Pie-Lab 2025年暑期培训 Practice1

徐浩
Pie-Lab
北京理工大学计算机学院
北京市海淀区中关村南大街
526358612@qq.com

Abstract

本文是“实践III：掌握diffusion model”的实验报告。

1 数学原理

1.1 DDPM整体思想

DDPM是一种生成模型，希望从数据中学到其特征分布，使得生成的数据符合原数据集。其大致过程见图1。

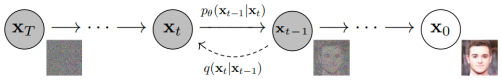


Figure 1: ddpm_overview

从右往左看，对输入的图像 x_0 逐步加噪，最终变成符合标准正态分布的 x_T。从左往右看，从标准正态分布里面采样，逐步去噪，还原出原始图像。

因此，训练好模型之后，只需要从标准正态分布里面采样，逐步去噪，就能得到一张生成的新图像，它是符合原数据集特征的。

1.2 正向加噪

设 x_{t-1} 加噪得到 x_t 的公式如下，其中 $0 < \alpha_t, \beta_t < 1$，加根号是为了待会儿推出的结论和论文的表达一致：

$$\boldsymbol{x}_t = \sqrt{\alpha_t}\boldsymbol{x}_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$$

因此，类推得到：

$$\boldsymbol{x}_t = \sqrt{(\alpha_t \dots \alpha_1)}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{(\alpha_t \dots \alpha_2)\beta_1}\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \sqrt{(\alpha_t \dots \alpha_3)\beta_2}\boldsymbol{\varepsilon}_2 + \cdots + \sqrt{\alpha_t\beta_{t-1}}\boldsymbol{\varepsilon}_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t$$

所有含 ε 的项可以合并为一个均值为 0、方差为系数平方和的正态分布，因此：

$$\boldsymbol{x}_t = \sqrt{(\alpha_t \dots \alpha_1)}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{(\alpha_t \dots \alpha_2)\beta_1 + (\alpha_t \dots \alpha_3)\beta_2 + \cdots + \alpha_t\beta_{t-1} + \beta_t}\,\boldsymbol{\varepsilon}_t, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})$$

注意，这里的 $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ 不是之前 β_t 后的 $\boldsymbol{\varepsilon}_t$，而是和 $\boldsymbol{x}_t$ 相关的量，这么写是为了简化后续的表示。

又因为该系数可以表示为：

$$
\begin{aligned}
&(\alpha_t \dots \alpha_1) + (\alpha_t \dots \alpha_2)\beta_1 + (\alpha_t \dots \alpha_3)\beta_2 + \dots + \alpha_t\beta_{t-1} + \beta_t \\
&= (\alpha_t \dots \alpha_2)\alpha_1 + (\alpha_t \dots \alpha_2)\beta_1 + (\alpha_t \dots \alpha_3)\beta_2 + \dots + \alpha_t\beta_{t-1} + \beta_t \\
&= (\alpha_t \dots \alpha_2)(\alpha_1 + \beta_1) + (\alpha_t \dots \alpha_3)\beta_2 + \dots + \alpha_t\beta_{t-1} + \beta_t \\
&= (\alpha_t \dots \alpha_3)\left(\alpha_2(\alpha_1 + \beta_1) + \beta_2\right) + \dots + \alpha_t\beta_{t-1} + \beta_t \\
&= \dots\dots \\
&= \alpha_t\left(\alpha_{t-1}\left(\dots(\alpha_2(\alpha_1 + \beta_1) + \beta_2) + \dots\right) + \beta_{t-1}\right) + \beta_t
\end{aligned}
$$

如果约束 $\alpha_t + \beta_t = 1$，上式就为 1，再令 $\bar{\alpha}_t = (\alpha_t \dots \alpha_1)$，就能得到：

$$
\boldsymbol{x}_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1 - \bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I}) \tag{1}
$$

由于加了约束，则 $\alpha_t = 1 - \beta_t$，因此最开始 x_{t-1} 加噪得到 x_t 的公式可以写为：

$$
\boldsymbol{x}_t = \sqrt{1 - \beta_t}\boldsymbol{x}_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\boldsymbol{\varepsilon}_t, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})
$$

由该公式可知，$\boldsymbol{x}_t$ 的分布为：

$$
\boldsymbol{x}_t \sim \mathcal{N}(\sqrt{1 - \beta_t}\boldsymbol{x}_{t-1}, \beta_t\boldsymbol{I})
$$

