05 扩散模型：加噪、学习与采样

从可构造噪声到反向生成

学习目标

本讲建立离散时间去噪扩散概率模型（DDPM）的训练与生成关系。

- 区分固定前向过程、给定真实数据的后验、真实反向条件与学得反向模型。
- 解释如何构造带噪训练样本、学习噪声预测，并从先验噪声逐步生成数据。
- 推导闭式加噪与高斯后验、路径 ELBO 到噪声回归的关系，以及反向采样更新。
- 说明时间条件网络的职责、固定方差假设和末步处理。

三部分推导分别独立展开；仅阅读算法结论可以恢复基本过程，掌握推导还需恢复其中的中间理由。

1 训练与生成的概率对象

区分前向链、训练后验与反向生成模型。

从高斯噪声生成图像的建模问题

生成目标：从容易抽样的标准高斯，产生具有真实图像结构的新样本。

复杂数据分布需要合适的建模方式。DDPM选择预先规定逐步加噪，再学习一系列局部反向转移；这是其建模路线。





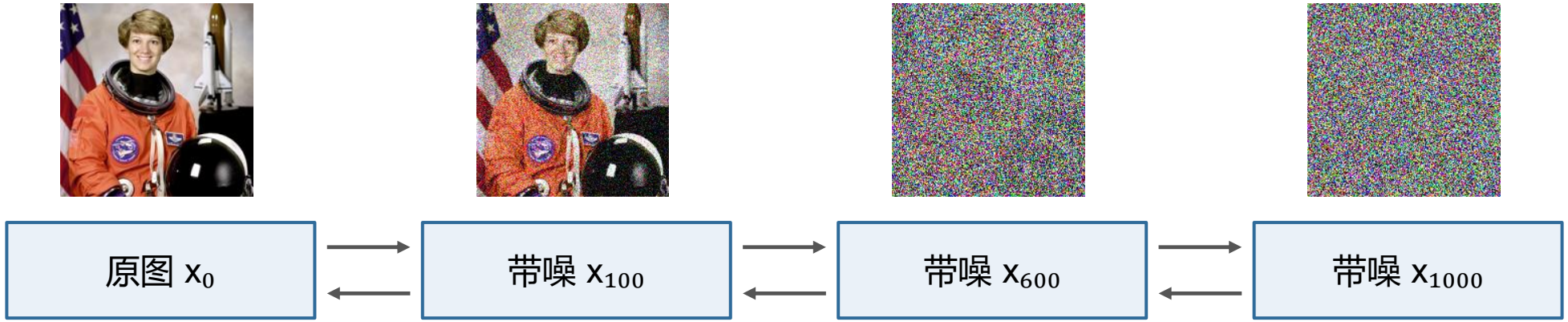
图为Ho等作者模型的无条件生成结果，非真实训练样本。来源：Fig.1，CelebA-HQ面板，arXiv:2006.11239v2。

从可构造的加噪学习生成

训练数据来自 p_{data}，数据向量记为 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^d$。

去噪扩散概率模型（DDPM）先用固定加噪过程构造训练信息，再学习从噪声生成数据的反向模型。

固定前向 q：时间增大；照片来自同一前向路径

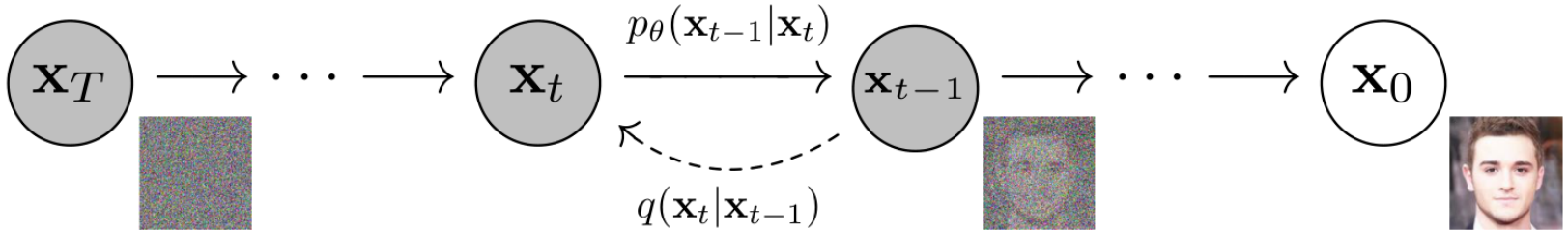


学得反向 pθ：时间减小；下行仅示意生成方向

照片：NASA；加噪：本课计算；显示裁剪不影响计算状态

- 训练时已知真实数据及人为加入的噪声，可据此构造监督信号。
- 生成时先从标准高斯抽取初始状态，再按学得反向转移产生新样本。

原论文概率图：两种方向共用状态



反向生成：左 → 右。时间从 T 减到 0，实线是学得的反向转移。

前向加噪：右 → 左。时间增大，虚线是固定的加噪转移。

这是概率依赖图。缩略图示意状态含义，不是逐层网络结构。

图中缩略图也不是同一张图的去噪实验记录。

来源：Ho 等（2020），Fig. 2，PDF p.2，arXiv:2006.11239v2

一步高斯转移与抽样

取时间 $t = 1, \ldots, T$，固定日程 $0 < \beta_t < 1$，定义 $\alpha_t = 1 - \beta_t$。一步加噪为

$$q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1}) = \mathcal{N}(\sqrt{\alpha_t}\boldsymbol{x}_{t-1}, \beta_t \boldsymbol{I}).$$

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

独立噪声与前向路径

各步 $\boldsymbol{\eta}_t$ 相互独立，并与原始数据独立。β_t 是噪声方差，乘在标准高斯前的 $\sqrt{\beta_t}$ 是标准差。

马尔可夫过程在给定当前状态后，其下一状态的条件分布无需更早的状态。因此整条前向路径为

$$q(\boldsymbol{x}_{1:T} \mid \boldsymbol{x}_0) = \prod_{t=1}^{T} q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1}).$$

所有中间状态组成路径潜变量；这里的加噪规则固定，不学习一个编码器参数 ϕ。

训练后验与生成模型的条件

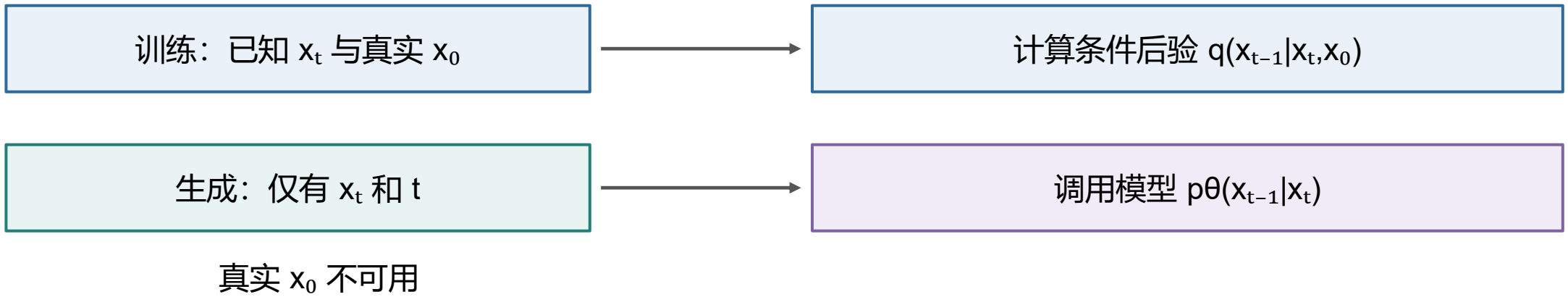
对象	已给定信息	职责
$q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1})$	前一状态	固定加噪
$q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)$	当前状态与真实数据	训练可计算的条件后验
$q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)$	当前状态	数据分布诱导的真实反向条件
$p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)$	当前状态与学得参数	生成所用模型

