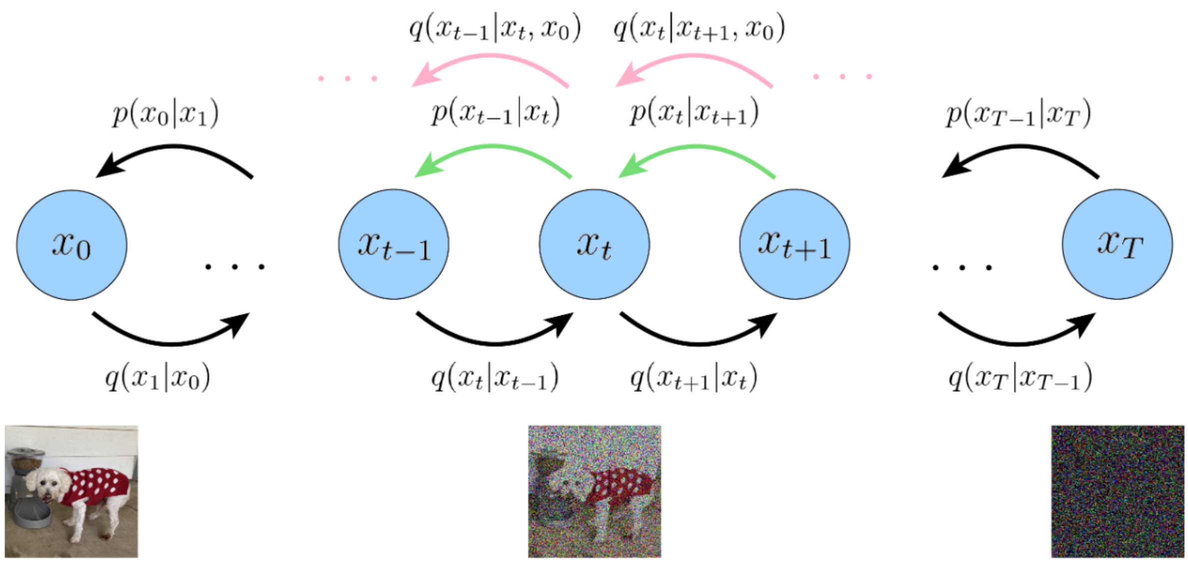
Diffusion Models

Denoising Diffusion Probabilistic Models (DDPMs)

目的：从随机噪声（标准正态分布）中生成数据样本（e.g., 一张猫猫/小狗的图片）。

$$z \sim \mathcal{N}(0, I) \longrightarrow x \sim q_{\text{data}}(x)$$



Forward Process

定义

很明显，直接从随机噪声中生成一个数据样本是非常困难的。那么如果反过来呢？考虑先把数据样本 x_0 破坏成噪声 x_T，（假设需要 T 时间步），这样就简单多了，只要每次在数据里添加随机噪声就好了，慢慢就变成一个纯的随机噪声了。把这个过程用数学表示出来（我们约定前向过程用概率分布 q 来表示）：

$$(x_0 \sim q_{\text{data}}) \to x_1 \to \cdots \to (x_T \sim \mathcal{N}(0, I))$$

更具体的，DDPMs将其定义为（已知的）前向加噪过程(Forward Process)，他是一个Markov过程：

$$q(x_{1:T} \mid x_0) = \prod_{t=1}^{T} q(x_t \mid x_{t-1}) \quad \text{with} \quad q(x_t \mid x_{t-1}) = \mathcal{N}(x_t; \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t I)$$

其中 β_t 也是已知的，预定义好的一个数列，满足 $\beta_1 < \beta_2 < \cdots < \beta_T$，可以是linear schedule, cosine schedule等等...

