

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»

Факультет компьютерных наук
Прикладная математика и информатика

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА

Исследовательский проект на тему

”Замена лица (FaceSwap) с помощью генеративных моделей”

Выполнил студент группы МИИАД22, 2 курс,
Рябыкин Алексей Сергеевич

Научный руководитель:
научный сотрудник Аланов Айбек

Москва 2024

РЕФЕРАТ

Дипломная работа содержит 20 страниц, N рисунок, N таблицу, N использованных источников.

Face swap, Deepfakes, ДИФФУЗИОННЫЕ МОДЕЛИ, ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ

Дипломная работа посвящена исследованию современных методов замены лиц на изображения с помощью диффузионных моделей. Исследована проблема

Теоретическая часть работы содержит исследовательский обзор статей о диффузионных моделях для задачи замены лиц на изображении (Face swap)...

В практической части содержатся результаты поставленных экспериментов, их анализ и постановка последующих исследований.

Contents

ВВЕДЕНИЕ	3
ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ	4
1 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ	5
1.1 Обзор литературы	5
1.2 Особенности поставленных экспериментов	11
2 ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ	12
2.1 Используемые инструменты	12
2.2 Экспериментальные результаты	12
2.3 Выводы	12
2.4 Дальнейшая работа	12
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	13
ПРИЛОЖЕНИЯ	14
ПРИЛОЖЕНИЕ 1	15
ПРИЛОЖЕНИЕ 2	16
ПРИЛОЖЕНИЕ 3	19

ВВЕДЕНИЕ

TBD

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

1 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

1.1 Обзор литературы

1.1.1 Общие сведения о диффузионных моделях

Долго лидирующие на поприще генерации изображений генеративно-состязательные сети обладают набором проблем, с которыми боролось и продолжает бороться научное сообщество. Основными проблемами, сохранившимися до сих пор, являются нестабильность обучения [9], решаемая с помощью спектральной нормализации [11], контролирующей константу Липшица, вводя ограничение весов, для стабилизации обучения дискриминатора; Mode Collapse [12]. Последняя является одной из главных проблем моделей такого типа. Проблема заключается в том, что в процессе обучения генератор приходит к состоянию, при котором генерируется лишь ограниченный (существенно меньший оригинального пространства изображений) набор выходов. Предлагаемые решения этой проблемы – WGAN [1] (авторы используют метрику Вассерштейна внутри лосс-функции, тем самым мотивируя дискриминатор выявлять повторяющиеся выходы, в которых стабилизировался генератор) и UGAN [13] (также адаптация функции потерь, однако теперь с оценкой выходов генератора на основе предсказаний будущих версий дискриминатора).

В отличие от генеративно-состязательных сетей эти же проблемы не свойственны новому классу моделей – диффузионным моделям. В оригинальной статье [2] авторы утилизируют идею из статистической термодинамики. Главной целью авторы видят определение двух процессов: итеративный диффузный процесс, который преобразует любое комплексное распределение данных в более простое и контролируемое, постепенно уменьшая SNR (signal-to-noise ratio), а также параметризованный обратный диффузионный процесс, обучаемый итеративно моделировать целевое распределение.

Прямой процесс

Рассмотрим набор данных из сложно контролируемого целевого распределения: $X = (x^1, \dots, x^n)$. Построим прямой процесс диффузии, постепенно зашумляющий данные из целевого распределения (уменьшая

SNR).

$$x_0^i \rightarrow x_1^i \rightarrow \dots \rightarrow x_T^i$$

$$x_t^i = \sqrt{1 - \beta_t} \cdot x_{t-1}^i + \sqrt{\beta_t} \cdot \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(\epsilon | 0, I)$$

где β_t – скорость диффузии на шаге t , x^i – семпл из выборки (сейчас и далее просто x). Этот прямой диффузионный процесс может быть записан в следующем виде:

$$q(x_t | x_{t-1}) = \mathcal{N}(x_t | \sqrt{1 - \beta_t} x_{t-1}, \beta_t I) \quad (1)$$

