22-10-29周报

1. 论文研读

> 本周学习了Score-Based Model的基础内容EBMs，并对其中基础推导，结合其他资料梳理了一遍笔记。
>
> 完成了对SBG-based的点云降噪进行的研读。
>
> 简单了解了Diffusion Model。
>
> How to Train Your Energy-Based Models
>
> Score-Based Point Cloud Denoising

1.1. Score-Based generative Model

EBM是当前score-based方法的基础模型。

Score-Based generative Model（以下简称SBG）有如下优点：

- 无需对抗学习，得到GAN级别的采样效果；
- 灵活的模型结构，基于这类方法可以设计符合课题的模型；
- 精确的exact log-likelihood computation（对数似然估计）；
- uniquely identifiable representation learning；

符号表：

Symbol	Description
$x_i,\ i = 1, 2, \ldots$	第i个数据集
θ	模型的参数，训练时需要寻找的参数
$p_\theta(x)$	模型的概率密度函数
$p_{data}(x)$	未知的真实数据的概率密度函数
$E_\theta(x)$	Energy function，可以是任意函数

1.1.1. Energy-based model(EBM)

EBM源于统计动力学，EBM的模型可被描述为如下形式：

$$p_\theta(x) = \frac{e^{-E_\theta(x)}}{Z_\theta},$$
$$where: Z_\theta = \int_\infty e^{-E_\theta(x)}dx$$

其中，Z_θ的作用是让概率密度总为 `1` ；结果上，能量$E_\theta(x)$越低的状态越有可能发生。

EBM是一种likelihood-based的直接学习data-generating分布的方法。但使用EBM建模时，不使用传统损失函数进行计算，以下用negative log-likelihood举例：

$$\begin{aligned}\sum_i -\log p_\theta(x_i) &= \sum_i -\log \frac{e^{-E_\theta(x_i)}}{Z_\theta} \\ &= \sum_i E_\theta(x_i) + \log \int e^{-E_\theta(x_i)}dx\end{aligned}$$

显然，若要用梯度下降计算θ，离不开处理后面的积分，这是个非常大难以实现的计算量。因此SCG方法使用了一个近似方法实现likelihood。

1.1.2. Score Matching

从上可知，对θ求导必然要处理Z_θ问题，因此Score-based方法转而对x进行求导，定义score function $s(x)$为log-density function对x的梯度。其效果如下：

$$\begin{aligned}s_\theta(x) = \nabla_x \log p_\theta(x) &= -\nabla_x E_\theta(x) - \nabla_x \log Z_\theta \\ &= -\nabla_x E_\theta(x)\end{aligned}$$

同时，我们希望$p_\theta(x)$尽可能接近目标$p_{data}(x)$，若有$s_\theta(x) = s_{data}(x)$，则：

$$E_\theta(x) = E_{data}(x) + Constant$$

又因为：

$$\begin{aligned}p_\theta(x) &= \frac{e^{-E_\theta(x)}}{Z_\theta} \\ &= \frac{e^{-E_{data}(x)-c}}{\int e^{-E_{data}(x)-c}dx} \\ &= \frac{e^{-E_{data}(x)}}{Z_{data}} \\ &= p_{data}(x)\end{aligned}$$

因此，score相等等价于分布p相等，即寻找参数θ问题可被约化为对二者的score进行比较。由此，我们可以定义新的loss：（这里出现了符号冲突，定义$E[x]$为求集合x的期望）

$$\mathcal{L} = E_{data}[\{s_\theta(x) - s_{data}(x)\}^2]$$

这种loss被称为Fisher Divergence。然而，$s_{data}(x)$也是未知项，因为我们不知道数据的**真实**分布。前人研究发现，在一些条件下，该loss可被展开为一个不含$s_{data}(x)$的表达式：

