Lec05&06 - Latent Variable Models (LVM) & Variational Autoencoder (VAE)

Motivation

核心动机：图像数据中存在大量潜在的变异因素（如性别、眼睛颜色、头发颜色、姿势等），但这些因素在未标注数据中未被显式记录。Latent Variable Models（LVMs）通过引入**潜在变量**z 显式建模这些隐含因素，从而简化复杂数据分布的建模。

关键点解析：

1. **数据复杂性的分解**：
   - 直接建模高维数据$p(x)$（如图像像素）非常困难，因为其分布可能极其复杂。
   - 若通过潜在变量z分解问题，条件分布$p(x|z)$可能更简单（例如，假设z包含“眼睛颜色”信息，则$p(x|z)$只需生成对应颜色的图像区域）
2. **无监督表示学习**：
   - 训练完成后，模型可通过后验分布$p(z|x)$推断潜在特征（如计算$p(EyeColor = Blue|x)$，实现无监督的特征提取。
3. **挑战**：
   - 手动设计$p(x|z)$和$p(z)$的显式形式几乎不可行，尤其是当潜在变量维度高时。
   - 后验推断$p(z|x)$的计算通常难以解析求解（需变分近似或蒙特卡洛方法）。

Deep LVM

核心思想：
利用深度神经网络参数化条件分布$p(x|z)$，结合潜在变量的生成能力，构建灵活且高容量的生成模型。

模型结构：

1. **潜在变量生成**：
   - $z \sim \mathcal{N}(0, I)$，假设潜在变量服从标准正态分布（或其他简单先验）。
2. **条件分布建模**：
   - $p(x|z) = \mathcal{N}(\mu_\theta(z), \Sigma_\theta(z))$，其中均值$\mu_\theta$和协方差$\Sigma_\theta$由神经网络生成（例如，多层感知机或卷积网络）。
3. **目标**：
   - 训练后，潜在变量z应编码有意义的语义特征（如“微笑程度”“头发颜色”），实现无监督的表示学习。

混合高斯模型(MoG)

基本原理

1. 模型定义
混合高斯模型（MoG）是一种浅层潜在变量模型，通过组合多个高斯分布来建模复杂的数据分布。其核心思想是：

- **潜在变量**z：表示数据点所属的混合成分（即聚类簇），服从分类分布：

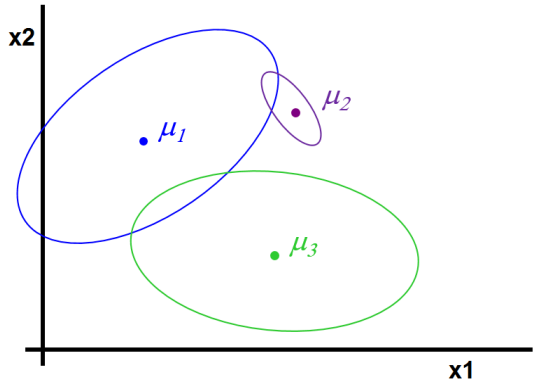
$$z \sim Categorical(1, \ldots, K) \tag{1}$$

- **观测变量**x：在给定潜在变量$z = k$的条件下，服从第k个高斯分布：

$$p(x|z = k) = \mathcal{N}(x; \mu_k, \Sigma_k) \tag{2}$$

- 整体数据分布的边际概率为：

$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} p(z = k)\mathcal{N}(x; \mu_k, \Sigma_k) \tag{3}$$



2. 生成过程
生成数据点的步骤如下：

1. **选择混合成分**：从分类分布中采样z，确定数据点属于第k个高斯成分。
2. **生成观测值**：从对应的高斯分布$\mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$中采样$x$。