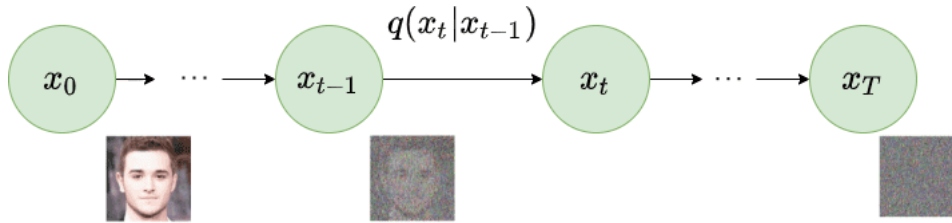


Рис. 1.1. Прямой процесс диффузии [6]

Используя трюк с репараметризацией можно получить явное выражение для семплирования на каждом шаге диффузии (ПРИЛОЖЕНИЕ 1):

$$x_t \sim q(x_t | x_0) = \mathcal{N}(x_t | \sqrt{\bar{\alpha}_t} x_0, (1 - \bar{\alpha}_t) I), \quad (2)$$

где $\bar{\alpha}_t = \prod_{s=0}^t (1 - \beta_s)$. Из последнего выражения нетрудно заметить, что при $T \rightarrow \infty \implies \bar{\alpha}_T \rightarrow 0$ генерируемый семпл будет иметь стандартное нормальное распределение $x_T \sim \mathcal{N}(x^T | 0, I)$.

Обратный процесс

Построив обратный процесс: $q(x_{t-1} | x_t)$ будет возможно воссоздать истинную выборку по входному сигналу гауссова шума. В условиях выбора малых β_t можно гарантировать, что $q(x_{t-1} | x_t)$ также гауссово распределение. Однако, оценка $q(x_{t-1} | x_t)$ невозможна без генеральной совокупности. В статье [2] предлагается параметризовать оценку условной вероятности p_θ для запуска процесса обратной диффузии:

$$p_\theta(x_{t-1} | x_t) = \mathcal{N}(x_{t-1} | \mu_\theta(x_t, t), \Sigma_\theta(x_t, t)) \quad (3)$$

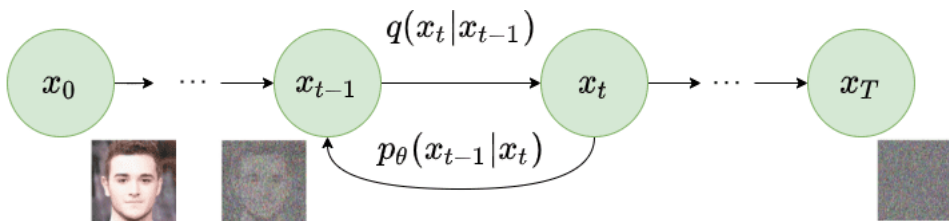


Рис. 1.2. Обратный процесс диффузии [6]

Обратная условная вероятность $q(x_{t-1}|x_t)$ контролируема, если обусловлена на x_0 :

$$q(x_{t-1}|x_t, x_0) = \mathcal{N}(x_{t-1}, \tilde{\mu}(x_t, x_0), \tilde{\beta}_t I) \quad (4)$$

причем из 2 следует можно выразить:

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}_t &= \frac{1 - \bar{\alpha}_{t-1}}{1 - \bar{\alpha}_t} \cdot \beta_t, \\ \tilde{\mu}_t(x_t, x_0) &= x_0 + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_t}(1 - \bar{\alpha}_{t-1})}{1 - \bar{\alpha}_t} x_t \end{aligned}$$

Пользуясь результатами ПРИЛОЖЕНИЕ 1. можно выразить:

$$x_0 = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(x_t - \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon)$$

Собирая вместе два последних выражения, можем получить среднее для произвольного шага, зависящее от x_t :

$$\tilde{\mu}_t(x_t) = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}} \left(x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}} \epsilon \right)$$

В статье [6] предлагается использовать нейронную сеть для оценки шума:

$$\tilde{\mu}_\theta(x_t, t) = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}} \left(x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}} \epsilon_\theta(x_t, t) \right)$$

Тогда функция ошибки (подробнее в ПРИЛОЖЕНИЕ 3.) может быть выражена:

$$L_t = \mathbb{E}_{x_0, t, \epsilon} \left[\frac{1}{2 \|\Sigma_\theta(x_t, t)\|_2^2} \|\tilde{\mu}_t - \tilde{\mu}_\theta(x_t, t)\|_2^2 \right] = \left[\frac{1}{2 \|\Sigma_\theta(x_t, t)\|_2^2} \|\epsilon_t - \epsilon_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon, t)\|^2 \right]$$

В статье [6] авторы обнаружили, что обучение модели лучше работает с упрощенным лоссом, с опущенным весовым членом

$$L_t^* = \mathbb{E}_{x_0, t, \epsilon} [\|\epsilon_t - \epsilon_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon, t)\|^2]$$

Но в [8] авторы показывают, что если учить оценку ковариационной матрицы, то результат будет лучше.

