldsymbol{x}) = Q(\boldsymbol{x}) \end{gathered}$$

Aurell, Erik, et al. *Journal of statistical physics* 147, 487-505 (2012).

温度一定$(T_t = T)$の時

$$S_\tau^{\mathrm{tot}} \ge \frac{(\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau))^2}{\tau T}$$

エントロピー生成率と 2-Wasserstein距離空間における速度

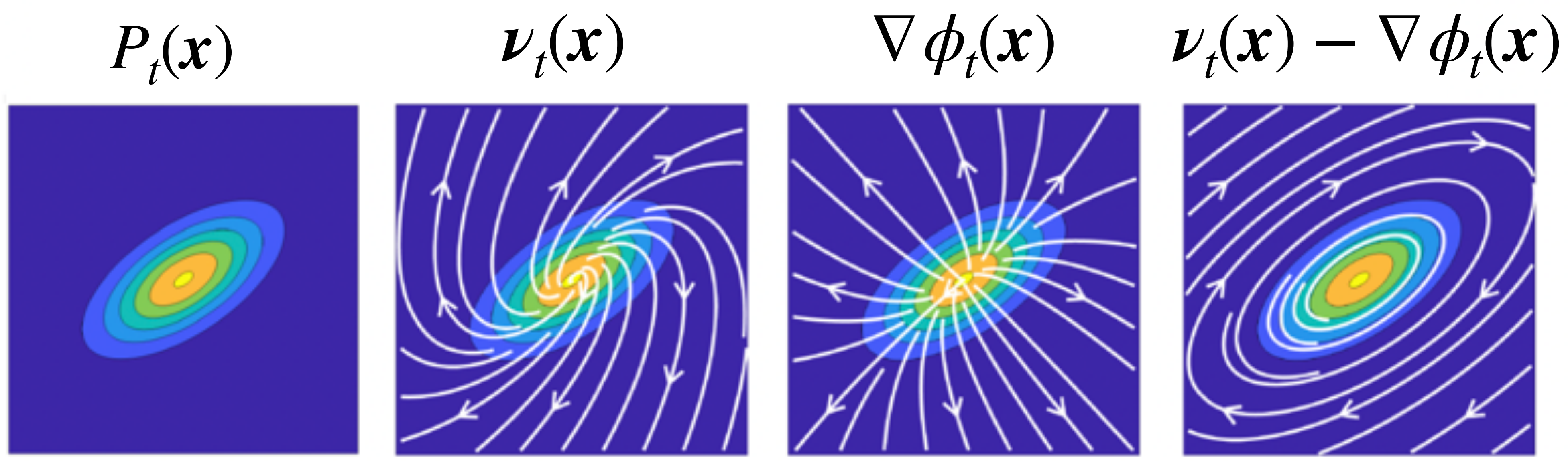
M. Nakazato and SI. Phys. Rev. Res. 3, 043093 (2021).

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} \geq \frac{[v_2(t)]^2}{T_t}$$

2-Wasserstein空間における速度 $v_2(t) = \lim_{\Delta t \to +0} \frac{\mathcal{W}_2(P_t, P_{t+\Delta t})}{\Delta t}$

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x})) = -\nabla \cdot ([\nabla \phi_t(\boldsymbol{x})] P_t(\boldsymbol{x}))$$

$$[v_2(t)]^2 = \int d\boldsymbol{x} \|\nabla \phi_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x})$$



(Figure from) D. Sekizawa, SI, M. Oizumi, Phys. Rev. X 14, 041003 (2024).

外力がポテンシャル力$\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla U_t(\boldsymbol{x})$の時, 等号達成

2-Wasserstein距離空間における測地線と最小エントロピー生成

温度一定($T_t = T$)の時

$$S_\tau^{\mathrm{tot}} \geq \frac{\left[\int_0^\tau dt v_2(t)\right]^2}{\tau T} \geq \frac{[\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)]^2}{\tau T}$$

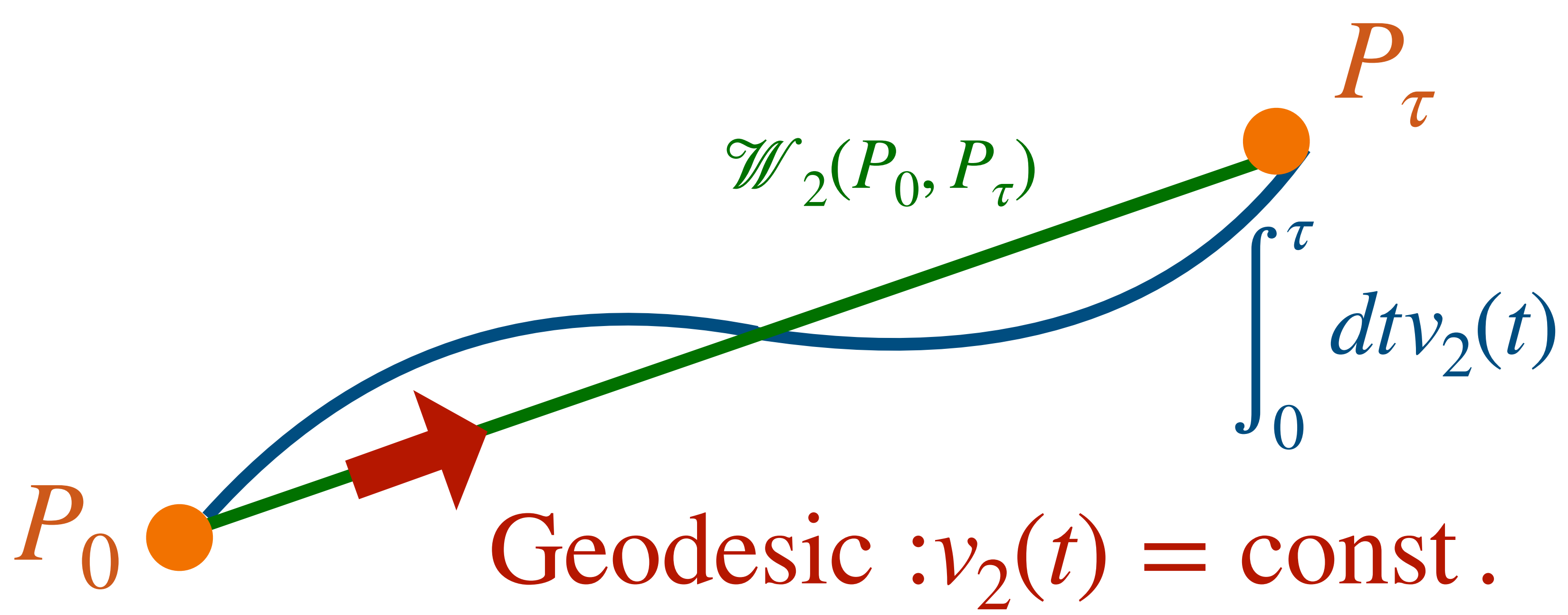
E. Aurell, K. Gawędzki, C. Mejía-Monasterio, R. Mohayaee, & P. Muratore-Ginanneschi, *Journal of statistical physics*, *147*, 487-505 (2012).
M. Nakazato and SI. Phys. Rev. Res. 3, 043093 (2021).

ポテンシャル力 + 測地線の時,
最小エントロピー生成

$$S_\tau^{\mathrm{tot}} = \frac{[\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)]^2}{\tau T}$$

$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} = \dfrac{[v_2(t)]^2}{T}$:ポテンシャル力 ($\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla U_t(\boldsymbol{x})$)

$v_2(t) = \dfrac{\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)}{\tau} = \mathrm{const}.$:測地線 (最適輸送)



熱力学的不確定性関係

A. Dechant, S-I Sasa and SI. Phys. Rev. Res. 4, L012034 (2022).
A. Dechant, S-I Sasa and SI, Phys. Rev. E. 106, 024125 (2022).

cf.) Cramér–Raoの不等式: SI and A. Dechant, *Phys. Rev. X*, *10*, 021056 (2020).

Cauchy-Schwarz不等式

$$[v_2(t)]^2 = \int d\boldsymbol{x} \|\nabla \phi_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x}) \geq \frac{[\int d\boldsymbol{x}[\nabla \phi_t(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla r(\boldsymbol{x})] P_t(\boldsymbol{x})]^2}{\int d\boldsymbol{x} \|\nabla r(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x})}$$

時間に依存しない観測量$r(\boldsymbol{x})$の期待値の時間変化

$$\int d\boldsymbol{x}[\nabla \phi_t(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla r(\boldsymbol{x})] P_t(\boldsymbol{x}) = \int d\boldsymbol{x}[-\nabla \cdot (\nabla \phi_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x}))] r(\boldsymbol{x}) = \int d\boldsymbol{x}[\partial_t P_t(\boldsymbol{x}))] r(\boldsymbol{x}) = \partial_t \langle r \rangle_{P_t}$$

➡ 熱力学的不確定性関係

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} \geq \frac{[v_2(t)]^2}{T_t} \geq \frac{|\partial_t \langle r \rangle_{P_t}|^2}{T_t \langle \|\nabla r\|^2 \rangle_{P_t}}$$

2-Wasserstein距離空間の速度と
観測量の速度/1-Wasserstein距離空間の速度

R. Nagayama, K. Yoshimura, A. Kolchinsky and SI. arXiv: 2311.16569.

観測量$r(\boldsymbol{x})$の速度 $$v_r(t) = \frac{|\partial_t \langle r \rangle_{P_t}|}{\sqrt{\langle \|\nabla r\|^2 \rangle_{P_t}}}$$

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} \geq \frac{[v_2(t)]^2}{T_t} \geq \frac{|\partial_t \langle r \rangle_{P_t}|^2}{T_t \langle \|\nabla r\|^2 \rangle_{P_t}}$$

➡

$$v_2(t) \geq v_r(t)$$

任意の時間依存しない観測量の速度の上限は2-Wasserstein距離空間の速度で与えられる.