在无监督学习中的应用

1. 聚类（Clustering）

- 后验概率$p(z = k|x)$直接给出数据点的软聚类结果。

2. 密度估计（Density Estimation）

- 混合高斯通过多个局部高斯分布的叠加，灵活拟合复杂数据分布。

3. 无监督特征学习

- 潜在变量z可视为数据的低维表示，但混合高斯的浅层结构限制了其表达能力。

与深度生成模型的对比

1. 混合高斯 vs. 变分自编码器（VAE）

- **表达能力**：
  - 混合高斯：浅层模型，仅通过线性组合高斯分布建模数据。
  - VAE：深层模型，利用神经网络参数化$p(x|z)$，可生成高度非线性的复杂分布（如图像）。
- **潜在变量**：

- 混合高斯：z为离散类别，解释性有限。
- VAE：z为连续向量，支持语义插值（如从“微笑”到“不微笑”的渐变）。

2. 应用场景

- **混合高斯**：适用于低维数据聚类、简单密度估计（如金融数据分群）。
- **VAE**：适用于高维数据生成（如图像、文本）、无监督特征学习（如提取潜在语义）。

边际似然(Marginal Likelihood)

定义与核心思想

边际似然是指在存在潜在变量（未观测变量）时，观测数据的概率。具体来说，假设我们有一个联合分布模型$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}; \theta)$，其中：

- $\mathbf{X}$是观测变量（例如图像中可见的像素）
- $\mathbf{Z}$是潜在变量（例如图像的类别、缺失的像素值）
- θ是模型参数

边际似然的目标是计算仅观测到$\mathbf{X} = \bar{x}$时的概率，即对所有可能的潜在变量$\mathbf{Z}$进行边缘化：

$$p(\mathbf{X} = \bar{x}; \theta) = \sum_{z} p(\mathbf{X} = \bar{x}, \mathbf{Z} = z; \theta) \text{(离散变量)}$$
$$p(\mathbf{X} = \bar{x}; \theta) = \int_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{X} = \bar{x}, \mathbf{Z} = z; \theta) dz \text{(连续变量)} \tag{4}$$

应用场景

- **图像补全**：若图像的上半部分像素缺失（即$\mathbf{X}$为下半部分，$\mathbf{Z}$ 为上半部分），边际似然需考虑所有可能的补全方式。
- **聚类分析**：在混合高斯模型中，$\mathbf{Z}$表示数据点所属的簇，边际似然对应数据点的总概率。

边际似然的意义

简单来说，边际似然函数衡量的是**“模型生成的数据有多像真实数据”**。

- 真实数据是你那批图像的像素点集合，记为$\mathbf{x}$。
- VAE作为一个生成模型，它试图学会一个概率分布$p(\mathbf{x})$，表示“生成这些图像的可能性”。

为什么是这个目标?

1. **生成模型的本质**
   VAE是一个生成模型，它的目标不是简单地记住训练数据，而是学会数据的概率分布$p(\mathbf{x})$，然后从中采样生成新数据。最大化$\log p(\mathbf{x})$就是在逼近这个真实分布。举个例子：如果你的图像是猫咪，最大化对数似然函数就是在让模型学会“猫咪图像的分布规律”，而不是只记住某几张特定的猫咪照片。

2. **从数据中“提炼规律”**
   你的训练集（图像）只是真实世界数据的一个样本，背后有个更大的“真实分布”（比如所有可能的猫咪图像）。最大化$\log p(\mathbf{x})$是在用有限的训练数据去估计这个真实分布，让模型不仅能重现训练集，还能生成没见过但合理的新图像。
3. **连接到潜在空间**
   VAE通过编码器把$\mathbf{x}$映射到$\mathbf{z}$，然后通过解码器从$\mathbf{z}$生成$\mathbf{x}$。最大化$\log p(\mathbf{x})$就是在优化整个过程（编码 + 解码），让潜在空间$\mathbf{z}$既能捕捉特征，又能生成符合训练数据的样本。

为什么部分观测数据下的参数学习具有挑战性?

