Diffusion Model 扩散模型

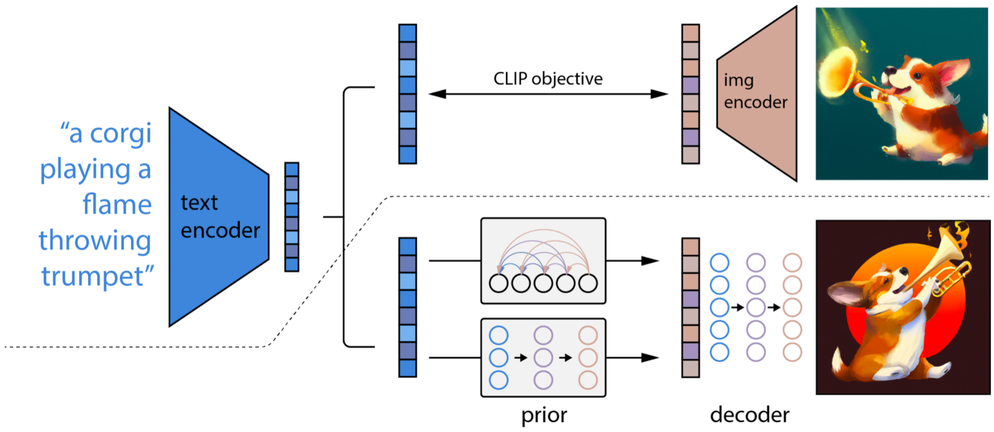
==😎 Edited at 2022-10-28 by **Song1xinn**==

1. Introduce

1.1 DALL·E 2

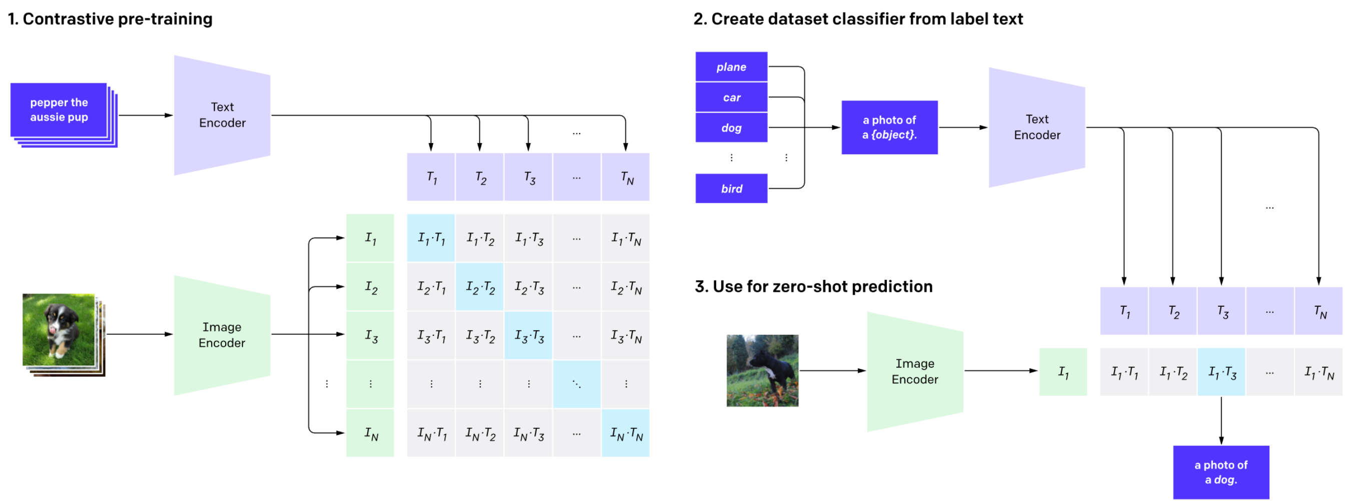
> DALL·E2：https://openai.com/dall-e-2/ DALL·E mini：https://huggingface.co/spaces/dalle-mini/dalle-mini Imagen / Parti - Google

