Score-Matching,SDE,Langevin Dynamics Sampling

参考：向diffusion更深处：score matching、随机微分方程和朗之万动力学 - 知乎

Score Matching

假如我们的目标是利用NN拟合目标概率分布

$$p(x)=\frac{e^{-f(x)}}{Z}$$

假设$f_\theta(x)$为NN的输出，为了构造合法的概率密度函数，我们令

$$p_\theta(x)=\frac{e^{-f_\theta(x)}}{Z_\theta}$$

其中$Z_\theta=\int e^{-f_\theta(x)}\mathrm{d}x$为归一化因子，非常难以求解，如何绕过?

答：使用Score Function $s_\theta(x)=\nabla_x\log p_\theta(x)=-\nabla_x f_\theta(x)$

$s_\theta(x)$加上归一化条件$\int p_\theta(x)\mathrm{d}x=1$可以唯一确定概率密度函数$p_\theta(x)$

因此，我们可以利用$s_\theta(x)$对$p_\theta(x)$作采样！！！

而具体方法就是Langevin Dynamics

现在，我们的任务变成拟合对数概率密度的梯度场

$$\theta^* = \arg\min_\theta \mathbb{E}_{p(x)}\left[\frac{1}{2}\|s(x) - s_\theta(x)\|^2\right]$$

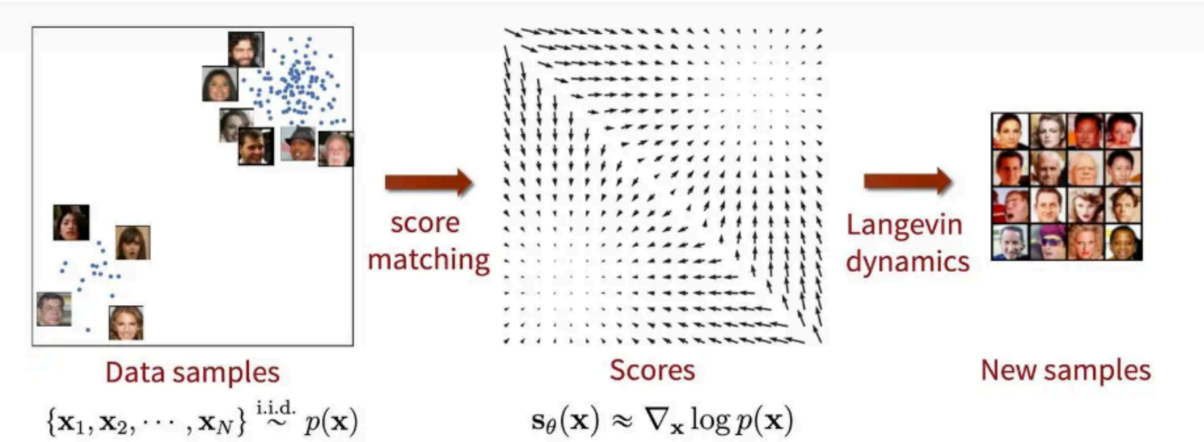
在一定条件下，上式的优化目标可化为(推导见参考或原文)

$$\mathcal{J}_\theta = \mathbb{E}_{p(x)} \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{1}{2}s_\theta^{(i)}(x)^2 + \frac{\partial s_\theta^{(i)}(x)}{\partial x_i}\right] + c$$

Langevin Dynamics Sampling

Assumption:

- **高概率区域，$p(x)$值较大，对数密度梯度$s(x)$较小**
- **低概率区域，$p(x)$值较小，对数密度梯度$s(x)$较大**



IDEA: 随机选一个点x_0，逐步将其更新到高概率区域！！！

Langevin Dynamics

为此，引入Langevin Equation(用于描述Brown Motion)

$$\mathrm{d}x(t)=-\nabla U(x(t))\mathrm{d}t+\sigma\sqrt{\mathrm{d}t}z_t$$

其中$z_t\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$

令$\mathrm{d}x(t)=x-x'$，并记$\mathrm{d}t=\epsilon$，我们有

$$x=x'-\nabla U(x(t))\epsilon+\sigma\sqrt{\epsilon}z_t \tag{1}$$

上式即为Langevin Dynamics Sampling的更新过程，会使得数据点往能量最低的区域运动并在该区域附近随机游走。若令

$$U(x)=-\log p(x)$$

则Langevin Sampling可以让数据点x移动到概率密度较高处(也就是真实图像)

