Генеративные модели на основе диффузии

Домашнее задание №3

Задача 1

(1 балл) Пусть $X_0 \sim p_{data}$ — объект из распределения данных, а $(X_t, t = 0, \ldots, T)$ — дискретный процесс с сохраняющейся дисперсией

$$X_t = \sqrt{1-\beta_t} X_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\varepsilon_t.$$

Предположим, что $D_t^\theta(x)$ является теоретическим оптимумом в задаче оптимизации

$$\sum_{t=1}^{T} E\|D_t^\theta(X_t) - X_0\|^2 \to \min_\theta,$$

а вероятностная модель обратного по времени процесса задана как (DDPM):

$$p_{t-1|t}^\theta(x_{t-1}|x_t) := p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, D_t^\theta(x_t)).$$

Покажите, что шаг генерации из данной модели

$$X_{t-1}^\theta \sim p_{t-1|t}^\theta(\cdot|X_t^\theta)$$

имеет вид

$$X_{t-1}^\theta = A_t X_t^\theta + B_t \nabla \log p_t(X_t^\theta) + \sqrt{C_t}\,\varepsilon_t,$$

где $\varepsilon_t \sim \mathcal{N}(0, I)$ — независимый от предыдущих величин шум. Найдите A_t, B_t, C_t. Покажите, что если взять $\beta_t = h\gamma_t$, то $A_t = 1 + h\frac{\gamma_t}{2} + \overline{o}(h)$ и $B_t = h\gamma_t + \overline{o}(h)$.

Замечание: если рассмотреть схему генерации из диффузионных моделей с непрерывным временем на основе VP-SDE

$$dY_t = -\frac{\gamma_t}{2} Y_t dt + \sqrt{\gamma_t} dW_t$$

и соответствующую схему Эйлера для обратного VP-SDE:

$$Y_{t-h} = Y_t\left(1 + h\frac{\gamma_t}{2}\right) + h\gamma_t \cdot \nabla \log p_t(Y_t) + \sqrt{h\gamma_t}\varepsilon_t,$$

то получится очень близкая схема.

Решение

Рассмотрим переходную плотность $p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0)$ для модели DDPM:

$$p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0) = \mathcal{N}(x_{t-1}|\mu(x_t, x_0), \Sigma)$$

$$\mu(x_t, x_0) = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}x_t + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{1-\alpha_t}x_0$$

$$\Sigma = \frac{1-\alpha_{t-1}}{1-\alpha_t}\beta_t$$

Проблема в том, что x_0 неизвестно. Однако дано, что $D_t^\theta(x)$ является теоретическим оптимумом в задаче оптимизации $\sum_{t=1}^{T} E\|D_t^\theta(X_t) - X_0\|^2 \to \min_\theta$. Это значит, что $D_t^\theta(x)$ приближает условное математическое ожидание $E[X_0|X_t] \Rightarrow$ можем использовать $D_t^\theta(x)$ вместо x_0:

$$\mu(x_t, x_0 = D_t^\theta(x_t)) = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}x_t + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{1-\alpha_t}D_t^\theta(x_t)$$

Можем выразить score-функцию через $D_t^\theta(x)$. Распишем $p_{t|0}$ для VP:

$$p_{t|0}(x_t|x_0) = \mathcal{N}(x_t|\sqrt{\alpha_t}x_0, (1-\alpha_t)I)$$

$$\log p_{t|0}(x_t|x_0) = const - \frac{1}{2}\frac{||x_t - \sqrt{\alpha_t}x_0||^2}{(1-\alpha_t)}$$

$$\nabla_{x_t} \log p_{t|0}(x_t|x_0) = -\frac{x_t - \sqrt{\alpha_t}x_0}{(1-\alpha_t)} = \frac{\sqrt{\alpha_t}x_0 - x_t}{(1-\alpha_t)}$$

$$\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) = E[\frac{\sqrt{\alpha_t}X_0 - X_t}{(1-\alpha_t)}|X_t = x_t] = \frac{\sqrt{\alpha_t}E[X_0|X_t = x_t] - x_t}{(1-\alpha_t)} =$$

$$\frac{\sqrt{\alpha_t}D_t^\theta(x_t) - x_t}{(1-\alpha_t)}$$

Можем перевыразить $D_t^\theta(x_t)$ через $\nabla_{x_t} \log p_t(x_t)$ и подставить выражение в математическое ожидание backward-VP процесса:

$$D_t^\theta(x_t) = \frac{(1-\alpha_t)\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) + x_t}{\sqrt{\alpha_t}}$$

$$\mu(x_t, x_0 = D_t^\theta(x_t)) = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}x_t + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)}\frac{(1-\alpha_t)\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) + x_t}{\sqrt{\alpha_t}} =$$

$$\frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}x_t + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}}\nabla_{x_t} \log p_t(x_t) + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}}x_t =$$

$$(\frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t} + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}})x_t + (\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}})\nabla_{x_t} \log p_t(x_t)$$

