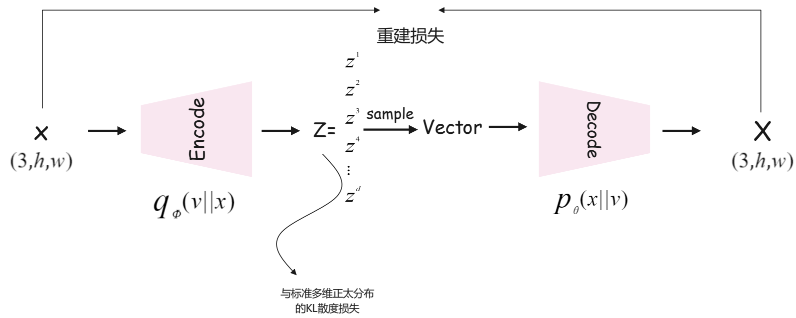
小锅的机器学习笔记–VAE 与 DDPM

VAE:



训练的时候，一张图片经过 $Encode$ 编码后，输出向量 $Z=[z_1,z_2,...,z_d]$, 其中 $z_i=(u_i,\sigma_i)$, 我们构建一个 d 维的正太分布:

$$N_{gen}(U, diag(\sigma))$$

$$\text{其中} \qquad U=[u_1,u_2,...,u_d] \qquad \sigma=[\sigma_1,\sigma_2,...,\sigma_d]$$

从该正太分布中抽样向量 $Vector=[v_1,v_2,...,v_d]$，最后把 $Vectot$ 输出 $Decode$ 中，生成重建图片。

在推理时，丢弃 $Encode$，从 d 维度标准正太分布中直接采样出向量 $Vector=[v_1,v_2,...,v_d]$，然后经过 $Decode$ 生成图片。

我们希望 $Decode$ 生成的图片能看,所以有重建损失 $L_{restruction}=\|image-image_{gen}\|^2$, 由于我们推理的时候是直接从 d 维正太分布中抽样 $Vector$ 的，所以我们希望在训练使构建的分布 $N_{gen}(U,diag(\sigma))$ 尽量的与标准正太分布类似，所以我们有 KL 损失 $D_{KL}=KL(N||N_g)$。

下面给出数学推导：

我们记原始数据分布为 $p_{data}(x)$, 我们拟合的数据分布为 $p_\theta(x)$, 我们的目标是让拟合的数据分布越来越接近原始分布，也就是我们要最小化 $p_{data}(x)$ 与 $p_\theta(x)$ 之间的 KL 散度：

$$\begin{aligned}
&\underset{\theta}{min}\left\{\mathbb{E}_{x\sim p_{data}(x)}\left[\log\frac{p_{data}(x)}{p_\theta(x)}\right]\right\}\\
&=\underset{\theta}{max}\left\{\mathbb{E}_{x\sim p_{data}(x)}\left[\log p_\theta(x)\right]\right\}\\
&\approx\underset{\theta}{max}\left\{\frac{1}{|D|}\sum_{x\in D}\left[\log p_\theta(x)\right]\right\}
\end{aligned}$$

其中 D 为数据集，我们用数据集的均值近似期望，其实就是在最大化 $p_\theta(x)$ 的似然。

我们引入隐变量 v, 并且这个隐变量服从标准正太分布，也就是 $p(v) \sim N(0, I)$。

所以:

$$\begin{aligned}
\log\left[p_\theta(x)\right] &= \log\left[\iint_v p_\theta(x, v) dv\right] \\
&= \log\left[\iint_v q_\phi(v|x) \frac{p_\theta(x, v)}{q_\phi(v|x)} dv\right] \\
&= \log \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \left\{\frac{p_\theta(x, v)}{q_\phi(v|x)}\right\} \geq \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left\{\frac{p_\theta(x, v)}{q_\phi(v|x)}\right\} \\
&= \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right] + \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[\frac{p(v)}{q_\phi(v|x)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right] - \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[\frac{q_\phi(v|x)}{p(v)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right] - D_{KL}\left[q_\phi(v|x)||p(v)\right]
\end{aligned}$$

我们记:

$$L = \mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right] - D_{KL}\left[q_\phi(v|x)||p(v)\right]$$

我们最大化 $\log\left[p_\theta(x)\right]$, 等效于最大化它的变分下界 L, 也就最大化 $\mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right]$ 以及最小化 $D_{KL}\left[q_\phi(v|x)||p(v)\right]$。

先求 $D_{KL}\left[q_\phi(v|x)||p(v)\right]$:

很显然 $q_\phi(v|x)$ 就是正太分布，并且 $q_\phi(v|x) \sim N(u_\phi(x), diag(\sigma^2_\phi(x)))$，其中:

$$u_\phi(x) = \left[u_\phi(x)_1, u_\phi(x)_2, ..., u_\phi(x)_d\right] \qquad \sigma^2_\phi(x) = \left[\sigma^2_\phi(x)_1, \sigma^2_\phi(x)_2, ..., \sigma^2_\phi(x)_d\right]$$

而 $p(v) \sim N(0, I)$。两个高斯分布的 $p_1(x) \sim N(u_1, \Sigma_1) \quad p_2(x) \sim N(u_2, \Sigma_2)$ 的 KL 散度为:

$$D_{KL}(p_1||p_2) = \frac{1}{2}\left[\log\left[\frac{|\Sigma_2|}{|\Sigma_1|}\right] - d + \mathbb{TR}\left(\Sigma_2^{-1}\Sigma_1\right) + (u_1 - u_2)^T \Sigma_2^{-1}(u_1 - u_2)\right]$$

所以:

$$\begin{aligned}
D_{KL}\left[q_\phi(v|x)||p(v)\right] &= \frac{1}{2}\left[-\sum_{i=1}^{d} \log\left[\sigma^2_\phi(x)_i\right] - d + \sum_{i=1}^{d} \sigma^2_\phi(x)_i + \sum_{i=1}^{d} u_\phi(x)_i\right] \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\left[\sigma^2_\phi(x)_i + u_\phi(x)_i - \log\left[\sigma^2_\phi(x)_i\right] - 1\right]
\end{aligned}$$