下面证明Langevin Sampling可以让数据点数据点转移到目标概率分布

若x代表大量数据点，则其概率密度函数与时间t有关，表示为$p(x,t)$，Langevin采样过程的概率密度函数变化可由Fokker-Planck Equation描述

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t}=\nabla_x p(x,t)^T\nabla U(x)+p(x,t)\,\mathrm{div}\nabla U(x)+\tfrac{1}{2}\sigma^2\Delta p(x,t) \tag{2}$$

我们希望$p(x,t)$最终达到稳态分布，也就是Boltzman分布

$$p(x,t)=p(x)=\frac{1}{Z}e^{-\frac{U(x)}{T}}$$

代入(2)可得$T=\frac{\sigma^2}{2}$，也就是$\sigma=\sqrt{2T}$

由于$p_\theta(x)=\frac{e^{-f_\theta(x)}}{Z_\theta}$，因此$T=1$，于是$\sigma=\sqrt{2}$，此时数据点分布将会趋于稳态Boltzman分布。于是，若选取$U(x)=-\log p(x)$，则最终的稳态Boltzman分布为

$$p(x)=\frac{1}{Z}e^{-\frac{f(x)}{T}}$$

即为所求。因此，只要拟合$\nabla U(x)=-\nabla\log p(x)=-s(x)$，再利用Langevin Dynamics Sampling就可以得到我们想要的数据点！！！

综上，采样方程如下

$$x_{i+1} = x_i + \epsilon \nabla_x \log p(x) + \sqrt{2\epsilon} z_i,\ i = 0, 1, \ldots, K$$

其中$\epsilon \to 0 (K \to \infty)$，实际采样时$\nabla_x \log p(x)$由拟合函数$s_\theta(x) = \nabla_x \log p_\theta(x)$代替

退化分布与Noise Conditional Score

现在有了拟合目标，我们却要面临退化分布问题：假设图像空间的维度为d，但实际图像为一个$r(r < d)$维嵌入子流形，因此$p(x)$在绝大多数区域上为0，这样的话score matching在这些点上并不准(因为甚至无法采样到)

解决方法：在图像空间上加高斯噪声$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I})$，得到 $x' = x + \epsilon$，对应概率密度函数为$q_\sigma(x') > 0$

大方差覆盖区域广，但会破坏原本数据分布；小方差能保留原本数据分布但覆盖区域小。因此作者采用多强度方差$0 < \sigma_1 < \cdots < \sigma_L$，对应Score Matching Loss如下

$$\mathbb{E}_{q_\sigma(x)} \frac{1}{2} \left[\| s_\theta(x, \sigma) - \nabla_x \log q_\sigma(x) \|^2 \right]$$

但是$q_\sigma(x)$无法精确计算，因此我们做如下转化(DDPM就采用该转化后的Loss)

$$\nabla_x \log q_\sigma(x) = \nabla_x \log \left[q_\sigma(x|x') p(x') \right] = \nabla_x \log q_\sigma(x|x')$$

其中

$$\log q_\sigma(x|x') = -\frac{(x - x')^2}{2\sigma^2}$$

因此，Score Matching Loss转化为下面的Noise Conditional Score Matching Loss

$$l(\theta; \sigma_i) = \mathbb{E}_{p(x')} \mathbb{E}_{x \sim \mathcal{N}(x', \sigma^2 \mathbf{I})} \left[\frac{1}{2} \| s_\theta(x, \sigma) + \frac{x - x'}{\sigma^2} \|^2 \right]$$