※ 1-Wasserstein距離空間の速度の上限も2-Wasserstein距離空間の速度で与えられる.

$$v_1(t) = \lim_{\Delta t \to +0} \frac{\mathscr{W}_1(P_t, P_{t+\Delta t})}{\Delta t}$$

$$v_1(t) = v_{f^*}(t)$$
$$f^* = \mathrm{argmax}_{f \in \mathrm{Lip}^1} [\langle f \rangle_{P_{t+\Delta t}} - \langle f \rangle_{P_t}]$$

➡

$$v_2(t) \geq v_1(t)$$

結果の普遍性

さまざまなシステムにおける非平衡熱力学と, 最適輸送理論の間の関係

Markov jump process

Deterministic chemical reaction networks

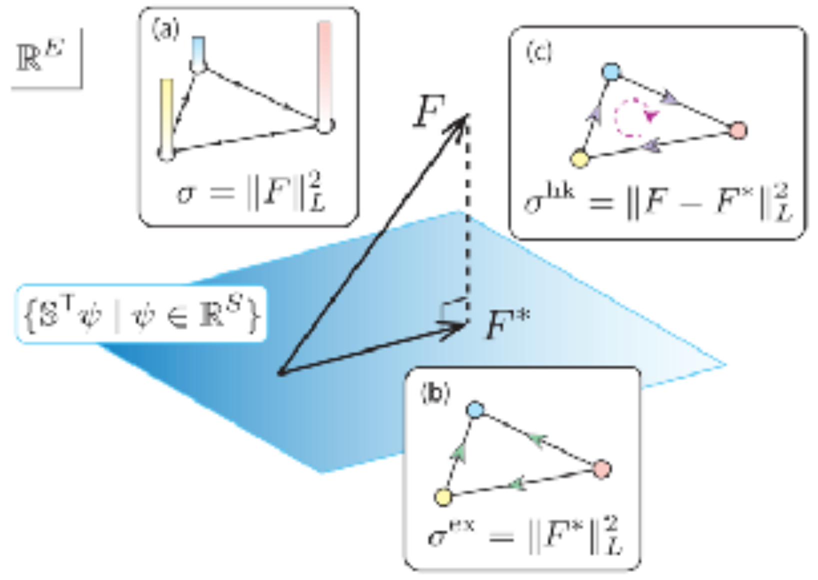
Deterministic reaction-diffusion systems