下面我们讨论 $\mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right]$:

$v \sim q_\phi(v|x)$ 其实代表的就是 x 输入 $encode$ 中，然后 $sample$ 向量 v 的过程的概率密度，$\mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)}$ 也是就多抽样几个 v，然后取平均值，其实抽样一次就够了。所以:

$$\mathbb{E}_{v\sim q_\phi(v|x)} \log\left[p_\theta(x|v)\right] \approx \log\left[p_\theta(x|v)\right] =$$

其中:

$$v \sim N(u_\phi(x), diag(\sigma_\phi^2(x))) = N\left(\begin{bmatrix} u_\phi(x)_1 \\ u_\phi(x)_2 \\ \vdots \\ u_\phi(x)_d \end{bmatrix}, diag\left\{\begin{bmatrix} \sigma_\phi^2(x)_1 \\ \sigma_\phi^2(x)_2 \\ \vdots \\ \sigma_\phi^2(x)_d \end{bmatrix}\right\}\right)$$

, 所以有:

$$v = \begin{bmatrix} u_\phi(x)_1 \\ u_\phi(x)_2 \\ \vdots \\ u_\phi(x)_d \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_\phi^2(x)_1 \\ \sigma_\phi^2(x)_2 \\ \vdots \\ \sigma_\phi^2(x)_d \end{bmatrix} \otimes \epsilon \qquad \text{其中}\epsilon \in N(0, I_{d\times d})$$

我们通常假设 $p_\theta(x|v)$, 服从一个固定方差的带参的正太分布, 也就是 $p_\theta(x|v) \sim N(u_\theta(v), \sigma^2 I_{n\times n})$, 式中 $n = 3 \times h \times w$。所以:

$$\begin{aligned} p_\theta(x|v) &= \frac{1}{2\pi^{\frac{n}{2}} |\sigma^2 I_{n\times n}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[x - u_\theta(v)\right]^T \left[\sigma^2 I_{n\times n}\right]^{-1} \left[x - u_\theta(v)\right]\right) \\ &= \frac{1}{2\pi^{\frac{n}{2}} \sigma^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left[x - u_\theta(v)\right]^T I_{n\times n} \left[x - u_\theta(v)\right]\right) \\ &= \frac{1}{2\pi^{\frac{n}{2}} \sigma^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|x - u_\theta(v)\|^2\right) \end{aligned}$$

所以:

$$\log p_\theta(x|v) = -n \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right) - \frac{1}{2\sigma^2}\|x - u_\theta(v)\|^2$$

是中 $u_\theta(v)$ 也就是我们的 $decode$。所以:

$$L = -n \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right) - \frac{1}{2\sigma^2}\|x - u_\theta(v)\|^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\left[\sigma_\phi^2(x)_i + u_\phi(x)_i - \log\left[\sigma_\phi^2(x)_i\right] - 1\right]$$

去掉与 $encode, decode$ 参数无关的变量:

$$\begin{aligned} max\left\{L\right\} &= max\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\|x - u_\theta(v)\|^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\left[\sigma_\phi^2(x)_i + u_\phi(x)_i - \log\left[\sigma_\phi^2(x)_i\right]\right]\right\} \\ &= min\left\{\|x - u_\theta(v)\|^2 + \sigma^2\sum_{i=1}^{d}\left[\sigma_\phi^2(x)_i + u_\phi(x)_i - \log\left[\sigma_\phi^2(x)_i\right]\right]\right\} \end{aligned}$$

回顾我们的目标，我们 VAE 的核心目标是优化分布 $p_{data}(x)$ 与 $p_\theta(x)$ 之间的距离越来越小，这两个分布均可写做:

$$\begin{aligned} p_{data}(x) &= \underset{v\sim p(v)}{E}\left\{p_{data}(x|v)\right\} \\ p_\theta(x) &= \underset{v\sim p(v)}{E}\left\{p_\theta(x|v)\right\} \end{aligned}$$

其实我在本质上是在优化 $p_{data}(x|v)$,$p_\theta(x|v)$ 这两个分布愈发的接近，$p_{data}(x|v)$ 是给定一个从标准高斯分布中抽样的向量的前提下，真实数据的分布的概率密度，$p_\theta(x|v)$ 是给定一个从标准高斯分布中抽样的向量的前提下，我们所建模的数据分布的概率密度, 并且我们假设它是高斯分布, 我们的 $decode(v) = \mu_\theta(v)$ 输出的是分布 $p_\theta(x|v)$ 的均值。

因为 $p_\theta(x|v) \sim N(x; \mu_\theta(v), \sigma^2 I_{n\times n})$: 所以从噪音 v 生成图片 x 的过程为:

$$x = \mu_\theta(v) + \sigma^2\varepsilon \qquad \varepsilon \sim N(0, I)$$

加上噪音 $\sigma^2\varepsilon$ 其实没必要，所以一般省略 $+\sigma^2\varepsilon$。

扩散模型

扩散过程

也就是加噪音过程被定义为：

$$x_0 \longrightarrow x_1 \longrightarrow x_2 \longrightarrow x_3 \longrightarrow \ldots \longrightarrow x_{t-1} \longrightarrow x_t \longrightarrow x_{t+1} \ldots \longrightarrow x_{T-1} \longrightarrow x_T$$

其中 x_0 为原始图像，$(x_1, x_2, \ldots, x_t, \ldots, x_T)$ 为隐变量，并且 $x_0 \to x_1 \to x_2 \ldots \to x_T$ 被定义为一条马尔科夫链。同时我们定义一组系数 $(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_T)$, 并且这组系数递减 $\beta_1 > \beta_2 > \beta_3 > \ldots > \beta_T$，并且 $\beta_i \in (0, 1)$。