集成不同噪声强度得到

$$\mathcal{L}(\theta; \{\sigma_i\}_{i=0}^{L}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} \lambda(\sigma_i) l(\theta; \sigma_i)$$

实验发现$s_\theta(x, \sigma) \propto \frac{1}{\sigma}$，因此我们选取$\lambda(\sigma_i) = \sigma_i^2$

Annealed Langevin Dynamics

Langevin Dynamics如下

$$x_{i+1} = x_i + \epsilon \nabla_x \log p(x) + \sqrt{2\epsilon} z_i,\ i = 0, 1, \ldots, K$$

将Score Function用拟合好的NN替代，有

$$x_{i+1} = x_i + \epsilon s_\theta(x_i, \sigma_{i+1}) + \sqrt{2\epsilon} z_i,\ i = 0, 1, \ldots, K$$

作者采用的退火Langevin Dynamics如下

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**

  $\alpha_i \leftarrow \epsilon \cdot \sigma_i^2 / \sigma_L^2$ ▷ 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 $\tilde{\mathbf{x}}_T$

也就是取

$$\epsilon = \frac{\alpha_i}{2} = \frac{\epsilon_0 \sigma_i^2}{2\sigma_L^2}$$

直觉上，一开始，粒子的视线还很模糊(σ_i比较大)，但离目标较远，因此步长可以大一些，每步都有随机性；走了T步之后，视线清晰(σ_i变小)了一些，距离目标近了一些，

因此步长减小；如此，走了(L-1)T步之后，视线基本清晰无误($\sigma_i \approx 0$)，于是小步微调，直到来到目标分布附近。至此，我们便得到服从$p_\theta(x) \approx p(x)$分布的图像x

SDE视角下的Diffusion

Ito process

首先引入**伊藤过程(Ito process)**

$$\mathrm{d}x = f(x,t)\mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}w$$

其中$\mathrm{d}w = \sqrt{\mathrm{d}t}z, z \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$为标准Wiener过程，$f(x,t)$，$g(t)$分别称为漂移因子与扩散因子。该过程亦称为**扩散过程(Diffusion Process)**

可以发现，上式和Langevin Equation的区别在于Langevin Equation的漂移因子与t无关，而Ito Process则更一般，与t相关。正是这点区别，使得DDPM对应的Ito Process的概率密度函数$p_t(x)$为原数据点分布加上高斯噪声之后的分布，也就是前文提到的$q_\sigma(x)$

可以证明，上述扩散过程的逆过程亦为扩散过程

$$\mathrm{d}x_t = [f(x,t) - g^2(t)\nabla_x \log p_t(x)]\mathrm{d}t + g(t)\mathrm{d}w$$

其中，$\mathrm{d}t$为负时间步，$\nabla_x \log p_t(x)$称作Score，是唯一的未知量

Score的求解

首先来看Score的表达式

$$\begin{aligned}\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) &= \nabla_{x_t} \log \left[p_{0t}(x_t|x_0)p_0(x_0)\right] \\ &= \nabla_{x_t} \log p_{0t}(x_t|x_0) \\ &= \nabla_{x_t}\left[-\frac{(x_t-\mu_t)^2}{2\sigma_t^2}\right] \\ &= -\frac{x_t-\mu_t}{\sigma_t^2}\end{aligned}$$

这里$p_{0t}(x_t|x_0)$亦为高斯分布

在DDPM中， 有

$$\mu_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t} x_0$$
$$\sigma_t = \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}$$

因此，有

$$\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) = -\frac{1}{\sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}} \epsilon_t$$

于是，DDPM的Loss为

$$\sum_{t=1}^{N} (1 - \bar{\alpha}_t) \mathbb{E}_{x_0 \sim p_0(x_0)} \mathbb{E}_{x_t \sim \mathcal{N}(x_0, \sigma_t^2 \mathbf{I})} \left[\| s_\theta(x_t, t) - \nabla_{x_t} \log p(x_t | x_0) \|^2 \right]$$

