Ускорение семплирования из диффузионных моделей с использованием состязательных сетей

Охотников Никита Владимирович

МФТИ

2023

Цели исследования

Цель

Модификацировать классическую диффузионную модель для существенного ускорения процесса семплирования

Задача

Проанализировать способы моделирования мультимодального распределения в обратном диффузионном процессе

Предлагается

Использовать неявную генеративную модель – состязательную сеть – на каждом шаге диффузионного процесса

Необходимо

Рассмотреть различные постановки минимизацонной задачи для используемой модели

Неявное моделирование обратного диффузионного процесса

Диффузионный процесс

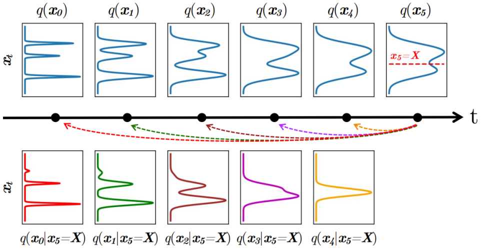
- Прямой:

$$q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \mathbf{x}_{t-1}\sqrt{1-\beta_t}, \beta_t \mathbf{I})$$

где $t = \overline{0, T}$, $\mathbf{x}_0$ – семпл из исходного распределения, $\mathbf{x}_t$ – семпл на шаге t, $\beta_t \in (0, 1)$

- Обратный:

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) \underset{T \gg 1}{\approx} \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \mu_\theta(\mathbf{x}_t, t), \Sigma_\theta(\mathbf{x}_t, t))$$



Основные предположения

- Марковость обратного процесса
- Нормальность и следовательно унимодальность $p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)$

Предложение

- Использовать неявную модель для восстановления распределения

Мотивация

- Моделирование мультимодального распределения для существенного уменьшения T

https://doi.org/10.48550/arxiv.2112.07804

Диффузионная модель

Описание

В основе модели лежит постепенное добавление случайного нормального шума с коэффициентом $\beta_t \in (0, 1)$ в семпл $\mathbf{x}_0$ из исходного распределения в прямом процессе и постепенное восстановление распределения в обратном.

Прямой процесс

$$q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \mathbf{x}_{t-1}\sqrt{1-\beta_t}, \beta_t \mathbf{I})$$

где $t = \overline{0, T}$, $\mathbf{x}_t$ – семпл на шаге t. В таком случае, принимая $\alpha_t = 1 - \beta_t$, $\overline{\alpha_t} = \prod_{i=1}^{t} \alpha_i$ можно записать:

$$q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \sqrt{\overline{\alpha_t}}\mathbf{x}_0, (1-\overline{\alpha_t})\mathbf{I})$$

Таким образом, при достаточно больших T со сколь угодно большой точностью $\mathbf{x}_T \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$, а значит обратный процесс начинается с нормального шума.

Обратный процесс

В приближении $T \gg 1$ распределение каждого следующего семпла в обратном процессе обусловлено только на предыдущий, а также нормально.

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) \underset{T \gg 1}{\approx} \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \mu_\theta(\mathbf{x}_t, t), \Sigma_\theta(\mathbf{x}_t, t))$$

Если $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_0^1 \dots \mathbf{x}_0^n) \sim p_0(\mathbf{x})$, то из метода максимального правдоподобия:

$$\theta = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}}\, p(\mathbf{X}|\theta) = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{x}_0^i|\theta)$$

После некоторых математических преобразований получаем минимизационную задачу:

$$\sum_{t=1}^{n} \mathbb{E}_{\mathbf{x_1} \dots \mathbf{x}_T} KL\left(q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) \;||\; p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)\right) \underset{\theta}{\longrightarrow} \min$$

https://doi.org/10.48550/arxiv.2006.11239

Постановка задачи

Проблема

При существенном уменьшении числа шагов обратного диффузионного процесса ($T \gtrsim 1$) предположения марковости и тем более нормальности $p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)$ очевидно не верны. Кроме того, $p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)$ мультимодальное.

Задача

Предложить неявную модель для аппроксимации мультимодального распределения в обратном процессе.

Метод

По аналогии с классической диффузионной моделью будем минимизировать некоторую меру близости между распределениями D_{adv}, но при помощи неявной модели

$$\sum_{t=1}^{n} \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_T} D_{adv} \left(q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) \, || \, p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) \right) \underset{\theta}{\longrightarrow} \min$$

где D_{adv}, в случае состязательных сетей, есть некоторая f-дивергенция или метрика Вассерштайна.

