现有的基于扩散的生成模型已被证明可以融合到一个称为 EDM 的统一设计空间中。然而，EDM 仅限于高斯噪声扩散，且不包括其他类型的噪声扩散过程的方法。尽管 EDM 将多种理论框架统一到一个共享设计空间中，并具有灵活的结构参数，例如噪声调度和训练目标，但其依赖纯高斯噪声的特性阻止了诸如流匹配和冷扩散等支持不同扩散过程的方法之间的整合，例如图中所示。从 A 转换到 B 的图像变换需要将扩散噪声图案从高斯噪声扩展到残差域（$B-A$）。因此，增加噪声图案的灵活性并构建一个更加包容的设计空间仍然是一个开放挑战。与生成相比，高灵活性扩散噪声模式在图像修复方面提供了更大的优势。当限制于高斯噪声时，普通扩散基础的修复方法 [14, 16, 17, 9] 从噪声损坏的降质图像或纯噪声图开始逆过程，逐步将其恢复到目标域。然而，这种强制噪声注入带来了两个关键限制：(1) 降质图像由于加入的噪声损坏而失去特定任务的信息，(2) 如图 **??** 所示，施加的噪声人为地增加了图像转换距离和修复复杂性。通过定制扩散噪声模式并直接从任务中已知的降质图像启动逆过程，可以减少这一距离，从而简化修复。相反，生成任务缺乏可利用的降质图像。因此，高灵活性扩散噪声模式对于修复任务至关重要，但在统一的 EDM 框架 [8] 中尚未解决这一问题。本文阐明了具备任意噪声模式的扩散模型的设计空间，称为 EDA。EDA 通过多变量高斯分布来描述扩散过程，我们的研究在理论上证明了其有能力扩散任意噪声模式。该框架通过多变量高斯分布对扩散后的噪声建模，并由多个独立的维纳过程驱动的随机微分方程（SDE）推导而来。通过求解概率流常微分方程（PFODE），我们得出了确定性采样规则。我们的研究表明，当从简单高斯噪声推广到复杂模式时，EDA 不会带来额外的计算成本。EDA 在三个恢复任务上进行了评估：MRI 偏置场校正（全局平滑噪声）、CT 金属伪影去除（全局尖锐噪声）和自然图像阴影去除（局部边界感知噪声）。在少于 5 的采样步骤下，EDA 的性能可与 100 步骤的基于 EDM 的方法媲美，超越了特定任务的方法，并在偏置场校正和阴影去除方面达到了最先进的效果。

EDM [8] 阐明了基于扩散的生成模型的统一设计空间，并在结构参数如噪声调度和训练目标上具有显著的灵活性。但 EDM 受到单一扩散噪声模式纯高斯噪声的限制。前向过程由随机微分方程（SDE）定义：

其中 $x \in \mathbb{R}^d$ 表示时间 t 的数据样本，$f(t): \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 和 $g(t): \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是漂移和扩散系数，ω_t 表示标准维纳过程。信号缩放函数 $s(t)$ 和噪声水平函数 $\sigma(t)$ 表示噪声调度，其被推导为 $s(t) = e^{\int_0^t f(r)\,\mathrm{d}r}$ 和 $\sigma(t) = \sqrt{\int_0^t \frac{g^2(r)}{s^2(r)}\,\mathrm{d}r}$ 。这导致在时间 t 时的扰动分布：

$$p_t(\boldsymbol{x}_t \mid \boldsymbol{x}_0) = \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_t;\, s(t)\boldsymbol{x}_0\,, s^2(t)\sigma^2(t)\boldsymbol{I}\right) \tag{1}$$

其中 $x_0 \sim p_{data}$ 是干净的数据样本，$\mathcal{N}(\cdot)$ 表示高斯分布，$\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵。确定性概率流常微分方程（PFODE）表示为：

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \left[\frac{s'(t)}{s(t)}\boldsymbol{x} - s^2(t)\sigma'(t)\sigma(t)\nabla_{\boldsymbol{x}} \log p\left(\frac{\boldsymbol{x}}{s(t)}; \sigma(t)\right)\right]\mathrm{d}t \tag{2}$$

其中 $s'(t) \triangleq \mathrm{d}\, s(t)/\mathrm{d}\, t$ ，$\sigma'(t) \triangleq \mathrm{d}\,\sigma(t)/\mathrm{d}\, t$ ，以及得分函数 $\nabla_{\boldsymbol{x}} \log p(\cdot)$ 被去噪器 $D(\boldsymbol{x};\sigma)$ 参数化为：

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \log p(\boldsymbol{x};\sigma) = \frac{D\left(\frac{\boldsymbol{x}}{s(t)};\sigma\right) - \frac{\boldsymbol{x}}{s(t)}}{s(t)\sigma^2(t)} \tag{3}$$

EDM 通过以下方式训练去噪器 $D(\boldsymbol{x};\sigma)$ ：

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0 \sim P_{data}} \mathbb{E}_{\boldsymbol{x} \sim P(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{y})} \|D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) - \boldsymbol{x}_0\|^2 \tag{4}$$

该 $D(\boldsymbol{x};\sigma)$ 定义为：

$$D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) = c_{skip}(\sigma)\boldsymbol{x} + c_{out}(\sigma)F_\theta(c_{in}(\sigma)\boldsymbol{x}; c_{noise}(\sigma)) \tag{5}$$

其中 F_θ 是可训练的神经网络，$c_{skip}(\sigma)$ ，$c_{out}(\sigma)$ ，$c_{in}(\sigma)$ 和 $c_{noise}(\sigma)$ 是超参数。$c_{skip}(\sigma)$ 和 $c_{out}(\sigma)$ 依赖于 F_θ 的训练目标和噪声添加策略 $f(\cdot), g(\cdot)$ 。$c_{in}(\sigma)$ 将输入数据缩放到一个标准化区间，$c_{noise}(\sigma)$ 编码时间信息。将得分函数方程 3 代入 PFODE 方程 2 ，得到最终的确定性采样规则：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)\boldsymbol{x} - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D_\theta\left(\frac{\boldsymbol{x}}{s(t)};\sigma\right) \tag{6}$$

综上所述，方程 1 中的噪声计划 $s(\cdot), \sigma(\cdot)$ 和方程 5 中的 F_θ 的训练目标是任意的。这种高度的灵活性允许框架统一几乎所有基于扩散的生成方法。例如，当 $s(t) = \sqrt{\bar{\alpha}_t}$ ，$\sigma(t) = \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}/\sqrt{\bar{\alpha}_t}$ ，以及 $F_\theta(x_t, t)$ 的训练目标是 x_t 中的噪声映射 ϵ 时，DDPM [6] 和

DDIM [21] 是 EDM 的特例。虽然 EDM 提供了理论上的统一性，但其单一扩散噪声模式引入了关键的限制。(1) 方程式 1 中的封闭形式扰动核将扩散限制为由像素独立性和均质性描述的纯高斯噪声，无法支持任意噪声模式。(2) 在最初状态 x_T 是退化图像 P_{LQ} 的恢复任务中，然而基于 EDM 的方法 [16, 9, 17, 14] 引入了人为的恢复间隙，因为其最初状态必须包括高斯噪声 $P_{LQ} + N_{Gaus}$ 。我们的 EDA 通过增加扩散噪声模式的灵活性同时保持结构参数的灵活性来解决这一问题。

最近在扩散模型方面的进展将扩散噪声从纯高斯噪声扩展到任意噪声模式，但 EDM 作为一个统一设计空间无法包容它们。流匹配 [13] 通过构建连续概率路径，实现了任意分布之间的转换，直接模拟从初始噪声分布 $p_1(x)$ 到目标数据分布 $p_0(x)$ 的确定性传输，通过条件路径 $\pi_t(x|x_0)$ 。其关键创新在于通过连续归一化流（CNFs）设计向量场，使样本 $x_0 \sim p_0$ 沿着这些路径演化到 x_1 。相比之下，冷扩散 [1] 用确定性降解算子 $D(\cdot)$ 替代了高斯噪声，并通过恢复算子 $R(\cdot)$ 训练网络进行反演 $D(\cdot)$ 。这些工作表明扩散模型的优势在于其渐进的变换框架，而不是特定的噪声类型。流动匹配的概率路径和冷扩散的确定性算子展示了不同的扩散过程。继前人的工作之后，本文将这些扩散媒介称为广义噪声。我们的 EDA 阐明了一个设计空间，该空间包含具有任意噪声模式的扩散模型，将基于 EDM 的方法位置为纯高斯噪声下的特例。

