Projet de Recherche

Quoc-Bao DO

Fevrier 2024

1 Modèle de diffusion

En modélisation probabiliste, il est fréquent de devoir générer des échantillons à partir d'une distribution de données dont la forme précise est inconnue ou trop complexe pour permettre un échantillonnage direct. Les modèles de diffusion offrent une solution à ce problème en apprenant une équation différentielle inhomogène dans le temps, qui transforme progressivement des échantillons issus d'une distribution gaussienne simple en échantillons correspondant à la distribution cible, plus complexe.

Considérons une équation différentielle stochastique dépendante du temps (Itô), donnée comme suit :

$$d\phi_t = f_t(\phi_t)dt + g_t dW_t \tag{1}$$

avec

- $\phi \in \mathbb{R}^N$
- $f_t : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ de classe C^1, et f_t linéairement croissante, i.e $\exists C > 0$ tel que $\|f_t(\phi)\| \leq C(1 + |\ \phi\|)$
- $g_t : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ de classe C^2
- W_t est un processus de Wiener standard de dimension N, c'est-à-dire tel que

$$\langle W_t^i, W_t^j \rangle = \begin{cases} t & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \tag{2}$$

  où W^i et W^j sont les i-ème et j-ème coordonnées de W_t respectivement.

Remarque 1.1. La condition que f_t soit linéairement croissante rassure l'existence de solution de la SDE.

Proposition 1.2 (Fokker – Planck equation)**.** Sous les hypothèses précédentes, le flux sur les distributions de probabilité π_t de ϕ_t pour $t \geq 0$ est donné par :

$$\frac{\partial \pi_t}{\partial t} = -\nabla \cdot (f_t \pi_t) + \frac{1}{2}\nabla^2(g_t^2 \pi_t) \tag{3}$$

Proof. Commençons par un rappel sur la formule d'Itô .

Théorème 1.3 (Formule d'Itô [1])**.** Soit $X(t)$ un processus d'Itô de dimension n vérifiant

$$dX(t) = u(t, X(t))dt + v(t, X(t))dB(t),$$

où :

- $X(t) \in \mathbb{R}^n$ est le processus d'état,
- $u(t, X(t)) \in \mathbb{R}^n$ est le terme de dérive,
- $v(t, X(t)) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ est la matrice de diffusion,
- $B(t) \in \mathbb{R}^m$ est un mouvement brownien standard de dimension m.

Soit $g : [0, \infty) \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$ une fonction deux fois continûment différentiable. On définit le processus transformé :

$$Y(t) = g(t, X(t)),$$

où $Y(t) \in \mathbb{R}^p$. Alors, $Y(t)$ satisfait l'équation d'Itô :

$$dY_k = \frac{\partial g_k}{\partial t} dt + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_k}{\partial x_i} u_i dt + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial g_k}{\partial x_i} v_{ij} dB_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} \sum_{r=1}^{m} v_{ir} v_{jr} \frac{\partial^2 g_k}{\partial x_i \partial x_j} dt.$$

Soit une fonction test $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$, de classe C^∞, à support compact. En utilisant la formule d'Ito, on obtient

$$\begin{aligned} dF(\phi_t) &= \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} (f_t^i(\phi_t) dt + g_t dW_t^i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 dt \\ &= \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \right) dt + \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} g_t^2 dW_t^i \end{aligned}$$

Le terme dW_t^i disparaît en prenant l'espérance (car $\mathbb{E}[dW_t^i] = 0$), donc :

$$\mathbb{E}\left[dF(\phi_t)\right] = \mathbb{E}\left[\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \right) dt \right]$$

Ou encore, en utilisant la linéarité de l'opérateur espérance, on peut sortir la dérivée, l'équation ci-dessus s'écrit :

$$d\mathbb{E}\left[F(\phi_t)\right] = \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \right] dt$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbb{E}\left[F(\phi_t)\right]}{dt} &= \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \right] && (4) \\ &= \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) \right] + \mathbb{E}\left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \right] && (5) \\ &= \mathbb{E}\left[\nabla\ F(\phi_t) \cdot f_t(\phi_t)\right] + \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\nabla^2 F(\phi_t) g_t^2\right] && (6) \end{aligned}$$

F est continue, donc mesurable, supposons que $\phi \to \frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t}$ existe, $\phi \to F(\phi)\frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t}$ est intégrable en $\mathbb{R}^N$ car F est à support compact. D'après la règle de Leibniz, le premier terme à droite s'écrit :

$$\frac{d\mathbb{E}[F(\phi_t)]}{dt} = \frac{d(\int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} F(\phi)\pi_t(\phi)d\phi)}{dt} = \int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} F(\phi)\frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t}d\phi$$

Nous allons rappeler la première identité de Green (Green's first identity) qui est fort utile dans la suite.

