Дисклеймер!

- В данной статье вводится море обозначений и выводится множество формул из статистики и теории вероятности. Я постарался максимально хорошо в них разобраться, но в некоторые переходы придется поверить...
- С точки зрения технических нюансов статья очень объемная. Ради экономии времени мы не будет очень подробно смотреть на детали в формулах, а лучше хорошо осознаем основные идеи.
- Если в какой-то момент вам покажется, что работа модели похожа на магию - не пугайтесь, это нормально!)

Denoising Diffusion Probabilistic Models

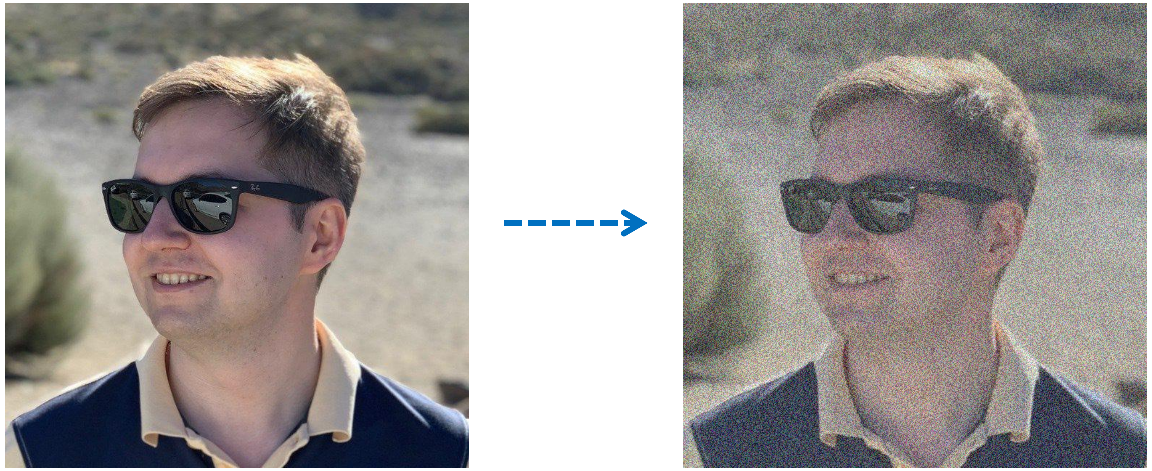
Докладчик: Иванов Данила
Рецензент: Лысенка Иван
Хакер: Солодуха Мария

План:

- Верхнеуровнево об идеи генерации картинок с помощью DDPM.
- Вывод математической базы модели (надо потерпеть).
    - Прямой процесс
    - Обратный процесс
    - Функция потерь
- Алгоритмы обучения и семплирования.
- Эксперименты авторов статьи.
- Инетерсные эффекты и идеи.

Что такое диффузионная модель?

Диффузия:



x_0 $\quad$ x_1

Что такое диффузионная модель?

Процесс Диффузии

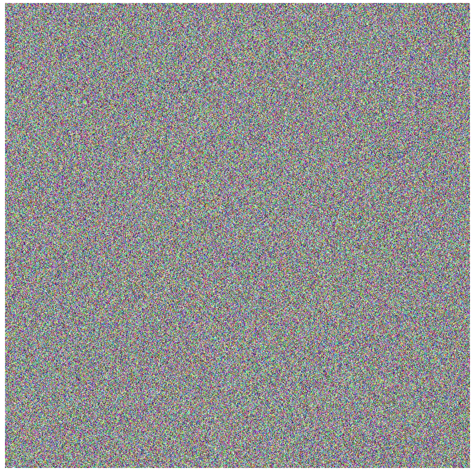
(diffusion process)

