# 2025 年 9 月 22 日至 9 月 28 日周报

何瑞杰
中山大学, 大湾区大学

## 1. 项目进展

### 1.1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学

本周由于时间规划原因没有做代码方面的更新。

找到了互联网上的一个模拟生命游戏的程序 Golly，其文档不仅包含原始版本的生命游戏，还包含极其丰富的变种，具体见 https://golly.sourceforge.io/Help/algos.html。可能可以通过下载该程序或对应的 python 包，以改进生成数据的代码，使得更换规则更加容易。

杨老师提到了 Gray-Scott 系统和交通流模型（https://www.thp.uni-koeln.de/~as/Mypage/traffic.html），前者我在上周自行寻找材料做了简单的阅读（见上周周报），且没想到如何用神经网络学习。交通流模型阅读后发现其属于一维元胞自动机，但目测情况下难以使用卷积网络学习其规则。

下周计划内容详见最后一节。

# 2. 文献阅读

## 2.1. Denoising Diffusion Probabilistic Models

Jonathan Ho, Ajay Jain and Pieter Abbeel | https://arxiv.org/abs/2006.11239

原论文中的推导跳过了大量细节，通过这些细节和来龙去脉花了较长时间，留下实验、结论、讨论和附录部分下周完成。

### 2.1.1. 综观

不同于 VAE 等等的一个隐变量空间的生成模型，DDPM 尝试用多步编码/解码，或是加噪/去噪方式生成数据。它的每一步可以视为是一个去噪自编码器（Denoising Autoencoder），而其采样（生成）过程通过与加噪过程的 Markov 链“共用”，并通过预测加噪过程中的随机噪声实现加噪过程的“反转”，并添上 Langevin 动力学的随机噪声实现对分布的采样。与正常的 Langevin 动力学不同的是，从第 $t$ 步到 $t-1$ 步，我们认为其在尝试适配一个分布 $p(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t)$ 过程中，只做了一次 Langevin 动力学的迭代。

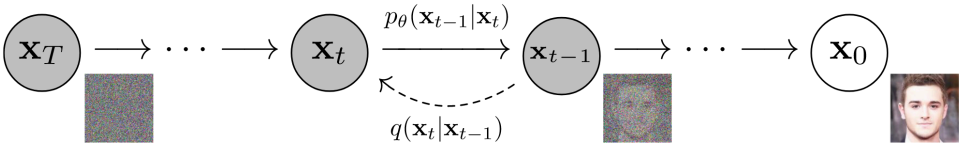


Figure 1: 图 1. DDPM 的工作流程示意图

### 2.1.2. 加噪过程的建模

首先对于加噪过程，我们有一列噪声强度 $\{\beta_t\}_{t=0}^T$，然后按照 $q(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_{t-1}) \sim N(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \beta_t \boldsymbol{I})$ 来进行：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_t &= \sqrt{1-\beta_t}\boldsymbol{x}_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t, && \boldsymbol{\varepsilon}_t \sim N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}) \\
&= \sqrt{1-\beta_t}\left[\sqrt{1-\beta_{t-1}}\boldsymbol{x}_{t-2} + \sqrt{\beta_{t-1}}\boldsymbol{\varepsilon}_{t-1}\right] + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t, && \boldsymbol{\varepsilon}_{t-1} \sim N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}) \\
&= \sqrt{(1-\beta_t)(1-\beta_{t-1})}\boldsymbol{x}_{t-2} + \sqrt{(1-\beta_t)\beta_{t-1}}\boldsymbol{\varepsilon}_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t \\
&= \sqrt{(1-\beta_t)(1-\beta_{t-1})}\boldsymbol{x}_{t-2} + \sqrt{(1-\beta_t)\beta_{t-1} - (1-\beta_t) + 1}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t, && \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t \sim N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}) \\
&= \sqrt{(1-\beta_t)(1-\beta_{t-1})}\boldsymbol{x}_{t-2} + \sqrt{1-(1-\beta_t)(1-\beta_{t-1})}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t \\
&\ \ \vdots \\
&= \sqrt{\prod_{s=1}^t (1-\beta_s)}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1-\prod_{s=1}^t (1-\beta_s)}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t
\end{aligned}
$$