随着 t 的增加，如果让超参数 β_t 在 [a, b] 线性增加，那么 α_t 就会线性减小，所以 $\bar{\alpha}_t$ 趋近于 0 的速度会越来越快，由式1可知，当 t 足够大，$\boldsymbol{x}_t$ 就会约等于 $\boldsymbol{\varepsilon}$，即服从标准正态分布。

至此，给定原始图像 $\boldsymbol{x}_0$，可以通过式1一次性加噪得到符合标准正态分布的 $\boldsymbol{x}_T$，而非最初提到的一步一步地加噪。

1.3 反向去噪

反向去噪即：从标准正态分布采样 $\boldsymbol{x}_T$，经过 T 次去噪，得到类似训练集的图像。

反向去噪的公式推导我只看懂了一点点，简述如下：

数学原理表明，当 β_t 足够小时，每一步“加噪声的逆操作”也满足正态分布，即已知 $\boldsymbol{x}_t$，还原出的 $\boldsymbol{x}_{t-1}$ 应满足：

$$
\boldsymbol{x}_{t-1} \sim \mathcal{N}(\tilde{\mu}_t, \tilde{\beta}_t\boldsymbol{I})
$$

因此需要求 $\tilde{\mu}_t$ 和 $\tilde{\beta}_t$。

由贝叶斯公式可得：

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

其中：

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) &= \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_{t-1}; \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t, \tilde{\boldsymbol{\beta}}_t\boldsymbol{I}) \\
q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1}, \boldsymbol{x}_0) &= \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_t; \sqrt{1 - \beta_t}\boldsymbol{x}_{t-1}, \beta_t\boldsymbol{I}) \\
q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0) &= \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0, (1 - \bar{\alpha}_t)\boldsymbol{I}) \\
q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_0) &= \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_{t-1}; \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0, (1 - \bar{\alpha}_{t-1})\boldsymbol{I})
\end{aligned}
$$

解得：

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mu}_t &= \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(\boldsymbol{x}_t - \frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\varepsilon_t\right) \\
\tilde{\beta}_t &= \frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t}\beta_t \\
\boldsymbol{x}_{t-1} &= \tilde{\mu}_t + \sqrt{\tilde{\beta}_t}\cdot\varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I})
\end{aligned}
\tag{2}
$$

其中 ε_t 就是式1里的那个，并且上式中只有它是未知量，其他都是常数。

换言之，只需要学习一个网络，它的输入是 $\boldsymbol{x}_t$ 和 t，希望它的输出等于 ε_t，就可以算出 $\boldsymbol{x}_{t-1}$。

因此，一旦训练好这个网络，就可以从 $\boldsymbol{x}_T$ 一步一步去噪得到生成的新图像 $\boldsymbol{x}_0$。

1.4 训练与采样

下面将论文的算法和上述理论对应起来。

训练的算法如图2，解释如下：

- 从训练集随机选一个图像 $\boldsymbol{x}_0$。
- 随机取一个时刻 t。
- 生成符合标准正态分布的噪声 ε。
- 利用 $\boldsymbol{x}_0$ 和 ε 生成 $\boldsymbol{x}_t$ （见式1），将 $\boldsymbol{x}_t$ 和 t 作为神经网络（U-Net等）的输入，输出 ε_θ ，目标是让 ε 和 ε_θ 的平方损失最小。

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

Figure 2: algorithm_train

生成（采样）的算法如图3，解释如下：

- 从标准正态分布采样 $\boldsymbol{x}_T$。
- 利用训练好的网络输出 ε_t，利用式2反向逐步计算 $\boldsymbol{x}_{t-1}$，其中 σ_t 就是式2中的 $\sqrt{\tilde{\beta}_t}$。
- 最终得到生成的图像 $\boldsymbol{x}_0$。