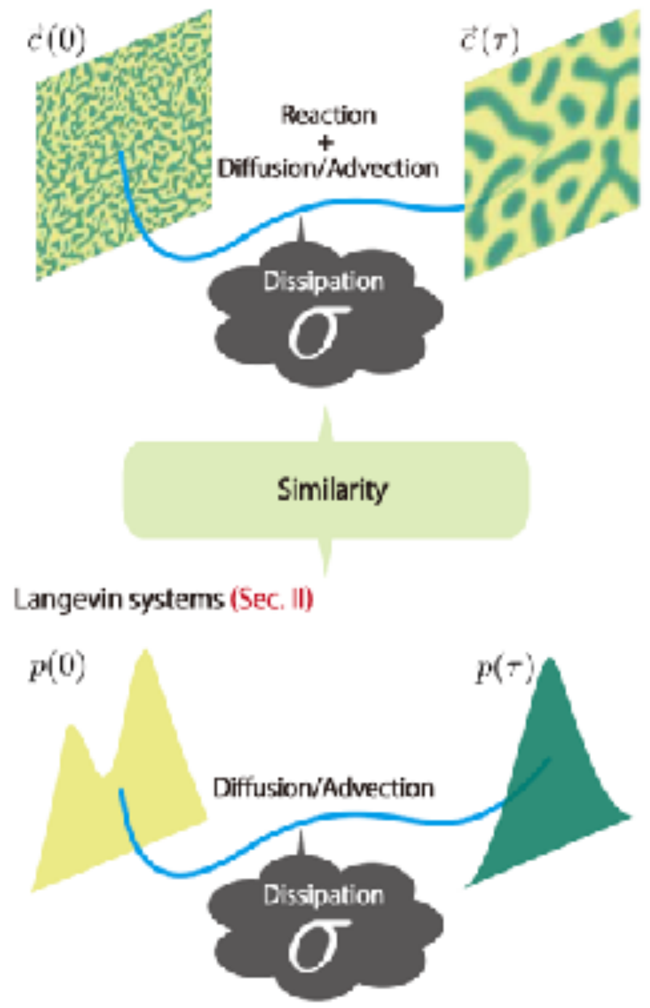
Deterministic fluid systems

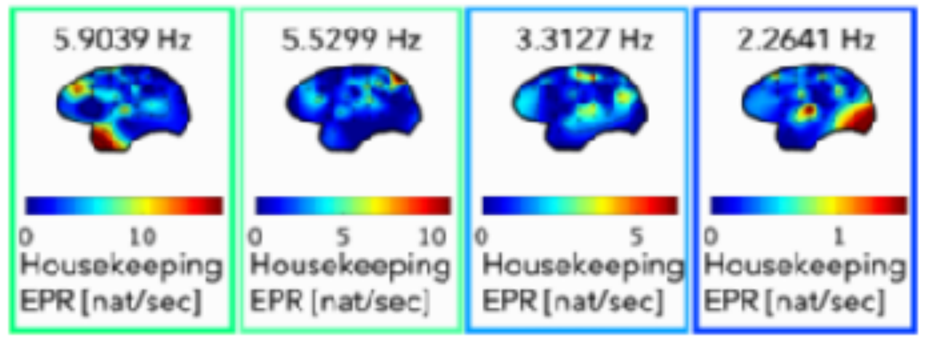
Open quantum systems

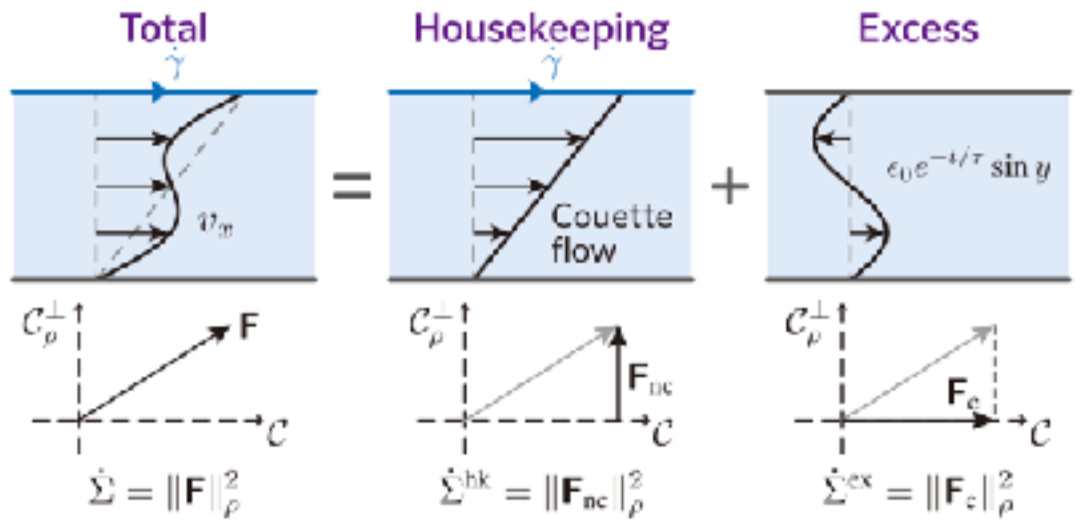
Brain dynamics

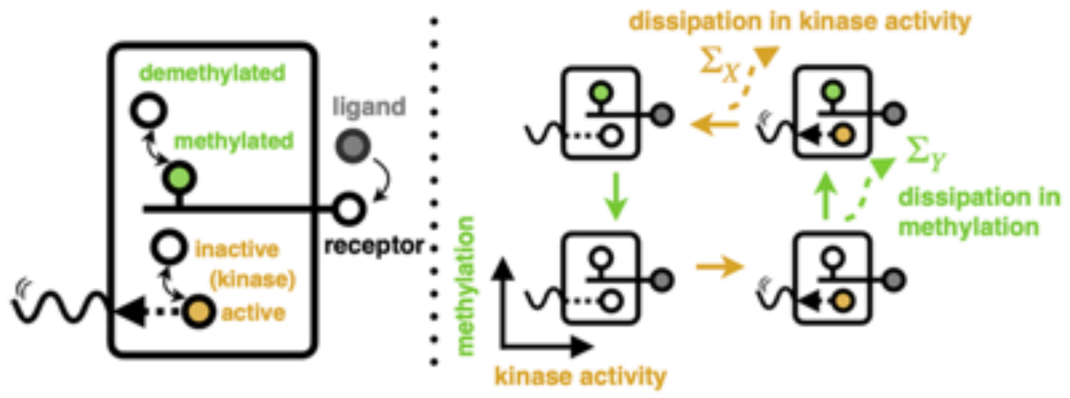
Maxwell’s demon

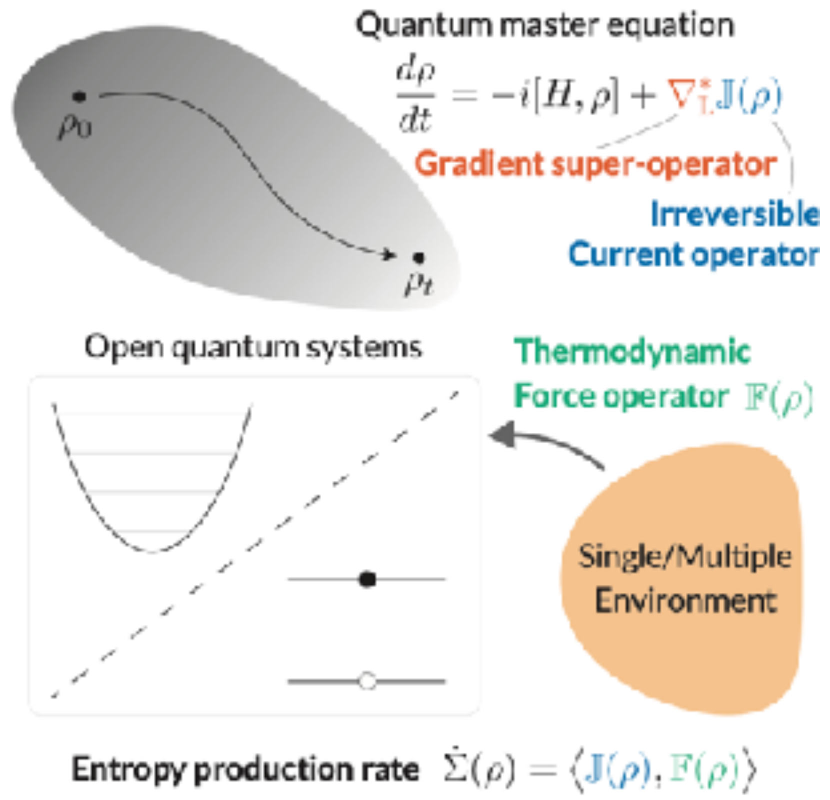












K. Yoshimura, A. Kolchinsky, A. Dechant and SI. Phys. Rev. Res. 5, 013017 (2023).
A. Kolchinsky, A. Dechant, K. Yoshimura and SI, arXiv:2206.14599. arXiv:2412.08432.
K. Yoshimura and SI, Phys. Rev. Res. 6, L022057 (2024).
R. Nagayama, K. Yoshimura, and SI .arXiv:2412.20690.

Y. Fujimoto and SI, Phys. Rev. Res. 6, 013023 (2024).
D. Sekizawa, SI, M. Oizumi, Phys. Rev. X 14, 041003 (2024).
R. Nagayama, K. Yoshimura, A. Kolchinsky and SI, arXiv:2311.16569.
K. Yoshimura, Yoh Maekawa, R. Nagayama and SI. arXiv:2410.22628.

アウトライン

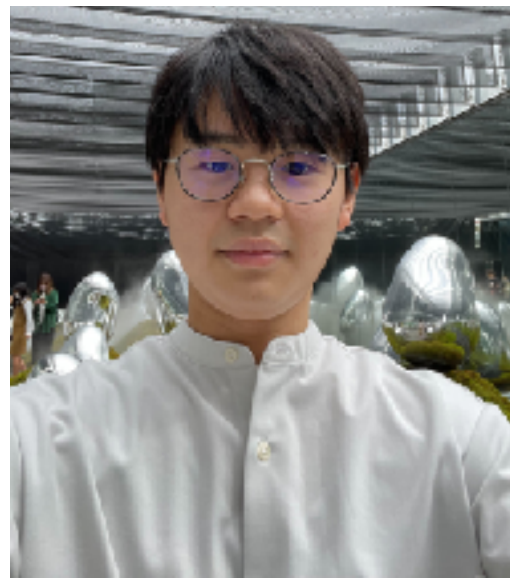
- なぜ非平衡熱力学か? 拡散現象における最適輸送理論との接点
- 非平衡熱力学/最適輸送理論の入門: 拡散現象における散逸と最適な輸送
- 非平衡熱力学と最適輸送の手法による, 拡散生成モデルへの応用

K. Ikeda, T. Uda, D. Okanohara and SI, arXiv:2407.04495.

共同研究者/関連研究など

Main topic (Diffusion model)

K. Ikeda, T. Uda, D. Okanohara and SI, arXiv:2407.04495.



Kotaro Ikeda (UTokyo/B3)

Tomoya Uda (UTokyo/B3)

Daisuke Okanohara (Preferred Networks Inc.)

Related topic (Nonequilibrium thermodynamics and optimal transport)

SI, Information geometry, *Information* Geometry 7.Suppl 1, 441-483 (2024).

M. Nakazato and SI. Phys. Rev. Res. 3, 043093 (2021).
A. Dechant, S-I Sasa and SI. Phys. Rev. Res. 4, L012034 (2022).
A. Dechant, S-I Sasa and SI, Phys. Rev. E. 106, 024125 (2022).
K. Yoshimura, A. Kolchinsky, A. Dechant and SI. Phys. Rev. Res. 5, 013017 (2023).
Y. Fujimoto and SI, Phys. Rev. Res. 6, 013023 (2024).
K. Yoshimura and SI, Phys. Rev. Res. 6, L022057 (2024).
D. Sekizawa, SI, M. Oizumi, Phys. Rev. X 14, 041003 (2024).
A. Kolchinsky, A. Dechant, K. Yoshimura and SI, arXiv:2206.14599. arXiv:2412.08432.
R. Nagayama, K. Yoshimura, A. Kolchinsky and SI, arXiv:2311.16569.
K. Yoshimura, Yoh Maekawa, R. Nagayama and SI. arXiv:2410.22628.
R. Nagayama, K. Yoshimura, and SI .arXiv:2412.20690.

Collaborators:
Lab members (+alumni) [Muka Nakazato, Kohei Yoshimura, Yuma Fujimoto, Artemy Kolchinsky, Ryan Nagayama, Yoh Maekawa]
Andreas Dechant (KyotoU), Shin-ichi Sasa (KyotoU), Daiki Sekizawa (UTokyo), Masafumi Oizumi (UTokyo)

拡散生成モデル

Stable diffusion (2022)

Stable diffusion online **https://stablediffusionweb.com/**

- 生成AI
- Text-to-imageモデル
- 拡散モデル

拡散生成モデル

Stable diffusion (2022)

Stable diffusion online **https://stablediffusionweb.com/**

- 生成AI
- Text-to-imageモデル
- 拡散モデル

拡散モデルの原論文 (2015)

J. Sohl-Dickstein, E. Weiss, N. Maheswaranathan, and S. Ganguli, PMLR, pp. 2256–2265 (2015).

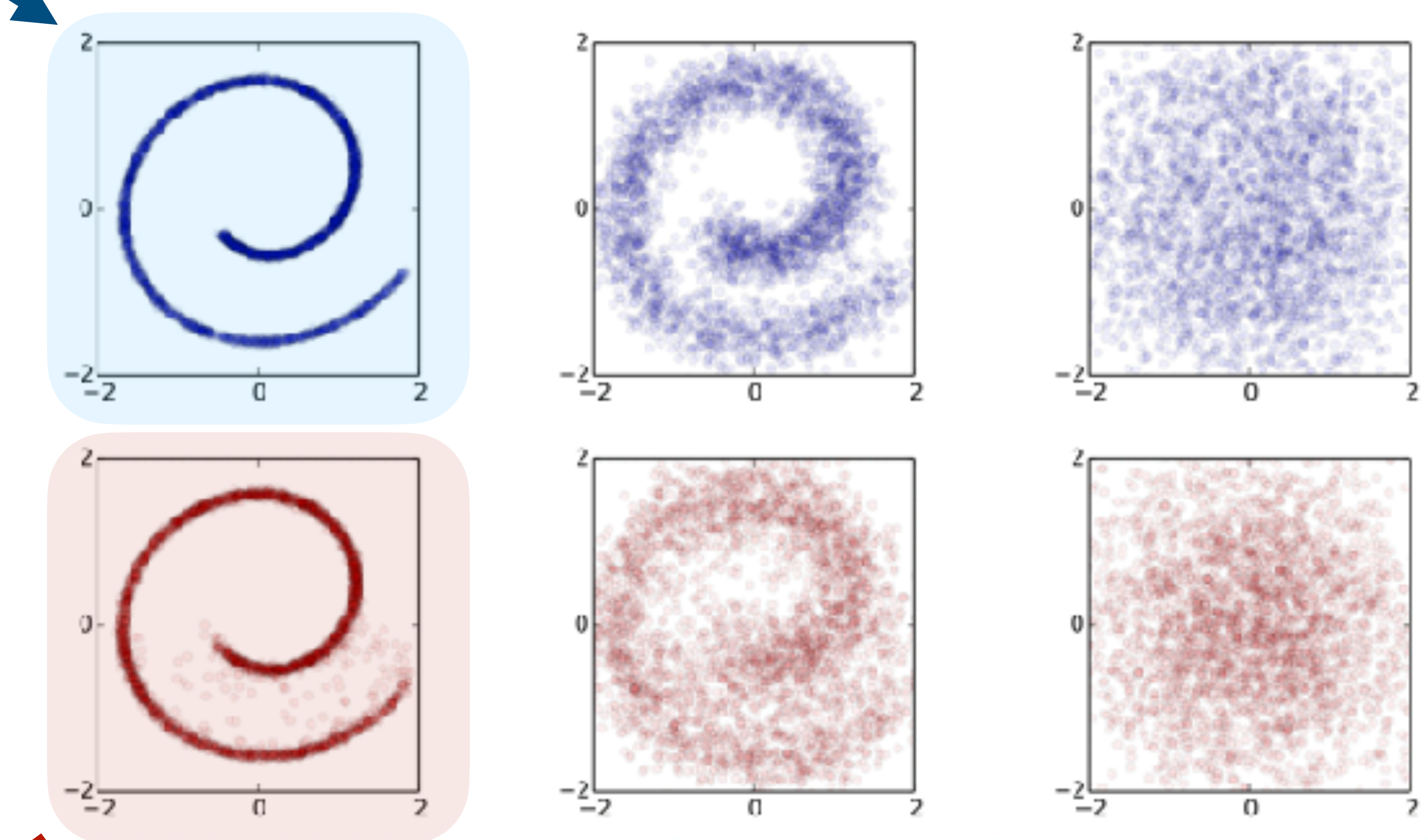
Deep Unsupervised Learning using Nonequilibrium Thermodynamics

Jascha Sohl-Dickstein, Eric Weiss, Niru Maheswaranathan, Surya Ganguli *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning*, PMLR 37:2256-2265, 2015.