从转移概率分布 $q(x_t \mid x_{t-1})$ 中可以看出，其实这个概率可以等价成一个等式（重参数化 reparameterization）：

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

这个等式相比概率分布而言更直观的体现加噪过程：每次在上一步的状态 x_{t-1} 上，与新引入的一个随机噪声 ε_t 进行线性组合，以此得到下一个时刻的状态 x_t。

现在来看看这个Markov链有什么很好的性质：任何时刻的 x_t 可以由 x_0 和 β_t 表示：

$$\begin{aligned}
x_t &= \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t \\
&= \sqrt{\alpha_t}x_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}\varepsilon_t \\
&= \sqrt{\alpha_t}(\sqrt{\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}}\epsilon_{t-1}) + \sqrt{1-\alpha_t}\varepsilon_t \\
&= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{\alpha_t(1-\alpha_{t-1}) + 1-\alpha_t}\varepsilon_{t-2} \\
&= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}}\varepsilon_{t-2} \\
&= \cdots \\
&= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}\cdots\alpha_1}x_0 + \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}\cdots\alpha_1}\varepsilon \\
&= \sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon
\end{aligned}$$

这里我们简记 $\alpha_t = 1-\beta_t$ 和 $\bar{\alpha}_t = \prod_{i=1}^{t}\alpha_i$，并且对随机噪声的合并中用到了正态分布的性质：$\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2 I) + \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2 I) = \mathcal{N}(\mu_1+\mu_2, (\sigma_1^2+\sigma_2^2)I)$。如果再用概率来表示 x_t 和 x_0 之间的关系 $x_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon$，也就是下面这个条件概率：

$$q(x_t \mid x_0) = \mathcal{N}(x_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0, (1-\bar{\alpha}_t)I)$$

Reverse Process

前向过程的性质就先挖到这里，接下来我们来考虑反向过程(Reverse Process)。约定反向过程中的未知概率分布用 p 来表示（与前向过程已知的分布区分），我们希望能够反转上述（前向）过程，如果可以从 $p(x_{t-1} \mid x_t)$ 中采样，那么我们就可以在 T 时刻从随机噪声（标准正态分布）中采样一个初始值 $x_T \sim \mathcal{N}(0, I)$，然后一步步去噪来还原，最终得到一个与真实图像分布（近似）一致的 $\hat{x}_0$。

但是我们并没有 $p(x_{t-1} \mid x_t)$ 的具体表达式，所以我们设计神经网络(Neural Network)来学习这个分布。

定义：$p_\theta(x_{t-1} \mid x_t) = \mathcal{N}(x_{t-1}; \mu_\theta(x_t, t), \Sigma_\theta(x_t, t)I)$，也即均值和方差分别为 $\mu_\theta(x_t, t)$ 和 $\Sigma_\theta(x_t, t)$ 这两个神经网络项。

我们先考虑如何设计Training Loss：DDPMs选择的是优化负对数似然(negative log-likelihood)，先上结论:

$$
\begin{aligned}
-\log p_\theta(x_0) &\le \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[-\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(x_T|x_0)\|p(x_T))}_{L_T} + \sum_{t=2}^{T}\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(x_{t-1}|x_t,x_0)\|p_\theta(x_{t-1}|x_t))}_{L_{t-1}} + \underbrace{\log p_\theta(x_0|x_1)}_{L_0}\right] \\
&\triangleq \mathcal{L}
\end{aligned}
$$

接下来一点点来推导：

1. ELBO: $-\log p_\theta(x_0) \le \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[-\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right]$

$$
\begin{aligned}
\log p_\theta(x_0) &= \log\int p_\theta(x_{0:T})dx_{1:T} \\
&= \log\int\frac{p_\theta(x_{0:T})q(x_{1:T}|x_0)}{q(x_{1:T}|x_0)}dx_{1:T} \\
&= \log\mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right] \\
&\ge \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right] \quad \text{Jensen's Inequality}
\end{aligned}
$$

2. $\mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right] = \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[L_T + \sum_{t=2}^{T}L_{t-1} + L_0\right]$