这给出了加噪过程中每一步得到的 $\boldsymbol{x}_t$ 更加便捷的表示，对后续的推导有帮助。

### 2.1.3. 优化目标

由于我们的目标是从随机噪声 $\boldsymbol{x}_0$ 生成图像，即 $\boldsymbol{x}_T$，因此需要最大化的项是 $\mathbb{E}_{p_\theta}[-\log p_\theta(\boldsymbol{x}_0)]$。因此我们需要继续用变分推断的技巧，逐步将其转化为可以计算得到的项。首先我们有下面的上界

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{p_\theta}[-\log p_\theta(\boldsymbol{x}_0)] \\
&= \mathbb{E}_{p_\theta}\left[-\log p_\theta(\boldsymbol{x}_0)\int q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{1:T}\right] = \mathbb{E}_{p_\theta}\left[-\int q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)\log p_\theta(\boldsymbol{x}_0)\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{1:T}\right] \\
&= -\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0), q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\left[\log \frac{p_\theta(\boldsymbol{x}_0)p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\right] = -\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0), q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\left[\log \frac{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= -\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0),q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\left[\log \frac{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})}{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\right] - \mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0),q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\left[\log \frac{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\right] \\
&= -\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0),q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\left[\log \frac{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})}{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}\right] - \underbrace{\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}_0)}[D_{\mathrm{KL}}[q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0) \mid p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)]]}_{\geqslant 0} \\
&\leqslant \mathbb{E}_q\left[\log \frac{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})}\right] =: L
\end{aligned}
$$

上式中的 $\boldsymbol{x}_{1:T}$ 不好处理，我们可以将打包的变量拆开，最后可以将其写成若干项 KL 散度之和，其中两项对应着 Markov 链头和尾，剩余的对应加噪过程的中间状态。

$$
\begin{aligned}
L &= \mathbb{E}_q\left[\log \frac{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})}\right] \\
&= \mathbb{E}_q\left[\log \frac{q(\boldsymbol{x}_T|\boldsymbol{x}_0)\prod_{t=2}^T q(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_T)\prod_{t=1}^T p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t)}\right] \\
&= \mathbb{E}_q\left[\log \frac{q(\boldsymbol{x}_T|\boldsymbol{x}_0)}{p(\boldsymbol{x}_T)} + \sum_{t=2}^T \frac{q(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t)} + \log \frac{1}{p_\theta(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_1)}\right] \\
&= \mathbb{E}_q\left[D_{\mathrm{KL}}[q(\boldsymbol{x}_T|\boldsymbol{x}_0)|p(\boldsymbol{x}_T)] + \sum_{t=2}^T D_{\mathrm{KL}}[q(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t,\boldsymbol{x}_0)|p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t)] - \log p_\theta(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_1)\right] \\
&= \mathbb{E}_q\left[L_T + \sum_{t=2}^T L_{t-1} - L_0\right].
\end{aligned}
$$

显然，得到的结果符合我们的预期，我们需要训练一个带参分布 $p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)$，并让其与 $q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)$ 对齐。后者是一个 Gauss 分布，使用 Bayes 公式不难得到它的分布参数

$$
\begin{aligned}
&q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) \\
&= q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1}, \boldsymbol{x}_0)\frac{q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_0)}{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)} \\
&= q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1})\frac{q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_0)}{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)} \\
&\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{\left\|\boldsymbol{x}_t - \sqrt{\alpha_t}\boldsymbol{x}_{t-1}\right\|^2}{\beta_t} + \frac{\left\|\boldsymbol{x}_{t-1} - \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0\right\|^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}} - \frac{\left\|\boldsymbol{x}_t - \sqrt{\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0\right\|^2}{1-\bar{\alpha}_t}\right]\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{\|\boldsymbol{x}_t\|^2 - \sqrt{\alpha_t}\langle \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_{t-1}\rangle + \alpha_t\|\boldsymbol{x}_{t-1}\|^2}{\beta_t} + \frac{\|\boldsymbol{x}_{t-1}\|^2 - \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\langle \boldsymbol{x}_{t-1}, \boldsymbol{x}_0\rangle + \bar{\alpha}_{t-1}\|\boldsymbol{x}_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\right.\right. \\
&\qquad \left.\left. - \frac{\|\boldsymbol{x}_t\|^2 - \sqrt{\bar{\alpha}_t}\langle \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0\rangle + \bar{\alpha}_t\|\boldsymbol{x}_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_t}\right]\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\right)\|\boldsymbol{x}_{t-1}\|^2 - \left\langle \frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_{t-1}\right\rangle + \text{constant}\right]\right\} \\
&\propto \exp\left\{\frac{\|\boldsymbol{x}_{t-1} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t\|^2}{2\tilde{\beta}_t}\right\}
\end{aligned}
$$