Algorithm 1 Training

```

1: repeat
2:    $\mathbf{x}_0 \sim q(\mathbf{x}_0)$ 
3:    $t \sim \text{Uniform}(\{1, \dots, T\})$ 
4:    $\epsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 
5:   Take gradient descent step on
      $\nabla_{\theta} \|\epsilon - \epsilon_{\theta}(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon, t)\|^2$ 
6: until converged

```

Algorithm 2 Sampling

```

1:  $\mathbf{x}_T \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 
2: for  $t = T, \dots, 1$  do
3:    $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  if  $t > 1$ , else  $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ 
4:    $\mathbf{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left( \mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\alpha_t}} \epsilon_{\theta}(\mathbf{x}_t, t) \right) + \sigma_t \mathbf{z}$ 
5: end for
6: return  $\mathbf{x}_0$ 

```

Рис. 1.3. Алгоритмы обучения и семплирования [6]

1.1.2 Обуславливаемые диффузионные модели (Conditioned diffusion models)

В статье [5] предлагается модель латентной диффузии. Авторы представляют процесс диффузии не в пространстве пикселей, а в пространстве латентных эмбеддингов, полученных с помощью автоэнкодера (VQ-VAE). Авторы обнаружили, что даже агрессивная компрессия сохраняет семантическую и концептуальную информацию 1.4. Поэтому они сначала убирают избыточность (компрессируют) с помощью автоэнкодера, а затем манипулируют/генерируют семантические понятия с помощью процесса диффузии на выученном латентном уровне. Энкодер \mathcal{E} используется для компрессии входных изображений в латентные эмбеддинги: $z = \mathcal{E}(x^{H \times W \times 3}) \in \mathbb{R}^{h \times w \times c}$. Затем для реконструкции из латентного пространства используется декодер $\mathcal{D} : \hat{x} = \mathcal{D}(z)$.

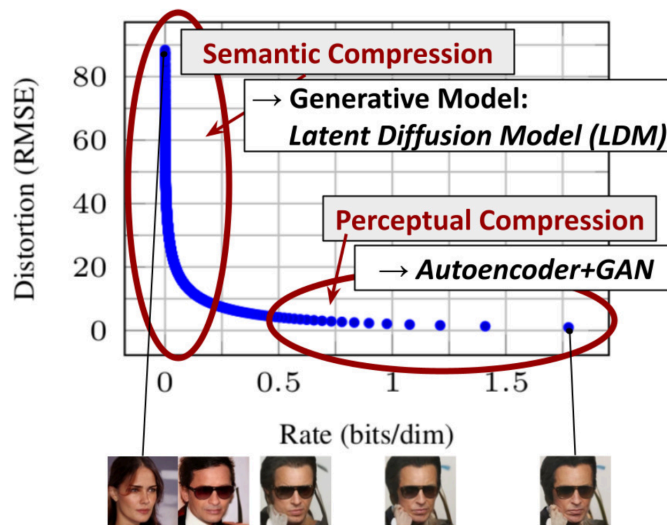


Рис. 1.4. Trade-off между сжатием и соответствующими искажениями [5]

В статье предлагается два типа регуляризации в обучении

автоэнкодера чтобы избежать высокой дисперсии в латентном пространстве:

- KL -регуляризация, взятая из идеи VAE [7], штраф за KL дивергенцию между распределением в латентном пространстве и стандартным нормальным распределением.
- VQ -регуляризация, взятая из идеи VQVAE [10], использующая векторную квантизацию внутри декодера.

Прямой и обратный процессы диффузии происходят в латентном представлении z . Архитектурой была выбрана $U - Net$, обусловленная по шагу диффузии с добавлением механизма перекрестного внимания, который позволяет обуславливать генерацию под разный тип данных (метки классов, low-pass изображения, текстовые запросы).