反向生成模型设为

$$p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T}) = p(\boldsymbol{x}_T) \prod_{t=1}^{T} p_\theta\left(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t\right), p(\boldsymbol{x}_T) = \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I}).$$

真实反向条件需要对数据混合

生成时：已知 $\boldsymbol{x}_t, t$，真实 $\boldsymbol{x}_0$ 未知。训练时：额外给定真实 $\boldsymbol{x}_0$，可以计算条件后验。



真实反向条件需要对未知原始数据混合：

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

给定真实数据后的后验可为高斯，混合后的分布未必是单个高斯。本讲把中间反向转移建模为高斯，学习其均值；这是模型设定。

累计系数给出直接采样

定义 **累计信号保留系数** $\overline{\alpha}_t = \prod_{s=1}^{t} \alpha_s$，约定 $\overline{\alpha}_0 = 1$。固定线性高斯加噪的边缘分布为

$$q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0) = \mathcal{N}(\sqrt{\overline{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0, (1-\overline{\alpha}_t)\boldsymbol{I}).$$

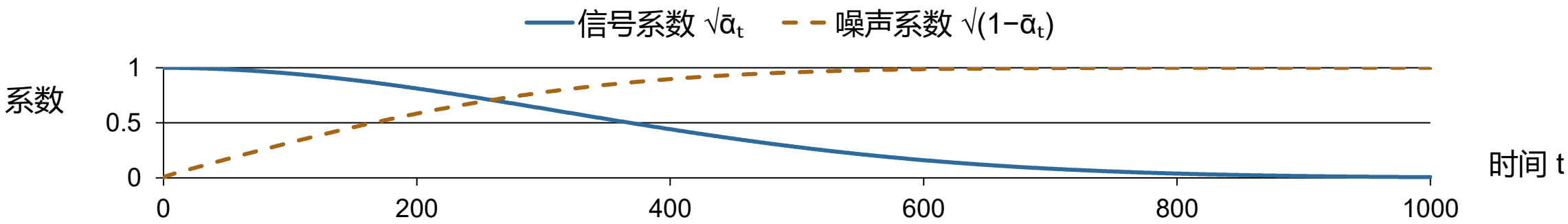
因此训练时给定 t 后，可直接构造

$$\boldsymbol{x}_t = \sqrt{\overline{\alpha}_t}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1-\overline{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I}).$$

这是对同一个条件边缘分布的抽样。直接抽出的状态与逐步加噪的状态具有相同条件分布，但无需复用某条已实现路径的噪声。它节省训练样本的构造步骤；生成仍使用反向采样算法。

日程决定信号与噪声的比例

图中采用 DDPM 线性日程：$T = 1000$，$\beta_t = 10^{-4} + \frac{t-1}{999}(0.02 - 10^{-4})$。





两系数的**平方之和为1**。信号残留趋近零、条件方差趋近1时，$q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)$ 趋近标准高斯；有限终端仍是近似。

照片：NASA / scikit-image astronaut；加噪为本课计算，显示时固定映射并裁剪到[0,1]，不改变计算状态。

一个可追踪的标量构造例

为便于手算，另设两步一维日程：$\beta_1 = \beta_2 = 0.2$，故 $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.8$、$\bar{\alpha}_2 = 0.64$。

取真实值 $x_0 = 1$，一次抽得的噪声为 $\epsilon = 0.5$。

$$x_2 = \sqrt{0.64}\times 1 + \sqrt{0.36}\times 0.5 = 0.8 + 0.3 = 1.1.$$

给定 $x_0 = 1$ 时，$q(x_2 \mid x_0) = \mathcal{N}(0.8, 0.36)$：均值为 0.8、方差为 0.36、标准差为 0.6；1.1 是这一次的状态值。

实际终端需要信号残留 $\sqrt{\bar{\alpha}_T}\boldsymbol{x}_0$ 足够小、条件协方差接近 $\boldsymbol{I}$，才适合用标准高斯近似初始化。例中的两步只用于核对运算，残留系数 0.8 很大，不能用它说明终端已接近标准高斯。

2 闭式加噪与高斯后验

恢复边缘与后验；时间有限可跳至第3节。

独立高斯噪声的累计

令 $m_t = \mathbb{E}[\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0]$、$v_t \boldsymbol{I} = Cov(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)$。给定数据后 $m_0 = \boldsymbol{x}_0$、$v_0 = 0$。由单步关系及噪声独立性，

$$m_t = \sqrt{\alpha_t} m_{t-1}, v_t = \alpha_t v_{t-1} + \beta_t.$$

均值递推给出 $m_t = \sqrt{\overline{\alpha}_t} \boldsymbol{x}_0$。若 $v_{t-1} = 1 - \overline{\alpha}_{t-1}$，则

$$v_t = \alpha_t (1 - \overline{\alpha}_{t-1}) + (1 - \alpha_t) = 1 - \overline{\alpha}_t.$$

初始条件成立，故归纳得到全部时间的方差。独立高斯的线性组合仍为高斯，均值和协方差已确定其分布，所以得到闭式边缘。也可将所有步的噪声合为等效 $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$。

这里方差相加使用了独立性；乘以 $\sqrt{\alpha_t}$ 后，方差乘以 α_t。

条件后验的两个高斯因子

固定 $t > 1$，给定 $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_t$，待求变量记为 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}_{t-1}$。Bayes 关系为

$$q(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) = \frac{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{y}) q(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{x}_0)}{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)}.$$

分母与 $\boldsymbol{y}$ 无关，只影响归一化。下方蓝色为一步转移约束，琥珀色为累计边缘信息：

$$q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{y}) \propto \exp\left[-\frac{\|\boldsymbol{x}_t - \sqrt{\alpha_t}\boldsymbol{y}\|^2}{2\beta_t}\right], \quad q(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{x}_0) \propto \exp\left[-\frac{\|\boldsymbol{y} - \sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0\|^2}{2(1-\bar{\alpha}_{t-1})}\right].$$

乘积的指数相加。两个平方项都关于同一个未知量 $\boldsymbol{y}$，可合并为一个二次型，再通过配方读出后验。

二次型配方读出后验参数

沿用蓝色一步转移与琥珀色累计边缘，分别贡献下式第一、第二项。展开并保留与 $\boldsymbol{y}$ 有关的项：

$$-2\log q(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) = A\|\boldsymbol{y}\|^2 - 2\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{y} + C_y,\ A = \frac{\alpha_t}{\beta_t} + \frac{1}{1-\bar{\alpha}_{t-1}},\ \boldsymbol{b} = \frac{\sqrt{\alpha_t}}{\beta_t}\boldsymbol{x}_t + \frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}}{1-\bar{\alpha}_{t-1}}\boldsymbol{x}_0.$$