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** $\mathbf{x}_0$

Figure 3: algorithm_sample

2 模型结构与代码说明

在这一部分，我用文字结合代码的方式，把“模型结构”和“实现细节与关键代码”一起阐述。

本实验的设置见图4。其中设置 $\beta \in [0.0001, 0.02]$，T $= 1000$，并尽可能将所有的系数提前算好。

```python
# 超参数
EPOCHS = 30
GEN_EPOCHS = 5
FID_SAMPLES = 100  # FID评估的样本数量
IMG_SIZE = 32
CHANNELS = 3
DEVICE = 'cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu'
T = 1000  # 加噪步数
BETA_MIN = 1e-4
BETA_MAX = 0.02
BETAS = torch.linspace(BETA_MIN, BETA_MAX, T).to(DEVICE)  # 所有下标t都是: [0, T-1]
ALPHAS = 1. - BETAS
ALPHAS_BAR = torch.cumprod(ALPHAS, dim=0)  # alpha累积
MODIFIED_ALPHAS_BAR = torch.cat([torch.tensor([1.0], device=DEVICE), ALPHAS_BAR[:-1]])  # 去掉ALPHAS_BAR最后一个，前面补1
SQRT_ALPHAS_BAR = torch.sqrt(ALPHAS_BAR)  # train
SQRT_ONE_MINUS_ALPHAS_BAR = torch.sqrt(1 - ALPHAS_BAR)  # train
SQRT_REVERSE_ALPHAS = torch.sqrt(1. / ALPHAS)  # sample
STD = torch.sqrt(BETAS * (1. - MODIFIED_ALPHAS_BAR) / (1. - ALPHAS_BAR))  # sample，恰好首位为0，(variance方差，std标准差)
# 重要调参
BATCH_SIZE = 128
LR = 1e-4
```

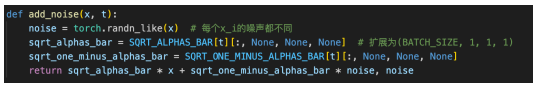
Figure 4: code_config

模型训练的实现见图5，首先输入原始图像 x 和步数 t，通过加噪公式得到 x_t 和 noise，然后将 x_t 和 noise 作为网络的输入，得到预测的 $noise_\theta$，利用均方损失计算 noise 和 $noise_\theta$ 的差距即可。

```python
def train(model, train_loader, optimizer, criterion):
    model.train()
    total_loss, count = 0, 0
    for imgs, _ in train_loader:
        imgs = imgs.to(DEVICE)
        t = torch.randint(0, T, (imgs.size(0),), device=DEVICE).long()  # t: [0, T-1]
        x_t, noise = add_noise(imgs, t)  # 一批图像，每个图像的t随机，noise也随机
        predicted_noise = model(x_t, t)
        loss = criterion(predicted_noise, noise)
        optimizer.zero_grad()
        loss.backward()
        optimizer.step()
        total_loss += loss.item() * imgs.size(0)
        count += imgs.size(0)
    return total_loss / count
```

Figure 5: code_train

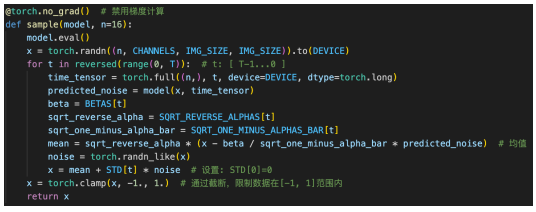
其中加噪的实现见图6，传入一个批量的 x 和随机生成的 t，然后生成一个批量的 noise，利用式1即可得到 x_t，然后返回 x_t 和 noise，再用去训练网络。



```python
def add_noise(x, t):
    noise = torch.randn_like(x)  # 每个x_i的噪声都不同
    sqrt_alphas_bar = SQRT_ALPHAS_BAR[t][:, None, None, None]  # 扩展为(BATCH_SIZE, 1, 1, 1)
    sqrt_one_minus_alphas_bar = SQRT_ONE_MINUS_ALPHAS_BAR[t][:, None, None, None]
    return sqrt_alphas_bar * x + sqrt_one_minus_alphas_bar * noise, noise
```

Figure 6: code_add_noise

生成的实现见图7，从 T-1 步到 0 步，利用训练好的网络生成 noise，通过式2一步一步去噪，最后得到生成的图像。这里需要一个小的设计，将 STD[0] 设置为 0，就可以规避算法3最后一步的特殊处理。



```python
@torch.no_grad()  # 禁用梯度计算
def sample(model, n=16):
    model.eval()
    x = torch.randn((n, CHANNELS, IMG_SIZE, IMG_SIZE)).to(DEVICE)
    for t in reversed(range(0, T)):  # t: [ T-1...0 ]
        time_tensor = torch.full((n,), t, device=DEVICE, dtype=torch.long)
        predicted_noise = model(x, time_tensor)
        beta = BETAS[t]
        sqrt_reverse_alpha = SQRT_REVERSE_ALPHAS[t]
        sqrt_one_minus_alpha_bar = SQRT_ONE_MINUS_ALPHAS_BAR[t]
        mean = sqrt_reverse_alpha * (x - beta / sqrt_one_minus_alpha_bar * predicted_noise)  # 均值
        noise = torch.randn_like(x)
        x = mean + STD[t] * noise  # 设置: STD[0]=0
    x = torch.clamp(x, -1., 1.)  # 通过截断，限制数据在[-1, 1]范围内
    return x
```