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d}}\right) \cdot V$$

$$\text{where } Q = W_Q^{(i)} \cdot \varphi_i(z_i), K = W_K^{(i)} \cdot \tau_\theta(y), V = W_V^{(i)} \cdot \tau_\theta(y)$$

$$\text{and } W_Q^{(i)} \in \mathbb{R}^{d \times d_\epsilon^i}, W_K^{(i)}, W_V^{(i)} \in \mathbb{R}^{d \times d_\tau}, \varphi_i(z_i) \in \mathbb{R}^{N \times d_\epsilon^i}, \tau_\theta(y) \in \mathbb{R}^{M \times d_\tau}$$

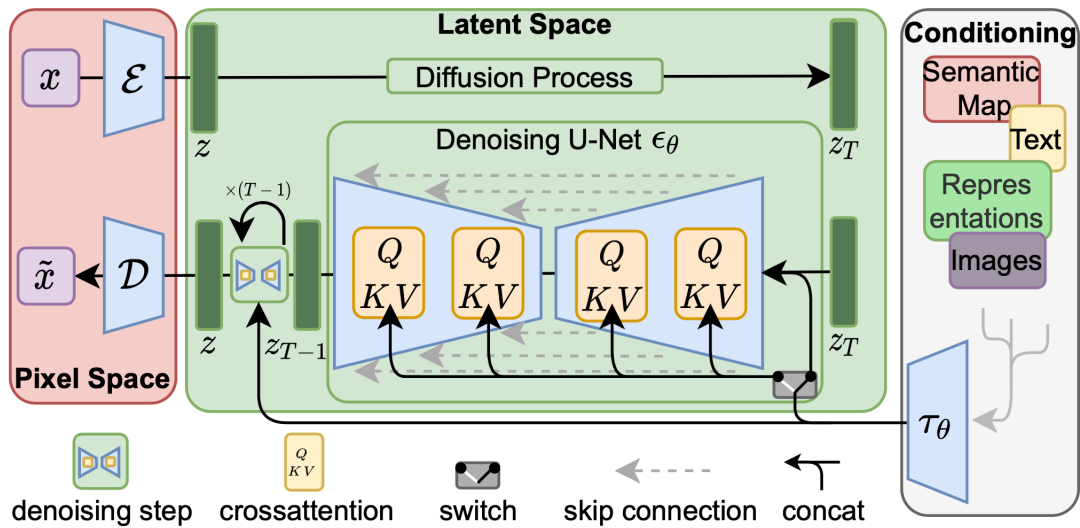


Рис. 1.5. U-Net архитектура с перекрестным вниманием

В [3] предлагается использование концептов.

1.1.3 Обучение моделей

1.1.4 Задача замены лиц (Face swap)

В статье [4] авторы предлагают двухступенчатую архитектуру для решения поставленной задачи. Авторы утилизируют идею генеративно-сопоставительных сетей, на первом этапе генерирует изображение с помощью адаптивного внедрения признаков из целевого изображения. Генератор в модели основывается на AAD (Adaptive Attentional Denormalization) слоях. На втором этапе модель решает проблему появления артефактов и нереалистичных частей на изображении в self-supervised режиме.

- AEI-Net (Генерация целевого лица):

AEI-Net состоит из энкодера личности (Identity Encoder), многоуровневого энкодера атрибутов (Multi-level Attributes Encoder) и генератора (AAD-Generator). AAD-Generator интегрирует информацию о личности и атрибутах на нескольких уровнях с помощью блоков AAD ResBlks. Такие блоки основываются на AAD слоях.

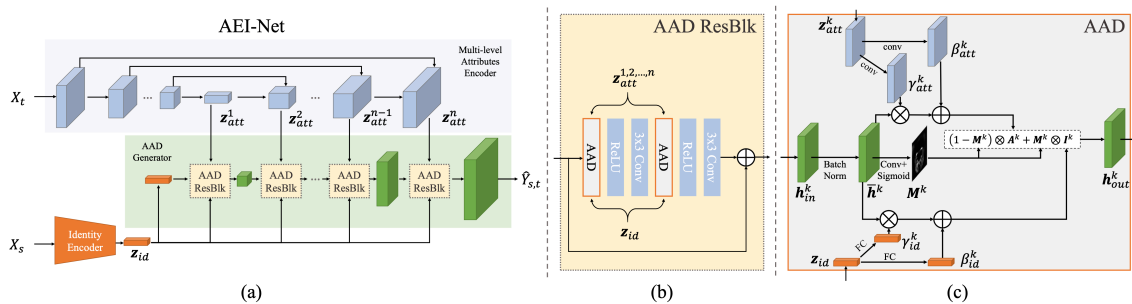


Рис. 1.6. Первый этап FaceShifter [4]

