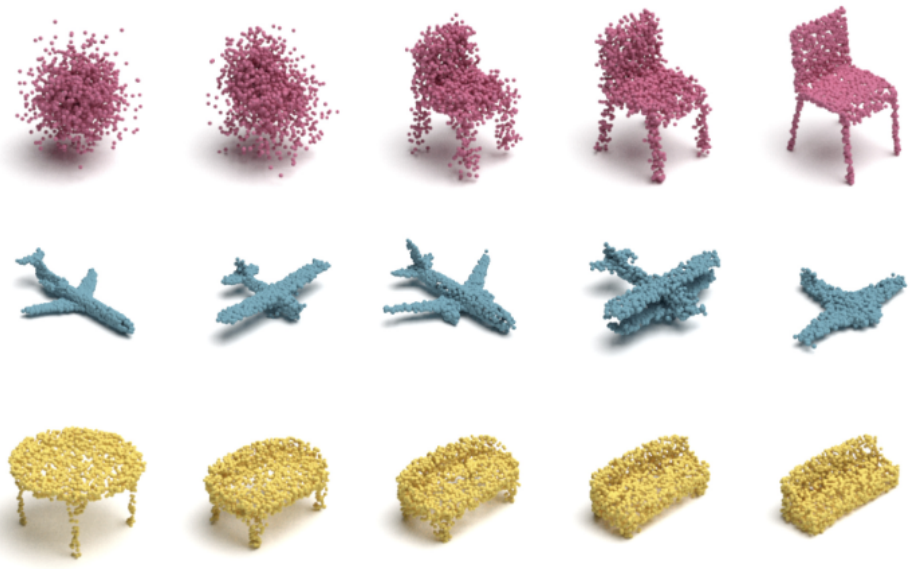
> 本周工作：
>
> 1. 打标签，完成；
> 2. 研读Diffusion Probabilistic Models；
> 3. 调研了微软为unity提供的Hololens库和Ar Foundation；

Diffusion Probabilistic Models for 3D Point Cloud Generation

1. Introduction

该文受非平衡热力学启发，基于DiffusionModel提出了点云生成方法。其中，他们认为3D点云中的点可视为非平衡热力学系统中的粒子，在扩散作用下粒子会从某形状扩散到整个空间。这个工作将点云的点分布和噪声分布建立关联。通过学习寻找逆分布，从而从噪声中恢复原始点分布。



本文的创新点：

- 提出了一个基于Diffusion的点云生成；
- 提出了一个易于训练的Diffusion Loss；
- 使用自动编码器获得点云总体特征（就是认为它潜在应该是什么模型，让扩散不那么随机）
- 提供了从预估分布中采样点云的方法；

2. Diffusion Probabilistic Models for Point Clouds

这部分定义了模型训练的前向和后向扩散的概率模型，最后定义了训练Loss。

2.1. Formulation

遵循热力学和点云定义，定义点云$X^{(0)}=\{x_i^{(0)}\}_{i=1}^N$为一组热力学系统中的粒子，每一个粒子$x_i$都可被独立采样于点分布$q(x_i^{(0)}|z)$，其中$z$为Shape Latent（决定点分布）。

遵循Diffusion，点到随机噪声这一扩散过程可描述为以下蒙特卡洛链：

$$q(x_i^{(1:T)}|x_i^{(0)})=\prod_{t=1}^{T}q(x_i^{(t)}|x_i^{(t-1)})$$

$$where\ q(x^{(t)}|x^{(t-1)})=\mathcal{N}(x^{(t)}|\sqrt{1-\beta_t}x^{(t-1)},\beta_t\mathbf{I}),\ t=1,\dots,T$$

由于目标是根据潜在编码z生成点云，因此定义逆向扩散过程。

1. 从近似于$q(x_i^{(t)})$的分布$q(x_i^{(t)})$采样一组点作为输入；
2. 通过蒙特卡洛链逆向回期望模型；

相比于前向的简单加噪声，逆向的模型是未知的，需要学习的。逆向过程可描述为：

$$p_\theta(x^{(0:T)}|z)=p(x^{(T)})\prod_{i=1}^{T}p_\theta(x^{(t-1)}|x^{(t)},z)$$

$$p_\theta(x^{(t-1)}|x^{(t)},z)=\mathcal{N}(x^{(t-1)}|\mu_\theta(x^{(t)},t,z),\beta_t\mathbf{I}),\ where\ p(x^{(T)})\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$$