其中均值 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t$ 和方差 $\tilde{\beta}_t$ 为

$$\tilde{\beta}_t = \frac{1}{\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}} = \frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t} \cdot \beta_t$$

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t = \frac{\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0}{\frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}} = \left(\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0\right)\frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t} \cdot \beta_t = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0$$

由于需要匹配一个 Gauss 分布，带参分布 $q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)$ 也需要是一个 Gauss 分布 $N(\boldsymbol{\mu}_{\theta,t}, \Sigma_{\theta,t})$，不过在此我们将协方差矩阵简化为对角，即 $\boldsymbol{\mu}_{\theta,t} = \beta_{\theta,t}\boldsymbol{I}$。此时我们可以求中间过程的 KL 散度，由于其参数是两个 Gauss 分布，我们有现成的结论：

$$\begin{aligned}
L_{t-1} &= D_{\mathrm{KL}}[q(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)|p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1}|\boldsymbol{x}_t)] \\
&= \frac{1}{2}\left[\log\frac{|\tilde{\beta}_t\boldsymbol{I}|}{|\beta_{\theta,t}\boldsymbol{I}|} - n + \mathrm{tr}\left(\tilde{\beta}_t^{-1}\boldsymbol{I}\beta_{\theta,t}\boldsymbol{I}\right) + \left(\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right)^\top \beta_{\theta,t}^{-1}\boldsymbol{I}\left(\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant}, \qquad \text{令}\beta_{\theta,t}\text{ 为只与时间相关的 } \sigma_t \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\left[\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\cdot\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}\left(\boldsymbol{x}_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\varepsilon}\right)\right] - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant} \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\left[\frac{\alpha_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})+\beta_t}{(1-\bar{\alpha}_t)\sqrt{\alpha_t}}\boldsymbol{x}_t + \frac{\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}\right] - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant} \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\left[\frac{\cancel{1-\bar{\alpha}_t}}{\cancel{(1-\bar{\alpha}_t)}\sqrt{\alpha_t}}\boldsymbol{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}\right] - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant}, \qquad \alpha_t = 1-\beta_t, \bar{\alpha}_t = \prod_{s=0}^{t}\alpha_t \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}\right] - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant}
\end{aligned}$$

进一步地，我们可以将预测均值 $\boldsymbol{\mu}_{\theta,t}$ 建模为与 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t$ 相同的形式，即

$$\boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right]$$

因此 $L_{t-1}$ 还可以进一步简化

$$\begin{aligned}
L_{t-1} &= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}\right] - \boldsymbol{\mu}_{\theta,t}\right\|^2\right] + \text{constant} \\
&= \frac{1}{2\sigma_t}\left[\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\cancel{\boldsymbol{x}_t} - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}\right] - \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\cancel{\boldsymbol{x}_t} - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right]\right\|^2\right] + \text{constant} \\
&= \frac{(1-\alpha_t)^2}{2\sigma_t\alpha_t(1-\bar{\alpha}_t)}\left\|\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right\|^2 + \text{constant}
\end{aligned}$$

推了半天之后我们发现我们的优化目标也只是预测噪声而已（而这并不是新鲜事），我们就可以很顺利地得到 DDPM 的训练和采样算法。我们也可以使用更加简单的目标函数，只需要将 $L_{t-1}$

