

# Ускорение семплирования из диффузионных моделей с использованием состязательных сетей

Охотников Никита Владимирович

**МФТИ**

2023

# Цели исследования

## Цель

Модифицировать 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 минимизационной задачи для используемой модели

# Неявное моделирование обратного диффузионного процесса

## Диффузионный процесс

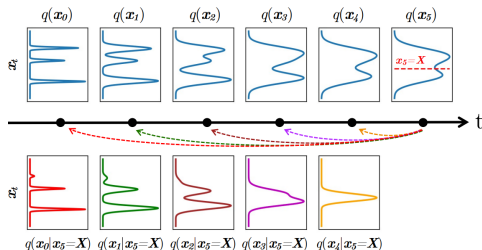
### ▶ Прямой:

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

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

### ▶ Обратный:

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



## Предложение

- ▶ Использовать неявную модель для восстановления распределения

## Мотивация

- ▶ Моделирование мультимодального распределения для существенного уменьшения  $T$

## Основные предположения

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

# 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.

После некоторых математических преобразований получаем минимизационную задачу:

$$\sum_{t=1}^n \mathbb{E}_{\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_T} KL(q(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) || p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1} | \mathbf{x}_t)) \rightarrow \min$$

## 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:

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

# 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

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

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  $\varphi$  – обучаемые параметры. Для начала используем схему тренировки стандартного GAN<sup>1</sup>, как ранее было предложено<sup>2</sup>, тогда задача минимизации для дискриминатора:

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

## Генератор

Введем генератор  $G_\theta(\mathbf{x}_{t-1}^{fake}, \mathbf{z}, t)$  с параметрами  $\theta$ , 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:

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

При известном дискриминаторе тренируем генератор на максимизацию

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

---

<sup>1</sup><https://doi.org/10.48550/arxiv.1406.2661>

<sup>2</sup><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  $f^*$ :

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

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

## Минимизируемый функционал

Генератор распределения  $P$ :  $G = G_\theta$ ,

модель  $V_\omega$  приближающая функцию  $T$ :  $T = T_\omega = g_f(V_\omega)$ , где  $g_f$  – функция активации.

В таком случае целевой функционал:

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

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

# Альтернативные схемы тренировки

## Рассматриваемые частные случаи

- ▶ Квадрат расстояния Хелингера

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

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

- ▶ Обратная KL-дивергенция

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

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

- ▶ Total variation distance

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

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



# 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  $\Gamma$  – множество всех совместных распределений  $\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  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, двойственностью Канторовича-Рубинштейна получаем:

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

где  $\|f_{\varphi}\|_L \leq K$  –  $K$ -липшицевы функции, приближаемые нейросетью с параметрами  $\varphi$ ,  $\theta$  – параметры генератора для распределения  $P$ .

Итоговая задача оптимизации:

$$\begin{cases} \min_{\theta} \max_{\varphi} \sum_{t=1}^n \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_t)} \left[ \mathbb{E}_{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} [f_{\varphi}(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t)] - \mathbb{E}_{p_{\theta}(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)} [f_{\varphi}(\mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t, t)] \right] , \\ \|f_{\varphi}\|_L \leq K. \end{cases}$$

# Вычислительный эксперимент

## Цели

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

## Метрика качества

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

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

В данное выражение подставляем выход модели InceptionV3<sup>3</sup> для реальных и сгенерированных данных.

## Данные

Fashion-MNIST<sup>4</sup> – 60000 черно-белых картинок  $28 \times 28$

## Архитектура

Генеративная сеть – собственная реализация U-Net<sup>5</sup> модели.

Дискриминативная – сжимающая половина генеративной и выходной линейный слой.