==DALL·E 2== CLIP + diffusion model

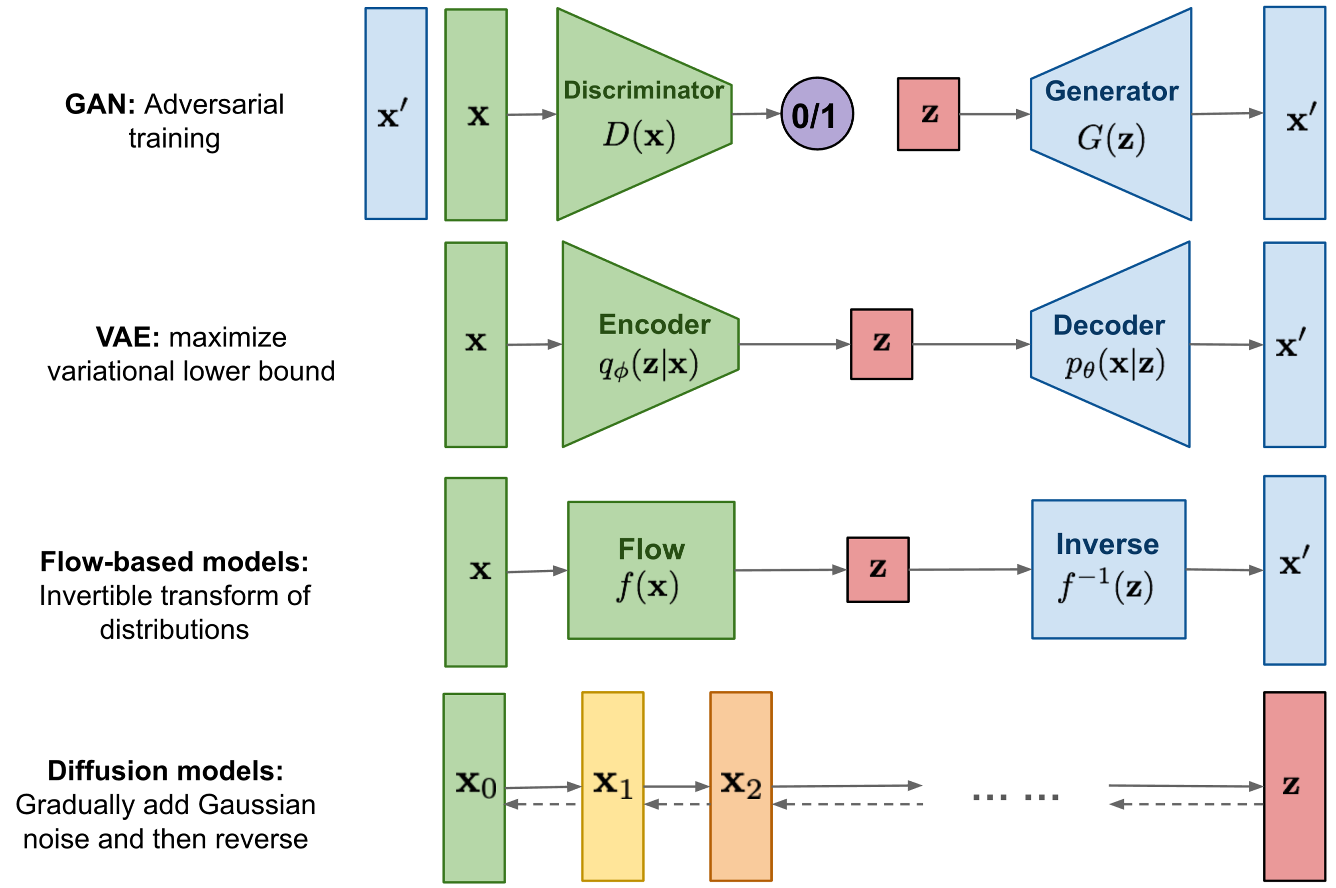


==CLIP==

> $\boxed{1}$CLIP pre-trains an image encoder and a text encoder to predict which images were paired with which texts in our dataset. $\boxed{2}$Then use this behavior to turn CLIP into a **zero-shot classifier**. $\boxed{3}$Convert all of a dataset's classes into captions such as "a photo of a *dog*" and **predict the class of the caption** with a given image.