C_y 表示与 $\boldsymbol{y}$ 无关的项。由 $A > 0$ 配方：

$$A\|\boldsymbol{y}\|^2 - 2\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{y} = A\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}/A\|^2 - \|\boldsymbol{b}\|^2/A.$$

比较高斯指数可得：协方差为 $A^{-1}\boldsymbol{I}$，均值为 $\boldsymbol{b}/A$。

累计系数给出后验参数

取精度倒数得方差，信息向量除以精度得均值；利用 $\alpha_t + \beta_t = 1$ 化简：

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

后验数值与末步边界

沿用 $\beta_1 = \beta_2 = 0.2$、$x_0 = 1$、$x_2 = 1.1$。在 $t = 2$ 时，

$$\tilde{\beta}_2 = \frac{0.2\times0.2}{0.36} = \frac{1}{9}, \tilde{\mu}_2 = \frac{\sqrt{0.8}\times0.2}{0.36}(1 + 1.1) \approx 1.043498.$$

这个后验描述“已知 x_0 与 x_2 时，中间 x_1 的不确定性”，其方差 $1/9$ 与前向单步方差 0.2 不同。

在 $t = 1$ 时，条件已含 $\boldsymbol{x}_0$，待求的也是 $\boldsymbol{x}_0$。

后验退化为给定数据点，因此 $\tilde{\beta}_1 = 0$。

此时 $1 - \bar{\alpha}_0 = 0$，不能直接代入前页的非退化配方或高斯KL。

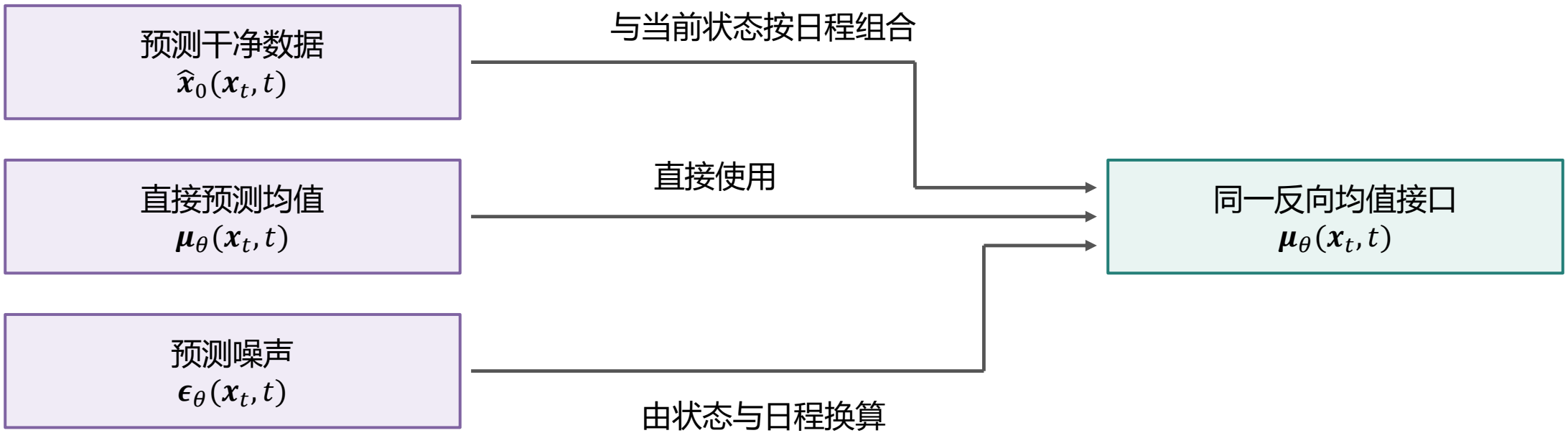
训练目标对 $t = 1$ 单独使用数据重建似然。生成时真实 $\boldsymbol{x}_0$ 未知，末步结果由学得模型产生。

3 噪声预测与学习接口

连接噪声标签、训练目标与模型均值。

反向均值的三种预测参数化

在已知当前状态和噪声日程时，不同预测量都可换算为反向模型均值。本页先给接口，具体后验关系稍后给出。

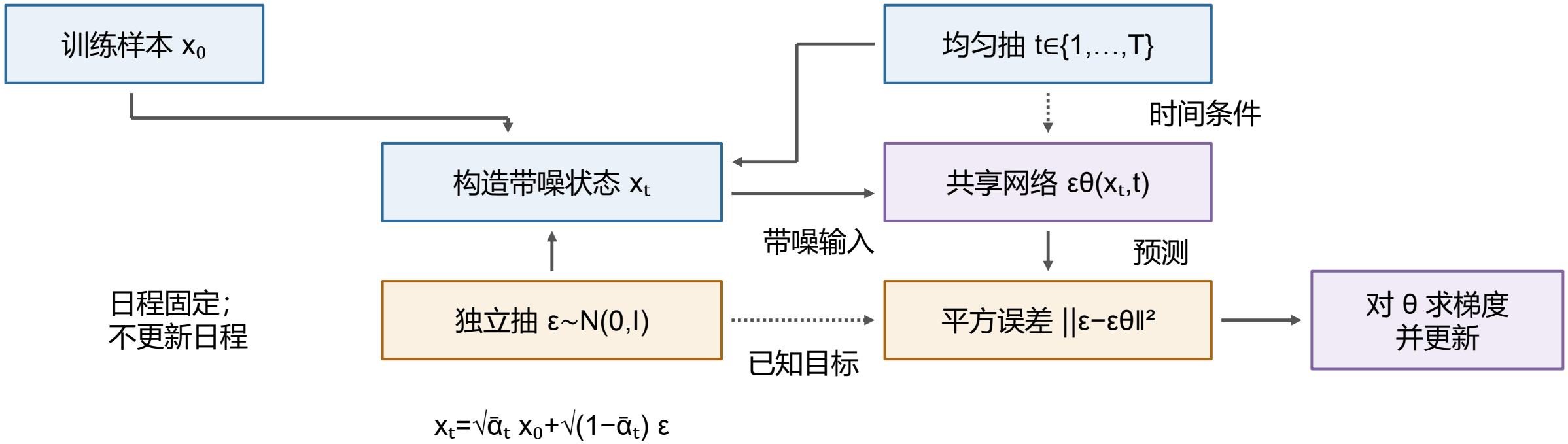


DDPM选择噪声预测：训练标签可随加噪直接构造，并能与变分目标中的均值误差建立联系。它是参数化选择。

在固定时间、系数非退化时，三种输出可以代数换算；分别采用无权MSE时，会产生不同的时间权重。

噪声预测的一次训练更新

噪声预测网络 $\epsilon_\theta(x_t, t)$ 的输入是带噪状态和时间，输出与数据形状相同。一次简化训练项如下：



$$L_{\text{simple}} = \mathbb{E}_{x_0,t,\epsilon}\|\epsilon - \epsilon_\theta(x_t, t)\|^2$$