В итоге мы имеем, что переходная плотность имеет форму нормального распределения с посчитанными параметрами $\mu(x_t, x_0)$ и Σ. Тогда сэмпл из данной плотности имеет вид:

$$X_{t-1} = (\frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t} + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}})X_t + (\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}})\nabla \log p_t(X_t) + \sqrt{\frac{1-\alpha_{t-1}}{1-\alpha_t}\beta_t}\,\varepsilon_t$$

$$\boxed{\begin{gathered} A_t = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t} + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}} \\ B_t = \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}} \\ C_t = \frac{1-\alpha_{t-1}}{1-\alpha_t}\beta_t \end{gathered}}$$

Теперь предположим, что $\beta_t = h\gamma_t$. Распишем A_t и B_t:

$$\sqrt{1-\beta_t} \approx 1 - \frac{\beta_t}{2} + \overline{o}(\beta_t) = 1 - \frac{h\gamma_t}{2} + \overline{o}(h)$$

$$\alpha_{t-1} = \alpha_t \frac{1}{(1-\beta_t)} \approx \alpha_t(1 + \beta_t + \overline{o}(\beta_t^2)) \approx \alpha_t(1 + h\gamma_t)$$

$$\frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t} = \frac{(1-\frac{h\gamma_t}{2} + \overline{o}(h))(1-\alpha_t-\alpha_t h\gamma_t)}{1-\alpha_t} = 1 - \frac{h\gamma_t}{2} - \frac{\alpha_t h\gamma_t}{1-\alpha_t} + \overline{o}(h) \text{ при } h \to 0$$

$$\sqrt{\alpha_{t-1}} = \sqrt{\alpha_t \frac{1}{1-\beta_t}} \approx \sqrt{\alpha_t(1+\beta_t)} = \sqrt{\alpha_t}\sqrt{1+\beta_t} \approx \sqrt{\alpha_t}(1+\frac{\beta_t}{2}+\overline{o}(\beta_t)) = \sqrt{\alpha_t}(1+\frac{h\gamma_t}{2}+\overline{o}(h)), h \to 0$$

$$\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}} = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1+\frac{h\gamma_t}{2}+\overline{o}(h))h\gamma_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}} = \frac{h\gamma_t}{1-\alpha_t}$$

$$\boxed{\begin{gathered} A_t = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t} + \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{(1-\alpha_t)\sqrt{\alpha_t}} = 1 - \frac{h\gamma_t}{2} + \frac{h\gamma_t(1-\alpha_t)}{1-\alpha_t} + \overline{o}(h) = 1 + \frac{h\gamma_t}{2} + \overline{o}(h) \\ B_t = \frac{\sqrt{\alpha_t}(1+\frac{h\gamma_t}{2}+\overline{o}(h))h\gamma_t}{\sqrt{\alpha_t}} = h\gamma_t \end{gathered}}$$

Задача 2

Пусть случайная величина X имеет распределение с плотностью $p(x)$. Покажите, что функционал обучения score функции

$$\frac{1}{2}\,E\|s_\theta(X) - \nabla \log p(X)\|^2 \to \min_\theta$$

1. **(0.4 балла)** в одномерном случае с точностью до константы, не зависящей от θ, совпадает с функционалом

   $$E\left(\frac{1}{2}(s_\theta(X))^2 + \frac{\partial}{\partial x}\,s_\theta(X)\right) \to \min_\theta;$$

   в предположении, что

   $$\lim_{x\to+\infty} s_\theta(x)p(x) = \lim_{x\to-\infty} s_\theta(x)p(x) = 0;$$

   Решение

   Перепишем исходный функционал в одномерном случае:

   $$\frac{1}{2}E[(s_\theta(X) - \frac{\partial}{\partial x}\log p(X))^2] \to \min_\theta$$

   $$\frac{1}{2}E[s_\theta(X)^2 - 2s_\theta(X)\frac{\partial}{\partial x}\log p(X) + (\frac{\partial}{\partial x}\log p(X))^2)] =$$

   $$E[\frac{1}{2}s_\theta(X)^2] - E[s_\theta(X)\frac{\frac{\partial}{\partial x}p(X)}{p(X)}] + E[\frac{1}{2}(\frac{\frac{\partial}{\partial x}p(X)}{p(X)})^2]$$