1.2 Generation Models

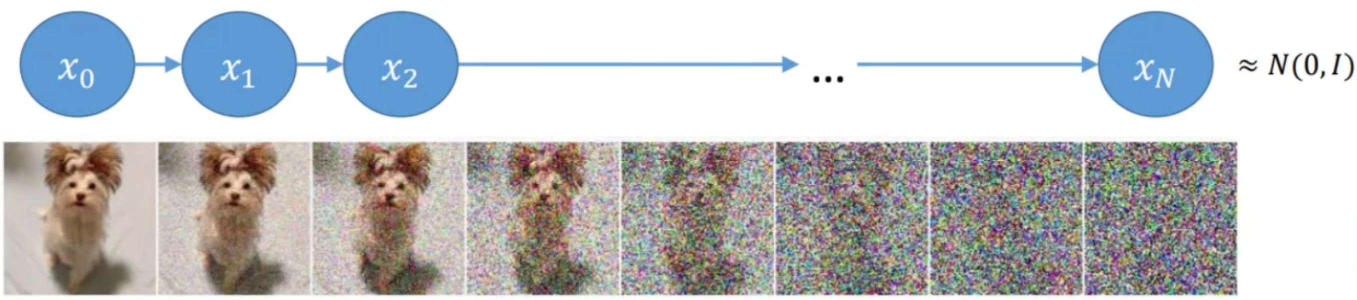


2. What's Diffusion Model

前提：所有的图像都满足自然中的分布（distribution），比如所有带有小猫的图都遵循一种分布、所有带有小狗的图都遵循一种分布。

2.1 Forward diffusion process（Training Process ONLY）

> Given a data point sampled from a real data distribution $ x_0~q(x)$, let us define a ***forward diffusion process*** in which we add small amount of **Gaussian noise** to the sample in T steps, producing a sequence of noisy samples $x_1,...,x_T$. The data sample $ x_0$ gradually loses its distinguishable features as the step t becomes larger. Eventually when $ T→∞$, $x_T $ is equivalent to an isotropic Gaussian distribution.



目标： $q(x_T|x_0)$

给定如下公式，其中 $ {β_t∈(0,1)}_{t=1}^T$，可以理解为添加的噪声的占比，是自定的函数，所以可以看作已知量。 $$ \alpha_t = 1-\beta_t $$

那么，如果已知 x_{t-1} ，我们设定 x_t 为下述公式，其中 ϵ_t 表示时刻 t 加的噪声： $$ x_t = \sqrt{\alpha_t}x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}\epsilon_t\label{2} $$ 同理， x_{t-1} 可以由 x_{t-2} 表示，再由于每一次添加噪声都是从高斯分布中采样的噪声，即 $\epsilon_t~N(0,\boldsymbol I)$ ， 基于此，我们还能推理得到 x_t 与 x_{t-2} 的关系，其中 ϵ 合并了两个高斯分布： $$ x_{t} = \sqrt{\alpha_t}(\sqrt{\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}}\epsilon_{t-1})+ \sqrt{1-\alpha_t}\epsilon_t \ = \sqrt{\alpha_t}\sqrt{\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\alpha_{t-1}}\epsilon_{t-1}+ \sqrt{1-\alpha_t}\epsilon_t \ =\sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}} \epsilon $$

> ==**数学解释**==
>
> - 关于 ϵ_t 的高斯分布可以写作：$\epsilon_t~N(0,\sigma_1^2)$，乘上 $ w$ 后方差变为 $\sigma_1^2 * w^2$，加上 b 后均值变为 $0+b$ 。
> - 如果两个相互独立的高斯分布$\epsilon_1~N(\mu_1,\sigma_1^2), \epsilon_2~N(\mu_2,\sigma_2^2)$，那么$\epsilon = (a\epsilon_1 ± b\epsilon_2)~N(a\mu_1±b\mu_2,a^2\sigma_1^2+b^2\sigma_2^2)$
> - 现在有两个高斯分布： $\sqrt{\alpha_t(1-\alpha_{t-1})}\epsilon_{t-1}~N(0,\alpha_t(1-\alpha_{t-1})) $，$\sqrt{1-\alpha_t}\epsilon_t~N(0,1-\alpha_t) $ 两个分布相加可以得到：$\sqrt{\alpha_t(1-\alpha_{t-1})}\epsilon_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}\epsilon_t ~N(0,1-\alpha_t\alpha_{t-1})$