本文提出了一种新颖的设计空间 EDA，将简化的扩散设计空间（EDM）推广到能够启用任意噪声模式，同时保持结构参数的灵活性。具体而言，第 **??** 节和 0.1 节介绍了基于多元高斯分布的理论框架 EDA，从而增加了扩散噪声模式的灵活性。随后，命题 1 证明了 EDA 具有实现任意噪声扩散的能力。

普通的扩散模型依赖于逐像素独立的高斯噪声，以其简单性和易于建模为特点，但它本质上限制了扩散模式的多样性。相比之下，我们的 EDA 通过不受限制的协方差参数化的任意基函数和随机性权重，引入了具有高度自由度和多样化扩散过程的新颖扩散噪声模式。设 $x_0 \sim P_{data}$ 为数据分布。EDA 中的扩散噪声 N 定义为：

$$N = \sum_{m=1}^{M} \frac{\eta + \epsilon_m}{\eta + 1} h_{m,\boldsymbol{x}_0} \tag{7}$$

，其中 $H_{\boldsymbol{x}_0} = [h_{1,\boldsymbol{x}_0}, ..., h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$ 是调整噪声模式的基集，每个 $h_{m,\boldsymbol{x}_0}$ 在维度上与 x_0 对齐，$\epsilon_1, ..., \epsilon_M \sim \mathcal{N}(0,1)$ 是独立的高斯变量，$\eta \geq 0$ 是调整扩散噪声随机性的中介。基函数 H_{x_0} 可以任意预定义，并不需要严格正交（见附录 3 ），从而能够灵活地进行噪声建模。参数 η 控制噪声的随机性：当 $\eta = 0$ 时，噪声为最大随机性；当 $\eta \to +\infty$ 时，噪声变为确定性。广义的前向过程被表述为：

$$\boldsymbol{x}_t = s(t)\boldsymbol{x}_0 + s(t)\sigma(t) \sum_{m=1}^{M} \frac{\epsilon_m + \eta}{\eta + 1} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \tag{8}$$

，其中 $s(t)$ 缩放信号并且 $\sigma(t)$ 安排噪声强度。$s(t)$ 和 $\sigma(t)$ 的定义同等式 1 ，只不过将扩散噪声 N 从高斯噪声替换为等式 7 。相应的分布为：

$$P(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0) = \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_t;\, s(t)\boldsymbol{x}_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta + 1} \sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}0},\, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0}\right) \tag{9}$$

，具有协方差 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0} = H_{\boldsymbol{x}_0} H_{\boldsymbol{x}_0}^\top$ 。不像 EDM 在等式 1 中的对角协方差，EDA 的 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0}$ 通过预定义基集 $H_{\boldsymbol{x}_0}$ 捕捉结构化噪声，丰富了噪声模式和扰动空间。对应 EDA 的广义前向过程方程 9 ，我们的前向过程由由多个独立维纳过程驱动的 SDE 控制：

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = [f(t)\boldsymbol{x} + \phi_{\boldsymbol{x}_0}(t)]\,\mathrm{d}t + g(t) \sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} \mathrm{d}\omega_t^{(m)} \tag{10}$$

，其中 $f(\cdot), g(\cdot) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 和 $\phi(\cdot) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^d$ ，$\mathrm{d}\omega_t^{(1)}, ..., \mathrm{d}\omega_t^{(M)}$ 是独立的维纳增量。项 $f(t)$ ，$g(t)$ 和 $\phi_{\boldsymbol{x}_0}(t)$ 直接映射到尺度 $s(t)$ 、噪声安排 $\sigma(t)$ 和基集 $H_{\boldsymbol{x}_0}$ （见附录 **??** ），这确保了方程 10 的 SDE 与前向过程方程 9 一致：

$$f(t) = \frac{s'(t)}{s(t)}, \quad g(t) = \frac{s(t)}{\eta + 1} \sqrt{\frac{\mathrm{d}\sigma^2(t)}{\mathrm{d}t}}, \quad \phi_{\boldsymbol{x}_0}(t) = \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta + 1} \sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} \tag{11}$$

我们的 EDA 将噪声扩散推广到超越纯高斯噪声，并且我们的 SDE 框架支持各种噪声扩散，拓宽了复杂损坏过程的适用性。

0.1 通过 PFODE 进行确定性采样

本节介绍了用于 EDA 的概率流常微分方程 [22] (PFODE)，其与具有不同扩散过程的 SDE 方程 10 共享相同的解空间。然后，基于 PFODE 推导出 EDA 的确定性采样公式。我们的 PFODE 的显著特点是，从时间 a 到 b （时间正向或逆向）演化一个样本 $x_a \sim P(x_a|x_0)$ 产生一个样本 $x_b \sim p(x_b|x_0)$ 。EDA 的 PFODE 推导为（见附录 3 ）:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = f(t)\boldsymbol{x} + \phi_{\boldsymbol{x}_0}(t) - \frac{1}{2}g^2(t)\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0}\nabla_{\boldsymbol{x}}\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_0) \tag{12}$$

其中 $f(t)$ 、$g(t)$ 和 $\phi_{\boldsymbol{x}_0}(t)$ 的具体形式见方程 11 。$\nabla_{\boldsymbol{x}}\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_0)$ 定义为得分函数 [22] ，其来源于分布方程 9 的概率密度函数（见附录 3 ）:

$$\nabla \boldsymbol{x}\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_0) = \frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0}^{-1}\left[s(t)\boldsymbol{x}_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0} - \boldsymbol{x}\right] \tag{13}$$

使用去噪器 D_θ 计算得分函数 $\nabla_{\boldsymbol{x}}\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_0)$ ，并将 $f(t)$ 、$g(t)$ 和 $\phi_{\boldsymbol{x}_0}(t)$ 用方程 11 代入到 PFODE 方程 12 中得到确定性更新规则（见附录 4 ）:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)\boldsymbol{x} - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) \tag{14}$$

去噪器 $D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma)$ 通过以下方式训练:

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0\sim P_{data}}\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim P(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{y})}\|D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) - \boldsymbol{x}_0\|^2 \tag{15}$$

其中 $D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma)$ 的定义与方程 5 相同为:

$$D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) = c_{skip}(\sigma)\boldsymbol{x} + c_{out}(\sigma)F_\theta(c_{in}(\sigma)\boldsymbol{x};c_{noise}(\sigma)) \tag{16}$$

其中 $F_\theta(x_t,t)$ 具有灵活的训练目标，如干净图像、扩散噪声 [6, 21] 、速度场 [13] 、得分函数 [22] 。EDA 的最终训练过程在算法 1 中提供。本文采用与 DDPM [6] 和 DDIM [21] 相同的训练目标，其网络预测扩散噪声，$F_\theta(\cdot) \approx N$ 。与 Heun 的 2$^{\text{nd}}$ 方法或高阶求解器相比，Euler 的 1$^{\text{st}}$ 方法计算量较小，并因其简单性仍广泛采用 [6, 21, 22, 13] 。因此，算法 2 基于 Euler 的 1$^{\text{st}}$ 方法提供了 EDM 的确定性采样过程。

Algorithm 1 EDA 训练过程采用任意的扩散噪声模式 N 。

Require: P_{data} , H , η , $\sigma(t)$, $s(t)$, time training strategies P_{time} , training step N ,