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p_\theta(x_T)\prod_{i=1}^{T}p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{\prod_{t=1}^{T}q(x_t|x_{t-1})}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)\prod_{t=2}^{T}p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_1|x_0)\prod_{t=2}^{T}q(x_t|x_{t-1})}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)\prod_{t=2}^{T}p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_1|x_0)\prod_{i=2}^{T}q(x_t|x_{t-1},x_0)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_1|x_0)} + \log\prod_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1},x_0)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_1|x_0)} + \log\prod_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{\frac{q(x_{t-1}|x_t,x_0)q(x_t|x_0)}{q(x_{t-1}|x_0)}}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[\log\frac{p(x_T)p_\theta(x_0|x_1)}{q(x_T|x_0)} + \log\prod_{t=2}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_{t-1}|x_t,x_0)}\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[D_{\mathrm{KL}}(q(x_T|x_0)\parallel p(x_T)) + \sum_{t=2}^{T}D_{\mathrm{KL}}(q(x_{t-1}|x_t,x_0)\parallel p_\theta(x_{t-1}|x_t)) + \log p_\theta(x_0|x_1)\right] \\
&= \mathbb{E}_{q(x_{1:T}|x_0)}\left[L_T + \sum_{t=2}^{T}L_{t-1} + L_0\right]
\end{aligned}
$$

由此，我们把负对数似然的上界(upper bound)求出来了，原来的负对数似然只是对反向过程中神经网络的概率分布 p_θ 的建模，通过这个upper bound建立了 p_θ 与前向过程已知的分布 q 之间的联系。我们把这个upper bound设为最终的Training loss $\mathcal{L}$ 。

可以看到，在推导的时候，我们把拆开的各个部分分别命名为 L_0, L_T 和 L_{t-1} $(2 \leq t \leq T)$。现在我们对他们进行单独分析：

1. L_T 对Training loss $\mathcal{L}$ 来说是个常数（因为我们已知 $p_\theta(x_T) = p(x_T)$ 这个反向过程的起始分布就是标准正态分布）
2. L_0 这一项在DDPM的实现中是通过高斯离散编码器(independent discrete decoder)实现的，这一块晚点来补充具体实现。

```
    # === Log likelihood calculation ===

    def _vb_terms_bpd(self, denoise_fn, x_start, x_t, t, *, clip_denoised:
bool, return_pred_xstart: bool):

        true_mean, _, true_log_variance_clipped =
self.q_posterior_mean_variance(x_start=x_start, x_t=x_t, t=t)

        model_mean, _, model_log_variance, pred_xstart = self.p_mean_variance(

          denoise_fn, x=x_t, t=t, clip_denoised=clip_denoised,
return_pred_xstart=True)

        kl = normal_kl(true_mean, true_log_variance_clipped, model_mean,
model_log_variance)

        kl = nn.meanflat(kl) / np.log(2.)

        decoder_nll = -utils.discretized_gaussian_log_likelihood(

          x_start, means=model_mean, log_scales=0.5 * model_log_variance)

        assert decoder_nll.shape == x_start.shape

        decoder_nll = nn.meanflat(decoder_nll) / np.log(2.)

        # At the first timestep return the decoder NLL, otherwise return
KL(q(x_{t-1}|x_t,x_0) || p(x_{t-1}|x_t))

        assert kl.shape == decoder_nll.shape == t.shape == [x_start.shape[0]]

        output = tf.where(tf.equal(t, 0), decoder_nll, kl)
```

```
return (output, pred_xstart) if return_pred_xstart else output
```