这个扩散过程实际上就是一个逐步加噪声的过程，扩散过程被定义为:

$$q(x_t|x_{t-1}) \sim N(x_t; \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t I)$$

由重参数化，可以写成:

$$x_t = \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t \qquad \varepsilon_t \sim N(0, I)$$

我们记:

$$\alpha_t = 1 - \beta_t \qquad\qquad \bar{\alpha_t} = \prod_{i=1}^{t} \alpha_i$$

有:

$$\begin{aligned}
x_t &= \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t \qquad \varepsilon_t \sim N(0, I) \\
&= \sqrt{1-\beta_t}\left[\sqrt{1-\beta_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{\beta_{t-1}}\varepsilon_{t-1}\right] + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t \qquad \varepsilon_{t-1} \sim N(o, I) \\
&= \sqrt{(1-\beta_t)(1-\beta_{t-1})}x_{t-2} + \sqrt{(1-\beta_t)\,\beta_{t-1}}\varepsilon_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t \\
&= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}}\,\bar{\varepsilon_t} \qquad \bar{\varepsilon_t} \sim N(0, I) \\
&= \sqrt{\bar{\alpha_t}}x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha_t}}\varepsilon \qquad \varepsilon \sim N(0, I)
\end{aligned}$$

所以显然有:

$$q(x_t|x_0) \sim N(x_t; \sqrt{\bar{\alpha_t}}x_0, \left(1-\bar{\alpha_t}\right) I)$$

逆扩散过程

逆扩散过程也是一条马尔科链:

$$x_T \longrightarrow x_{T-1} \longrightarrow x_{T-2} \longrightarrow \ldots \longrightarrow x_{t+1} \longrightarrow x_t \longrightarrow x_{t-1} \ldots \longrightarrow x_1 \longrightarrow x_0$$

我们定义 $p(x_T)$ 为标准高斯分布，也就是 $p(x_T) \sim N(0, I)$, 并且定义逆扩散过程 $q_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 服从一个固定方差的高斯分布，也就是 $q_\theta(x_{t-1}|x_t) \sim N(u_\theta(x_t, t), \sigma_t^2 I)$.

训练与推理

扩散模型的在训练时也就是扩散过程，逐步往原始图片 x_0 中加噪音，也就是逐步生成 $x_1, x_2, \ldots, x_{T-1}, x_T$，并且同时我们也逐步训练一个去噪模型 $p_\theta(x_{t-1}|x_t)$，使可以利用 x_t 得到 x_{t-1}。

由于 $q(x_t|x_0) \sim N(x_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t} x_0, \left(1 - \bar{\alpha}_t\right) I)$，只要时间步数 T 足够大，$q(x_t|x_0)$ 就会服从标准高斯分布，所以在推理时我们只需要从标准高斯分布 $p(x_T)$ 中采样一个噪声，然后逐步经过训练好的是 $q_\theta(x_{t-1}|x_t) \quad t = T, T-1, ..., 1$ 进行去噪音，我们就能的得到生成的图片 $x_0^{'}$.

推导:

我们定义 $p_{data}(x_0)$ 为原始数据分布，$p_\theta(x_0)$ 为我们拟合的数据分布，我们的目标是最小化 $D_{KL}(p_{data}(x_0)||p_\theta(x_0))$。如上文推导的那样，等效于最大化 $p_\theta(x_0)$ 的最大对数似然，也就是:

$$\max_\theta \left\{ \frac{1}{|D|} \sum_{x_0 \in D} [\log p_\theta(x_0)] \right\}$$

式中 D 为我们的数据。

与 VAE 有所区别的，DDPM 是多隐变量模型，$x_1, x_2, x_3, \ldots, x_{T-1}, x_T$ 都是隐变量，并且在生成隐变量的没有可训练的参数，为了方便表述，我们下列所有的推导中令 $(x_i, x_{i+1}, \ldots, x_j) = x_{i:j}$。

$$\begin{aligned}
\log p_\theta(x_0) &= \log \iint_{x_{1:T}} p_\theta(x_{0:T}) dx_{1:T} \\
&= \log \iint_{x_{1:T}} q(x_{1:T}|x_0) \frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)} dx_{1:T} \\
&= \log \underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E} \left\{ \frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)} \right\} \\
&\geq \underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E} \left\{ \log \frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)} \right\}
\end{aligned}$$

$\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right\}$ 也就是 $\log p_\theta(x_0)$ 的变分下界, 只需要最大化变分下界即可。

首先推导三个结论:

$$p_\theta(x_{0:T}) = p_\theta(x_0|x_{1:T})p_\theta(x_1|x_{2:T})p_\theta(x_2|x_{3:T})\ldots\ldots p_\theta(x_{T-2}|x_{T-1:T})p_\theta(x_{T-1}|x_T)p(x_T)$$

$$= p_\theta(x_0|x_1)p_\theta(x_1|x_2)p_\theta(x_2|x_3)\ldots\ldots p_\theta(x_{T-2}|x_{T-1})p_\theta(x_{T-1}|x_T)p(x_T)$$

$$= p(x_T)\prod_{t=1}^{T}p_\theta(x_{t-1}|x_t)$$

$$q(x_{1:T}|x_0) = \frac{q(x_{0:T})}{q(x_0)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{q(x_T|x_{0:T-1})q(x_{T-1}|x_{0:T-2})q(x_{T-2}|x_{0:T-3})\ldots\ldots q(x_2|x_{0:1})q(x_1|x_0)q(x_0)}{q(x_0)}\\
&= q(x_T|x_{0:T-1})q(x_{T-1}|x_{0:T-2})q(x_{T-2}|x_{0:T-3})\ldots\ldots q(x_2|x_{0:1})q(x_1|x_0)\\
&= q(x_T|x_{T-1})q(x_{T-1}|x_{T-2})q(x_{T-2}|x_{T-3})\ldots\ldots q(x_2|x_1)q(x_1|x_0)\\
&= \prod_{t=1}^{T}q(x_t|x_{t-1})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q(x_t|x_{t-1},x_0) &= \frac{q(x_t,x_{t-1},x_0)}{q(x_{t-1},x_0)}\\
&= \frac{q(x_{t-1}|x_0,x_t)q(x_t|x_0)}{q(x_{t-1}|x_0)}
\end{aligned}$$