Abstract

A central problem in machine learning involves modeling complex data-sets using highly flexible families of probability distributions in which learning, sampling, inference, and evaluation are still analytically or computationally tractable. Here, we develop an approach that simultaneously achieves both flexibility and tractability. The essential idea, inspired by non-equilibrium statistical physics, is to systematically and slowly destroy structure in a data distribution through an iterative forward diffusion process. We then learn a reverse diffusion process that restores structure in data, yielding a highly flexible and tractable generative model of the data. This approach allows us to rapidly learn, sample from, and evaluate probabilities in deep generative models with thousands of layers or time steps, as well as to compute conditional and posterior probabilities under the learned model. We additionally release an open source reference implementation of the algorithm.

訓練データ

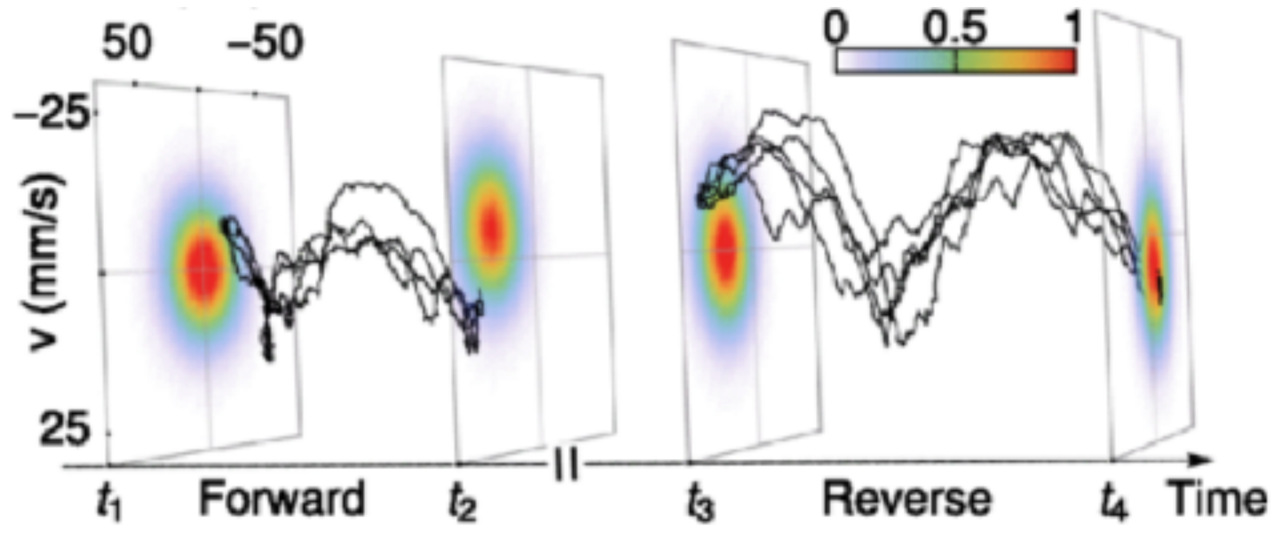


時間順方向の拡散: 学習

時間逆方向の拡散: データ生成

生成データ

cf) ゆらぎの定理



Evans, D. J., Cohen, E. G. D., & Morriss, G. P, Phys. Rev. Lett. ***71***, 2401 (1993).
Jarzynski, C. Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
Crooks, G. E. Phys. Rev. E, **60**, 2721 (1999)…etc.

(Figure from) Hoang, T. M., Pan, R., Ahn, J., Bang, J., Quan, H. T., & Li, T. Phys. Rev. Lett., **120,** 080602 (2018).

拡散モデルの亜種
- Flow-based generative model (2022)

Y. Lipman, R. T. Chen, H. Ben-Hamu, M. Nickel, and M. Le, International Conference on Learning Representations (2022)

Flow-based generative model

Fokker-Planck方程式 (時間順方向のダイナミクス)

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) P_t(\boldsymbol{x})) \qquad \boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) = F_t(\boldsymbol{x}) - T_t \nabla \ln P_t(\boldsymbol{x})$$

速度場を推定: $\hat{\boldsymbol{\nu}}_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})$

-常微分方程式による時間逆方向のダイナミクスを用いたデータ生成

$$\dot{\boldsymbol{x}}_{\tilde{t}} = -\hat{\boldsymbol{\nu}}_{\tau-\tilde{t}}(\boldsymbol{x}_{\tilde{t}})$$

($\tilde{t} = \tau - t$:逆向きの時間)

拡散モデルにおける最適輸送

線形外力 $F_t(\boldsymbol{x}) = \mathsf{A}_t \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}_t$

ガウス分布による時間発展

$$P_t^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x}\,|\,\boldsymbol{y}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}\,|\,\boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{y}), \Sigma_t) \qquad \boldsymbol{\mu}_0(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{y} \qquad \Sigma_0 = \mathsf{O} \quad \Rightarrow \quad P_t(\boldsymbol{x}) = \int d\boldsymbol{y} P_t^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x}\,|\,\boldsymbol{y}) P_0(\boldsymbol{y})$$

Conditional optimal transport (最適輸送の近似)

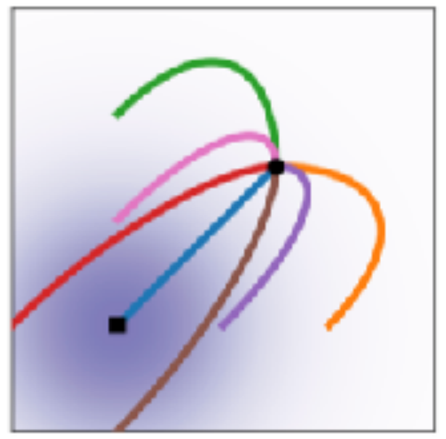
Y. Lipman, R. T. Chen, H. Ben-Hamu, M. Nickel, and M. Le, International Conference on Learning Representations (2022)

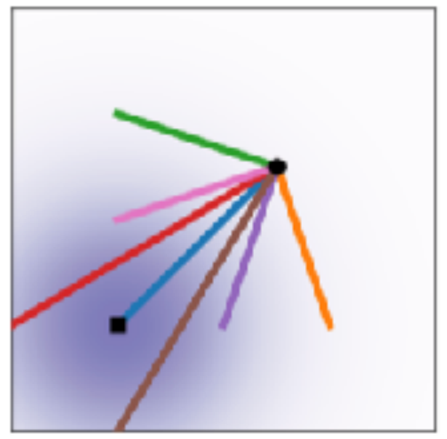
$$\boldsymbol{\mu}_t(\boldsymbol{y}) = m_t \boldsymbol{y}$$

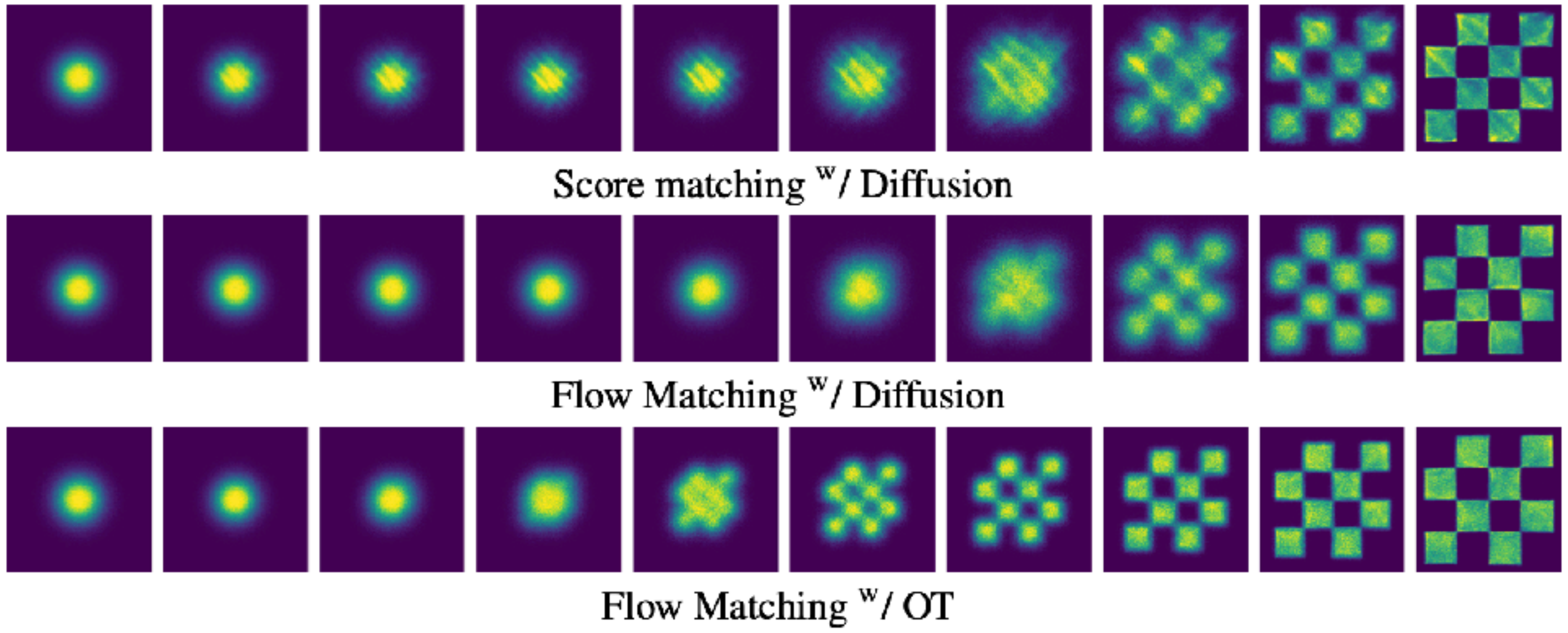
$$\Sigma_t = \sigma_t^2 \mathrm{I}$$

$$t \in [0, \tau]$$

$$m_t = 1 - \frac{t}{\tau} \qquad \sigma_t = \frac{t}{\tau}$$


Diffusion


OT



研究のモチベーション

拡散モデルは非平衡熱力学にインスパイアされた手法である.