1: Initialize the neural network $F_\theta(\cdot)$
2: **for** training step $s \in \{1,\dots,N\}$ **do**
3: Sample data $\boldsymbol{x}_0 \sim P_{data}$
4: Sample time $t \sim P_{time}$
5: Get basis set $H_{\boldsymbol{x}_0} = [h_{1,\boldsymbol{x}_0},...,h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$
6: Sample diffusion data $\boldsymbol{x}_t \sim \mathcal{N}\left(s(t)\boldsymbol{x}_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{x}_0}\right)$
7: Compute loss function:

$$\mathcal{L} = \|D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma) - \boldsymbol{x_0}\|^2$$

8: Update network parameters with $\nabla_\theta\mathcal{L}$
9: **end for**
10: **return** $D_\theta(\cdot)$ ▷ Return trained denoiser

Proposition 1. *EDA 支持扩散和消除任意噪声。*

证明。EDA 通过一个不受约束的基组 $H_{\boldsymbol{x}_0} = [h_{1,\boldsymbol{x}_0},...,h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$ 实现适应任意噪声模式，该基组控制扩散过程的协方差。下面，正式呈现三个代表性案例:

Case 1 统一基集（最优情况）。这种情况代表了 EDA 的最优配置（见附录 5 ），当噪声可以分解为一个固定的基集 H ，与数据样本 x_0 无关，使得对任何 $\forall j \sim P_{data}$ ，$H = H_j$ 成立，并且协方差 $\Sigma = HH^\top$ 在样本之间保持不变。例如，在 MRI 偏置场校正中（图 **??** ），平滑的偏置场可以由一系列低频基函数 $H = [h_1,...,h_M]$ 表示，其中每个 h_m 是一个与 x_0 无关的平滑模板（附录 **??** ）。然而，固定基集的假设是有限制的，限制了实际应用。

Algorithm 2 使用欧拉法的确定性采样。

Require: $D_\theta(x;\sigma)$, $\sigma(t)$, $s(t)$, time steps $t_{i\in\{0,\dots,N\}}$

1: Get initial sample $x_T \sim P_{LQ} \approx P(\boldsymbol{x}_T|\boldsymbol{x}_0)$
2: **for** $i \in \{T,\dots,1\}$ **do**
3: Evaluate $\mathrm{d}x/\mathrm{d}t$ at t_i :

$$d_i \leftarrow \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)\boldsymbol{x}_t - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D_\theta(\boldsymbol{x};\sigma)$$

4: Update with Euler step:

$$x_{i-1} \leftarrow x_i + (t_{i-1} - t_i)d_i$$

5: **end for**
6: **return** x_0 ▷ Return noise-free sample

Case 2 样本依赖的基函数（一般情况）。这种情况普遍适用。当噪声模式不能分解为固定的基集时，$H_{\boldsymbol{x}_0}$ 变得依赖于样本。举个简单的例子，把一个图像 $\boldsymbol{A}$ 映射到其退化的对应图像 $\boldsymbol{B}$ ，此时基集简化为 $H_{\boldsymbol{A}} = [\boldsymbol{B} - \boldsymbol{A}]$ 。与案例 1 不同，案例 2 使用去噪器在确定性采样过程中的近似最佳输出（见附录 4 ）。应用包括 CT 中的金属伪影减少（MAR）和自然图像中的阴影去除（附录 6.2 、**??** ）。

Case 3 通过离散采样的非高斯噪声。尽管这种情况是情况二的一个特殊实例，它解决了因非高斯噪声分布 P_{noise} （如泊松噪声）引起的潜在混淆。通过离散化实验场景，假设一个离散样本 $N_1 \sim P_{noise}$ ，并且我们的扩散噪声被构建为 $N_2 = \frac{\epsilon+\eta}{\eta+1}\boldsymbol{h}$ ，其中 $\boldsymbol{h} \sim P_{noise}$ 和 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$ 。通过调整适当的 η ，N_1 和 N_2 在离散空间中共享相同的分布，从而使 EDA 在实践中支持除高斯噪声外的随机噪声。

Proposition 2. *扩散噪声模式的高灵活性并不会增加采样复杂性。*

证明。EDA 在确定性采样和去噪器训练目标上与 EDM 对齐。尽管 EDA 中的扩散过程包含一个任意协方差矩阵 $\Sigma_{\boldsymbol{x}_0}$ ，与 EDM 的对角协方差 $\sigma^2(t)\boldsymbol{I}$ 形成对比，这引入了额外的项在 $P(\boldsymbol{x}_t|\boldsymbol{x}_0)$ 中（方程 1 对比 9 ），在 SDE（方程 **??** 对比 10 ），在 PFODE（方程 2 对比 12 ），以及在得分函数（方程 3 对比 13 ）。值得注意的是，这些额外项可以通过分析简化并移除（附录 4 ），得到我们的与 EDM 对齐的确定性采样公式方程 14 ）。此外，去噪器是使用相同的目标来训练的，如方程 4 和 15 所示。

Proposition 3. *EDM 是我们 EDA 的一个特例。*

证明。EDM [8] 在特定参数配置下是 EDA 的一个严格子集，如图 **??** 所示。当参数设置为：(1) 中介 $\eta = 0$ ；(2) 基组 $H = [E_{1,1},...,E_{H,W}]$ ，其中每个 $E_{i,j}$ 是一个矩阵，在位置 (i,j) 的值为 1 ，其他位置为 0 时。EDA 方程 7 中的扩散噪声简化为像素级独立高斯噪声：

$$\boldsymbol{N} = \sum_{i,j} \epsilon_{i,j} E_{i,j}, \quad \epsilon_{i,j} \sim \mathcal{N}(0,1) \tag{17}$$

这与 EDM 中的噪声模式相同。因此，扩散过程简化为：

$$\boldsymbol{x}_t = s(t)\boldsymbol{x}_0 + s(t)\sigma(t)\boldsymbol{N}, \quad \boldsymbol{N} \sim \mathcal{N}(0,\boldsymbol{I}) \tag{18}$$

这与 EDM 的加性高斯干扰方程 1 是相同的。前向过程和确定性采样进一步与 EDM 分别对齐。

1 实验

我们的 EDA 已在三种不同且具有代表性的图像复原任务上进行了评估。使用少于 5 的采样步骤，EDA 优于大多数特定任务的方法，并在偏置场校正和阴影去除方面实现了最先进的性能。

选择了三个不同的复原任务进行评估，具有代表性的噪声如图 **??** 所示：(1) 全局平滑噪声，(2) 全局锐利噪声，(3) 具有边界的局部噪声。

任务 1：偏置场校正（BFC）是 MRI 处理中的一个关键步骤。去除的偏置场是全局平滑的，可用于均匀化 MRI 强度，提高图像质量，并改善诊断准确性。本文使用了来自人类连接组计划（HCP）的临床数据集 [24] 。经过预处理后，有 2206 张切片用于训练和验证，1000 张切片用于测试。

任务 2：金属伪影消减（MAR）是 CT 扫描中对有金属植入物患者的不可避免任务。金属会导致 CT 中投影数据的丢失和全局锐利条纹伪影，影响临床分析 [19] 。根据 [11, 12, 18, 30, 32] ，我们的研究使用 100 金属掩码从 DeepLesion [29] 中模拟金属伪影。训练集为 1000 张图像配有 90 掩码，测试集为 200 张图像配有 10 掩码。

任务 3：阴影去除（SR）的目标是恢复具有边界的局部阴影区域，改善图像质量并有利于计算机视觉任务 [20, 31] 。本文使用了 ISTD 数据集 [28] ，其中包含 1330 张训练图像和 540 张测试图像。我们的 EDA 是在 PyTorch 中开发的，并在一台 NVIDIA GeForce RTX 3090 GPU 上进行训练。参数设置为 $s(t)=1$ ，$\sigma=\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}$ ，其中 $\bar{\alpha}_t$ 是 DDPM [6] 中的超参数。训练过程中的总步数为 $T=100$ 。训练时间策略标记为 $P_{time}\sim U(0,T)$ 。对于 BFC，调节器 $\eta=0$ ，基组集 H 被设置为命题 1 中的案例 1。输入的 MRI 为 256×256 ，并在 500 个时期内以 1 的批量大小进行训练。对于 MAR 和 SR，$\eta=10$ 和基组集 H 遵循命题 1 中的案例 2。输入的 CT 为 416×416 ，经过 1000 个时期的训练，批量大小为 1 。影像为 $256\times256\times3$ ，经过 2000 个时期的训练，批量大小为 4 。具体实验设置见附录 6 。

