

# Tutorial on Denoising Diffusion-based Generative Modeling

Nguyen Vu Hoa Binh

Khai Trinh Xuan

Hoang-Bach ngo

Minh-Hung An

Ngày 7 tháng 2 năm 2024

## Phần I: Một số khái niệm cơ bản

Trước khi chúng ta bắt đầu tìm hiểu về Stable Diffusion (SD) thì ở phần này chúng ta sẽ cùng nhau tổng quan lại một số kiến thức nền tảng, những khái niệm trong phần này sẽ là cơ sở để chúng ta hiểu và chứng minh được cách mà một mô hình SD vận hành.

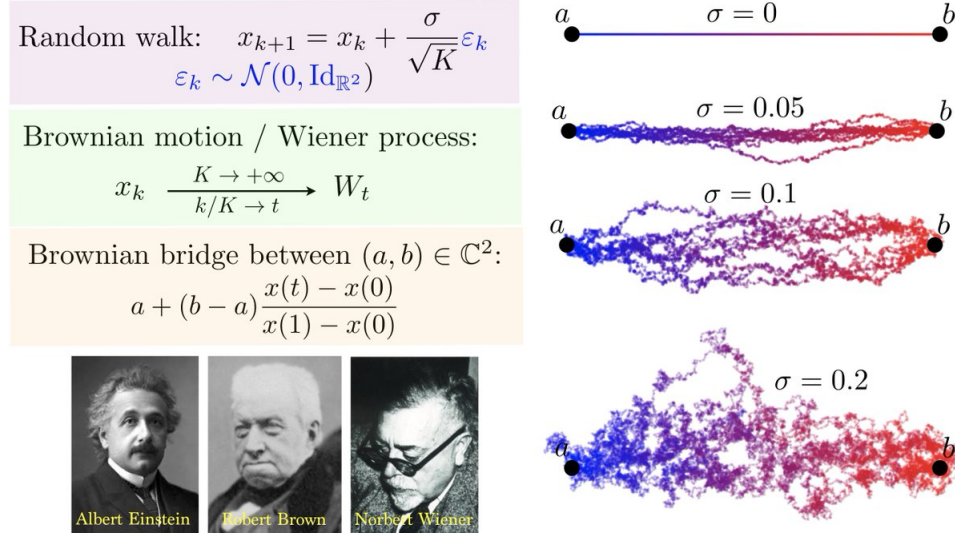
### 1 Wiener process

Wiener process còn được gọi là Brownian process (Brownian motion), là một quá trình ngẫu nhiên không giảm dần theo thời gian. Được đặt tên theo nhà toán học và nhà vật lý học Norbert Wiener và Robert Brown.

Một số đặc điểm của Wiener process:

- **Liên tục:** Nó là một quá trình liên tục trong không gian và thời gian. Điều này có nghĩa rằng nó không bị gián đoạn và có giá trị tại mọi thời điểm.
- **Không xác định:** Wiener process có tính chất ngẫu nhiên mạnh, nghĩa là không thể dự đoán được cách nó di chuyển tại một thời điểm cụ thể. Nó thường được mô tả bằng một biến ngẫu nhiên theo phân phối chuẩn (normal).
- **Điểm xuất phát:** Quá trình Wiener thường được mô tả bằng một điểm xuất phát, sau đó tiến hành theo một quá trình ngẫu nhiên không giảm dần.
- **Được sử dụng rộng rãi:** Quá trình Wiener được sử dụng trong nhiều lĩnh vực như tài chính (để mô phỏng biến động giá cổ phiếu), khoa học máy tính (để mô phỏng quá trình ngẫu nhiên), toán học,...

Wiener process là một ví dụ quan trọng trong lĩnh vực lý thuyết xác suất và quá trình ngẫu nhiên và chúng thường được sử dụng để mô phỏng và nghiên cứu sự biến đổi ngẫu nhiên trong các hệ thống thực tế.



Hình 1: Hình ảnh minh họa cho Wiener process

## 2 Stochastic Differential Equation (SDE)

Phương trình vi phân (SDE) là một loại phương trình chứa thành phần ngẫu nhiên. Chúng được sử dụng để mô tả sự biến đổi ngẫu nhiên trong các quá trình theo thời gian, như sự biến động giá cổ phiếu trong tài chính, phân phối không đều trong sinh học, hay các hiện tượng tự nhiên khác có yếu tố ngẫu nhiên.

$$dX(t) = a(X(t), t)dt + b(X(t), t)dW(t) \quad (1)$$

Trong đó:

- $X(t)$  là quá trình stochastics cần mô phỏng.
- $a(X(t), t)$  và  $b(X(t), t)$  là các hàm thường chứa thành phần xác định và có thể chứa thành phần ngẫu nhiên.
- $dt$  là một khoảng thời gian vô cùng nhỏ.
- $dW(t)$  là một biến ngẫu nhiên, thường là một Wiener process, có phân phối chuẩn với giá trị kỳ vọng bằng 0 và phương sai bằng  $dt$ .

Sự biến đổi ngẫu nhiên được biểu thị bằng phần tử  $b(X(t), t)dW(t)$ . Sự biến đổi này làm cho các giá trị  $X(t)$  biến đổi theo thời gian theo một cách không xác định và có tính chất ngẫu nhiên.

## 3 Euler-Maruyama

Euler-Maruyama là một phương pháp số học để giải các phương trình vi phân stochastics (SDE). Nó thường được sử dụng để mô phỏng các quá trình ngẫu nhiên trong khoa học máy tính, tài chính, sinh học và nhiều lĩnh vực khác.

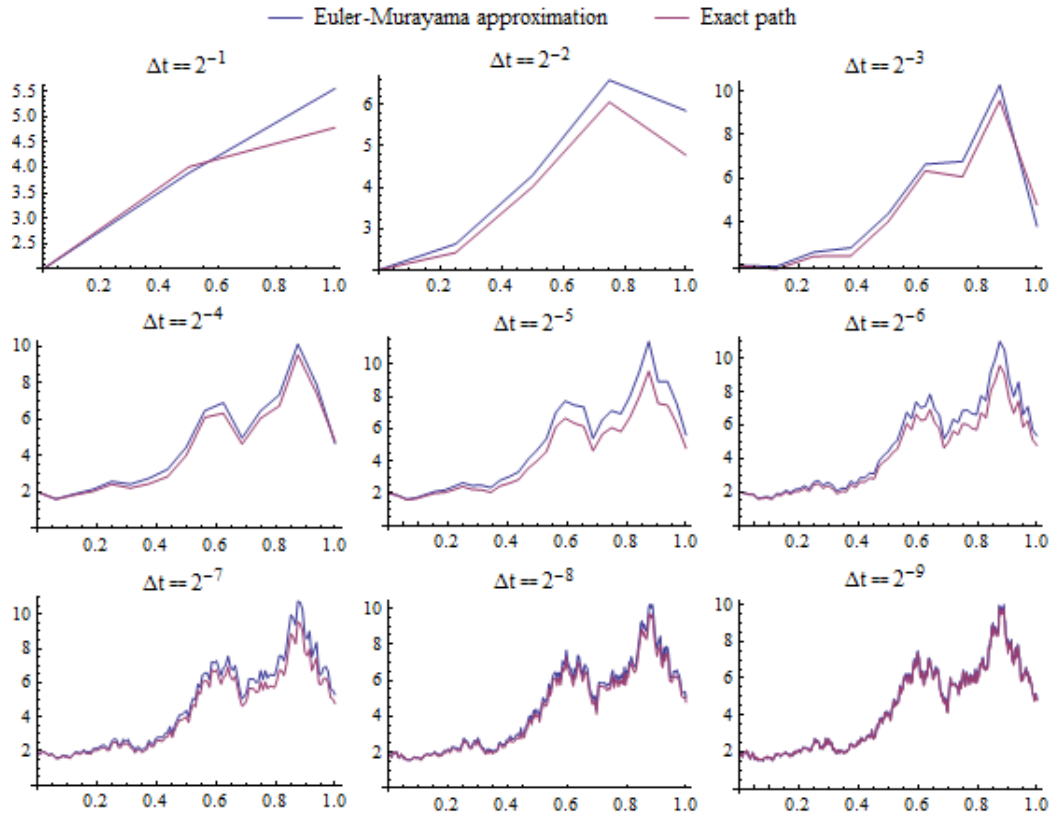
Phương pháp này chủ yếu được sử dụng khi có một phương trình vi phân stochastics, có sự biến đổi ngẫu nhiên. Euler-Maruyama chia khoảng thời gian thành các bước nhỏ và ước tính giá trị của hàm số tại mỗi time step. Tại mỗi bước, nó sử dụng giá trị của hàm số ở bước trước và một ngẫu nhiên được

tạo ra theo phân phối chuẩn để tính giá trị tiếp theo. Phương pháp này có thể được biểu thị bằng công thức:

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n, t_n) \cdot \Delta t + g(X_n, t_n) \cdot \sqrt{\Delta t} \cdot Z_{n+1} \quad (2)$$

Trong đó:

- $X_n$  là giá trị ước tính tại thời điểm  $t_n$
- $f(X_n, t_n)$  là phần không xác định (deterministic) của phương trình vi phân stochastic.
- $g(X_n, t_n)$  là ngẫu nhiên của phương trình vi phân stochastic.
- $\Delta t$  là khoảng thời gian giữa các bước.
- $Z_{n+1}$  là phân phối chuẩn hóa hoặc chuẩn tắc (mean 0, variance 1)



Hình 2: Euler-Maruyama có độ đơn giản và dễ triển khai, nhưng nó có thể có sai số và yếu tố ngẫu nhiên khi giải phương trình stochastic. Thường được sử dụng khi cần một phương pháp gần đúng cho mô phỏng thay vì một giải pháp chính xác

## 4 Heat kernel

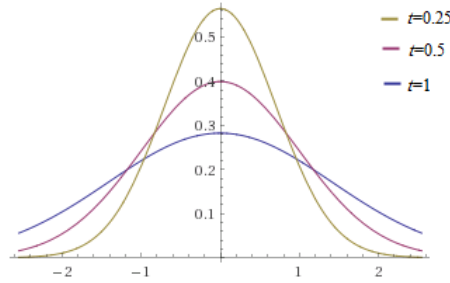
Heat kernel (Gaussian heat kernel) - thường được sử dụng để mô tả sự lan truyền của nhiệt trong không gian 2D/3D và cũng có ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác. Heat kernel có tính chất lan truyền nhiệt từ một điểm cố định ra xa theo thời gian và không gian.

Heat kernel thường được biểu diễn dưới dạng một hàm số, phụ thuộc vào biến thời gian  $t$  và không gian  $x$  và thường được ký hiệu là  $H(t, x)$  hoặc  $K_t(x)$ . Hàm này thường được định nghĩa dựa trên phân phối Gaussian và có dạng:

$$H(t, x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} e^{-\frac{\|x\|^2}{4t}} \quad (3)$$

Trong đó:

- $d$  là số chiều của không gian 2D/3D
- $t$  là thời gian.
- $x$  là vị trí trong không gian (vector  $x$  có  $d$  chiều)
- $\|x\|$  là độ dài của vector  $x$ .



