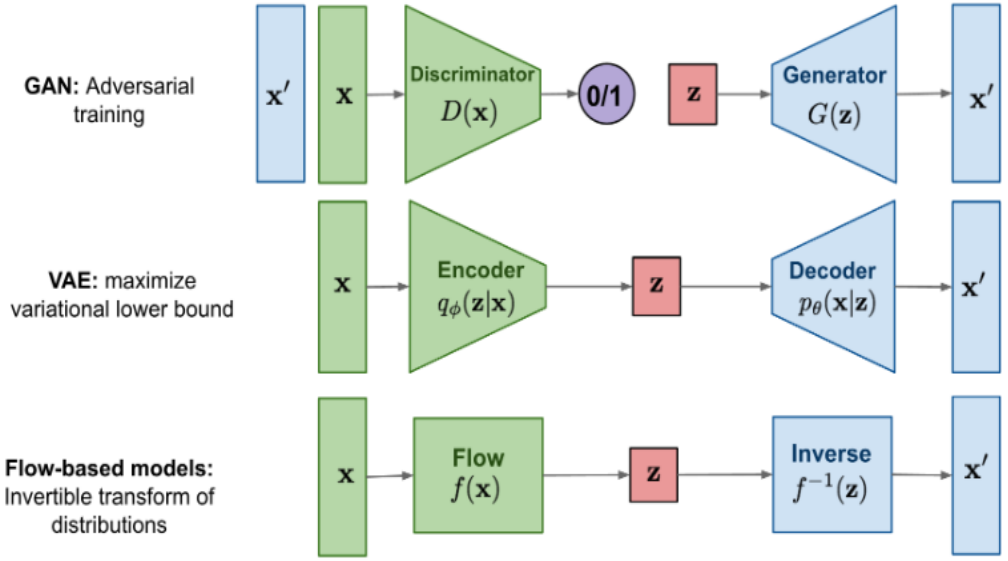
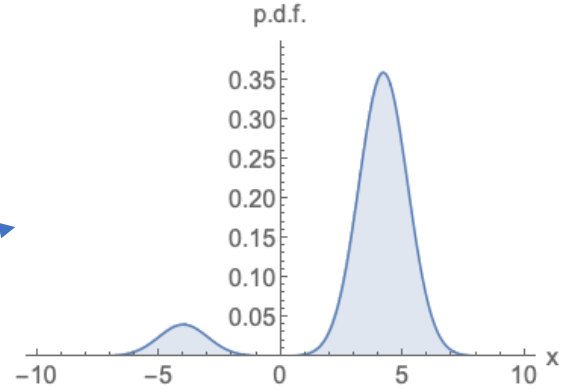
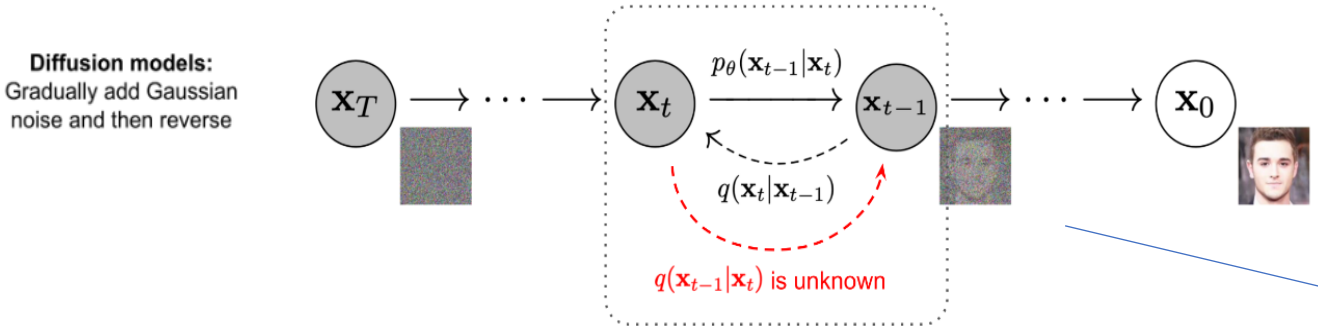
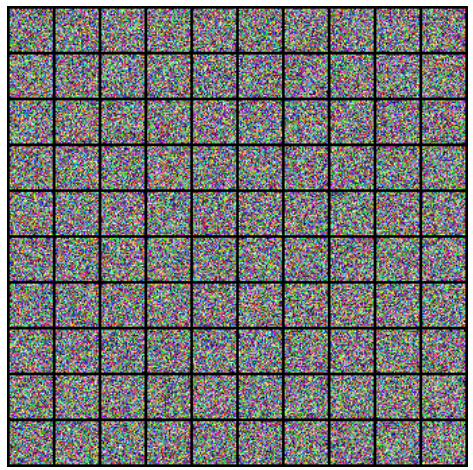
What are Diffusion Models?