Théorème 1.4 (Première identité de Green)**.** Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, on se donne une fonction $u : \Omega \to \mathbb{R}$, $u \in C^2$ et une autre fonction $v : \Omega \to \mathbb{R}$, $v \in C^1$, alors :

$$\int_{\Omega} (v(x)\nabla^2 u(x) + \nabla u(x) \cdot \nabla v(x))dx = \int_{\partial\Omega} v\nabla u \cdot ndS \tag{7}$$

Avec n le vecteur normal unitaire à la frontière $\partial\Omega$ et dS la mesure de frontière sur $\partial\Omega$.

Supposons qu'il existe une fonction v_t telle que $\nabla_\phi v_t = f_t \pi_t$.

On utilise la première identité de Green sur le premier terme à gauche en remarquant que l'intégrale sur le bord s'annule car F est à support compact, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\nabla\ F(\phi_t) \cdot f_t(\phi_t)\right] &= \int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} \nabla\ F(\phi) \cdot \big(f_t(\phi)\pi_t(\phi)\big)d\phi \\ &= -\int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)(\nabla \cdot f_t(\phi)\pi_t(\phi))d\phi\end{aligned}$$

Pareil, en appliquant l'intégration par parties deux fois sur le deuxième terme à droite, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\nabla^2 F(\phi_t) g_t^2\right] &= \int_{\mathbb{R}^N} \nabla^2 F(\phi) g_t^2 \pi_t(\phi)d\phi \\ &= -\int_{\mathbb{R}^N} \nabla F(\phi) \cdot \nabla(g_t^2 \pi_t(\phi))d\phi \\ &= \int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)\nabla^2(g_t^2\pi_t(\phi))d\phi\end{aligned}$$

Injectons les résultats précédents dans l'équation (4) :

$$\int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} F(\phi)\frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t}d\phi = -\int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)(\nabla \cdot f_t(\phi)\pi_t(\phi))d\phi + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)\nabla^2(g_t^2\pi_t(\phi))d\phi$$

Cette relation est vraie pour toute fonction de test $F \in C_c^\infty$ (i.e ensemble des fonctions infiniment dérivables à support compact), la théorie de distribution nous dit :

$$\frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t} = -\nabla \cdot (f_t(\phi)\pi_t(\phi)) + \frac{1}{2}\nabla^2(g_t^2\pi_t(\phi))$$

□

Le processus avant est généralement construit de sorte que lorsque $t \to \infty$ (ou $t \to T$ pour un certain temps fini T), la distribution π_t converge vers une distribution connue et bien définie π_∞, souvent choisie comme une gaussienne à variance finie.

Dans le contexte des modèles de diffusion, et plus précisément des modèles implicites de diffusion pour le débruitage (DDIMs), on cherche un champ de vecteurs déterministe et dépendant du temps $v_t(\phi)$ qui reproduit la même transformation des distributions de probabilité que l'équation stochastique précédente. Cette reformulation permet d'inverser le processus de diffusion de manière déterministe :

- On commence par échantillonner $\phi_T \sim \pi_t$
- Puis on fait évoluer l'échantillon en arrière dans temps, de $t = T$ à $t = 0$, en résolvant l'EDO suivante :

$$\frac{d\phi_t}{dt} = v_t(\phi_t) \tag{8}$$

D'après l'équation de Fokker-Planck, l'évolution de la distribution ϕ_t est donnée par l'équation de transport suivante :

$$\frac{d\pi_t(\phi)}{dt} = -\nabla \cdot [v_t(\phi)\pi_t(\phi)]$$

Notre but est d'identifier la fonction v_t déterministe et dépendante en temps de sorte que l'équation au dessus produise la même évolution que l'équation (2) (flow-matching en anglais). Pour ce faire, on récrit (2) comme suit :

$$\frac{d\pi_t(\phi)}{dt} = \nabla \cdot ([f_t(\phi) - \frac{1}{2}g_t^2 \nabla log\pi_t(\phi)]\pi_t(\phi))$$

Ainsi,

$$v_t(\phi) = f_t(\phi) - \frac{1}{2}g_t^2 \nabla log\pi_t(\phi)$$

On note $s_t(\phi) = \nabla log\pi_t(\phi)$ et on appelle s_t la fonction de score (score function en anglais).

Le choix le plus courant de processus direct est un processus Ornstein-Uhlenbeck inhomogène de la forme suivante :

$$d\phi_t = -\gamma_t \phi_t dt + \sqrt{2\gamma_t} dW_t$$

Ainsi, le fluide de probabilité est donné par :

$$v_t(\phi) = -\gamma_t(\phi + \nabla log\pi_t(\phi)) = -\gamma_t(\phi + s_t(\phi))$$

References

[1] Bernt Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications.* Springer, Berlin, Heidelberg, 6th edition, 2003. Universitext.