所以:

$$
\begin{aligned}
&\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\frac{p(x_T)\prod_{t=1}^T p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{\prod_{t=1}^T q(x_t|x_{t-1})}\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)\prod_{t=2}^T p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_1|x_0)\prod_{i=2}^T q(x_t|x_{t-1})}\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_1|x_0)}\right]+\log\left[\prod_{t=2}^T\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1},x_0)}\right]\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_1|x_0)}\right]+\log\left[\prod_{t=2}^T\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{\frac{q(x_{t-1}|x_0,x_t)q(x_t|x_0)}{q(x_{t-1}|x_0)}}\right]\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_1|x_0)}\right]+\log\left[\prod_{t=2}^T\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_0,x_t)}\right]+\log\left[\prod_{t=2}^T\frac{q(x_{t-1}|x_0)}{q(x_t|x_0)}\right]\right\}\\
&\quad=\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)}{q(x_T|x_0)}\right]\right\}+\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)+\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^T\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}
\end{aligned}
$$

下面我们分别考虑 $\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)}{q(x_T|x_0)}\right]\right\}$, $\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)$, $\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^T\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}$:
对于:

$$
\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)}{q(x_T|x_0)}\right]\right\}=-\underset{q(x_T|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{q(x_T|x_0)}{p(x_T)}\right]\right\}=-D_{KL}(q(x_T|x_0)\|p(x_T))
$$

首先 $\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\left[\frac{p(x_T)}{q(x_T|x_0)}\right]\right\}$ 没有可训练的参数，所以不需要优化，其次我们的目标是最大化 $\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right\}$, 也就是最小化 $D_{KL}(q(x_T|x_0)\|p(x_T))$。

又因为 $p(x_T)\sim N(0,I)$, 而 $q(x_t|x_0)\sim N(x_t;\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_t\right)I)$, 我们想让 $D_{KL}(q(x_T|x_0)\|p(x_T))$ 尽可能的小，这要求我的时间步尽可能的大，使 $N(x_t;\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_t\right)I)$ 尽可能的接近标准高斯分布.

对于:

$$
\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)
$$

我们假设逆扩散过程 $q_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 服从一个固定方差的高斯分布，也就是 $q_\theta(x_{t-1}|x_t)\sim N(u_\theta(x_t,t),\sigma_t^2I)$. 所以:

$$
q_\theta(x_0|x_1)=\frac{1}{(2\pi\sigma_1^2)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_1^2}\|x_0-u_\theta(x_1,1)\|^2\right\}
$$

所以:

$$\underset{q(x_1|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)=\underset{q(x_1|x_0)}{E}\left\{-\frac{d}{2}\log 2\pi\sigma_1^2-\frac{1}{2\sigma_1^2}\|x_0-u_\theta(x_1,1)\|^2\right\}$$

对于:

$$\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}$$

有:

$$\begin{aligned}\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}&=\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\underset{q(x_{t-1}|x_0,x_t)}{E}\left\{\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}\right\}\\&=-\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\underset{q(x_{t-1}|x_0,x_t)}{E}\left\{\frac{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}\right\}\right\}\\&=-\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{D_{KL}\left[q(x_{t-1}|x_t,x_0)||p_\theta(x_{t-1}|x_t)\right]\right\}\end{aligned}$$

我们先求 $q(x_{t-1}|x_t,x_0)$ 的表达式:

$$q(x_{t-1}|x_t,x_0)=\frac{q(x_t,x_{t-1},x_0)}{q(x_t,x_0)}=\frac{q(x_t|x_{t-1},x_0)q(x_{t-1}|x_0)}{q(x_t|x_0)}=\frac{q(x_t|x_{t-1})q(x_{t-1}|x_0)}{q(x_t|x_0)}$$

因为:

$$q(x_t|x_{t-1})\sim N\left(x_t;\sqrt{a_t}x_{t-1},(1-\alpha_t)I\right)=\frac{1}{(2\pi\beta_t)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1}\|^2}{\beta_t}\right\}$$

$$q(x_{t-1}|x_0)\sim N\left(x_{t-1};\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)I\right)=\frac{1}{\left(2\pi\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)\right)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\right\}$$

$$q(x_t|x_0)\sim N\left(x_t;\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_t\right)I\right)=\frac{1}{\left(2\pi\left(1-\bar{\alpha}_t\right)\right)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_t}\right\}$$

所以:

$$q(x_{t-1}|x_t,x_0)=\frac{N\left(x_t;\sqrt{a_t}x_{t-1},(1-\alpha_t)I\right)N\left(x_{t-1};\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)I\right)}{N\left(x_t;\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0,\left(1-\bar{\alpha}_t\right)I\right)}$$

$$=\frac{\frac{1}{(2\pi\beta_t)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1}\|^2}{\beta_t}\right\}\frac{1}{\left(2\pi\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)\right)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\right\}}{\frac{1}{\left(2\pi\left(1-\bar{\alpha}_t\right)\right)^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_t}\right\}}$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\frac{\left(1-\bar{\alpha}_t\right)^{\frac{d}{2}}}{\left[\beta_t\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)\right]^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{\|x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1}\|^2}{\beta_t}+\frac{\|x_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}-\frac{\|x_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0\|^2}{1-\bar{\alpha}_t}\right]\right\}$$