x_0

x_1

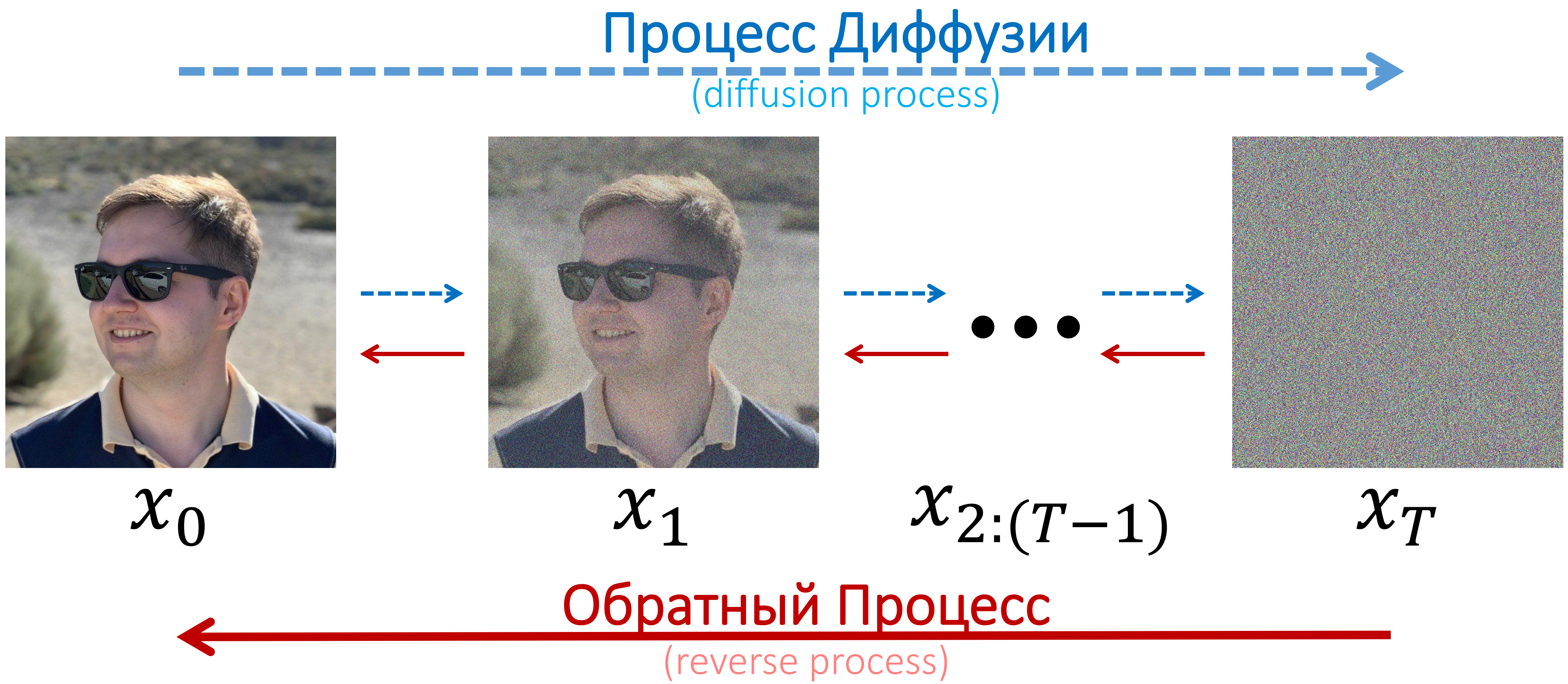
$\bullet\bullet\bullet$

$x_{2:(T-1)}$



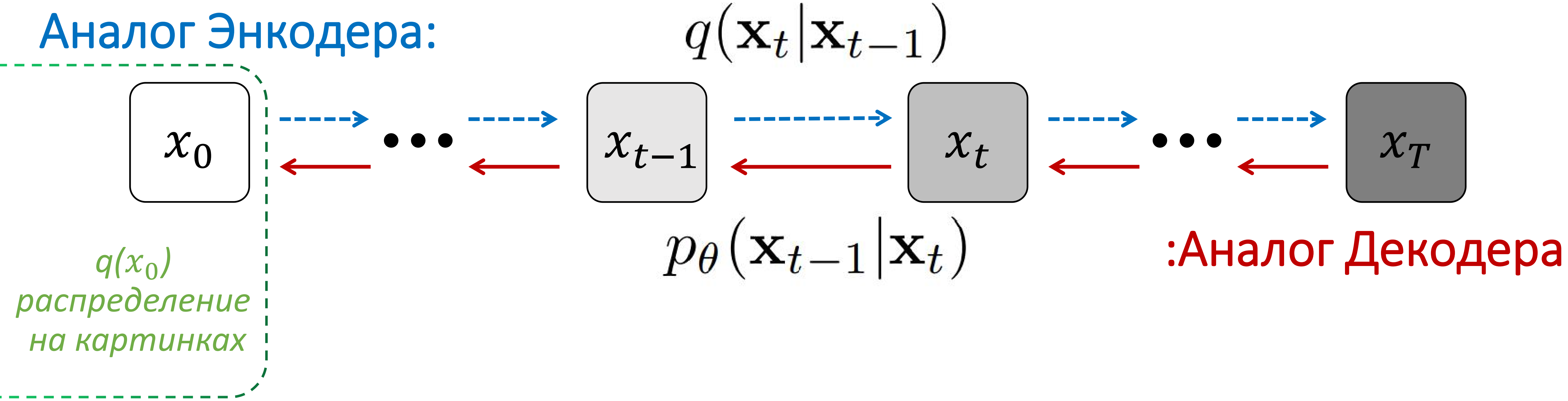
x_T

Что такое диффузионная модель?

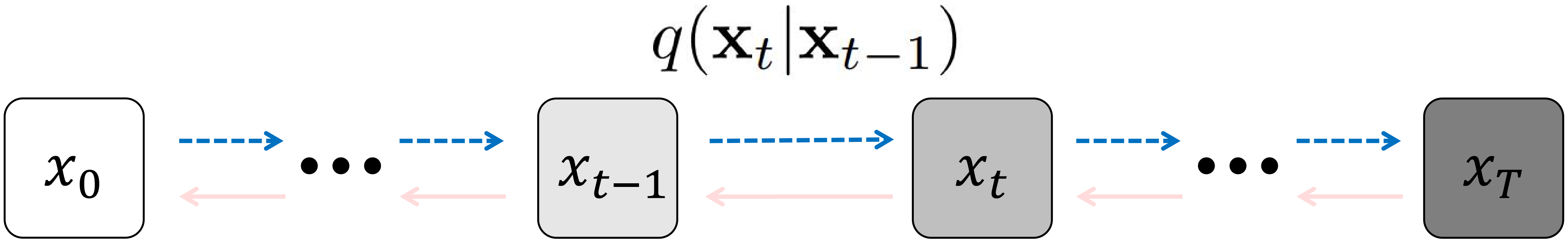


Более формально:

- Диффузионная модель - это цепь Маркова.
- Проход в от картинки к шуму - **фиксированный процесс**, обратный процесс - **сам процесс обучения**.



Процесс Диффузии (Fixed)



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

где $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_T$ - фиксированное дисперсионное расписание.

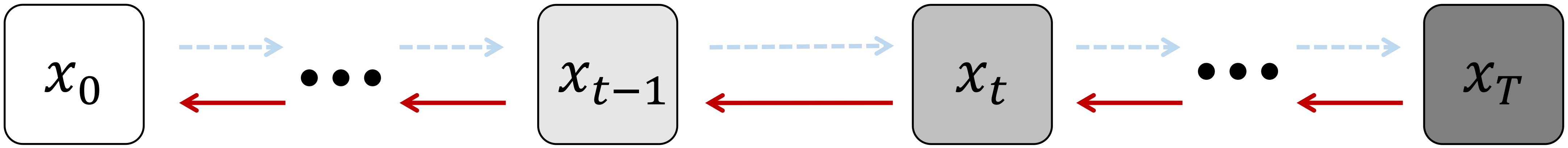
!Важно! $0 < \beta_1 < \beta_2 < \ldots < \beta_T << 1$

Пусть $\alpha_t := 1 - \beta_t$ и $\bar{\alpha}_t := \prod_{s=1}^{t} \alpha_s$. Тогда:

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

Обратный процесс (learning)

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)$$



$$p_\theta(\mathbf{x}_0) := \int p_\theta(\mathbf{x}_{0:T})\, d\mathbf{x}_{1:T}$$

$$p_\theta(\mathbf{x}_{0:T}) := p(\mathbf{x}_T) \prod_{t=1}^{T} p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)$$

Предположение, что обратный процесс - тоже семплирование из нормального распределения:

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) := \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t), \boldsymbol{\Sigma}_\theta(\mathbf{x}_t, t))$$

Фиксируем дисперсию. Учим только $\boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t)$.

