@author: Neil0306

什么是 Diffusion Model

原论文: DDPM

- 原论文的数学推导是从 信息论 的角度出发的, 公式的中间推导过程并没有详细给出, 因此不好理解.
- 下面我们会直接用**概率论的贝叶斯公式**来推导, 得到的结果是相同的, 重在理解结果的意义.

扩散(diffusion)指的是在一个图片上加入噪声, 使得图片变得模糊. 通过加入噪声, 使得图片的信息变得不那么明显.

diffusion model 生成图片的过程简单来说就是:

- 在已经训练好模型的前提下, 我们给模型一张固定大小的噪声图片(图片里的每一个像素点都是从高斯分布中采样而来的值), 图片的大小与模型有关, 看模型支持多大的图片. 然后整个 "生成图片" 的流程其实是一个 `for循环`, 一共循环 T 个 time step.
  - 每一个 time step 的任务是让 上一个 time step 的图片更加清晰, 也就是逐步去噪.
    - 具体来说, 我们会用模型预测当前 time step 下要去除的噪声, 然后用前一个 time step 的图片减去这个预测的噪声, 得到当前 time step 的图片.
    - 循环 T 次之后, 理论上就得到一张清晰的图片.

Diffusion model 和 GAN 的简单比较

- GAN 能生成的类别有限, 因为类别太多, 判别器就很容易分辨出合成的图像, 导致模型训练不收敛.
  - 也就是类别多了, 模型很难训练.
- diffusion model 用更简单的方法诠释了生成模型应该如何学习以及生成, 更简单.

Diffusion model 的 "过程"

forward:

- 向一个图片中逐步加入噪声, 加噪声的次数越多, 图片越模糊.
  - 一共往图片中加入 `time steps` 次噪声.
  - 每一次加入的噪声一般不相同, 一开始加入的噪声都是比较少的, 越往后加入的噪声的幅度越大.

backward:

- 从 T 时刻开始, 输入到模型里的是一张纯噪声图片 (所有像素点都是从高斯分布中采样而来).
    - 模型的任务是**预测当前时刻应该去除多大的噪声**, 然后拿当前时刻的图片减去预测的噪声(逐步去噪), 也就是逐步还原图片.
    - 一共还原 `time steps` 次, 最后得到的图片就是我们想要的图片.

注意:

- 如果是在训练模型的话, 在forward 阶段, 我们采样的噪声会暂时保存下来, 因为噪声在训练的过程中等价于 `label` , 在走 backward 的时候, 模型在每一个 time step 所预测的噪声就会与 forward 阶段的那个噪声计算loss.

下图是 diffusion model 的训练和推理逻辑:

Algorithm 1 Training

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

Algorithm 2 Sampling

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

训练过程:

1. 首先设定整个模型的最大 time step: T

    > 这是一个超参数

2. 从数据集中随机拿出一张图(多模态的话可能是"文字+图片"), 也就是 x_0
    - 根据 batch size 取出多个 sample, 作为各自的 x_0
3. 对于每一个样本 x_0, 随机从 0~T 中取一个 time step, 作为当前样本要执行的 total time step, 也就是 t
    - 也就是说, batch 内的每一个样本在训练的时候, 都会有各自的 total time step.
4. 走 forward 过程 -- **这个过程并没有让模型参与进来**:
    - 从标准正态分布中采样噪声, 并根据当前 time step 的大小, 对噪声进行进行缩放(这里有公式计算的), time step 越往后, 加入的噪声就越大.

    > 由于每一个 time step 加入的噪声大小在 forward 的过程中是可以用公式直接算出来的, 因此在代码实现中我们是直接计算出 1~t 时刻的所有噪声大小并保存下来, 作为 backward 的训练 label.

5. 走 backward 过程 -- **训练模型**:

- 用公式直接计算 loss: 图中的 ϵ_θ 其实就是模型的预测值, 这里先不展开讲.

> 在这个过程中, 由于我们始终规定噪声服从高斯分布, 因此我们需要的统计量就是 `均值` 和 `方差` ,公式里给出的正是计算均值和方差的方法, 有了均值和方差, 我们就可以得到一个分布, 噪声则是从这个分布中采样而来.
>
> > 由于 `采样` 这个操作是不可导的, 因此代码中用了 `重参数化技巧` 来解决这个问题.

- 有了loss, 模型就正常梯度反传更新参数就完事了.

6. 重复 2~4, 直到模型收敛.

推理过程:

1. 从标准正态分布中采样出 指定size 的纯噪声图片.
2. 指定一个 time step, 作为当前图片的 total time step.
3. 执行 for-loop:
   - 用训练好的模型预测每一个像素点需要减去的噪声大小. (代码中依然是用重参数化技巧来采样噪声)
   - 用当前时刻的噪声图片减去预测的噪声, 得到当前时刻refine后的图片.
4. 执行完 for-loop, 理论上就得到了一张新生成的图片.