- HEAR-Net (Избавление от возможных артефактов)

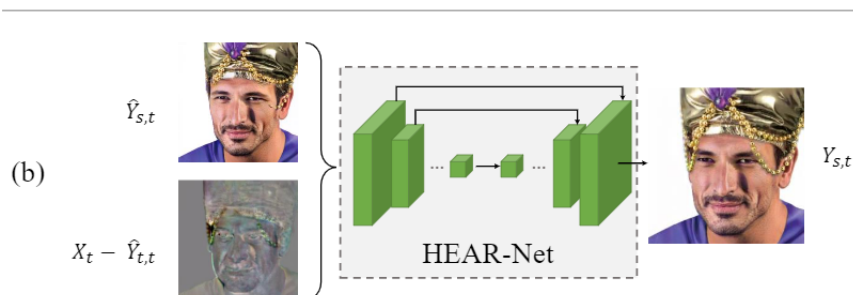


Рис. 1.7. Второй этап FaceShifter [4]

1.2 Особенности поставленных экспериментов

1.2.1

2 ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1 Используемые инструменты

- | | | |
|---------------|-----------------|----------------|
| - Python 3 | - hugging-face | - TorchPruning |
| - PyTorch | - Plotly | - diffusers |
| - TorchVision | - transformers | |
| - Matplotlib | - TorchIntegral | - wandb |

2.2 Экспериментальные результаты

2.3 Выводы

2.4 Дальнейшая работа

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Arjovsky M., Chintala S., Bottou L. Wasserstein GAN. — 2017. — arXiv: 1701.07875 [stat.ML].
2. Deep Unsupervised Learning using Nonequilibrium Thermodynamics / J. Sohl-Dickstein [et al.]. — 2015. — arXiv: 1503.03585 [cs.LG].
3. DreamBooth: Fine Tuning Text-to-Image Diffusion Models for Subject-Driven Generation / N. Ruiz [et al.]. — 2023. — arXiv: 2208.12242 [cs.CV].
4. FaceShifter: Towards High Fidelity And Occlusion Aware Face Swapping / L. Li [et al.]. — 2020. — arXiv: 1912.13457 [cs.CV].
5. High-Resolution Image Synthesis with Latent Diffusion Models / R. Rombach [et al.]. — 2022. — arXiv: 2112.10752 [cs.CV].
6. Ho J., Jain A., Abbeel P. Denoising Diffusion Probabilistic Models. — 2020. — arXiv: 2006.11239 [cs.LG].
7. Kingma D. P., Welling M. An Introduction to Variational Autoencoders // Foundations and Trends® in Machine Learning. — 2019. — Vol. 12, no. 4. — P. 307–392. — ISSN 1935-8245. — DOI: 10.1561/22000000056. — URL: <http://dx.doi.org/10.1561/22000000056>.
8. Nichol A., Dhariwal P. Improved Denoising Diffusion Probabilistic Models. — 2021. — arXiv: 2102.09672 [cs.LG].
9. On Convergence and Stability of GANs / N. Kodali [et al.]. — 2017. — arXiv: 1705.07215 [cs.AI].
10. Oord A. van den, Vinyals O., Kavukcuoglu K. Neural Discrete Representation Learning. — 2018. — arXiv: 1711.00937 [cs.LG].
11. Spectral Normalization for Generative Adversarial Networks / T. Miyato [et al.]. — 2018. — arXiv: 1802.05957 [cs.LG].
12. Thanh-Tung H., Tran T. On Catastrophic Forgetting and Mode Collapse in Generative Adversarial Networks. — 2020. — arXiv: 1807.04015 [cs.LG].
13. Unrolled Generative Adversarial Networks / L. Metz [et al.]. — 2017. — arXiv: 1611.02163 [cs.LG].

ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Явное выражение для семплирования на произвольном шаге диффузии

Рассмотрим выражение 1. Положим $\alpha_t = 1 - \beta_t$ и $\bar{\alpha}_t = \prod_{s=0}^t \alpha_s$. Рекурсивно применяя трюк с репараметризацией:

$$\begin{aligned} x_t &= \sqrt{1 - \beta_t} x_{t-1} + \sqrt{\beta_t} \epsilon_{t-1} = \sqrt{\alpha_t \alpha_{t-1}} x_{t-2} + \sqrt{1 - \alpha_t \alpha_{t-1}} \epsilon_{t-2} = \dots \\ &\dots = \sqrt{\bar{\alpha}_t} x_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t} \epsilon_0, \end{aligned}$$

где $\epsilon_{t-1}, \epsilon_{t-2}, \dots \sim \mathcal{N}(0, I)$, $\bar{\epsilon}_{t-2}$ смесь нормальных распределений

$$\bar{\epsilon}_{t-2} \sim \mathcal{N}(0, \sqrt{(1 - \alpha_t) + \alpha_t(1 - \alpha_{t-1})} I) = \mathcal{N}(0, \sqrt{1 - \alpha_t \alpha_{t-1}})$$

Обычно по мере зашумления используется больший шаг зашумлений, т.е.:

$$\begin{aligned} \beta_1 &< \beta_2 < \dots < \beta_T, \\ \bar{\alpha}_1 &> \bar{\alpha}_2 > \dots > \bar{\alpha}_T. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Динамика Ланжевена как стохастическая реализация уравнения Фоккера-Планка

Рассмотрим стохастическое дифференциальное уравнение (СДУ) в общем виде:

$$dx = f(x, t)dt + g(t)dW,$$

где W – Винеровский процесс.

Теорема 0.1. Эволюция распределения $p(x|t)$ по времени t детерминированно описывается дифференциальным уравнением Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial p(x|t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (f(x, t)p(x|t)) + \frac{1}{2}g^2(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2} (p(x|t))$$

Proof. Докажем отдельно для детерминированной и стохастической частей. Детерминированная часть ($g(t) = 0$). Пусть $\hat{x} = x + f(x, t)dt$. Тогда:

$$p(\hat{x}|t + dt) = p(\hat{x} - f(x, t)dt|t) \left| \frac{\partial}{\partial x} (x + f(x, t)dt) \right|^{-1}.$$

Разложим в ряд Тейлора в точке \hat{x} функцию $f(x, t)$:

$$f(x, t) = f(\hat{x}, t) + \frac{\partial f(\hat{x}, t)}{\partial x} f(x, t)dt + o(dt).$$

Для упрощения выкладок рассмотрим одномерный случай.

$$\begin{aligned} p(\hat{x}|t + dt) &= p \left(\hat{x} - f(\hat{x}, t)dt - \underbrace{\frac{\partial f(\hat{x}, t)}{\partial x} f(x, t)dt^2}_{\text{т.к. } dt \rightarrow 0, \text{ то } o(dt)} + o(dt) \right) \left(1 + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt \right)^{-1} = \\ &= p(\hat{x} - f(\hat{x}, t)dt + o(dt)|t) \cdot \left(1 + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt \right)^{-1} = \\ &= p(\hat{x} - f(\hat{x}, t)dt + o(dt)|t) \cdot \left(1 - \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt + o(dt) \right) = \\ &= \left[p(\hat{x}|t) - \frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} f(\hat{x}, t)dt^2 - \frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} f(\hat{x}, t)dt - p(\hat{x}|t) \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt + o(t) \right] = \\ &= p(\hat{x}|t) - \frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} f(\hat{x}, t)dt - \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} p(\hat{x}|t)dt + o(t) = \\ &= p(\hat{x}|t) - dt \left(\frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} f(\hat{x}, t) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} p(\hat{x}|t) \right) + o(dt) = \\ &= p(\hat{x}|t) - dt \left(\frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} f(\hat{x}, t) + \frac{\partial f(\hat{x}, t)}{\partial x} p(\hat{x}, t) \right) + o(dt) \end{aligned}$$

Перенесем налево $p(\hat{x}|t)$, разделим обе части на dt и рассмотрим $\lim_{dt \rightarrow 0}$:

$$\frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (f(\hat{x}, t) p(\hat{x}|t)).$$