1. 计算复杂性

- **边际似然的计算**：需要对所有可能的潜在变量值求和或积分。例如：
  - 若Z是30维二元变量，求和项数为2^{30}，计算量爆炸。
  - 若Z是连续变量，积分无解析解，需近似方法（如蒙特卡洛采样）。

2. 似然函数的非分解性

- **完全观测数据**：似然函数可分解为各变量条件概率的乘积，例如在贝叶斯网络中：

$$p(x_1, \ldots, x_n) = \prod_i p(x_i | x_{pa(i)}) \tag{5}$$

- **部分观测数据**：由于潜在变量Z的存在，似然函数无法分解，导致计算和优化困难。

3. 多峰性与局部最优

- **多峰性**：边际似然函数可能存在多个局部最大值，梯度下降法容易陷入局部最优。
- **初始化敏感**：例如在EM算法中，初始参数选择显著影响最终结果。

4. 梯度估计困难

- **蒙特卡洛梯度估计**：即使采用蒙特卡洛方法近似梯度，潜在变量的高方差会导致梯度估计不稳定。
- **高方差问题**：例如在混合高斯模型中，若某些簇的后验概率极低，采样效率低下。

重要性采样

1. **基本思想**：重要性采样是一种蒙特卡洛方法，用于高效估计难以直接计算的期望值或积分。其核心是通过引入一个**提议分布(Proposal Distribution)**$q(\mathbf{z})$，对高概率区域进行加权采样，从而减少估计的方差。
2. **数学形式**
   - 引入$q(\mathbf{z})$

$$
\begin{aligned}
p_\theta(\mathbf{x}) &= \sum_{\textit{All posiible value of } \mathbf{z}} p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \\
&= \sum_{\mathbf{z} \in \mathcal{Z}} \frac{q(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \\
&= \mathbf{E}_{\mathbf{z} \sim q(\mathbf{z})} \left[\frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right] \\
&\approx \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} \frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}^{(j)})}{q(\mathbf{z}^{(j)})} \qquad \mathbf{z}^{(j)} \sim q(\mathbf{z})
\end{aligned}
\tag{6}
$$

- 步骤：
  1. 从$q(\mathbf{z})$中采样k个潜在变量$\mathbf{z}^{(1)}, \ldots, \mathbf{z}^{(j)}$
  2. 计算每个样本的权重$w_j = \frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}^{(j)})}{q(\mathbf{z}^{(j)})}$
  3. 用样本平均近似$p_\theta(\mathbf{x})$

3. **与朴素蒙特卡洛的对比**
   - **朴素蒙特卡洛**：均匀采样z，但高维空间中大部分样本对期望贡献极小（低效）。
   - **重要性采样**：通过$q(\mathbf{z})$聚焦高概率区域，加权后提升估计效率。

对数似然的估计问题

目标：训练模型时需要最大化对数似然函数$\log p_\theta(x)$

直接估计的问题：对蒙特卡洛估计值取对数会导致偏差：

$$
\log p_\theta(x) \approx \log \left(\frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} \frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}^{(j)})}{q(\mathbf{z}^{(j)})} \right) \tag{7}
$$

关键矛盾：期望的对数不等于对数的期望，即：

$$
\mathbf{E}_{\mathbf{z} \sim q(\mathbf{z})} \left[\log \left(\frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right) \right] \neq \log \left(\mathbf{E}_{\mathbf{z} \sim q(\mathbf{z})} \left[\frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right] \right) \tag{8}
$$

> 证明：由于对数函数具有凹性，因此利用Jenson不等式可知：$\log \mathbf{E}[X] \geq \mathbf{E}[\log(X)]$

后果：

- 若仅用单样本$z^{(1)}$近似，估计值偏差较大。
- 即使使用多个样本，对数似然的估计仍然存在高方差或系统性偏差。

单样本近似的局限性：

假设我们仅仅取单个样本来进行近似，则

$$
\log p_\theta(x) \approx \log \left(\frac{p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}^{(1)})}{q(\mathbf{z}^{(1)})} \right) \qquad \mathbf{z}^{(1)} \sim q(\mathbf{z}) \tag{9}
$$

