DDPM原理推导

高斯分布

也叫正态分布（Normal distribution），在自然界各种情况下都经常出现的一种分布类型。一般记为 $N(\mu, \sigma^2)$ 其中， μ 为这一分布的数学期望（均值）， σ 为这一分布的标准差。

当 $\mu = 0, \sigma = 1$ 时，这一分布称为**标准正态分布**，一般的高斯分布函数可以写作：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$$

高斯噪声

对于图像领域，经常会使用到高斯噪声，而高斯噪声就是通过高斯分布来随机生成的。对于一个典型的三通道RGB，每个像素取值为256色，那么其高斯噪声图像即为，对每个像素的单一通道进行一次标准正态分布的取值（像素取值归一化到0~1这一范围）。完成全部取值后的图片即为高斯噪声，一般记作 ϵ .

前向加噪

对于DDPM中的逐步加噪过程，每一步都可以写做：

$$\sqrt{\beta} \times \epsilon + \sqrt{1-\beta} \times x$$

其中x为上一张图像， ϵ 为等大的高斯噪声， β 为一个常数（随着进行的过程逐步增大，但不超过1），也就是

$$0 < \beta_1 < \beta_2 < ... < \beta_t < 1$$

现在我们已知了从 x_{t-1} 到 x_t 的计算公式（即便这是个随机过程），接下来就要尝试研究能否有 x_0 直接到 x_t 的计算公式：

$$x_t = \sqrt{\beta_t} \times \epsilon + \sqrt{1-\beta_t} \times x_{t-1}$$

为了简化后续的计算，引入一个新的常数 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ ，那么计算式就被简化为了

$$x_t = \sqrt{1-\alpha_t} \times \epsilon_t + \sqrt{\alpha_t} \times x_{t-1}$$

考虑 x_{t-2} 到 x_t 的过程，经过计算化简得到

$$x_t = \sqrt{1-\alpha_t} \times \epsilon_t + \sqrt{\alpha_t(1-\alpha_{t-1})} \times \epsilon_{t-1} + \sqrt{\alpha_{t-1}\alpha_t} \times x_{t-2}$$

其中前两项都是一个标准正态分布 $\times$ 一个常数的格式，所以可以写做

$$x_t = N(0, 1-\alpha_t) + N(0, \alpha_t(1-\alpha_{t-1})) + \sqrt{\alpha_{t-1}\alpha_t} \times x_{t-2}$$

而两个正态分布相加，得到的也是一个正态分布

$$N(\mu_1, \sigma_1^2) + N(\mu_2, \sigma_2^2) = N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

所以可以进一步化简为

$$x_t = N(0, 1 - \alpha_t + \alpha_t(1 - \alpha_{t-1})) + \sqrt{\alpha_{t-1}\alpha_t} \times x_{t-2} = N(0, 1 - \alpha_t\alpha_{t-1}) + \sqrt{\alpha_{t-1}\alpha_t} \times x_{t-2}$$

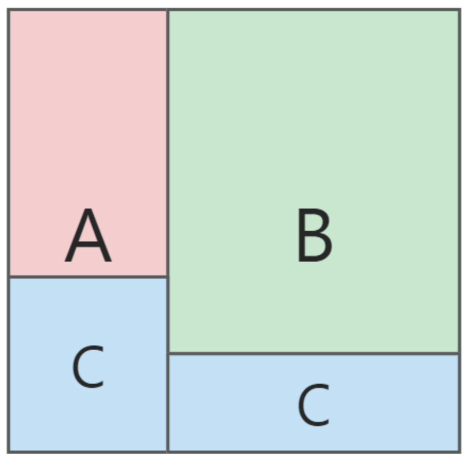
继续推导可以得到 x_0 到 x_t 的转化公式，其中 $\hat{\alpha}_t = \alpha_1 \cdot \alpha_2 ... \alpha_t$

$$x_t = N(0, 1 - \hat{\alpha}_t) + \sqrt{\hat{\alpha}_t} \times x_0$$

转化回高斯噪声的添加就是

$$x_t = \sqrt{\hat{\alpha}_t} \times x_0 + \sqrt{1 - \hat{\alpha}_t} \times \epsilon$$

贝叶斯公式



如图中的这也一个概率分布中，A，B是两个独立事件，而发生A，B事件之后，各有一定的概率发生C，如果我们已知C已发生，那么会对AB分别发生概率进行一个重新的估计，这一过程可以用贝叶斯公式来计算

$$P(A|C) = \frac{P(C|A)P(A)}{P(C)}$$

其中， $P(A)$ 是不知道任何情况时，默认的A事件概率，称为先验概率， $P(A|C)$ 是知晓C事件发生后，对A事件概率进行的修正后概率，称为后验概率，其中 $P(C)$ 称为证据， $p(B|A)$ 称为似然。

反向去噪

因为从 x_{t-1} 到 x_t 是一个随机过程，那么反向也同样是一个随机过程，所以我们要求的就是 $P(x_{t-1}|x_t)$,根据贝叶斯公式，且 x_t 的概率即为从 x_0 得到其的概率

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

此时，等式右边的几个概率都为加噪过程中的概率，根据之前已经求得的公式，可以得到其随机过程的表达

$$x_t = \sqrt{\alpha_t} \times x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t} \times \epsilon_t = N(\sqrt{\alpha_t} x_{t-1}, 1-\alpha_t)$$
$$x_t = \sqrt{\hat{\alpha}_t} \times x_0 + \sqrt{1-\hat{\alpha}_t} \times \epsilon = N(\sqrt{\hat{\alpha}_t} x_0, 1-\hat{\alpha}_t)$$

而将这三个概率函数带入到原式中，经过化简得到：

$$P(x_{t-1}|x_t) = N(\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\hat{\alpha}_{t-1})}{1-\hat{\alpha}_t} x_t + \frac{\sqrt{\hat{\alpha}_{t-1}}(1-\alpha_t)}{1-\hat{\alpha}_t} x_0, (\frac{(1-\alpha_t)(1-\hat{\alpha}_{t-1})}{1-\hat{\alpha}_t}))$$

但此时的式子中仍旧存在 x_0 其作为需要被求的结果，肯定是未知的，但对之前的 x_0 到 x_t 之间的关系进行简单变换，就有

$$x_0 = \frac{x_t - \sqrt{1-\hat{\alpha}_t} \times \epsilon}{\sqrt{\hat{\alpha}_t}}$$

带入进去得到

$$\begin{gathered} P(x_{t-1}|x_t) = N(\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\hat{\alpha}_{t-1})}{1-\hat{\alpha}_t} x_t + \frac{\sqrt{\hat{\alpha}_{t-1}}(1-\alpha_t)}{1-\hat{\alpha}_t} \times \\ \frac{x_t - \sqrt{1-\hat{\alpha}_t} \times \epsilon}{\sqrt{\hat{\alpha}_t}}, (\frac{(1-\alpha_t)(1-\hat{\alpha}_{t-1})}{1-\hat{\alpha}_t})) \end{gathered}$$

此时，只需要 ϵ 高斯噪声作为输入（特指从 x_0 到 x_t 使用的那一个），就可以确定这个随机过程。