$$\begin{aligned}
E_{data}[\{s_\theta(x) - s_{data}(x)\}^2] &= E_{data}[s_{data}(x)]^2 + E_{data}[s_\theta(x)]^2 \\
&- 2\int s_{data}(x)s_\theta(x)dx \\
&= const. + E_{data}[s_\theta(x)]^2 - 2p_{data}(x)s_\theta(x)|_{-\infty}^{\infty} \\
&+ 2\int p_{data}(x)\nabla_x s_\theta(x)dx \\
assuming: \ x \to \pm\infty \ \Rightarrow \ p_{data}(x) \to 0: \\
&\Rightarrow E_{data}[x]^2 + 2\int p_{data}(x)\nabla_x s_\theta(x)dx + c \\
if \ x \ is \ high-dim \ data: \\
&\Rightarrow E_{data}[||s_\theta(x)||_2^2] + 2E_{data}[tr(\nabla_x s_\theta(x))] + c \\
&= E_{data}[||s_\theta(x)||_2^2 + 2tr(\nabla_x s_\theta(x))] + c \\
&\Rightarrow E_{data}[||s_\theta(x)||_2^2 + 2tr(\nabla_x s_\theta(x))]
\end{aligned}$$

其中，$\nabla_x s_\theta(x)$是Hessian矩阵，因此求解这个项的开销在x的维度较大时会很高。

Score Matching本身基于连续可微等假设，而实际数据往往是离散的，因此引出后续解决这些问题的优化。

1.1.3. Denoising Score Matching

对于图像数据，像素值$x_i \in \{0, 1, \ldots, 255\}$，是离散的，因此我们会添加噪声$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2\mathrm{I})$，添加噪声后的连续光滑结果为$\tilde{x} = x + \varepsilon$：

$$q_{data}(\tilde{x}) = \int q(\tilde{x}|x)p_{data}(x)dx, \ where \ q(\tilde{x}|x) \sim \mathcal{N}(x, \sigma^2\mathrm{I})$$

由此，将新数据代入$\mathcal{L}$，得到新Loss：

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{Fisher}(q_{data}(\tilde{x})||p_\theta(\tilde{x})) &= E_{q_{data}(\tilde{x})}[||\nabla_{\tilde{x}}\log q_{data}(\tilde{x}) - \nabla_{\tilde{x}}\log p_\theta(\tilde{x})||^2] \\
&= const. + E_{q(\tilde{x}|x)}[||\nabla_{\tilde{x}}\log p_\theta(x) - \nabla_{\tilde{x}}\log q(\tilde{x}|x)||^2] \\
&\Rightarrow E_{q(\tilde{x}|x)}[||\nabla_{\tilde{x}}\log p_\theta(x) - \nabla_{\tilde{x}}\log q(\tilde{x}|x)||^2]
\end{aligned}$$

> 与之同类的方法很多，就没有继续看了。

1.1.4. Langevin MCMC

当我们训练出一个$p_\theta(x)$时，我们可以使用Langevin MCMC实现采样。输入一个根据先验分布构造的初始集x^0，通过迭代，根据分布梯度$\nabla_x \log p_\theta(x)$，令集合在第$K$步收敛到一个结果：

$$x^{k+1} \leftarrow x^k + \frac{\epsilon^2}{2} \nabla_x \log p_\theta(x^k) + \epsilon z^k,\ k = 0, 1, \ldots K - 1$$

> 关于z，文中没有明说，但根据Langvin dynamic和退火思路，我认为是一个随机扰动集。

> 截止于此，插入总结：传统EBM的思路是，寻找能量模型$E_\theta(x)$，然后根据这一模型得到目标$s_\theta(x)$，然后基于训练得到模型参数θ，然后将当前迭代的$s_\theta(x)$用于迭代收敛x，然后开始下一轮迭代收敛。

1.2. Score-Based Point Cloud Denosing

Score-Based Point Cloud Denosing（以下省略为SPD）实现了将基于EBM的Score-Based Model引用于点云降噪。SPD认为，输入的噪声点云可以被认作是干净点云样本的模型$p(x)$和噪声分布模型n的卷积，即$p * n(x)$。此外，SPD沿用传统SBM中的对数似然估计（log-likelihood）计算x的分布的上升梯度进行迭代更新x（类似于LangevinMCMC，但SPD依旧沿用了某个前人的近似有偏估计，不是创新点）。