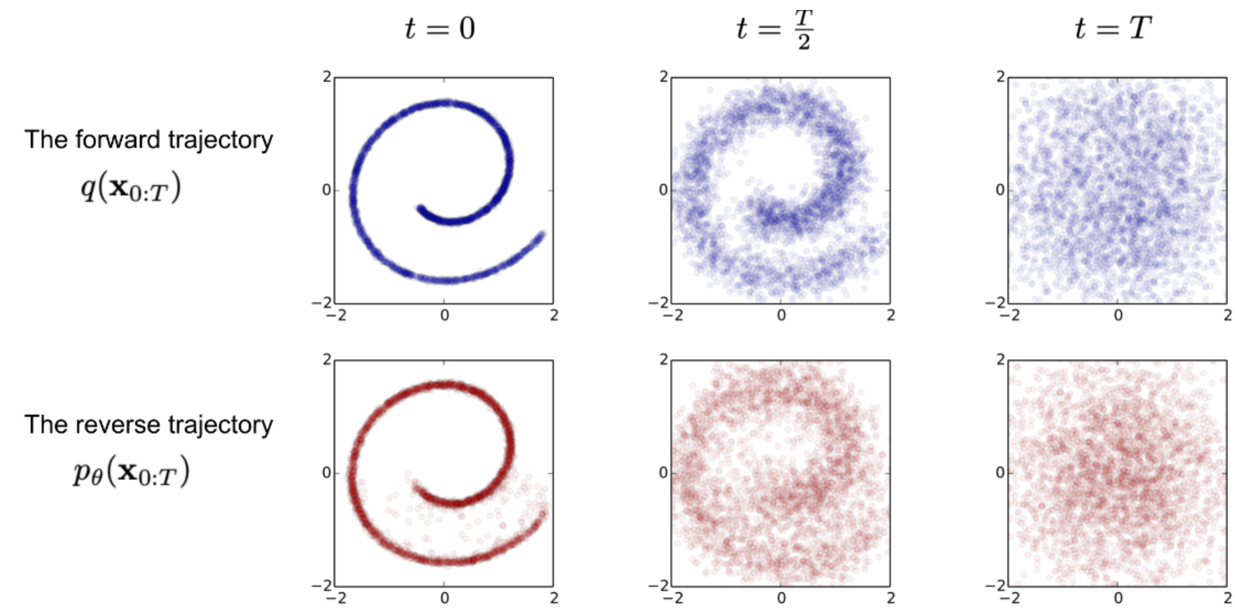
可以推理得到 x_t 与 x_0 的关系，其中 $\bar\alpha_t$ 表示累乘： $$ x_{t} =\sqrt{\bar\alpha_t}x_{0} + \sqrt{1-\bar\alpha_t}\epsilon\label{4} $$ ==回到概率分析==

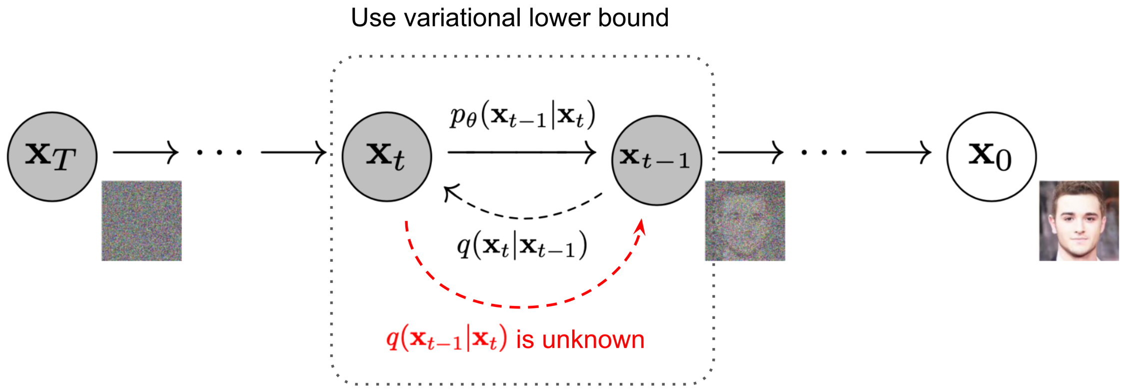
给定初始的数据分布 $x_0 ~ q(x)$，可以不断地向分布中添加高斯噪声，该噪声的方差以固定值 β_t 确定，均值以 β_t 和当前时刻 t 的数据 x_t 决定。基于前一时刻去预测后一时刻是一个条件概率分布，给定 x_0 ， x_1 到 x_T 的联合概率分布可以写为条件概率分布相乘： $$ q(x_{1:T}|x_{0}) = \prod^T_{t=1} q(x_t|x_{t-1}) \qquad q(x_t|x_{t-1}) = N(x_t; \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1},\beta_t\boldsymbol I)\label{11} $$ 公式 $\eqref{11}$ 中可以看出这个分布的均值是 $\sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}$ ， 方差是 β_t ， 可以得到由 x_{t-1} 表示的 x_t，也就是公式 $\eqref{2}$ 。和前面的推理原理相同，通过对高斯分布的相加，得到 x_t 关于 x_0 的条件概率分布。 $$ q(x_t|x_0) = N(x_t; \sqrt{\bar\alpha_t}x_0,(1-\bar\alpha_t)\boldsymbol I) $$ 随着 t 的不断增大，当 $T \to \infty $，最终数据分布 x_T 变成了一个各向独立的高斯分布。 注意，前向过程不包括任何需要学习的参数。

