A Review of Unify Diffusion Model Theory Based on EDM

Created by Zeng zhiwen

Reference: Elucidating the Design Space of Diffusion-Based Generative Models

前向:通用加噪公式与SDE的相互转化

从一个分布 x_0 到另一个分布 x_t 的桥梁,也即流(Flow):

$$p(\boldsymbol{x_t}|\boldsymbol{x_0}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x_t}; s(t)\boldsymbol{x_0}, s^2(t)\sigma^2(t)\boldsymbol{I})$$
(1)

将公式(1)进行重参数化采样,这里的 $\sigma(t)$ 为噪声强度的相对系数, $s(t)\sigma(t)$ 为绝对噪声强度(即噪声实际标准 差):

$$\mathbf{x_t} = s(t)\mathbf{x_0} + s(t)\sigma(t)\epsilon \tag{2}$$

• $s(t)\mathbf{x_0}$ 为信息部分:

信号功率 = $\mathbb{E}\left[\|s(t)\mathbf{x}_0\|^2\right] = s(t)^2 \cdot \mathbb{E}[\|\mathbf{x}_0\|^2] = s(t)^2 \cdot \alpha \cdot n$

• $s(t)\sigma(t)\epsilon$ 为噪声部分:

噪声功率 = $\mathbb{E}\left[\|s(t)\sigma(t)\boldsymbol{\epsilon}\|^2
ight] = s(t)^2\sigma(t)^2\cdot\mathbb{E}[\|\boldsymbol{\epsilon}\|^2] = s(t)^2\sigma(t)^2\cdot n$

• 信噪比:

 $SNR(t) = \frac{\alpha}{\sigma^2(t)}$

为了适配EDM统一框架输入:

$$\mathbf{\hat{x}_t} = rac{\mathbf{x_t}}{s(t)} = \mathbf{x_0} + \sigma(t)\epsilon$$

最终单步递推公式(见 #证明1):

$$\mathbf{x}_t = rac{s(t)}{s(t-1)} \mathbf{x}_{t-1} + s(t) \sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2} \epsilon_t$$

具体可转化为各模型形式,如DDPM:

$$\mathbf{x_t} = \sqrt{1 - \beta_t} \mathbf{x_{t-1}} + \sqrt{\beta_t} \epsilon$$

其中,
$$s(t)=\sqrt{ar{lpha}_t},\quad ar{lpha}_t=\prod_{s=1}^t(1-eta_s),\quad \sigma(t)=\sqrt{rac{1-ar{lpha}_t}{ar{lpha}_t}}$$

对应的随机微分方程(SDE),形式如下:

$$d\mathbf{x_t} = f(t)\mathbf{x}_t dt + g(t)dw_t \tag{3}$$

反之,递推式可通过求取极限(见 #证明2)得到公式(3),对应系数如下:

$$egin{align} s(t) &= e^{\int_0^t f(r)dr} \ f(t) &= rac{s'(t)}{s(t)} \ \end{array}$$

$$\sigma^{2}(t) = \int_{0}^{t} \frac{g^{2}(r)}{s^{2}(r)} dr$$

$$g(t) = s(t)\sqrt{2 \cdot \sigma(t)\sigma'(t)}$$
(5)

公式(2)与公式(3)是等价的,公式(4)和(5)是沟通二者的桥梁,即起点分布相同条件下(即原图像 x_0),针对特定加噪时间点 t,公式(3)SDE的解 x_t 与公式(1)采样获得的 x_t 在分布上是一致的。特别地,EDM框架令 s(t)=1, $\delta(t)=t$,保证了时间和噪声水平完全等价。

模型:通用模型框架

EDM概括了所有扩散模型中,神经网络部分的模型框架:

$$D_{\theta}(\hat{\mathbf{x}}; \sigma) = C_{skip}(\sigma)\hat{\mathbf{x}} + C_{out}(\sigma)F_{\theta}(C_{in}(\sigma)\hat{\mathbf{x}}; C_{nosie}(\sigma))$$
(6)

- $D_{\theta}(\hat{\boldsymbol{x}};\sigma)$ 是接收一个规范化后的噪声图片(即原始图片 \mathbf{x}_0 直接添加 σ 水平的噪声,不进行尺度缩放得到的 $\hat{\mathbf{x}}$), 以及我们为其指定的噪声水平 σ ,输出降噪后的"纯净图像"
 - 但是直接训练一个纯净网络效果不佳,因此 $F_{ heta}$ (残差)才是真正的网络组成。
 - $\hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{s(t)}$,用于统一所有模型的输入尺度
- C_{skip} , C_{out} : 纯净去噪网络 $D_{ heta}(\hat{m{x}};\sigma)$ 的输出由噪声图片 $\hat{m{x}}$ 和模型 $F_{ heta}$ 输出加权组成。
- C_{in} : 用于适配不同网络对标准输入 \hat{x} 的系数,如 s(t)。
- C_{noise} : EDM要求模型框架 $D_{\theta}(\hat{\boldsymbol{x}};\sigma)$ 的输入为 σ ,但不同模型真正输入 F_{θ} 的参数可能为 σ 的函数,因此需要作变换。

VP

$$D_{ heta}(\hat{\mathbf{x}};\sigma) = \underbrace{1 \cdot \hat{\mathbf{x}}}_{cskip} \underbrace{-\sigma}_{cout} \cdot F_{ heta} \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{\sigma^2+1}}}_{cin} \cdot \hat{\mathbf{x}}; \underbrace{(M-1) \ \sigma^{-1}(\sigma)}_{cnoise} \right)$$