前面的系数扔掉，同时考虑服从离散均匀分布的 $t$ 即可。在下面的算法中，我们实际上也是随机从均匀分布中采样 $t$ 然后训练模型。

#### 2.1.4. 训练和采样算法

**Algorithm 1: Training**

**procedure** TRAINING()
  **while** not converged **do**
    $\boldsymbol{x}_0 \sim q(\boldsymbol{x}_0)$
    $t \sim \text{Uniform}(\{1, ..., T\})$
    $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$
    ▷ Perform gradient update
    $\theta \leftarrow \theta - \eta \nabla_\theta \left\| \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_\theta\left(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\varepsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_0, t)\right)\right\|^2$
  **end**
**end**

**Algorithm 2: Sampling**

**procedure** SAMPLING()
  $\boldsymbol{x}_T \sim N(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$
  **for** $t = T, ..., 1$ **do**
    **if** $t > 1$ **then**
      $\boldsymbol{z} \sim N(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$
    **else**
      $\boldsymbol{z} \leftarrow 0$
    **end**
    $\boldsymbol{x}_{t+1} \leftarrow \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\varepsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right] + \sigma_t \boldsymbol{z}$
  **end**
  **return** $\boldsymbol{x}_0$
**end**

可以将其与下面的模拟退火 Langevin 动力学采样进行对比

**Algorithm 3: Annealed Langevin Dynamics**

**procedure** ANNEALED LANGEVIN DYNAMICS($\{\sigma_i\}_{i=1}^n$, $\varepsilon$, $T$)
  ▷ Initialize the search range
  $\bar{\boldsymbol{x}}_0 \leftarrow \boldsymbol{v}$
  **for** $t \leftarrow 1, ..., L$ **do**
    ▷ Set step size $\alpha_i$
    $\alpha_i \leftarrow \varepsilon \cdot \sigma_i^2 / \sigma_L^2$
    **for** $t \leftarrow 1, ..., T$ **do**
      Draw $\boldsymbol{z}_t \sim N(0, I)$
      $\bar{\boldsymbol{x}}_t \leftarrow \bar{\boldsymbol{x}}_{t-1} + \alpha_i/2 \cdot s_\theta(\bar{\boldsymbol{x}}_{t-1}, \sigma_i) + \sqrt{\alpha_i}\boldsymbol{z}_t$
    **end**
    $\bar{\boldsymbol{x}}_0 \leftarrow \bar{\boldsymbol{x}}_T$
  **end**
  **return** $\bar{\boldsymbol{x}}_T$
**end**

不难发现 DDPM 中的 Sampling 算法将 Annealed Langevin Dynamics 算法中的内层的循环减少到了 1。

**2.1.5.** 离散值图像生成的最后一步

由于需要生成的对象是计算机中离散编码（如八位）的图像，对应最后一步的 $p_\theta(\boldsymbol{x}_0|\boldsymbol{x}_1)$ 需要得到的是离散分布。论文使用了一个简便的技巧，假设图像的像素值在离散化过程中从 $\{0,1,...,255\}$ 线性地归一化到 $[-1,1]$ 内，即 0 被映射到 $-1$，255 被映射到 1。在计算 $\boldsymbol{x}_0$ 的第 $i$ 个像素值是 $\boldsymbol{x}_0^{(i)}$ 时，我们可以简单地将 $\mathbb{R}$ 切分成 256 块，其中 $1\sim 254$ 分别对应着 $\left[-1-\frac{1}{255},1+\frac{1}{255}\right]$ 中宽度为 $\frac{2}{255}$ 的小区间 $[\delta_-(x),\delta_+(x)]$，剩下的一头一尾就分别对应剩下的两个无限长度的区间。具体而言，

$$\delta_+(x)=\begin{cases}\infty & \text{if } x=1\\ x+\dfrac{1}{255} & \text{if } x<1\end{cases}\text{，}\qquad \delta_-(x)=\begin{cases}-\infty & \text{if } x=-1\\ x-\dfrac{1}{255} & \text{if } x>-1\end{cases}$$

假设 $\boldsymbol{x}_0$ 的分布中各分量相互独立，就有

$$p_\theta(\boldsymbol{x}_0)=\prod_{i=1}^n p_\theta\left(\boldsymbol{x}_0^{(i)}\right)=\prod_{i=1}^n\int_{\delta_-\left(\boldsymbol{x}_0^{(i)}\right)}^{\delta_+\left(\boldsymbol{x}_0^{(i)}\right)} N\left(x\mid\boldsymbol{\mu}_\theta^{(i)}(\boldsymbol{x}_1,1),\sigma_1\boldsymbol{I}\right)\mathrm{d}x$$