Hình 3: Heat kernel có các tính chất quan trọng bao gồm tính duy nhất của nó khi tất cả điểm bắt đầu và thời gian khác nhau và tính xấp xỉ khi  $t$  tiến gần đến 0 hoặc vô cùng. Nó thường được sử dụng trong lý thuyết xác suất để mô tả quá trình diffusion và trong xử lý ảnh để làm mịn hoặc làm nổi bật các đặc trưng của ảnh.

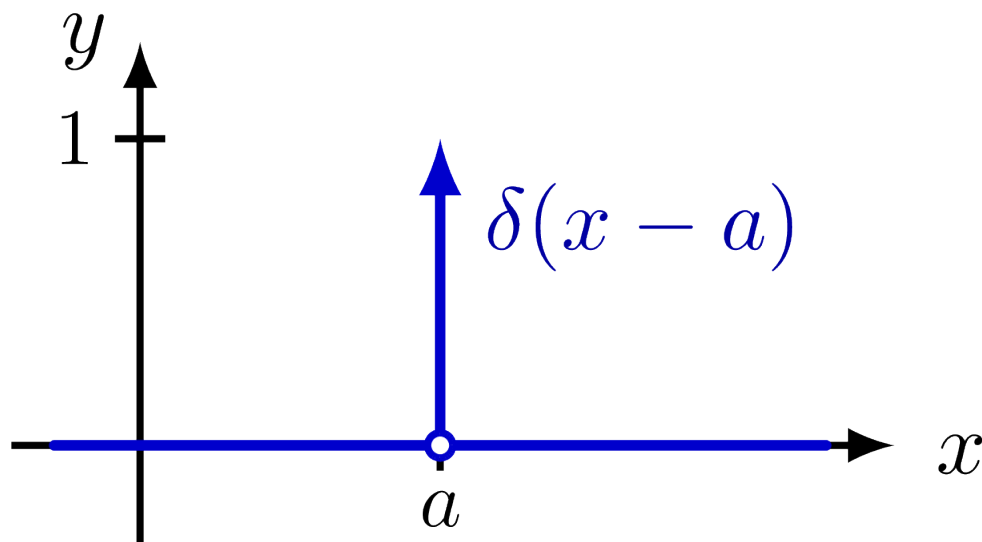
## 5 Delta Dirac Function

Delta dirac là hàm đặc trưng với tích phân của nó bằng 1 trên toàn bộ trục số thực và bằng 0 ở mọi điểm ngoại trừ điểm gốc ( $x=0$  hoặc  $k=0$ ). Cụ thể, mô tả hàm delta dirac có thể được biểu diễn như sau:

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty & \text{if } x = 0 \\ 0 & \text{if } x \neq 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (5)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - \xi) dx = f(\xi) \quad (6)$$



Hình 4: Hàm delta dirac thường được sử dụng trong các ứng dụng toán học và kỹ thuật như biểu diễn các hàm xác định tại một điểm duy nhất hoặc trong lý thuyết xác suất để biểu diễn phân phối xác suất của một biến ngẫu nhiên tại một giá trị duy nhất.

## 6 Heat equation

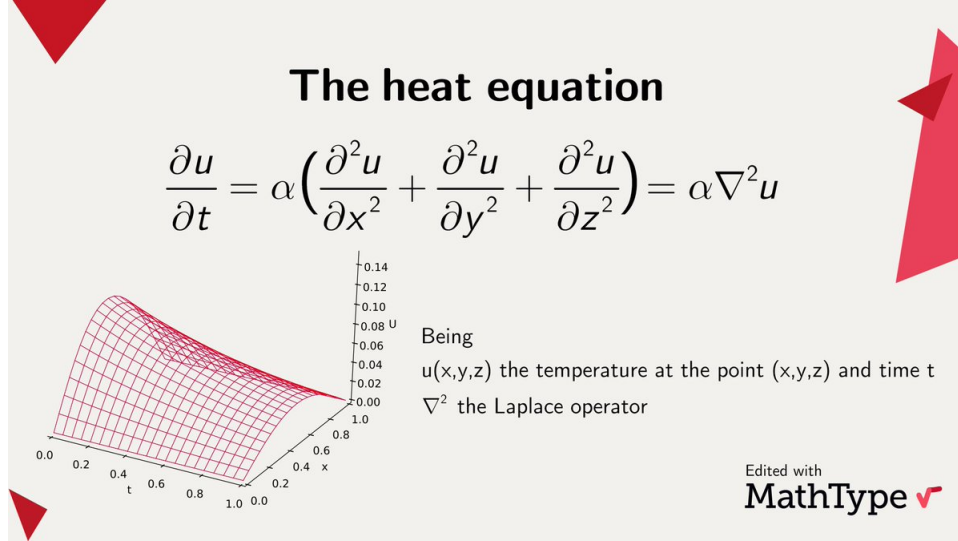
Heat Equation là một phương trình đạo hàm riêng sử dụng để mô tả sự truyền nhiệt (heat) trong các hệ thống vật lý. Nó giúp chúng ta dự đoán và mô tả cách nhiệt độ thay đổi theo thời gian và không gian trong các vật thể hoặc hệ thống.

Phương trình nhiệt thường được biểu diễn như sau:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u \quad (7)$$

Trong đó:

- $\frac{\partial u}{\partial t}$  là đạo hàm riêng theo thời gian của nhiệt độ (u)
- $\alpha$  là hệ số dẫn nhiệt, biểu thị tốc độ truyền nhiệt trong vật thể.
- $\nabla^2 u$  là Laplacian của nhiệt độ (u), biểu thị sự biến đổi trong không gian của nhiệt độ.



Hình 5: Phương trình này nói lên rằng sự thay đổi của nhiệt độ tại một điểm cụ thể trong không gian  $\frac{\partial u}{\partial t}$  phụ thuộc vào tốc độ dẫn nhiệt  $\alpha$  và biến đổi không gian của nhiệt độ  $\nabla^2 u$

## 7 Ito interpretation

Ito interpretation là một khái niệm quan trọng trong lý thuyết xử lý stochastic (lý thuyết xử lý ngẫu nhiên), đặc biệt trong lĩnh vực tài chính và toán học. Nó liên quan đến việc diễn giải và giải thích phương trình stochastic dạng Ito, một công cụ quan trọng để mô hình hóa các biến ngẫu nhiên trong thời gian thực.

Nó giúp chúng ta hiểu cách các yếu tố ngẫu nhiên, cũng như các yếu tố quá trình xử lý (process components) tác động và tương tác với nhau trong phương trình và làm thế nào chúng tạo ra sự biến đổi của biến ngẫu nhiên.

Phương trình stochastic dạng Ito là một phương trình vi phân stochastic sử dụng để mô hình hóa và mô tả sự biến đổi của biến ngẫu nhiên theo thời gian. Phương trình này thường được biểu diễn dưới dạng:

$$dX = a(X, t)dt + b(X, t)dW \quad (8)$$

Trong đó:

- $dX$  là thay đổi infinitesimal (vô cực nhỏ) của biến ngẫu nhiên  $X$  theo thời gian. Nó biểu thị sự biến đổi ngẫu nhiên của biến  $X$  trong một khoảng rất nhỏ của thời gian  $dt$ .
- $a(X, t)dt$  là thành phần xác định (deterministic component) của sự biến đổi của  $X$ . Nó phụ thuộc vào giá trị hiện tại của  $X$  và thời gian  $t$ . Thành phần này mô tả sự thay đổi trung bình hoặc sự biến đổi xác định của  $X$  theo thời gian.
- $b(X, t)dW$  là thành phần ngẫu nhiên (stochastic component) của sự biến đổi của  $X$ . Nó phụ thuộc vào giá trị hiện tại của  $X$  và thời gian  $t$ , cũng như vào dạng ngẫu nhiên  $dW$ . Thành phần này mô tả sự biến đổi ngẫu nhiên của  $X$  dưới tác động của dạng ngẫu nhiên  $dW$ .
- $dW$  là dạng ngẫu nhiên Wiener. Nó thường được mô tả là một biến ngẫu nhiên liên tục và không thể dự đoán, với tính chất  $\Delta W = Z\sqrt{dt}$ , trong đó  $Z$  là một biến ngẫu nhiên theo phân phối Gauss.

Chúng ta sẽ xét một ví dụ về việc sử dụng Ito interpretation để giải quyết một bài toán cụ thể trong tài chính. Giả sử chúng ta muốn mô hình hóa giá cổ phiếu trong thời gian thực và dự đoán sự biến đổi của nó.

Phương trình stochastics dạng itô cho giá cổ phiếu có thể được biểu diễn như sau:

$$dS = \mu S dt + \sigma S dW \quad (9)$$

Trong đó:

- $S$  là giá cổ phiếu
- $\mu$  là tỷ suất lợi nhuận kỳ vọng hàng ngày.
- $\sigma$  là biến động thị trường (volatility)
- $dW$  là phần còn lại, là dạng ngẫu nhiên của biến đổi giá cổ phiếu theo thời gian.

Ito interpretation cho phương trình này sẽ giải thích các thành phần của nó như sau:

- $\mu S dt$  mô tả sự thay đổi trung bình của giá cổ phiếu theo thời gian.
- $\sigma S dW$  mô tả biến động ngẫu nhiên của giá cổ phiếu dưới tác động của dạng ngẫu nhiên  $dW$

Sử dụng Ito interpretation, chúng ta hiểu rằng sự biến đổi của giá cổ phiếu không chỉ do lợi nhuận kỳ vọng  $\mu S dt$  mà còn do yếu tố biến động thị trường ngẫu nhiên  $\sigma S dW$ .

Dựa vào phương trình này và Ito interpretation, chúng ta có thể mô hình hóa và dự đoán giá cổ phiếu trong tương lai dưới tác động của cả yếu tố lợi nhuận kỳ vọng và biến động thị trường, giúp người giao dịch và nhà đầu tư hiểu rõ các yếu tố quyết định giá cổ phiếu và đưa ra quyết định thông minh trong thị trường tài chính.

## 8 Drift function

Drift function là một hàm số mô tả thành phần xác định và xác định hướng thay đổi trung bình của biến ngẫu nhiên theo thời gian. Drift function thường được ký hiệu bằng  $a(X, t)$  trong phương trình itô:

$$dX = a(X, t)dt + \dots \quad (10)$$

Trong phương trình này,  $a(X, t)$  là drift function, chịu trách nhiệm cho sự thay đổi trung bình của biến  $X$  trong khoảng thời gian  $dt$ . Drift function có thể thay đổi theo giá trị hiện tại của  $X$  và thời gian  $t$  và có thể có một sự phụ thuộc phức tạp vào các yếu tố khác nhau.

Drift function là một phần quan trọng trong việc mô hình hóa các hiện tượng ngẫu nhiên và dự đoán sự biến đổi của các biến ngẫu nhiên. Nó cung cấp thông tin về hướng diễn ra của sự biến đổi của biến ngẫu nhiên và là một phần quan trọng trong việc hiểu và mô hình hóa các hiện tượng thực tế.

## 9 Fokker-Planck equation

Fokker-Planck equation là một loại phương trình vi phân riêng phần parabol (partial differential equation) trong lý thuyết xác suất và quá trình ngẫu nhiên. Phương trình này mô tả cách phân phối xác suất của một quá trình stochastics (ngẫu nhiên) thay đổi theo thời gian.