VE

$$D_{ heta}(\mathbf{\hat{x}}; \sigma) = \underbrace{1 \cdot \mathbf{\hat{x}}}_{cskip} + \underbrace{\sigma \cdot F_{ heta}(\underbrace{1 \cdot \mathbf{\hat{x}}}_{cin}; \underbrace{\log\left(\frac{1}{2}\sigma\right)}_{cout})$$

注意: 这里的 VE $\hat{x} = x$

训练:通用训练框架

训练的过程,是针对从原始图像集合中采样得到的真实图像 \mathbf{x}_0 ,进行一次 σ 级别的噪声添加,得到 $\mathbf{x}_0+\mathbf{n}$,随后可构造损失函数:

$$\mathcal{L}_{diff} = \underbrace{\mathbb{E}_{\sigma,n,\mathbf{x}_0} \left[\lambda(\sigma) \left| |D_{\theta}(\hat{\mathbf{x}}; \sigma) - \mathbf{x}_{\mathbf{0}}||_2^2 \right]}_{p_{train}} \underbrace{\left[\lambda(\sigma) \left| C_{out}^2(\sigma) \right| \left| \underbrace{F_{\theta} \left(C_{in}(\sigma) \cdot (\mathbf{x}_{\mathbf{0}} + \mathbf{n}); C_{noise}(\sigma) \right)}_{\text{$\notid}$} - \underbrace{\frac{1}{C_{out}(\sigma)} \left(\mathbf{x}_{\mathbf{0}} - C_{skip}(\sigma) \cdot (\mathbf{x}_{\mathbf{0}} + \mathbf{n}) \right)}_{\text{$iiish}$ | ish} \right| ||_2^2 \right]}_{\text{$iiish}}$$
(7)

- $\sigma \sim P_{train}$,即前向噪声采样分布,由各个模型决定
- $m{n} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 m{I})$, $\mathbf{x}_0 \sim P_{data}$
- $Var(\mathbf{x}_0) = \sigma_{data}^2$
- C_{in}: 保证神经网络的输入保持单位方差(式117)

$$c_{in}(\sigma) = rac{1}{\sqrt{\sigma^2 + \sigma_{data}^2}}$$

• C_{out}, C_{skip} : 保证训练目标保持方差恒为1,同时让 C_{out}^2 被最小化,防止模型误差被放大(式138、131):

$$C_{skip}(\sigma) = rac{\sigma_{data}^2}{\sigma_{data}^2 + \sigma^2} \ C_{out}(\sigma) = rac{\sigma \cdot \sigma_{data}}{\sqrt{\sigma^2 + \sigma_{data}^2}}$$

• $\lambda(\sigma)$: 保证损失权重 w(t) = 1 (式 144):

$$\lambda = rac{\sigma^2 + \sigma_{data}^2}{(\sigma \cdot \sigma_{data})^2}$$

• 当初始化神经网络权重为0(即输出恒0),方差暂时固定某个初始值时,有:

$$\mathbb{E}(\mathcal{L})=1$$

• σ 调度:EDM认为,损失函数在加噪水平很低或很高情况下,损失函数均难以下降,因此训练噪声调度的选择如下:

$$ln(\sigma) \sim \mathcal{N}(P_{mean}, P_{std}^2)$$

其中 $P_{mean} = -1.2, P_{std} = 1.2$

• 对于 VP , 其训练调度为面向 t 的均匀分布:

$$eta(t) = (eta_{max} - eta_{min})t + eta_{min}, \quad t \sim \mathcal{U}(\epsilon_t, 1)$$

• 对于 VE ,其训练调度与EDM同样面对 σ 进行,但是为均匀调度:

$$\ln(\sigma) \sim \mathcal{U}(\ln(\sigma_{min}), \ln(\sigma_{max}))$$

VP

$$\underbrace{\mathbb{E}_{\sigma^{-1}(\sigma) \sim \mathcal{U}(\epsilon_{t},1)}}_{p_{train}} \mathbb{E}_{\mathbf{x_{0}},\mathbf{n}} \Big[\underbrace{\frac{1}{\sigma^{2}}}_{\text{损失权重}} \big\| D_{ heta} \big(\mathbf{x_{0}} + \mathbf{n}; \sigma \big) - \mathbf{x_{0}} \big\|_{2}^{2} \Big]$$

VE

$$\underbrace{\mathbb{E}_{\ln(\sigma) \sim \mathcal{U}(\ln(\sigma_{min}), \ln(\sigma_{max}))}}_{p_{train}} \mathbb{E}_{\mathbf{x_0}, \mathbf{n}} \Big[\underbrace{\frac{1}{\sigma^2}}_{\text{flf-KP}} \big\| D_{\theta} \big(\mathbf{x_0} + \mathbf{n}; \sigma \big) - \mathbf{x_0} \big\|_2^2 \Big]$$

二者的损失权重均随噪声减小而增大,即后期精细降噪过程给与更多关注

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x_0} + \mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}}{s(t)}$$

损失类型	数学形式	适用场景
残差损失	$\ D_{ heta}(\mathbf{\hat{x}}) - \mathbf{x}_0\ ^2$	直接去噪
噪声损失	$\ F_{ heta}(\mathbf{x}) - oldsymbol{\epsilon}\ ^2$	DDPM 类模型
分数匹配	$\ N_{ heta}(\mathbf{x}) - abla \log p(\mathbf{x})\ ^2$	基于分数的生成模型