Figure 7: code_sample

神经网络的实现见图8，整体结构参考 UNet。时间步 t 首先经过正弦余弦嵌入映射为高维向量，然后经过线性层映射到每个像素的维度，就得到了 t 的嵌入向量，再把它加到每个像素上，就完成了时间步和输入图像的融合。当然这里面有很多的细节需要学习，这里由于时间紧张，没有完全看懂网络结构，重点还是放在 diffusion 的原理上。

```python
class UNet(nn.Module):
    """输入层增、编码器下采样、中间层处理、解码器上采样、输出噪声预测"""
    def __init__(self, img_channels=3, base_channels=64, time_emb_dim=256):
        super().__init__()
        self.time_mlp = nn.Sequential(
            nn.Linear(time_emb_dim, time_emb_dim * 4),
            nn.SiLU(),
            nn.Linear(time_emb_dim * 4, time_emb_dim)
        )
        self.time_emb_dim = time_emb_dim
        self.input_conv = nn.Conv2d(img_channels, base_channels, kernel_size=3, padding=1)
        self.down1 = DownBlock(base_channels, base_channels * 2, time_emb_dim)
        self.down2 = DownBlock(base_channels * 2, base_channels * 4, time_emb_dim)
        self.middle1 = ResidualBlock(base_channels * 4, base_channels * 4, time_emb_dim)
        self.middle2 = ResidualBlock(base_channels * 4, base_channels * 4, time_emb_dim)
        self.up1 = UpBlock(in_c=base_channels * 4, skip_c=base_channels * 4, out_c=base_channels * 2, time_emb_dim=time_emb_dim)
        self.up2 = UpBlock(in_c=base_channels * 2, skip_c=base_channels * 2, out_c=base_channels, time_emb_dim=time_emb_dim)
        self.output_conv = nn.Sequential(
            nn.GroupNorm(8, base_channels),
            nn.SiLU(),
            nn.Conv2d(base_channels, img_channels, kernel_size=3, padding=1)
        )

    def forward(self, x, t):
        t_emb = sinusoidal_embedding(t, self.time_emb_dim)
        t_emb = self.time_mlp(t_emb)
        x = self.input_conv(x)
        x1, skip1 = self.down1(x, t_emb)
        x2, skip2 = self.down2(x1, t_emb)
        x_mid = self.middle1(x2, t_emb)
        x_mid = self.middle2(x_mid, t_emb)
        x = self.up1(x_mid, skip2, t_emb)
        x = self.up2(x, skip1, t_emb)
        return self.output_conv(x)
```

Figure 8: code_net

3 实验结果与分析

训练损失见图9，大概第 15 个周期开始就训不动了，loss 一直在 0.035 左右。

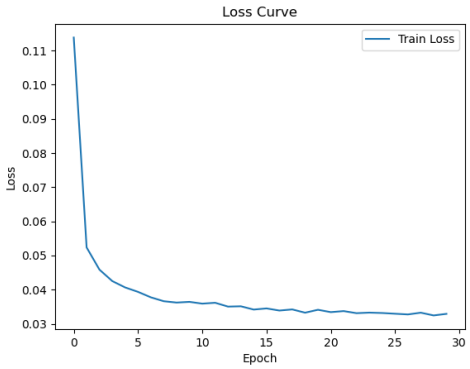


Figure 9: train_loss

评估采用 FID，它通过比较真实数据和生成数据的特征分布（用高斯分布来近似），来衡量二者的相似度，数学原理大致如下。

分别采样真实图像 x、生成图像 y 若干，然后使用预训练的 Inception 模型 f 将图像转为特征向量 f(x)、f(y)。

分别计算真实图像特征向量、生成图像特征向量的均值和协方差：

$$\mu_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i),$$
$$\mu_2 = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} f(y_i),$$
$$\Sigma_1 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N} \left(f(x_i)-\mu_1\right)\left(f(x_i)-\mu_1\right)^T,$$
$$\Sigma_2 = \frac{1}{M-1}\sum_{i=1}^{M} \left(f(y_i)-\mu_2\right)\left(f(y_i)-\mu_2\right)^T.$$