J. Sohl-Dickstein, E. Weiss, N. Maheswaranathan, and S. Ganguli, PMLR, pp. 2256–2265 (2015).

問題意識:

非平衡熱力学は現在の拡散モデルの学習方法に本質的に有用か?

非平衡熱力学

最適輸送

= 最小エントロピー生成

トレードオフ関係

$$\dot{S}_t^{\mathrm{tot}} \geq \frac{[v_2(t)]^2}{T_t} \quad S_\tau^{\mathrm{tot}} \geq \frac{[\int_0^\tau dt v_2(t)]^2}{\tau T} \quad v_2(t) \geq v_r(t)$$

アナロジー

→

拡散モデル

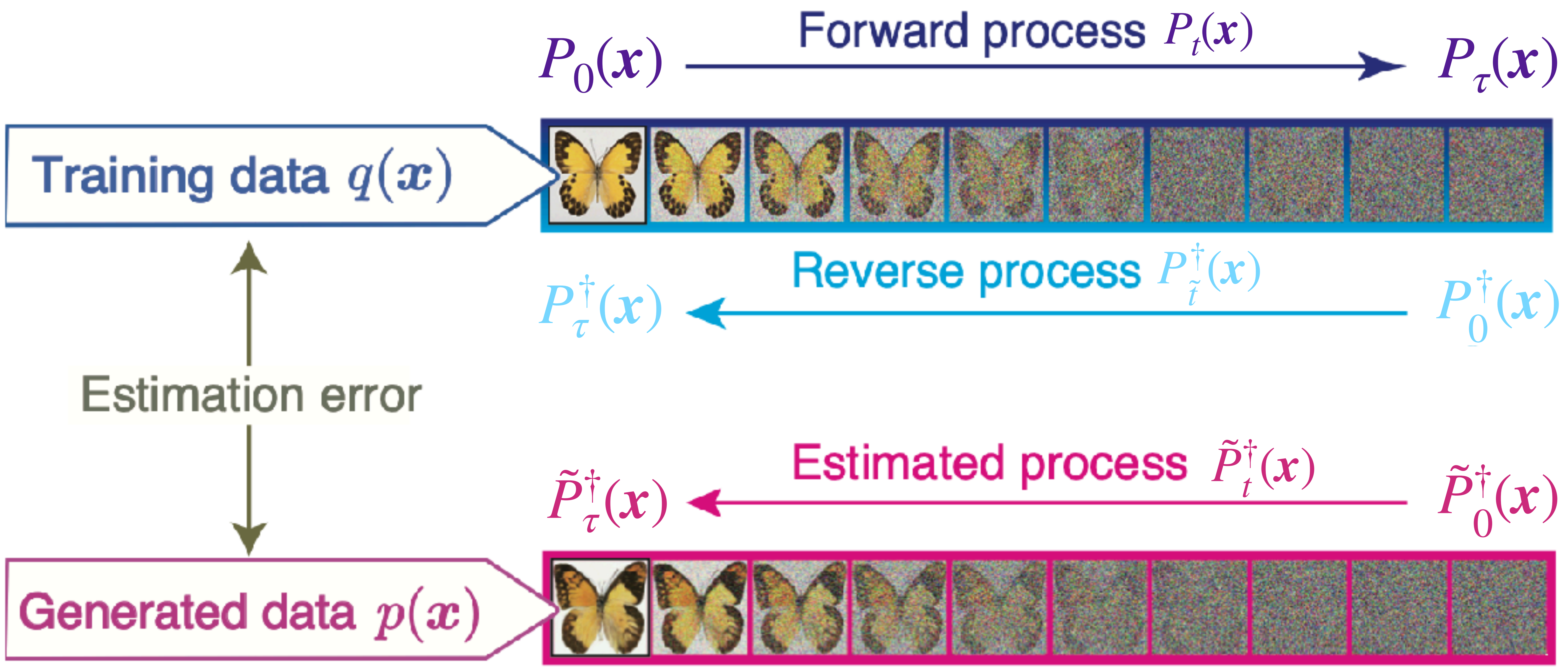
最適輸送の近似

= 精度の高いデータ生成

(経験的な事実)

本結果: トレードオフ関係

拡散モデルの正確性



$$P_t(\boldsymbol{x}) = P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})$$

$$P^\dagger_0(\boldsymbol{x}) \neq \tilde{P}^\dagger_0(\boldsymbol{x})$$

Estimation error (1-Wasserstein距離で定義)

$$\mathscr{W}_1(p, q)$$

e.g.,) K. Oko, S. Akiyama & T. Suzuki, In *International Conference on Machine Learning* (pp. 26517-26582). PMLR (2023).

摂動と応答関数

Forward process/Reverse process

$$\partial_t P_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla\cdot(\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})P_t(\boldsymbol{x})) \quad P_t(\boldsymbol{x}) = P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})$$

$$\partial_{\tilde{t}} P^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) = \nabla\cdot(\boldsymbol{\nu}_{\tau-\tilde{t}}(\boldsymbol{x})P^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x})) \quad \tilde{t} = \tau - t$$

Estimated process

$$\partial_{\tilde{t}} \tilde{P}^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) = \nabla\cdot(\boldsymbol{\nu}_{\tau-\tilde{t}}(\boldsymbol{x})\tilde{P}^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}))$$

摂動

$$D_0 = \int d\boldsymbol{x}\frac{(P^\dagger_0(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_0(\boldsymbol{x}))^2}{P^\dagger_0(\boldsymbol{x})}$$

: χ^2-ダイバージェンス

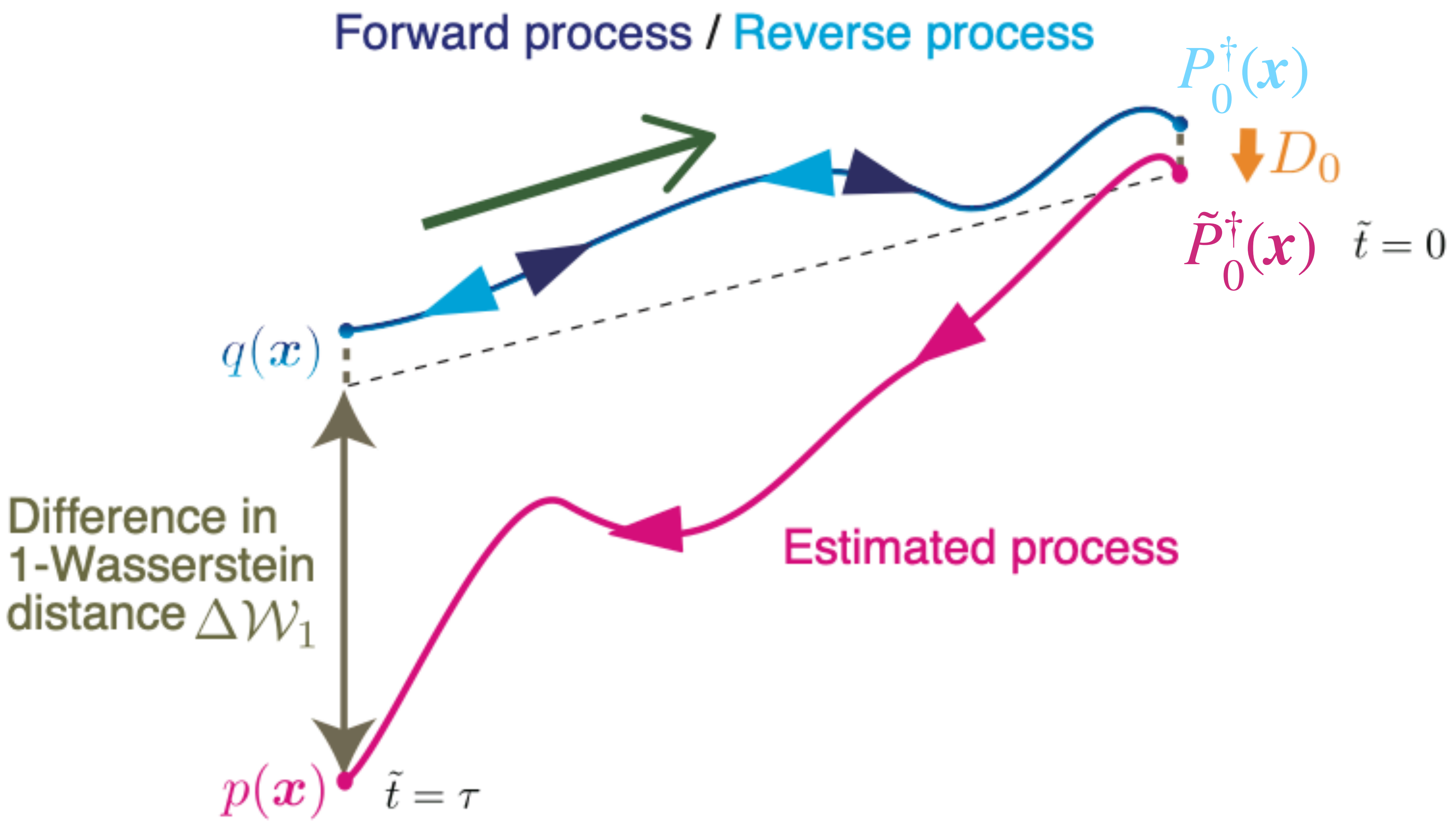
応答関数

Estimation error

$$\frac{\Delta\mathscr{W}_1^2}{D_0} = \frac{[\mathscr{W}_1(p,q) - \mathscr{W}_1(P^\dagger_0, \tilde{P}^\dagger_0)]^2}{D_0}$$

摂動

$\frac{\Delta\mathscr{W}_1^2}{D_0}$ が小さい. $\Rightarrow$ データ生成結果は摂動に対して**ロバスト**.