• $D_{ heta}$ 是逐步去噪后的结果,可能导致误差积累,而直接预测比较简单的单步噪声分布 F heta 更为容易学习。

反向:通用推理过程

通用 概率流常微分方程 PFODE

▶ 通用反向:对于任意一个扩散模型加噪SDE(公式(3)),通过福克普朗克方程,可进一步推导出一个常微分方程 (ODE),也叫概率流常微分方程(PFODE):

$$d\mathbf{x_t} = \left[f(t)\mathbf{x_t} - \frac{1}{2}g^2(t) \bigtriangledown_{\mathbf{x_t}} log p_t(\mathbf{x_t}) \right] dt$$
(8)

注意,这里的 $p_t(\mathbf{x}_t)$ 可以描述为:

$$egin{aligned} p_t(x) &= \int_{\mathcal{R}^d} p_{0t}(x|x_0) p_{data}(x_0) dx_0 \ &= s(t)^{-d} [p_{data} * \mathcal{N}(0, \sigma^2(t)\mathbf{I})](\mathbf{x}/s(t)) \ &= s(t)^{-d} p(\mathbf{x}/s(t); \sigma(t)) \end{aligned}$$

- * 表示卷积操作
- $\mathbf{x}/s(t)$ 表示分布在此处的取值

$$\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{t}(\mathbf{x}_{t}) = \nabla_{\mathbf{x}} \log s(t)^{-d} + \nabla_{\mathbf{x}} \log[p_{t}(\frac{\mathbf{x}_{t}}{s(t)}; \sigma(t))] = \nabla_{\mathbf{x}} \log[p_{t}(\frac{\mathbf{x}_{t}}{s(t)}; \sigma(t))]$$

$$= \frac{1}{s(t)} \nabla_{\hat{\mathbf{x}}} \log p(\hat{\mathbf{x}}; \sigma(t)) = \frac{1}{s(t)\sigma^{2}(t)} (D_{\theta}(\hat{\mathbf{x}}; \sigma(t)) - \hat{\mathbf{x}})$$
(10)

分数函数的方向由当前噪声图谱 $\hat{\mathbf{x}}$ (低概率密度)指向神经网络预测的真实的分布 $\mathcal{D}_{\theta}(\hat{\mathbf{x}};\sigma(t))$ (高概率密度)

▶ 通用反向:因此,在确定起点 $\mathbf{x_0}$ (前向)或 $\mathbf{x_N}$ (逆向)前提下,式(8)解的分布 $p(\mathbf{x_t})$,即 $\mathbf{x_t}$ 的边缘概率密度与加噪过程SDE求解得到的分布是完全相同:

$$d\boldsymbol{x}_{t} = \left[\left(\frac{\dot{\sigma}(t)}{\sigma(t)} + \frac{\dot{s}(t)}{s(t)} \right) \boldsymbol{x}_{t} - \frac{\dot{\sigma}(t)s(t)}{\sigma(t)} D_{\theta} \left(\frac{\boldsymbol{x}_{t}}{s(t)} ; \sigma(t) \right) \right] dt$$
(11)

说明:针对PFODE,当dt取反时,便可实现前向加噪和后向加噪的切换,因此式(8)、式(9)、式(11)都可以兼顾前向和反向的描述,但**不可用PFODE**实现图像加噪,因为PFODE在给定起点时,其终点是确定的,于是变形成非分布的一对一输入输出样本匹配对。扩散模型建模的是真实分布与完全噪声分布之间的关系,必须通过随机采样配对实现,因此不能用PFODE实现图像加噪,而是仅能用于反向采样去噪

通用确定性采样

公式(11)的 \mathcal{D}_{θ} 可用神经网络模拟,具体为公式(6),随后通过使用ODE求解器,如一阶Euler,二阶Heun,在给定起点 X_N 下,逐步采样获得生成图像。**注意:训练过程的时间步和采样过程的时间步定义不同**,EDM采样过程的噪声水平定义为:

$$\sigma_{i < N} = \left(\sigma_{max}^{\frac{1}{\rho}} + \frac{i}{N-1} \left(\sigma_{min}^{\frac{1}{\rho}} - \sigma_{max}^{\frac{1}{\rho}}\right)\right)^{
ho} and \ \sigma_N = 0$$
 (12)

Algorithm 1 Deterministic sampling using Heun's 2^{nd} order method with arbitrary $\sigma(t)$ and s(t).

```
1: procedure HEUNSAMPLER(D_{\theta}(x; \sigma), \sigma(t), s(t), t_{i \in \{0,...,N\}})
            sample x_0 \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \ \sigma^2(t_0) \ s^2(t_0) \ \mathbf{I})
2:
                                                                                                                                                     \triangleright Generate initial sample at t_0
            for i \in \{0, ..., N-1\} do
3:
                                                                                                                                                  \triangleright Solve Eq. 4 over N time steps
                   d_i \leftarrow \left(\frac{\dot{\sigma}(t_i)}{\sigma(t_i)} + \frac{\dot{s}(t_i)}{s(t_i)}\right) x_i - \frac{\dot{\sigma}(t_i)s(t_i)}{\sigma(t_i)} D_{\theta}\left(\frac{x_i}{s(t_i)}; \sigma(t_i)\right)
4:
                                                                                                                                                                   \triangleright Evaluate dx/dt at t_i
                   x_{i+1} \leftarrow x_i + (t_{i+1} - t_i)d_i
5:
                                                                                                                                                \triangleright Take Euler step from t_i to t_{i+1}
                   if \sigma(t_{i+1}) \neq 0 then \forall x \not \in X_i \rightarrow 0 \Rightarrow \text{Apply } 2^{\text{nd}} order correction unless \sigma goes to zero
6:
                           d_i' \leftarrow \left(\frac{\dot{\sigma}(t_{i+1})}{\sigma(t_{i+1})} + \frac{\dot{s}(t_{i+1})}{s(t_{i+1})}\right) \underbrace{x_{i+1}}_{s(t_{i+1})} - \frac{\dot{\sigma}(t_{i+1})s(t_{i+1})}{\sigma(t_{i+1})} D_{\theta}\left(\frac{x_{i+1}}{s(t_{i+1})}; \sigma(t_{i+1})\right) > \text{Eval. } dx/dt \text{ at } t_{i+1}
7:
8:
                           x_{i+1} \leftarrow x_i + (t_{i+1} - t_i)(\frac{1}{2}d_i + \frac{1}{2}d_i')
                                                                                                                                                \triangleright Explicit trapezoidal rule at t_{i+1}
                                                                                                                                                \triangleright Return noise-free sample at t_N
9:
             return x_N
```

