

令和 6 年 6 月 9 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03364

研究課題名（和文）シュレディンガー問題の数値解析

研究課題名（英文）Numerical Analysis of Schroedinger's problem

研究代表者

中野 張（Nakano, Yumiharu）

東京工業大学・情報理工学院・准教授

研究者番号：00452409

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,800,000円

研究成果の概要（和文）：シュレディンガー問題に対する、McKean-Vlasov型確率制御問題による数値解法を開発し、その厳密な収束を証明した。

さらに、現在、画像生成モデルとして広く普及している拡散生成モデルの理論解析の研究を行った。具体的には、ノイズ除去拡散確率モデル(Denoising Diffusion Probabilistic Models)による生成分布が目標分布に収束するための十分条件を明らかにした。既存研究で知られている収束証明では、順時間過程のパラメータがどのような条件を満たせば生成が成功するのか、不明瞭だったが、本研究では、このパラメータに対する適当な漸近挙動の十分条件を導出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

シュレディンガー問題は近年、生成モデルの理論的基盤として注目されているものである。本研究では特に、シュレディンガー問題において初期分布が任意の場合に適当可能な新しい数値解法を提案し、理論的正当性も与えた。このことに応用数学としての学術的意義があるのはもちろん、新しい分布補間の手段を提示できたことで、例えば、画像から画像の生成など、新たな生成モデルの展開のための一助になることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：We developed a numerical method for the Schroedinger's problem based on a McKean-Vlasov type stochastic control problem and proved its rigorous convergence.

Furthermore, we studied the theoretical analysis of the diffusion generative model, which is now widely used as an image generation model. Specifically, we clarified the sufficient conditions for the convergence of the generated distribution of the Denoising Diffusion Probabilistic Models to the target distribution. In the convergence proofs known from existing studies, it has been unclear what conditions must be satisfied for the parameters of the forward time process to be successful, but in this study, we derived sufficient conditions for appropriate asymptotic behavior for these parameters.

研究分野：応用数学

キーワード：シュレディンガー問題 確率制御 拡散生成モデル 確率微分方程式

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

初期分布と終端分布が固定されたブラウン粒子の中で最も起こりやすい時間発展を求める問題はシュレディンガー問題と呼ばれ、機械学習分野との関連等から近年再注目されている。シュレディンガー問題は群ロボットの制御、交通密度の制御、共分散の制御、最適輸送問題の正則化など多数の有望な応用を持つが、現実的な実装のためには既存の数値解法では不十分である。

2. 研究の目的

シュレディンガー問題に対する既存の数値解法には現実的な実装において不十分な点がある。本研究では空間次元が高い場合かつ所与の周辺分布が経験分布の場合にも適用可能なシュレディンガー問題の数値解法の開発とその収束を厳密に証明することを目的とする。

3. 研究の方法

- (1) シュレディンガー問題は終端分布に制約条件のある特殊な確率制御問題である。これを何らかの形で処罰項を導入し、制約条件なしの通常の確率制御問題に帰着できないか検討する。
- (2) 実用のためには、シュレディンガー問題を解く確率微分方程式の時間離散化が必要となる。この文脈で現れるシュレディンガー・フェルマー拡散という特殊なクラスの確率微分方程式の時間離散化の理論解析を行う。
- (3) 近年、画像生成 AI において用いられている拡散モデルはシュレディンガー問題の特殊な場合の近似解と実とはみなせる。拡散モデルの理論解析を進め、有効性を分析することで、一般的なシュレディンガー問題に対する新しい数値解法の開発に繋げたい。