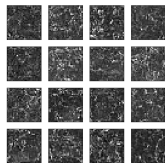
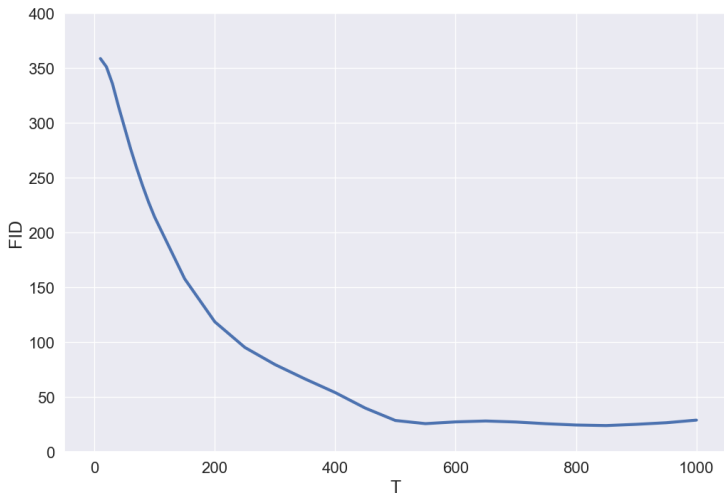
<sup>3</sup><https://doi.org/10.48550/arXiv.1512.00567>

<sup>4</sup><http://arxiv.org/abs/1708.07747>

<sup>5</sup><http://arxiv.org/abs/1505.04597>

# Вычислительный эксперимент

## Диффузионная модель



(a)  $T = 50$



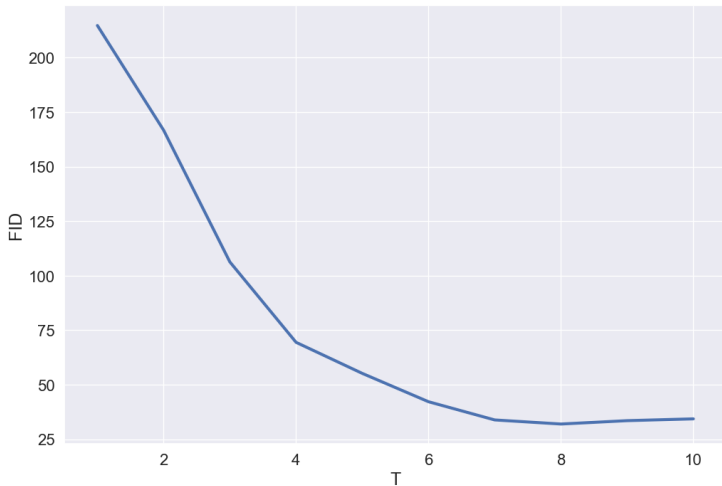
(b)  $T = 300$



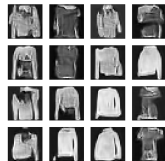
(c)  $T = 1000$

# Вычислительный эксперимент

## DDGAN с JS-дивергенцией



(a)  $T = 3$



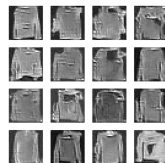
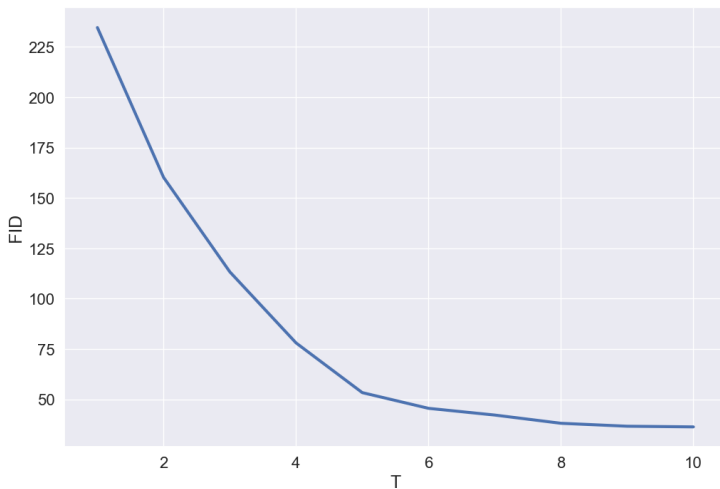
(b)  $T = 5$