通用 随机微分方程

▶ 通用: 逆向随机形式 SDE 为:

$$d\mathbf{x} = \left[\mathbf{f}(t)\mathbf{x}_t - g(t)^2 \nabla_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x}) \right] dt + g(t) d\bar{\mathbf{w}}, \tag{a}$$

SDE适用于前向和反向过程,因此这里特别分别给出了其在扩散模型中的前向、反向过程定义。而PFODE在扩散模型领域只适用于反向过程,见式(8)。

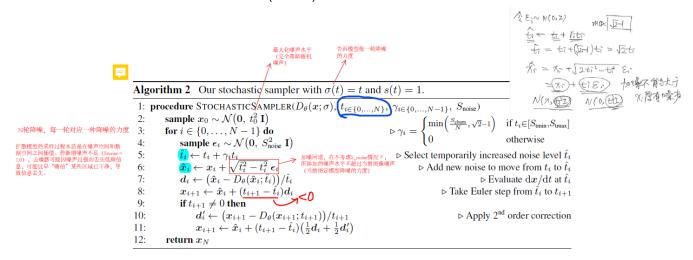
当 g(t) = 0 时,方程变为 $d\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{x},t)dt$,此时不能称为 扩散模型的确定性采样过程,因为扩散项以及被消除了,不再是扩散模型的范畴。真正确定性逆向采样参见式(8)。

思考:既然 $-g(t)^2 \bigtriangledown_{\mathbf{x}} \log p_t(\mathbf{x})$ 已经能够为逆向采样过程提供降噪方向正确的、降噪强度确定的保证了,为什么还要后面的随机项?保持生成多样性,避免坍缩到单一模式。

#猜想: 变成随机后二分之一没了,但多了一个随机项

非通用 随机性采样

随机性采样过程方法众多,甚至和逆向SDE公式本身"关系不大"。EDM论文也表示它设计的机性采样过程不是一种通用的SDE求解器,而是一种面向扩散模型问题的垂类SDE求解器。EDM设计的随机性采样过程非常简单,其核心就是在确定性采样的基础上增加了"回退"操作,也即先对样本额外加噪,再采用ODE求解器采样获得下一个时间点的图像。这种回退操作可以有效修正前面迭代步骤产生的误差,所以通常相比PFODE的生成效果更好,但同时也要花费更多的采样步数。EDM提出的SDE采样器(求解器)基本算法流程如图所示:



• 特点: EDM采取 加噪 后立即利用最新状态计算梯度并更新,而欧拉离散化方法 采取先更新再叠加噪声,没有立刻更新梯度基准,导致离散误差在 Δ_t 较大时增大。

VP (DDPM / DDIM)

VP(Variance Perserving),噪声调度满足信号与噪声的方差总和恒定,前向公式:

$$\mathbf{x}_{t} = \sqrt{1 - \beta_{t}} \mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{\beta_{t}} \epsilon$$

$$\mathbf{x}_{t} = \sqrt{\overline{\alpha_{t}}} \mathbf{x}_{0} + \sqrt{1 - \overline{\alpha_{t}}} \epsilon$$

$$\hat{\mathbf{x}}_{t} = \frac{\mathbf{x}_{t}}{\sqrt{\overline{\alpha_{t}}}} = \mathbf{x}_{0} + \frac{\sqrt{1 - \overline{\alpha_{t}}}}{\sqrt{\overline{\alpha_{t}}}} \epsilon$$

$$d\mathbf{x} = -\frac{1}{2} \beta(t) \mathbf{x} dt + \sqrt{\beta(t)} d\mathbf{w}$$
(16)

对离散递推式取极限可以直接导出连续式(16)。

VP一步加噪式中的 $\bar{\sigma}=\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}$ 表示原框架下的图谱噪声,其融合了尺度缩放项 s(t),而在同一框架下, $\sigma(t)$ 才是前向过程所叠加的噪声标准差:

$$egin{aligned} ar{\sigma}(t) &= \sqrt{1-ar{lpha}_t} \ s(t) &= \sqrt{ar{lpha}_t} \ \sigma(t) &= rac{\sqrt{1-ar{lpha}_t}}{\sqrt{ar{lpha}_t}} \end{aligned}$$

满足

$$s(t) = rac{1}{\sqrt{\sigma^2(t)+1}}$$

上面的符号与式(2)对应。

漂移项f(t):

$$f(t) = -rac{1}{2}eta(t)$$

扩散项 g(t):

$$g(t) = \sqrt{\beta(t)} \tag{18}$$

式(17)、式(18)带入式(b)得到VP逆向SDE过程:

$$d\mathbf{x} = \frac{1}{2}\beta(t)\sigma(t)^{2}\nabla_{\mathbf{x}}\log p(\mathbf{x})dt + \sqrt{\beta(t)}d\mathbf{w}$$

$$= \left[-\frac{1}{2}\beta(t)\mathbf{x} - \beta(t)\nabla_{\mathbf{x}}\log p(\mathbf{x})\right]dt + \sqrt{\beta(t)}d\mathbf{w}$$
(19)