重复抽时间，使网络学习各噪声等级。一次只构造一个时间的训练项，无需生成完整前向或反向路径。

Algorithm 1：训练时抽时间而非走反向链

据 Ho 等，Alg.1，p.4，arXiv:2006.11239v2 译写。固定 T、日程及累计系数，重复以下更新：

1. 抽真实样本 $\boldsymbol{x}_0 \sim p_{\text{data}}$、时间 $t \sim \text{Uniform}\{1, \ldots, T\}$ 与独立噪声 $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$。
2. 直接构造所抽时间的状态：

$$\boldsymbol{x}_t = \sqrt{\overline{\alpha}_t}\,\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{1 - \overline{\alpha}_t}\,\boldsymbol{\epsilon}.$$

3. 对下式取梯度下降步，只更新 θ：

$$\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\|^2.$$

输出训练后的参数。每次抽到的时间可以不同，算法没有把本次状态依次推进到下一时间。

预测量确定反向模型均值

采用固定反向方差 $\sigma_t^2 > 0$，中间步骤的模型为

$$p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t), \sigma_t^2 \boldsymbol{I}), \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right].$$

本讲构造例统一选 $\sigma_t^2 = \beta_t$。训练使预测噪声接近已知标签；这个参数化把噪声预测误差转成反向均值误差，因而把回归学习接到生成分布。它不是逐步找回某次加入的真实噪声。

训练后验与末步结论接口

训练可用后验在 $t > 1$ 为 $\mathcal{N}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t, \tilde{\beta}_t \boldsymbol{I})$，其中

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

后验提供目标中的比较对象，模型均值只消费 $\boldsymbol{x}_t, t$ 和参数。$t = 1$ 的训练条件后验退化，目标改用重建似然。

负ELBO包含三类目标项

沿用GM02，ELBO是对数似然下界，负ELBO取其相反数，训练最小化它。把 $\boldsymbol{x}_{1:T}$ 看成潜变量，负ELBO依次包含终端先验匹配、中间转移匹配与负重建对数似然三类项：

$$
\begin{aligned}
L_{\mathrm{vb}}(\boldsymbol{x}_0) = & \quad D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{x}_T \mid \boldsymbol{x}_0) \| p(\boldsymbol{x}_T)) \\
& + \sum_{t=2}^{T} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)} D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) \| p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)) \\
& - \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{x}_1 \mid \boldsymbol{x}_0)} \log p_\theta(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{x}_1).
\end{aligned}
$$

时间权重与简化回归

固定日程与先验时，终端项不依赖 θ，但可以非零。固定反向方差下，中间项中依赖参数的部分为

$$\mathbb{E}[w_t\|\boldsymbol{\epsilon}-\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t,t)\|^2], w_t=\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2\alpha_t(1-\overline{\alpha}_t)}, t>1.$$

均匀抽时间的无权 L_{simple} 改变这些时间权重，并把末步也纳入噪声回归。原论文的离散像素解码似然与该简化处理还存在近似关系；两者不能逐项视为同一目标。

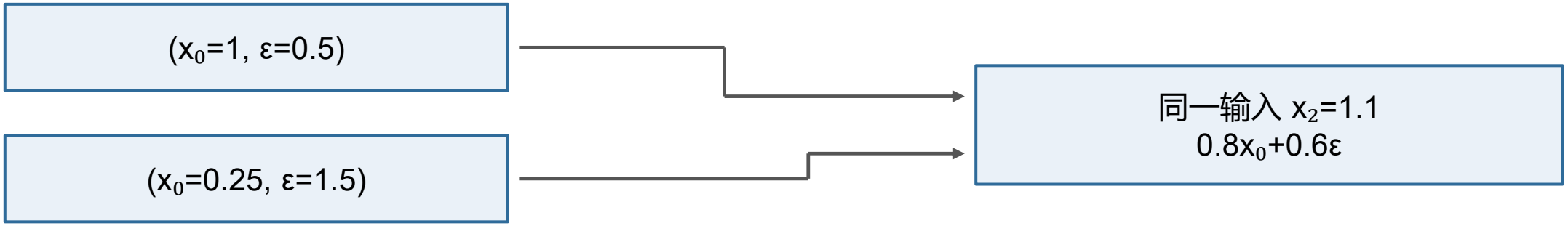
一次训练的噪声标签与梯度

构造例的 $x_2 = 1.1$、$\epsilon = 0.5$。若当前网络给出 $\epsilon_\theta(1.1,2) = 0.2$，则这一次训练损失为

$$\ell = (0.5 - 0.2)^2 = 0.09, \frac{\partial \ell}{\partial \epsilon_\theta} = 2(0.2 - 0.5) = -0.6.$$

梯度通过网络的链式求导传给参数；它不要求真实噪声成为网络的额外输入。

理想回归预测是条件平均



同一时间；不同来源

同一个带噪输入可能来自不同数据与噪声组合。给定输入 $X = (\boldsymbol{x}_t, t)$，平方损失满足

$$\mathbb{E}[\|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{f}(X)\|^2 \mid X] = \mathbb{E}[\|\boldsymbol{\epsilon} - \mathbb{E}(\boldsymbol{\epsilon} \mid X)\|^2 \mid X] + \|\mathbb{E}(\boldsymbol{\epsilon} \mid X) - \boldsymbol{f}(X)\|^2.$$

交叉项因条件均值为零而消失。因此理想回归函数是 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon} \mid \boldsymbol{x}_t, t]$，网络近似这个函数；一次训练标签仍是实际抽得的噪声。

4 从ELBO到去噪目标

推导路径ELBO与噪声权重；可跳至第5节。

路径潜变量的变分下界

在 GM02 的 $p_\theta(x,z)$ 中，用数据 $\boldsymbol{x}_0$ 对应 x，用整条路径 $\boldsymbol{x}_{1:T}$ 对应 z。这里变分分布是固定的前向路径 $q(\boldsymbol{x}_{1:T} \mid \boldsymbol{x}_0)$。

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}_0) = \mathbb{E}_q \log \frac{p_\theta(\boldsymbol{x}_{0:T})}{q(\boldsymbol{x}_{1:T}|\boldsymbol{x}_0)}, \log p_\theta(\boldsymbol{x}_0) = \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_0) + D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{x}_{1:T} \mid \boldsymbol{x}_0) \| p_\theta(\boldsymbol{x}_{1:T} \mid \boldsymbol{x}_0)).$$

在相应支持、可积及 KL 有限条件下，KL 非负，故 $\mathcal{L}$ 为对数似然下界。最小化 **负 ELBO** $L_{\mathrm{vb}} = -\mathcal{L}$，等价于最大化该下界。

展开前向与反向联合概率

$$L_{\mathrm{vb}} = \mathbb{E}_q \left[-\log p(\boldsymbol{x}_T) + \sum_{t=1}^{T} \log \frac{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1})}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)} \right].$$

等号来自前向与反向联合概率的乘积分解。这里的期望仍对整条前向路径计算；ELBO 的有限随机估计不保证逐次为对数似然下界；负 ELBO 的估计也不保证逐次为负对数似然上界。

Bayes关系产生边缘对数差

等价变换：Bayes恒等改写，暂不求和。

对 $t > 1$，将后验 Bayes 关系重新排列：

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

取对数后，中间项分成后验 / 模型之比，以及相邻时间的边缘对数之差：

$$\log \frac{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_{t-1})}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)} = \log \frac{q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0)}{p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)} + \log q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0) - \log q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_0).$$