Cụ thể, Fokker-Planck equation xuất hiện trong bối cảnh mô hình hóa sự biến đổi của một hệ thống có tính chất ngẫu nhiên, ví dụ, trong lý thuyết tài chính, vật lý thống kê và vật lý động lượng. Phương trình này giúp dự đoán cách mật độ xác suất của hệ thống thay đổi theo thời gian.

Fokker-Planck equation có dạng tổng quát như sau:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [ f(x,t)p(x,t) ] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{g(x,t)^2}{2} p(x,t) \right] \quad (11)$$

Trong đó:

- $\frac{\partial p(x,t)}{\partial t}$  là đạo hàm riêng của mật độ xác suất  $p(x,t)$  theo thời gian  $t$ . Nó mô tả cách mật độ xác suất thay đổi theo thời gian.
- $\frac{\partial}{\partial x}$  là đạo hàm riêng theo  $x$ . Phần này mô tả cách mật độ xác suất thay đổi theo không gian (vị trí  $x$ )
- $f(x,t)$  là drift function, miêu tả cách giá trị trung bình của biến ngẫu nhiên  $x(t)$  thay đổi theo thời gian  $t$ .  $f(x,t)$  là một hàm của  $x$  và  $t$  và được sử dụng để mô tả sự thay đổi trung bình của quá trình.
- $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  là đạo hàm riêng theo hai vị trí  $x$ . Phần này liên quan đến độ lớn của biến thể ngẫu nhiên (nhiều) và mô tả cách sự biến đổi ngẫu nhiên của  $x(t)$  phân tán trong không gian (vị trí  $x$ ). Hàm  $g(x,t)$  thường đo lường mức độ của biến ngẫu nhiên, và  $\frac{g(x,t)^2}{2}$  chính là phần diffusion

Phương trình này mô tả cách mật độ xác suất thay đổi theo thời gian do tác động của các thành phần xác định và ngẫu nhiên. Fokker-Planck equation là một công cụ quan trọng để nghiên cứu và dự đoán hành vi của các hệ thống phức tạp trong điều kiện ngẫu nhiên.

## 10 Ornstein-Uhlenbeck processes

Ornstein-Uhlenbeck processes là một quá trình stochastics (ngẫu nhiên) thường được sử dụng trong lý thuyết xác suất và thống kê để mô hình hóa sự biến đổi và trạng thái cân bằng của các hệ thống có sự phản hồi trở lại. Cụ thể, các OU process có xu hướng trở về một giá trị trung bình cố định dưới tác động của nhiễu ngẫu nhiên. Chúng có nhiều ứng dụng trong nhiều lĩnh vực như tài chính, vật lý, sinh học và điều khiển tự động.

OU process có thể bao gồm nhiều các biến thể như OU phi tuyến tính, OU colored noise hoặc các biến thể khác nhằm mô tả các hiện tượng phức tạp hơn.

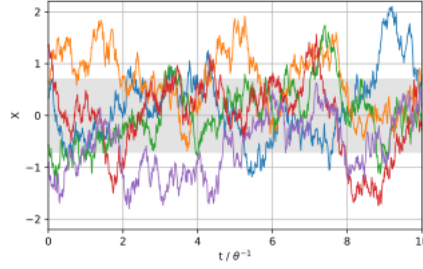
Một OU process cơ bản có dạng sau:

$$dX_t = \theta(\mu - X_t)dt + \sigma dW_t \quad (12)$$

Trong đó:

- $X_t$  là OU process, biểu thị sự biến đổi của hệ thống tại thời điểm  $t$ .
- $\theta$  là hệ số phản hồi, đo lường mức độ mà  $X_t$  trở về giá trị trung bình  $\mu$
- $\mu$  là giá trị trung bình của process.
- $\sigma$  là độ lớn của biến thể noise, thường dựa trên quá trình Wiener  $W_t$





Hình 6: Các biến thể OU process có thể điều chỉnh các thành phần này để thích nghi với các tình huống cụ thể hoặc để mô hình biến đổi phức tạp hơn trong thời gian. Chúng có thể được sử dụng để mô hình hóa các quá trình ngẫu nhiên có cấu trúc phản hồi và trạng thái cân bằng trong nhiều ứng dụng khác nhau.

## 11 Monte Carlo method

Phương pháp Monte Carlo là một phương pháp toán học và thống kê dựa trên việc sử dụng số ngẫu nhiên để giải các vấn đề có thể có sự ngẫu nhiên trong quá trình tính toán. Phương pháp này được đặt tên theo sông bài Monte Carlo ở Monaco, nơi có trò chơi roulette với tính ngẫu nhiên tương tự.

Cụ thể, phương pháp Monte Carlo được sử dụng để xấp xỉ giá trị của một biểu thức toán học bằng cách thực hiện một loạt các mẫu ngẫu nhiên và tính toán giá trị trung bình của chúng. Phương pháp này được ứng dụng rộng rãi trong nhiều lĩnh vực như vật lý, thống kê, tài chính.

Các bước cơ bản của phương pháp Monte Carlo là:

- Xác định vấn đề: Chọn một vấn đề cần giải và biểu diễn nó dưới dạng một biểu thức toán học hoặc mô hình.
- Tạo số ngẫu nhiên: Sinh ra một loạt các số ngẫu nhiên theo một phân phối xác định
- Áp dụng mẫu ngẫu nhiên: Sử dụng các số ngẫu nhiên để đưa vào biểu thức hoặc mô hình đã chọn và tính giá trị tương ứng.
- Tính toán giá trị trung bình: lấy trung bình của tất cả các giá trị đã tính từ các mẫu để xấp xỉ giá trị cuối cùng của biểu thức hoặc mô hình.

Phương pháp Monte Carlo thường được sử dụng khi không thể tính toán chính xác giá trị mong muốn một cách trực tiếp, nhưng có thể dễ dàng tạo ra các mẫu ngẫu nhiên và tính toán xấp xỉ.

## 12 Boundary conditions

Điều kiện biên (Boundary conditions) là các điều kiện được áp dụng tại ranh giới của miền không gian khi giải một vấn đề toán học hoặc vật lý. Các điều kiện biên quy định cách giải phương trình hay hệ phương trình trong miền không gian cụ thể đó.

Trong trường hợp phương trình Fokker-Planck (FPE), điều kiện biên có thể bao gồm các điều kiện về phân phối xác suất tại các ranh giới của miền không gian. Cụ thể:

- Đối với phương trình FPE mô tả quá trình lan truyền xác suất, điều kiện biên có thể xác định phân phối xác suất tại các giới hạn của không gian chúng ta quan tâm.
- Ví dụ, nếu không gian của biến xác suất là  $R$ , điều kiện biên có thể là  $p(\infty, t) = 0$  và  $p(-\infty, t) = 0$ , giả định rằng xác suất tại  $\infty$  và  $-\infty$  là không có.

- Đối với các phương trình FPE tương ứng với time-reversed process, điều kiện khởi tạo tại  $t = T$  là quan trọng.
- Nếu  $p(x, T)$  được xác định là phân phối xác suất ổn định của reverse process, điều kiện khởi tạo có thể đặt ra giả định nó có sẵn và có thể là một phân phối xác suất đã biết từ các điều kiện khác của vấn đề.

Điều kiện biên có thể thay đổi tùy thuộc vào bối cảnh cụ thể và vấn đề mà chúng ta đang xem xét. Trong nhiều trường hợp, chúng được xác định để đảm bảo tính duy nhất và ổn định của giải pháp.

### 13 Effect of diffusion on Gaussian mixture

Một chút mở rộng cho quá trình diffusion 1D, chúng ta sử dụng một điều kiện ban đầu là gaussian mixture gồm M mixture components.

$$p_0(x) = \sum_{j=1}^M w_j \frac{1}{\sqrt{2\pi s_j^2}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu_j]^2}{2s_j^2} \right\} \quad (13)$$

Trong đó:

- $\mu_j$  là trung bình của thành phần thứ j trong hỗn hợp gaussian.
- $s_j$  là độ lệch chuẩn của thành phần thứ j trong gaussian mixture.
- $w_j$  là trọng số của thành phần thứ j, sao cho  $\sum_{j=1}^M w_j = 1$

**Transition Probability cho Quá Trình Diffusion 1D:**

$$p(x, t|x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2 t} \right\} . \quad (14)$$

**Tích Phân để Tính Xác Suất Tại Thời Điểm t:**

$$\begin{aligned} p(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t|x_0, 0) p_0(x_0) dx_0 \\ &= \sum_{j=1}^M w_j \frac{1}{\sqrt{2\pi(s_j^2 + \sigma^2 t)}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu_j]^2}{2(s_j^2 + \sigma^2 t)} \right\} . \end{aligned} \quad (15)$$

Trong đó:

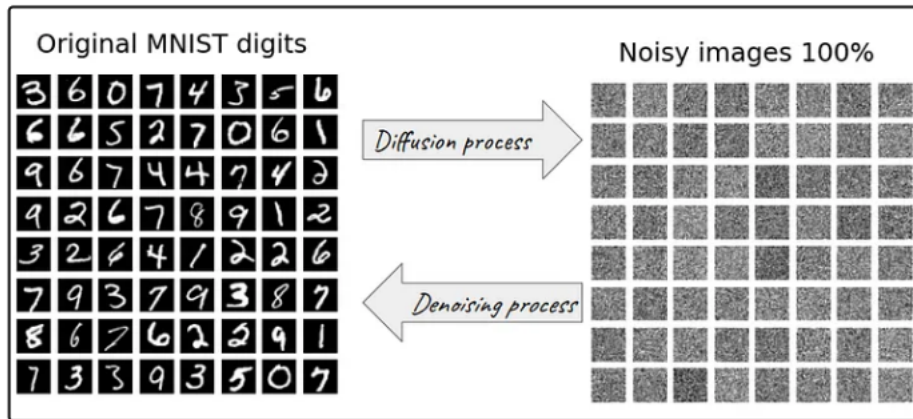
- $p(x, t)$  là xác suất phân phối tại vị trí x và thời điểm t sau quá trình diffusion từ điều kiện ban đầu là Gaussian Mixture  $p_0(x)$ .
- Đoạn tích phân trên là tích phân qua tất cả các điều kiện ban đầu có thể, mỗi điều kiện ban đầu được đánh trọng số bởi  $p_0(x_0)$ .
- Kết quả là một tổng của các Gaussian với trung bình  $\mu_j$  và độ lệch chuẩn  $(s_j^2 + \sigma^2 t)$ , nghĩa là tất cả các thành phần trong mixture được "lan truyền" và có phương sai tăng lên sau mỗi khoảng thời gian t.

## Phần II: Denoising Diffusion Probabilistic Models (DDPM)

DDPM là một phương pháp để tạo ra dữ liệu mới, chẳng hạn như hình ảnh, âm thanh, hoặc văn bản, một cách tự nhiên. Bao gồm hai quá trình chính là Forward Diffusion và Reverse Diffusion. Trong đó:

- **Quá trình Phân tán - Forward Diffusion:** Bắt đầu từ dữ liệu thực, mô hình áp dụng một chuỗi các bước tạo nhiễu ngẫu nhiên, dần dần thêm nhiễu vào dữ liệu ban đầu cho đến khi toàn bộ cấu trúc của dữ liệu gốc biến mất, để lại chỉ một mẫu nhiễu.
- **Quá trình Khử nhiễu - Reverse Diffusion:** Đây là quá trình ngược lại, trong đó mô hình học cách loại bỏ dần dần nhiễu khỏi mẫu nhiễu, với mục tiêu cuối cùng là tái tạo dữ liệu gốc. Quá trình này được thực hiện thông qua một loạt các bước, với mỗi bước cố gắng phục hồi một phần của cấu trúc dữ liệu ban đầu từ dữ liệu bị nhiễu.