VE (SMLD)

VE(Variance Exploding),VE过程的噪声调度允许 **噪声方差无限增长**,**前向**公式:

$$\mathbf{x}_{t} = \mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{\sigma^{2}(t) - \sigma^{2}(t-1)\epsilon}$$

$$\mathbf{x}_{t} = \mathbf{x}_{0} + \sigma(t)\epsilon$$

$$d\mathbf{x} = \sqrt{\frac{d\bar{\sigma}^{2}(t)}{dt}}d\mathbf{w}$$
(20)

其中, $\bar{\sigma}(t) = s(t) \cdot \sigma(t) = \sigma(t)$

扩散项:

$$g(t) = \sqrt{\frac{d\bar{\sigma}^2(t)}{dt}} = \sqrt{\frac{d\sigma^2(t)}{dt}}$$
 (22)

漂移项:

$$f(t) = 0$$

带入式(a)得到与song等人定义一致的VE逆向过程:

$$d\mathbf{x} = [-g(t)^{2} \bigtriangledown_{x} \log p_{t}(\mathbf{x})]dt + g(t)d\mathbf{w}$$

$$= [-\frac{d\sigma^{2}(t)}{dt} \bigtriangledown_{x} \log p_{t}(\mathbf{x})]dt + \sqrt{\frac{d\sigma^{2}(t)}{dt}}d\mathbf{w}$$
(23)

附录

【补充1】如何理解 VP 方差保持与 VE 方差爆炸

考虑VP递推:

$$x_t = \sqrt{lpha_t} x_{t-1} + \sqrt{1 - lpha_t} \epsilon$$

由方差性质:

$$Var(x_t) = lpha_t Var(x_{t-1}) + (1-lpha_t) \cdot 1$$

由数学归纳法,假设 $Var(x_{t-1}) = 1$,有:

$$Var(x_t) = lpha_t + 1 - lpha_t = 1$$

因此方差是保持的。

而VE中, $Var(x_t) = 1 - \alpha_t = \beta_t$,由于噪声水平逐步增大,因此方差是爆炸式增大的。

【补充2】DDPM与VP的关系

DDPM是VP的离散化形式

模型	前向加噪公式
VP SDE	$d\mathbf{x} = -rac{1}{2}eta(t)\mathbf{x}dt + \sqrt{eta(t)}d\mathbf{w}$
DDPM	$egin{aligned} \mathbf{x}_t &= \sqrt{1-eta_t}\mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{eta_t}\epsilon \ \mathbf{x_t} &= \sqrt{ar{lpha}_t}\mathbf{x_0} + \sqrt{1-ar{lpha}_t}\epsilon \end{aligned}$

模型	反向采样公式
VP SDE	$d\mathbf{x} = [-rac{1}{2}eta(t)\mathbf{x} - eta(t) abla_x \log p_t(x)]dt + \sqrt{eta(t)}d\mathbf{ar{w}}$
DDPM	$\mathbf{x}_{t-1} = rac{1}{\sqrt{lpha_t}}igg(\mathbf{x}_t - eta_t rac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t, t)}{\sqrt{1 - ar{lpha}_t}}igg) + \sqrt{eta_t}\epsilon_t \ \mathbf{x}_{t-1} = rac{1}{\sqrt{1 - eta_t}}igg(\mathbf{x}_t + eta_t rac{D_{ heta}(rac{\mathbf{x}_t}{s(t)}; \sigma(t)) - rac{\mathbf{x}_t}{s(t)}}{s(t)\sigma^2(t)}igg) + \sqrt{eta_t}\epsilon_t$

VP中的变量定义与转化

1.
$$\alpha_t = 1 - \beta_t$$

2.
$$\bar{\alpha}_t = \prod_{s=1}^t (1 - \beta_s)$$

在实践中,有如下近似:

$$\log ar{lpha}_t = \sum_{i=1}^t \log lpha_i pprox \int_0^t \log(1-eta_s) ds$$

这里的 $\log(1-\beta_s)\approx -\beta_s$,表示在0处的泰勒展开 因此

$$ar{lpha}_tpprox \exp\left(-\int_0^teta_sds
ight)$$

 β_t 在实践中被定义为时间线性函数

$$eta(t) = (eta_{max} - eta_{min})t + eta_{min} \ \int_0^t eta_s ds = \int_0^t (eta_{\min} + s(eta_{\max} - eta_{\min}))ds = eta_{\min} t + rac{t^2}{2}(eta_{\max} - eta_{\min})$$

故

$$ar{lpha_t} = exp(-eta_{\min}t + rac{t^2}{2}(eta_{\max} - eta_{\min}))$$

- $3. \, \bar{\sigma}(t) = s(t)\sigma(t) = \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}$,即原框架下 t 时刻的图像噪声水平
- $4. \ s(t) = \sqrt{\bar{lpha_t}}$,与式(2)对应
- $5.~\sigma(t)=rac{\sqrt{1-ar{lpha_t}}}{\sqrt{ar{lpha_t}}}$,与式(2)对应

【其他】

1. EDM前向

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{\sigma^2(t) - \sigma^2(t-1)}\epsilon$$
 $\mathbf{x}_t = \mathbf{x_0} + \sigma(t)\epsilon$
 $d\mathbf{x} = \sqrt{\frac{d\bar{\sigma}^2(t)}{dt}}d\mathbf{w}$