Введение GAN моделей

Дискриминатор

Зададим дискриминатор как $D_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t)$, где φ – обучаемые параметры.
Для начала используем схему тренировки стандартного GAN[1], как ранее было предложено[2], тогда задача минимизации для дискриминатора:

$$\min_{\varphi} \sum_{t \geqslant 1}^{n} \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)}[\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[-\log(D_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t))] + \mathbb{E}_{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[-\log(1 - D_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t))]]$$

Генератор

Введем генератор $G_\theta(\mathbf{x}_{t-1}^{fake}, \mathbf{z}, t)$ с параметрами θ, латентной переменной $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$, обусловленный на $\mathbf{x}_{t-1}^{fake}$ и порождающий семплы из исходного распределения. В таком случае целевое распределение в обратном диффузионном процессе:

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) := \int p_\theta(\mathbf{x}_0|\mathbf{x}_t) q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 = \int p(z) q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0 = G_\theta(\mathbf{x}_t, \mathbf{z}, t)) d\mathbf{z}$$

При известном дискриминаторе тренируем генератор на максимизацию

$$\max_{\theta} \sum_{t \geqslant 1}^{n} \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)} \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[\log(D_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t))]$$

[1] https://doi.org/10.48550/arxiv.1406.2661
[2] https://doi.org/10.48550/arxiv.2112.07804

Альтернативные схемы тренировки

Семейство F-дивергенций

F-дивергенции – семейство функций, определяемых как

$$D_f(Q||P) = \int_{\mathcal{X}} p(\mathbf{x}) f\left(\frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}\right) d\mathbf{x},$$

где f – выпуклая непрерывная слева функция, такая что $f(1) = 0$ называемая порождающей.
Произвольную f-дивергенцию можно оценить снизу, используя сопряженную к f функцию f^*:

$$D_f(Q||P) \geqslant \sup_{T \in \mathcal{T}} \left(\mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim Q}[T(\mathbf{x})] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim P}[f^*(T(\mathbf{x}))]\right),$$

где $\mathcal{T}$ – произвольный класс функций $T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$.

Минимизируемый функционал

Генератор распределения P: $G = G_\theta$,
модель V_ω приближающая функцию T: $T = T_\omega = g_f(V_\omega)$, где g_f – функция активации.
В таком случае целевой фукнционал:

$$F(\theta, \omega) = \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim Q}[g_f(V_\omega(\mathbf{x}))] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim P_\theta}[f^*(g_f(V_\omega(\mathbf{x})))].$$

Будем подставлять частные случаи этого функционала в схему тренировки диффузионной модели аналогично стандартному GAN.

Альтернативные схемы тренировки

Рассматриваемые частные случаи

- Квадрат растояния Хелингера

$$\mathrm{H}^2(Q||P) - \frac{1}{2}\int_{\mathcal{X}}\left(\sqrt{q(\mathbf{x})} - \sqrt{p(\mathbf{x})}\right)^2 d(x), \quad f^*_{H^2}(t) = \frac{t}{1-t}, \quad g_{f_{H^2}}(V) = 1 - \exp(V).$$

$$\min_{\theta}\max_{\varphi}\sum_{t\geqslant 1}^{n}\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)}\left[\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[-\exp\left(V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)\right)] - \mathbb{E}_{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[\exp\left(-V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)\right)]\right]$$

- Обратная KL-дивергенция

$$\text{Reverse-KL}(Q||P) = \mathrm{KL}(P||Q) = \int\limits_{\mathcal{X}} p(\mathbf{x})\log\frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})}d\mathbf{x}, \quad f^*_{R-KL}(t) = -1-\log(-t), \quad g_{f_{R-KL}}(V)$$

$$\min_{\theta}\max_{\varphi}\sum_{t\geqslant 1}^{n}\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)}\left[\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[-\exp\left(V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)\right)] + \mathbb{E}_{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}[1 + V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)]\right].$$

- Total variation distance

$$\delta(Q||P) = \sup_x|Q(x) - P(x)|, \quad f^*_\delta(t) = t, \quad g_{f_\delta}(V) = \frac{1}{2}\tanh(v).$$

$$\min_{\theta}\max_{\varphi}\sum_{t\geqslant 1}^{n}\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)}\left[\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}\left[\tanh\left(V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)\right)\right] - \mathbb{E}_{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}\left[\tanh\left(V_\varphi(\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_t,t)\right)\right]\right].$$

Альтернативные схемы тренировки

Wasserstein distance

Отдельно рассматриваем wasserstein distance – другую меру близости распределений, не входящую в семейство f-дивергенций

$$W(Q||P) = \inf_{\gamma \in \Gamma(Q,P)} \mathbb{E}_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\sim\gamma} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|,$$

Где Γ – множество всех совместных распределений $\gamma(x, y)$ таких, что $\int \gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} = P(\mathbf{y}), \ \int \gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} = Q(\mathbf{x})$.

