Генеративные модели на основе диффузии

Домашнее задание №1

Задача 1

Пусть $X_0 \sim p_{\text{data}}$ — объект из распределения данных, $t = 0, 1, \dots, T$ – последовательность моментов времени, а $(X_t, t = 0, \dots, T)$ — одномерный процесс зашумления (с сохраняющейся или взрывающейся дисперсией). Найдите условное распределение перехода от момента времени t к моменту времени $t-1$ при известном начальном объекте $X_0 = x_0$. Покажите, что данное распределение имеет вид

$$p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0) := p_{X_{t-1}|X_t,X_0}(x_{t-1}|x_t, x_0) = \mathcal{N}\left(x_{t-1} \mid A_t x_t + B_t x_0,\, C_t^2\right).$$

В частности,

1. Если $X_t = X_{t-1} + g(t)\varepsilon_t$ — процесс с взрывающейся дисперсией, то

$$A_t = \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2}; \quad B_t = 1 - \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2}; \quad C_t^2 = \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2} g^2(t),$$

   где $\sigma_t^2 = \sum_{s=1}^t g^2(s)$;

2. Если $X_t = \sqrt{1-\beta_t}\, X_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\,\varepsilon_t$ — процесс с сохраняющейся дисперсией, то

$$A_t = \frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}; \quad B_t = \frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{1-\alpha_t}; \quad C_t^2 = \frac{1-\alpha_{t-1}}{1-\alpha_t}\beta_t,$$

   где $\alpha_t = \prod_{s=1}^t (1-\beta_s)$.

Решение

1. Распишем плотность $p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0)$ по формуле Байеса:

$$p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0) \propto p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) \times p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0)$$

Можем рассмотреть только числитель в формуле Байеса, т.к. знаменатель не зависит от x_{t-1} и должна выполняться нормировка. Также с точностью до константы можем расписать и произведение в числителе формулы Байсе и рассматривать только экспоненты из нормального распределения:

$$p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) = \mathcal{N}(x_t|x_{t-1}, g^2(t)I)$$

$$p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0) = \mathcal{N}(x_{t-1}|x_0, \sigma_{t-1}^2 I)$$

$$p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) \times p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0) \propto \exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_t - x_{t-1}||^2}{g^2(t)}\} \times \exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_{t-1} - x_0||^2}{\sigma_{t-1}^2}\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\frac{x_t^2 - 2x_t x_{t-1} + x_{t-1}^2}{g^2(t)} - \frac{1}{2}\frac{x_{t-1}^2 - 2x_{t-1}x_0 + x_0^2}{\sigma_{t-1}^2}\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}([\frac{x_{t-1}^2}{g^2(t)} + \frac{x_{t-1}^2}{\sigma_{t-1}^2}] + [\frac{2x_t x_{t-1}}{g^2(t)} + \frac{2x_{t-1}x_0}{\sigma_{t-1}^2}])\} \times \underbrace{\exp\{C\}}_{\text{н.з. от } x_{t-1}} \propto$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}(x_{t-1}^2[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}] - 2x_{t-1}[\frac{x_t}{g^2(t)} + \frac{x_0}{\sigma_{t-1}^2}])\}$$

Можем заметить, что выражение под экспонентой похоже на квадрат разности, поэтому вынесем множитель $\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}$ и выделим полный квадрат:

$$\exp\{-\frac{1}{2}[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}](x_{t-1}^2 - 2x_{t-1}[\frac{x_t}{g^2(t)} + \frac{x_0}{\sigma_{t-1}^2}]/[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}] \underbrace{\pm([\frac{x_t}{g^2(t)} + \frac{x_0}{\sigma_{t-1}^2}]/[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}])^2}_{\text{н.з. от } x_{t-1}})\} \propto$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\underbrace{[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}]}_{\Sigma^{-1}} ||x_{t-1} - \underbrace{[\frac{x_t}{g^2(t)} + \frac{x_0}{\sigma_{t-1}^2}]/[\frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2}]}_{\mu} ||^2\}$$