最后计算 FID 分数如下：

$$\mathrm{FID}(X,Y) = \|\mu_1-\mu_2\|_2^2 + \mathrm{Tr}\left(\Sigma_1+\Sigma_2-2(\Sigma_1\Sigma_2)^{1/2}\right)$$

FID 的值越小，说明二者的均值、协方差越接近，也就是特征分布越接近。

概要输出信息如下（完整输出见https://github.com/xuhaoo0/pie-lab）。

其中 FID 值有下降的趋势，说明生成的图像还是有在趋向于原始数据集。但最低也就 205，说明生成效果并不好，和原数据差距较大。

FID score at epoch 5: 257.68

FID score at epoch 10: 214.59

FID score at epoch 15: 246.37

FID score at epoch 20: 211.25

FID score at epoch 25: 205.01

FID score at epoch 30: 228.97

Training time: 19m 45s

生成的图像见10，效果不怎么好，也看不出来是个啥，因此它的 FID 在 200 以上也是理所应当。个人认为，diffusion 算法是固定的、超参数的影响也没这么大，所以肯定是神经网络还不够合适。因此 diffusion 算法更像是一种思路，它通过数学推导给出了可行的训练方案，但需要搭配合适的网络的架构，才能发挥出它的作用。

4 疑惑

本实验存在的疑惑如下：

- **色系** 生成一个批次的图像时，初始采样的 x 都不一样，但为什么最后得到的生成图像都是一个色系的，比如图10，都是蓝色系；比如图11，都是棕色系。个人猜测这是网络的局限性，由于这个神经网络并不合适、训练得不够好，导致它学到的特征分布很单一，比如都往一个色系去输出。
- **预测噪声** 为什么神经网络输入要包含 t？简单解释：随机一个噪声，并以一定程度加到 x_0 上，得到 x_t 。网络根据 x_t 和描述这种程度的 t，来预测原本的噪声长什么样。

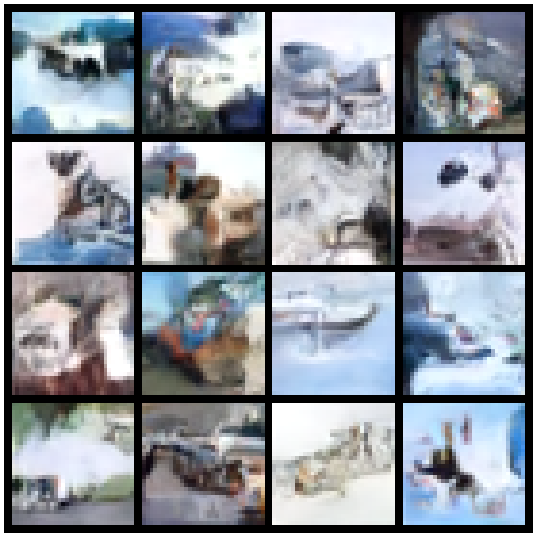


Figure 10: gen_img_e25

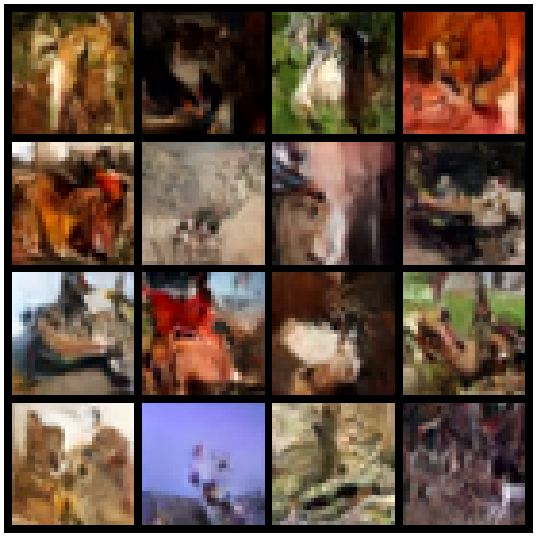


Figure 11: gen_img_e30