Bên cạnh đó, để tạo ra được một dữ liệu mới từ DDPM thì chúng ta cần phải làm cho mô hình học cách thực hiện quá trình khử nhiễu một cách hiệu quả. Mô hình được huấn luyện để dự đoán nhiễu và loại bỏ nó, từ đó phục hồi dữ liệu gốc từ mẫu nhiễu. Sau khi huấn luyện, mô hình có thể sử dụng quá trình khử nhiễu để tạo ra dữ liệu mới. Bắt đầu từ nhiễu ngẫu nhiên, mô hình thực hiện quá trình khử nhiễu để tạo ra mẫu dữ liệu mới mà không cần dựa trên dữ liệu gốc.



Hình 7: DDPM được sử dụng trong nhiều ứng dụng khác nhau, từ tạo hình ảnh đến tạo văn bản và âm thanh. Một trong những ưu điểm chính của DDPM là khả năng tạo ra dữ liệu có chất lượng cao và tự nhiên.

### 14 Forward Diffusion

Ở phần này chúng ta sẽ tìm hiểu về Forward Diffusion - bước đầu tiên trong DDPM. Quá trình này là quá trình phá vỡ hình ảnh gốc bằng cách thêm dần các noise vào tại các thời điểm từ  $[x_0 : x_T]$  và giả sử rằng chúng ta sử dụng Normal Distribution để sinh ra các hình ảnh nhiễu tại các thời điểm từ  $[x_0 : x_T]$ . Công thức của Normal Distribution cho từng thời điểm  $x$  được định nghĩa như sau:

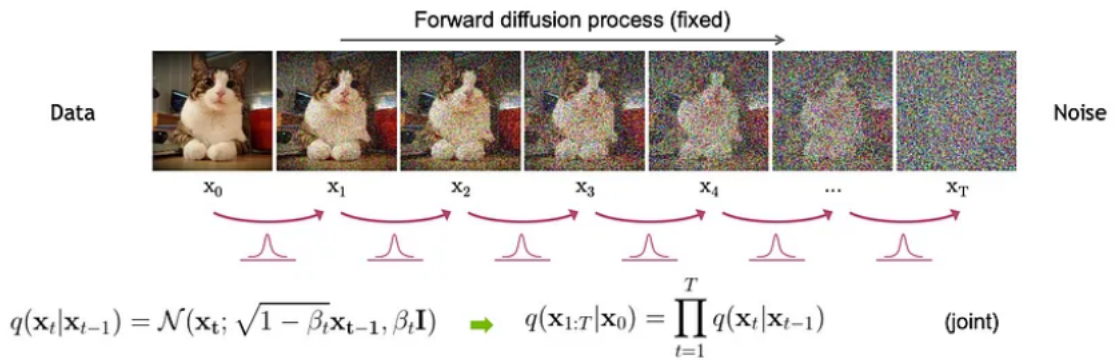
$$q(x_t|x_{t-1}) = \mathcal{N}(x_t; \sqrt{1 - \beta_t}x_{t-1}, \beta_t\mathbf{I}) \quad (16)$$

Trong đó:

- $q(x_t|x_{t-1})$ : Là Conditional Distribution của dữ liệu tại thời điểm  $t$ , với dữ liệu tại thời điểm  $t$  trước đó
- $\mathcal{N}(x_t; \sqrt{1 - \beta_t}x_{t-1}, \beta_t\mathbf{I})$ : Là Công thức phân phối chuẩn (Normal Distribution).  $\mathbf{I}$  là ma trận đơn vị, điều này có nghĩa là noise được thêm vào tại các thời điểm  $T$  đều là độc lập xuyên suốt các chiều không gian của dữ liệu.
- $\sqrt{1 - \beta_t}x_{t-1}$ : Mean của Normal Distribution cho thời điểm  $t$  hiện tại.
- $\beta_t$ : Tham số điều khiển số lượng noise được thêm vào tại mỗi thời điểm  $T$ .
- $\beta_t\mathbf{I}$ : Covariance Matrix của noise được thêm vào.

Như vậy, ta có công thức tổng quan cho Normal Distribution với thời điểm  $[x_0 : x_T]$  là:

$$q(x_{1:T}|x_0) = \prod_{t=1}^T q(x_t|x_{t-1}) \quad (17)$$



Hình 8: Forward Diffusion được mô tả dưới dạng một chuỗi Markov, trong đó size của từng bước được xác định thông qua variance schedule. Điểm đặc biệt của Markovian process chính là khả năng thu được mẫu tại bất kỳ khoảng thời gian nào một cách chính xác mà không cần trải qua các bước trung gian. Bên cạnh đó, variance schedule được thiết kế một cách tỉ mỉ, nhằm đảm bảo mẫu sẽ dần biến đổi thành white noise khi đạt đến bước thời gian  $T$ .

### 14.1 Basic of diffusion

Trước tiên chúng ta có quá trình diffusion một chiều trên đường thẳng số thực. Sử dụng phương trình vi phân stochastic (SDE) để mô tả quá trình này:

$$\dot{x} = \sigma \eta(t) \quad (18)$$

Trong đó:

- $\sigma$  là một hằng số dương
- $\eta(t)$  là Gaussian white noise

Để giải thích ý nghĩa của biểu thức trên chúng ta cần định nghĩa nó dưới dạng giới hạn  $\Delta t$  nhỏ của quá trình rời rạc, trong đó  $x(t + \Delta t)$  được tính dựa trên  $x(t)$  và một số  $r$  được rút ra từ phân phối chuẩn (normal distribution) với mean 0 và variance 1. Đây là một ví dụ cơ bản của Euler Maruyama.

Tiếp theo xem xét sự thay đổi của mật độ xác suất  $p(x, t)$  tức xác suất hệ thống ở vị trí  $x$  tại thời điểm  $t$ , theo thời gian. Nó đề cập đến diffusion equation:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \sigma\sqrt{\Delta t} r \quad (19)$$

thể hiện rằng mật độ xác suất  $p(x, t)$  thay đổi theo thời gian theo cách được mô tả bởi phương trình trên.

Diffusion equation còn được gọi là heat equation - mô tả cách mật độ xác suất  $p(x, t)$  thay đổi theo thời gian trong một quá trình diffusion. Cụ thể, nó cho biết cách độ dày của xác suất tại một vị trí  $x$  thời gian  $t$  thay đổi theo thời gian.

Diffusion equation là một phương trình quan trọng trong lý thuyết xác suất và quá trình ngẫu nhiên, nó có thể được xuất phát từ một loạt các quy tắc cơ bản về sự biến đổi ngẫu nhiên. Bây giờ chúng ta sẽ tìm hiểu cách mà phương trình này được tạo ra.

Bước đầu tiên là suy ra một biểu thức cho sự biến đổi xác suất  $p(x, t)$  theo thời gian  $t$  khi không có sự tương tác hoặc mật độ xác suất ban đầu tại các vị trí khác. Một cách tự nhiên, nó sẽ thay đổi theo cường độ biến đổi ngẫu nhiên ( $\sigma$ ) và tỷ lệ độ dày không gian ( $\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}$ ). Dựa vào điều này chúng ta sẽ mô tả diffusion equation thông qua hệ số nhiệt  $D = \sigma^2/2$  với  $D$  là một diffusion constant.

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} . \quad (20)$$

Phương trình này mô tả sự biến đổi của mật độ xác suất  $p(x, t)$  theo thời gian  $t$  và vị trí không gian  $x$  trong diffusion process. Nó cho biết tốc độ biến đổi của xác suất tại một thời điểm  $t$  bằng một nửa của bình phương độ dày không gian và cường độ biến đổi theo thời gian.

Để giải diffusion equation này với một điều kiện cụ thể là  $p(x, 0) = \delta(x - x_0)$ , trong đó  $\delta(x)$  là một hàm delta dirac. Điều này có nghĩa là chúng ta đang xem xét một trường hợp trong đó chúng ta biết chính xác rằng vị trí ban đầu là tại  $x_0$

Với điều kiện ban đầu  $p(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . Công thức cho heat kernel được áp dụng để giải phương trình với điều kiện này. Và chúng ta sẽ có:

$$p(x, t|x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2 t} \right\} . \quad (21)$$

Công thức này cho biết xác suất hệ thống ở vị trí  $x$  tại thời điểm  $t$ , khi ta đã biết rằng hệ thống ban đầu ở vị trí  $x_0$  tại thời điểm 0.

Nói cách khác, heat kernel cho biết cách xác suất của sự di chuyển của hệ thống từ vị trí  $x_0$  tại thời điểm 0 đến vị trí  $x$  tại thời điểm  $t$  phụ thuộc vào sự phân tán không gian và thời gian ( $\sigma^2$  và  $t$ ). Nó là một biểu thức quan trọng trong lý thuyết diffusion.

**Lưu ý:** Một câu hỏi đặt ra là liệu heat kernel có được dùng để giải diffusion equation với điều kiện  $p(x, 0)$  cụ thể hay không?. Một cách rõ ràng hơn về vai trò của heat kernel ở đây đó là:

- **Base diffusion equation:** mô tả cách mật độ xác suất  $p(x, t)$  thay đổi theo thời gian và không gian trong diffusion process. Nó là một phương trình cơ bản trong lý thuyết xác suất và quá trình ngẫu nhiên.
- **Công thức heat kernel:** Công thức heat kernel không phải là một cách để giải diffusion equation, mà là một cách biểu diễn mật độ xác suất  $p(x, t)$  tại một thời điểm  $t$  sau một khoảng thời gian từ điểm ban đầu có thông tin cụ thể (biểu thị bằng hàm delta dirac).

- **Tại sao sử dụng heat kernel?:** Heat kernel được sử dụng để biểu diễn mật độ xác suất trong trường hợp cụ thể khi chúng ta đã biết một điểm cụ thể mà first step ở đó. Nó cho biết xác suất sẽ xuất hiện ở các vị trí khác nhau sau một khoảng thời gian  $t$  dựa trên điểm ban đầu đã biết. Trong bối cảnh của diffusion nó sẽ giúp làm mịn hình ảnh và mô tả sự lan truyền của dữ liệu.

**Kết luận:** Về cơ bản, heat kernel không giúp giải phương trình diffusion mà là một công cụ để biểu diễn kết quả phương trình diffusion cho một điều kiện ban đầu cụ thể và nó có thể được sử dụng để tính toán xác suất của sự di chuyển của hệ thống trong không gian và thời gian.

