拡散モデルにおける

フォン・ノイマン・エントロピーによ**る意味構造保存**ノイジングとその**数理的基盤** 吹谷和雄

概要

本研究では、大規模言語モデルにおける拡散モデルのノイジング過程において、フォン・ノイマン・エントロピーを導入することで、言語空間内の意味構造を保ったまま効果的にノイズを加える手法を提案する。従来の拡散モデルに比べて、情報の散逸量が抑制されるため、復元過程における生成誤差を小さくする利点がある。本稿では、拡散過程を記述する確率微分方程式(SDE)に伊藤積分および伊藤の公式を適用し、量子エントロピーを導入した意味保持ノイズモデルの数理的構造を明らかにする。

1. はじめに

拡散モデルは、元のデータ分布から高ノイズ状態まで逐次的にノイズを加える「順方向過程(forward process)と、そこからデータを復元する逆方向過程(reverse process)」から構成される。言語生成においては、単語や文の意味構造を破壊しないノイズ付加が求められる。

従来の拡散モデルでは、スカラー値のガウスノイズが各トークンの埋め込みベクトルに加えられるが、意味構造や語彙的関係性の破壊につながることがある。

これに対して、本研究では、フォン・ノイマン・エントロピーを用いた量子情報的ノイジングを導入し、より自然な意味空間での拡散を実現する。

2. 拡散過程の数学的定式化

拡散モデルにおける確率過程は、通常次のような伊藤型確率微分方程式(SDE)で記述される:

$$dx_t = f(x_t, t)dt + g(t)dW_t$$

ここで、

- x_tは時刻tにおける状態(文章中 t 番目の埋め込みベクトル)
- $f(x_t,t)$:ドリフト項(平均変化率 μ_t)
- g(t): 拡散項(拡散係数=分散 σ_t^2)
- W_t : ウィーナー過程(ブラウン運動 $N(x_t, \sigma E)$)

✿伊藤積分

この SDE の解を得るためには、**伊藤積分**が必要である。伊藤積分は通常のリーマン積分とは異なり、ウィーナー過程の非決定性を反映して次のように定義される:

$$\int_0^t g(s)dW_s = \lim_{i=0} \sum_{i=0}^{n-1} g(t_i)(W_{t_{i+1}} - W_{t_i})$$

この形式により、非可換的な時間発展が可能となり、言語のような非線形な空間にも適応 可能となる。

☆伊藤の公式

関数 $y_t = f(x_t, t)$ に対し、伊藤の公式によりその微分は次のように与えられる:

$$dy_t = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x}f + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}g^2\right)dt + \frac{\partial f}{\partial x}gdW_t$$

この公式は、拡散過程中の任意の変換量(例えばエントロピーや潜在変数)に対しても、 時間発展を記述可能とする。

3. フォン・ノイマン・エントロピーによる拡散の制御

言語空間の意味構造を記述するため、埋め込みベクトルの共分散行列を密度行列 ho_t とみなし、以下のようにフォン・ノイマン・エントロピーを定義する:

$$S(\rho_t) = -Tr(\rho_t log \rho_t)$$

ここで、 ρ_t は意味的類似性に基づいた密度行列であり、時刻 t における言語表現の状態を反映する。ノイズ付加過程においては、 ρ_t のエントロピー変化を最小限に抑えるように設計することで、意味構造を保持する。

4. 散逸量と生成誤差

拡散過程による情報の損失量(散逸量)は、エントロピーの時間変化によって定量化できる:

$$\frac{d}{dt}S(\rho_t) \approx -Tr(\dot{\rho_t}log\rho_t)$$

この変化量が小さいほど、逆拡散過程において意味的な復元がしやすくなり、最終的な生成誤差が小さくなる。実験的にも、フォン・ノイマン・エントロピーを正則化項として加えることにより、復元文の BLEU スコアや意味類似度が向上する傾向が確認された。

5. 今後の課題と展望

本手法は、量子情報理論と自然言語処理の融合的アプローチであり、今後以下のような展開が期待される:

- 意味空間上の測地線に基づいたノイズ経路の最適化
- 量子トポロジーに基づくトークン間結合の解析
- スコアベース拡散との統合による高速生成

付録:数理定義と補足

• 密度行列と類似性

言語ベクトル集合 $\{x_i\}$ に対して、密度行列は以下で定義される:

$$\rho = \sum_{i} p_i x_i x_i^T$$

ここで p_i は重み(例えば頻度や重要度)であり、 ρ は類似性空間における意味構造を反映する。

• エントロピー最小ノイジングの最適性条件

エネルギー汎関数 $\mathcal{F}[\rho] = S(\rho) + \lambda \cdot D_{KL}(\rho \parallel \rho_0)$ を最小化することで、情報保存型の拡散が実現できる。