这种简化假设$\frac{p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z}^{(1)})}{q(\mathbf{z}^{(1)})}$能够准确代表整体的期望值，但是实际上：

- 若$q(\mathbf{z})$与真实后验$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$差异较大，单样本权重w_1可能远离真实值。导致对数似然估计不稳定，尤其在$q(\mathbf{z})$选择不当时。

提议分布$q(\mathbf{z})$的选择：

- 理想情况：**$q(\mathbf{z})$应接近真实后验$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$，以减少方差**
- 实际挑战：真实后验未知，通常需要**变分推断**或自适应重要性采样。

证据下界

由于期望的对数$\log \mathbf{E}[X]$很难计算，我们可以尝试计算其下界，即对数的期望$\mathbf{E}[\log(X)]$。

我们将这个下界称为**证据下界(ELBO)**，因此我们的目标改为最大化对数似然的证据下界

变分

变分的概念

1. 在数学中，“变分”（Variational）一词来源于**变分法**（Calculus of Variations），它是研究如何寻找泛函（函数的函数）极值的一门学科。**核心思想**是通过调整函数的形状或参数，找到使得某个目标函数（如时间、能量）达到极值的函数。
2. 在机器学习和概率模型中，“变分”通常指**变分推断**（Variational Inference），其核心是**用简单的参数化分布近似复杂分布**，并通过优化参数使近似分布尽可能接近真实分布。
3. 在变分自编码器（VAE）中，“变分”体现在以下两方面：

   （1）变分推断

   - **问题**：计算真实后验$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$困难（因潜在变量高维且模型复杂）。
   - **解决**：用神经网络（编码器）参数化近似分布$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$，通过优化使$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$逼近$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$。

   （2）变分下界（ELBO）

   - **目标**：最大化数据的对数似然$\log p(\mathbf{x})$，但因边缘化困难，转而优化其下界
   - **“变分”的体现**：通过调整ϕ（编码器参数）和θ（解码器参数），最大化ELBO，间接提升对数似然。
4. 直观类比：将“变分”理解为**用简单工具解决复杂问题**：

- 比喻：真实后验$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$是一座复杂的山峰，直接攀登（计算）困难。变分推断则是用一块可塑的橡皮泥（参数化分布$q(\mathbf{z};\phi)$），不断调整形状（优化ϕ），使其尽可能贴合山峰的轮廓。

变分下界

我们将目标函数的证据下界进行展开可以得到：

$$
\begin{aligned}
\log p(\mathbf{x};\theta) &\geq \mathbf{E}_{\mathbf{z}\sim q(\mathbf{z})}\left[\log\left(\frac{p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})}\right)\right] \\
&= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\left(\frac{p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})}\right) \\
&= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\left(p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z})\right) - \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log q(\mathbf{z}) \\
&= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\left(p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z})\right) + H(q)
\end{aligned}
\tag{10}
$$

> 其中$H(q)$是概率分布q的熵，定义为$H(q) = -\sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log q(\mathbf{z})$

如果存在理想情况，即$q(\mathbf{z})$等于真实后验$p(\mathbf{z}|\mathbf{x})$，此时取等。

于是我们希望让$q(\mathbf{z})$尽可能贴近真实后验分布，我们可以用KL散度来衡量

$$
\begin{aligned}
D_{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)) &= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\frac{q(\mathbf{z})}{p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)} \\
&= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log q(\mathbf{z}) - \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\left(p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)\right) \\
&= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log q(\mathbf{z}) - \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log\left(\frac{p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)}{p(\mathbf{x};\theta)}\right) \\
&= -\sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z})\log(p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)) + \log p(\mathbf{x};\theta) - H(q) \\
&\geq 0
\end{aligned}
\tag{11}
$$