我们的 EDA 与任务特定方法进行了比较。BFC 方法包括 N4 [23] ，MICO [10] ，LapGM [25] ，ABCNet [2] 。MAR 包括 LI [7] ，CNNMAR [32] ，DSCMAR [30] ，DuDoNet [12] ，InDuDoNet+ [27] ，DICDNet [26] ，这些都是双域（正弦和图像域）使用。SR 包括 G2R [15] ，DHAN [3] ，Fu 等人 [4] ，Zhu 等人 [34] ，BMNet [33] ，ShadowFormer [5] 。

此外，实验包括 Refusion [17] ，一种代表性的基于高斯扩散的恢复方法，以及优化版本的 IRSDE [16] 。Refusion 在 CVPR NTIRE 影子移除挑战赛中总排名第二（感知指标中排名第一）。所有结果均引用自原始出版物或使用其官方实现复现，主评估指标为峰值信噪比（PSNR）和结构相似性（SSIM）。

1.1 实验结果

定性和定量结果表明，我们的 EDA 在修复中更高效、更准确。仅使用 5 个采样步骤，EDA 就超过了 100 步的 Refusion 和大多数任务特定的方法，在 BFC 和 SR 中达到 SOTA 性能。

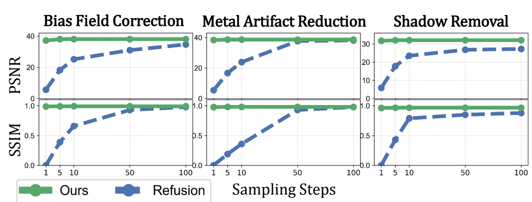

Figure 1: 我们的 EDA 样本在少于 5 步的情况下实现或甚至超越了 100 步时的 Refusion 采样。

磁共振成像中的偏置场校正。定量（表格 **??** ）和定性结果（图 **??** ）证明我们的 EDA 有效去除了偏置场。灰质（GM）和白质（WM）的相关系数（COCO）和变异系数（CV）也进行了报告。EDA 显著提升了校正精度，这通过最高的 PSNR、SSIM 和 COCO 得到了证明。此外，WM 和 GM 的最低 CV 反映了 EDA 在组织内具有最均匀的强度。值得注意的是，EDA 的修复速度为 0.182 秒/切片，明显快于 Refusion 的 9.665 秒/切片。图 1 显示 EDA 需要更少的采样步骤，同时产生更准确的结果。图 **??** 显示了我们校正图像的卓越保真度和预测偏置场的高准确性（图 **??** 中的第二行）。CT 中的金属伪影去除。定量（表 **??** ）和定性结果（图 **??** ）表明我们的 EDA 有效降低了金属伪影，表现出具有竞争力的性能，准确恢复了组织结构。值得注意的是，所有 MAR 特定的方法都使用双域（正弦和图像域）信息进行恢复，而我们的 EDA 和 Refusion 仅依赖于图像域信息。性能在跨金属大小分层的五个测试数据组中进行了全面评估。仅使用图像域，我们的 EDA 比几种双域方法表现更好，这表明我们的 EDA 具有强大的图像恢复性能，但 EDA 与顶级双域方法之间仍存在小的性能差距。此外，EDA 的 5 步采样的总体结果在表 **??** 中优于 100 步的 Refusion，并且 EDA 的采样速度和性能显著优于 Refusion，如图 1 所示。

自然图像中的阴影去除。定量（表 **??** ）和定性（图 **??** ）结果表明，我们的 EDA 最准确地去除了阴影，并提供了非阴影区域最逼真的恢复。此外，还报告了 LAB 颜色空间中的均方根误差（RMSE）。以 PSNR, SSIM 和 RMSE 衡量，我们的方法实现了整体图像的最佳性能，这在图 **??** 中也得到了视觉确认。EDA 恢复模型基于 ShadowFormer，EDA 实现了性能提升，

突出了其有效性。与 Refusion 相比，我们的 EDA 在采样效率和去阴影效果上显著增强，如图 1 所示。

2 结论

本文介绍了 EDA，一种用于图像通用转化的扩散模型统一设计空间，适用于任意噪声模式。EDA 将简单设计空间推广至多元高斯分布，并严格证明其扩散任意噪声模式的能力。此外，我们的研究表明，将 EDM 中使用的简单高斯模式的扩散噪声扩展到更复杂的任意模式不会增加计算开销。EDA 已被验证用于 MRI 偏场校正、CT 金属伪影减少及自然图像阴影消除，并在少于五个步骤内实现了优越的准确性和效率，如图 1 所示。

References

[1] Bansal, A., Borgnia, E., Chu, H.M., Li, J.S., Kazemi, H., Huang, F., Goldblum, M., Geiping, J., Goldstein, T.: Cold diffusion: Inverting arbitrary image transforms without noise. arXiv preprint arXiv:2208.09392 (2022)

[2] Chen, L., Wu, Z., Hu, D., Wang, F., Smith, J.K., Lin, W., Wang, L., Shen, D., Li, G., Consortium, U.B.C.P., et al.: Abcnet: Adversarial bias correction network for infant brain mr images. Medical image analysis **72**, 102133 (2021)

[3] Cun, X., Pun, C.M., Shi, C.: Towards ghost-free shadow removal via dual hierarchical aggregation network and shadow matting gan. In: Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. vol. 34, pp. 10680–10687 (2020)

[4] Fu, L., Zhou, C., Guo, Q., Juefei-Xu, F., Yu, H., Feng, W., Liu, Y., Wang, S.: Auto-exposure fusion for single-image shadow removal. In: Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. pp. 10571–10580 (2021)

[5] Guo, L., Huang, S., Liu, D., Cheng, H., Wen, B.: Shadowformer: Global context helps image shadow removal. arXiv preprint arXiv:2302.01650 (2023)

[6] Ho, J., Jain, A., Abbeel, P.: Denoising diffusion probabilistic models. Advances in Neural Information Processing Systems **33**, 6840–6851 (2020)

[7] Kalender, W.A., Hebel, R., Ebersberger, J.: Reduction of ct artifacts caused by metallic implants. Radiology **164**(2), 576–577 (1987)

[8] Karras, T., Aittala, M., Aila, T., Laine, S.: Elucidating the design space of diffusion-based generative models. Advances in neural information processing systems **35**, 26565–26577 (2022)

[9] Kawar, B., Elad, M., Ermon, S., Song, J.: Denoising diffusion restoration models. Advances in Neural Information Processing Systems **35**, 23593–23606 (2022)

[10] Li, C., Gore, J.C., Davatzikos, C.: Multiplicative intrinsic component optimization (mico) for mri bias field estimation and tissue segmentation. Magnetic Resonance Imaging **32**, 913–923 (2014). https://doi.org/10.1016/j.mri.2014.03.010

[11] Liao, H., Lin, W.A., Zhou, S.K., Luo, J.: Adn: artifact disentanglement network for unsupervised metal artifact reduction. IEEE Transactions on Medical Imaging **39**(3), 634–643 (2019)

[12] Lin, W.A., Liao, H., Peng, C., Sun, X., Zhang, J., Luo, J., Chellappa, R., Zhou, S.K.: Dudonet: Dual domain network for ct metal artifact reduction. In: Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. pp. 10512–10521 (2019)

[13] Lipman, Y., Chen, R.T., Ben-Hamu, H., Nickel, M., Le, M.: Flow matching for generative modeling. arXiv preprint arXiv:2210.02747 (2022)

[14] Liu, J., Wang, Q., Fan, H., Wang, Y., Tang, Y., Qu, L.: Residual denoising diffusion models. arXiv preprint arXiv:2308.13712 (2023)