本文的创新点：

- 提供了一个实现SBM的神经网络框架，使SBM可用于点云降噪；
- 提供了一个可用于点云降噪的Score function；
- 提供了一个根据Score function的去噪算法；

SPD认为，点云是从3D物体表面采样得到的，因此点云可被认为是一组由2D流形构成的某个3D分布$p(x)$。对于被噪声污染的分布$p * n(x)$来说，点云降噪等价于使用$\nabla_x \log p * n(x)$迭代更新x，因为SPD认为$p * n(x)$尽可能多的迭代更新可以得到一个干净的$p(x)$。（见下面的Figure）

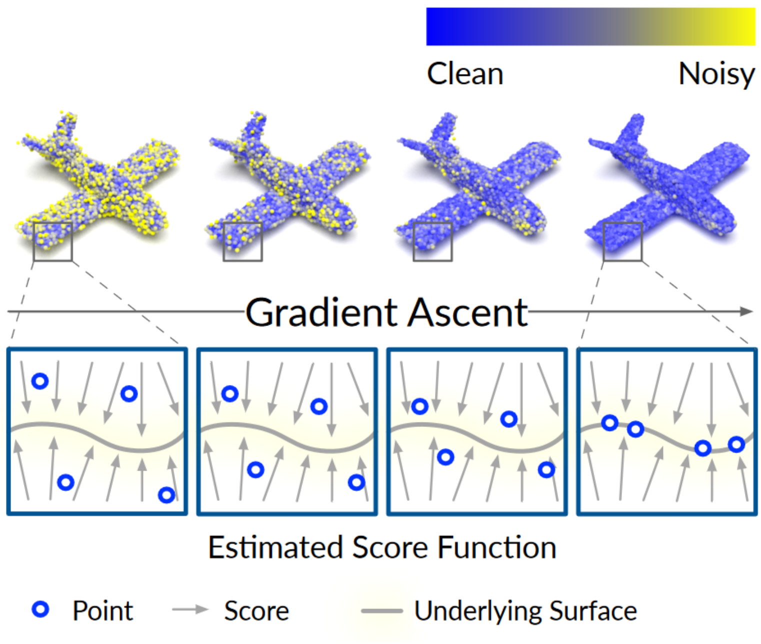
SPD特长：

- 对于解决模型收缩和离群点问题有非常鲁棒的结果。

挑战：

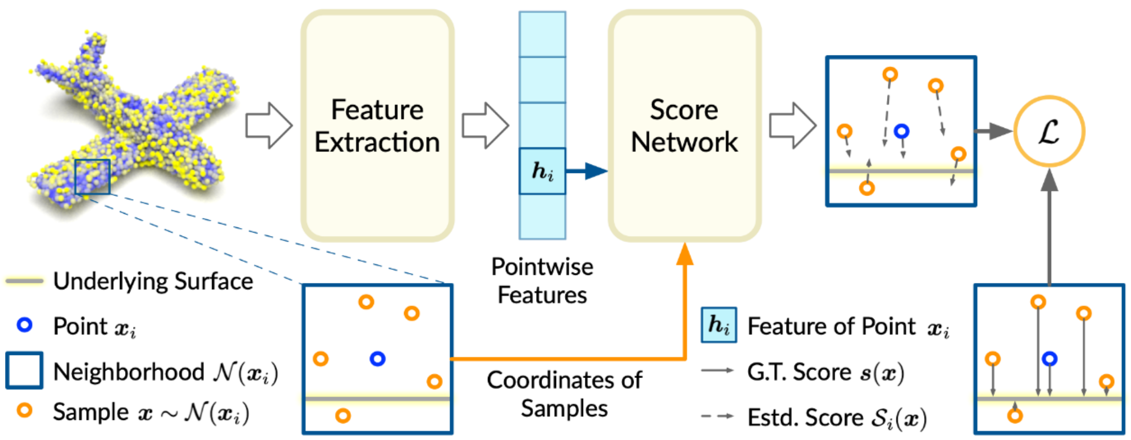
- 用于测试的$p * n(x)$是未知的，只能从输入点云估计。因此SPD提出了一种神经网络，用于估计点云分布$p * n(x)$的Score function $S(x) = \nabla_x \log[p * n(x)]$。