4. 研究成果

- (1) 一般の拡散過程の分布法則を事前分布として採用した場合のシュレディンガー問題について、シュレディンガー・システムと呼ばれる連立偏微分方程式を用いずに近似解を求めるアルゴリズムを導出した。既存の数値解法では、シュレディンガー・システムを数値的に解いた後、 h -path 過程と呼ばれる確率微分方程式を構成する必要があった。この方法では初期分布と終端分布の両方の密度関数の情報を必要とし、さらにその積分も計算する必要があるので、応用例は限定的になってしまうという問題点があった。提案手法はシュレディンガー・システムを直接利用しない解法であり、経験分布の情報のみが必要で、さらに、事前分布である拡散過程の推移確率の情報も必要ないため、広範囲の応用が期待できる。導出したアルゴリズムは、シュレディンガー問題に対する McKean-Vlasov 型確率制御問題へ帰着することにより得られるものであるが、本研究では、シュレディンガー問題と McKean-Vlasov 型確率制御問題の同値性を証明した。副産物として、ガウスカーネルによる、確率測度のヒルベルト空間への埋め込みが弱収束と同値であることを証明した。これは未解決問題として提示されていたものであった。

具体的には、シュレディンガー問題を、終端時間分布制約のない McKean-Vlasov 型確率制御問題の族によって特徴付ける際、確率測度のヒルベルト空間埋め込み理論を用い、制約を確率測度間の距離によって定義されるペナルティ項として記述した。その上で、近似最適制御から得られる状態過程の確率法則からなる列が、与えられた初期・終期時間分布と事前情報となる拡散過程に対する緩やかな条件下で、シュレディンガー問題の一意解に収束することを証明した。さらに、帰着された McKean-Vlasov 確率制御問題に対するニューラル SDE ベースの深層学習アルゴリズムを提案し、いくつかの数値実験により我々の手法を検証した。

- (2) シュレディンガー・フェルマー拡散は初期分布がデルタ測度である場合のシュレディンガー問題の解であり、マルコフ連鎖モンテカルロ法や大域最適化問題への応用が研究されはじめているものである。既存研究では、シュレディンガー・フェルマー拡散の強近似の収束証明が論じられているが、収束条件が厳しく、現実的ではないものであった。本研究では、弱近似の枠組みにすることで、応用上現れる問題に適用可能になるよう収束条件を緩めることに成功した。
- (3) ノイズ除去拡散確率モデル(Denoising Diffusion Probabilistic Models)による生成分布が目標分布に収束するための十分条件を明らかにした。既存研究で知られている収束証明では、順時間過程のパラメータがどのような条件を満たせば生成が成功するのか、不明瞭だったが、本研究では、このパラメータに対する適当な漸近挙動の十分条件を導出した。具体的には、Hoら(Advances in Neural Information Processing Systems, 33 (2020), pp.6840-6851)により提案されたノイズ除去拡散確率モデル(DDPM)のオリジナルバージョンを理論的に解析した。時間ステップ数に対するノイズスケジュール、L2 ノルムに関するスコア推定誤差、ノイズ推定関数のパラメータに関するいくつかの漸近挙動の仮定の下、DDPM サンプリングアルゴリズムによって構築された確率変数列が、時間ステップ数が無限大になるにつれて、与えられたデータ分布に弱収束することを証明した。この定理を証明するにあたり、サンプリング列が逆時間確率微分方程式(SDE)の

指数積分器型近似と見なせることを明らかにした．さらに，一般的な連続過程に対する後向き伊藤積分の適切な定義を与え，前進コルモゴロフ方程式の滑らかさと一意性を用いることなく，後向き伊藤積分により記述される SDE の逆時間表現を厳密に証明した．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Nakano, Yumiharu	4. 巻 149
2. 論文標題 Inverse stochastic optimal controls	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Automatica	6. 最初と最後の頁 110831 ~ 110831
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.automatica.2022.110831	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Endo, K. and Nakano, Y.	4. 巻 -
2. 論文標題 Weak approximation of Schroedinger-Foellmer diffusion	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Statistics & Probability Letters	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.spl.2024.110171	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Y. Nakano
2. 発表標題 A kernel-based method for Schroedinger bridges
3. 学会等名 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics（国際学会）
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

プレプリント

Y. Nakano, Convergence of the denoising diffusion probabilistic models. arxiv:2406.01320[math.PR]

Y. Nakano, A kernel-based method for Schroedinger bridges. arXiv:2310.14522[math.OA].

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------