

高階サンプラーによる拡散確率モデルの画像生成品質向上

韓宇[†] 中村和幸[†]
Yu Han Kazuyuki Nakamura

1. はじめに

拡散確率モデル (Diffusion Probability Models; DPMs) は現在、非常に強力な生成モデルとされ、特に高品質で多様なサンプルを生成する能力があるため、画像・音楽・ビデオ・分子・音声など様々な分野で広く応用されている。DPMs は生成過程で一般的に 2 つのステップを行う。まず、予測段階として離散化された確率微分方程式(Stochastic Differential Equation; SDE) を使用してサンプリングする。次に修正段階として、周辺分布の勾配情報を利用して予測段階で得られた結果を修正する。修正段階では、主に Langevin Sampler が使用される。

本報告では、DPMs の修正段階として BAOAB-Limit Sampler を使用することを提案する。具体的には、Langevin Sampler により高階誤差項を持つサンプラーを導入する。提案手法は、CIFAR10 データに対して、定量的・定性的に既存手法を凌駕したことを報告する。

2. 拡散確率モデル

ここでは、連続時間の状況での DPMs [1] について簡潔に説明する。DPMs は、拡散過程と生成過程で構成されている。拡散過程について、 $t \in [0, T]$ で $\{x_t\}_{t=0}^T$ を考える。 x_t は Itô SDE

$$dx = f(t)xdt + g(t)dw \quad (1)$$

に従う。 w は標準 Wiener 過程であり、 $f(t): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ はドリフト係数、 $g(t): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ は拡散係数である。式(1)は拡散過程を構築する。DPMs は拡散過程を利用して徐々に現実のデータ x_0 にノイズを加えて、複雑な現実のデータ分布からガウス分布へと変化させる。ここで、拡散過程の時間点 t における周辺分布として、 x_t が従う $q_t(x)$ を定義する。

式(1)に対して、一意に対応する逆 SDE が存在し、両者は同じ周辺確率分布を保持している。この逆 SDE は以下の式によって記述することができる：

$$dx = [f(t)x - g(t)^2 \nabla_x \log q_t(x)]dt + g(t)d\tilde{w} \quad (2)$$

$\tilde{w}$ は逆標準ウィーナー過程である。式 (2) は、ガウス分布に従う x_T が、元のデータ x_0 までステップ毎に復元される過程を記述しており、この過程は生成過程または逆拡散過程と呼ばれる。しかし、一般的に、 $q_t(x)$ は得ることが困難であるため、Score を用いた Score Matching [2] が必要である。ここでは、以下の損失関数を使用して、 $\nabla_x \log q_t(x)$ を近似する $s_\theta(x_t, t)$ を得ることができる：

$$\mathbb{E}_t \mathbb{E}_{q_0(x_0)} \mathbb{E}_{q(x_t|x_0)} \|s_\theta(x_t, t) - \nabla_x \log q(x_t | x_0)\|_2^2 \quad (3)$$

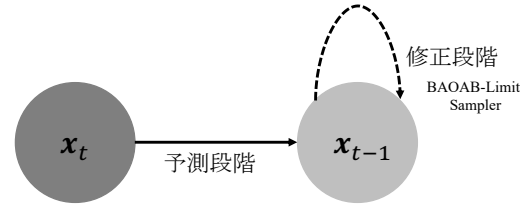


Figure 1. DPMs の生成過程

ここで、 $q(x_t | x_0)$ は式 (1) によって定義される遷移確率分布であり、一般に $q(x_t | x_0)$ は条件付き正規分布である。実際のモデリングにおいては、まず拡散過程を定義し、次に損失関数 (3) を用いてモデルを訓練し、 $s_\theta(x_t, t)$ を得る。最後に、 $s_\theta(x_t, t)$ を使用して逆拡散過程を実行し、ガウス変数からサンプルを取得する。

同時に、 $s_\theta(x_t, t)$ が周辺確率分布の勾配情報を持っているため、生成過程にマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) を導入することが可能である。そのため、まず予測段階として SDE を利用し、Euler-Maruyama 法などの手法で x_t から x_{t-1} への変換を行う。次に、MCMC を適用して x_{t-1} の調整を行い、最終的に修正された値 x_{t-1}^* を取得する。この予測段階と修正段階のサイクルを繰り返すことにより、最終的に生成されたデータ x_0^* となる。

3. 提案手法

DPMs の修正段階では、Langevin Sampler [3] が主に使われている。サンプリングのステップサイズが δ の場合、Langevin Sampler のサンプリング誤差は $O(\delta)$ である。このサンプリング誤差は拡散確率モデルの生成品質における大きな制約となっている。スコアベースの DPMs の生成品質をさらに向上させるために、修正段階でサンプリング誤差が $O(\delta^2)$ のサンプラー、BAOAB-Limit Sampler [4] [5] を使用することが考えられる。以下に BAOAB-Limit Sampler の簡単な紹介を行う。

まず、次の方程式によってランジュバン動力学システムを示す：

$$dx = M^{-1}vdt, dv = [-\nabla U(x) - \gamma v]dt + \sigma M^{\frac{1}{2}}dw \quad (4)$$

ここで、 γ は摩擦係数である。次に、確率ベクトル場を三つの部分に分割する：

$$d \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} M^{-1}v \\ 0 \end{bmatrix}}_A dt + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ -\nabla U(x) \end{bmatrix}}_B dt + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ -\gamma v dt + \sigma M^{\frac{1}{2}} dW \end{bmatrix}}_O \quad (5)$$