从概率论的角度理解 Diffusion model 的数学原理

有两个超参数, 它的具体含义得看信息论中怎么定义, 这里为了简单, 直接当它是一个`与time spte 有关的噪声权重`好了:

1. β_t : 用来控制噪声的大小, 也就是控制 t 时刻加入的噪声的**大小**.
2. α_t : 用来控制噪声的分布, 控制 t 时刻的噪声所服从的高斯分布的**方差**.

> 它们之间具有关系: $\alpha_t = 1 - \beta_t$
> 在论文中, 作者给出了经验数值范围: $\alpha_t \in [0.0001, 0.002]$

噪声随着 time step 的增加而增加的理由:

- 一开始, 往原图中加一点点噪声就有效果, 越往后, 如果要看到 "乱糟糟" 的感觉, 就需要加入更大的噪声.

公式推导 (forward 过程)

一个显然而易见的关系是: 在 t 时刻, 增加噪声后的图片 与 前一个 time step 的图片之间的关系为:

$$\begin{aligned} x_t &= \sqrt{a_t} \cdot x_{t-1} + \sqrt{1-a_t} \cdot \epsilon_t \\ &= \sqrt{a_t} \cdot x_{t-1} + \sqrt{\beta_t} \cdot \epsilon_t \end{aligned}$$

- 首先明确的一点是, 随着t的增加, β_t 在不断增大, 因此t时刻输出的图片 x_t 的构成越来越偏向于一张噪声图片. (噪声越加越多, 前一个time step里的像素点的值占比越来越小)

这时候, 我们觉得要一步步增加噪声计算起来太麻烦了, 于是希望可以推导出一个公式, 直接从x_0计算 x_t , 我们从 t-1 时刻开始推:

$$x_{t-1} = \sqrt{a_{t-1}} \cdot x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_{t-1}$$

带入到 x_t 的公式中:

$$\begin{aligned} x_t &= \sqrt{a_t} \cdot (\sqrt{a_{t-1}} \cdot x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_{t-1}) + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_t \\ &= \sqrt{a_t \cdot a_{t-1}} \cdot x_{t-2} + (\sqrt{a_t \cdot (1-\alpha_{t-1})} \cdot \epsilon_{t-1} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_t) \end{aligned}$$

由于每次加入的噪声都服从`正态分布`, 即 $\epsilon_t \sim N(0,1)$.

> 这里提一下高斯分布的性质:
> (1) 高斯随机变量乘以一个数a, 相当于改变了方差, 即方差乘以系数a^2;
> (2) 高斯随机变量相加, 相当于改变了均值, 也就是将这两个随机变量的均值相加.
>
> > $\mathcal{N}(0, \sigma_1^2 \mathbf{I}) + \mathcal{N}(0, \sigma_2^2 \mathbf{I}) \sim \mathcal{N}(0, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 \mathbf{I})$

所以, 上式可以进一步得到

$$\begin{aligned} x_t &= \sqrt{a_t} \cdot (\sqrt{a_{t-1}} \cdot x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_{t-1}) + \sqrt{1-\alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_t \\ &= \sqrt{a_t \cdot a_{t-1}} \cdot x_{t-2} + \sqrt{1-\alpha_t \alpha_{t-1}} \cdot \epsilon_{t-1} \end{aligned}$$

不断推导后, 就会发现其实就是将 α_i 进行累乘, 也就是 $\bar{\alpha}_t = \prod_{i=0}^{t} \alpha_i$

于是, 最终的递推式为:

$$x_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t} \cdot \epsilon_i$$

- 其中 $\bar{\alpha}_t$ 表示连乘.
- 这说明, **任意时刻的分布都可以通过初始状态 x_0 直接计算出来**.

公式推导 (backward 过程)

Motivation:

- 在 backward 过程里, 如果像 forward 那样, 直接从 x_t 一步到位得到 x_0 是非常困难的, 原因就是从叠加后高斯分布无法唯一地分解回叠加前的状态. 得不到准确的不要紧, 我们可以 `求近似解` , 但近似也不容易进行数学建模, 咋办? 当然是用神经网络啊!
- 所以, **SD模型本质上是一个预测噪声的模型, 它学习的是某种噪声的分布**, 当然, 这个噪声的分布是跟训练数据的分布存在复杂的隐藏关系的.

所以, 我们的目标很明确:

> 我要给一张加了噪声之后的图片去噪, 尽可能还原出原来的图片.

操作逻辑也很明确:

> 既然没办法直接从噪声图片嗖地一下得到去噪的图片, 那就一点点地来, 逐步去噪声咯.

用概率论的方式去描述, 就是求去噪后的分布 $p(x_{t-1}|x_t)$, 然后再从这个分布中采样, 就得到去噪后的东西啦~

- 此时又遇到困难了, 这概率咋求? 我现在就只有一个 x_t, 一张噪声图, **假设我们在跑backward之前也把forward给跑了**, 那我们顶多还知道了 forward 过程里记录下来的每次加进去的噪声, 但是我怎么直接得知去掉的噪声分布是啥啊? 老天都不知道好吧?!
- 不过, 好歹我们会forward过程, 往图片中加噪声总是会的嘛, 所以 $p(x_t|x_{t-1})$ 我们是会算的.