Вывод функции потерь
Максимизируем правдоподобие!

$$\mathbb{E}\left[-\log p_\theta(\mathbf{x}_0)\right] \leq \mathbb{E}_q\left[-\log \frac{p_\theta(\mathbf{x}_{0:T})}{q(\mathbf{x}_{1:T}|\mathbf{x}_0)}\right] = \mathbb{E}_q\left[-\log p(\mathbf{x}_T) - \sum_{t\geq 1} \log \frac{p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t)}{q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})}\right] =$$

$$\mathbb{E}_q\left[\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{x}_T|\mathbf{x}_0) \parallel p(\mathbf{x}_T))}_{L_T} + \sum_{t>1} \underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) \parallel p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t))}_{L_{t-1}} \underbrace{- \log p_\theta(\mathbf{x}_0|\mathbf{x}_1)}_{L_0}\right]$$

const

Вывод функции потерь

$$q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0), \tilde{\beta}_t \mathbf{I}),$$

$$\text{where} \quad \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) := \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_t \quad \text{and} \quad \tilde{\beta}_t := \frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t}\beta_t$$

$$\mathbb{E}_q\Bigg[\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{x}_T|\mathbf{x}_0) \parallel p(\mathbf{x}_T))}_{L_T} + \sum_{t>1} \underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) \parallel p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t))}_{L_{t-1}} \underbrace{- \log p_\theta(\mathbf{x}_0|\mathbf{x}_1)}_{L_0}\Bigg]$$

$$\mathbb{E}_q\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) - \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\|^2\right]$$

Вывод функции потерь
Перепараметризация!

$$\boxed{\mathbf{x}_t(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\epsilon}) = \sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon} \text{ for } \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})}$$

$$\mathbb{E}_q\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_0) - \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\|^2\right] =$$

$$= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\epsilon}) - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}\right) - \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\epsilon}), t)\right\|^2\right]$$

$$\boxed{\boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t) = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t\left(\mathbf{x}_t, \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(\mathbf{x}_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t))\right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\right)}$$

Вывод функции потерь

Наконец!

$$\boxed{\boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t) = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t\left(\mathbf{x}_t, \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(\mathbf{x}_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t))\right) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\right)}$$

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t(\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}) - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}\right) - \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t(\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}), t)\right\|^2\right] =$$

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2\alpha_t(1-\bar{\alpha}_t)}\left\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, t)\right\|^2\right]$$

$$L_{\mathrm{simple}}(\theta) := \mathbb{E}_{t,\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\left\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, t)\right\|^2\right]$$

Элегантные алгоритмы!

Algorithm 1 Training

repeat
  $\mathbf{x}_0 \sim q(\mathbf{x}_0)$
  $t \sim \mathrm{Uniform}(\{1, \ldots, T\})$
  $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$
  Take gradient descent step on
    $\nabla_\theta \left\| \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, t) \right\|^2$
until converged