==😲Question== **Why forward diffusion process ?**

2.2 Reverse diffusion process

> if we can reverse the above process and sample from $q(x_{t−1}|x_t)$, we will be able to recreate the true sample from a Gaussian noise input, $x_T~N(0,I)$. Note that if $β_t$ is small enough, $q(x_{t−1}|x_t)$ will also be Gaussian. Unfortunately, we cannot easily estimate $q(x_{t−1}|x_t)$ because it needs to use the entire dataset and therefore we need to learn a **model $p_θ$** to approximate these conditional probabilities in order to run the *reverse diffusion process*.





目标： $p_\theta(x_0|x_T)$

逆过程是从高斯噪声中回复原始数据，所以可以假设其也是一个高斯分布，在这里需要构建一个模型 p_θ 来通过给定的噪声来预测出训练集的分布，从而可以通过从分布中采样来生成新的样本。 $$ p_\theta(x_{0:T}) =p(x_T) \prod^T_{t=1} p_\theta(x_{t-1}|x_{t}) \qquad p_\theta(x_{t-1}|x_{t}) = N(x_{t-1}; \mu_\theta(x_t,t),\Sigma_\theta(x_t,t))\label{13} $$ 由于反向过程没办法直接求得 x_0 与 x_t 之间的关系，即无法直接从噪声到图像，那么我们转换方式，我们可以先求 x_{t-1}，x_{t-2} ... 直到得到x_{0}，即先求 $q(x_{t-1}|x_t)$ ，再进一步建模。若给定 x_t, x_0 后验扩散条件概率 $q(x_{t-1}|x_t,x_0) $分布用公式表达： $$ q(x_{t-1}|x_t,x_0) = N(x_{t-1};\tilde\mu_t(x_t,x_0),\tilde\beta_t\boldsymbol I) $$ 根据贝叶斯公式，有： $$ q(x_{t-1}|x_t,x_0) = q(x_{t}|x_{t-1},x_0)\frac{q(x_{t-1},x_0)}{q(x_t,x_0)}\ $$ 将上式用分布表示，同时进行展开 $$ (9); ∝ exp(−\frac{1}{2}(\frac{(x_t−\sqrt{α_t}x_{t−1})^2}{β_t} + \frac{(x_{t−1}−\sqrt{α_{t−1}}x_0)^2}{1−\barα_{t−1}} −\frac{x_t−\sqrt{\barα_t}x_0)^2}{1−\barα_t}))\ = exp(−\frac{1}{2} (\frac{x_t^2−2\sqrtα_tx_tx_{t−1}+α_tx_{t−1}^2} {βt}+\frac{x_{t−1}^2−2\sqrt{\barα_{t−1}}x_0x_{t−1}+\barα_{t−1}x_0^2}{1−\barα_{t−1}}−\frac{(x_t− \sqrt{\barα_t}x_0)^2}{1−\barα_t}))\ =exp(−\frac{1}{2}((\frac{α_t}{β_t}+\frac{1}{1−\barα_{t−1}})x_{t−1}^2− (\frac{2\sqrtα_t}{β_t}x_t+\frac{2\barα_{t−1}}{1−\barα_{t−1}}x_0)x_{t−1}+C(x_t,x_0)))\label{7} $$

> ==**数学解释**==
>
> - 根据前向过程，可以得到： $q(x_{t}|x_{t-1},x_0) = \sqrt\alpha_tx_{t-1}+\sqrt{1-\alpha_t}\epsilon ~N(\sqrt\alpha_tx_{t-1},1-\alpha_t)$ $ {q(x_{t-1},x_0)} = \sqrt{\bar\alpha_{t-1}}x_{0}+\sqrt{1-\bar\alpha_{t-1}}\epsilon ~N(\sqrt{\bar\alpha_{t-1}}x_{0},1-\bar\alpha_{t-1})$ $