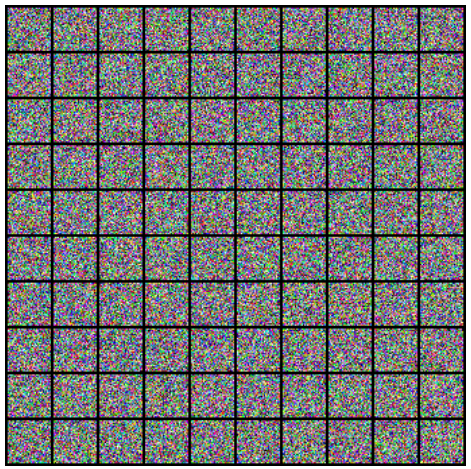




这俩不太主流
但是VAE被latent diffusion model用过







Forward Process 加噪过程

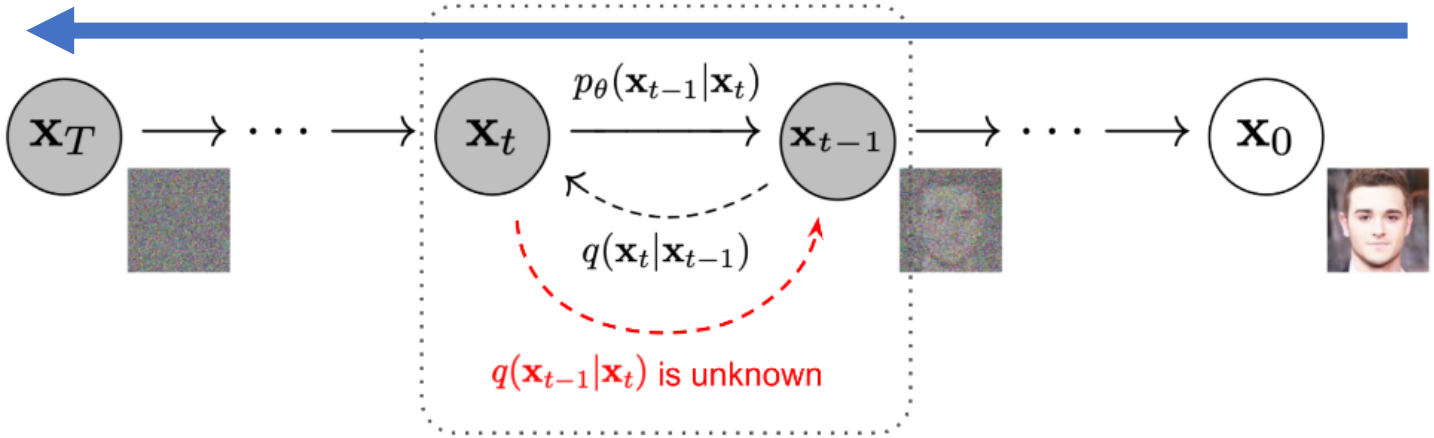
通过应用一个扩散过程，将噪声样本逐渐传播到整个数据空间。这个过程可以使用一系列的扩散步骤来实现，每个步骤都会对噪声样本进行一定程度的扩散。