Рассмотрим теперь стохастическую часть. Пусть $\hat{x} = x + \epsilon$, где $\epsilon \sim \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt)$:

$$\begin{aligned} p(\hat{x}|t+dt) &= \int p(\hat{x} - \epsilon|t) \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon = \\ &= \int \left(p(\hat{x}, t) - \epsilon \frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{\partial^2 p(\hat{x}|t)}{\partial x^2} + o(\epsilon^2) \right) \cdot \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon = \\ &= p(\hat{x}|t) \underbrace{\int \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon}_1 - \frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial x} \underbrace{\epsilon \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon}_{\mu=0} + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(\hat{x}|t)}{\partial x^2} \underbrace{\int \epsilon^2 \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon}_{\sigma=g^2(t)dt} + \underbrace{\int \epsilon^2 \cdot o(1) \cdot \mathcal{N}(\epsilon|0, g^2(t)dt) d\epsilon}_{o(1) \cdot g^2(t)dt=o(dt)} = \end{aligned}$$

Упростив последнее выражение, получим:

$$= p(\hat{x}|t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(\hat{x}|t)}{\partial x^2} g^2(t)dt + o(dt).$$

Перенесем первое слагаемое налево и поделим обе части на dt :

$$\frac{p(\hat{x}|t+dt) - p(\hat{x}|t)}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(\hat{x}|t)}{\partial x^2} g^2(t) + o(1)$$

При $\lim_{dt \rightarrow 0}$:

$$\frac{\partial p(\hat{x}|t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(\hat{x}|t)}{\partial x^2} g^2(t)$$

По принципу суперпозиции, получаем доказываемое выражение:

$$\frac{\partial p(x|t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) p(x|t)) + \frac{1}{2} g^2(t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} (p(x|t))$$

□

Рассмотрим теперь стохастическое дифференциальное уравнение с $g(t) = 1$, $f(x, t) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \log p(x|t)$. Запишем эволюцию распределения для этого СДУ:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p(x|t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \log p(x|t)p(x|t) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x|t) = \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{p(x|t)} \frac{\partial}{\partial x} p(x|t)p(x|t) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x|t) = 0.
\end{aligned}$$

Таким образом, мы показали, что динамика Ланжевена как стохастическая реализация уравнения Фоккера-Планка сохраняет распределение.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Вывод ELBO

Используя правило Байеса для 4, получим:

$$\begin{aligned}
 q(x_{t-1}|x_t, x_0) &= q(x_t|x_{t-1}, x_0) \frac{q(x_{t-1}|x_0)}{q(x_t|x_0)} = \\
 &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{(x_t - \sqrt{\alpha_t}x_{t-1})^2}{\beta_t} + \frac{(x_{t-1} - \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0)^2}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} - \frac{(x_t - \sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0)^2}{1 - \bar{\alpha}_t} \right) \right) = \\
 &= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x_t^2 - 2\sqrt{\alpha_t}x_t x_{t-1} + \alpha_t x_{t-1}^2}{\beta_t} + \frac{x_{t-1}^2 - 2\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0 x_{t-1} + \bar{\alpha}_{t-1}x_0^2}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} - \frac{(x_t - \sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0)^2}{1 - \bar{\alpha}_t} \right) \right) = \\
 &= \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\left(\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} \right) x_{t-1}^2 - \left(\frac{2\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t} x_t + \frac{2\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} x_0 \right) x_{t-1} + C(x_t, x_0) \right) \right)
 \end{aligned}$$

Среднее значение и дисперсия могут быть параметризованы следующим образом

$$\tilde{\beta}_t = 1 / \left(\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} \right) = \frac{1}{\left(\frac{\alpha_t - \bar{\alpha}_t + \beta_t}{\beta_t(1 - \bar{\alpha}_{t-1})} \right)} = \frac{1 - \bar{\alpha}_{t-1}}{1 - \bar{\alpha}_t} \cdot \beta_t$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mu}_t(x_t, x_0) &= \frac{\left(\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t} x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} x_0 \right)}{\left(\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} \right)} = \left(\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t} x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1 - \bar{\alpha}_{t-1}} x_0 \right) \frac{1 - \bar{\alpha}_{t-1}}{1 - \bar{\alpha}_t} \cdot \beta_t = \\
 &= \frac{\sqrt{\alpha_t}(1 - \bar{\alpha}_{t-1})}{1 - \bar{\alpha}_t} x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1 - \bar{\alpha}_t} x_0
 \end{aligned}$$