这样也不会破坏分布的归一化性质。

**2.1.6.** 实验结果

下周补齐

**2.1.7.** 总结和讨论

下周补齐

参考资料

1. https://arxiv.org/abs/1907.05600
2. https://arxiv.org/abs/2006.11239
3. https://lilianweng.github.io/posts/2021-07-11-diffusion-models/#nice

# 3. 学习进度

## 3.1. 随机过程

首先复习回顾了有关于尾部概率的诸不等式：Markov 不等式、Chebyshev 不等式、Chernoff 界。我发现有一个更一般的情形可以轻松涵盖这三个不等式，以及我在 SDE 那本小册子中看到的 Chebyshev 不等式的版本：

定理 3.1.1 (拓展 Chebyshev 不等式)：考虑随机变量 $X:\Omega\to\mathbb{R}$，和连续增函数 $g:\mathbb{R}_{\geqslant 0}\to\mathbb{R}_{\geqslant 0}$，如果 $g(a)>0$ 且 $\mathbb{E}(g(|X|))$ 存在，有

$$\mathbb{E}(|X|\geqslant a)\leqslant\frac{\mathbb{E}(g(|X|))}{g(a)}$$

- 取 $X=Y-\mathbb{E}[Y]$，$g(x)=x^2$，得到 Chebyshev 不等式：$\mathbb{E}(|Y-\mathbb{E}[Y]|\geqslant a)\leqslant\dfrac{\mathrm{Var}(Y)}{a^2}$
- 取 $g(x)=x$，得到 Markov 不等式：$\mathbb{E}(|X|\geqslant a)\leqslant\dfrac{\mathbb{E}(|X|)}{a}$
- 取 $g(x)=e^{\lambda x}$，其中 $\lambda\geqslant 0$，得到 Chernoff 界：$\mathbb{E}(|X|\geqslant a)\leqslant\dfrac{\mathbb{E}(\exp\{\lambda|X|\})}{\exp\{a\lambda\}}$
- 取 $g(x)=x^p$，其中 $p\geqslant 1$，得到下面另一形式的 Chebyshev 不等式：$\mathbb{E}(|X|\geqslant\lambda)\leqslant\dfrac{\mathbb{E}(|X|^p)}{\lambda^p}$

## 3.2. 随机微分方程

本周学习了 Itô 积分的链式法则、和乘积法则。具体而言，我们研究的是具有下列基本形式之随机微分的随机过程：

$$\mathrm{d}X=F\mathrm{d}t+G\mathrm{d}W\iff X(r)=X(s)+\int_s^r F\mathrm{d}t+\int_s^r G\mathrm{d}W,\quad 0\leqslant s\leqslant r\leqslant T$$

其中 $F\in\mathbb{L}^1(0,T)$，$G\in\mathbb{L}^2(0,T)$。链式法则是说对于函数 $u:\mathbb{R}\times[0,T]\to\mathbb{R}$，如果 $u_x,u_t,u_{xx}$ 都存在且连续，则有

$$\begin{aligned}\mathrm{d}Y=\mathrm{d}u(X(t),t)&=u_t\mathrm{d}t+u_x\mathrm{d}X+\frac{1}{2}u_{xx}G^2\mathrm{d}t\\&=\left(u_t+u_xF+\frac{1}{2}u_{xx}G^2\right)\mathrm{d}t+u_xG\mathrm{d}W\end{aligned}$$

或者说

$$\begin{aligned}Y(r)-Y(s)&=u(X(r),r)-u(X(s),s)\\&=\int_s^r u_t+u_xF+\frac{1}{2}u_{xx}G^2\,\mathrm{d}t+\int_r^s u_xG\,\mathrm{d}W\quad\text{a.s.}\end{aligned}$$

乘积法则说的是两个有上述基本形式之随机微分的过程

$$\begin{aligned}\mathrm{d}X_1&=F_1\mathrm{d}t+G_1\mathrm{d}W\\\mathrm{d}X_2&=F_1\mathrm{d}t+G_1\mathrm{d}W\end{aligned}$$