与VE一致,但噪声分布不同:

$$\ln(\sigma(t)) = \ln(t) \sim \mathcal{N}(P_{mean}, P_{std}^2)$$

2. Wiener过程

 $w_t \sim \mathcal{N}(0,t)$ 是一个布朗运动(Wiener) 过程

- 独立增量性: $w_{t+\triangle t}-w_t$ 与 w_t 独立
- 布朗运动的增量服从正态分布: $w_{t+\triangle t} w_t \sim \mathcal{N}(0, \triangle t)$
- $\diamondsuit \triangle_t \rightarrow 0, d_w \sim \mathcal{N}(0, d_t)$
 - 布朗运动无穷小增量的平方 $d_w^2 = d_t$ 为确定性量
 - 重参数化展开: $d_w = \sqrt{d_t} \cdot \epsilon, \epsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$

3. EDM论文相关

Song et al. present a stochastic differential equation (SDE) that **maintains** the desired distribution p as sample x evolves over time

若一个SDE的解 \mathbf{x}_t 的边际分布 p_t 满足:

$$\lim_{t\to\infty} p_t(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x})$$
 且 一旦达到 p 后,分布不再随时间变化

则称 p_t 是该SDE的**不变分布**(或稳态分布)。此时,SDE"保持"了分布 p_t 。

•正向过程:

从数据分布 p_{data} 出发,通过SDE逐渐将数据破坏为噪声分布纯粹的高斯分布 ϵ 。

•逆向过程:

从噪声 ϵ 出发,通过SDE将样本演化回 p_{data} 。

To specify the ODE, we must first choose a schedule $\sigma(t)$ that defines the desired noise level at time t.

在PFODE中, $\sigma(t)$ **直接表示 t 时刻数据的噪声水平(累积结果)**,而非单步添加量。这样一来,在前向加噪训练时,针对某一时刻 t 噪声水平 $\sigma(t)$,直接向 $\mathbf{x_0}$ 添加 $\mathcal{N} \sim (0, \sigma^2(t))$ 的高斯随机噪声即可。在反向降噪采样时,也可以直接告诉神经网络当前图像的噪声水平 $\sigma(t)$,从而做出**相应力度**的降噪操作。

The score function has the remarkable property that it does not depend on the generally intractable normalization constant of the underlying density function $p(\mathbf{x}; \sigma)$

Score Function它不依赖于概率密度函数 p(x;σ) 的归一化常数(normalization constant)。 假设概率密度函数可以分解为:

$$p(x;\sigma) = rac{1}{Z(\sigma)} ilde{p}(x;\sigma)$$

其中:

- $\tilde{p}(x;\sigma)$ 是未归一化的概率密度(可能难以计算积分)。
- $Z(\sigma)$ 是归一化常数(通常难以计算,尤其是高维数据)。

取对数后:

$$\log p(x; \sigma) = \log \tilde{p}(x; \sigma) - \log Z(\sigma)$$

计算梯度时:

$$abla_x \log p(x;\sigma) =
abla_x \log ilde{p}(x;\sigma) - \underbrace{
abla_x \log Z(\sigma)}_{=0}$$

由于 $Z(\sigma)$ 不依赖 x,其梯度为零,因此:

$$abla_x \log p(x;\sigma) =
abla_x \log ilde{p}(x;\sigma)$$

结论: Score 函数仅依赖于未归一化的 $\tilde{p}(x;\sigma)$,与 $Z(\sigma)$ 无关!

Excessive Langevin-like addition and removal of noise results in gradual **loss of detail** in the generated images, There is also a drift toward oversaturated colors at very low and high noise levels. We suspect that practical denoisers induce a slightly nonconservative vector field.

引入随机性(SDE,朗之万噪声步骤)虽然能修正早期采样误差,但会导致**细节丢失**和在极端噪声水平下的颜色过饱 和。

原因可能在干:

- Denoiser的过渡去噪移除了比理论值更多的噪声,破坏了朗之万扩散所需的保守向量场;
- £² 损失使得模型倾向于预测均值,忽略极端边缘细节 解决方案在于:
- 限制噪声添加的时机范围 $t_i \in [S_{t_{min}}, S_{t_{max}}]$
- 使得每次添加随机噪声的水平 S_{naise} 略微大于1抵消细节损失

【证明1】前向离散一步加噪式(2)转化为离散单步递推式

离散一步加噪形式:

$$\mathbf{x_t} = s(t)\mathbf{x_0} + s(t)\sigma(t)\epsilon$$

假设:

$$\mathbf{x}_t = \alpha_t \mathbf{x}_{t-1} + \beta_t \boldsymbol{\epsilon}_t$$

1. 期望匹配:

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}_t] = s(t)\mathbf{x}_0 = \alpha_t \mathbb{E}[\mathbf{x}_{t-1}] = \alpha_t s(t-1)\mathbf{x}_0$$

因此:

$$lpha_t = rac{s(t)}{s(t-1)}$$

2. 方差匹配:

$$\operatorname{Var}(\mathbf{x}_t) = s(t)^2 \sigma(t)^2 = \alpha_t^2 \operatorname{Var}(\mathbf{x}_{t-1}) + \beta_t^2$$

代入 $Var(\mathbf{x}_{t-1}) = s(t-1)^2 \sigma(t-1)^2$:

$$eta_t^2 = s(t)^2 \sigma(t)^2 - \left(rac{s(t)}{s(t-1)}
ight)^2 s(t-1)^2 \sigma(t-1)^2 = s(t)^2 \left(\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2
ight)$$

因此:

$$eta_t = s(t) \sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2}$$

3. 最终单步递推公式:

$$\mathbf{x}_t = \frac{s(t)}{s(t-1)} \mathbf{x}_{t-1} + s(t) \sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2} \boldsymbol{\epsilon}_t$$
 (24)