3. 最重要的就是中间的 $T-1$ 项 L_{t-1} $(2 \leq t \leq T)$。

我们先考虑 $q(x_{t-1}|x_t, x_0)$ 这个概率分布，因为这是一个确定的分布，根据贝叶斯(Bayes)定理和前向过程定义的概率：

$$
\begin{aligned}
q(x_{t-1}|x_t, x_0) &= \frac{q(x_{t-1}, x_t, x_0)}{q(x_t, x_0)} \\
&= \frac{q(x_0, x_{t-1})q(x_t|x_0, x_{t-1})}{q(x_0)q(x_0|x_t)} \\
&= \frac{q(x_0)q(x_{t-1}|x_0)q(x_t|x_0, x_{t-1})}{q(x_0)q(x_t|x_0)} \\
&= \frac{q(x_{t-1}|x_0)q(x_t|x_0, x_{t-1})}{q(x_t|x_0)} \\
&= \frac{q(x_{t-1}|x_0)q(x_t|x_{t-1})}{q(x_t|x_0)} \\
&= \frac{\mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0, (1-\bar{\alpha}_{t-1})I) \cdot \mathcal{N}(\sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t I)}{\mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0, (1-\bar{\alpha}_t)I)}
\end{aligned}
$$

计算这种正态分布乘积除法的混合运算时，已知最后运算结束还是服从正态分布，所以可以直接考虑 e 指数的部分（先省略其他的常数部分 e.g. $\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}$），以减轻计算量（这里指数部分展开后的合并化简策略大概是这样的：最终要计算 $q(x_{t-1}|x_t, x_0)$ ，我们把其中的 x_{t-1} 当成主元（未知数），条件中的 x_t 和 x_0 作为已知的进行计算）：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0, (1-\bar{\alpha}_{t-1})I) \cdot \mathcal{N}(\sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t I)}{\mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0, (1-\bar{\alpha}_t)I)} \\
\propto &\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{(x_t-\sqrt{\alpha_t}x_{t-1})^2}{\beta_t} + \frac{(x_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}x_0)^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}} - \frac{(x_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0)^2}{\bar{\alpha}_t}\right)\right] \\
\propto &\exp\left\{-\frac{1}{2\frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}}\left[x_{t-1}^2 - 2\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})x_t + \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t x_0}{1-\bar{\alpha}_t}x_{t-1}\right]\right\} \\
\propto &\exp\left\{-\frac{1}{2\frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}}\left(x_{t-1} - \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})x_t + \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t x_0}{1-\bar{\alpha}_t}\right)^2\right\}
\end{aligned}
$$

对比正态分布的概率密度表达式就可以得到：

$$
\begin{gathered}
q(x_{t-1}|x_t, x_0) \sim \mathcal{N}(\mu_q, \Sigma_q^2 I), \\
\mu_q = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}x_0,\ \Sigma_q^2 = \frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}.
\end{gathered}
$$

先前我们已经求出了 x_t 与 x_0 的关系式，所以这里我们进一步化简 μ_q

$$
\begin{aligned}
\mu_q &= \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}x_0 \\
&= \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}x_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(x_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon_t) \\
&= \frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}x_t + \frac{\beta_t}{(1-\bar{\alpha}_t)\sqrt{\alpha_t}}(x_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon_t) \\
&= \left(\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t} + \frac{\beta_t}{(1-\bar{\alpha}_t)\sqrt{\alpha_t}}\right)x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\sqrt{\alpha_t}}\varepsilon_t \\
&= \left(\frac{\alpha_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})+\beta_t}{(1-\bar{\alpha}_t)\sqrt{\alpha_t}}\right)x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\sqrt{\alpha_t}}\varepsilon_t \\
&= \left(\frac{1-\alpha_t\bar{\alpha}_{t-1}}{(1-\bar{\alpha}_t)\sqrt{\alpha_t}}\right)x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\sqrt{\alpha_t}}\varepsilon_t \\
&= \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\sqrt{\alpha_t}}\varepsilon_t \\
&= \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_t\right)
\end{aligned}
$$