Cuối cùng để tính toán mật độ xác suất  $p(x, t)$  dựa trên xác suất ban đầu  $p_0(x_0)$  và heat kernel  $p(x, t|x_0, 0)$ . Để làm điều này, chúng ta tính tích phân qua tất cả các vị trí ban đầu có thể  $x_0$  bằng cách sử dụng heat kernel. Điều này cho phép chúng ta tính toán mật độ xác suất cuối cùng  $p(x, t)$  tại mọi vị trí  $x$  và thời điểm  $t$  dựa trên mật độ xác suất ban đầu  $p_0(x_0)$ . Công thức này giúp hiểu cách mật độ xác suất thay đổi theo thời gian và không gian trong quá trình diffusion.

$$p(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t|x_0, 0)p_0(x_0) dx_0 . \quad (22)$$

Trong đó:

- $p(x, t)$  là mật độ xác suất của hệ thống tại vị trí  $x$  tại thời điểm  $t$ .
- $p(x, t|x_0, 0)$  là heat kernel. Cho biết xác suất di chuyển từ vị trí ban đầu  $x_0$  tại thời điểm 0 đến vị trí  $x$  tại thời điểm  $t$ , dựa trên sự phân tán không gian và thời gian.
- $p_0(x_0)$  là mật độ xác suất ban đầu tại vị trí  $x_0$  tại thời điểm 0.

## 14.2 Basics of stochastic differential equations (SDEs)

Diffusion là một ví dụ đơn giản về quá trình ngẫu nhiên được điều chỉnh bởi SDE - một phương trình mô tả sự biến đổi của một biến ngẫu nhiên  $x(t)$  theo thời gian  $t$  có dạng:

$$\dot{x} = f(x, t) + g(x, t) \eta(t) \quad (23)$$

Trong đó:

- $\dot{x}$  là đạo hàm riêng theo thời gian của  $x(t)$ .
- $f(x, t)$  là drift function, miêu tả sự biến đổi trung bình của  $x(t)$  theo thời gian.
- $g(x, t)$  là hàm nhiễu hoặc diffusion, miêu tả sự biến đổi ngẫu nhiên của  $x(t)$ .
- $\eta(t)$  là Gaussian white noise.

Áp dụng phương trình itô để theo dõi các biến đổi ngẫu nhiên của phương trình trên là sự hạn chế của quá trình rời rạc khi ta giảm bước thời gian  $\Delta t$  về 0. Với  $\Delta t$  rất nhỏ chúng ta miêu tả cách giá trị  $x(t)$  biến đổi ngẫu nhiên trong thời gian ngắn  $\Delta t$  dưới tác động của biến ngẫu nhiên.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + f(x(t), t)\Delta t + g(x, t)\sqrt{\Delta t} r \quad (24)$$

Trong đó:

- $x(t + \Delta t)$  là giá trị của biến ngẫu nhiên  $x$  tại thời điểm  $t + \Delta t$
- $x(t)$  là giá trị của biến ngẫu nhiên  $x$  tại thời điểm  $t$ .

- $f(x(t), t)\Delta t$  là thành phần drift. Nó miêu tả cách giá trị trung bình của  $x(t)$  thay đổi theo thời gian  $t$ .  $f(x(t), t)$  là một hàm của  $x$  và  $t$  được sử dụng để mô tả sự thay đổi trung bình của quá trình.
- $g(x, t)\sqrt{\Delta t} r$  là thành phần "nhiều" hoặc diffusion.  $g(x, t)$  là một hàm  $x$  và  $t$  đo lường mức độ của biến ngẫu nhiên trong quá trình.  $\sqrt{\Delta t}$  là căn bậc hai của  $\Delta t$ , và  $r$  là một số ngẫu nhiên được lấy mẫu từ normal distribution ( $r \sim \mathcal{N}(0, 1)$ ).

Công thức trên là một dạng tổng quát của Euler-Maruyama.

Thường thì phương trình Fokker-Planck equation (FPE) khó có thể được giải một cách chính xác hoặc khá khó khăn để có được giải pháp chính xác cho  $p(x, t)$  (mật độ xác suất). Nên chúng ta sẽ cung cấp phương trình SDE cho OU process, nó mô tả cách  $x(t)$  biến đổi theo thời gian. Trong trường hợp một chiều, phương trình SDE có dạng:

$$\dot{x} = \frac{1}{\tau} [\mu - x] + \sigma \sqrt{\frac{2}{\tau}} \eta(t) . \quad (25)$$

Trong đó:

- $\tau$  là tham số liên quan đến tốc độ trung bình trở về
- $\mu$  là giá trị trung bình mà quá trình trung bình trở về
- $\sigma$  là độ lớn của biến ngẫu nhiên.
- $\eta(t)$  là white gaussian noise.

Công thức cho  $p(x, t|x_0, 0)$  là một biểu thức phụ thuộc vào  $x, x_0, t$  và miêu tả cách mật độ xác suất thay đổi theo thời gian cho OU process khi ta biết rằng tại  $t = 0$  đã có giá trị  $x_0$ . Công thức này là heat kernel của OU process.

$$p(x, t|x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s(t)^2}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu(t)]^2}{2s(t)^2} \right\} \quad (26)$$

Trong công thức này:

- $\mu(t)$  là giá trị trung bình tại thời điểm  $t$  và được tính như sau:

$$\mu(t) := x_0 e^{-t/\tau} + \mu \left(1 - e^{-t/\tau}\right) \quad (27)$$

- $s(t)^2$  là phương sai tại thời điểm  $t$  và được tính như sau:

$$s(t)^2 := \sigma^2 \left(1 - e^{-2t/\tau}\right) \quad (28)$$

OU process có một đặc điểm quan trọng đó là khi thời gian tăng lên, mật độ xác suất  $p(x, t)$  ít phụ thuộc vào  $p_0(x)$ , tức là giá trị ban đầu  $p_0(x)$  mất dần ảnh hưởng vào quá trình tiến đến trạng thái ổn định  $p_{ss}(x)$ .

$$p(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t|x_0, 0) p_0(x_0) dx_0 . \quad (29)$$

Trong đó:

- $p(x, t)$  là mật độ xác suất tại thời điểm  $t$  cho OU process. Nó miêu tả xác suất mà biến  $x(t)$  có giá trị  $x$  tại thời điểm  $t$ , khi chúng ta đã biết mật độ xác suất ban đầu  $p_0(x_0)$  tại  $t = 0$ .
- $p(x, t|x_0, 0)$  là heat kernel của OU process, đã được tính toán trước đó và miêu tả cách mật độ xác suất thay đổi theo thời gian từ  $t = 0$  đến  $t$  khi biết rằng tại  $t = 0$ ,  $x$  đã có giá trị  $x_0$ .
- $p_0(x_0)$  là mật độ xác suất ban đầu tại  $t = 0$ , tức là mật độ xác suất ban đầu của biến  $x(t)$  tại  $t = 0$ . Nó là điều kiện ban đầu cho quá trình.

Tích phân này có nghĩa là chúng ta đang tính toán mật độ xác suất  $p(x, t)$  bằng cách tích phân trên tất cả các giá trị có thể có của  $x_0$  từ âm vô vùng đến dương vô cùng. Điều này có nghĩa rằng chúng ta xem xét mọi giá trị ban đầu có thể cho  $x$  tại  $t = 0$  (từ âm vô cùng đến dương vô cùng) và tính xác suất mà  $x(t)$  sẽ có giá trị  $x$  tại thời điểm  $t$  sau khi đã biết mật độ xác suất ban đầu  $p_0(x_0)$  tại  $t = 0$ .

Tới đây chúng ta có thể thấy rằng OU process có khả năng quên dần đi điều kiện ban đầu. Khi thời gian  $t$  tăng lên vô cùng, heat kernel  $p(x, t|x_0, 0)$  của OU process tiến đến phân phối ổn định  $p_{ss}(x)$  mà chúng ta đã xác định trước đó.

Điều quan trọng ở đây là  $p(x, t|x_0, 0)$  không còn phụ thuộc mạnh vào  $x_0$  khi  $t$  lớn. Nó nghĩa là dù ban đầu  $x$  có giá trị nào tại  $t = 0$ , khi  $t$  tăng lên đủ lớn, mật độ xác suất  $p(x, t)$  tại thời điểm  $t$  không còn quá phụ thuộc vào giá trị ban đầu  $x_0$ . Thay vào đó, nó tiến gần đến một phân phối ổn định  $p_{ss}(x)$  với giá trị trung bình  $\mu$  và phương sai  $\sigma^2$ .

Ở 3 công thức trên chúng ta đã giải phương trình OU process và tính toán heat kernel tại thời điểm  $t$  cụ thể. Và chúng ta đã thấy cách mật độ xác suất tiến gần đến giá trị ổn định khi thời gian dài. Cuối cùng chúng ta nhận thấy rằng OU process có khả năng quên dần đi điều kiện ban đầu khi thời gian tăng lên với một số lý do.

Trước tiên chúng ta nhắc lại công thức 12 như sau:

$$dX_t = \theta(\mu - X_t)dt + \sigma dW_t$$

- **Tính Chất Hồi Quy:** OU process có tính chất hồi quy về giá trị trung bình dài hạn. Điều này có nghĩa là, không phụ thuộc vào giá trị khởi tạo, quá trình sẽ dần dần hội tụ về một giá trị trung bình cố định qua thời gian. Do đó, ảnh hưởng của điều kiện ban đầu giảm dần theo thời gian. Từ phương trình, ta thấy rằng khi  $X_t$  lớn hơn  $\mu$  thì  $\theta(\mu - X_t)$  sẽ âm dẫn đến việc giảm  $X_t$  về phía  $\mu$  và ngược lại. Điều này cho thấy quá trình có tính hồi quy.
- **Sự Cân Bằng Giữa Xu Hướng và Nhiễu:** Trong OU process, có một sự cân bằng giữa xu hướng hồi quy về giá trị trung bình và ảnh hưởng của nhiễu ngẫu nhiên. Khi thời gian trôi đi, ảnh hưởng của nhiễu ngẫu nhiên trở nên quan trọng hơn so với điều kiện ban đầu.
- **Decay Factor:** Trong công thức của OU process, có một hệ số giảm dần liên quan đến thời gian, điều này làm cho ảnh hưởng của điều kiện ban đầu giảm đi theo cấp số nhân khi thời gian tăng lên. hệ số giảm dần được thể hiện thông qua  $\theta$ . Giá trị lớn của  $\theta$  có nghĩa là hệ số giảm dần nhanh, làm cho ảnh hưởng của điều kiện ban đầu giảm nhanh theo thời gian.
- **Tính Dừng:** OU process là một quá trình dừng, nghĩa là các đặc trưng thống kê của nó (như kỳ vọng và phương sai) không thay đổi theo thời gian. Điều này giúp quá trình trở nên ít phụ thuộc vào điều kiện ban đầu khi thời gian tăng lên.