在扩散过程中，噪声样本会逐渐与真实数据混合，形成一个经过加噪处理的样本。

核心在于

1.怎么描述这个过程

2.怎么快速的获取加过T次噪声之后的结果



1. 扩散过程建模 - Denoising Diffusion Probabilistic Models

我们将这个过程表征为一个在当前图像像素上正态分布（大数定律）偏离的过程

$$q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \sqrt{1-\beta_t}\mathbf{x}_{t-1}, \beta_t\mathbf{I}) \quad q(\mathbf{x}_{1:T}|\mathbf{x}_0) = \prod_{t=1}^{T} q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1})$$

因为这样的一个条件概率的形式，连乘之后就可以表征从初始状态X0到任意状态XT的结果

基于条件概率的一个条件概率描述，表征在当前图像中加正态分布噪声的过程。

$\beta_1 < \beta_2 < \cdots < \beta_T$ 这个表征了打乱的程度，从0到T打乱程度逐渐变大，预设的

这个过程也可以通过动力学方法进行表征（我觉得更好理解，Langevin dynamics）

Generative Modeling by Estimating Gradients of the Data Distribution

这个地方的德尔塔就是上边的β

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} + \frac{\delta}{2}\nabla_{\mathbf{x}} \log p(\mathbf{x}_{t-1}) + \sqrt{\delta}\boldsymbol{\epsilon}_t, \quad \text{where } \boldsymbol{\epsilon}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$$

表征当前时刻图像变化的方向

这边用了一个类似于重参数的方法把正态分布写在外边了

2. T时刻结果的快速获取

我们刚刚说的那个重参数方法，具体可以当动力学理解

这边推理用的全都是一维标准正态分布

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}_t &= \sqrt{\alpha_t}\mathbf{x}_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_t}\boldsymbol{\epsilon}_{t-1} && ;\text{where } \boldsymbol{\epsilon}_{t-1}, \boldsymbol{\epsilon}_{t-2}, \cdots \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}) \\
&= \sqrt{\alpha_t\alpha_{t-1}}\mathbf{x}_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}}\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{t-2} && ;\text{where } \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{t-2} \text{ merges two Gaussians (*).} \\
&= \dots \\
&= \sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon} \\
q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_0) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0, (1-\bar{\alpha}_t)\mathbf{I})
\end{aligned}
$$

这边是用了一个简单的数学归纳法，感兴趣可以推一下，是match的，之前推过

这边这一步两个point

1. 把表达式一的Xt-1换成Xt-1的扩展表达式，很自然的就有前边一项
2. 后边这个是相当于两个正态分布相加，相当于方差的部分相加，然后 $\sqrt{(1-\alpha_t)+\alpha_t(1-\alpha_{t-1})} = \sqrt{1-\alpha_t\alpha_{t-1}}$.

Reverse diffusion process 去噪过程

扩散过程是将加噪样本逐渐还原为噪声样本的过程，即将噪声样本从数据中移除。

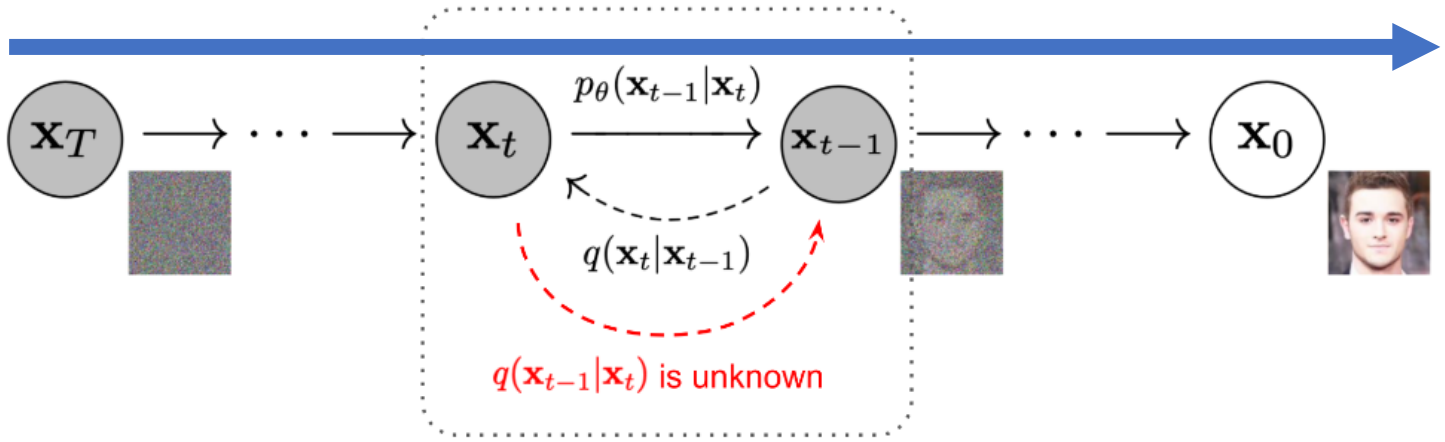
通过反复进行扩散和逆扩散过程，最终得到一个接近真实数据分布的样本。这个样本可以用于生成新的数据。