Получили квадратичное по x_{t-1} выражение под экспонентой $\Rightarrow p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0)$ имеет вид нормального распределения с параметрами мат. ожидания μ и дисперсией Σ

$$\mu = [\frac{x_t}{g^2(t)} + \frac{x_0}{\sigma_{t-1}^2}]/\frac{\sigma_t^2}{g^2(t)\sigma_{t-1}^2} =$$

$$\frac{x_t g^2(t)\sigma_{t-1}^2}{g^2(t)\sigma_t^2} + \frac{x_0 g^2(t)\sigma_{t-1}^2}{\sigma_{t-1}^2\sigma_t^2} = x_t\frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2} + x_0\frac{\sigma_t^2 - \sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2} =$$

$$x_t \underbrace{\frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2}}_{A_t} + x_0 \underbrace{(1 - \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2})}_{B_t}$$

$$\Sigma^{-1} = \frac{1}{g^2(t)} + \frac{1}{\sigma_{t-1}^2} = \frac{\sigma_t^2}{g^2(t)\sigma_{t-1}^2} \Rightarrow$$

$$\Sigma = \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2} g^2(t) = C_t^2$$

Получилось, что $p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0) = \mathcal{N}\left(x_{t-1} \mid \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2}x_t + (1 - \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2})x_0,\ \frac{\sigma_{t-1}^2}{\sigma_t^2}g^2(t)\right)$

2. Аналогично воспользуемся формулой Байеса:

$$p_{t-1|t,0}(x_{t-1}|x_t, x_0) \propto p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) \times p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0)$$

Однако теперь мы рассматриваем VP процесс $\Rightarrow$ плотности $p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1})$ и $p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0)$ имеют другой вид:

$$p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) = \mathcal{N}(x_t|\sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t I)$$

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

Подставим данные плотности в числитель формулы Байеса:

$$p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1}) \times p_{t-1|0}(x_{t-1}|x_0) \propto \exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_t - \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}||^2}{\beta_t}\} \times \exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_{t-1} - \sqrt{\alpha_{t-1}}x_0||^2}{1-\alpha_{t-1}}\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}(\frac{x_t^2 - 2\sqrt{1-\beta_t}x_t x_{t-1} + (1-\beta_t)x_{t-1}^2}{\beta_t} + \frac{x_{t-1}^2 - 2\sqrt{\alpha_{t-1}}x_0 x_{t-1} + \alpha_{t-1}x_0^2}{1-\alpha_{t-1}})\}$$

Избавляемся от слагаемых, которые не зависят от x_{t-1} и получаем пропорциональное выражение

$$\exp\{-\frac{1}{2}(x_{t-1}^2(\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}) - 2x_{t-1}(x_t\frac{\sqrt{1-\beta_t}}{\beta_t} + x_0\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}}{1-\alpha_{t-1}}))\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}[\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}](x_{t-1}^2 - 2x_{t-1}[x_t\frac{\sqrt{1-\beta_t}}{\beta_t} + x_0\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}}{1-\alpha_{t-1}}]/[\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}]$$

$$\underbrace{\pm([x_t\frac{\sqrt{1-\beta_t}}{\beta_t} + x_0\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}}{1-\alpha_{t-1}}]/[\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}])^2)}_{\text{н.з. от } x_{t-1}}\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\underbrace{[\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}]}_{\Sigma^{-1}}||x_{t-1} - \underbrace{[x_t\frac{\sqrt{1-\beta_t}}{\beta_t} + x_0\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}}{1-\alpha_{t-1}}]/[\frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}}]}_{\mu}||^2\}$$

Пересчитаем параметры получившегося распределения

$$\Sigma^{-1} = \frac{1-\beta_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\alpha_{t-1}} = \frac{(1-\beta_t)(1-\alpha_{t-1}) + \beta_t}{\beta_t(1-\alpha_{t-1})} = \frac{1-\beta_t-\alpha_t+\beta_t}{\beta_t(1-\alpha_{t-1})}$$

$$\Rightarrow \Sigma = \beta_t\frac{1-\alpha_{t-1}}{1-\alpha_t} = C_t^2$$

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

$$x_t\underbrace{\frac{\sqrt{1-\beta_t}(1-\alpha_{t-1})}{1-\alpha_t}}_{A_t} + x_0\underbrace{\frac{\sqrt{\alpha_{t-1}}\beta_t}{1-\alpha_t}}_{B_t}$$