主結果
拡散モデルにおけるトレードオフ関係

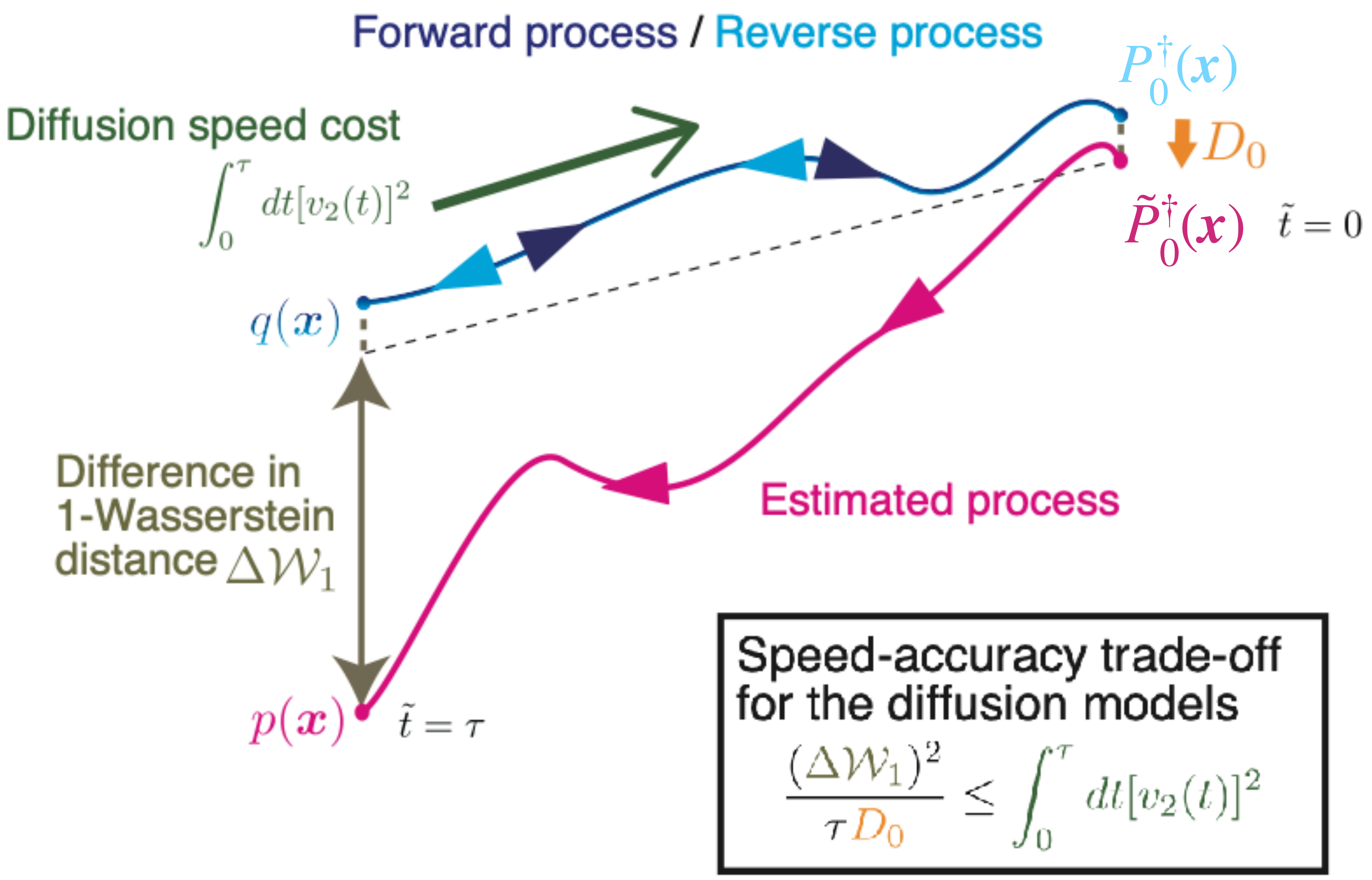
拡散モデルにおけるトレードオフ関係

$$\frac{\Delta \mathscr{W}_1^2}{\tau D_0} \leq \int_0^\tau dt T_t \dot{S}_t^{\mathrm{tot}}$$

ポテンシャル力で記述できる場合

$(\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla U_t(\boldsymbol{x}))$

$$\frac{\Delta \mathscr{W}_1^2}{\tau D_0} \leq \int_0^\tau dt [v_2(t)]^2$$



データ生成結果の**ロバストさ**は**時間順方向の拡散の(2-Wasserstein距離空間での)速度**$v_2(t)$

(もしくはエントロピー生成率 $\dot{S}_t^{\mathrm{tot}}$ を用いた熱力学量で抑えられる。

主結果

生成モデルにおけるトレードオフ関係(瞬間的なトレードオフ関係)

瞬間的なトレードオフ関係

$$\frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|^2}{D_0} \leq T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t$$

ポテンシャル力で記述できる場合

$(\boldsymbol{F}_t(\boldsymbol{x}) = -\nabla U_t(\boldsymbol{x}))$

$$v_{\mathrm{loss}}(t) \leq v_2(t)$$

$$v_{\mathrm{loss}}(t) = \frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|}{\sqrt{D_0}}$$

cf.) 熱力学的不確定性関係 $v_r(t) \leq v_2(t)$

証明の概略: 瞬間的なトレードオフ関係

$$\partial_{\tilde{t}} P^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_{\tau-\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) P^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}))$$
$$\partial_{\tilde{t}} \tilde{P}^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_{\tau-\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) \tilde{P}^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}))$$
$$\tilde{t} = \tau - t$$

$$\Rightarrow \quad \partial_t [P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})] = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})[P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})])$$

連続の式

$$f \in \mathrm{Lip}^1 \qquad |\partial_t(\langle f \rangle_{P^\dagger_{\tau-t}} - \langle f \rangle_{\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}})|^2 = \left(\int d\boldsymbol{x} f(\boldsymbol{x}) \partial_t [P^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_{\tilde{t}}(\boldsymbol{x})] \right)^2$$

$$= \left(\int d\boldsymbol{x}\, \nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x}) [P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})] \right)^2$$

Cauchy-Schwartzの不等式

+ 1-Lipshitz ($\|\nabla f(\boldsymbol{x})\| \leq 1$)

$$\leq \underbrace{\left(\int d\boldsymbol{x} \|\boldsymbol{\nu}_t(\boldsymbol{x})\|^2 P_t(\boldsymbol{x}) \right)}_{T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t} \underbrace{\left(\int d\boldsymbol{x} \frac{[P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x}) - \tilde{P}^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})]^2}{P^\dagger_{\tau-t}(\boldsymbol{x})} \right)}_{D_0}$$

(時間に依存しない)

+ Kantrovich-Rubinstein双対性 $\quad \exists f \in \mathrm{Lip}^1 \quad |\partial_t \mathscr{W}_1(P^\dagger_{\tau-t}, \tilde{P}^\dagger_{\tau-t})|^2 \leq |\partial_t(\langle f \rangle_{P^\dagger_{\tau-t}} - \langle f \rangle_{\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}})|^2$

瞬間的なトレードオフ関係

$$\frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|^2}{D_0} \leq T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t$$

証明の概略: 拡散モデルにおけるトレードオフ関係

瞬間的なトレードオフ関係

$$\frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|^2}{D_0} \leq T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t$$

$$\int_0^\tau dt T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t \geq \int_0^\tau dt \frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|^2}{D_0}$$

Cauchy-Schwartzの不等式 $\geq \dfrac{(\Delta \mathscr{W}_1)^2}{\tau D_0}$

拡散モデルにおけるトレードオフ関係

$$\frac{\Delta \mathscr{W}_1^2}{\tau D_0} \leq \int_0^\tau dt T_t \dot{S}^{\mathrm{tot}}_t$$

正確なデータ生成のための“最適な"拡散過程

$$\frac{\Delta \mathscr{W}_1^2}{\tau D_0} \leq \underline{\int_0^\tau dt [v_2(t)]^2}$$

上限の最小化を考える

$$\int_0^\tau dt [v_2(t)]^2 \geq \frac{\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)^2}{\tau}$$

cf.) 最小エントロピー生成

$$v_2(t) = \frac{\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)}{\tau} = \mathrm{const}\,.$$