很显然:

$$\|x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1}\|^2=(x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1})^T(x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1})=x_t^Tx_t-2\sqrt{\alpha_t}x_t^Tx_{t-1}+\alpha_tx_{t-1}^Tx_{t-1}$$

$$\|x_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0\|^2=x_{t-1}^Tx_{t-1}-2\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_{t-1}^Tx_0+\bar{\alpha}_{t-1}\,x_0^Tx_0$$

$$\|x_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0\|^2=x_t^Tx_t-2\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_t^Tx_0+\bar{\alpha}_t\,x_0^Tx_0$$

带入上面的 exp 中:

$$x_{t-1}^Tx_{t-1}\left[\frac{1-\bar{\alpha}_t}{\beta_t\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)}\right]-2x_{t-1}^T\left[\frac{\sqrt{\alpha_t}x_t}{\beta_t}+\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\right]+x_t^Tx_t\left[\frac{\alpha_t-\bar{\alpha}_t}{\beta_t\left(1-\bar{\alpha}_t\right)}\right]$$
$$+x_0^Tx_0\left[\frac{\beta_t\,\bar{\alpha}_{t-1}}{\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)\left(1-\bar{\alpha}_t\right)}\right]+x_t^Tx_0\left[\frac{2\sqrt{\bar{\alpha}_t}}{1-\bar{\alpha}_t}\right]$$

$$
= \left[\frac{1-\bar{\alpha_t}}{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}\right]\left(x_{t-1}^T x_{t-1} - 2x_{t-1}^T\left[\frac{\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)\sqrt{\alpha_t}x_t+\beta_t\sqrt{\bar{\alpha_{t-1}}}x_0}{1-\bar{\alpha_t}}\right]\right)
$$

$$
+ x_t^T x_t\left[\frac{\alpha_t-\bar{\alpha_t}}{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_t}\right)}\right] + x_0^T x_0\left[\frac{\beta_t\,\bar{\alpha_{t-1}}}{\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)\left(1-\bar{\alpha_t}\right)}\right] + x_t^T x_0\left[\frac{2\sqrt{\bar{\alpha_t}}}{1-\bar{\alpha_t}}\right]
$$

$$
= \frac{\|x_{t-1} - \left[\frac{\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)\sqrt{\alpha_t}x_t+\beta_t\sqrt{\bar{\alpha_{t-1}}}x_0}{1-\bar{\alpha_t}}\right]\|^2}{\left[\frac{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}{1-\bar{\alpha_t}}\right]}
$$

所以:

$$
q(x_{t-1}|x_t,x_0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}\frac{1}{\left[\frac{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}{\left(1-\bar{\alpha_t}\right)}\right]^{\frac{d}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\|x_{t-1} - \left[\frac{\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)\sqrt{\alpha_t}x_t+\beta_t\sqrt{\bar{\alpha_{t-1}}}x_0}{1-\bar{\alpha_t}}\right]\|^2}{\left[\frac{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}{1-\bar{\alpha_t}}\right]}\right\}
$$

显然:

$$
q(x_{t-1}|x_t,x_0) \sim N(x_{t-1}; u_{q,t}, \sigma_{q,t}^2 I)
$$

其中:

$$
u_{q,t} = \left[\frac{\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)\sqrt{\alpha_t}x_t+\beta_t\sqrt{\bar{\alpha_{t-1}}}x_0}{1-\bar{\alpha_t}}\right] \qquad \sigma_{q,t}^2 = \left[\frac{\beta_t\left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}{\left(1-\bar{\alpha_t}\right)}\right]
$$

我们假设逆扩散过程 $q_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 服从一个固定方差的高斯分布,也就是 $q_\theta(x_{t-1}|x_t) \sim N(u_\theta(x_t,t), \sigma_t^2 I)$. 所以:

$$
D_{KL}(q(x_{t-1}|x_t,x_0)||q_\theta(x_{t-1}|x_t)) = \frac{1}{2}\left[-d\log\frac{\sigma_{q,t}^2}{\sigma_t^2} - d + d\left[\frac{\sigma_{q,t}^2}{\sigma_t^2}\right] + \frac{\|u_\theta(x_t,t)-u_{q,t}\|^2}{\sigma_t^2}\right]
$$

我们忽略与参数无光的项:

$$
D_{KL}(q(x_{t-1}|x_t,x_0)||q_\theta(x_{t-1}|x_t)) \simeq \frac{1}{2}\frac{\|u_\theta(x_t,t)-u_{q,t}\|^2}{\sigma_t^2}
$$

$$\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}=-\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{D_{KL}\left[q(x_{t-1}|x_t,x_0)||p_\theta(x_{t-1}|x_t)\right]\right\}$$
$$\simeq-\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\frac{1}{2\sigma_t^2}\|u_\theta(x_t,t)-u_{q,t}\|^2\right\}$$

对于 $\underset{q(x_1|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)$，忽略参数无关的项:

$$\underset{q(x_1|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)=\underset{q(x_1|x_0)}{E}\left\{-\frac{d}{2}\log 2\pi\sigma_1^2-\frac{1}{2\sigma_1^2}\|x_0-u_\theta(x_1,1)\|^2\right\}$$
$$\simeq-\underset{q(x_1|x_0)}{E}\left\{\frac{1}{2\sigma_1^2}\|x_0-u_\theta(x_1,1)\|^2\right\}$$

所以我们的目标等价是最大化:

$$\underset{q(x_1|x_0)}{E}\log p_\theta(x_0|x_1)+\underset{q(x_{1:T}|x_0)}{E}\left\{\sum_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right\}$$

等价于最小化损失函数:

$$Loss=\underset{q(x_1|x_0)}{E}\left\{\frac{1}{2\sigma_1^2}\|u_\theta(x_1,1)-x_0\|^2\right\}+\sum_{t=2}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\frac{1}{2\sigma_t^2}\|u_\theta(x_t,t)-u_{q,t}\|^2\right\}$$

我们将 $x_0=\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}\left[x_t-\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon_t\right]$ 带入 $u_{q,t}$ 中:

$$u_{q,t}=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_t\right]\qquad\varepsilon_t\sim N(0,I)$$