核心在于

1.怎么描述这个过程

2.怎么简化这个流程-逼近逆过程的均值方差

2.为什么要在引入深度学习以及怎么引入



1. 去噪过程建模

和刚刚说到的加噪过程一样，正态分布的反分布也是正态分布，因为基于t时刻重建t-1时刻的过程也可以用正态分布描述

$$
p_\theta(\mathbf{x}_{0:T}) = p(\mathbf{x}_T)\prod_{t=1}^{T} p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) \qquad p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t), \boldsymbol{\Sigma}_\theta(\mathbf{x}_t, t))
$$

和前边一样的条件概率连城的方式进行重建

这个地方是两个完全位未知的量，我们可以通过后边的方法去逼近这两个量，一个均值一个方差

2. 上述过程的数学描述：找到重建过程的化简形态

利用贝叶斯公式把这个表征打开 $P(B|A)=\frac{P(A|B)*P(B)}{P(A)}$ 使用贝叶斯方法可以将一个位未知的反向传播过程表征成为全正相传播

上一页的公式化

$$q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_0)=q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_{t-1},\mathbf{x}_0)\frac{q(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_0)}{q(\mathbf{x}_t|\mathbf{x}_0)}$$

值得注意的是这个地方的所有X0都是大条件，虽然出现了，但是就放没有出现

$$\propto \exp\Big(-\frac{1}{2}\big(\frac{(\mathbf{x}_t-\sqrt{\alpha_t}\mathbf{x}_{t-1})^2}{\beta_t}+\frac{(\mathbf{x}_{t-1}-\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\mathbf{x}_0)^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}-\frac{(\mathbf{x}_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0)^2}{1-\bar{\alpha}_t}\big)\Big)$$

正向传播全是正态分布，打开之后化简，这个正比带来了后边函数的那个常值

$$=\exp\Big(-\frac{1}{2}\big(\frac{\mathbf{x}_t^2-2\sqrt{\alpha_t}\mathbf{x}_t\mathbf{x}_{t-1}+\alpha_t\mathbf{x}_{t-1}^2}{\beta_t}+\frac{\mathbf{x}_{t-1}^2-2\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\mathbf{x}_0\mathbf{x}_{t-1}+\bar{\alpha}_{t-1}\mathbf{x}_0^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}-\frac{(\mathbf{x}_t-\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0)^2}{1-\bar{\alpha}_t}\big)\Big)$$

$$=\exp\Big(-\frac{1}{2}\big((\frac{\alpha_t}{\beta_t}+\frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}})\mathbf{x}_{t-1}^2-(\frac{2\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\mathbf{x}_t+\frac{2\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\mathbf{x}_0)\mathbf{x}_{t-1}+C(\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_0)\big)\Big)$$

化简完之后重新写成正态分布的形式

其他的和X过程无关的其他过程的汇总

上边的这个过程拆分，写成标准的正态分布表达式
然后就能提取出他变化量的均值和方差，方差是β，均值是μ

$$\tilde{\beta}_t=1/(\frac{\alpha_t}{\beta_t}+\frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}})=1/(\frac{\alpha_t-\bar{\alpha}_t+\beta_t}{\beta_t(1-\bar{\alpha}_{t-1})})=\frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t}\cdot\beta_t$$

