diffusion model 公式推导

1136928835

February 2024

1 Introduction

针对扩散模型的公式推导。

$x_0, x_1, ..., x_t$ 分别表示为从原始图像开始逐渐增加噪声至完全的白噪声，x_0 为原始图像，x_t 为白噪声，服从高斯分布。扩散过程可以分为两个阶段：逐渐向原始图像中增加噪声成为白噪声，这一阶段为正向扩散过程；由白噪声逐渐减少噪声恢复成原始的图像，这一阶段为逆向扩散过程。对于不含有噪声的图像而言，改变它的分布只需要增加一点噪声，但对于混合噪声的图像而言，改变分布需要增加更多的噪声。

根据前向扩散的定义，x_t 可以由 x_{t-1} 增加噪声得到：

$$x_t = \sqrt{\alpha_t}x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}z_1 \tag{1}$$

其中：$\alpha_t = 1 - \beta_t$，β 与 α 为权重因子，β 随着时间 t 递增，α 随着时间 t 递减，表示图像中需要增加的噪声越来越多；z_1 服从高斯分布：$z_1 \sim \mathcal{N}(0,1)$。

根据 (1) 我们可以递推得到 x_t 与 x_{t-2} 的关系：

$$x_{t-1} = \sqrt{\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}}z_2 \tag{2}$$

$$\begin{aligned} x_t &= \sqrt{\alpha_t}(\sqrt{\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}}z_2) + \sqrt{1-\alpha_t}z_1 \\ &= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{(1-\alpha_t\alpha_{t-1})}z \end{aligned} \tag{3}$$

不断递推，可以得到 x_0 与 x_t 的关系：

$$x_t = \sqrt{\overline{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1-\overline{\alpha}_t}z \tag{4}$$

$$\overline{\alpha}_t = \alpha_t\alpha_{t-1}..\alpha_0 \tag{5}$$

α 为超参数，可以根据时间步计算出具体的值；z_1 服从高斯分布：$z_1 \sim \mathcal{N}(0,1)$。于是我们得到前向扩散过程中最重要的一个公式 (4)，根据原始图像和时间步 t，我们可以得到噪声扩散任意时间后的图像。

现在来看逆向过程，对于逆向过程，我们需要根据白噪声 x_t 得到它前一步的分布 x_{t-1}，即条件概率：$q(x_{t-1}|x_t, x_0)$，x_0 在逆向过程中是需要求得的结果，为未知变量，这里加上 x_0 是作为先决条件，在后面可以进行替换消除。

$$q(x_{t-1}|x_t, x_0) = q(x_t|x_{t-1}, x_0)\frac{q(x_{t-1}|x_0)}{q(x_t|x_0)} \tag{6}$$

$$q(x_t|x_{t-1}, x_0) = \sqrt{\alpha_t}x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}z \sim \mathcal{N}(\sqrt{\alpha_t}x_{t-1}, 1-\alpha_t) \tag{7}$$

$$q(x_t|x_0) = \sqrt{\overline{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1-\overline{\alpha}_t}z \sim \mathcal{N}(\sqrt{\overline{\alpha}_t}x_0, 1-\overline{\alpha}_t) \tag{8}$$

$$q(x_{t-1}|x_0) = \sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}x_0 + \sqrt{1-\overline{\alpha}_{t-1}}z \sim \mathcal{N}(\sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}x_0, 1-\overline{\alpha}_{t-1}) \tag{9}$$

已知高斯分布 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 的概率分布为:

$$
\begin{aligned}
f(x) &= exp(-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}) \\
&= exp(-\frac{1}{2}\frac{x^2 - 2x\mu + \mu^2}{\sigma^2})
\end{aligned} \tag{10}
$$

由此我们可以得到 $q(x_{t-1}|x_t, x_0)$ 的概率分布为:

$$
f(x_{t-1}) = exp[-\frac{1}{2}(\frac{(x_t - \sqrt{\alpha_t}x_{t-1})^2}{1-\alpha_t} + \frac{(x_{t-1} - \sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}x_0)^2}{1-\overline{\alpha}_{t-1}} - \frac{(x_t - \sqrt{\overline{\alpha}_t}x_0)^2}{1-\overline{\alpha}_t})] \tag{11}
$$

$$
= exp[-\frac{1}{2}(\frac{x_t^2 - 2\sqrt{\alpha_t}x_t x_{t-1} + \alpha_t x_{t-1}^2}{1-\alpha_t} + \frac{x_{t-1}^2 - 2\sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}x_0 x_{t-1} + \overline{\alpha}_{t-1}x_0^2}{1-\overline{\alpha}_{t-1}} - \frac{x_t^2 - 2\sqrt{\overline{\alpha}_t}x_0 x_t + \overline{\alpha}_t x_0^2}{1-\overline{\alpha}_t})] \tag{12}
$$

$$
= exp\{-\frac{1}{2}[(\frac{\alpha_t}{1-\alpha_t} + \frac{1}{1-\overline{\alpha}_{t-1}})x_{t-1}^2 + (\frac{-2\sqrt{\alpha_t}x_t}{1-\alpha_t} - \frac{2\sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}x_0}{1-\overline{\alpha}_{t-1}})x_{t-1} + C]\} \tag{13}
$$

对比 (10)，可以得到 $q(x_{t-1}|x_t, x_0)$ 的均值和方差:

$$
\sigma^2 = \frac{1}{\frac{\alpha_t}{1-\alpha_t} + \frac{1}{1-\overline{\alpha}_{t-1}}} = \frac{1-\overline{\alpha}_{t-1}}{1-\overline{\alpha}_t}\beta_t \tag{14}
$$

$$
\mu = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\overline{\alpha}_{t-1})}{1-\overline{\alpha_t}}x_t + \frac{\sqrt{\overline{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\overline{\alpha}_t}x_0 \tag{15}
$$

根据 x_0 和 x_t 之间的关系 (4)，将均值中的 x_0 进行替换:

$$
\mu = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}(x_t - \sqrt{1-\overline{\alpha}_t}\epsilon_\theta) \tag{16}
$$

ϵ_θ 为模型预测值。