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.

Proposition 1.1. (Fokker – Planck equation) Considérons une équation différentielle stochastique dépendante du temps (Ito), donnée comme suit :

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

avec $\phi \in \mathbb{R}^N$, $f_t : \mathbb{R}_+ \to R^N$ de classe C^1, $g_t : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ de classe C^2 , et W_t est un processus Wiener standard de dimension N.
Alors le flux sur les distributions de probabilité π_t de ϕ_t pour $t \geq 0$ est donné par :

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

Démonstration:

Soit une fonction test $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$, de classe C^2, alors d'après le lemme d'Itô :

$$dF(\phi_t) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} d\phi_t^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} d\langle \phi^i, \phi^j \rangle_t$$

D'après l'équation (1) et notons que $\langle W_t^i, W_t^j \rangle_t$ si $i = j$ et 0 sinon, avec W^i et W^j sont les i-èmes et j-èmes coordonnées de W_t respectivement, ainsi,

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

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

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

Ainsi,

$$\frac{d\mathbb{E}[F(\phi_t)]}{dt} = \mathbb{E}[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2 \tag{3}$$

$$= \mathbb{E}[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t)] + \mathbb{E}[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2] \tag{4}$$

F est continue, donc mesurable, supposons que $\frac{\partial \pi_t(\phi)}{\partial t}$ est intégrable, alors le terme à gauche s'écrit :

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

Comme π_t s'annule rapidement à l'infini, l'application du théorème de Green sur le premier terme à droite donne:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi_t)}{\partial x_i} f_t^i(\phi_t)]dt &= \int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial F(\phi)}{\partial x_i} f_t^i(\phi)\pi_t(\phi)d\phi \\
&= \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} \frac{\partial F(\phi)}{\partial x_i} f_t^i(\phi)\pi_t(\phi)d\phi \\
&= \sum_{i=1}^{N} (-\int_{\mathbb{R}^{\mathbb{N}}} F(\phi)\frac{\partial (f_t^i(\phi)\pi_t(\phi))}{\partial x_i} d\phi) \\
&= -\int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)(\nabla \cdot f_t(\phi)\pi_t(\phi))d\phi
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 F(\phi_t)}{\partial x_i^2} g_t^2] &= \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\partial^2 F(\phi)}{\partial x_i^2} g_t^2 \pi_t(\phi)d\phi \\
&= \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}(g_t^2\pi_t(\phi))d\phi \\
&= \int_{\mathbb{R}^N} F(\phi)\nabla^2(g_t^2\pi_t(\phi))d\phi
\end{aligned}$$

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

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

Cette relation est vraie pour toute fonction test F, d'où le résultat final :

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

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 :

$$\frac{d\phi_t}{dt} = v_t(\phi_t) \tag{5}$$

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 :

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