[15] Liu, Z., Yin, H., Wu, X., Wu, Z., Mi, Y., Wang, S.: From shadow generation to shadow removal. In: Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. pp. 4927–4936 (2021)

[16] Luo, Z., Gustafsson, F.K., Zhao, Z., Sjölund, J., Schön, T.B.: Image restoration with mean-reverting stochastic differential equations. In: Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning. ICML'23, JMLR.org (2023)

[17] Luo, Z., Gustafsson, F.K., Zhao, Z., Sjölund, J., Schön, T.B.: Refusion: Enabling large-size realistic image restoration with latent-space diffusion models. In: Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. pp. 1680–1691 (2023)

[18] Lyu, Y., Lin, W.A., Liao, H., Lu, J., Zhou, S.K.: Encoding metal mask projection for metal artifact reduction in computed tomography. In: Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention–MICCAI 2020: 23rd International Conference, Lima, Peru, October 4–8, 2020, Proceedings, Part II 23. pp. 147–157. Springer (2020)

[19] Park, H.S., Lee, S.M., Kim, H.P., Seo, J.K., Chung, Y.E.: Ct sinogram-consistency learning for metal-induced beam hardening correction. Medical physics **45**(12), 5376–5384 (2018)

[20] Sanin, A., Sanderson, C., Lovell, B.C.: Improved shadow removal for robust person tracking in surveillance scenarios. In: 2010 20th International Conference on Pattern Recognition. pp. 141–144. IEEE (2010)

[21] Song, J., Meng, C., Ermon, S.: Denoising diffusion implicit models. arXiv preprint arXiv:2010.02502 (2020)

[22] Song, Y., Sohl-Dickstein, J., Kingma, D.P., Kumar, A., Ermon, S., Poole, B.: Score-based generative modeling through stochastic differential equations. arXiv preprint arXiv:2011.13456 (2020)

[23] Tustison, N.J., Avants, B.B., Cook, P.A., Zheng, Y., Egan, A., Yushkevich, P.A., Gee, J.C.: N4itk: improved n3 bias correction. IEEE transactions on medical imaging **29**(6), 1310–1320 (2010)

[24] Van Essen, D.C., Smith, S.M., Barch, D.M., Behrens, T.E., Yacoub, E., Ugurbil, K., Consortium, W.M.H., et al.: The wu-minn human connectome project: an overview. Neuroimage **80**, 62–79 (2013)

[25] Vinas, L., Amini, A.A., Fischer, J., Sudhyadhom, A.: Lapgm: A multisequence mr bias correction and normalization model (9 2022), `http://arxiv.org/abs/2209.13619`

[26] Wang, H., Li, Y., He, N., Ma, K., Meng, D., Zheng, Y.: Dicdnet: Deep interpretable convolutional dictionary network for metal artifact reduction in ct images. IEEE Transactions on Medical Imaging **41**(4), 869–880 (2021)

[27] Wang, H., Li, Y., Zhang, H., Meng, D., Zheng, Y.: Indudonet+: A deep unfolding dual domain network for metal artifact reduction in ct images. Medical Image Analysis **85**, 102729 (2023)

[28] Wang, J., Li, X., Yang, J.: Stacked conditional generative adversarial networks for jointly learning shadow detection and shadow removal. In: Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. pp. 1788–1797 (2018)

[29] Yan, K., Wang, X., Lu, L., Zhang, L., Harrison, A.P., Bagheri, M., Summers, R.M.: Deep lesion graphs in the wild: relationship learning and organization of significant radiology image findings in a diverse large-scale lesion database. In: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. pp. 9261–9270 (2018)

[30] Yu, L., Zhang, Z., Li, X., Xing, L.: Deep sinogram completion with image prior for metal artifact reduction in ct images. IEEE transactions on medical imaging **40**(1), 228–238 (2020)

[31] Zhang, W., Zhao, X., Morvan, J.M., Chen, L.: Improving shadow suppression for illumination robust face recognition. IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence **41**(3), 611–624 (2018)

[32] Zhang, Y., Yu, H.: Convolutional neural network based metal artifact reduction in x-ray computed tomography. IEEE transactions on medical imaging **37**(6), 1370–1381 (2018)

[33] Zhu, Y., Huang, J., Fu, X., Zhao, F., Sun, Q., Zha, Z.J.: Bijective mapping network for shadow removal. In: Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. pp. 5627–5636 (2022)

[34] Zhu, Y., Xiao, Z., Fang, Y., Fu, X., Xiong, Z., Zha, Z.J.: Efficient model-driven network for shadow removal. In: Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence. vol. 36, pp. 3635–3643 (2022)

考虑到 EDA 前向过程：

$$x_t = s(t)x_0 + s(t)\sigma(t)\sum_{m=1}^{M}\frac{\epsilon_m+\eta}{\eta+1}h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \tag{19}$$

及其分布：

$$P\left(x_t \mid x_0\right) = \mathcal{N}\left(x_t;\, s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0},\, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right), \tag{20}$$

其中 $\Sigma_{x_0} = H_{x_0}H_{x_0}^T$ 和 $H_{x_0} = [h_{1,\boldsymbol{x}_0} \quad \ldots \quad h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$。所关联的随机微分方程（SDE）表示为：

$$dx = [f(t)x + \phi(t,x_0)]\,dt + g(t)\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0}dw_t^{(m)}, \tag{21}$$

其中 $dw_t^{(m)}$ 是独立的维纳过程，满足 $\mathbb{E}[dw_t^{(m)}dw_t^{(n)}] = \delta_{mn}dt$ 。系数函数推导如下：

推导：推导分为两部分进行：均值和方差。

前向扩散过程 $P(x_t|x_0)$ 的均值为：

$$\mu(t) = s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0} \tag{22}$$

对于 SDE：

$$\mathrm{d}x = [f(t)x + \phi_{x_0}(t)]\,\mathrm{d}t + g(t)\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0}\mathrm{d}w_t^{(m)} \tag{23}$$

由此差分方程控制均值 $\mu(t)$ ：

$$\frac{\mathrm{d}\mu(t)}{\mathrm{d}t} = f(t)\mu(t) + \phi_{x_0}(t), \quad \mu(0) = x_0 \tag{24}$$

通过使用 $\lambda(t) = \exp\left(-\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau\right)$ 的积分因子法求解这一阶线性非齐次微分方程：

$$\mu(t) = \exp\left(\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau\right)x_0 + \exp\left(\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\int_0^t \phi(\tau)\exp\left(-\int_0^\tau f(s)\mathrm{d}s\right)\mathrm{d}\tau$$

将其等同于 $P(x_t|x_0)$ 的均值，我们得到 $s(t) = \exp\left(\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau\right)$ 。所以我们得到：

$$f(t) = \frac{s'(t)}{s(t)} \qquad \square$$

对于第二项：

$$s(t)\int_0^t \frac{\phi_{x_0}(\tau)}{s(\tau)}\mathrm{d}\tau = \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0} \tag{25}$$

从两边都消去 $s(t)$ 并针对 t 求导：

$$\frac{\phi_{x_0}(t)}{s(t)} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\eta\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0}\right] \tag{26}$$

由于 $\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0}$ 是时间无关的，我们最终得到：

$$\phi_{x_0}(t) = \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0} \qquad \square$$

2.1

2. 方差成分的推导 前向扩散过程的协方差矩阵为：

$$\Sigma(t) = \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}, \quad \text{where } \Sigma_{x_0} = \sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} h_{m,\boldsymbol{x}_0}^\top \tag{27}$$

应用 Itô 引理于 SDE 的协方差矩阵 $\Sigma_S(t)$ ，微分方程得以满足：

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma_S(t)}{\mathrm{d}t} = 2f(t)\Sigma_S(t) + g^2(t)\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} h_{m,\boldsymbol{x}_0}^\top, \quad \Sigma(0) = 0 \tag{28}$$

求解此方程，得到：

$$\Sigma_S(t) = s^2(t)\int_0^t \frac{g^2(\tau)}{s^2(\tau)}\mathrm{d}\tau \cdot \sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} h_{m,\boldsymbol{x}_0}^\top \tag{29}$$