对于方差 Σ_q^2 ，他只与我们预设的超参数 β_t 有关。

对于两个正态分布的KL散度 (KL Divergence) (assume d is the dimension)：

$$
D_{\mathrm{KL}}\left(\mathcal{N}(x;\mu_x,\Sigma_x) \parallel \mathcal{N}(y;\mu_y,\Sigma_y)\right) = \frac{1}{2}\left[\log\frac{|\Sigma_y|}{|\Sigma_x|} - d + \mathrm{tr}(\Sigma_y^{-1}\Sigma_x) + (\mu_y-\mu_x)^T\Sigma_y^{-1}(\mu_y-\mu_x)\right]
$$

于是为了简便计算 $D_{\mathrm{KL}}\left(q(x_{t-1}|x_t,x_0)||p_\theta(x_{t-1}|x_t)\right)$，DDPMs就直接把 $p_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 的方差 $\Sigma_\theta(x_t,t)$ 设置成与 $q(x_{t-1}|x_t,x_0)$ 的方差相同 $\Sigma_\theta^2(x_t,t)=\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})/(1-\bar{\alpha}_t)$。

此时，L_{t-1} 就变为

$$
\begin{aligned}
L_t &= D_{\mathrm{KL}}(q(x_{t-1}|x_t,x_0) \parallel p_\theta(x_{t-1}|x_t)) \\
&= \frac{1}{2}\left[\log\frac{|\Sigma_q|}{|\Sigma_q|} - d + \mathrm{tr}(\Sigma_q^{-1}\Sigma_q) + (\mu_\theta-\mu_q)^T\Sigma_q^{-1}(\mu_\theta-\mu_q)\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[-d + d + (\mu_\theta-\mu_q)^T\left(\frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}I\right)^{-1}(\mu_\theta-\mu_q)\right] \\
&= \frac{1}{2\sigma_t^2}\|\mu_q(x_t,t)-\mu_\theta(x_t,t)\|^2
\end{aligned}
$$

这里简记 $\sigma_t^2 \triangleq \frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}$。这时就能发现，其实最终的loss就是两个均值之间的norm平方。

再进一步的，我们前面化简过 μ_q 了，代入 L_{t-1} 中后，

$$
\frac{1}{2\sigma_t^2}\|\mu_q(x_t,t)-\mu_\theta(x_t,t)\|^2 = \frac{1}{2\sigma_t^2}\left\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_t\right) - \mu_\theta(x_t,t)\right\|^2
$$

此时神经网络项 $\mu_\theta(x_t,t)$ 是需要有 x_t 作为输入的（即我们已知 x_t ），这时候如果我们做一个巧妙的参数化（目的是为了进一步简化这个loss的形式）：

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

也就是将参数 θ 从均值 μ_θ 转换到噪声 ε_θ 上，由此可以消去norm中的 x_t 部分，此时 L_t 进一步化简为：

$$\frac{1}{2\sigma_t^2}\|\mu_q(x_t, t) - \mu_\theta(x_t, t)\|^2 = \frac{1}{2\sigma_t^2}\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\|\varepsilon_\theta(x_t, t) - \varepsilon_t\|^2$$

norm前面的常数倍数其实是可以忽略的（常数倍数对Loss没有影响），所以最终DDPMs就是训练一个噪声神经网络 $\varepsilon_\theta(x_t, t)$ （输入是当前时刻 t 和一张带有噪声的图片 x_t ）去拟合当前时刻前向过程引入的噪声。

最终的Loss $\mathcal{L}$ 就变成了：

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{t, x_0, \varepsilon}\left[\|\varepsilon_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\varepsilon, t) - \varepsilon\|^2\right]$$

其中 $t \sim U(1, T)$。$t = 1$ 的情况对应于L_0，就是离散解码器的情况，$t > 1$ 的情况就是刚刚推导的 L_{t-1}。正如前面所说的，L_T 与神经网络参数 θ 无关，所以就没有出现。

Training Algorithm

用伪代码来总结一下整个的训练流程：

1. 从数据(Ground Truth)训练集中随机选取一个数据 x_0。
2. 从1到 T 中随机选取一个时间步 t。
3. 从标准正态分布中随机选取一个噪声 ε，计算这个时间步下的 x_t。
4. 把 x_t 和 t 输入神经网络并返回预测的噪声 ε_θ。
5. 计算Loss $\mathcal{L}$并对 θ 进行梯度下降进行优化，直到收敛。