> NOTE：虽然SPD是基于分布这一概念的，但是相比于传统EBM通过假设分布p再训练模型寻找分布p的参数θ来说，SPD跳过了寻找分布这步，通过神经网络寻找最后的分布的Score function，即无需假设分布模型。这点在研究上省去了试分布这一步骤。缺点上，我个人直觉：它对不同种类的噪声的泛化应该不好，因为SPD文章本身也没展示这项工作。
>
> 本块不保真，需要进一步检验。



> 快速浏览Relate Work时发现一个非常相关的工作ShapeGF，不出意外是这篇文章的灵感来源。
>
> 作者罗列的不同点：
>
> 1. ShapeGF沿用传统思路，通过学习从3D点云生成建模无噪声的3D分布$p(x)$；SPD基于带噪声的分布$p * n(x)$学习生成score function $s_{p*n}(x)$。
> 2. ShapeGF不具备对它的分布能描述的形状外的形状具备泛化性（这也是传统EBM的缺陷）；SPD可以扩展，因为它的生成是基于局部的基础上定义的，而不是整个点云本身。
> 3. ShapeGF的目标是寻找输入点云的一个潜在标签，（后续它的描述没读懂）大概意思应该是ShapeGF可以做除了降噪外的更多，不需要特意从某一任务中进行学习。

1.2.1. model



> 这个模型的简单理解就是：
>
> 1. 给点云切Patch；
> 2. 获取这个Patch的特征，然后根据特征和Patch内点云坐标输出Patch内所有点的分数，ScoreNet根据局部特征确定局部分布的ScoreFunction，并结合坐标计算对应的上升梯度$S_i(x) = Score(x - \overline{x}, h_i)$；

> 3. 最后一个描述的是学习Loss，上升梯度$s(x)$类似于PointCleanNet提到的偏移量，因此这个Loss就是基于上升梯度$s(x)$和groundTruth偏移量设计的。

1.2.1.1. Loss

> 此处的符号以此处描述的为主，例如s的含义出现与前面的描述冲突

Symbol	Description
$X = \{x_i\}_{i=1}^N,\ x_i \in \mathbb{R}^3$	输入的噪声点云
$Y = \{y_i\}_{i=1}^N,\ y_i \in \mathbb{R}^3$	ground truth无噪声点云
$\mathrm{NN}(x, Y)$	点集Y中距离点x最近的点Figure右下角那个样子

定义groundTruth上升梯度：

$$s(x) = NN(x, Y) - x,\ x \in \mathbb{R}^3$$

结合训练得到的上升梯度，得到单个Patch的Loss：

$$\mathcal{L}^{(i)} = E_{x \sim \mathcal{N}(x_i)}[||s(x) - S_i(x)||_2^2]$$

最终Loss：

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathcal{L}^{(i)}$$

1.2.2. Score-Based denoising Alg

上面的一切都没提怎么降噪，当点云降噪的最终目的是降噪.jpg

理论上，上面输出的$S_i(x)$可以在一次迭代内完成降噪，但显然上升梯度本身是描述函数局部的梯度，它的数学模型希望它是一个连续的函数。因此SPD提出的降噪算法也是和Langevin MCMC类似的爬坡迭代方法。

定义一个评分函数，光滑一下，$kNN(x_i)$就是x_ik邻域：

$$\varepsilon_i(x_i) = \frac{1}{K}\sum_{x_j \in kNN(x_i)} S_j(x_i),\ x \in \mathbb{R}^3$$

然后，迭代方程为：

$$\begin{aligned} x_i^{(t)} &= x_i^{(t-1)} + \alpha_t \varepsilon_i(x_i^{(t-1)}),\ t = 1, \ldots, T \\ x_i^{(0)} &= x_i,\ x_i \in X \end{aligned}$$

α_t就是个$(0,1)$的参数，不是重点。

1.3. Diffusion Model