并且对于:

$$x_0=\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}\left[x_t-\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon_t\right]=\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_1}}\left[x_1-\sqrt{1-\bar{\alpha}_1}\varepsilon_1\right]=\frac{1}{\sqrt{\alpha_1}}\left[x_1-\frac{1-\alpha_1}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_1}}\varepsilon_1\right]$$

所以我们的损失函数可以写作:

$$Loss=\sum_{t=1}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\frac{1}{2\sigma_t^2}\|u_\theta(x_t,t)-\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_t\right]\|^2\right\}$$

为了方便求解，我们可以把 $u_\theta(x_t,t)$ 定义为:

$$u_\theta(x_t,t)=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_\theta(x_t,t)\right]$$

损失函数可以写作:

$$Loss=\sum_{t=1}^{T}\underset{q(x_t|x_0)}{E}\left\{\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2\alpha_t\left(1-\bar{\alpha}_t\right)}\|\varepsilon_t-\varepsilon_\theta(x_t,t)\|^2\right\}$$

$q(x_t|x_0)$ 这个过程是由 x_0 生成 x_t 的过程，具有随机性，$\underset{q(x_t|x_0)}{E}$ 本质上代表的是多抽样几次，然后求均值，其实抽样一次就够了。故损失函数可以写成:

$$Loss = \sum_{t=1}^{T} \frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2 \alpha_t \left(1-\bar{\alpha_t}\right)} \|\varepsilon_t - \varepsilon_\theta(x_t, t)\|^2$$

DDPM 论文实验的时候发现去除前面的系数 $\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2 \alpha_t \left(1-\bar{\alpha_t}\right)}$ 训练效果更加好，更加稳定，所以:

$$Loss = \sum_{t=1}^{T} \|\varepsilon_t - \varepsilon_\theta(x_t, t)\|^2 \qquad \text{其中} \qquad x_t = \sqrt{\bar{\alpha_t}} x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha_t}}\,\bar{\varepsilon_t} \quad \bar{\varepsilon_t} \sim N(0, I)$$

利用该损失函数训练好模型后: 从标准高斯分布中抽样 x_T, 然后利用我们训练好的 $q_\theta(x_{t-1}|x_t) \quad t = (T, T-1, .., 1)$ 的到生成的图片 x_0。因为:

$$q_\theta(x_{t-1}|x_t) \sim N(\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left[x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha_t}}} \varepsilon_\theta(x_t, t) \right], \sigma_t^2 I)$$

那么由 x_t 生成 x_{t-1} 的公式为:

$$x_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left[x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha_t}}} \varepsilon_\theta(x_t, t) \right] + \sigma_t \varepsilon_t' \qquad \text{其中} \qquad \varepsilon_t' \sim N(0, 1)$$

这个 σ_t 是我们为每个 $q_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 设置的方法，是超参数，我们一般取:

$$\sigma_t^2 = \sigma_{q,t}^2 = \left[\frac{\beta_t \left(1-\bar{\alpha_{t-1}}\right)}{\left(1-\bar{\alpha_t}\right)} \right]$$

。这是为啥? 回顾我们的优化目标其中的一项:

$$min \left\{ \sum_{t=2}^{T} \underset{q(x_t|x_0)}{E} \{ D_{KL} \left[q(x_{t-1}|x_t, x_0) || p_\theta(x_{t-1}|x_t) \right] \} \right\}$$

由于我们固定了方差，所以在优化的时候只考虑了这两个高斯分布的均值接近，我们想让 $D_{KL} \left[q(x_{t-1}|x_t, x_0) || p_\theta(x_{t-1}|x_t) \right]$ 能尽可能的小，所以设置 $\sigma_t^2 = \sigma_{q,t}^2$。

Gradient model

假设原始数据分布为 $p_{data}(x)$，如果我们知道 $p_{data}(x)$ 的梯度，那么我们可以首先在随机在生成一个与原始数据同形状的采样数据 x_T, 然后利用沿着梯度的方向去逐步迭代更新采样数据 $x_T, x_{T-1}, ..., x_1, x_0$，最终的迭代数据 x_0 会使 $p_{data}(x_0)$ 将会非常大，等效于我们直接从 $p_{data}(x)$ 采样的数据。为了做到这个，我们需要建模 $\nabla_x p_{data}(x)$.

对于任意一个概率分布密度函数 $p(x)$，均可以用通用的形式来表示:

$$p(x) = \frac{\exp\{-f(x)\}}{\int \exp\{-f(t)\}\,dt}$$

所以:

$$\nabla_x p(x) = -\left[\nabla_x f(x)\right] \frac{\exp(-f(x))}{\int \exp\{-f(t)\}\,dt} = -\left[\nabla_x f(x)\right] p(x)$$

记利用神经网络建模的梯度为 $\nabla_x p_\theta(x)$，同理有：

$$\nabla_x p_\theta(x) = -\left[\nabla_x f_\theta(x)\right] \frac{\exp(-f_\theta(x))}{\int \exp\{-f_\theta(t)\}\,dt} = -\left[\nabla_x f_\theta(x)\right] p_\theta(x)$$

在这里我们观察到 $\nabla_x f(x)$ 或者 $\nabla_x f_\theta(x)$ 决定方向，而 $p(x)$ 或者 $p_\theta(x)$ 决定梯度的大小。假设我们直接利用 $\nabla_x p_\theta(x)$ 去建模 $\nabla_x p(x)$，存在两个问题:

首先是因为我们要利用梯度去迭代跟新样本，才能得到近似于从原始分布 $p(x)$ 中采样的样本，那么在迭代跟新的后期，也就是快迭代完了，这时 $p(x)$ 会很大，也就是梯度的值会很大，这样是不利的。

其次是直接建模 $\nabla_x p(x)$,相当于我们间接的建模 $f(x)$,并且同时建模 $\int \exp\{-f(t)\}\,dt$，这基本上做不了。