### 14.3 More general SDEs

Bây giờ chúng ta sẽ cùng tìm hiểu về phương trình vi phân ngẫu nhiên (SDE) đa biến và phương trình Fokker-Planck tương ứng. Quay trở lại với SDE, với  $x(t)$  là một vector N-chiều ( $x(t) \in \mathbb{R}^N$ ) ta có:



$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{g}(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}(t) \quad (30)$$

Trong đó:

- $f(x, t)$  là một hàm ánh xạ vector từ  $\mathbf{x}$  và thời gian  $t$  sang một vector trong  $R^N$
- $g(x, t)$  là một ma trận  $N \times M$  (trong đó  $N$  là số chiều của  $\mathbf{x}$  và  $M$  là số chiều của vector noise  $\boldsymbol{\eta}(t)$ ). Ma trận này phụ thuộc vào  $\mathbf{x}$  và  $t$ .
- $\boldsymbol{\eta}(t)$  là một vector  $M$  chiều của các thành phần gaussian noise độc lập

Tiếp theo chúng ta sẽ có Euler-Maruyama đa biến với:

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), t)\Delta t + \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), t)\sqrt{\Delta t} \mathbf{r} \quad (31)$$

Trong đó  $\mathbf{r}$  là một vector  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_M)^T$  với mỗi thành phần  $r_i$  được lấy mẫu từ phân phối chuẩn. Công thức Fokker-Planck cho phương trình SDE đa biến có dạng:

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^N -\frac{\partial}{\partial x_j} [f_j(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t)] + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} [D_{jk}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t)] \quad (32)$$

Trong đó:

- $D(x, t)$  là một ma trận  $N \times N$  gọi là "diffusion tensor". Các phần tử của ma trận này được tính như sau:

$$D_{jk}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^M \sigma_{j\ell}(\mathbf{x}, t) \sigma_{k\ell}(\mathbf{x}, t) .$$

- $\sigma_{j\ell}(\mathbf{x}, t)$  là các phần tử của ma trận  $g(x, t)$ . Ma trận này chứa thông tin về biến đổi của mỗi thành phần của  $\mathbf{x}$  do nhiễu.

Cuối cùng, chúng ta sẽ tập trung vào trường hợp đơn giản hơn trong đó  $g(x, t)$  không còn là một ma trận  $N \times M$  mà chỉ là một hàm số  $g(x, t)$  và  $M = N$  (tức số chiều của nhiễu và số chiều của  $\mathbf{x}$  bằng nhau). Điều này đồng nghĩa với việc mỗi chiều của  $\mathbf{x}$  có nhiễu riêng của nó (không có sự kết nối) và tất cả các nhiễu có cùng độ lớn  $g(\mathbf{x}, t)$ .

Phương trình Fokker-Planck đơn giản lại như sau:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\nabla \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t)] + \nabla^2 \left[ \frac{g(\mathbf{x}, t)^2}{2} p(\mathbf{x}, t) \right] \\ &= -\nabla \cdot \left[ \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t) - \nabla \left( \frac{g(\mathbf{x}, t)^2}{2} p(\mathbf{x}, t) \right) \right] . \end{aligned} \quad (33)$$

#### 14.4 What SDEs should we use to corrupt samples

Ở phần này chúng ta sẽ thảo luận về việc lựa chọn stochastic process để biến đổi mẫu từ một phân phối cố định sang mẫu từ phân phối mục tiêu.

Chúng ta có 3 lưu ý cần xem xét:

- Mục tiêu là tìm một quá trình ngẫu nhiên đơn giản đủ để tính toán mật độ xác suất  $p(t)$  một cách chính xác khi  $t$  đủ lớn. Điều này quan trọng vì quá trình ngược (reverse diffusion) sẽ chuyển chúng ta từ  $p(x, t)$  về phân phối mục tiêu. Khi chúng ta biết phân phối  $p(x, t)$  sau một thời gian đủ lớn, chúng ta biết cách lấy mẫu từ phân phối này để tạo ra các mẫu reverse diffusion từ phân phối mục tiêu.

- Mục tiêu là làm cho  $p(x, t)$  (với  $t$  đủ lớn) trở thành một phân phối dễ lấy mẫu (ví dụ: phân phối gauss). Điều này làm cho việc tạo ra các mẫu reverse diffusion từ  $p(x, t)$  trở nên dễ dàng.
- Chúng ta muốn mẫu bị biến đổi mạnh, tức là không còn dấu vết của mẫu ban đầu. Điều này đòi hỏi việc chúng ta phải đưa rất nhiều nhiễu vào các mẫu. Điều này có thể đạt được thông qua việc sử dụng hệ số nhiễu lớn hoặc thông qua việc biến đổi trong một khoảng thời gian rất dài. Tuy nhiên, việc định nghĩa "lớn" khác nhau cho từng tập dữ liệu. Vì vậy, để tránh phải điều chỉnh tham số nhiễu một cách thủ công sau khi nhận thấy rằng chúng ta chưa làm cho mẫu bị biến đổi đủ "nhiều", một giải pháp là sử dụng nhiễu tăng lên theo cấp số mũ (exponential) theo thời gian. Như vậy chúng ta sẽ có đủ nhiễu.

Việc lựa chọn stochastic process:

- Cần loại bỏ quá trình ngẫu nhiên tiềm năng vì hầu hết các phương trình Fokker-Planck không thể được giải chính xác. Các quá trình được mô tả ở trên đã được đưa qua quá trình biến đổi ngẫu nhiên và OU process.
- Cả hai quá trình biến đổi ở trong thời gian dài (long time limit), chuyển đổi mẫu thành các mẫu từ phân phối gauss. Việc này đảm bảo rằng  $p(x, t)$  (với  $t$  đủ lớn) trở thành một phân phối dễ lấy mẫu. (có thể lấy mẫu từ phân phối gauss)

#### 14.5 Variance Exploding SDE (VE SDE)

Phần này chúng ta sẽ tìm hiểu về Variance Exploding (VE) trong SDE và cách xây dựng phân phối chuyển đổi (transition probability) tương ứng.

Phương trình SDE cho VE được xác định bởi:

$$\dot{\mathbf{x}} = \sqrt{\frac{d[\sigma^2(t)]}{dt}} \boldsymbol{\eta}(t) \quad (34)$$

Với  $\sigma^2(t)$  là một hàm tăng dần và  $x(t)$  thuộc không gian  $R^N$ . Phương trình này mô tả một quá trình nhiễu trong đó mức độ nhiễu tăng lên theo thời gian.

Phân phối chuyển đổi cho quá trình VE mô tả xác suất của VE khi thời gian tiến đến  $t$ , dựa trên giá trị ban đầu  $x_0$  tại  $t = 0$ . Và sau đó công thức được phân rã thành tích của  $N$  phân phối Gauss 1D.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0) &= \frac{1}{\left[\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}\right]^N} \exp \left\{ -\frac{[\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}]^2}{2\sigma^2(t)} \right\} \\ &= \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} \exp \left\{ -\frac{[x_j - x_j^{(0)}]^2}{2\sigma^2(t)} \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

Hàm  $\sigma^2(t)$  quyết định cách biến thiên của mức độ nhiễu theo thời gian. Để tăng quá trình diffusion chúng ta có thể để cho quá trình nhiễu tăng theo cấp số mũ:

$$\sigma^2(t) := \sigma_{min}^2 \left( \frac{\sigma_{max}^2}{\sigma_{min}^2} \right)^{t/T} = \sigma_{min}^2 \exp \left\{ \frac{t}{T} \log \left( \frac{\sigma_{max}^2}{\sigma_{min}^2} \right) \right\} \quad (36)$$

Trong đó  $T$  là thời gian chúng ta áp dụng quá trình nhiễu trên các mẫu. Điều quan trọng không phải là việc đặt tham số mà là việc hàm  $\sigma^2(t)$  tăng theo cấp số mũ theo thời gian. Điều này sẽ giúp cho sự biến đổi mạnh hơn theo thời gian.

## 14.6 Variance Preserving SDE (VP SDE)

Ở phần này chúng ta sẽ tìm hiểu về Variance Preserving (VP) trong SDE.

Phương trình SDE cho VP được định nghĩa bởi:

$$\dot{\mathbf{x}} = -\frac{\beta(t)}{2}\mathbf{x} + \sqrt{\beta(t)}\boldsymbol{\eta}(t) \quad (37)$$

Trong đó,  $\beta(t)$  là một hàm tăng dần và  $x(t)$  thuộc không gian  $R^N$ . Phương trình này mô tả một quá trình nhiễu trong đó mức độ nhiễu để duy trì phương sai ban đầu.

Phân phối chuyển đổi  $p(x, t|x_0, 0)$  VP cho biết xác suất để quá trình nhiễu đang tiến đến một giá trị  $x$  tại thời điểm  $t$  dựa trên giá trị ban đầu  $x_0$  tại thời điểm  $t = 0$

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) &= \frac{1}{\left[\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}\right]^N} \exp\left\{-\frac{[\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}(t)]^2}{2\sigma^2(t)}\right\} \\ &= \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} \exp\left\{-\frac{[x_j - \mu_j(t)]^2}{2\sigma^2(t)}\right\} \end{aligned} \quad (38)$$

Với

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}(t) &:= \mathbf{x}^{(0)} e^{-\frac{1}{2} \int_0^t \beta(s) ds} \\ \sigma^2(t) &:= 1 - e^{-\int_0^t \beta(s) ds} . \end{aligned} \quad (39)$$

Trong đó

- $\mathbf{x}$  là một vector  $N$  chiều, biểu thị tọa độ của quá trình nhiễu tại thời điểm  $t$ .
- $\mathbf{x}^{(0)}$  là giá trị ban đầu của quá trình nhiễu tại  $t = 0$
- $t$  là thời gian của quá trình nhiễu.

Biểu thức này dựa trên phân phối gauss và có thể được chia thành  $N$  phần độc lập, mỗi thành phần biểu thị một chiều của vector  $\mathbf{x}$ .

- Mẫu từng chiều  $x_j$  của vector  $\mathbf{x}$  (với  $j$  từ 1 đến  $N$ ) được mô tả bằng một phân phối gauss 1D với giá trị trung bình  $\mu_j(t)$  và phương sai  $\sigma^2(t)$ .
- $\mu_j(t)$  là giá trị trung bình tại thời điểm  $t$  cho chiều thứ  $j$  của vector  $\mathbf{x}$ . Nó được tính bằng cách áp dụng một hàm mũ giảm dần của thời gian lên giá trị ban đầu  $x^{(0)}$  tại  $t=0$ .
- $\sigma^2(t)$  là phương sai tại thời điểm  $t$  cho chiều thứ  $j$  của vector  $\mathbf{x}$ . Nó giảm dần theo thời gian, làm cho mức độ nhiễu trong quá trình nhiễu giảm dần đến khi đạt giá trị ổn định (steady-state).

Tổng cộng, biểu thức này giúp xác định các chiều riêng lẻ của quá trình nhiễu biến đổi và tương tác với thời gian. Khi thời gian tiến đến đủ lâu ( $t$  tiến đến vô cùng), phân phối sẽ hội tụ đến một phân phối gauss tiêu chuẩn với trung bình 0 và phương sai 1 độc lập cho mỗi chiều.

$$p(\mathbf{x}, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} p_{ss}(\mathbf{x}) = \frac{1}{[\sqrt{2\pi}]^N} \exp\left\{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right\} = \prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x_j^2}{2}\right\} \quad (40)$$

Còn một điểm chú ý nữa là hàm  $\beta(t)$  quyết định cách biến đổi của mức độ nhiễu theo thời gian. Bên cạnh việc tăng nhiễu theo cấp số mũ, hàm này có thể được chọn để tăng một cách tuyến tính:

$$\beta(t) := \beta_{min} + (\beta_{max} - \beta_{min}) \frac{t}{T} \quad (41)$$

Trong đó  $T$  là thời gian áp dụng quá trình nhiễu trên các mẫu. Điều quan trọng là  $\beta(t)$  tăng tuyến tính thay vì tăng mũ theo thời gian. Điều này đảm bảo rằng cuối cùng, mức độ nhiễu không giảm và làm cho sự biến đổi được duy trì.

