

1.Score Matching 與 Denoising Autoencoder、Diffusion

Model 的關係報告

一、Score Matching 的核心概念

在生成模型中，我們希望學得資料分布 ($p(x)$)，但直接估計此密度往往困難。

Score Matching 提出以學習其「score function」來取代：

$$S(x) = \nabla_x \log p(x)$$

這個 score function 描述了資料分布對數密度的梯度方向，可視為「往高機率區域移動的方向」。

◆ 主要想法：

若模型能正確預測 score，則它能指引樣本沿著正確的機率流動，最終生成真實樣本。

二、Score Matching 的數學推導簡述

$$\text{假設： } p(x;\theta) = \frac{1}{z(\theta)} e^{q(x;\theta)}$$

$$\text{取對數並對 } x \text{ 微分： } \nabla_x \log p(x;\theta) = \nabla_x q(x;\theta) = S(x;\theta)$$

目標：讓模型的分數 $S(x;\theta)$ 接近真實分數 $\nabla_x \log p(x)$ 。

(1) Explicit Score Matching (ESM)

$$L_{ESM}(\theta) = E_{x \sim p(x)} \| S(x;\theta) - \nabla_x \log p(x) \|^2 \text{ 但真實分數不可得。}$$

(2) Implicit Score Matching (ISM)

經由分部積分化簡： $L_{ISM}(\theta) = E_{x \sim p(x)} [\|S(x;\theta)\|^2 + 2\nabla_x \cdot S(x;\theta)]$ 不需真實分數，適合未歸一化模型。

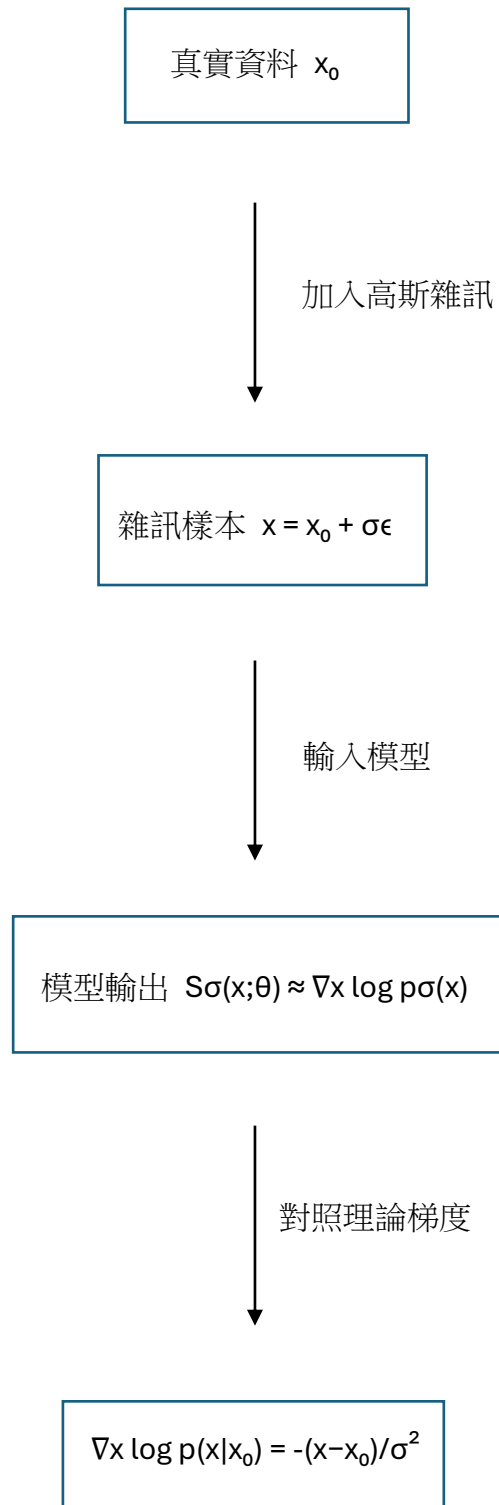
(3) Denoising Score Matching (DSM)

在無法取樣 ($p(x)$) 的情況下，加入高斯雜訊： $x = x_0 + \sigma\epsilon, \epsilon \sim N(0, I)$

$$\text{則： } \nabla_x \log p(x|x_0) = -\frac{1}{\sigma^2}(x - x_0)$$

定義 DSM 損失： $L_{DSM}(\theta) = E_{x_0, x|x_0} \| S_{\sigma}(x; \theta) - \frac{1}{\sigma^2}(x - x_0) \|^2$

三、DSM 與 Denoising Autoencoder (DAE) 的關係圖



Vincent (2010) 證明： Denoising Autoencoder 的訓練目標與 DSM 完全等價。

也就是： $J_{DAE}^{\sigma} \triangleq J_{DSM}^{q\sigma}$

因此，DAE 其實在學習「如何沿著分布梯度去除雜訊」，即學習 score function。

四、Score Matching 與 Diffusion Model 的連結

在 擴散模型（Diffusion Model / Score-based Model）中，會逐步將資料加入雜訊形成序列：

$$x_T \sim N(0, I), x_{t-1} = x_t + f(x_t, t)dt + g(t) dW_t$$

模型學習的即是每個時間步的 score function： $S_{\theta}(x_t, t) \approx \nabla_{x_t} \log p_t(x_t)$

藉由學會這些 score，反向過程（Reverse Diffusion）能從純雜訊重建真實資料。

概念圖：

Forward Diffusion: $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_T$ (加入噪音)

Reverse Process: $x_T \rightarrow x_{\{T-1\}} \rightarrow \dots \rightarrow x_0$ (靠 score 去除噪音)

因此：Diffusion Model = 多層級的 DSM。每個雜訊層都有對應的 score network，整體共同學會資料分布的生成路徑。

五、結論

1. Score Matching 以學習分布的梯度代替直接估計密度，避開了歸一化常數問題。
2. DSM 將這一思想與「加雜訊去雜訊」結合，形成實際可訓練的框架。
3. Vincent (2010) 證明 DAE = DSM，使自編碼器擁有明確的概率學解釋。
4. Diffusion Models 延伸 DSM 思想，多層次地學習 score，以實現高品質生成。

參考文獻

- Hyvärinen, A. (2005). Estimation of non-normalized statistical models using

score matching. JMLR.

- Vincent, P. (2010). A Connection Between Score Matching and Denoising Autoencoders. Neural Computation.
- Ho et al. (2020). Denoising Diffusion Probabilistic Models. NeurIPS.
- Song et al. (2021). Score-Based Generative Modeling through Stochastic Differential Equations.

2.問題

1. 為什麼 score function 比直接學密度函數更容易學習？
2. 在 DSM 中，雜訊程度 σ 如何影響模型的泛化能力？
3. DSM、ISM、ESM 三者在實作時有何差異？何者更穩定？
4. 擴散模型的「反向過程」為何需要準確的 score 函數？
5. 是否能將 DSM 理解為對 score 的一種自監督學習？
6. DAE 與 Diffusion Model 的能量函數有何相似與不同？
7. 是否存在非高斯雜訊版本的 DSM？效果如何？
8. DSM 損失中的常數項 C 是否對訓練完全沒有影響？