DDPM后边走了捷径把这个β省略了（Loss归一了），所以核心在μ上

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_0)=(\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\mathbf{x}_t+\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\mathbf{x}_0)/(\frac{\alpha_t}{\beta_t}+\frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}})$$

$$=(\frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\mathbf{x}_t+\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\mathbf{x}_0)\frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t}\cdot\beta_t$$

$$=\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_t+\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{x}_0=\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(\mathbf{x}_t-\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_t)$$

这两个方程待在一起可以把μ里边的X0替换掉，得到的就是下边的结果

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t=\frac{\sqrt{\alpha_t}(1-\bar{\alpha}_{t-1})}{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_t+\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}\frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(\mathbf{x}_t-\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_t)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\Big(\mathbf{x}_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_t\Big)$$

因而只需要用一个模型学习这个即可

如果这个东西是已知的，那么走这个过程就可以完成图像重建

3. 已经知道了均值的表达形式，怎么学习到我们需要的参数-都是针对每一个小的time step进行的

神经网络 这个地方的Xt就是当前状态下的参数输入

$$\boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\right)$$

$$\text{Thus } \mathbf{x}_{t-1} = \mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}; \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t, t)\right), \boldsymbol{\Sigma}_\theta(\mathbf{x}_t, t))$$

左边的那个参数去重参数化之后的表达方式

Xt时刻的均值和方差，带回逆传播过程之后的结果

基于正态分布方差得归一化 这个部分是实际的噪声值

$$L_t = \mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{1}{2\|\boldsymbol{\Sigma}_\theta(\mathbf{x}_t,t)\|_2^2}\|\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t(\mathbf{x}_t,\mathbf{x}_0) - \boldsymbol{\mu}_\theta(\mathbf{x}_t,t)\|^2\right]$$

上边给的带模型预测的结果，这一部分是包含神经网络的

$$= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{1}{2\|\boldsymbol{\Sigma}_\theta\|_2^2}\|\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_t\right) - \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\mathbf{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t,t)\right)\|^2\right]$$

实际值　　预测值

$$= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{(1-\alpha_t)^2}{2\alpha_t(1-\bar{\alpha}_t)\|\boldsymbol{\Sigma}_\theta\|_2^2}\|\boldsymbol{\epsilon}_t - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t,t)\|^2\right]$$

打开之后化简得结果，但是由于我们数据是从X0开始得，需要把他从X0写过去，用到了最开始得函数

$$= \mathbb{E}_{\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}}\left[\frac{(1-\alpha_t)^2}{2\alpha_t(1-\bar{\alpha}_t)\|\boldsymbol{\Sigma}_\theta\|_2^2}\|\boldsymbol{\epsilon}_t - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_t, t)\|^2\right]$$

打开之后化简得结果，这个函数全部都是已知量

这个值是一个常数值，优化得时候可以把它去掉

最后优化这个目标：

$$L_t^{\text{simple}} = \mathbb{E}_{t\sim[1,T],\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}_t}\left[\|\boldsymbol{\epsilon}_t - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\mathbf{x}_t,t)\|^2\right]$$

$$= \mathbb{E}_{t\sim[1,T],\mathbf{x}_0,\boldsymbol{\epsilon}_t}\left[\|\boldsymbol{\epsilon}_t - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_t, t)\|^2\right]$$

Algorithm 1 Training

1: **repeat**
2: $\mathbf{x}_0 \sim q(\mathbf{x}_0)$
3: $t \sim \text{Uniform}(\{1,\dots,T\})$
4: $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\mathbf{I})$
5: Take gradient descent step on
$\nabla_\theta \left\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, t)\right\|^2$
6: **until** converged

Algorithm 2 Sampling

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

Table 1: CIFAR10 results. NLL measured in bits/dim.