这时候咧, Bayes 大佬的公式就来了:

$$
\begin{aligned}
p(x_{t-1}|x_t) &= \frac{p(x_t|x_{t-1}) \cdot p(x_{t-1})}{p(x_t)} \\
&= p(x_t|x_{t-1}) \cdot \frac{p(x_{t-1})}{p(x_t)}
\end{aligned}
$$

对于这个贝叶斯公式的每一项, 我们有以下分析:

- 在forward阶段的推导里, 我们知道, 无论是否知道 x_0, 我们只要有 α_t, 就能直接计算出 x_t 的分布. 也就是:

$$
p(x_t) = \sqrt{a_t} \cdot p(x_{t-1}) + \sqrt{1-a_t} \cdot \epsilon_t
$$

- 并且, 如果我们进一步有 x_0, 就能用递推式直接算出 x_t 或者 x_{t-1}, 也就是 $p(x_{t-1}|x_0)$ 是能求的. 也就是:

$$
p(x_t) = p(x_t|x_0) = \sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot p(x_0) + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t} \cdot \epsilon_t \\
p(x_{t-1}) = p(x_{t-1}|x_0) = \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}} \cdot p(x_0) + \sqrt{1-\bar{\alpha}_{t-1}} \cdot \epsilon_{t-1}
$$

  - 注意这里的 $\bar{\alpha}_t$ 是从 0 到 t 的**连乘**.

所以, 给出已知项 x_0 时, 贝叶斯公式改写为:

$$
\begin{aligned}
p(x_{t-1}|x_t, x_0) &= p(x_t|x_{t-1}, x_0) \cdot \frac{p(x_{t-1}|x_0) \cdot p(x_0)}{p(x_t|x_0) \cdot p(x_0)} \\
&= p(x_t|x_{t-1}, x_0) \cdot \frac{p(x_{t-1}|x_0)}{p(x_t|x_0)}
\end{aligned}
$$

先来分析一下每一项的数据分布(利用前面提到的高斯分布的性质):

$$
p(x_t|x_0) \sim \mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot x_0, 1-\bar{\alpha}_t) \\
p(x_{t-1}|x_0) \sim \mathcal{N}(\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}} \cdot x_0, 1-\bar{\alpha}_{t-1}) \\
p(x_t|x_{t-1}, x_0) \sim \mathcal{N}(\sqrt{\alpha_t} \cdot x_{t-1}, 1-\alpha_t)
$$

那么, 根据高斯分布的公式和性质(针对方差来说, 乘法相当于加, 除法就是减), 最后得到的 $p(x_{t-1}|x_t, x_0)$ 就应该有如下关系:

$$
p(x_{t-1}|x_t, x_0) \propto \exp -\frac{1}{2}(\frac{(x_t - \sqrt{\alpha_t} \cdot x_{t-1})^2}{\beta_t} + \frac{(x_{t-1} - \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}} \cdot x_0)^2}{1-\bar{\alpha}_{t-1}} - \frac{(x_t - \sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot x_0)^2}{1-\bar{\alpha}_t})
$$

化简:

接下来继续化简，咱们现在要求的是上一时刻的分布

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

C那个是常数项，不影响

这个任务中，咱们核心就是求跟Xt-1有关的，其他的都不关心现在，这一顿展开就是在给它配方呢

$$
\exp\Big(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\Big) = \exp\Big(-\frac{1}{2}(\frac{1}{\sigma^2}x^2 - \frac{2\mu}{\sigma^2}x + \frac{\mu^2}{\sigma^2})\Big)
$$

这样就能得到均值和方差了

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

配完化简后的结果，但是我哪有X0啊现在

之前咱们说Xt可以由X0计算得到，现在逆一下 $\mathbf{x}_0 = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}(\mathbf{x}_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\mathbf{z}_t)$

- 注意这里公式中的 x_0 指的是最开始, 从数据集里拿出来的数据(比如图片), forward 的过程是用它走的.

所以, 最终的结果就是:

$$\tilde{\mu}_t = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}(x_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\epsilon_t)$$

$$\sigma = \frac{\alpha_t^2}{\beta_t} + \frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}$$

- t 时刻的均值 只与 t-1 时刻的状态 以及 t 时刻的噪声有关.
- 注意: 这是原始版本的stable diffusion, 所以这里的 σ 是一个跟超参数有关的值, 是一个固定值, 但是后续的改进版本中, 这里被改成了一个可学习的参数.

从这两个公式, 我们可以发现这没有出现 x_0 哦! backward 这个流程似乎是可以单独跑的嘛~

那么, 如果我们现在只跑backward, 在均值的式子中, 我们可以看到, ϵ_t 是t时刻里的噪声, 这噪声咋整? 怎么来?

简单, 玄学的事情就交给玄学, 炼丹! 最难的事情肯定交给老天爷, 让模型去决定是多少呗~

- 所以, diffusion model 本质上是在学习一个噪声分布.

那这个模型怎么炼啊?

- 跑forward, 得到每个time step的噪声, 保存下来.
- 跑backward, **模型的输出其实就是噪声**, 这时候, forward保存的噪声就可以作为label, 计算loss, 然后更新参数, 也就是能训练模型啦!