Пользуясь, двойствененостью Канторовича-Рубинштейна получаем:

$$\begin{cases} \max\limits_{\varphi} \left(\mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim Q}[f_\varphi(\mathbf{x})] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim P_\theta}[f_\varphi(\mathbf{x})] \right), \\ \|f\|_L \leqslant K, \end{cases}$$

где $\|f_\varphi\|_L \leqslant K$ – K-липшицевы функции, приближаемые нейросетью с параметрами φ, θ – параметры генератора для распределения P.

Итоговая задача оптимизации:

$$\begin{cases} \min\limits_{\theta} \max\limits_{\varphi} \sum\limits_{t\geqslant 1}^{n} \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)} \left[\mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} [f_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t)] - \mathbb{E}_{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} [f_\varphi(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t)] \right], \\ \|f_\varphi\|_L \leqslant K. \end{cases}$$

Вычислительный эксперимент

Цели

- Анализ качества семплов в зависимости от количества шагов обратного процесса T для DDPM
- Достижение сравнимого качества для малых $T \leqslant 10$ с использованием GAN
- Анализ применимости альтернативных состязательных сетей

Метрика качества

Fréchet inception distance или FID-score, в предположение нормальности вычисляется как:

$$\mathbf{FID}(\mathcal{N}(\mu, \Sigma), \mathcal{N}(\mu', \Sigma'))^2 = \|\mu - \mu'\|_2^2 + \mathbf{tr}\left(\Sigma + \Sigma' - 2\left(\Sigma^{\frac{1}{2}} \cdot \Sigma' \cdot \Sigma^{\frac{1}{2}}\right)^{\frac{1}{2}}\right).$$

В данное выражение подставляем выход модели InceptionV3[3] для реальных и сгенерированных данных.

Данные

Fashion-MNIST[4] – 60000 черно-белых картинок 28×28

Архитектура

Генеративная сеть – собственная реализация U-Net[5] модели.
Дискриминативная – сжимающая половина генеративной и выходной линейный слой.

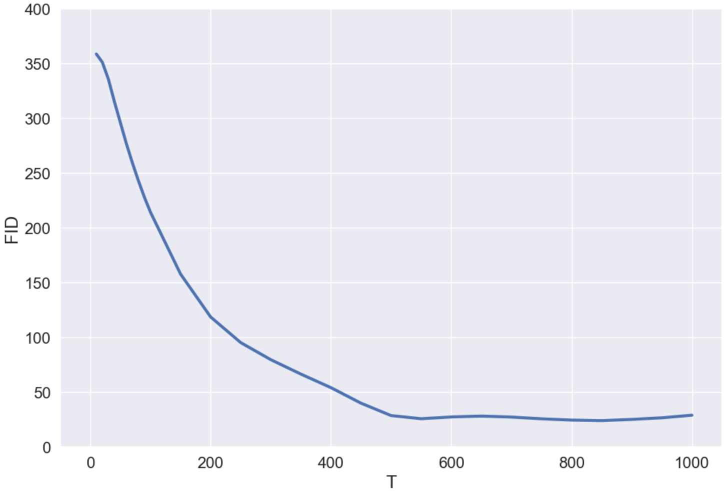
[3] https://doi.org/10.48550/arXiv.1512.00567