【证明2】前向加噪离散形式到连续形式的转化

原始递推式如下:

$$\mathbf{x}_t = rac{s(t)}{s(t-1)} \mathbf{x}_{t-1} + s(t) \sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2} oldsymbol{\epsilon}_t$$

两边减去 \mathbf{x}_{t-1} ,并写为极限形式:

$$\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t-\Delta t} = igg(rac{s(t)}{s(t-\Delta t)} - 1igg)\mathbf{x}_{t-\Delta t} + s(t)\sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-\Delta t)^2}oldsymbol{\epsilon}_t.$$

当时间步长 $\Delta t = t - (t-1) \rightarrow 0$ 时:

(1) 对 $s(t-\Delta t)$ 进行泰勒展开

$$egin{split} s(t-\Delta t) &pprox s(t) - s'(t) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \ rac{s(t)}{s(t-\Delta t)} &pprox rac{s(t)}{s(t) - s'(t) \Delta t} pprox 1 + rac{s'(t)}{s(t)} \Delta t \ &\left(rac{s(t)}{s(t-\Delta t)} - 1
ight) pprox rac{s'(t)}{s(t)} \Delta t \end{split}$$

当 $\Delta t \rightarrow 1$ 令:

$$f(t) = \left(rac{s(t)}{s(t-1)} - 1
ight) pprox rac{s'(t)}{s(t)}$$

(2)对 $\sigma^2(t-\Delta t)$ 泰勒展开

$$\sigma(t-\Delta t)^2pprox \sigma(t)^2-rac{d}{dt}[\sigma(t)^2]\Delta t$$

因此

$$\sigma(t)^2 - \sigma(t-\Delta t)^2 pprox 2\sigma(t)\sigma'(t)\Delta t$$

当 $\Delta t \rightarrow 1$

$$\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2 \approx 2\sigma(t)\sigma'(t)$$

因此

$$g(t) = s(t) \sqrt{\sigma(t)^2 - \sigma(t-1)^2} oldsymbol{\epsilon}_t = s(t) \sqrt{2\sigma(t)\sigma'(t)}$$

【证明3】VE 前向离散形式推导

$$dx = \sqrt{rac{d^2\sigma(t)}{dt}}dw_t$$

由欧拉离散化 $x_t = x_{t-1} + dx(t-1)$:

$$x_t = x_{t-1} + \sqrt{rac{\sigma^2(t) - \sigma^2(t - \Delta t)}{\Delta t}} \sqrt{\Delta t} \epsilon$$

令 $\Delta t = 1$ 得:

$$x_t = x_{t-1} + \sqrt{\sigma^2(t) - \sigma^2(t-1)}\epsilon$$

由迭代求和可得:

$$x_t = x_0 + \sigma(t)\epsilon$$

特别地, $\sigma(t)=\sigma_{min}(rac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}})^t$,其中 $t\sim\mathcal{U}(0,1)$ 也可由式(24)通式带入相关项得到。

【证明4】VP 前向离散形式推导

$$d\mathbf{x}_t = -rac{1}{2}eta(t)\mathbf{x}_tdt + \sqrt{eta(t)}dw_t$$

欧拉离散化:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} + (-\frac{1}{2}\beta(t)\mathbf{x}_{t-1}\Delta t + \sqrt{\beta(t)}\sqrt{\Delta t}\epsilon)$$

令 $\Delta t = 1$,得:

$$\mathbf{x}_t = (1 - rac{1}{2}eta(t))\mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{eta(t)}\epsilon$$

泰勒展开近似有: $\sqrt{1-\beta(t)}=1-\frac{1}{2}\beta(t)$ 得:

$$\mathbf{x}_t = \sqrt{1-eta(t)}\mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{eta(t)}\epsilon$$

递推求和得, $\sigma(t)^2 = 1 - e^{-\int_0^t \beta(s)ds}$:

$$\mathbf{x}_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t} \mathbf{x}_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t} \epsilon$$

特别地, $eta(t) = (eta_{max} - eta_{min})t + eta_{min}$,其中, $t \sim \mathcal{U}(\epsilon_t, 1)$

给定VP逆向SDE:

$$d\mathbf{x} = igg[-rac{1}{2}eta(t)\mathbf{x} - eta(t)
abla_x \log p_t(\mathbf{x}) igg] dt + \sqrt{eta(t)} dar{\mathbf{w}}$$

(1) 忽略扩散项

$$d\mathbf{x} = \left[-rac{1}{2}eta(t)\mathbf{x} - eta(t)
abla_x \log p_t(\mathbf{x})
ight] dt$$

(2) 欧拉离散化

对时间 (t) 离散化,步长 Δt ,逆向时间从 (t) 到 (t-1):

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + igg[-rac{1}{2}eta_t\mathbf{x}_t - eta_t
abla_x\log p_t(\mathbf{x}_t) igg] (-\Delta t)$$

 $\diamondsuit \Delta t = 1$

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + rac{1}{2}eta_t\mathbf{x}_t + eta_t
abla_x\log p_t(\mathbf{x}_t)$$

(3) 得分函数替换(残差形式):

$$abla_x \log p_t(\mathbf{x}_t) pprox -rac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t,t)}{\sqrt{1-ar{lpha}_t}} = rac{1}{s(t)\sigma^2(t)}(D_{ heta}(rac{\mathbf{x}_t}{s(t)};\sigma(t)) - rac{\mathbf{x}_t}{s(t)})$$

- 这里 ϵ_{θ} 表示噪声方向
- 前者为噪声预测形式,后者为残差形式。
- $\sqrt{1-ar{lpha}_t}=ar{\sigma_t}$
- \mathbf{x}_t 表示原模型输入 F_{θ} 的形式