Bên cạnh đó chúng ta còn có phương trình sub-VP tương tự VP như sau:

$$\dot{\mathbf{x}} = -\frac{\beta(t)}{2} \mathbf{x} + \sqrt{\beta(t) \left[ 1 - e^{-2 \int_0^t \beta(s) ds} \right]} \boldsymbol{\eta}(t) \quad (42)$$

## 15 Reverse diffusion

### 15.1 Reversing 1D diffusion

Trước tiên chúng ta sẽ tìm hiểu về reverse 1D. Ở phần trước quá trình forward chúng ta thấy rằng diffusion khiến noise được khuếch tán dần ra (theo thời gian) và làm thay đổi mẫu ban đầu. Tại đây chúng ta sẽ kỳ vọng reverse lại quá trình diffusion thì mẫu của chúng ta sẽ trở về như cũ.

$$\dot{x} = \frac{x_0 - x}{T - t} + \sigma \eta(t) \quad (43)$$

Công thức trên (OU process) phản ánh một quá trình trong đó biến ngẫu nhiên  $x$  tiếp tục được tái tạo về một giá trị  $x_0$  theo thời gian. Thành phần  $\frac{x_0 - x}{T - t}$  tạo ra sự hồi phục về giá trị  $x_0$ , và  $\sigma \eta(t)$  thêm nhiễu để tạo sự biến động ngẫu nhiên.

Nói cách khác, quá trình trên nên một Gaussian cho đến khi nó trở thành Delta Dirac Function với centered  $x_0$  tại thời điểm  $T$ . Đây cũng là một xác suất chuyển đổi (transition probability) của quá trình reverse.

$$q(x, t | x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(T-t)}} \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2(T-t)} \right\}. \quad (44)$$

Trong đó xác suất chuyển đổi  $q(x, t | x_0, 0)$  là xác suất để OU process chuyển từ giá trị ban đầu  $x_0$  tại thời điểm 0 đến giá trị  $x$  tại thời điểm  $t$  - được định nghĩa bởi hàm Gaussian, xác suất chuyển đổi giảm theo thời gian và tập trung xung quanh giá trị  $x_0$ . Điều này phản ánh khả năng của quá trình OU hồi phục về trung bình và giảm thiểu biến động ngẫu nhiên theo thời gian.

Note: Ký hiệu  $q$  là để tránh nhầm lẫn với quá trình forward diffusion (p).

Vì Reverse process được điều chỉnh bởi SDE nên chúng ta sẽ áp dụng Euler-Maruyama để biểu diễn nó.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{x_0 - x}{T - t} \Delta t + \sigma \sqrt{\Delta t} r. \quad (45)$$

Trong đó Euler-Maruyama  $x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{x_0 - x}{T - t} \Delta t + \sigma \sqrt{\Delta t} r$  mô phỏng cách mỗi bước thời gian, giá trị  $x$  thay đổi. Thành phần tái tạo  $\frac{x_0 - x}{T - t} \Delta t$  đảm bảo rằng giá trị  $x$  hồi phục về  $x_0$  dần dần theo thời gian. Nhiễu  $\sigma \sqrt{\Delta t} r$  tăng cường biến động ngẫu nhiên, thể hiện sự không chắc chắn trong quá trình reverse.

Tóm lại, OU process và xác suất chuyển đổi giúp mô tả các quá trình trong đó các giá trị có xu hướng hồi phục về giá trị trung bình với biến động ngẫu nhiên. Các bước Euler-Maruyama được sử dụng để mô phỏng số liệu và thu thập thông tin về quá trình reverse.

## 15.2 Reversing more general stochastic processes

Ta có Forward process được mô tả bởi SDE

$$\dot{x} = f(x, t) + g(t) \eta(t)$$

Trong đó  $f(x, t)$  là drift function,  $g(t)$  là thành phần nhiễu và  $\eta(t)$  là white noise (gauss).

Với Reverse process chúng ta sẽ đảo ngược thời gian được tạo ra cho Forward process từ thời điểm  $t = 0$  đến  $t = T$ . Time-reversed SDE được định nghĩa:

$$\dot{x} = -f(x, T - t) + g(T - t)^2 \frac{\partial}{\partial x} \log p(x, T - t) + g(T - t) \eta(t) . \quad (46)$$

Tại đây chúng ta tìm hiểu một chút về mối quan hệ giữa forward process và reversed process. Nếu  $p(x, t)$  đại diện cho phân phối xác suất của forward process tại thời điểm  $t$ , thì  $q(x, t)$  là phân phối xác suất của reverse process thỏa mãn  $q(x, t) = p(x, T - t)$ . Mối quan hệ này có nghĩa là phân phối xác suất tiến triển theo thời gian theo một cách tương tự. Chỉ là hai hướng ngược nhau.

Mở rộng sang N-dim Ito-interpreted SDEs bao gồm một vector  $\mathbf{x}$  và vector noise  $\eta(t)$ . Reversed process cho N-dim có dạng:

$$\dot{\mathbf{x}} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}, T - t) + g(T - t)^2 \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, T - t) + g(T - t) \boldsymbol{\eta}(t) . \quad (47)$$

Phần này chúng ta đã xác định reversed process của một stochastic process do một loại phương trình vi phân ngẫu nhiên điều khiển.

Bây giờ chúng ta sẽ chứng minh mối quan hệ giữa forward và reverse process trên:

$$q(x, t) = p(x, T - t)$$

Áp dụng kiến thức về lý thuyết xác suất vào phương trình Fokker-Planck (FPE). Ta có Forward process được xác định bởi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\nabla \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t)] + \nabla^2 \left[ \frac{g(\mathbf{x}, t)^2}{2} p(\mathbf{x}, t) \right] \\ &= -\nabla \cdot \left[ \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t) - \nabla \left( \frac{g(\mathbf{x}, t)^2}{2} p(\mathbf{x}, t) \right) \right] . \end{aligned} \quad (48)$$

Giả sử  $p(x, t)$  là phân phối xác suất của forward process với điều kiện ban đầu  $p(x, 0) = p_0(x)$ . Xác định FPE cho reversed process bằng cách thay  $t$  bằng  $T - t$  trong FPE cho forward process.

$$\frac{\partial q(x, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[ \mathbf{f}(\mathbf{x}, T - t)q(\mathbf{x}, t) - \nabla \left( \frac{g(\mathbf{x}, T - t)^2}{2} q(\mathbf{x}, t) \right) \right] \quad (49)$$

Điều này giống với FPE cho forward process, chỉ là chúng ta thay đổi thời gian từ  $t$  thành  $T - t$ . Vì  $p(x, 0) = p_0(x)$ , giả sử rằng  $q(x, T)$  sẽ là phân phối xác suất của quá trình đảo ngược.

Để xác định mối quan hệ này chính xác, cần áp dụng điều kiện biên phù hợp cho  $q(x, t)$  tại  $t = T$ . Điều này có thể được thực hiện thông qua điều kiện biên hoặc điều kiện khởi tạo phù hợp.

Dựa vào đối số điều kiện biên và điều kiện khởi tạo, có thể chứng minh được mối quan hệ trên. (Để chứng minh cụ thể hơn còn phải phụ thuộc vào chi tiết bài toán cụ thể).

### 15.3 Score functions

Score function là một khái niệm quan trọng trong reverse process. Được định nghĩa như sau:

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}, t) := \nabla_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}, t) . \quad (50)$$

Trong đó  $s(x, t)$  là score function, một vector được tính bằng đạo hàm gradient của  $p(x, t)$  theo  $x$ .  
Vai trò của Score function:

- Khi ta muốn thực thi reverse process trên một nhiễu nào đó và chuyển đổi nó thành một mẫu từ phân phối mục tiêu (target distribution).
- Tuy nhiên, vấn đề chính trong phương pháp này là chúng ta không biết chính xác giá trị của  $p(x, t)$ . Nếu chúng ta biết, chúng ta có thể lấy mẫu trực tiếp từ nó thay vì thực hiện quá trình reverse.

Tuy chúng ta không biết  $p(x, t)$  nhưng chúng ta có thể học được score function. Quan trọng hơn, việc học score function thậm chí là dễ hơn so với việc học trực tiếp  $p(x, t)$ , vì nhiệm vụ này yêu cầu học một normalization factor => đây là một điều tương đối khó khăn.

### 15.4 Examples of score functions

Score function liên kết một vector field với mỗi time step của stochastic process. Mỗi vector chỉ hướng xác suất tăng dần.

#### 15.4.1 1D diffusion from a point mass

Xét quá trình 1D diffusion với điều kiện ban đầu là Delta Function tại  $x_0$ . Nói cách khác, ta xem xét sự lan truyền của một phân phối Delta tại  $x_0$  theo thời gian.

##### 1D Diffusion with Delta Function Initial Condition

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2 t} \right\} . \quad (51)$$

Trong đó:

- $p(x, t)$  là xác suất phân phối tại vị trí  $x$  và thời điểm  $t$  cho quá trình 1D diffusion.
- $x_0$  là vị trí ban đầu của Delta Function.
- $\sigma$  là tham số đặc trưng cho độ rộng của phân phối.

##### Score Function for the 1D Diffusion

$$s(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \log p(x, t) = -\frac{(x - x_0)}{\sigma^2 t} . \quad (52)$$

Trong đó:

- $s(x, t)$  là score function cho quá trình 1D diffusion, được tính bằng cách lấy đạo hàm riêng theo  $x$  của logarithm của  $p(x, t)$ .
- Score function mô tả sự thay đổi của logarithm của phân phối theo  $x$  tại mỗi điểm  $x$  và thời điểm  $t$ .
- Trong trường hợp này, score function cho biết càng xa khỏi vị trí  $x_0$  càng có trị tuyệt đối lớn hơn, với độ rộng của phân phối  $\sigma$  và thời gian  $t$  làm mẫu số. Điều này phản ánh sự lan truyền rộng và chậm của phân phối trong thời gian.

### 15.4.2 1D OU process from a point mass

Trong 1D OU process với điều kiện ban đầu là Delta function tại  $x_0$ .

#### 1D OU Process with Delta Function Initial Condition

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s(t)^2}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu(t)]^2}{2s(t)^2} \right\}. \quad (53)$$

Trong đó:

- $p(x, t)$  là xác suất phân phối tại  $x$  và thời điểm  $t$  cho 1D OU process.
- $x_0$  là vị trí ban đầu của Delta Function.
- $\mu(t)$  và  $s(t)$  là giá trị kỳ vọng và độ lệch chuẩn của OU process tại thời điểm  $t$ .

#### Score Function for the 1D OU Process

$$s(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \log p(x, t) = -\frac{[x - \mu(t)]}{s(t)^2}. \quad (54)$$

Trong đó:

- $s(x, t)$  là score function cho 1D OU process, được tính bằng cách lấy đạo hàm riêng theo  $x$  của logarithm của  $p(x, t)$ .
- Score function mô tả sự thay đổi của logarithm của phân phối theo  $x$  tại mỗi điểm  $x$  và thời điểm  $t$ .
- Trong trường hợp này, score function cho biết càng xa khỏi giá trị kỳ vọng  $\mu(t)$ , càng có giá trị tuyệt đối lớn hơn, với độ lệch chuẩn  $s(t)$  làm mẫu số. Điều này phản ánh tính chất của OU process, nơi xác suất của sự biến động ngẫu nhiên tăng lên khi  $x$  cách xa giá trị kỳ vọng.