上面的分析已经知道了 $\nabla_x f(x)$ 代表方向，其实我们知道方向就够了，我们希望直接去建模 $f(x)$，而不需要去管 $p(x)$，从避免上述两个问题。

log 是一个单调函数，使 $\log p(x)$ 增大的梯度方向一定能使 $p(x)$ 增大，并且:

$$\nabla_x \log p(x) = -\nabla_x f(x) - \nabla_x \log\left\{\int \exp\{-f(t)\}\,dt\right\} = -\nabla_x f(x)$$

我们一般把 $-\nabla_x f(x)$ 称为 $p(x)$ 的分数函数，所以我们只需要建模 $\nabla_x \log p(x)$，我们利用 $s_\theta(x)$ 去建模 $\nabla_x \log p(x)$, 称 $s_\theta(x)$ 为基于分数的模型。

经过上述的分析，我们的损失函数可以写成:

$$Loss = \underset{x\sim p_{data}(x)}{E} \|s_\theta(x) - \nabla_x \log p_{data}(x)\|^2$$

我们利用采样的数据集近似期望:

$$Loss = \sum_{i=1}^{n} \|s_\theta(x^i) - \nabla_x \log p_{data}(x^i)\|^2 \tag{1}$$

假设我们训练好了 $s_\theta(x)$ 后，我们可以采用 Langevin dynamics 采样样本，设从先验分布中采样的样本为 x_0, 我们迭代跟新 T 步:

$$x_{t+1} = x_t + \epsilon s_\theta(x) + \sqrt{2\epsilon} z_t \qquad z_t \in N(0, I) \qquad t = 0, 1, ..., T-1$$

当 $\epsilon \to 0$ 并且 $T \to \infty$ 时，Langevin dynamics 认为 x_T 就是对原始数据分布 $p_{data}(x)$ 的采样。

但是有两个问题:

1. 我们不知道 $p_{data}(x)$，更别说 $\nabla_x \log p_{data}(x)$
2. 其次，在利用数据集计算损失使，我们的数据集其实是对原始数据分布采样，显然绝大多数采样样本集中在高密度的区域，只有很少的样本在低密度区域，甚至某些区域压根没有样本被采集到，那么我们的分数模型 $s_\theta(x)$ 对低密度区域的估计会不准，我们从先验分布随机采样的 x_0 绝大多数是在低密度区域，这样就炸了。

为了解决上述两个问题，我们对数据点进行噪声，然后训练在噪声数据点上训练分数模型，这时我们的损失函数可以写成:

$$Loss = \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \|s_\theta(x) - \nabla_{\dot{x}} \log p_\sigma(\dot{x}|x)\|^2$$

式中 $p_\sigma(\dot{x}|x) \sim N(x, \sigma^2 I)$, 重参数化技巧可以写成 $\dot{x} = x + \epsilon\sigma \quad \epsilon \sim N(0, I)$，$\sigma$ 控制施加的噪声强度。

这样还是有问题，较小的 σ 代表施加较小的噪音，这使得 $p_\sigma(\dot{x}|x) \simeq p(x)$，但是施加小的噪音，并不能让我们采样的数据均匀分布在整个空间，要想让我们采样的数据均匀分布在整个空间，我们必须施加较大的噪音，但是较大的噪音将会使 $p_\sigma(\dot{x}|x)$ 与 $p(x)$ 相差较大。

为了解决这个问题我们定义一组等比极数:

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_2} > \frac{\sigma_2}{\sigma_3} > \ldots > \frac{\sigma_{L-2}}{\sigma_{L-1}} > \frac{\sigma_{L-1}}{\sigma_L} > 1$$

其中 σ_L 接近 0，使成立 $p_{\sigma_L}(\dot{x}|x) \simeq p(x)$，$\sigma_1$ 为一个充分大的数，让 $p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$ 在分布空间尽可能的均匀。

那么这个时候我们的优化目标可以写成:

$$Loss = \sum_{i=1}^{L} \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \left\{ \underset{q_{\sigma_i}(\dot{x}|x)}{E} \|s_\theta(x, i) - \nabla_{\dot{x}} \log p_{\sigma_i}(\dot{x}|x)\|^2 \right\}$$

我们把 $\nabla_x \log p_{\sigma_i}(\dot{x}|x)$ 展开:

$$\begin{aligned}
\nabla_{\dot{x}} \log p_{\sigma_i}(\dot{x}|x) &= \nabla_{\dot{x}} \log \left[\frac{1}{(2\pi\sigma_i^2)^{\frac{d}{2}}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\|\dot{x} - x\|^2}{\sigma_i^2} \right\} \right] \\
&= \nabla_{\dot{x}} \left[-\frac{1}{2} \frac{\|\dot{x} - x\|^2}{\sigma_i^2} \right] \\
&= -\frac{\dot{x} - x}{\sigma_i^2}
\end{aligned}$$

所以损失函数写成:

$$Loss = \sum_{i=1}^{L} \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \left\{ \underset{q_{\sigma_i}(\dot{x}|x)}{E} \|s_\theta(x, i) + \frac{\dot{x} - x}{\sigma_i^2}\|^2 \right\}$$

又因为 $p_{\sigma_i}(\dot{x}|x) \sim N(x, \sigma_i^2 I)$，并且 $\dot{x} - x = \epsilon_i \sigma_i \quad \epsilon_i \sim N(0, I)$，实际上 $s_\theta(x, i)$ 是在预测 $-\frac{\epsilon_i}{\sigma_i}$, 在预测噪音，所以我们把 $s_\theta(x, i)$ 成为 Conditional Score Network。 $\underset{q_{\sigma_i}(\dot{x}|x)}{E}$ 代表期望，其实是多抽样几次取平均值，其实抽样一次就够了，损失可以写成:

$$Loss = \sum_{i=1}^{L} \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \|s_\theta(x, i) + \frac{\epsilon_i}{\sigma_i}\|^2 \quad \text{其中：} \quad \epsilon_i \sim N(0, I)$$