:測地線条件

$$\int_0^\tau dt [v_2(t)]^2 = \frac{\mathscr{W}_2(P_0, P_\tau)^2}{\tau}$$

最小値の等号達成

“最適な”拡散過程は最適輸送(i.e., 2-Wasserstein距離空間での測地線)で達成される

正確なデータ生成のための“準最適な"拡散過程

Theorem N. Shaul, R. T. Chen, M. Nickel, M. Le, and Y. Lipman, in International Conference on Machine Learning, PMLR, pp. 30883–30907 (2023)

データ数 N_D が データ次元 n_d に対して十分小さいとき $(N_\mathrm{D}/\sqrt{n_\mathrm{d}} \to 0)$,

$$\int_0^\tau dt[v_2(t)]^2 \simeq n_\mathrm{d} \int_0^\tau dt[(\partial_t \sigma_t)^2 + (\partial_t m_t)^2]$$

$$P_t(\boldsymbol{x}) = \int d\boldsymbol{y} P_t^\mathrm{c}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{y}) P_0(\boldsymbol{y})$$

$$P_t^\mathrm{c}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{y}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid m_t \boldsymbol{y}, \sigma_t^2 \mathtt{I})$$

$$\frac{\Delta \mathscr{W}_1^2}{\tau D_0} \leq \int_0^\tau dt[v_2(t)]^2 \simeq n_\mathrm{d} \underline{\int_0^\tau dt[(\partial_t \sigma_t)^2 + (\partial_t m_t)^2]}$$

近似的な上限の最小化 (準最適)

正確なデータ生成のための“準最適な"拡散過程

Conditional optimal transport

$$n_\mathrm{d}\int_0^\tau dt[(\partial_t\sigma_t)^2+(\partial_t m_t)^2]\geq n_\mathrm{d}\frac{(\sigma_0-\sigma_\tau)^2+(m_0-m_\tau)^2}{\tau}$$

$$m_t = 1-\frac{t}{\tau}\qquad \sigma_t=\frac{t}{\tau}$$

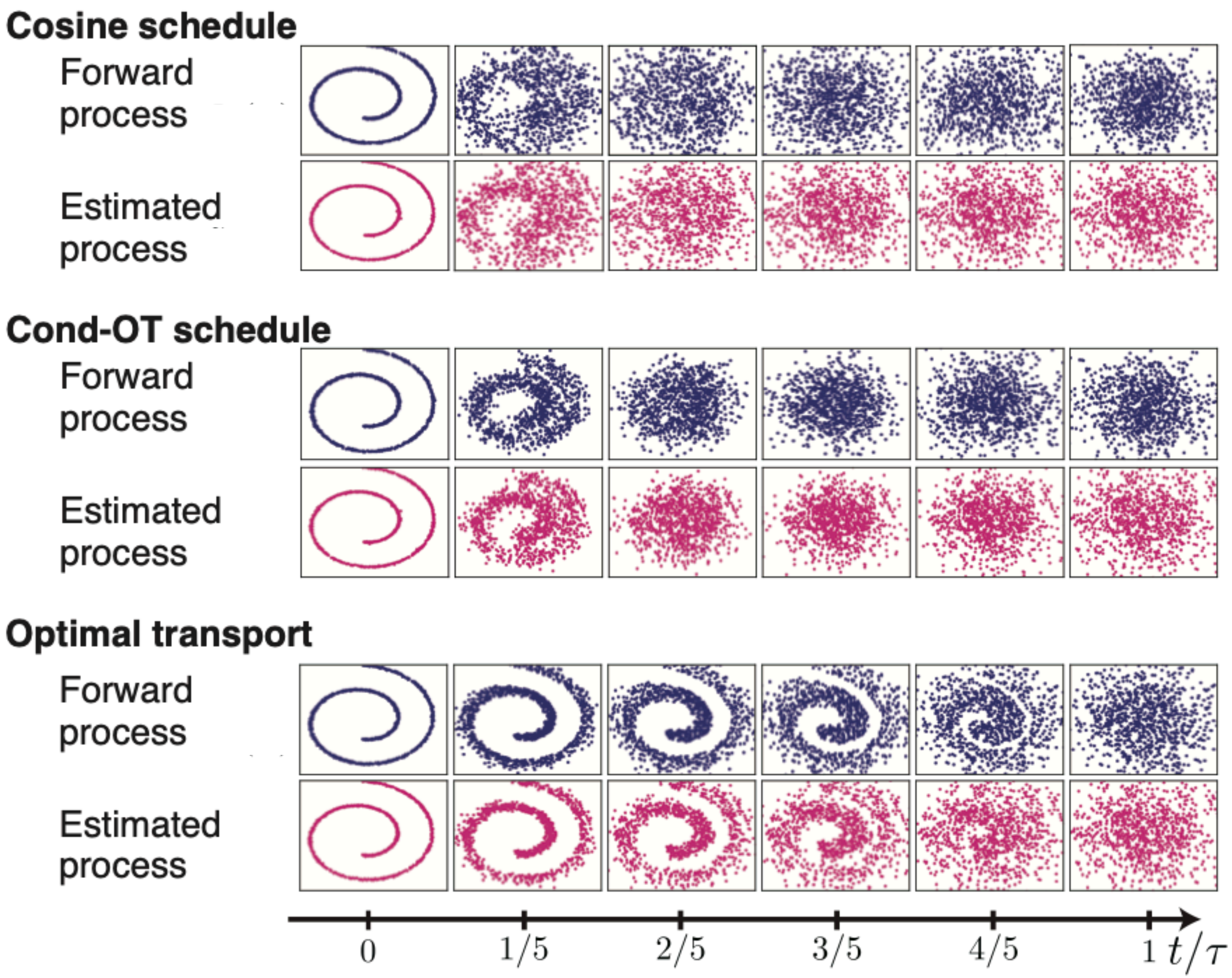
:Conditional optimal transport

$$\Rightarrow\quad n_\mathrm{d}\int_0^\tau dt[(\partial_t\sigma_t)^2+(\partial_t m_t)^2]= n_\mathrm{d}\frac{(\sigma_0-\sigma_\tau)^2+(m_0-m_\tau)^2}{\tau}$$

最小値を達成

conditional optimal transportによるダイナミクスが”準最適な”拡散過程である.

最適なダイナミクスとそうでないダイナミクスの比較: Swissロールの場合

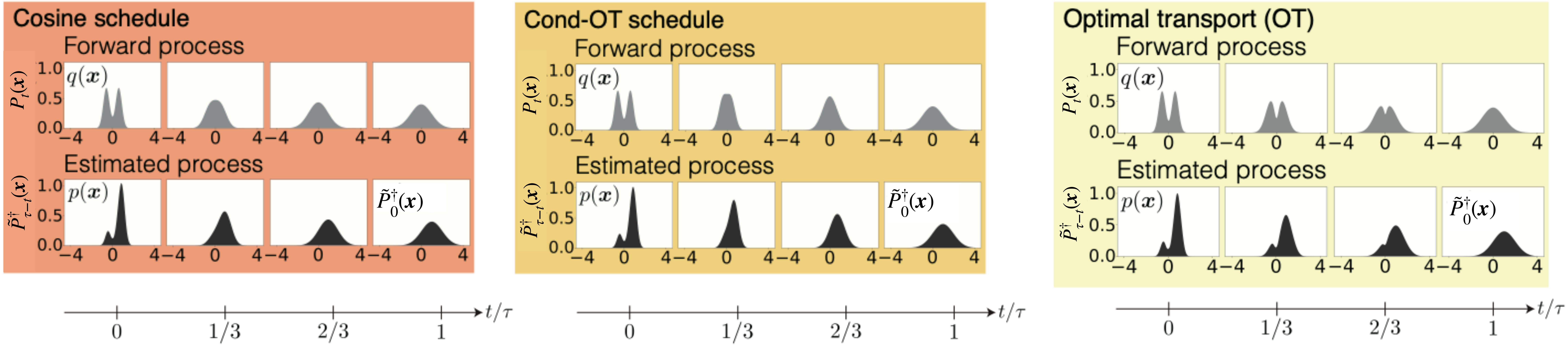


(Cosine schedule)