相邻边缘项相消后留下末步

记 $a_s = \log q(\boldsymbol{x}_s \mid \boldsymbol{x}_0)$。先观察三步展开，再回到一般求和：

$(+a_2 - a_1)$ $+(a_3 - a_2)$ $= a_3 - a_1$

$+a_2$ 与 $-a_2$ 消去；保留两端

原 t=1 项：$+a_1 - \log p\theta(x_0|x_1)$

$-a_1$ 与 $+a_1$ 抵消

留下重建项：$-\log p\theta(x_0|x_1)$

相邻边缘项求和时相消：

$$\sum_{t=2}^{T}[\log q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0) - \log q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_0)] = \log q(\boldsymbol{x}_T \mid \boldsymbol{x}_0) - \log q(\boldsymbol{x}_1 \mid \boldsymbol{x}_0).$$

原来 $t = 1$ 的项含 $+\log q(\boldsymbol{x}_1 \mid \boldsymbol{x}_0)$，恰好抵消末尾的负项。剩余末步项为 $-\log p_\theta(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{x}_1)$。

条件期望得到三类目标项

代入相消结果。固定 $\boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0$ 后，对 $\boldsymbol{x}_{t-1}$ 求条件期望，后验与模型的对数比成为KL。

$$L_{\mathrm{vb}} = L_T + \sum_{t=2}^{T} L_{t-1} + L_0,$$

$$L_T = D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{x}_T \mid \boldsymbol{x}_0) \| p(\boldsymbol{x}_T)),$$

固定真实数据后，把中间条件KL记为 $K_t(\boldsymbol{x}_t)$：

$$K_t(\boldsymbol{x}_t) = D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t, \boldsymbol{x}_0) \| p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)), t > 1.$$

$$L_{t-1} = \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0)}[K_t(\boldsymbol{x}_t)], t > 1.$$

$$L_0 = -\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{x}_1 \mid \boldsymbol{x}_0)} \log p_\theta(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{x}_1).$$

中间KL可解析计算。外层对带噪状态的平均用抽样估计。

全数据目标还需对 $p_{\mathrm{data}}(\boldsymbol{x}_0)$ 平均。训练时以样本近似该平均。

终端常数不等于零

固定日程与先验使 L_T 不依赖网络参数。构造例 $q(x_2 \mid x_0 = 1) = \mathcal{N}(0.8, 0.36)$，相对 $\mathcal{N}(0,1)$ 的 KL 为

$$\frac{1}{2}[0.8^2 + 0.36 - 1 - \log 0.36] \approx 0.510826.$$

所以“优化时可忽略”与“数值为零”是两件不同的事。

固定反向方差下的高斯 KL

等价变换：固定方差，分离参数相关项。

对 $t > 1$，训练后验与模型都是非退化的 d 维各向同性高斯。其 KL 为

$$D_{\mathrm{KL}}(\mathcal{N}(\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t, \tilde{\beta}_t \boldsymbol{I}) \| \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_\theta, \sigma_t^2 \boldsymbol{I})) = \frac{1}{2}\left[d\left(\frac{\tilde{\beta}_t}{\sigma_t^2} - 1 + \log \frac{\sigma_t^2}{\tilde{\beta}_t} \right) + \frac{\left\| \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_\theta \right\|^2}{\sigma_t^2} \right].$$

固定日程、固定反向方差时，方差比和对数项均不含 θ。记这些项为 C_t，则

$$L_{t-1} = \mathbb{E}\left[\frac{1}{2\sigma_t^2} \left\| \tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) \right\|^2 \right] + C_t.$$

学习因此可集中在模型均值如何接近训练后验均值。若反向方差也学习，C_t 及分母通常含参数，不能按本页删去。

消去真实数据并合并系数

等价变换：代数消元，仍是训练后验。

从闭式加噪关系解出真实数据：

$$\boldsymbol{x}_0 = \frac{\boldsymbol{x}_t - \sqrt{1-\overline{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}}{\sqrt{\overline{\alpha}_t}}.$$

代入已推得的后验均值。来自 $\boldsymbol{x}_0$ 项的 $\boldsymbol{x}_t$ 系数为 $\beta_t/[\sqrt{\alpha_t}(1-\overline{\alpha}_t)]$。再加上原有 $\boldsymbol{x}_t$ 项，总系数为

$$\frac{\beta_t + \alpha_t(1-\overline{\alpha}_{t-1})}{\sqrt{\alpha_t}(1-\overline{\alpha}_t)} = \frac{1-\overline{\alpha}_t}{\sqrt{\alpha_t}(1-\overline{\alpha}_t)} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}.$$

噪声项的系数为 $-\beta_t/[\sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\overline{\alpha}_t}]$，所以

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\overline{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}\right].$$

噪声参数化定义模型均值

模型选择：用网络输出定义模型均值；随后计算均值差。

用网络预测替代式中的真实噪声，定义模型均值 $\boldsymbol{\mu}_\theta$。相减得到

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}_t - \boldsymbol{\mu}_\theta = \frac{\beta_t}{\sqrt{\alpha_t}\sqrt{1-\overline{\alpha}_t}}(\boldsymbol{\epsilon}_\theta - \boldsymbol{\epsilon}).$$

这一步是参数化选择；它建立学习预测与生成均值的关系，不保证模型等于真实反向条件分布。

时间权重与简化MSE

等价变换得到加权目标；去掉时间权重属于目标改变。

把均值差代入固定方差 KL，得到

$$w_t = \frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2 \alpha_t (1-\overline{\alpha}_t)}, t > 1.$$

$$L_{t-1} = \mathbb{E}[w_t \|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\|^2] + C_t, t > 1.$$

若仅考虑中间项，均匀抽 $t \in \{2, \dots, T\}$ 时，

$$\sum_{t=2}^{T} \mathbb{E}[\, w_t \|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta\|^2] = (T-1)\mathbb{E}_{t,\boldsymbol{\epsilon}}[w_t \|\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_\theta\|^2].$$

总体正比例因子 $T-1$ 不改变最优点；去掉随时间变化的 w_t 则改变目标。原 DDPM 的简化训练均匀抽 $1, \dots, T$，使用无权噪声误差。

同一数值核对两种误差表达

构造例取 $t=2$、$\sigma_2^2=\beta_2=0.2$，则 $w_2=0.347222$。网络预测 0.2、实际噪声 0.5 时，

$$w_2(0.5-0.2)^2=0.03125.$$

对应 $\mu_\theta\approx 1.155302$、$\tilde{\mu}_2\approx 1.043498$，均值误差项同样为 $(\tilde{\mu}_2-\mu_\theta)^2/(2\times 0.2)=0.03125$。方差差异产生的常数仍是 KL 的一部分。

连续教学模型的末步似然

L_0 是重建负对数似然。对于本讲的连续标量 / 向量教学模型，可以明确选择

$$p_\theta(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{x}_1) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_1, 1), \sigma_1^2 \boldsymbol{I}), \sigma_1^2 = \beta_1 > 0.$$

于是

$$L_0 = \mathbb{E} \frac{\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_1, 1)\|^2}{2\sigma_1^2} + \frac{d}{2} \log(2\pi\sigma_1^2).$$

末步噪声误差与离散像素边界

因 $\boldsymbol{x}_1 = \sqrt{\alpha_1}\boldsymbol{x}_0 + \sqrt{\beta_1}\boldsymbol{\epsilon}$，代入均值参数化得

$$\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_1, 1) = \sqrt{\frac{\beta_1}{\alpha_1}}(\boldsymbol{\epsilon}_\theta - \boldsymbol{\epsilon}).$$