> 这同样可以用来证明变分下界的存在。

当$D_{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)) = 0$的时候，可以取等。

后验分布的变分推断

实际上在变分推断中的后验分布$p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)$很难计算，因为其实际意义是：给定了一个观测数据$\mathbf{X}$，需要试图找到哪些$\mathbf{Z}$可能是产生这个$\mathbf{X}$的真是分布。我必须以概率的方式把整个神经网络翻转过来。

所以我们可以定义一系列潜变量的分布，并通过一组变分参数ϕ来进行参数化。

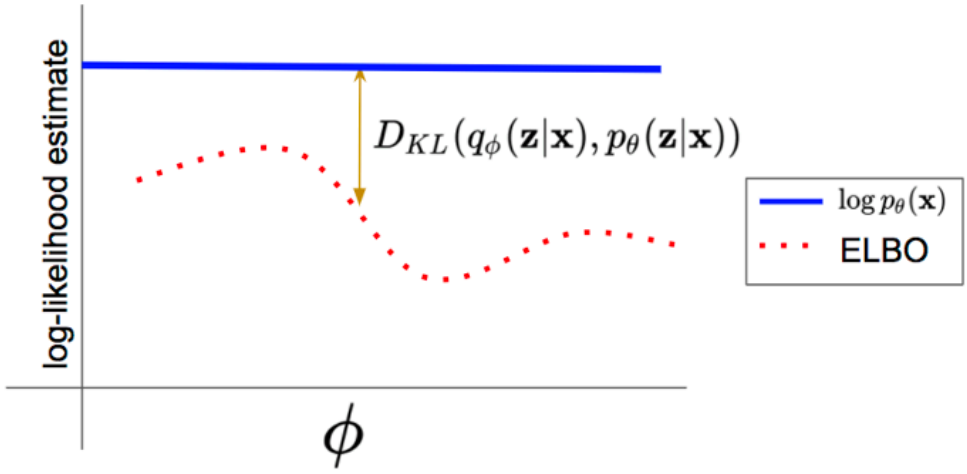
进行假设：假设$q(\mathbf{z};\phi)$是一种易处理的概率分布，通过变分参数ϕ来进行定义，例如$q(\mathbf{z};\phi) = \mathcal{N}(\phi_1,\phi_2)$

变分推断：不断调整ϕ使得$q(\mathbf{z};\phi)$尽可能接近真实后验分布$p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta)$

将这个变分参数ϕ回代入原式可得：

$$
\begin{aligned}
&\log p(\mathbf{x};\theta) \geq \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z};\phi)\log\left(p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)\right) + H(q(\mathbf{z};\phi)) = \mathcal{L}(\mathbf{x};\theta,\phi) \\
&\log p(\mathbf{x};\theta) = \mathcal{L}(\mathbf{x};\theta,\phi) + D_{KL}(q(\mathbf{z};\phi) \parallel p(\mathbf{z}|\mathbf{x};\theta))
\end{aligned}
\tag{12}
$$

变分推断越接近，D_{KL}越小，证据下界ELBO和真实的函数$\log p(\mathbf{x};\theta)$越接近。



最终结果：会有两个神经网络，一个解码器和一个编码器，解码器主要由θ控制，编码器主要由ϕ控制。

推广至多样本情况：学习目标是：**最大化整个数据集的似然函数**

$$l(\theta;\mathcal{D}) = \sum_{\mathbf{x}^i\in\mathcal{D}} \log p(\mathbf{x}^i;\theta) \geq \sum_{\mathbf{x}^i\in\mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi^i) \tag{13}$$

> 注意：此处我们需要对于不同的样本采取不同的编码方式，也就是对于每一个$\mathbf{x}^i$，都有一个ϕ^i与其对应。

$$\max_\theta l(\theta;\mathcal{D}) \geq \max_{\theta,\phi^1,\ldots,\phi^M} \sum_{\mathbf{x}^i\in\mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi^i) \tag{14}$$

利用随机变分推断(Stochastic Variational Inference SVI)进行学习

采用SGD方法对**整个数据集的似然函数的变分下界**进行优化，即$\sum_{\mathbf{x}^i\in\mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi^i)$