Algorithm 1 Training

```
repeat
  x_0 ~ q(x_0)
  t ~ Uniform({1, ..., T})
  ϵ ~ N(0, I)
  Take gradient descent step on
      ∇_θ ‖ϵ − ϵ_θ(√ᾱ_t x_0 + √(1 − ᾱ_t) ϵ, t)‖²
until converged
```

$$\nabla_\theta \left\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, t)\right\|^2$$

Sampling/Inference Algorithm

假设我们已经获得了训练好的噪声神经网络 $\varepsilon_\theta(x_t, t)$ ，接下来我们来分析采样/推理（sampling/inference）过程。

这里就比较简单了，因为我们可以直接通过先前建模的概率分布 $p_\theta(x_{t-1}|x_t)$ 来进行采样/推理，从随机噪声 $x_T \sim \mathcal{N}(0, I)$ 开始生成一张图像。具体来说：

$$p_\theta(x_{t-1}|x_t) = \mathcal{N}\left(\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_\theta(x_t, t)\right), \frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}I\right)$$
$$\Leftrightarrow\ x_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_\theta(x_t, t)\right) + \frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}z, \quad z \sim \mathcal{N}(0, I)$$

所以在有当前时间步下的 x_t 和网络输出 $\varepsilon_\theta(x_t, t)$ 后，就可以根据上述公式往前递推一步。用伪代码来总结一下整个的采样/推理流程：

1. 从随机噪声中采样 $x_T \sim \mathcal{N}(0, I)$。
2. 从随机噪声中采样 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$。当 $t = 1$ 也就是采样的最后一步生成 $\hat{x}_0$ 时，就不需要添加噪声了（这样生成最终的图像时不会引入额外的噪声）。
3. t 到 $t-1$ 往前更新一步：$x_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_\theta(x_t, t)\right) + \frac{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}z$
4. 循环 T 步，最终返回生成的 $\hat{x}_0$。

Algorithm 2 Sampling

1: $\mathbf{x}_T \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$
2: **for** $t = T, \ldots, 1$ **do**
3: $\quad\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ if $t > 1$, else $\mathbf{z} = \mathbf{0}$
4: $\quad\mathbf{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\right) + \sigma_t\mathbf{z}$
5: **end for**
6: **return** $\mathbf{x}_0$

β_t 的选取

现在我们回过头来看 β_t 应该如何选取：为了尽可能满足最终 $x_T \sim \mathcal{N}(0, I)$，我们希望 $\sqrt{\bar{\alpha}_T} \approx 0$。DDPMs原文中选取了总步长 $T = 1000$，线性的 β_t (linear schedule)，满足 $\beta_1 = 10^{-4}$ 和 $\beta_T = 0.02$ 单调递增，（也就是 $\beta_t = 10^{-4} + (t-1)\frac{0.02-10^{-4}}{T-1}$），对应的 α_t 就满足 $\alpha_1 = 1 - 10^{-4}$ 和 $\alpha_T = 1 - 0.02$ 单调递减（$\alpha_t = 1 - \beta_t$）。简单估算一下 $\bar{\alpha}_t$:

$$\log\bar{\alpha}_t = \sum_{t=1}^{T}\log\alpha_t = \sum_{t=1}^{T}\log(1-\beta_t) < -\sum_{t=1}^{T}\beta_t = -\frac{\beta_1 + \beta_T}{2}T$$

代入 $T = 1000$, $\beta_1 = 10^{-4}$ 和 $\beta_T = 0.02$，因此，$\bar{\alpha}_t \approx e^{-10}$ 可以近似于 0，所以这样的 β_t 是符合标准的。

Code Implementations

emmmm这部分等我什么时候手撕了DDPMs再来更新（恨）

To Be Continued...