因此此连续模型的末步也能写成带权噪声误差；这一结论来自似然，而非零方差后验 KL。

原 DDPM 对离散像素使用各像素取值区间内的高斯积分作为解码概率。无权噪声回归在该末步涉及近似；不能把连续高斯密度的公式直接称作原论文精确的离散似然。

5 反向生成算法

由高斯开始，经噪声预测、均值计算与随机采样递减时间。

从标准高斯开始逐步生成

据 Ho 等，Alg.2，p.4，arXiv:2006.11239v2 译写。固定训练完成的网络参数：

1. 抽初始状态 $\boldsymbol{x}_T \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$。

2. 对 $t = T, T-1, \ldots, 1$，使用当前状态和时间计算均值并更新状态：

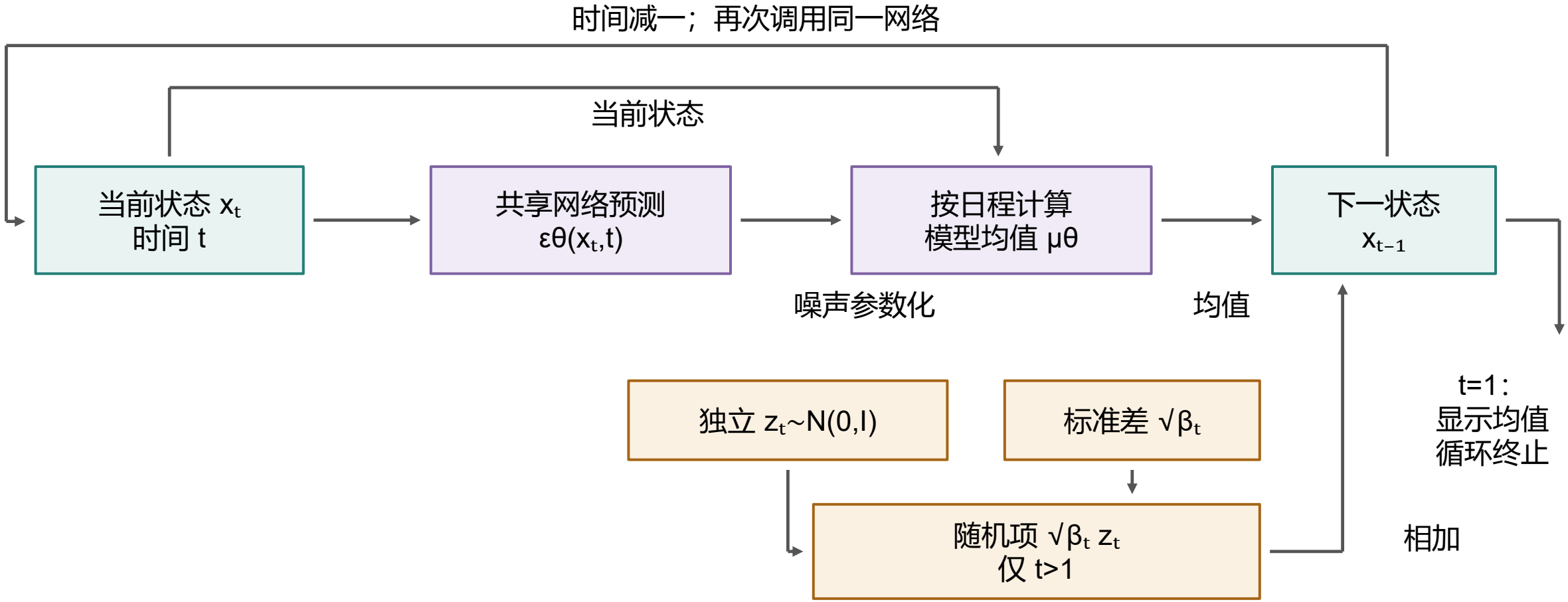
$$\boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left[\boldsymbol{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)\right], \boldsymbol{x}_{t-1} = \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) + \sigma_t \boldsymbol{z}_t.$$

本讲固定 $\sigma_t^2 = \beta_t$，更新时的随机源按时间选择：

- 当 $t > 1$，独立抽 $\boldsymbol{z}_t \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$。
- 当 $t = 1$，按 DDPM Algorithm 2 令 $\boldsymbol{z}_1 = 0$，显示预测均值作为最终样本。

生成步骤只使用当前状态、时间、固定日程、学得网络和规定随机源。$\boldsymbol{x}_0$ 在循环结束前是待生成结果，真实训练样本和本次加噪噪声都不进入此算法。

预测量、分布参数与下一状态



预测、均值和状态的区别

三个量分别承担不同职责：

- 网络输出 ϵ_θ 是预测向量。
- μ_θ 是反向分布的均值。
- x_{t-1} 是实际更新的状态。

同一预测均值在中间步骤可因新噪声而产生不同状态。

本讲 DDPM 采样依赖逐步更新；从这一采样器随意删去部分步骤会改变状态分布，不能自动获得有效的少步算法。

真实生成的开始、中间与最终预测



同一行、同一次生成的第1 / 11 / 20列摘录，按原顺序从左到右：**开始的预测杂乱 → 中间显出轮廓 → 最右形成飞机细节。**

图中是最终图像预测，不是带噪状态；下一页用公式对应。

来源：Ho 等，Fig.6 / 式(15)，p.7，arXiv:2006.11239v2。原图未标各列具体时间；这是论文结果，本课未运行模型。

论文图像与采样状态的对应



早期 / 中期 / 末期的 $\hat{x}_0$ 预测；非 x_t 状态

图中显示的是各时刻对最终图像的预测 $\hat{\boldsymbol{x}}_0$，不是算法迭代的带噪状态 $\boldsymbol{x}_t$。预测由当前状态与噪声网络计算：

$$\hat{\boldsymbol{x}}_0 = \frac{\boldsymbol{x}_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t)}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}.$$

前页左图已经是早期状态经网络计算出的预测，不能标成初始化的纯噪声。第1 / 11 / 20列按论文顺序摘录，原文未标具体时间。

6 反向采样机制

推导采样更新并核对数值；可跳至第7节。

均值加随机扰动实现高斯采样

给定当前状态 $\boldsymbol{x}_t$，模型均值 $\boldsymbol{\mu}_\theta$ 为已确定向量。若 $\boldsymbol{z}_t \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$，则仿射变换

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\mu}_\theta + \sigma_t \boldsymbol{z}_t$$

仍为高斯，并且

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{Y} \mid \boldsymbol{x}_t] = \boldsymbol{\mu}_\theta, Cov(\boldsymbol{Y} \mid \boldsymbol{x}_t) = \sigma_t^2 \boldsymbol{I}.$$

因此中间步骤的 $\boldsymbol{Y}$ 正是模型 $p_\theta(\boldsymbol{x}_{t-1} \mid \boldsymbol{x}_t)$ 的样本。代入噪声均值参数化及本讲 $\sigma_t^2 = \beta_t$，得到

$$\boldsymbol{x}_{t-1} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left[\boldsymbol{x}_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1 - \overline{\alpha}_t}} \boldsymbol{\epsilon}_\theta(\boldsymbol{x}_t, t) \right] + \sqrt{\beta_t} \boldsymbol{z}_t, t > 1.$$