将 $\Sigma_S(t)$ 与前向过程协方差 $\Sigma(t)$ 相等：

$$\frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0} = s^2(t)\int_0^t \frac{g^2(\tau)}{s^2(\tau)}\mathrm{d}\tau \cdot \Sigma_{x_0} \tag{30}$$

从两边消去 $s^2(t)\Sigma_{x_0}$ 得到：

$$\int_0^t \frac{g^2(\tau)}{s^2(\tau)}\mathrm{d}\tau = \frac{\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2} \tag{31}$$

对两边关于 t 求导：

$$\frac{g^2(t)}{s^2(t)} = \frac{1}{(\eta+1)^2}\frac{\mathrm{d}\sigma^2(t)}{\mathrm{d}t} \tag{32}$$

取平方根并解 $g(t)$ ，得到：

$$g(t) = \frac{s(t)}{(\eta+1)}\sqrt{\frac{\mathrm{d}\sigma^2(t)}{\mathrm{d}t}}$$

□

3 推导 EDA 的概率流 ODE

3.1

问题设置 考虑 EDA 的前向过程 SDE：

$$\mathrm{d}x = [f(t)x + \phi_{x_0}(t)]\,\mathrm{d}t + g(t)\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}\mathrm{d}w_t^{(m)} \tag{33}$$

其中：

- $f(t)$ ： 标量漂移系数
- $\phi_{x_0}(t)$ ： 确定性偏置项
- $g(t)$ ： 扩散系数
- $h_{m,\boldsymbol{x}_0}$ ： 基础函数（仅依赖于初始条件 x_0 ）
- $\mathrm{d}w_t^{(m)}$ ： 独立的维纳过程增量

我们的目标是找到对应的概率流 ODE（PFODE）：

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v_{x_0}(x,t) \tag{34}$$

其解保留了原 SDE 的概率分布 $p(x|x_0)$ 。

3.2

通过福克-普朗克框架推导 对于一般的 SDE $\mathrm{d}x_t = \mu(x_t,t)\mathrm{d}t + \bar{\Sigma}(x_t,t)\mathrm{d}w_t$ ，Fokker-Planck 方程（FPE）为：

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla\cdot[\mu p] + \frac{1}{2}\nabla\nabla : [\bar{\Sigma}\bar{\Sigma}^\top p] \tag{35}$$

其中 $\nabla\cdot$ 表示散度，$\nabla\nabla :$ 表示二重散度算子。替换我们的 SDE 系数：

- 漂移项：$\mu(x,t) = f(t)x + \phi_{x_0}(t)$
- 扩散项：$\bar{\Sigma}(x,t) = g(t)\cdot[h_{1,\boldsymbol{x}_0},\ldots,h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$

协方差矩阵变为：

$$\bar{\Sigma}\bar{\Sigma}^\top = g^2(t)\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}h_{m,\boldsymbol{x}_0}^\top \triangleq g^2(t)\Sigma_{x_0} \tag{36}$$

FPE 专化为：

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla\cdot\left[(f(t)x + \phi_{x_0}(t))p\right] + \frac{1}{2}g^2(t)\nabla\nabla : [\Sigma_{x_0}p] \tag{37}$$

3.3

构造 PFODE 概率流 ODE 需要连续性方程：

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla\cdot\left[v_{x_0}(x,t)p\right] = 0 \tag{38}$$

与 FPE 相等，我们得到：

$$\nabla\cdot\left[v_{x_0}p\right] = \nabla\cdot\left[(f(t)x + \phi_{x_0}(t))p\right] - \frac{1}{2}g^2(t)\nabla\nabla : \left[\Sigma p\right] \tag{39}$$

3.3.1

求解速度场 引入得分函数：

$$\bar{s}(x,t) = \nabla_x \ln p(x|x_0) = \frac{\nabla_x p}{p} \tag{40}$$

对于扩散项：

$$\begin{aligned}\nabla\nabla : \left[\Sigma_{x_0}p\right] &= \sum_{i,j}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\left[(\Sigma_{x_0})_{ij}p\right]\\ &= \nabla\cdot[\Sigma_{x_0}\nabla p]\\ &= \nabla\cdot[\Sigma_{x_0}p\nabla\ln p] \quad (\text{using } \nabla p = p\nabla\ln p)\end{aligned}$$

这建立了扩散项与得分函数之间的关键联系。然后我们变换扩散项：

$$\frac{1}{2}\nabla\nabla : \left[\Sigma_{x_0}p\right] = \nabla\cdot\left[\frac{1}{2}\Sigma_{x_0}\nabla p\right] \tag{41}$$

$$= \nabla\cdot\left[\frac{1}{2}\Sigma_{x_0}ps\right] \tag{42}$$

代回，得到：

$$\nabla\cdot\left[v_{x_0}p\right] = \nabla\cdot\left[(f(t)x + \phi_{x_0}(t))p - \frac{1}{2}g^2(t)\Sigma_{x_0}p\bar{s}\right] \tag{43}$$

这识别了速度场：

$$v_{x_0}(x,t) = f(t)x + \phi_{x_0}(t) - \frac{1}{2}g^2(t)\Sigma_{x_0}\bar{s}(x,t) \tag{44}$$

3.4

最终 PFODE 形式 替换 $s(x,t)=\nabla_x \ln p(x,t)$ ，我们得到完整的 PFODE：

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=f(t)x+\phi_{x_0}(t)-\frac{1}{2}g^2(t)\Sigma_{x_0}\nabla_x \ln p(x|x_0) \qquad \square$$

其中 $\Sigma_{x_0}=\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}h_{m,\boldsymbol{x}_0}^{\top}$ 。

4 从 PFODE 推导确定性采样公式

4.1

PFODE 简化 给定概率流 ODE（PFODE）：

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=f(t)x+\phi_{x_0}(t)-\frac{1}{2}g^2(t)\Sigma_{x_0}\nabla_x \ln p(x|x_0) \tag{45}$$

在附录 **??** 中推导的参数关系代入：

$$f(t)=\frac{s'(t)}{s(t)},\quad \phi_{x_0}(t)=\frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0},\quad g^2(t)=\frac{2s^2(t)\sigma(t)\sigma'(t)}{(\eta+1)^2} \tag{46}$$

这样将 PFODE 转换为：

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{s'(t)}{s(t)}x+\frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}-\frac{s^2(t)\sigma(t)\sigma'(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\nabla_{x_t}\log p(x|x_0) \tag{47}$$

4.2

去噪器学习 定义损失函数 $\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t))$ ：

$$\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t))=\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\mu(x_0,t),\bar{\Sigma}(t))}\|D(x;\sigma)-x_0\|^2 \tag{48}$$

其中：

$$\mu(x_0,t)=s(t)x_0+\frac{s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}\eta h_{m,\boldsymbol{x}_0}$$

$$\bar{\Sigma}(t)=\frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}$$

展开 $\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t))$ 得到：

$$\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t))=\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\mu(x_0,t),\bar{\Sigma}(t))}\|D(x;\sigma)-x_0\|^2 \tag{49}$$

$$=\int_{\mathbb{R}^d}\mathcal{N}\left(s(t)x_0+\frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}h_{m,\boldsymbol{x}_0},\frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right)\|D_{x_0}(x;\sigma)-x_0\|^2\mathrm{d}x \tag{50}$$

$$\triangleq\int_{\mathbb{R}^d}\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t),x)\mathrm{d}x \tag{51}$$

然后最小化 $\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t),x)$ 。这个凸优化问题通过将梯度设为零来解决：

$$0=\nabla_{D_{x_0}(x,\sigma)}\mathcal{L}_{x_0}(D;\sigma(t),x) \tag{52}$$

$$0=\nabla_{D_{x_0}(x,\sigma)}\left[\mathcal{N}\left(s(t)x_0+\frac{s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M}\eta h_{m,\boldsymbol{x}_0},\frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right)\|D_{x_0}(x;\sigma)-x_0\|^2\right] \tag{53}$$

$$0=\nabla_{D_{x_0}(x,\sigma)}\|D_{x_0}(x;\sigma)-x_0\|^2 \tag{54}$$

这导致了最优解：

$$D_{x_0}(x;\sigma)=x_0 \tag{55}$$

4.3

得分函数推导 对于条件分布:

$$p(x_t|x_0) = \mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right) \tag{56}$$