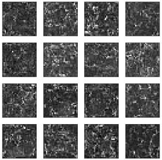
[4] http://arxiv.org/abs/1708.07747

[5] http://arxiv.org/abs/1505.04597

Вычислительный эксперимент

Диффузионная модель





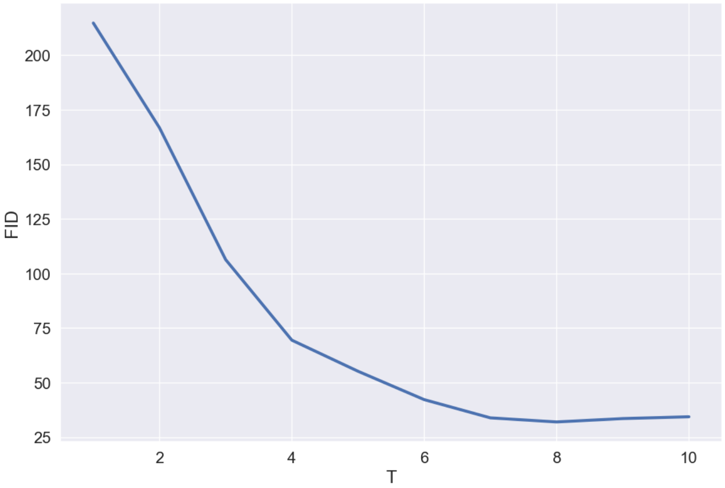
(a) T = 50

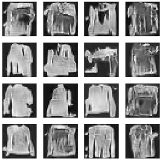
(b) T = 300

(c) T = 1000

Вычислительный эксперимент

DDGAN с JS-дивергенцией





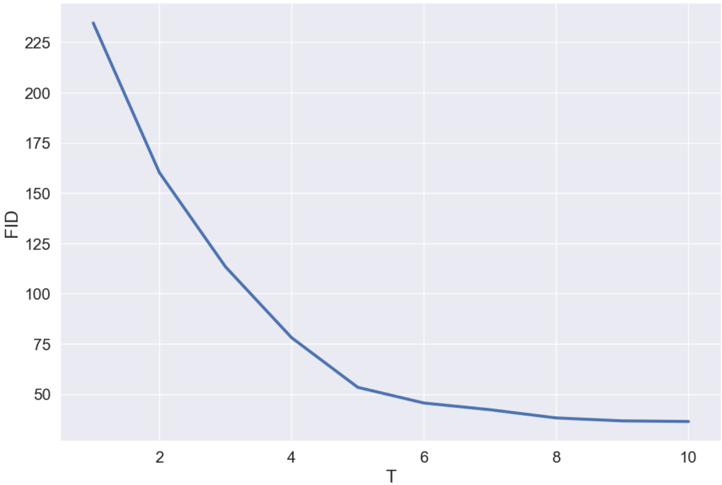
(a) T = 3

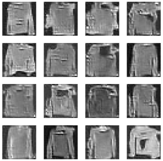
(b) T = 5

(c) T = 10

Вычислительный эксперимент

DDGAN с H^2





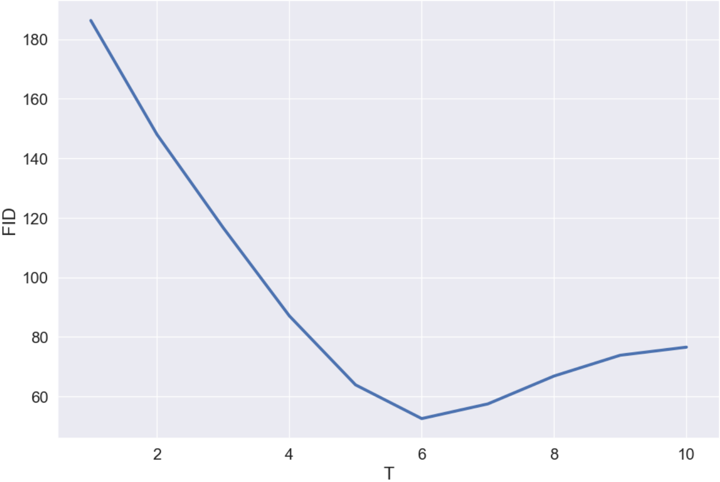
(a) T = 3

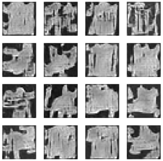
(b) T = 5

(c) T = 10

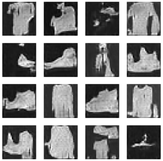
Вычислительный эксперимент

DDGAN с обратной KL дивергенцией

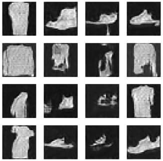




(a) T = 3



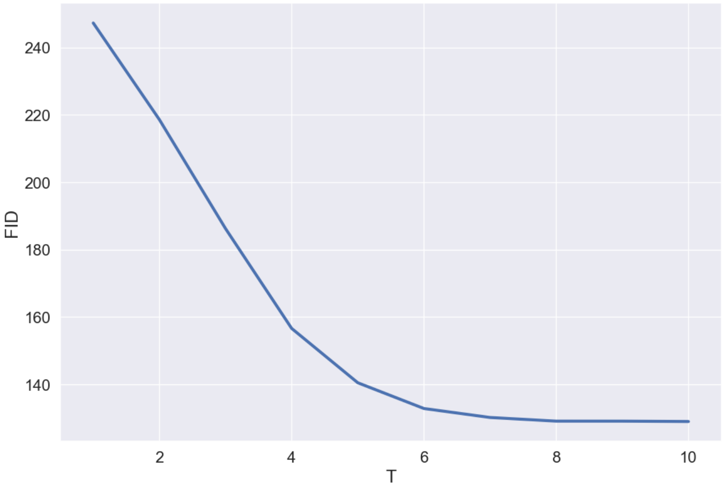
(b) T = 5

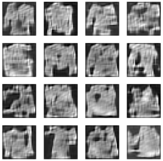


(c) T = 10

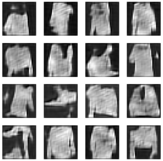
Вычислительный эксперимент

DDGAN с total variation