我们希望不同的 σ_i 对损失的影响是一个数量级别，所以我们对不同的 σ_i 加权 $\lambda(\sigma_i)$，损失可以写成:

$$Loss = \sum_{i=1}^{L} \lambda(\sigma_i) \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \|s_\theta(x, i) + \frac{\epsilon_i}{\sigma_i}\|^2 \quad \text{其中：} \quad \epsilon_i \sim N(0, I)$$

通常取 $\lambda(\sigma_i) = \sigma_i^2$，所以 Conditional Score Network 的损失可以写成:

$$Loss = \sum_{i=1}^{L} \underset{x \sim p_{data}(x)}{E} \|\sigma_i s_\theta(x, i) + \epsilon_i\|^2 \quad \text{其中：} \quad \epsilon_i \sim N(0, I)$$

利用上述损失训练好 $s_\theta(x, i)$ 后，我们的采样算法可以写成:

Algorithm 1 Annealed Langevin dynamics.

Require: $\{\sigma_i\}_{i=1}^{L}, \epsilon, T$.

Initialize $\tilde{\mathbf{x}}_0$
for $i \leftarrow 1$ to L **do**
  $\alpha_i \leftarrow \epsilon \cdot \sigma_i^2 / \sigma_L^2$ $\triangleright$ α_i is the step size.
  for $t \leftarrow 1$ to T **do**
    Draw $\mathbf{z}_t \sim \mathcal{N}(0, I)$
    $\tilde{\mathbf{x}}_t \leftarrow \tilde{\mathbf{x}}_{t-1} + \frac{\alpha_i}{2} \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}(\tilde{\mathbf{x}}_{t-1}, \sigma_i) + \sqrt{\alpha_i}\, \mathbf{z}_t$
  end for
  $\tilde{\mathbf{x}}_0 \leftarrow \tilde{\mathbf{x}}_T$
end for
return $\tilde{\mathbf{x}}_T$

我们先从均匀分布中采样 $\bar{x}_0$，$s_\theta(x, 1)$ 估计 $\nabla_{\dot{x}} \log p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$，由于 σ_1 是一个较大的值，$s_\theta(x, 1)$ 对 $\nabla_{\dot{x}} \log p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$ 在低密度的区域估计也是准的，经过算法中的第二个 for 循环，我们最终关于 $p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$ 的样本 x_T 是可以认为是关于对于分布 $p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$ 的采样。

显然 $p_{\sigma_1}(\dot{x}|x)$ 与 $p_{\sigma_2}(\dot{x}|x)$ 尽管略有不同，但是总体差别不大，经过利用 $s_\theta(x, 1)$ 迭代的样本 x_T 为 $s_\theta(x, 2)$ 提供了良好的初始化样本，也是就利用 $s_\theta(x, 2)$ 迭代的初始样本 x_0 是在 $p_{\sigma_2}(\dot{x}|x)$ 的高密度区域，在高密度区域 $s_\theta(x, 2)$ 对 $\nabla_{\dot{x}} \log p_{\sigma_2}(\dot{x}|x)$ 的估计是准的，以此类推，经过 $s_\theta(x, i-1)$ 迭代优化的样本为 $s_\theta(x, i)$ 提供了良好的初始化样本。

最终 $s_\theta(x, L-1)$ 迭代优化的样本为 $s_\theta(x, L)$ 提供了高密度区域 (密度梯度准确区域) 采样的初始化样本，并且由于 σ_L 较小，$s_\theta(x, L)$ 可以看做是对 $\nabla_x \log p_{data}(x)$ 的准确估计，进过迭代优化后得到了对 $p_{data}(x)$ 的近似采样。

关于 $s_\theta(x,i) \quad i=1,...,L$, 通常是使用 U-NET 结构，但是条件信息 i 如何输入网络中呢？DDPM 使用 NLP 中的时间编码信息来表示而外的信息，这里使用条件实例归一化来表示。

实例归一化:

我们定义输入特征图 x 的形状为 (C,H,W), 那么实例归一化首先对每个通道计算沿着空间维度的均值 $\mu \in R^C$ 以及标准差 $\Phi \in R^C$:

$$u_c = \frac{1}{HW}\sum_{h=1}^{H}\sum_{w=1}^{W} x_{[c,h,w]} \qquad \Phi_c = \sqrt{\frac{1}{HW}\sum_{h=1}^{H}\sum_{w=1}^{W}\left(x_{[c,h,w]} - u_c\right)^2} \qquad c = 1,2,...,C$$

我们设实例归一化的输出为 y, 形状为 (C,H,W)，那么:

$$y_{[c,h,w]} = \gamma_c \frac{x_{[c,h,w]} - u_c}{\Phi_c} + \beta_c$$

其中 $\gamma, \Phi \in R^C$，是一组可学习的参数（线性映射系数）。

条件实例归一化:

与实例归一化不同的是，对于不同 $i=1,...,L$ 使用不同的线性映射系数，我们重新定义 $\gamma, \Phi \in R^{L\times C}$, 输出可以写成:

$$y_{[c,h,w]} = \gamma_{[i,c]} \frac{x_{[c,h,w]} - u_c}{\Phi_c} + \beta_{[i,c]} \qquad \text{其中}i\text{为输入的条件}$$

论文还做了一些修改:

$$y_{[c,h,w]} = \gamma_{[i,c]} \frac{x_{[c,h,w]} - u_c}{\Phi_c} + \beta_{[i,c]} + \alpha_{[i,c]}\frac{u_c - m}{v} \qquad \text{其中}i\text{为输入的条件}$$

式中 $\alpha \in R^{L\times C}$ 是一组可以学习的参数，m, v 分别为 u 的均值和标准差，我们把条件实例归一化放在所有的卷积层和池化层后面，对 $s_\theta()$。

SDE