### 15.4.3 1D diffusion from a Gaussian mixture

Ta có 1D Gaussian mixture với  $M$  mixture components:

$$p_0(x) = \sum_{j=1}^M w_j \frac{1}{\sqrt{2\pi s_j^2}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu_j]^2}{2s_j^2} \right\} \quad (55)$$

#### Xác Suất Sau Quá Trình Diffusion

$$\begin{aligned} p(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t|x_0, 0) p_0(x_0) dx_0 \\ &= \sum_{j=1}^M w_j \frac{1}{\sqrt{2\pi(s_j^2 + \sigma^2 t)}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu_j]^2}{2(s_j^2 + \sigma^2 t)} \right\}. \end{aligned} \quad (56)$$

Trong đó:

- $p(x, t)$  là xác suất phân phối tại vị trí  $x$  và thời điểm  $t$  sau quá trình diffusion từ điều kiện ban đầu là hỗn hợp Gaussian  $p_0(x_0)$ .
- Đoạn tích phân trên là tích phân qua tất cả các điều kiện ban đầu có thể, mỗi điều kiện ban đầu được đánh trọng số bởi  $p_0(x_0)$ .

- Kết quả là một tổng của các Gaussian với trung bình  $\mu_j$  và độ lệch chuẩn  $s_j^2 + \sigma^2 t$ .

### Score Function Tương Ứng

$$s(x) = \frac{\partial}{\partial x} \log p(x, t) = -\frac{1}{p(x, t)} \sum_{j=1}^M w_j \frac{(x - \mu_j)}{s_j^2 + \sigma^2 t} \frac{1}{\sqrt{2\pi(s_j^2 + \sigma^2 t)}} \exp \left\{ -\frac{[x - \mu_j]^2}{2(s_j^2 + \sigma^2 t)} \right\}. \quad (57)$$

Trong đó:

- $s(x)$  là score function, là đạo hàm riêng theo  $x$  của logarit của xác suất  $p(x, t)$ .
- Tổ hợp của các thành phần của  $s(x)$  là tổng trọng số của các đạo hàm riêng theo  $x$  của các thành phần Gaussian trong mixture.
- Score function thường được sử dụng trong các mô hình generative để học xác suất và tạo dữ liệu mới

## 15.5 Learning the score function

Bây giờ chúng ta sẽ thử ước lượng tham số  $\theta$  của score function  $s_\theta(x, t)$  trong bối cảnh của mô hình generative.

### Hàm Mục Tiêu Ban Đầu

$$J(\theta) := \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} dt [\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t)]^2. \quad (58)$$

Trong đó:

- $J(\theta)$  là hàm mục tiêu ban đầu dựa trên việc so sánh score function xấp xỉ  $s_\theta(x, t)$  với đạo hàm của log xác suất  $p(x, t)$  theo  $x$
- Tuy nhiên, hàm này không ưu tiên bất kỳ giá trị cụ thể nào của  $x$  hơn các giá trị khác.

Để giải quyết điều này chúng ta cần một sự điều chỉnh nhỏ là:

$$J(\theta) := \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} dt p(\mathbf{x}, t) [\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t)]^2. \quad (59)$$

Trong đó:

- Trọng số  $p(x, t)$  giúp ưu tiên việc xấp xỉ score function cho các giá trị  $x$  mà có xác suất cao.
- Tuy nhiên, việc ước lượng đạo hàm của  $\log p(x, t)$  có thể khó khăn do phụ thuộc mạnh mẽ vào  $p(x, 0)$  (xác suất ban đầu).

### Thêm Trọng Số Theo Thời Gian

$$J_{naive}(\theta) := \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} dt \lambda(t) p(\mathbf{x}, t) [\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t)]^2. \quad (60)$$

Trọng số thời gian  $\lambda(t)$  được thêm vào để có thể xử lý sự thay đổi về quy mô của độ lệch từ score function chính xác. Trọng số này giúp xử lý việc quy mô của độ lệch có thể thay đổi theo thời gian.

### Vấn Đề với Hàm Mục Tiêu Điều Chỉnh

- Khó khăn trong việc ước lượng đạo hàm của  $\log p(x, t)$  do phụ thuộc mạnh mẽ vào  $p(x, 0)$ .



- Không biết phân phối mục tiêu, điều này là lý do chính trong quá trình học của model.

**Giải Pháp: Hàm Mục Tiêu Thay Thế** Một hàm mục tiêu thay thế được giới thiệu để giải quyết vấn đề ước lượng đạo hàm với việc sử dụng xác suất chuyển tiếp  $p(x, t|x^{(0)}, 0)$  để giảm khả năng khó khăn trong việc ước lượng đạo hàm của  $\log p(x, t)$ .

Hàm mục tiêu mới là:

$$J_{mod}(\theta) := \frac{1}{2} \int dx dx^{(0)} dt p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) p(\mathbf{x}^{(0)}) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right]^2. \quad (61)$$

Điều này dẫn đến hai hàm mục tiêu là giống nhau, tính theo  $\theta$  với một hằng số cộng. Sau đây là quá trình tính đạo hàm của hai hàm naive và mod theo bộ tham số  $\theta$ .

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta} J_{naive}(\theta) &= \int dx dt p(\mathbf{x}, t) [\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t)] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \\ &= \int dx dt p(\mathbf{x}, t) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}, t)}{p(\mathbf{x}, t)} \right] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \\ &= \int dx dt [p(\mathbf{x}, t) \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}, t)] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \\ &= \int dx dx^{(0)} dt p(\mathbf{x}^{(0)}) \left[ p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \\ &= \int dx dx^{(0)} dt p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) p(\mathbf{x}^{(0)}) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (62)$$

$$\nabla_{\theta} J_{mod}(\theta) = \int dx dx^{(0)} dt p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) p(\mathbf{x}^{(0)}) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right] \cdot \nabla_{\theta} \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t). \quad (63)$$

Đạo hàm của  $J_{mod}(\theta)$  được tính tương tự như  $J_{naive}(\theta)$  nhưng sử dụng xác suất chuyển tiếp có điều kiện  $p(x, t|x^{(0)}, 0)$  thay vì xác suất  $p(x, t)$ . Cuối cùng biểu thức cho cả hai đạo hàm là giống nhau, chỉ khác nhau ở một hằng số cộng.

Việc xây dựng hàm mục tiêu  $J(\theta)$  để tối ưu hóa trong bối cảnh ước lượng đạo hàm của xác suất chuyển tiếp.

$$\begin{aligned} J(\theta) &:= \frac{1}{2} \int dx dx^{(0)} dt p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) p(\mathbf{x}^{(0)}) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right]^2 \\ &= \frac{1}{2} \mathbb{E}_t \left\{ \lambda(t) \mathbb{E}_{\mathbf{x}^{(0)}} \mathbb{E}_{\mathbf{x}|\mathbf{x}^{(0)}} \left[ \left\| \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}^{(0)}, 0) \right\|_2^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (64)$$

Trong đó:

- Hàm mục tiêu  $J(\theta)$  là một hàm của bộ tham số  $\theta$ .
- Nó bao gồm một phần tích phân trên không gian  $\mathbf{x}$  và  $\mathbf{x}^{(0)}$  cũng như qua thời gian  $t$ .
- $p(x, t|x^{(0)}, 0)$  là xác suất chuyển tiếp có điều kiện,  $p(x^{(0)})$  là xác suất ban đầu, và  $s_\theta(x, t)$  là hàm điểm số được tham số hóa.

Giải thích biểu thức:

- Phần đầu của  $J(\theta)$  tính tổng trung bình của bình phương sự chênh lệch giữa score function thực tế và đạo hàm của log xác suất chuyển tiếp có điều kiện theo  $x^{(0)}$ .

- Phần thứ hai của  $J(\theta)$  diễn giải lại phần đầu với kỳ vọng theo thời gian  $t$  và các kỳ vọng xác suất ban đầu và xác suất chuyển tiếp có điều kiện theo  $x^{(0)}$  và  $x$ .

Chúng ta có một số chú ý sau:

- $\mathbb{E}$  là ký hiệu cho kỳ vọng theo thời gian  $t$  và  $\mathbb{E}_{x^{(0)}}$  và  $\mathbb{E}_{x|x^{(0)}}$  là ký hiệu cho kỳ vọng theo xác suất ban đầu và xác suất chuyển tiếp có điều kiện.
- $\lambda(t)$  là một hệ số trọng số có thể thay đổi theo thời gian, giúp điều chỉnh độ quan trọng của các khoảng thời gian khác nhau trong việc ước lượng gradient.
- $\|\cdot\|_2$  là norm  $L_2$  và  $\|\mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0)\|_2^2$  là bình phương của khoảng cách giữa hai vector.
- Việc sử dụng đạo hàm của log xác suất chuyển tiếp có điều kiện thay vì xác suất chuyển tiếp trực tiếp giúp giảm độ phức tạp khi tính đạo hàm.

## 15.6 Approximating the objective function using samples

Để tính xấp xỉ cho objective function chúng ta sử dụng kỳ vọng và Monte Carlo.

- Khi hàm mục tiêu được viết dưới dạng kỳ vọng, nó gợi ý về một chiến lược rõ ràng để xấp xỉ nó bằng cách sử dụng mẫu (Monte Carlo).
- Đưa ra một mẫu  $x^{(0)}$  từ phân phối mục tiêu.

Các bước xấp xỉ:

- Lấy một mẫu thời gian  $t$  theo phân phối đồng đều từ khoảng  $[0, T]$ .
- Sử dụng kiến thức về xác suất chuyển tiếp để lấy mẫu  $x$  gần bằng với xác suất  $p(x, t | x^{(0)}, 0)$
- Sử dụng kiến thức về xác suất chuyển tiếp để đánh giá  $\nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0)$

Ta có Approximating the objective function:

$$J(\theta) \approx \frac{1}{2} \lambda(t) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}, t) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0) \right]^2. \quad (65)$$

Nếu có một Batch  $S$ , ta có thể xấp xỉ hàm mục tiêu bằng cách lặp lại quy trình với mỗi mẫu và xây dựng hàm xấp xỉ như sau:

$$J(\theta) \approx \frac{1}{2S} \sum_{j=1}^S \lambda(t_j) \left[ \mathbf{s}_\theta(\mathbf{x}_j, t_j) - \nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}_j, t | \mathbf{x}_j^{(0)}, 0) \right]^2. \quad (66)$$

Trong trường hợp cụ thể của quá trình ngẫu nhiên, log xác suất chuyển tiếp (transition probability) có dạng đơn giản, giúp giảm độ phức tạp khi tính toán đạo hàm.

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0) = \frac{1}{\left[ \sqrt{2\pi\sigma^2(t)} \right]^N} \exp \left\{ -\frac{[\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}]^2}{2\sigma^2(t)} \right\}, \quad (67)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}^{(0)}, 0) = -\frac{[\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}]}{\sigma^2(t)}.$$

- Hết -