式 (5) では、複雑なベクトル場を A, B, O の三つの簡単なベクトル場に変換し、それぞれが正確な解に対応している。

[†] 明治大学 Meiji University

特に O 部分はオルンスタイン・ウーレンバック (OU) SDE に対応し、O 部分の正確な解は以下の式となる：

$$\mathbf{v}_t = e^{-\gamma t} \mathbf{v}_0 + \sigma \sqrt{(1 - e^{-2\gamma t})} \beta^{-1} M^{1/2} \epsilon_t$$

ベクトル場を分割した後、Verlet 法 [6] [7] を実装することができる。Verlet 方法を使用して、分割された確率ベクトル場から特定の順序とステップサイズでサンプリングを行うと、得られるサンプルは依然として定常分布に従う。ここでは、以下のサンプリング順序に従う：

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}_{t+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_t - \frac{\delta \nabla U(\mathbf{x}_t)}{2} \\ \mathbf{x}_{t+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}_t + \frac{\delta M^{-1} \mathbf{v}_{t+\frac{1}{2}}}{2} \\ \hat{\mathbf{v}}_{t+\frac{1}{2}} = c_1 \mathbf{x}_{t+\frac{1}{2}} + c_3 M^{\frac{1}{2}} \epsilon_t \\ \mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_{t+\frac{1}{2}} + \frac{\delta M^{-1} \hat{\mathbf{v}}_{t+\frac{1}{2}}}{2} \\ \mathbf{v}_{t+1} = \hat{\mathbf{v}}_{t+\frac{1}{2}} - \frac{\delta \nabla U(\mathbf{x}_{t+1})}{2} \end{array} \right.$$

ここで、 $c_1 = e^{-\gamma t}$, $c_2 = \gamma^{-1}(1 - c_1)$, $c_3 = \sqrt{k_B T(1 - c_1^2)}$ 。この方程式群を使用してサンプリングを行うサンプリング方法は、サンプリング順序から BAOAB と呼ばれる。BAOAB を用いて $\mathbf{x}_t$ と $\mathbf{x}_{t-1}$ の関係を再整理し、 $\gamma \rightarrow \infty$ とすると、BAOAB-Limit Sampler を得ることができる。生成されたサンプルは同じ定常分布に従う。したがって、最後に、BAOAB-Limit Sampler は以下の方程に従う：

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \delta t M^{-1} \nabla U(\mathbf{x}_t) + \sqrt{\frac{k_B T \delta t}{2}} M^{\frac{1}{2}} (\epsilon_t + \epsilon_{t+1}) \quad (6)$$

4. 数値実験

実験では、CIFAR-10 データセットを使用した。ハイパーパラメータについては、[8]と同じ設定を採用した。ベースラインモデルは SOTA モデルの NPR-DPM [9] と SN-DPM [9] である。評価指標は FID を使用した。NPR-DPM(B) と SN-DPM(B) は、修正段階で BAOAB-Limit Sampler を使用することを示している。

Table 1 と Table 2 に FID 評価結果を示す。Table 1 では、CIFAR10 (LS) はベースラインモデルが CIFAR10 上で linear schedule を使用して訓練されたことを示している。同様に、Table 2 では、CIFAR10 (CS) はベースラインモデルが CIFAR10 上で cosine schedule を使用して訓練されたことを示している。

以上の結果から、異なる訓練状況とベースラインの拡散確率モデルの下で、提案方法は一貫してサンプル品質を改善することができた。

Timesteps	10	25	50	100
NPR-DPM	32.35	10.55	6.18	4.52
NPR-DPM (B)	31.32	9.26	4.92	3.49
SN-DPM	24.06	6.91	4.63	3.67
SN-DPM (B)	23.87	6.47	4.10	3.36

Table 1. CIFAR10 (LS) の FID 結果

Timesteps	10	25	50	100
NPR-DPM	19.74	7.88	5.20	4.42
NPR-DPM (B)	19.36	7.73	4.91	4.26
SN-DDPM	16.10	5.91	4.06	3.72
SN-DPM (B)	16.01	5.87	4.01	3.65

Table 2. CIFAR10 (CS) の FID 結果

5. まとめ

本研究では、BAOAB-Limit Sampler に基づく新しい DPMs の生成手法を提案した。これは、DPMs の生成過程は高階誤差項を持つサンプラーを導入する。提案手法は実験で生成された画像の品質において有効性が確認された。手法や実験の詳細については、当日報告する。

参考文献

- [1] Song Y, Ermon S. Generative modeling by estimating gradients of the data distribution[J]. Advances in neural information processing systems, 2019, 32.
- [2] Song Y, Garg S, Shi J, et al. Sliced score matching: A scalable approach to density and score estimation[C]//Uncertainty in Artificial Intelligence. PMLR, 2020: 574-584.
- [3] Welling M, Teh Y W. Bayesian learning via stochastic gradient Langevin dynamics[C] //Proceedings of the 28th international conference on machine learning (ICML-11). 2011: 681-688.
- [4] Jain A, Poole B. Journey to the BAOAB-limit: finding effective MCMC samplers for score-based models[C]//NeurIPS 2022 Workshop on Score-Based Methods. 2022.
- [5] Leimkuhler B, Matthews C. Rational construction of stochastic numerical methods for molecular sampling[J]. Applied Mathematics Research eXpress, 2013, 2013(1): 34-56.
- [6] Melchionna S. Design of quasisymplectic propagators for Langevin dynamics[J]. The Journal of chemical physics, 2007, 127(4).
- [7] Skeel R D, Izaguirre J A. An impulse integrator for Langevin dynamics[J]. Molecular Physics, 2002, 100(24): 3885-3891.
- [8] Ho J, Jain A, Abbeel P. Denoising diffusion probabilistic models[J]. Advances in neural information processing systems, 2020, 33: 6840-6851.
- [9] Bao F, Li C, Sun J, et al. Estimating the optimal covariance with imperfect mean in diffusion probabilistic models[J]. arXiv preprint arXiv:2206.07309, 2022