(c)  $T = 10$

# Вычислительный эксперимент

DDGAN с  $H^2$



(a)  $T = 3$



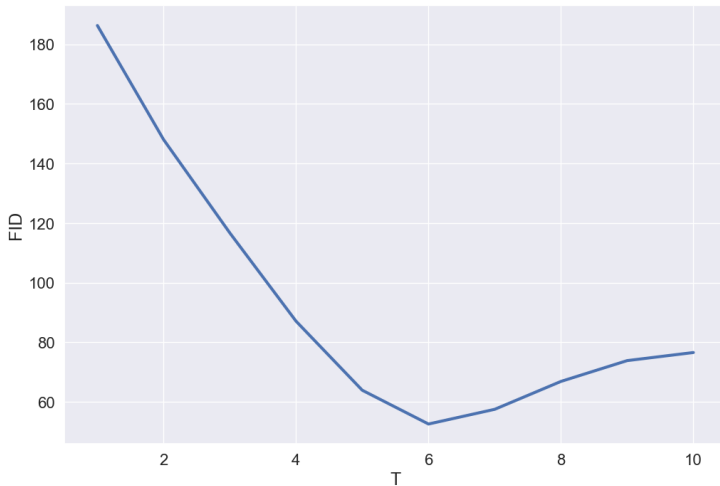
(b)  $T = 5$



(c)  $T = 10$

# Вычислительный эксперимент

## DDGAN с обратной KL дивергенцией



(a)  $T = 3$



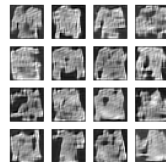
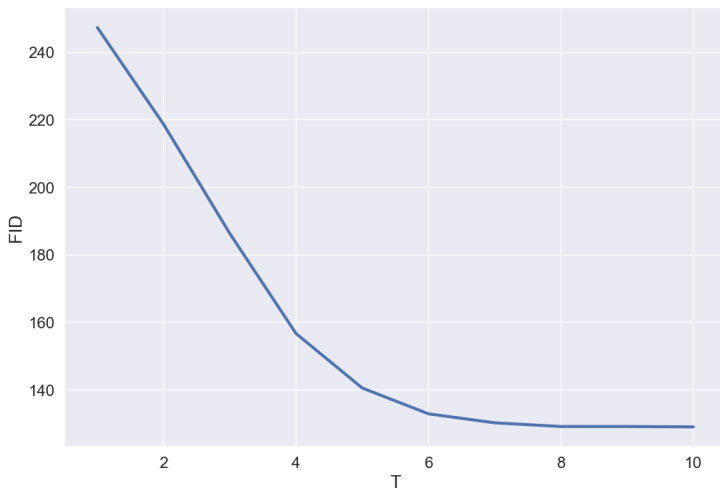
(b)  $T = 5$



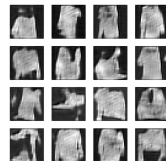
(c)  $T = 10$

# Вычислительный эксперимент

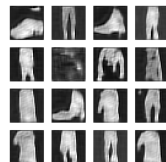
## DDGAN с total variation



(a)  $T = 3$



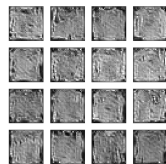
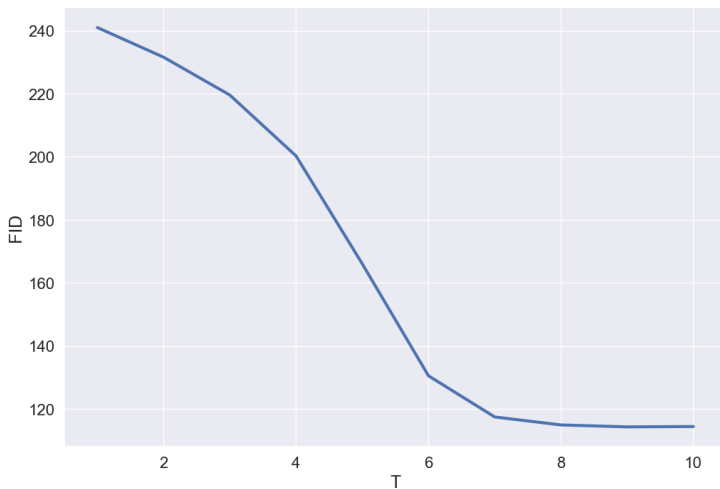
(b)  $T = 5$



(c)  $T = 10$

# Вычислительный эксперимент

## DDGAN с wasserstein distance



(a)  $T = 3$



(b)  $T = 5$



(c)  $T = 10$



# Вычислительный эксперимент

## Сравнение различных схем тренировки