方差也可另选，例如 $\tilde{\beta}_t$；那会改变随机项和学习目标中的权重，必须一致声明。当前公式及算例始终采用 β_t。

一次反向更新的计算

比较用构造值：$x_2 = 1.1$、$\epsilon_\theta(1.1,2) = 0.2$，$\alpha_2 = 0.8$、$\overline{\alpha}_2 = 0.64$、$\beta_2 = 0.2$。

$$\mu_\theta = \frac{1.1 - (0.2/0.6)\times 0.2}{\sqrt{0.8}} \approx 1.155302.$$

若此步新抽得 $z_2 = -0.5$，则

$$x_1 = 1.155302 + \sqrt{0.2}\times(-0.5) \approx 0.931695.$$

预测、均值和采样状态的数值身份

数值	身份
0.2	网络噪声预测
1.155302	当前模型均值
0.931695	加入新随机项后的状态
1.043498	给定真实 $x_0 = 1$ 后的训练后验均值，仅用于对照

生成更新的两行计算没有使用真实 x_0 或训练噪声 $\epsilon = 0.5$。这里复用一个状态值来核对公式，不声称构造例是训练成功的生成结果。

最后一步的显示约定与误差来源

连续教学模型可以为末步规定正方差的解码分布 $p_\theta(\boldsymbol{x}_0 \mid \boldsymbol{x}_1)$。若要严格从该分布抽样，仍应加入其随机项。DDPM Algorithm 2 的图像显示流程在 $t = 1$ 置 $\boldsymbol{z}_1 = 0$，最终使用

$$\boldsymbol{x}_{\text{out}} = \boldsymbol{\mu}_\theta(\boldsymbol{x}_1, 1).$$

它是末步输出的约定，不是对正方差解码高斯执行完整随机抽样，也不是因为生成时知道真实数据。

生成效果还受到以下因素影响：

- 终端先验与前向终端分布的近似程度会影响生成效果。
- 固定高斯反向模型及网络预测的误差会影响结果。
- 所采用的采样更新与步数也会影响结果。

更多步骤增加网络调用次数，其效果需结合模型和采样器判断。

7 时间条件网络与算法闭环

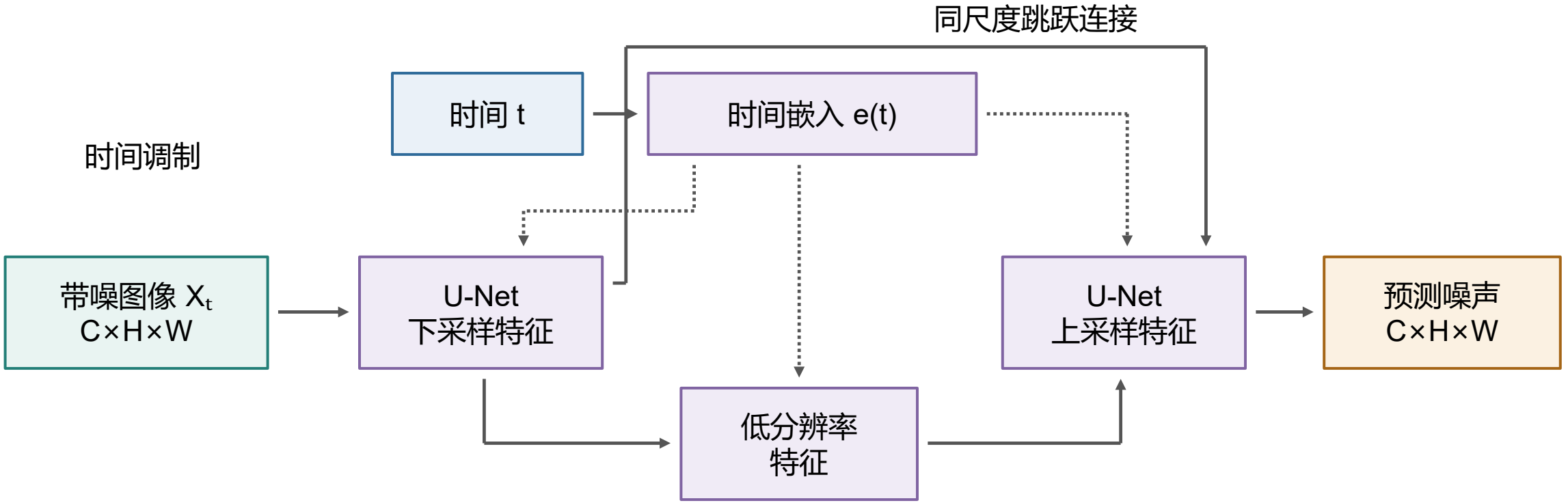
回收时间条件、网络和训练生成的计算职责。

时间条件与图像张量接口

不同时间对应不同噪声水平，同一数值状态在不同时间可能需要不同预测。网络因此同时接收 $\boldsymbol{x}_t$ 与时间条件 t。

图像实现可将状态写为张量 $\boldsymbol{X}_t \in \mathbb{R}^{C\times H\times W}$，三个轴为通道、高、宽；输出噪声预测具有相同形状。展平后对应前文的 $d = CHW$ 维向量。

时间条件U-Net的空间与调制路径

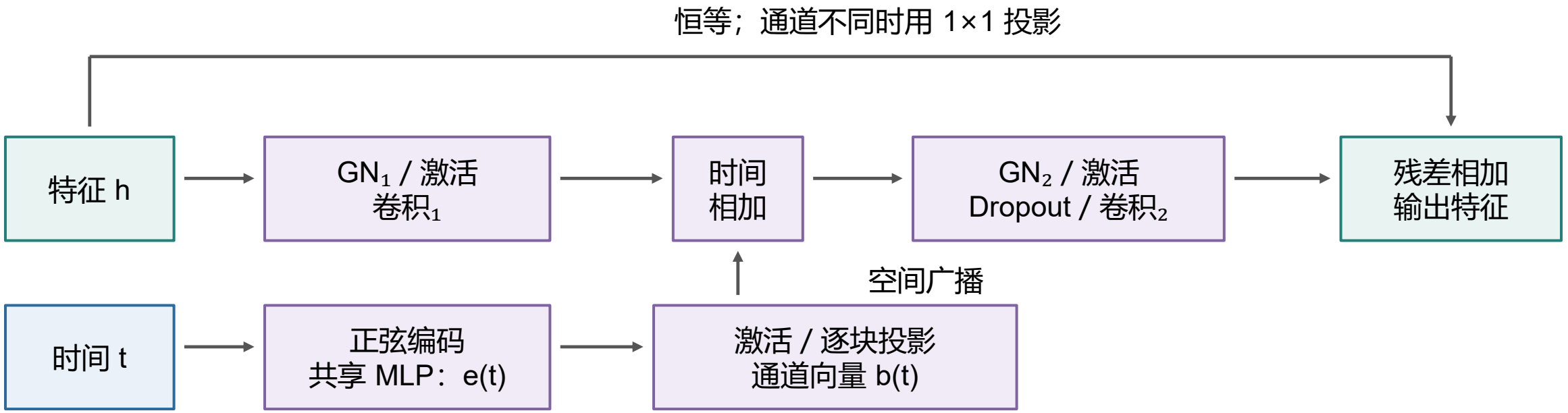


各尺度为接口示意，未规定层数；所有时间共用 θ

时间嵌入将时间转换成网络可消费的向量；原 DDPM 使用正弦式时间嵌入。它说明当前噪声等级。U-Net 的跨尺度计算处理空间信息，跳跃连接传递细节；网络骨干、学习目标和采样规则分别承担不同职责。