其乘积有下面的随机微分：

$$\mathrm{d}(X_1X_2)=X_2\mathrm{d}X_1+X_1\mathrm{d}X_2+G_1G_2\mathrm{d}t.$$

两个定理的证明具有一定的相似性。对于乘积法则，首先证明与时间无关的 $F$ 和 $G$ 情形下在 $[0,t]$（其中 $t \leqslant T$）满足条件，然后再证在任意区间 $[s,t]$ 上成立，这是第一步；接着可以证明对任意的阶梯过程 $F \in \mathbb{L}^1(0,T)$ 和 $G \in \mathbb{L}^2(0,T)$ 都成立，这是第二步；最后利用 $\mathbb{L}^1(0,T)$ 和 $\mathbb{L}^2(0,T)$ 的完备性，利用近似的思想推广到任意的 $F \in \mathbb{L}^1(0,T)$ 和 $G \in \mathbb{L}^2(0,T)$，这是第三步。

链式法则的证明与此类似。对于函数 $u$，首先考虑最简单的形式，即多项式 $u \in \mathbb{F}[x]$，然后再推广到任意的关于 $x$ 和 $t$ 的多项式的乘积形式。由于 $\mathbb{F}[x,t]$ 上的任意元素都可以写成 $\sum_{i=1}^{n} p_i(x)q_i(t)$ 的形式，其中 $p_i \in \mathbb{F}[x]$，$q_i \in \mathbb{F}[t]$，因此可以推广到任意的 $u \in \mathbb{F}[x,t]$。最后让一列多项式逼近任意满足定理条件的 $u$ 即可。

# 4. 问题解决记录

## 4.1. Typst 相关

### 4.1.1. 直接套用 LaTeX 公式

可以通过导入 `mitex` 包实现直接将 LaTeX 或 Markdown 文档中的行内和行间公式嵌入 typst 文档：

```
#import "@preview/mitex:0.2.4": *
#mitex(`
\begin{align} \mathrm{d} X_{1} &= F_{1}
\mathrm{d}t + G_{1}\mathrm{d}W\\
\mathrm{d} X_{2} &= F_{1} \mathrm{d}t +
G_{1}\mathrm{d}W\\ \end{align}
`)
```

$$\begin{aligned} \mathrm{d} X_{1} &= F_{1} \mathrm{d}t + G_{1}\mathrm{d}W\\ \mathrm{d} X_{2} &= F_{1} \mathrm{d}t + G_{1}\mathrm{d}W\\ \end{aligned}$$

### 4.1.2. 一些更灵活的 typst 函数定义

在撰写一些细节推导时，不可避免地需要使用不同颜色指示推导中有不同功能的项。例如

```
$y = #text(red)[$k$]x$
```

$y = \text{k}x$

在推导过程很复杂时显然不适宜，我们可以定义下面的函数：

```
#let redText(text) = {text(red)[$text$]}
```

这样就可以更方便地使用该函数

```
$y = redText(k)x$
```

$y = \text{t}x$

类似还可以设计其他常用颜色的函数。

# 5. 下周计划

### 论文阅读

1. 生成模型
   - 完成 Diffusion 剩下的部分
   - Sliced Score Matching: A Scalable Approach to Density and Score Estimation
   - Score-Based Generative Modeling through Stochastic Differential Equations

### 项目进度

1. 使用神经网络学习生命游戏的演化动力学
   - 解释神经网络
     - 寻找更多神经网络权重的解释方法
   - 其他的生命游戏规则
     - 探索并整理 Golly 文档中提到的可简单实现的若干种方法（五种左右）
     - 调整代码实现，使之可以各方面适配多数据集的情形（例如训练的输入输出、logging 的规格，以及输出文件的文件名和文件夹规格，需要包含所使用的数据集）
   - 其他模型
     - 考虑交通流模型和一维元胞自动机使用神经网络学习规则的方法
     - 考虑如何通过神经网络模型预测 Gray-Scott 的动力学

### 理论学习

1. 随机过程课程
   - 随机过程完成第一章和第二次作业
2. 随机微分方程
   - Evans 完成至第五章第一节或第二节