然后推导得分函数:

$$\nabla_{x_t}\log p(x_t|x_0) = \frac{\nabla_{x_t}p(x_t|x_0)}{p(x_t|x_0)} \tag{57}$$

$$= \frac{\nabla_{x_t}\mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right)}{\mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right)} \tag{58}$$

$$\tag{59}$$

其中分子是:

$$\nabla_{x_t}\mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right) \tag{60}$$

$$= \mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right) \nabla_{x_t}\left[-\frac{(\eta+1)^2}{2s^2(t)\sigma^2(t)}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x_t\right)^\top \Sigma_{x_0}^{-1} \left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x_t\right)\right] \tag{61}$$

$$= \mathcal{N}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0}, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\right) \left[\frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\Sigma_{x_0}^{-1}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x_t\right)\right] \tag{62}$$

代入得分函数得到:

$$\nabla_{x_t}\log p(x_t|x_0) = \frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\Sigma_{x_0}^{-1}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x_t\right) \tag{63}$$

$$\tag{64}$$

4.4

常微分方程简化 将得分函数代入 PFODE：

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= \frac{s'(t)}{s(t)}x + \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - \frac{s^2(t)\sigma(t)\sigma'(t)}{(\eta+1)^2}\Sigma_{x_0}\left(\frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\Sigma_{x_0}^{-1}\right. \\
&\qquad \left.\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x\right)\right) && (65) \\
&= \frac{s'(t)}{s(t)}x + \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\left(s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_{m,\boldsymbol{x}_0} - x\right) && (66) \\
&= \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)x_t - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}x_0 && (67) \\
&= \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)x_t - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D_{x_0}(x;\sigma) && (68) \\
& && (69)
\end{aligned}
$$

使用均匀网络 $D(x;\sigma)$ 学习所有 $D_{x_0}(x;\sigma)$ ，损失函数为：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}(D;\sigma(t)) &= \mathbb{E}_{y\sim P_{\text{data}}}\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\mu(y,t),\bar{\Sigma}(t))}\|D(x;\sigma) - D_y(x;\sigma)\|^2 && (70) \\
&= \mathbb{E}_{y\sim P_{\text{data}}}\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{N}(\mu(y,t),\bar{\Sigma}(t))}\|D(x;\sigma) - y\|^2 && (71) \\
& && (72)
\end{aligned}
$$

当网络拟合时：

$$
D(x;\sigma) \approx D_y(x;\sigma) = y, \quad \forall y \sim P_{\text{data}} \tag{73}
$$

注意这里的 $\approx$ 存在误差，并不是凸问题的理论最优点。当训练期间误差足够小时，将 $D(x;\sigma)$ 代入简化的 PFODE：

$$
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)x - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D(x;\sigma) \qquad \square
$$

值得注意的是，方程 101 中推导的所有与数据相关的基础 $h_{m,\boldsymbol{x}_0}$ 的项都会完全简化。这使得我们的任何噪声基础的 EDA 确定性采样过程与 EDM 框架方程 6 的完全相同。

5 EDA 的最优案例推导

Proposition 4. *附录 4 中的公式 73 的近似通过在训练收敛时将去噪器输出 $D(x;\sigma)$ 替换为真实训练目标 y 引入误差。然而，当基组与数据样本 x_0 ，$H = [h_1,\ldots,h_M]$ 无关时，这些误差会消失，这与公式 20 中的样本相关基 $H_{x_0} = [h_{1,\boldsymbol{x}_0},\ldots,h_{M,\boldsymbol{x}_0}]$ 形成对比。这代表了 EDA 的最佳情况。*

证明：当基础集合 H 独立于数据样本 x_0 ，PFODE 方程 45 可以使用边际分布 $p(x)$ 替代条件分布 $p(x|x_0)$ ，这更准确地表示了 x_t 的分布。协方差矩阵变为：

$$
\boldsymbol{\Sigma} = \sum_{m=1}^{M} h_m h_m^\top \tag{74}
$$

导出修正的 PFODE：

$$
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = f(t)x + \phi(t) - \frac{1}{2}g^2(t)\boldsymbol{\Sigma}\nabla_x \log p(x) \tag{75}
$$

其系数为：

$$
f(t) = \frac{s'(t)}{s(t)}, \quad \phi(t) = \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \quad g(t) = \frac{s(t)}{\eta+1}\sqrt{\frac{\mathrm{d}\sigma^2(t)}{\mathrm{d}t}} \tag{76}
$$

假设我们的训练集由有限样本 $[y_1, \ldots, y_Y]$ 组成。因此，$p_{\text{data}}(x)$ 由狄拉克 分布的混合表示：

$$p_{\text{data}}(x) = \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\delta(x - y_i) \tag{77}$$

边际分布 $p(x)$ 为：

$$\begin{aligned}
p(x) &= \int_{\mathbb{R}^d} p_{\text{data}}(x_0)\mathcal{N}\left(x; s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\mathrm{d}x_0 &(78)\\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\delta(x_0 - y_i)\mathcal{N}\left(x; s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\mathrm{d}x_0 &(79)\\
&= \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\int_{\mathbb{R}^d} \delta(x_0 - y_i)\mathcal{N}\left(x; s(t)x_0 + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\mathrm{d}x_0 &(80)\\
&= \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}\left(x; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right) &(81)
\end{aligned}$$

现在考虑训练目标：

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(D;\sigma) &= \mathbb{E}_{y\sim p_{\text{data}}}\mathbb{E}_{x\sim p(x|y)}\|D(x;\sigma) - y\|^2 &(82)\\
&= \mathbb{E}_{y\sim p_{\text{data}}}\int_{\mathbb{R}^d}\mathcal{N}\left(s(t)y + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\|D(x;\sigma) - y\|^2\mathrm{d}x &(83)\\
&= \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\int_{\mathbb{R}^d}\mathcal{N}\left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\|D(x;\sigma) - y_i\|^2\mathrm{d}x &(84)\\
&= \int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}\left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)\|D(x;\sigma) - y_i\|^2\mathrm{d}x &(85)\\
&\triangleq \int_{\mathbb{R}^d}\mathcal{L}(D;x,\sigma)\mathrm{d}x &(86)
\end{aligned}$$

我们通过对每个个体 x 最小化 $\mathcal{L}(D;x,\sigma)$ 来最小化 $\mathcal{L}(D;\sigma)$ 。$\mathcal{L}(D;x,\sigma)$ 是一个凸优化问题，其解可以通过令梯度为零来计算：

$$\begin{aligned}
0 &= \nabla_{D(x,\sigma)}\mathcal{L}(D;x,\sigma) &(87)\\
0 &= \nabla_{D(x,\sigma)}\frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)\|D(x;\sigma) - y_i\|^2\mathrm{d}x &(88)\\
0 &= \frac{1}{Y}\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)\nabla_{D(x,\sigma)}\|D(x;\sigma) - y_i\|^2\mathrm{d}x &(89)\\
0 &= \sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)\left[2D(x;\sigma) - 2y_i\right] &(90)\\
D(x;\sigma) &= \frac{\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)y_i}{\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)} &(91)
\end{aligned}$$

其中 $\mathcal{N}(\cdot)$ 表示上一方程 85 中的高斯概率密度函数。将边际分布 $p(x)$ 代入方程 81，得分函数变为：

$$\nabla_{x_t} \log p(x_t) = \frac{\nabla_{x_t} p(x_t)}{p(x_t)} \tag{92}$$

$$= \frac{\nabla_{x_t} \frac{1}{Y} \sum_{i=1}^{Y} \mathcal{N}\left(x_t; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1} \sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)}{\frac{1}{Y} \sum_{i=1}^{Y} \mathcal{N}\left(x_t; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1} \sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)} \tag{93}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{Y} \nabla_{x_t} \mathcal{N}\left(x_t; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1} \sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)}{\sum_{i=1}^{Y} \mathcal{N}\left(x_t; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1} \sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right)} \tag{94}$$