A. Q. Nichol, & P. Dhariwal,
In *International conference on machine learning* (pp. 8162-8171). PMLR (2021)

最もロバストになっている

最適なダイナミクスとそうでないダイナミクスの比較:
混合ガウス分布の場合



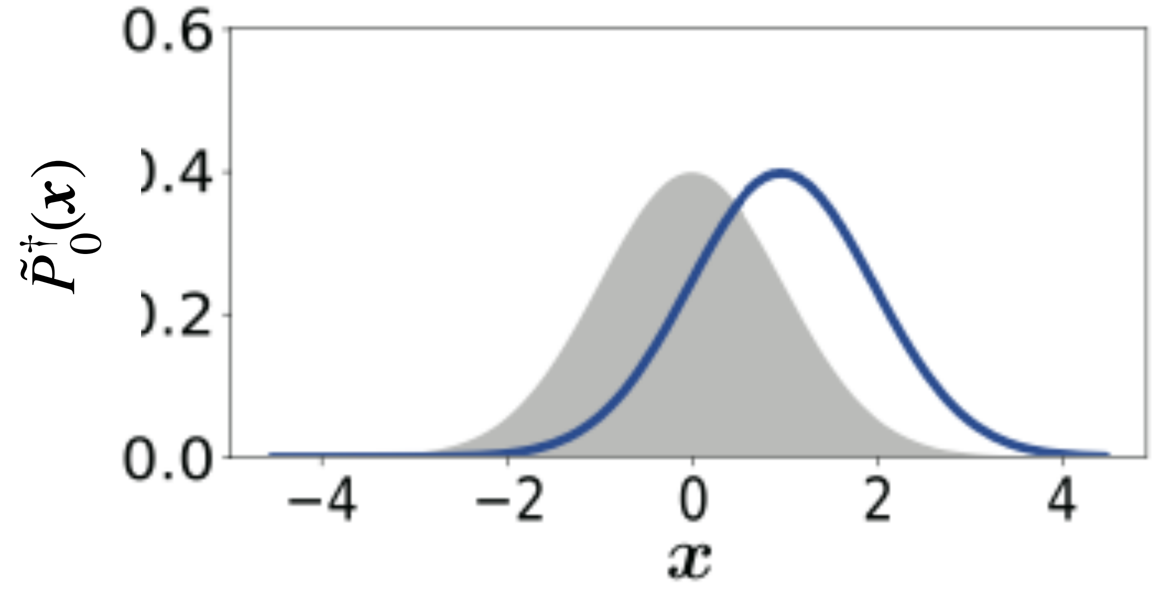
$P_t(\boldsymbol{x})$:Forward process

$\tilde{P}^{\dagger}_{\tau-t}(\boldsymbol{x})$:Estimated process

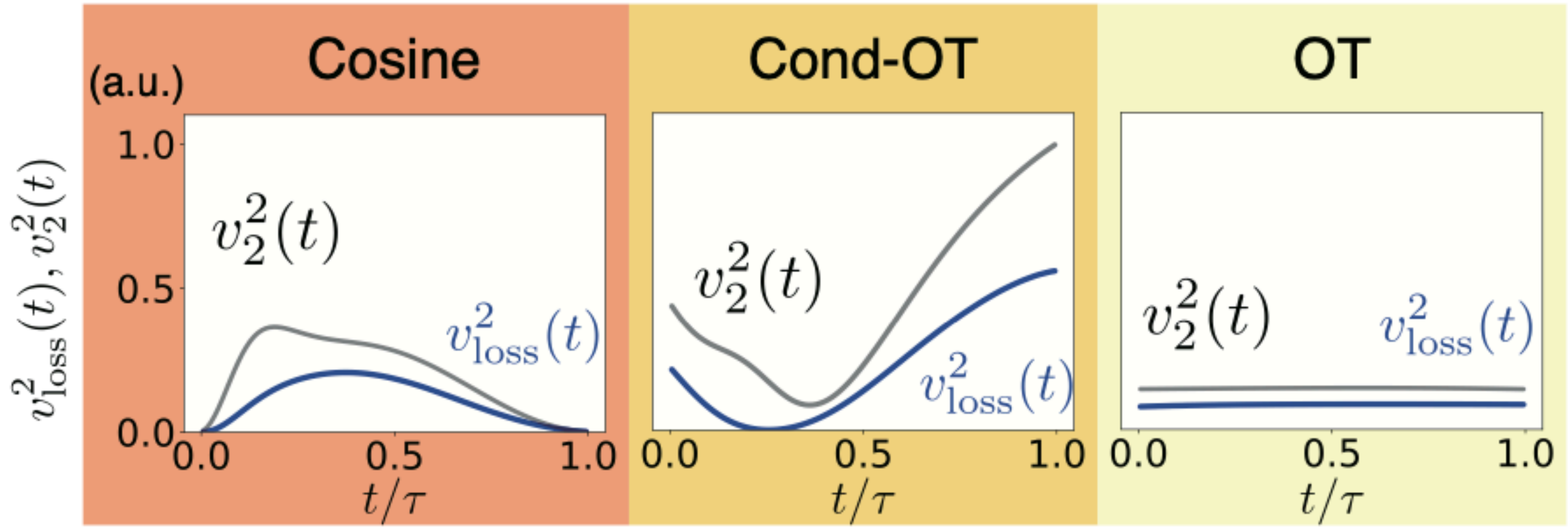
データ構造(2個のピーク)は最適輸送の場合には
逆向きの過程の途中においても復元がうまくなされていることがわかる.

摂動方法

Gaussian distribution
with different mean

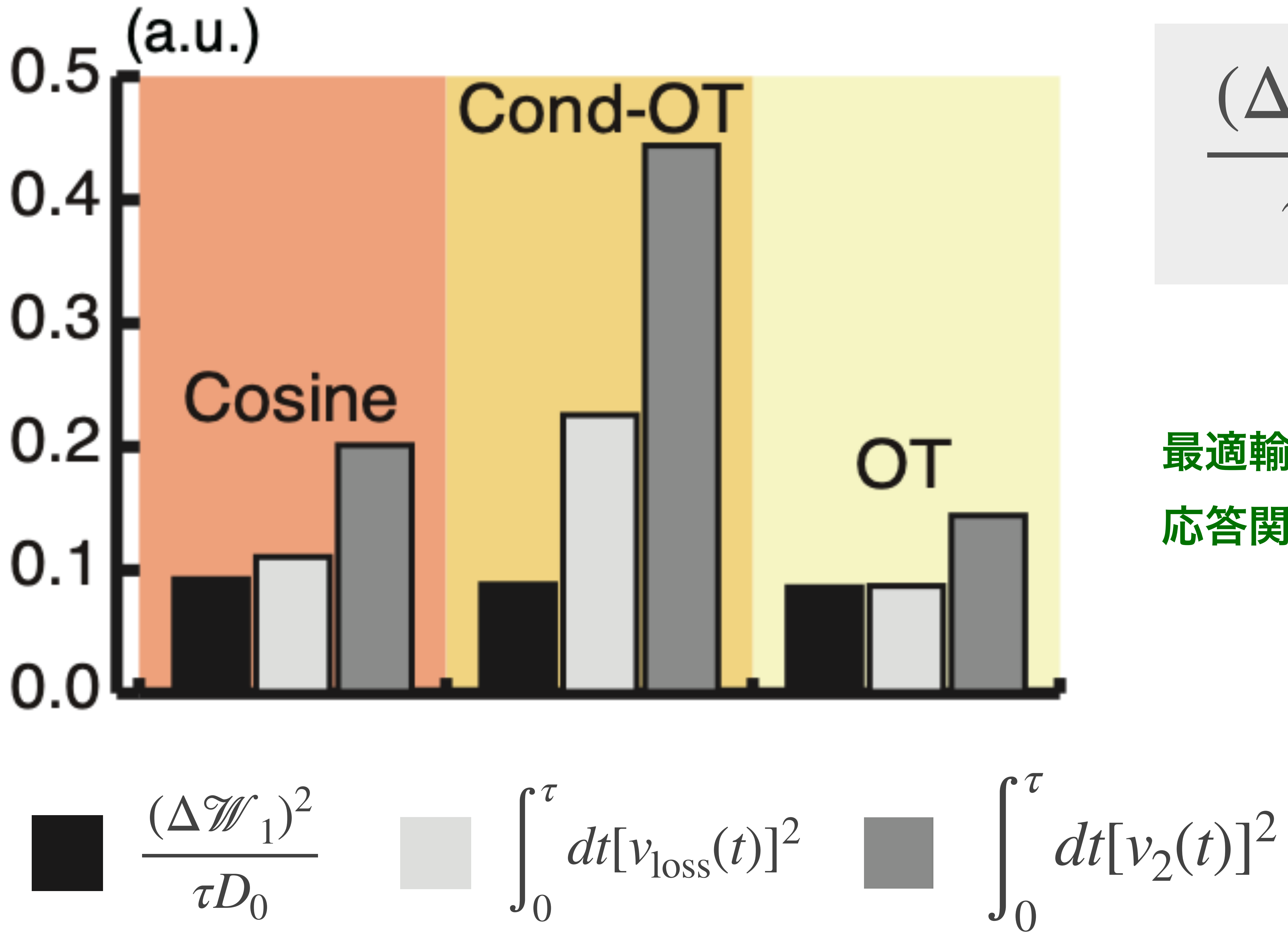


瞬間的なトレードオフ関係の検証



$$\frac{|\partial_t \mathscr{W}_1(\tilde{P}^\dagger_{\tau-t}, P^\dagger_{\tau-t})|^2}{D_0} = [v_{\mathrm{loss}}(t)]^2 \le [v_2(t)]^2$$

拡散モデルにおけるトレードオフ関係の検証



$$\frac{(\Delta\mathscr{W}_1)^2}{\tau D_0} \leq \int_0^\tau dt[v_{\mathrm{loss}}(t)]^2 \leq \int_0^\tau dt[v_2(t)]^2$$

最適輸送の場合に最もタイトな不等式制約になっている。

応答関数の値 $(\Delta\mathscr{W}_1)^2/(\tau D_0)$ は最も最適輸送の場合が小さくなっている。

Noise schedules	Values of $(\Delta\mathscr{W}_1)^2/(\tau D_0)$
Cosine	9.1884×10^{-2}
Cond-OT	8.7810×10^{-2}
OT	8.5375×10^{-2}

まとめ

- 最適輸送理論と非平衡熱力学の間の関係を説明し、最適輸送理論から非平衡熱力学における不可逆性であるエントロピー生成に関するトレードオフを議論できることを説明した.

- 最適輸送理論の手法は拡散モデルなどの生成モデルにおいても利用されており、最適な輸送を実現する拡散による学習が、データ生成の精度を高めることが知られていた.

- 我々は非平衡熱力学で議論されているトレードオフ関係の手法を用いることで、データ生成の精度(ロバストさ)とエントロピー生成率/最適輸送の間のトレードオフ関係を導き, 最適輸送の場合に最も”最適な”データ生成が可能であることを示した.

For more information and examples, see K. Ikeda, T. Uda, D. Okanohara and SI, arXiv:2407.04495.