时间嵌入进入残差块的计算

时间在第一层卷积之后、第二次归一化之前加性注入。局部图对应作者实现，省略注意力与部分细节。

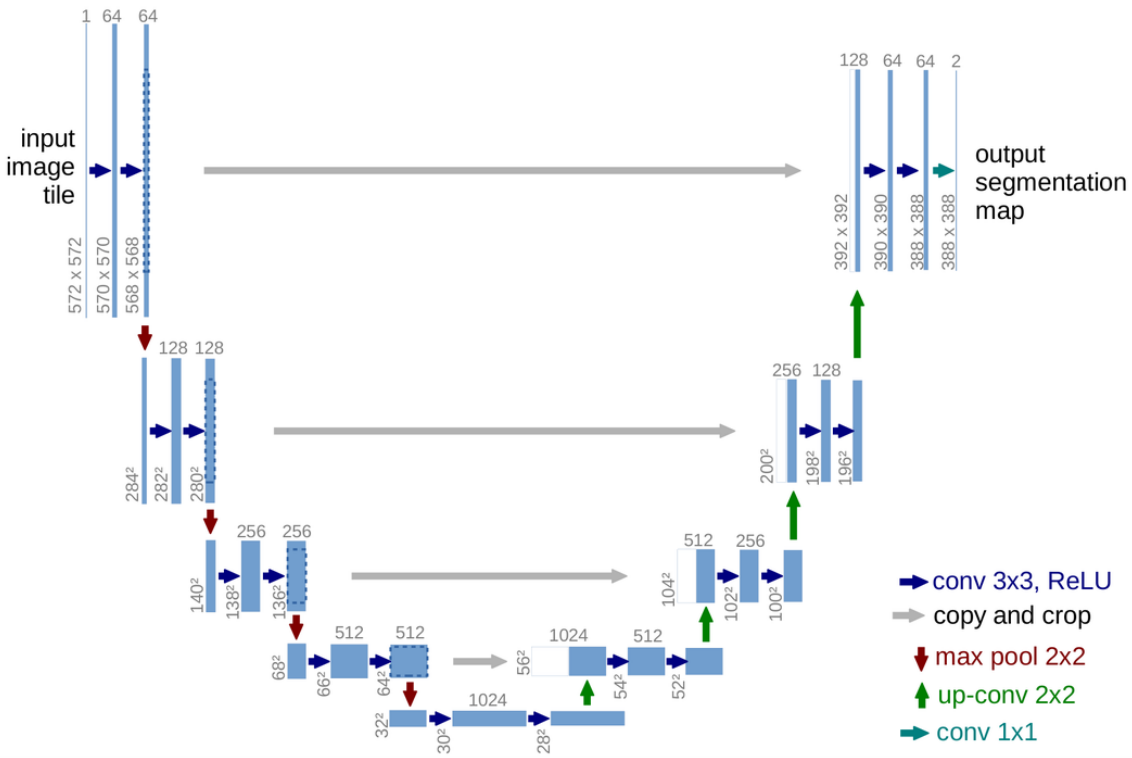


$$U'_{c,i,j} = U_{c,i,j} + b_c(t), \boldsymbol{b}(t) = \boldsymbol{W}\phi(\boldsymbol{e}(t)) + \boldsymbol{b}_0.$$

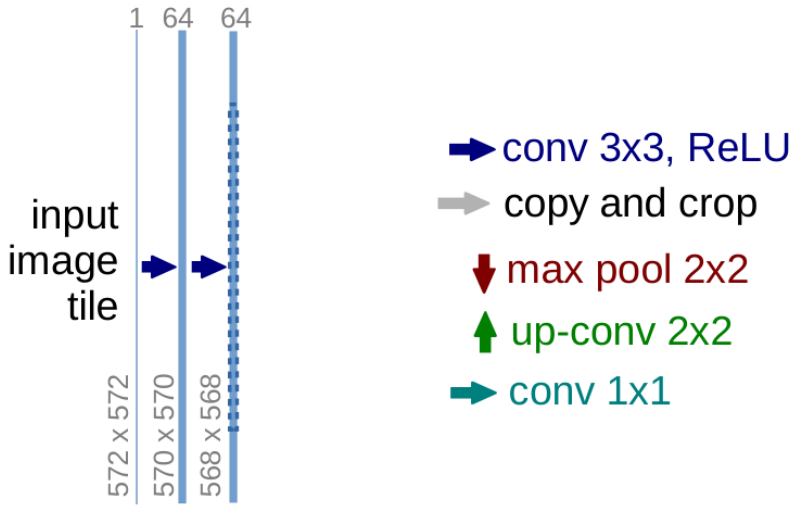
各残差块共享时间嵌入输入，但投影参数各自独立；这些参数在不同时间之间复用。

来源：Ho 等作者代码 diffusion_tf/models/unet.py，resnet_block / model；通道优先记法为课程转写。

原始U-Net架构与DDPM适配的边界



局部：原图操作图例



局部：首层通道 / 尺寸

原图用于生物医学分割：下采样 → 低分辨率 → 上采样；横向复制同尺度特征。
原图没有扩散时间输入；通道和尺寸属于该例。DDPM并非原图照搬。
DDPM适配：噪声预测、时间条件、残差块、组归一化及注意力。

原图：Ronneberger 等，Fig.1，p.2，arXiv:1505.04597v1；适配：Ho 等，§4 / 附录B，2006.11239v2

训练更新与生成迭代

关系	训练的一次更新	生成的一次完整过程
起点	真实数据、随机时间和加噪噪声	标准高斯初始状态
状态产生	直接构造所抽时间的带噪状态	当前状态经反向采样得到下一状态
网络使用	预测噪声，计算平方误差	预测噪声，确定反向模型均值
参数	由损失梯度更新	固定训练完成的参数
时间组织	重复抽取不同时间的训练项	从 T 依次递减到 1

训练的随机时间抽样让共享网络接触整个时间范围；生成则依赖前一步实际得到的状态，两者的计算关系不同。

对于当前逐步调用的 DDPM，生成计算量大致由“调用次数 × 单次网络计算量”决定。改变骨干会影响单次成本，改变采样器会影响调用组织；两者不能只用一个步数概括。

本讲总结

- 固定前向过程使训练状态可构造。独立高斯递推得到累计均值和方差，给定真实数据后可通过配方计算中间后验。
- 路径ELBO经Bayes关系与边缘项相消，分为终端先验、中间KL和末步重建。固定反向方差时，中间KL的可学习部分是带权噪声误差；无权MSE改变时间权重。
- 噪声预测经参数化确定反向均值。中间采样再加入规定的随机项，从先验逐步更新状态；最后一步按显示约定输出均值。
- 时间条件使共享网络服务不同噪声等级。训练使用真实数据及可知噪声更新参数，生成固定参数并使用当前状态。

恢复整个机制时，需保持四组区别：四类分布的条件集合；方差与标准差；真实噪声与网络预测；分布均值与采样状态。