   Первое математическое ожидание уже имеет ожидаемый вид, последнее математическое ожидание не зависит от параметра θ. Следовательно, осталось по определению раскрыть математическое ожидание посередине:

   $$E[s_\theta(X)\frac{\frac{\partial}{\partial x}p(X)}{p(X)}] = \int s_\theta(x)\frac{\frac{\partial}{\partial x}p(x)}{p(x)}p(x)dx = \int s_\theta(x)\frac{\partial}{\partial x}p(x)dx =$$

   $$s_\theta(x)p(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \frac{\partial}{\partial x}s_\theta(x)p(x)dx = s_\theta(x)p(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - E[\frac{\partial}{\partial x}s_\theta(X)]$$

   Пользуясь предположением, что $\lim_{x\to+\infty} s_\theta(x)p(x) = \lim_{x\to-\infty} s_\theta(x)p(x) = 0$, в остатке получаем, что расписанное математическое ожидание имеет вид $-E[\frac{\partial}{\partial x}s_\theta(X)]$. Подставляем полученное выражение в исходное и получаем результат с точностью до константы:

   $$\boxed{E[\frac{1}{2}s_\theta(X)^2] + E[\frac{\partial}{\partial x}s_\theta(X)] = E[\frac{1}{2}s_\theta(X)^2 + \frac{\partial}{\partial x}s_\theta(X)]}$$

2. **(0.4 балла)** в общем случае с точностью до константы, не зависящей от θ, совпадает с функционалом
$$E\left(\frac{1}{2}\|s_\theta(X)\|^2 + \operatorname{div} s_\theta(X)\right) \to \min_\theta$$
в предположении, что
$$\lim_{\|x\|\to+\infty} s_\theta(x)p(x) = 0;$$

Решение

Раскроем норму из исходного выражения:

$$\frac{1}{2}E[||s_\theta(X)||^2 - 2\langle s_\theta(X), \nabla \log p(X)\rangle + ||\nabla \log p(X)||^2] =$$

$$E[\frac{1}{2}||s_\theta||^2] - E[\langle s_\theta(X), \nabla \log p(X)\rangle] + const$$

Распишем математическое ожидание скалярного произведения:

$$E[\langle s_\theta(X), \nabla \log p(X)\rangle] = E[\sum_{i=1}^{d} s_\theta^i(X)\frac{\frac{\partial}{\partial x_i}p(X)}{p(X)}] = \sum_{i=1}^{d} E[s_\theta^i(X)\frac{\frac{\partial}{\partial x_i}p(X)}{p(X)}]$$

Пользуясь результатми из предыдущего пункта для одномерного случая, получаем:

$$\sum_{i=1}^{d} E[s_\theta^i(X)\frac{\frac{\partial}{\partial x_i}p(X)}{p(X)}] = -\sum_{i=1}^{d} E[\frac{\partial}{\partial x_i}s_\theta(X)] = -E[\sum_{i=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_i}s_\theta(X)] = -E[\text{div }s_\theta(X)]$$

Подставляем результат в итоговое выражение и получаем ответ с точностью до константы:
$$\boxed{E[\frac{1}{2}||s_\theta||^2] - E[\text{div }s_\theta(X)] = E[\frac{1}{2}||s_\theta||^2 - \text{div }s_\theta(X)]}$$

3. **(0.2 балла)** выведите из этого, что score-функцию можно обучать с помощью минимизации
$$E\left(\frac{1}{2}\|s_\theta(X)\|^2 + \left\langle \frac{\partial}{\partial x}s_\theta(X)\varepsilon, \varepsilon\right\rangle\right) \to \min_\theta,$$
где ε — независимая с X величина с $E\,\varepsilon = 0$, $\operatorname{Var}\varepsilon = I$.

Замечание: предположение про предел имеет смысл, так как идеальное решение $s_\theta(x) = \nabla \log p(x)$ удовлетворяет $\nabla \log p(x) \cdot p(x) = \nabla p(x)$, что логично предположить нулем на бесконечности, так как там плотность нулевая и не меняется.