直观理解:分母 $\sqrt{1-ar{lpha_t}}=s(t)\sigma(t)$,分子量纲为 $\sigma(t)\cdot\epsilon_{ heta}$,因此需要再除一份 $\sigma(t)$

(3') 得分函数替换(噪声形式):

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + rac{1}{2}eta_t\mathbf{x}_t - eta_trac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t,t)}{\sqrt{1-ar{lpha}_t}}$$

$$\mathbf{x}_{t-1} = \left(1 + \frac{1}{2}\beta_t\right)\mathbf{x}_t - \beta_t \frac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t,t)}{\sqrt{1-ar{lpha}_t}}$$

此处 $1 + \frac{1}{2}\beta_t$ 泰勒展开近似

$$\mathbf{x}_{t-1} pprox rac{1}{\sqrt{lpha_t}}igg(\mathbf{x}_t - \sqrt{lpha_t}eta_trac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t,t)}{\sqrt{1-ar{lpha}_t}}igg)$$

由于 β_t 近似0, $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 近似1,因此 $\sqrt{\alpha_t}\beta_t \approx \beta_t$

(4) 加入随机噪声

噪声预测形式:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left(\mathbf{x}_t - \beta_t \frac{\epsilon_{\theta}(\mathbf{x}_t, t)}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}} \right) + \sqrt{\beta_t} \epsilon_t$$

残差预测形式:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta_t}} \Bigg(\mathbf{x}_t + \beta_t \frac{D_{\theta}(\frac{\mathbf{x}_t}{s(t)}; \sigma(t)) - \frac{\mathbf{x}_t}{s(t)}}{s(t)\sigma^2(t)} \Bigg) + \sqrt{\beta_t} \epsilon_t$$

【证明6】VE 反向形式离散化推导过程

由VE反向连续SDE形式:

$$d\mathbf{x} = \sqrt{rac{d\sigma^2(t)}{dt}}dw_t$$

可知

$$g(t) = \sqrt{rac{d\sigma^2(t)}{dt}}$$

对VE反向SDE连续形式欧拉离散化:

$$d\mathbf{x} = [-g(t)^2 \bigtriangledown_x \log p_t(\mathbf{x})]dt + g(t)d\mathbf{w}$$

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + d\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_t + rac{d^2\sigma_t}{dt} \cdot rac{\epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t,t)}{ar{\sigma}_t} + \sqrt{rac{d^2\sigma_t}{dt}} \sqrt{dt}\epsilon_t$$

进一步,令 $\Delta t = 1$:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + rac{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2}{ar{\sigma}_t} \epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t, t) + \sqrt{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2} \epsilon_t$$

由于 $\bar{\sigma}(t) = \sigma(t)$, 因此:

噪声预测形式:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t + rac{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2}{\sigma_t} \epsilon_{ heta}(\mathbf{x}_t, t) + \sqrt{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2} \epsilon_t$$

残差预测形式:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t - (\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2) \frac{1}{s(t)\sigma^2(t)} (D_{\theta}(\frac{\mathbf{x}_t}{s(t)}; \sigma(t)) - \frac{\mathbf{x}_t}{s(t)}) + \sqrt{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2} \epsilon_t$$

由于 s(t) = 1,有:

$$\mathbf{x}_{t-1} = \mathbf{x}_t - rac{(\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2)}{\sigma_t^2} (D_{ heta}(\mathbf{x}_t; \sigma_t) - \mathbf{x}_t) + \sqrt{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2} \epsilon_t$$

实践

VP

- 训练
 - 时间调度: $t \sim \mathcal{U}(\epsilon_t, 1)$
 - 噪声调度: $\sigma(t)=\sqrt{e^{rac{1}{2}eta_dt^2+eta_{min}t}-1}$
 - 损失权重: $\lambda(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2}$
- 采样
 - 时间调度: $t \sim 1 + \frac{i}{N-1} (\epsilon_s 1)$
 - 噪声调度: $\sigma(t) = \sqrt{e^{rac{1}{2}eta_dt^2 + eta_{min}t} 1}$
 - 缩放系数: $s(t) = \frac{1}{\sqrt{1-\sigma^2}}$

VE

- 训练
 - 时间调度: $t \sim \mathcal{U}(\ln(\sigma_{min}), \ln(\sigma_{max}))$
 - 噪声调度: $\sigma(t) = \sigma_{min}(rac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}})^t$,人为定义
 - 损失权重: $\lambda(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2}$
- 采样
 - 时间调度: $t \sim \sigma_{max}^2(rac{\sigma_{min}^2}{\sigma_{max}^2})^{rac{i}{N-1}}$
 - 噪声调度: \sqrt{t} ,理论值
 - 缩放系数: s(t) = 1

EDM

- 训练
 - 时间调度:无
 - 噪声调度: $\ln(\sigma) \sim \mathcal{N}(P_{mean}, P_{std}^2)$
 - 损失权重: $\frac{\sigma^2 + \sigma_{data}^2}{(\sigma \cdot \sigma_{data})^2}$
- 采样
 - 。 时间调度: $(\sigma_{max}^{rac{1}{
 ho}}+rac{i}{N-1}(\sigma_{min}^{rac{1}{
 ho}}-\sigma_{max}^{rac{1}{
 ho}}))^
 ho$
 - 噪声调度: σ(t) = t
 - 缩放系数: s(t) = 1

VE、EDM采用的是基于sigma的均匀分布采样训练,需要避免极端噪声 VP采用的是基于时间均匀分布的采样训练,可以覆盖全部时间范围