Model	IS	FID	NLL Test (Train)
Conditional			
EBM [11]	8.30	37.9	
JEM [17]	8.76	38.4	
BigGAN [3]	9.22	14.73	
StyleGAN2 + ADA (v1) [29]	**10.06**	**2.67**	
Unconditional			
Diffusion (original) [53]			≤ 5.40
Gated PixelCNN [59]	4.60	65.93	3.03 (2.90)
Sparse Transformer [7]			**2.80**
PixelIQN [43]	5.29	49.46	
EBM [11]	6.78	38.2	
NCSNv2 [56]		31.75	
NCSN [55]	8.87 ± 0.12	25.32	
SNGAN [39]	8.22 ± 0.05	21.7	
SNGAN-DDLS [4]	9.09 ± 0.10	15.42	
StyleGAN2 + ADA (v1) [29]	$\mathbf{9.74} \pm 0.05$	3.26	
Ours (L, fixed isotropic $\mathbf{\Sigma}$)	7.67 ± 0.13	13.51	≤ 3.70 (3.69)
Ours (L_{simple})	9.46 ± 0.11	**3.17**	≤ 3.75 (3.72)

Table 2: Unconditional CIFAR10 reverse process parameterization and training objective ablation. Blank entries were unstable to train and generated poor samples with out-of-range scores.

Objective	IS	FID
$\tilde{\mu}$ prediction (baseline)		
L, learned diagonal $\mathbf{\Sigma}$	7.28 ± 0.10	23.69
L, fixed isotropic $\mathbf{\Sigma}$	8.06 ± 0.09	13.22
$\|\tilde{\mu} - \tilde{\mu}_\theta\|^2$	–	–
ϵ prediction (ours)		
L, learned diagonal $\mathbf{\Sigma}$	–	–
L, fixed isotropic $\mathbf{\Sigma}$	7.67 ± 0.13	13.51
$\|\tilde{\epsilon} - \epsilon_\theta\|^2$ (L_{simple})	$\mathbf{9.46 \pm 0.11}$	**3.17**

Figure 6: Unconditional CIFAR10 progressive generation ($\hat{\mathbf{x}}_0$ over time, from left to right). Extended samples and sample quality metrics over time in the appendix (Figs. 10 and 14).

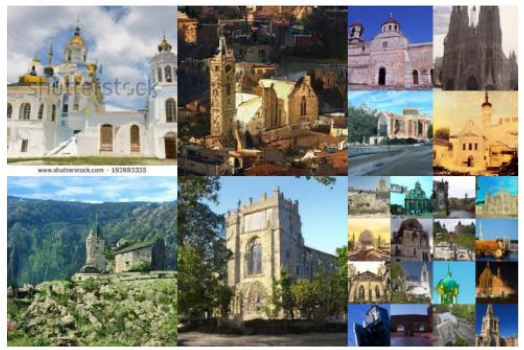
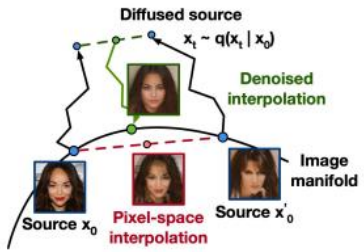