由于输入点云是从分布$p(x_i^t)$中采样的，因此整个点云的概率就是所有样本点的乘积：

$$q(X^{(1:T)}|X^0)=\prod_{i=1}^{N}q(x_i^{(1:T)}|x_i^{(0)})$$

$$p_\theta(X^{(1:T)}|z)=\prod_{i=1}^{N}p_\theta(x_i^{(1:T)}|z)$$

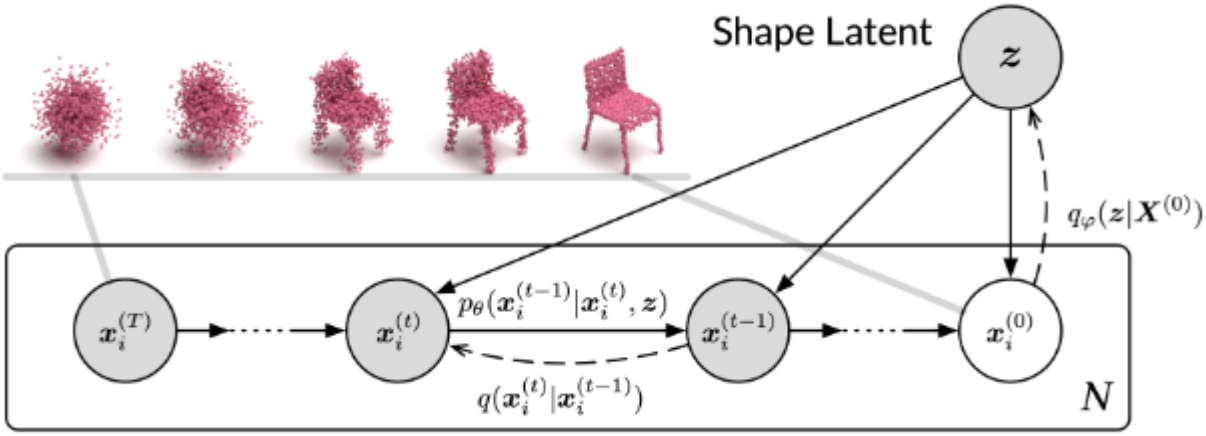
2.2. Training Objective

训练反向扩散的目的是使点云的似然估计$\mathbb{E}[\log p_\theta(X^{(0)})]$最大化。但直接算不行（见EBM），因此使用最大化变分下界化简：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\log p_\theta(X^{(0)})] &\geq \mathbb{E}_q\left[\log \frac{p_\theta(X^{(0:T)}, z)}{q(X^{(1:T)}, z|X^{(0)})}\right] \\ &= E_q\Bigg[\log p(X^{(T)}) \\ &+ \sum_{t=1}^{T} \log \frac{p_\theta(X^{(t-1)}|X^{(t)}, z)}{q(X^{(T)}|X^{(t-1)})} \\ &- \log \frac{q_\varphi(z|X^{(0)})}{p(z)}\Bigg]\end{aligned}$$

通过推导，由此得到本文用于训练的Loss：

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\theta, \varphi) = \mathbb{E}_q\Big[&\sum_{t=2}^{T} D_{KL}\big(q(X^{(t-1)}|X^{(t)}, X^{(0)})||p_\theta(X^{(t-1)}|X^{(t)}, z)\big) \\ &- \log p_\theta(X^{(0)}|X^{(1)}, z) \\ &+ D_{KL}\big(q_\varphi(z|X^{(0)})||p(z)\big)\Big]\end{aligned}$$



由于样本的采样的独立性，可继续细化Loss：

$$\mathcal{L}(\theta,\varphi)=\mathbb{E}_q\Big[\sum_{t=2}^{T}\sum_{i=1}^{N}D_{KL}\big(\underbrace{q(x_i^{(t-1)}|x_i^{(t)},x_i^{(0)})}_{(1)}||\underbrace{p_\theta(x_i^{(t-1)}|x_i^{(t)},z)}_{(2)}\big)$$

$$-\sum_{i=1}^{N}\underbrace{\log p_\theta(x_i^{(0)}|x_i^{(1)},z)}_{(3)}$$

$$+D_{KL}\big(\underbrace{q_\varphi(z|X^{(0)})}_{(4)}||\underbrace{p(z)}_{(5)}\big)\Big]$$

1. 该项可通过Closed-from高斯计算paper：
2. $p_\theta(x_i^{(t-1)}|x_i^{(t)},z)$可由前面计算；
3. 同上；
4. (important) $q_\varphi(z|X^{(0)})$是一个近似后验分布，通俗理解就是一个变分编码器，通过输入原始点云得到一个点云总体的潜在编码z，不同的是这里用了分布描述，实际使用PointNet预估；
5. 最后一项是一个先验分布，本文选择使用参数化先验分布（normalizing flows）实现；