Решение

Из предыдущего пункта известно, что при оптимизации можно использовать $\mathrm{div} s_\theta(X)$. Распишем дивергенцию более подробно:

$$\nabla_x s_\theta(X) = \{\frac{\partial}{\partial x_j} s_{\theta,i}(X)\}_{i,j}^d$$

$$\mathrm{div} s_\theta(X) = \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} s_\theta(X) = Tr(\nabla_x s_\theta(X))$$

Пусть ε — независимая с X величина с $E\,\varepsilon = 0, \mathrm{Var}\,\varepsilon = I$. Покажем, что $E[\left\langle \frac{\partial}{\partial x} s_\theta(X)\varepsilon, \varepsilon \right\rangle] = \mathrm{div} s_\theta(X)$:

$$E[\left\langle \frac{\partial}{\partial x} s_\theta(X)\varepsilon, \varepsilon \right\rangle] = E[\sum_i \sum_j \varepsilon_i \nabla_x s_\theta^{i,j}(X)\varepsilon_j] = \sum_i \sum_j \nabla_x s_\theta^{i,j}(X) E[\varepsilon_i \varepsilon_j] =$$

$$\sum_{i=j} \nabla_x s_\theta^{i,j}(X) \underbrace{E[\varepsilon_i \varepsilon_j]}_{=I} + \sum_{i\neq j} \nabla_x s_\theta^{i,j}(X) \underbrace{E[\varepsilon_i \varepsilon_j]}_{0} = \sum_i \nabla_x s_\theta^{i,i}(X) = Tr(\nabla_x s_\theta(X)) = \mathrm{div} s_\theta(X)$$

Тогда можем в функционале, получившемся в предыдущем пункте, заменить дивергению $\mathrm{div} s_\theta(X)$ на полученное выражение:

$$\boxed{E\left(\frac{1}{2}\|s_\theta(X)\|^2 + \left\langle \frac{\partial}{\partial x} s_\theta(X)\varepsilon, \varepsilon \right\rangle\right) \to \min_\theta}$$

Задача 3

1. **(0.8 балла)** Пусть X, Z — независимые величины. Покажите, что

$$\nabla_y \log p_{X+Z}(y) = E\left[\nabla_x \log p_X(X) | X+Z=y\right].$$

Решение

Распишем score-функцию:

$$\nabla_y \log p_{X+Z}(y) = \frac{\nabla_y p_{X+Z}(y)}{p_{X+Z}(y)}$$

Распишем плотность суммы через формулу свертки и найдем все неизвестные компоненты:

$$p_{X+Z}(y) = \int p_X(k) p_Z(y-k) dk$$

$$\nabla_y p_{X+Z}(y) = \int p_X(k) \nabla_y p_Z(y-k) dk$$

$$\nabla_y p_Z(y-k) = \nabla_{y-k} p_Z(y-k) = -\nabla_k p_Z(y-k) \Rightarrow$$

$$-\int p_X(k) \nabla_k p_Z(y-k) dk = -p_X(k) p_Z(y-k) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int \nabla_k p_X(k) p_Z(y-k) dk = \int \nabla_k p_X(k) p_Z(y-k) dk$$

$$\frac{\nabla_y p_{X+Z}(y)}{p_{X+Z}(y)} = \frac{\int \nabla_k p_X(k) p_Z(y-k) dk}{p_{X+Z}(y)} = \frac{\int \nabla_k \log p_X(k) p_Z(y-k) p_X(k) dk}{p_{X+Z}(y)} =$$

$$\boxed{\int \nabla_k \log p_X(k) \frac{p_Z(y-k) p_X(k) dk}{p_{X+Z}(y)} dk = E[\nabla_x \log p_X(X) | X+Z=y]}$$

2. **(0.2 балла)** Предложите на основе первого пункта функционал обучения score функции $\nabla_x \log p_t(x)$ шумного распределения, если известна score функция чистого распределения $\nabla_x \log p_0(x)$, а прямой процесс задан VE-SDE

$$\begin{cases} dX_t = g(t) dW_t; \\ X_0 \sim p_0. \end{cases}$$

Решение

Для VE-процесса в непрерывном времени известно:

$$X_t = X_0 + \int_0^t g^2(s) dWS$$

$$X_0 \sim p_0; \quad Y_t = \int_0^t g^2(s) dWS \sim \mathcal{N}(0, \int_0^t g^2(s) ds)$$

Тогда плотность X_t - свертка для двух случайных величин:

$$p_{X_t}(x) = \int p_{X_0}(x) p_{Y_t}(x - z) dz$$

Пользуясь результатом первого пункта можем выразить score-функцию для X_t:

$$\nabla_x \log p_{X_t}(x) = \nabla_x \log p_{X_0 + Y_t}(x) = E[\nabla_x \log p_{X_0}(X_0) | X_0 + Y_t = y]$$

Тогда функционал для обучения при известной score-функции $\nabla_x \log p_0(x)$ имеет вид:

$$\boxed{E[||s_\theta(X_t) - \nabla_x \log p_{X_0}(X_0)||^2] \to \min_\theta}$$