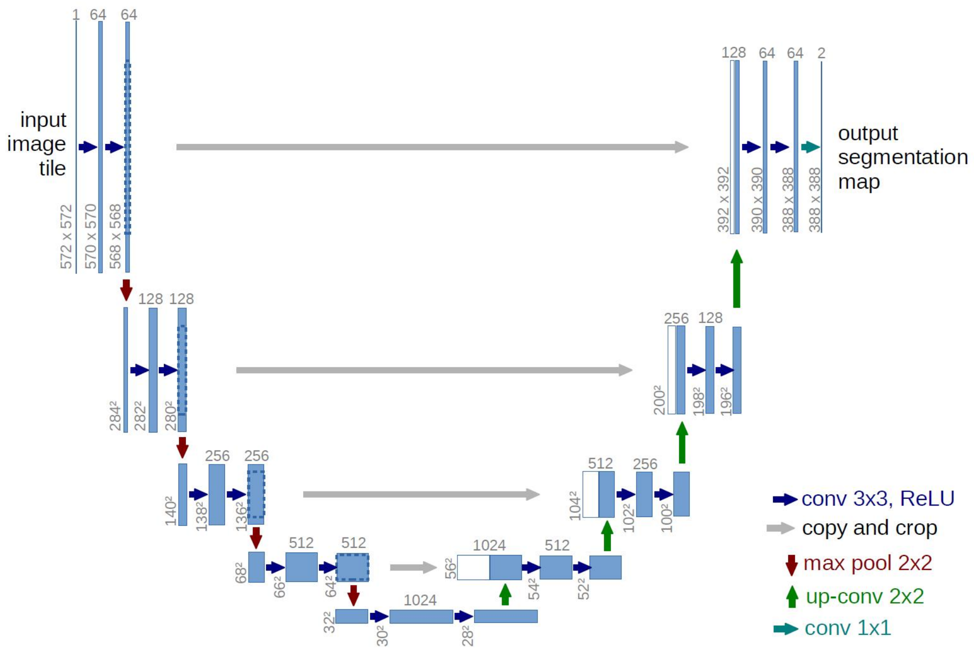
Algorithm 2 Sampling

$\mathbf{x}_T \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$
for $t = T, \ldots, 1$ **do**
  $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ if $t > 1$, else $\mathbf{z} = \mathbf{0}$
  $\mathbf{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}} \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t) \right) + \sigma_t \mathbf{z}$
end for
return $\mathbf{x}_0$

Настройки и результаты экспериментов

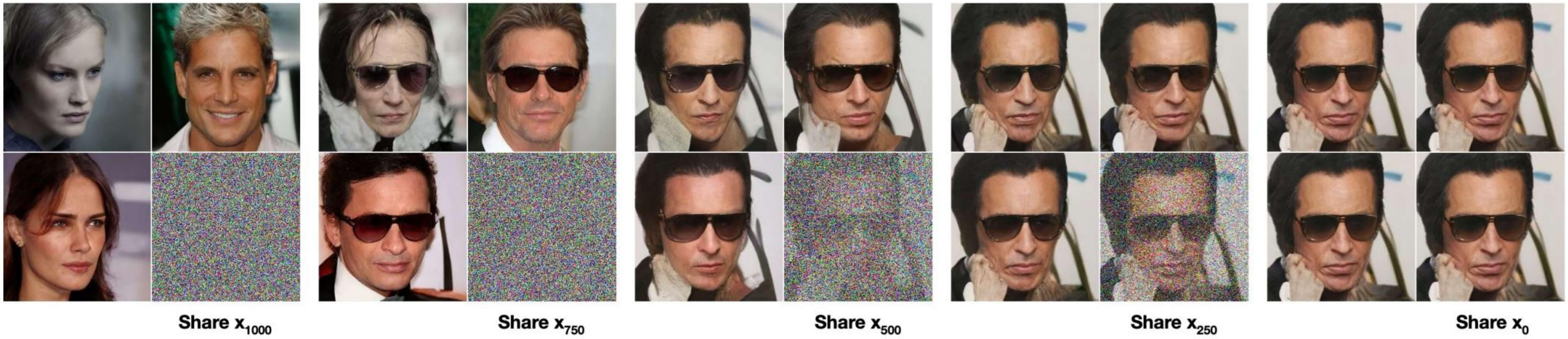
Гиперпараметры в экспериментах авторов:

- T = 1000.
- Дисперсионное расписание:
  линейно от $\beta_1 = 10^{-4}$ до $\beta_T = 2 * 10^{-2}$.
- Сеть: U-Net similar to an unmasked PixelCNN+
- Датасеты: CIFAR10, LSUN, CelebA-HQ.