Задача 2

Пусть $X_0 \sim p_{\text{data}}$ — объект из распределения данных, $t = 0, 1, \dots, T$ – последовательность моментов времени, а $(X_t, t = 0, \dots, T)$ – процесс с взрывающейся дисперсией

$$X_t = X_{t-1} + g(t)\varepsilon_t.$$

Обозначим за $p_t(x_t) := p_{Xt}(x_t)$ распределение процесса в момент времени t. Пользуясь в выводе равенством $p_{t-1}(x) = p_t(x)$, покажите, что

$$p_{t-1|t}(x_{t-1}|x_t) \propto \mathcal{N}(x_{t-1} \mid x_t + g^2(t)\nabla_{x_t} \log p_t(x_t),\ g^2(t)I) \cdot \exp(\tilde{o}(x_t - x_{t-1})),$$

где $\propto$ обозначает равенство с точностью до мультипликативной константы, то есть $f(x_{t-1}) \propto g(x_{t-1})$, если $f(x_{t-1}) = cg(x_{t-1})$ для некоторой положительной константы c, не зависящей от x_{t-1}.

Решение

Распишем плотность $p_{t-1|t}(x_{t-1}|x_t)$ по формуле Байеса и с точностью до константы выпишем числитель:

$$p_{t-1|t}(x_{t-1}|x_t) \propto p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1})p_{t-1}(x_{t-1})$$

Для VE процесса известно, что плотность $p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1})$ имеет вид $\mathcal{N}(x_t|x_{t-1}, g^2(t)I)$. Также пользуясь предположением, что $p_{t-1}(x) \approx p_t(x)$, заменим $p_{t-1}(x_{t-1})$ на $p_t(x_{t-1})$ и представим получившуюся плотность как $\exp\{\log p_t(x_{t-1})\}$, чтобы "прокинуть" ее в экспоненту из нормального распределения:

$$p_{t|t-1}(x_t|x_{t-1})p_{t-1}(x_{t-1}) \propto \exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_t - x_{t-1}||^2}{g^2(t)}\} \exp\{\log p_t(x_{t-1})\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_t - x_{t-1}||^2}{g^2(t)} + \log p_t(x_{t-1})\}$$

Воспользуемся разложением $\log p_t$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_t:

$$\log p_t(x_{t-1}) \approx \log p_t(x_t) + \nabla_{x_t} \log p_t(x_t)^T(x_t - x_{t-1}) + \tilde{o}(||x_t - x_{t-1}||^2)$$

Подставим получившееся разложение в экспоненту и перепишем ее с точностью до константы (отбросим $\log p_t(x_t)$), а также вынесем $\tilde{o}$ в отдельную экспоненту:

$$\exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_t - x_{t-1}||^2}{g^2(t)} + \frac{2g^2(t)\nabla_{x_t} \log p_t(x_t)^T(x_t - x_{t-1})}{2g^2(t)}\} \exp\{\tilde{o}(||x_t - x_{t-1}||^2)\} =$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_{t-1}-x_t||^2-2g^2(t)\nabla_{x_t}\log p_t(x_t)^T(x_{t-1}-x_t)\pm g^4(t)||\log p_t(x_t)||^2}{g^2(t)}\}\exp\{\tilde{o}(||x_t - x_{t-1}||^2)\}\propto$$

$$\exp\{-\frac{1}{2}\frac{||x_{t-1}-x_t-g^2(t)\nabla_{x_t}\log p_t(x_t))||^2}{g^2(t)}\}\exp\{\tilde{o}(||x_t-x_{t-1}||^2)\}$$

В итоге из первой экспоненты получилось нормальное распределение $\mathcal{N}(x_{t-1}|x_t+g^2(t)\nabla_{x_t}\log p_t(x_t), g^2(t)I)$ и в итоге получилось выражение:

$$\mathcal{N}(x_{t-1}|x_t+g^2(t)\nabla_{x_t}\log p_t(x_t), g^2(t)I)\exp\{\tilde{o}(||x_t-x_{t-1}||^2)\}$$