此即前文提到过的Noise Conditional Score Matching Loss

DDPM的SDE推导

DDPM加噪过程为

$$x_i = \sqrt{1 - \beta_i} x_{i-1} + \sqrt{\beta_i} \epsilon, i = 1, \ldots, N$$

令$x(t = \frac{i}{N}) = x_i, \beta(t = \frac{i}{N}) = N\beta_i, \Delta t = \frac{1}{N}, N \to \infty$

代入有

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= \sqrt{1 - \frac{\beta(t + \Delta t)}{N}} x(t) + \sqrt{\frac{\beta(t + \Delta t)}{N}} \epsilon \\ &= \sqrt{1 - \beta(t + \Delta t)\Delta t} x(t) + \sqrt{\beta(t + \Delta t)\Delta t} \epsilon \end{aligned}$$

取

$$\sqrt{1 - \beta(t + \Delta t)\Delta t} \approx 1 - \frac{1}{2} \beta(t + \Delta t) \Delta t$$

有

$$x(t + \Delta t) = \left[1 - \frac{1}{2} \beta(t + \Delta t) \right] \Delta t x(t) + \sqrt{\beta(t + \Delta t)\Delta t} \epsilon$$

两边减去$x(t)$并令$\Delta t \to 0$得

$$
\begin{aligned}
\mathrm{d}x(t) &= -\frac{1}{2}\beta(t)x(t)\mathrm{d}t + \sqrt{\beta(t)\mathrm{d}t}\epsilon \\
&= -\frac{1}{2}\beta(t)x(t)\mathrm{d}t + \sqrt{\beta(t)}\mathrm{d}w
\end{aligned}
$$

此即DDPM对应的SDE。注意，上面对β作了N倍放缩主要是为了凑出Δt

逆向 SDE的求解

Euler-Maruyama Method(欧拉-丸山法)

假设我们有如下SDE

$$
\mathrm{d}x = a(x_t)\mathrm{d}t + b(x_t)\mathrm{d}w
$$

则可进行如下数值估计

$$
x(t+\Delta t) = x_t + a(x_t)\Delta t + b(x_t)\Delta w
$$

另外，在数值估计中，有一种优化预测结果的方法，**Predictor-Corrector method(PC方法，预测-校正法)**，也就是先用一般数值估计求出一个粗解，再利用该粗解用其他方法做进一步修正。在SMLD中，校正的方法即Langevin Dynamics Sampling

Algorithm 3 PC sampling (VP SDE)

$\mathbf{x}_N \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$

for $i = N-1$ **to** 0 **do**

Predictor

  $\mathbf{x}_i' \leftarrow (2-\sqrt{1-\beta_{i+1}})\mathbf{x}_{i+1} + \beta_{i+1}\mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}^*}(\mathbf{x}_{i+1}, i+1)$

  $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$

  $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i' + \sqrt{\beta_{i+1}}\mathbf{z}$

Corrector

  for $j = 1$ **to** M **do**

    $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$

    $\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_i + \epsilon_i \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}^*}(\mathbf{x}_i, i) + \sqrt{2\epsilon_i}\mathbf{z}$

return $\mathbf{x}_0$

注：1. 任何SDE的数值估计法，都可以作为Predictor 2. 任何Score-based MCMC方法，都可以作为Corrector

在DDPM中，Predictor对应模型预测每一步的噪声并更新样本

$$x_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\epsilon_\theta(x_t, t)) + \tilde{\sigma}_t z$$

无显式Corrector

Conditional Generation

$$\begin{aligned}
\nabla_x \log p(x|y) &= \nabla_x \log p(y|x) + \nabla_x \log p(x) \\
&= \omega \left[\nabla_x \log p(x|y) - \nabla_x \log p(x)\right] + \nabla_x \log p(x) \\
&= \underbrace{\omega \nabla_x \log p(x|y)}_{\text{Conditional Score}} + \underbrace{(1-\omega)\nabla_x \log p(x)}_{\text{Unconditional Score}}
\end{aligned}$$