> {q(x_t,x_0)}=\sqrt\alpha_tx_{0}+\sqrt{1-\bar\alpha_{t}}\epsilon~N(\sqrt\alpha_tx_{0},1-\bar\alpha_{t})$
>
> - 高斯分布的概率密度函数： $ f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}exp({-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2})$， 于是有 $N(\mu, \sigma^2) \propto exp({-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2})$， 展开后在 exp 中， 乘法就是相加， 除法就是相减。

又因为 $exp({-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}) = exp(-\frac{1}{2}(\frac{1}{\sigma^2}x^2-\frac{2\mu}{\sigma^2}x+ \frac{\mu^2}{\sigma^2}))$ ， 所以根据 $\eqref{7}$ 可以得到关于 x_{t-1} 的分布方差和均值: $$ \tilde\beta_t = \frac{1}{(\frac{α_t}{β_t}+\frac{1}{1−\barα_{t−1}})} = \frac{1−\barα_{t−1}}{1−\barα_{t}} \cdot \beta_t \\tilde\mu_t(x_t,x_0) = \frac{\sqrt\alpha_t(1-\bar\alpha_{t-1})}{1-\bar\alpha_{t}}x_t+\frac{\sqrt{\bar\alpha_{t-1}}\beta_t}{1-\bar\alpha_{t}}x_0\label{8} $$ 由于当前的已知是 x_t ， 在前向过程中推理了 x_t 与 x_0 的关系， 那么利用公式 $\eqref{4}$ 将 x_0 用 x_t 来近似，有： $$ x_0 =\frac{1}{\sqrt{\bar\alpha_t}}(x_t-\sqrt{1-\bar\alpha_t}\epsilon_t) $$

$$ \tilde\mu_t = \frac{1}{\sqrt\alpha_t}(x_t-\frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar\alpha_t}}\epsilon_t) $$

==😲Question== **How to get $\boldsymbol{\epsilon_t}$?** 👐*Train a model to predict it.*

2.3 Algrithms

2.3.1 Training (Predict the noise)

Algrithm 1 Training	**Note**
1: **repeat**	
2: $x_0 ~ q(x_0)$	x_0 为分布 q 中随机采样的图像（数据集中取数据）
3: $t ~ Uniform({1,...,T})$	$ t$ 即扩散次数，从 0 到 T，对不同的图像是不固定的
4: $\epsilon ~ N(0, I)$	ϵ 高斯分布 $N(0, I)$ 中随机采样的噪声（从前向过程获得）
5: Take gradient descent step on $\gradient_\theta ||ϵ−ϵ_θ(\sqrt{\bar α_t}x_0+\sqrt{1−\bar α_t}ϵ,t)||^2 $	$ϵ_θ$ 即训练的模型，括号内是输入：时间以及 x_t
6: **until** converged	

2.3.2 Sampling (To get x_0)

Algrithm 2 Sampling	**Note**
1: $x_T ~ N(0, I)$	x_T 高斯分布 $N(0, I)$ 中随机采样的噪声
2: **for** $t = T,...,1 $ **do**	
3: $z ~ N(0, I)$ **if** $t>1$, **else** $z = 0$	$ t = 1$ 即 x_0 时刻没有噪声，其他时刻都有从分布中采样的噪声（重参数）

Algrithm 2 Sampling	Note
4: $x_{t-1} = \frac{1}{\sqrt\alpha_t}(x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar\alpha_t}}\epsilon_\theta(x_t, t)) + \sigma_tz$	
5: **end for**	
6: **return** x_0	

3. Code

- diffusion model demo
- diffusion in DALL·E 2 （image generation）

References:

[1] Radford A, Kim J W, Hallacy C, et al. Learning transferable visual models from natural language supervision[C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021: 8748-8763. [2] **Ho J, Jain A, Abbeel P. Denoising diffusion probabilistic models[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33: 6840-6851.** [3] https://openai.com/dall-e-2/ [4] https://huggingface.co/spaces/dalle-mini/dalle-mini [5] https://lilianweng.github.io/posts/2021-07-11-diffusion-models/ [6] https://www.bilibili.com/video/BV1b541197HX/?spm_id_from=333.788&vd_source=7020551ede7e34125c5de7acc9417f8d [7] https://www.bilibili.com/video/BV1tY4y1N7jg/?spm_id_from=333.788.recommend_more_video.1&vd_source=7020551ede7e34125c5de7acc9417f8d [8] https://github.com/heejkoo/Awesome-Diffusion-Models [9] https://www.bilibili.com/video/BV1ad4y1c7vY/?spm_id_from=333.337.search-card.all.click&vd_source=7020551ede7e34125c5de7acc9417f8d