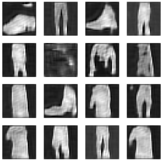




(a) T = 3



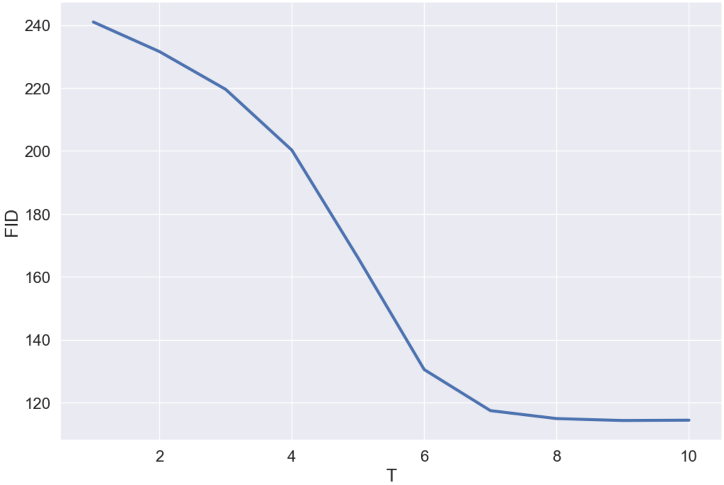
(b) T = 5

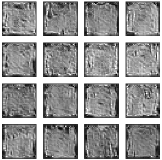


(c) T = 10

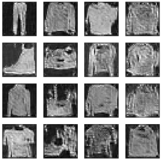
Вычислительный эксперимент

DDGAN с wasserstein distance





(a) T = 3

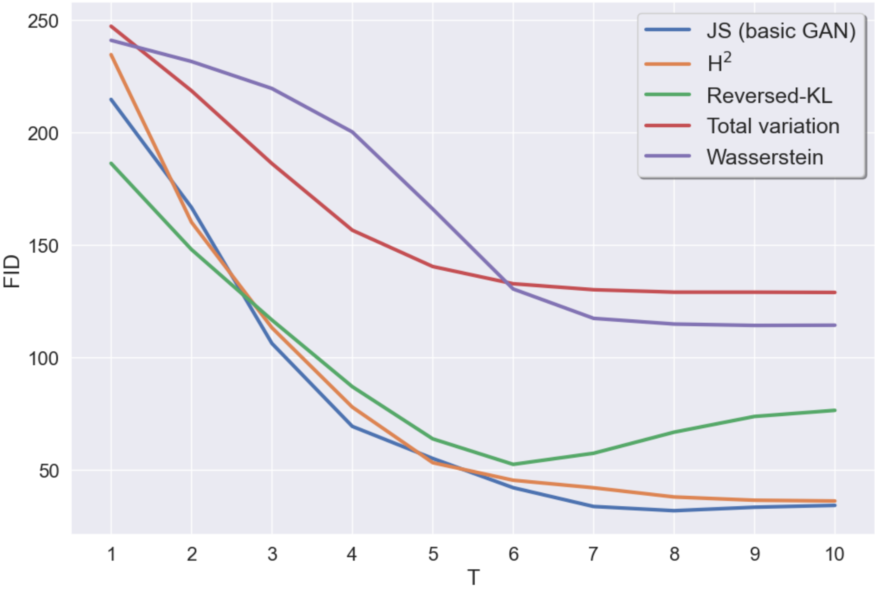


(b) T = 5

(c) T = 10

Вычислительный эксперимент

Сравнение различных схем тренировки



Вычислительный эксперимент

Сравнение различных схем тренировки

Модель	FID
DDPM	28.9
JS DDGAN	34.3
H^2 DDGAN	36.3
Reversed-KL DDGAN	76.6
Total variation DDGAN	129.0
Wasserstein DDGAN	114.4

FID-score для максимального числа шагов

Итоги эксперимента

- Количество шагов в диффузионной модели успешно снижено на 2 порядка при незначительном падении качества семплов
- Стандартный (JS) DDGAN показывает себя лучше остальных
- DDGAN с H^2 достигает сравнимого со стандартным качества
- Обучение всех DDGAN кроме стандартного склонно к расбалансировке и требует тщательного подбора гиперпарамтеров