其中 $\nabla_{x_t}\mathcal{N}(\cdot)$ 为：

$$\nabla_{x_t} \mathcal{N}\left(x_t; s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1} \sum_m h_m, \frac{s^2(t)\sigma^2(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\right) \tag{95}$$

$$= \mathcal{N}(\cdot)\nabla_{x_t}\left[-\frac{(\eta+1)^2}{2s^2(t)\sigma^2(t)}\left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right)^\top \mathbf{\Sigma}^{-1} \left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right)\right] \tag{96}$$

$$= \mathcal{N}(\cdot)\left[\frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right)\right] \tag{97}$$

将 $\nabla_{x_t}\mathcal{N}(\cdot)$ 代入方程 94 得：

$$\nabla_{x_t} \log p(x_t) = \frac{\sum_{i=1}^{Y} \mathcal{N}(\cdot)\left[\frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left(s(t)y_i + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right)\right]}{\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)} \tag{98}$$

$$= \frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left[\frac{s(t)\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)y_i}{\sum_{i=1}^{Y}\mathcal{N}(\cdot)} + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right] \tag{99}$$

将 $D(x;\sigma)$ 代入方程 99：

$$\nabla_{x_t} \log p(x_t) = \frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left[s(t)D(x_t;\sigma) + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x_t\right] \tag{100}$$

将得分函数 $\nabla_{x_t}\log p(x_t)$ 代入 PFODE，最终的确定性采样公式为：

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{s'(t)}{s(t)}x + \frac{\eta s(t)\sigma'(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - \frac{s^2(t)\sigma(t)\sigma'(t)}{(\eta+1)^2}\mathbf{\Sigma}\left(\frac{(\eta+1)^2}{s^2(t)\sigma^2(t)}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left(s(t)D(x;\sigma) + \frac{\eta s(t)\sigma(t)}{\eta+1}\sum_{m=1}^{M} h_m - x\right)\right) \tag{101}$$

$$= \left(\frac{s'(t)}{s(t)} + \frac{\sigma'(t)}{\sigma(t)}\right)x - \frac{\sigma'(t)s(t)}{\sigma(t)}D(x;\sigma) \qquad \square$$

总结来说，该框架与附录 4 存在两个区别：（1）边际概率密度方程 75 替换了 PFODE 中的条件密度方程 45，以更准确地表示 x_t 分布；（2）如方程 91 所示，去噪器 $D(x;\sigma)$ 的最优输出的推导采用严格的凸优化，而非方程 73 中的近似及误差。因此，当基组 H 独立于数据采样 x_0 时，该理论框架实现了更大的完备性，并代表了 EDM 的最优情况。

6 实现细节

6.1 MRI 中的偏置场校正

我们使用 Adam，动量为 $(0.9, 0.999)$ 。初始学习率设置为 2×10^{-5} ，衰减到 $1e^{-8}$ ，衰减因子为 0.6 ，耐心为 25 个 epoch。我们使用 0.9999 指数移动平均（EMA）。GDMP 的训练时长为 800 个 epoch，批大小为 1 。总扩散步骤 T 被设置为 100 。噪声日程定义为 $\bar{\alpha} = \prod_{s=1}^{t} \alpha_s$ ，像在 [6, 21] 中，其中 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 和 β_t 从 0.0001 线性增加到 0.02 。

由于偏置场和 MRI 之间的关系通常被建模为乘法关系，我们首先对图像应用对数变换，将图像和噪声之间的乘法关系转换为加法关系，如 $log(A \times B) = log(A) + log(B)$ 所示。η 设置为零。如果扩散噪声被设置为偏置场，其平滑性属性必须满足，因此我们在方程 7 中设置基集 H 以包含低阶勒让德多项式和缓慢变化的三角函数。我们用 $P_i(x)$ 表示第 i 个勒让德多项式。那么二维勒让德多项式为 $P_{m,n}(x,y) = P_m(x)P_n(y)$ 。最高次数小于或等于 N 的二维勒让德多项式被用作基函数，$L_N(x,y) \triangleq \{P_{m,n}(x,y) | m+n \leq N\}$ ，其中 N 是一个超参数。我们使用一个旋转函数 $f(x,y,\theta) = xcos(\theta) + ysin(\theta)$ 并定义 $S_n(x,y) = \{cos(n \cdot f(x,y,\theta)), sin(n \cdot f(x,y,\theta)) | mod(\theta, 10) = 0, \theta \leq 180\}$ 。三角基集是 $T_N(x,y) \triangleq \{S_n(x,y) | 2 \leq n \leq N\}$ ，其中 N 是一个超参数。由于变化太缓慢，函数 n 小于 2 的被移除。总结，基集为:

$$H_{N_1,N_2}(x,y) \triangleq \{L_{N_1}(x,y), T_{N_2}(x,y)\} \tag{102}$$

其中, x 和 y 坐标的范围均为 $[-1,1]$ 。每个在 $H_{N_1,N_2}(x,y)$ 中的基函数线性映射到以 $[0.9, 1.1]$ 为中心的范围，以实现公平性。我们使用 $H_{3,5}(x,y)$ 作为基组。神经网络 θ 预测在 [6, 21] 中指称的 x_t 的扩散噪声，损失函数为:

$$L_{BFC}(\theta) = \mathbb{E}\|N_\theta(x_t, t) - N\|_2^2 \tag{103}$$

6.2 CT 中的金属伪影去除

我们使用动量为 $(0.9, 0.999)$ 的 Adam 。初始学习率设置为 1×10^{-5} ，衰减到 $1e^{-8}$ ，因子为 0.6 ，耐心为 25000 步。我们使用 0.9999 指数移动平均（EMA）。GDMP 被训练了 500 个周期，批量大小为 1 。总扩散步骤 T 被设置为 100 。噪声计划定义为 $\bar{\alpha} = \prod_{s=1}^{t} \alpha_s$ ，如 [6, 21] 中，其中 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 和 β_t 从 0.0001 线性增加到 0.02 。金属影响的 CT 是 X_{ma} ，无金属的 CT 是 x_0 。扩散噪声是 X_{ma} 和 x_0 之间的图像差异，η 是 10 ，表示为 $N = (10+\epsilon)(X_{ma} - x_0)/11, \epsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$ 。在金属伪影消除中，金属域的伪影比非金属域严重得多，但金属域的恢复并不重要，并且会降低非金属域伪影的预测准确性。因此，我们使用加权 MSE 优化了损失函数，该函数在金属和非金属域之间平衡了伪影强度:

$$L_{MAR}(\theta) = \mathbb{E}\left(1 + (1-m)\frac{max(m \cdot N)}{max((1-m) \cdot N)}\right)\|N_\theta(x_t, t) - N\|_2^2 \tag{104}$$

其中 m 是金属掩膜。

6.3 自然图像中的阴影去除

对于阴影去除，训练的超参数与 ShadowFormer 中的官方实现保持一致。总扩散步骤 T 设置为 100 。噪声时间表如在 [6, 21] 中定义为 $\bar{\alpha} = \prod_{s=1}^{t} \alpha_s$ ，其中 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 和 β_t 线性增加从 0.0001 到 0.02 。由于 GDMP 在扩散过程中增加了不同强度的阴影图，因此保持 ShadowFormer 中的阴影掩码的系数与阴影图的系数一致，即 $\sqrt{1-\alpha_t}$ 。η 是 10 。扩散噪声 N 作为 $(10+\epsilon)(X_S - x_0)/11$ 类似于 MAR，其中 X_S 是阴影图像，x_0 是非阴影图像。我们的学习目标应该与基线模型 ShadowFormer 一致，直接学习非阴影图像 x_0 。因此损失函数是:

$$L_{SR}(\theta) = \mathbb{E}\|x_\theta(x_t, t) - x_0\|_2^2 \tag{105}$$