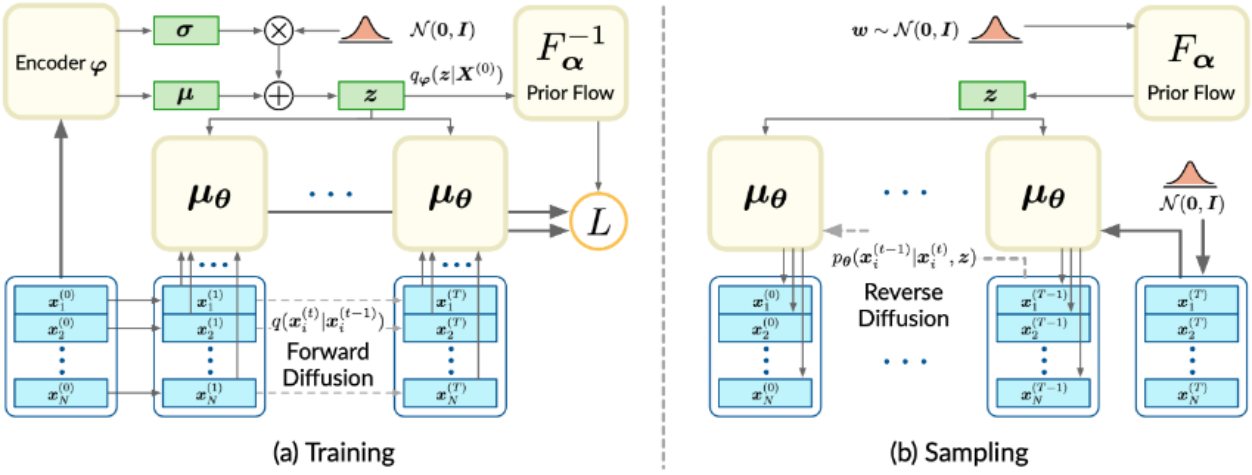
> 但是计算每一个节点的期望同样耗时，所以提出一个优化：随机计算一个t的期望，增加一小段训练时间，提高总体效率。

- 蓝色部分为Diffusion模型的Loss；
- 绿色部分是Flow模型需要计算的Loss，对于AutoEncoder这个模块，不需要计算这个交叉熵。

Algorithm 1 Training (Simplified)

repeat
  Sample $\boldsymbol{X}^{(0)}\sim q_{\text{data}}(\boldsymbol{X}^{(0)})$
  Sample $\boldsymbol{z}\sim q_{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X}^{(0)})$
  Sample $t\sim\text{Uniform}(\{1,\dots,T\})$
  Sample $\boldsymbol{x}_1^{(t)},\dots,\boldsymbol{x}_N^{(t)}\sim q(\boldsymbol{x}^{(t)}|\boldsymbol{x}^{(0)})$
  $L_t\leftarrow\sum_{i=1}^{N}D_{\text{KL}}\left(q(\boldsymbol{x}_i^{(t-1)}|\boldsymbol{x}_i^{(t)},\boldsymbol{x}_i^{(0)})\middle\|p_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_i^{(t-1)}|\boldsymbol{x}_i^{(t)},\boldsymbol{z})\right)$
  $L_{\boldsymbol{z}}\leftarrow D_{\text{KL}}(q_{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X}^{(0)})\|p(\boldsymbol{z}))$
  Compute $\nabla_{\boldsymbol{\theta}}(L_t+\frac{1}{T}L_{\boldsymbol{z}})$. Then perform gradient descent.
until converged

2.3. Model Implementations



如上，模型训练Loss分两个部分，DiffusionLoss和自编码Loss。

在这块的Work：

- 找到一个双向分布映射$F_\alpha: w \rightarrow z$，可以将一个各向同性分布映射为一个参数化的复分布，且能直接计算复分布样本的概率$p(z)$；
- 对于编码器$q_\varphi(z|X^{(0)})$，使用PointNet实现对均值和方差的预估；
- 提出了一个AutoEncoder，对应Loss部分蓝绿Loss相关内容。

3. How 2 use Diffusion for denoising only?

首先，之前点云降噪任务和这个工作：

- 降噪过程：这篇是从$\mathcal{N}(0, \mathbf{I})$将点云**重采样**为目标形状；之前降噪往往对点云Patch进行估计某个属性 (e.g. 偏移量、梯度方向...)；
- 泛化：这篇提出的点云生成结果依赖于训练用的数据集，它无法生成它不认识的模型；大部分降噪方法往往不受模型本身影响，少数（e.g. ShapeGF）除外；
- ...

如何使用Diffusion实现点云降噪，思路分析：

1. 噪声点云，若它可被一个分布表示，例如高斯分布$q(X^T|X_0)$，那它是不是可以被视作Sampling过程中t较小的比较靠前的链中的某个X^t？那么这个问题就可以被约化为寻找一个预测t的方法，根据输入噪声点云预测t，而PointNet能做预测属性。但难点目前存在以下几个方面：
    - PointNet能否预测t?

    - 需要一个用于控制DiffusionSampling的z，它的输入是噪声点云，目的是让最终生成的模型是噪声点云潜在描述的那个样子。有如下难点：
        - 这个分布的输入一个各向异性分布，输出一个潜在特征；
        - 如何计算Loss？或者，不用算？Flow能做吗？AutoEncoder能做吗？
2. 从之前的Score-Based方法中，它们通过猜Patch中平面的分布从而实现降噪。那么对于Diffusion来说，每一Step都是通过输入猜噪声分布，然后再通过重采样采样下一个Step，从而实现从噪声到实体的生成过程。那么，能否使用Diffusion对点云Patch进行降噪？因为对于Diffusion的每Step可以理解为通过重采样采样一个ScoreFunction，从而实现降噪。