Подставим в это выражение $x_0 = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(x_t - \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon_t)$:

$$\tilde{\mu}_t = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1 - \bar{\alpha}_{t-1})}{1 - \bar{\alpha}_t} x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1 - \bar{\alpha}_t} \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}} (x_t - \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\epsilon_t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left(x_t - \frac{1 - \alpha_t}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}} \epsilon_t \right)$$

Запишем наконец нижнюю вариационную границу (ELBO):

$$\begin{aligned}
-\log p_\theta(x_0) &\leq -\log p_\theta(x_0) + D_{\text{KL}}(q(x_{1:T}|x_0) \| p_\theta(x_{1:T}|x_0)) \\
&= -\log p_\theta(x_0) + \mathbb{E}_{x_{1:T} \sim q(x_{1:T}|x_0)} \left[\log \frac{q(x_{1:T}|x_0)}{p_\theta(x_{0:T})/p_\theta(x_0)} \right] \\
&= -\log p_\theta(x_0) + \mathbb{E}_q \left[\log \frac{q(x_{1:T}|x_0)}{p_\theta(x_{0:T})} + \log p_\theta(x_0) \right] \\
&= \mathbb{E}_q \left[\log \frac{q(x_{1:T}|x_0)}{p_\theta(x_{0:T})} \right] \\
\text{Let } L_{\text{VLB}} &= \mathbb{E}_{q(x_{0:T})} \left[\log \frac{q(x_{1:T}|x_0)}{p_\theta(x_{0:T})} \right] \geq -\mathbb{E}_{q(x_0)} \log p_\theta(x_0)
\end{aligned}$$

Финалочка: переписываем этот весь треш в комбинацию нескольких KL-дивергенций и энтропии

$$\begin{aligned}
L_{\text{VLB}} &= \mathbb{E}_{q(x_{0:T})} \left[\log \frac{q(x_{1:T}|x_0)}{p_\theta(x_{0:T})} \right] = \mathbb{E}_q \left[\log \frac{\prod_{t=1}^T q(x_t|x_{t-1})}{p_\theta(x_T) \prod_{t=1}^T p_\theta(x_{t-1}|x_t)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[-\log p_\theta(x_T) + \sum_{t=1}^T \log \frac{q(x_t|x_{t-1})}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[-\log p_\theta(x_T) + \sum_{t=2}^T \log \frac{q(x_t|x_{t-1})}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} + \log \frac{q(x_1|x_0)}{p_\theta(x_0|x_1)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[-\log p_\theta(x_T) + \sum_{t=2}^T \log \left(\frac{q(x_{t-1}|x_t, x_0)}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} \cdot \frac{q(x_t|x_0)}{q(x_{t-1}|x_0)} \right) + \log \frac{q(x_1|x_0)}{p_\theta(x_0|x_1)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[-\log p_\theta(x_T) + \sum_{t=2}^T \log \frac{q(x_{t-1}|x_t, x_0)}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} + \sum_{t=2}^T \log \frac{q(x_t|x_0)}{q(x_{t-1}|x_0)} + \log \frac{q(x_1|x_0)}{p_\theta(x_0|x_1)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[-\log p_\theta(x_T) + \sum_{t=2}^T \log \frac{q(x_{t-1}|x_t, x_0)}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} + \log \frac{q(x_T|x_0)}{q(x_1|x_0)} + \log \frac{q(x_1|x_0)}{p_\theta(x_0|x_1)} \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[\log \frac{q(x_T|x_0)}{p_\theta(x_T)} + \sum_{t=2}^T \log \frac{q(x_{t-1}|x_t, x_0)}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)} - \log p_\theta(x_0|x_1) \right] = \\
&= \mathbb{E}_q \left[\underbrace{D_{\text{KL}}(q(x_T|x_0) \| p_\theta(x_T))}_{L_T} + \sum_{t=2}^T \underbrace{D_{\text{KL}}(q(x_{t-1}|x_t, x_0) \| p_\theta(x_{t-1}|x_t))}_{L_{t-1}} - \underbrace{\log p_\theta(x_0|x_1)}_{L_0} \right]
\end{aligned}$$