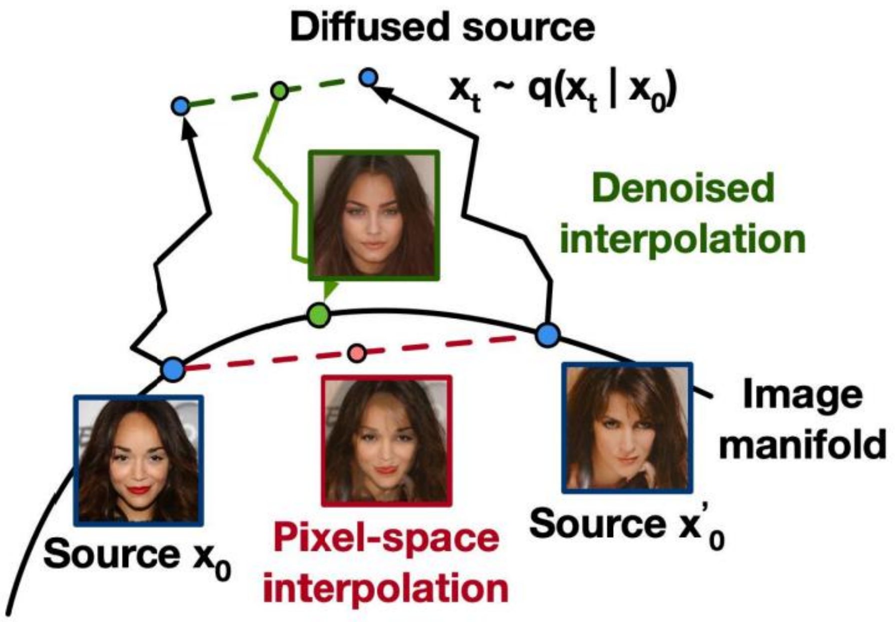


Рубрика «инетерсные эффекты и идеи»
Эффект:

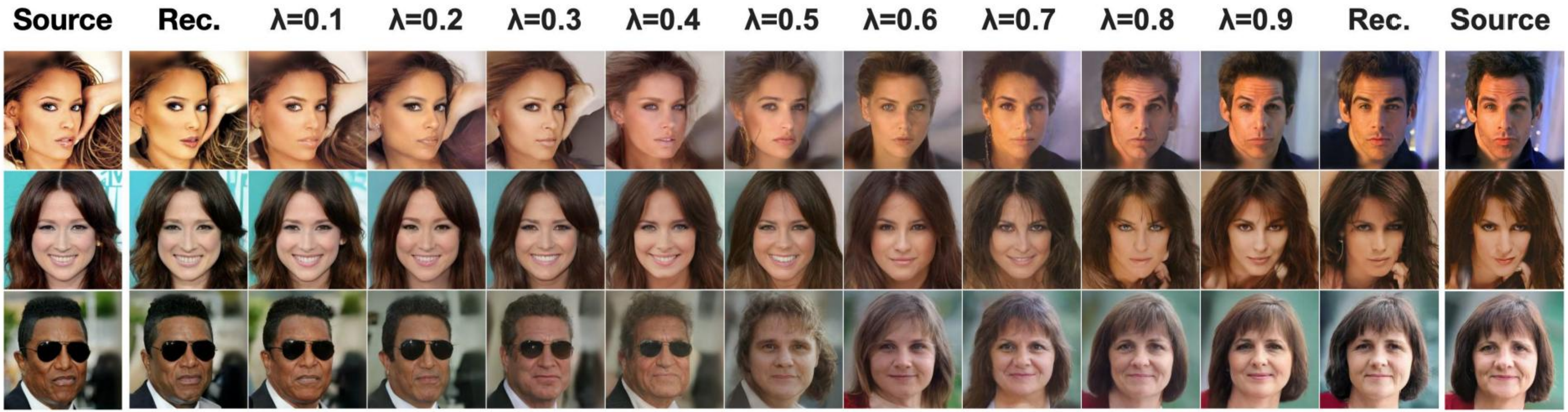
Чем больше шаго диффузии мы сделали, тем больше будет разброс в итоговоых картинках:



Использование DDPM для слияния картинок:



Вместо поиска «среднего арифметического» картинок в изначальном пространстве, можно перейти в пространсто шума и найти смесь картинок там.



Заключение

У авторов получилось реализовать очень мощный инструмент для генерации изображений, а также протестировать его на различных датасетах!

Авторы описали идеи использования данной архитектуры для задачи создания градиента картинок между двумя исходниками, задачи заполнения дыр в картинках. Этот метод нашел продолжение в задаче построение картинки по тесту и многих другихдругих.