Figure 3: LSUN Church samples. FID=7.89

Figure 4: LSUN Bedroom samples. FID=4.90



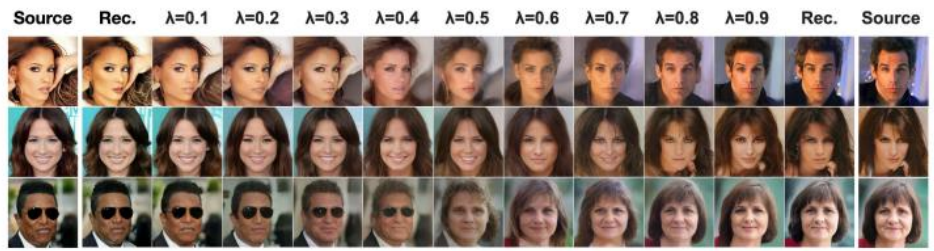
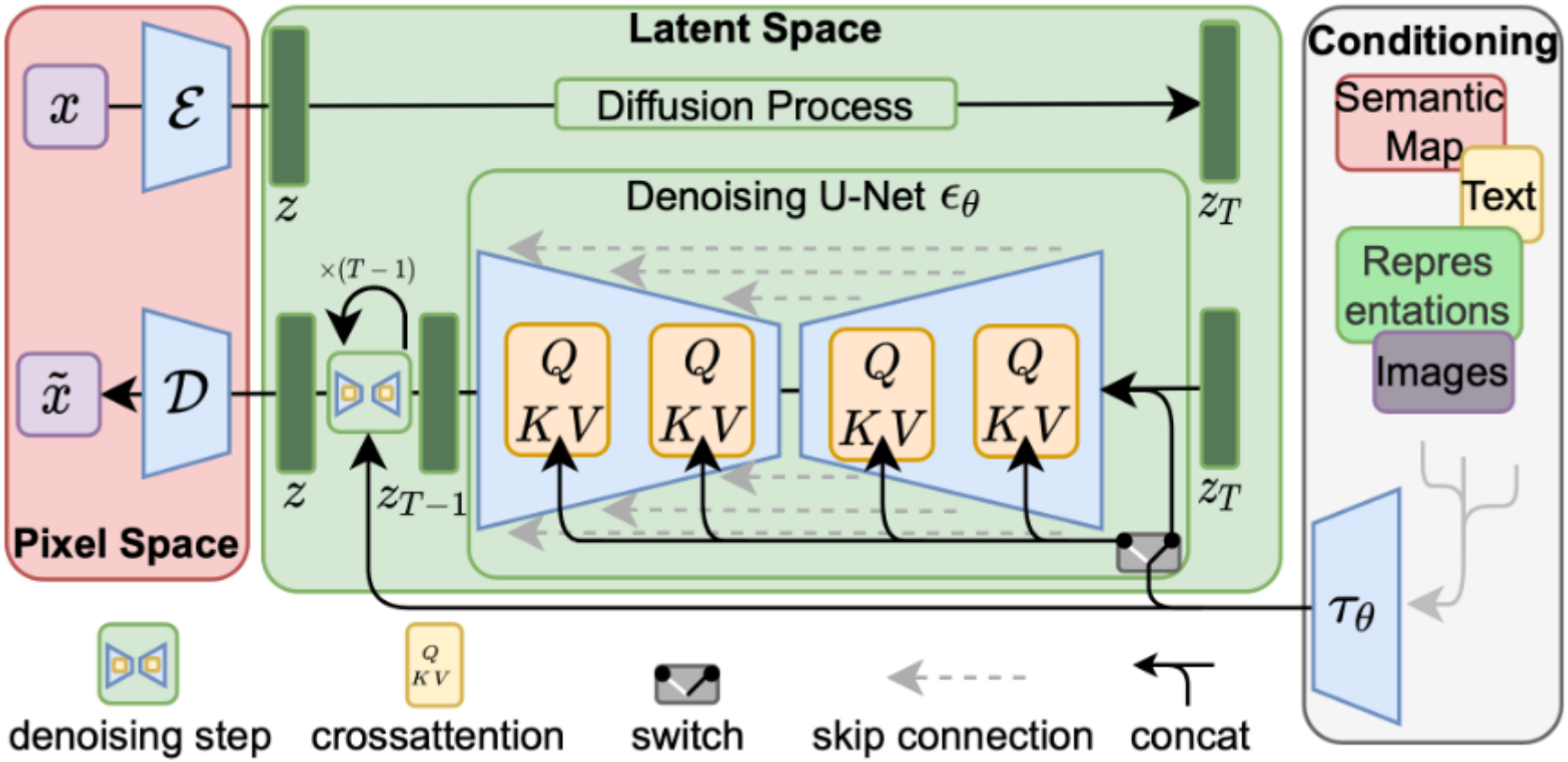


Figure 8: Interpolations of CelebA-HQ 256x256 images with 500 timesteps of diffusion.

LDM


Latent Space
Diffusion Process
Denoising U-Net ϵ_θ
$\times(T-1)$
x
$\mathcal{E}$
z
z_T
$\tilde{x}$
$\mathcal{D}$
z_{T-1}
Pixel Space
Q
K V
Conditioning
Semantic Map
Text
Repres entations
Images
τ_θ
denoising step
crossattention
switch
skip connection
concat