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{x}^i\in\mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi) &= \sum_{\mathbf{z}} q(\mathbf{z};\phi)\log\left(p(\mathbf{z},\mathbf{x}^i;\theta)\right) + H(q(\mathbf{z};\phi^i)) \\ &= \mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi^i)}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x}^i;\theta) - \log q(\mathbf{z};\phi^i)\right]\end{aligned} \tag{15}$$

1. 对参数$\theta, \phi^1, \ldots, \phi^M$进行初始化。
2. 从数据集$\mathcal{D}$中随机采样$\mathbf{x}^i$
3. 将变分下界视为关于ϕ^i的函数对其求偏导后优化。
   - $\phi^i = \phi^i + \eta\nabla_{\phi^i}\mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi^i)$，由于优化目标是最大化而不是最小化，所以这里要用加号。
   - 直到向$\phi^{i,*} \approx arg\max_\phi \mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi)$
4. 将变分下界视为关于θ的函数对其求偏导后优化。
5. 回到步骤2，重新采样进行优化。

> 我们可以将对ϕ的优化过程视为编码过程，将对θ的优化过程视为解码过程。

如何计算梯度?

有关于参数θ, ϕ的梯度实际上没有解析解，因此我们需要采用蒙特卡洛模拟来进行近似，即：

$$\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)-\log q(\mathbf{z};\phi)\right]\approx\frac{1}{K}\sum_{k}\left(\log p(\mathbf{z}^k,\mathbf{x};\theta)-\log q(\mathbf{z}^k;\phi)\right)\tag{16}$$

计算θ的梯度相对比较简单：

$$\begin{aligned}\nabla_\theta\mathcal{L}(\mathbf{x}^i;\theta,\phi^i)&=\nabla_\theta\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)-\log q(\mathbf{z};\phi)\right]\\&=\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)\right]\\&\approx\frac{1}{K}\sum_{k}\nabla_\theta\log p(\mathbf{z}^k,\mathbf{x};\theta)\end{aligned}\tag{17}$$

而计算ϕ的梯度则复杂的多，一般需要用到**强化学习**的技巧。但是有一个简单但是泛用性较差的方法可供选择，即**重参数化技巧**

重参数化

现在我想从下式中计算ϕ的梯度：

$$\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}[r(\mathbf{z})]=\int q(\mathbf{z};\phi)r(\mathbf{z})d\mathbf{z}\tag{18}$$

假设$q(\mathbf{z};\phi)\sim\mathcal{N}(\mu,\sigma^2\mathbf{I})$是以$\phi=(\mu,\sigma)$为参数的高斯分布，则以下两种采样方式是完全等价的：

- 从$q(\mathbf{z};\phi)$中直接采样$\mathbf{z}$
- 从标准高斯分布中采样$\epsilon\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$，计算$\mathbf{z}=\mu+\sigma\epsilon=g(\epsilon;\phi)$

于是我们可以用以下方式来进行计算：

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}[r(\mathbf{z})]&=\int q(\mathbf{z};\phi)r(\mathbf{z})d\mathbf{z}=\mathbf{E}_{\epsilon\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})}[r(g(\epsilon;\phi))]=\int\mathcal{N}(\epsilon)r(\mu+\sigma\epsilon)d\epsilon\\\nabla_\phi\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}[r(\mathbf{z})]&=\nabla_\phi\mathbf{E}_\epsilon r(g(\epsilon;\phi))]=\mathbf{E}_\epsilon[\nabla_\phi r(g(\epsilon;\phi))]\approx\frac{1}{K}\sum_k\nabla_\phi r(g(\epsilon_k;\phi))\end{aligned}\tag{19}$$

> 这仅仅适用于连续变量中的高斯分布。

现在我们回代入原式可得：

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\mathbf{x};\theta,\phi)&=\sum_{\mathbf{z}}q(\mathbf{z};\phi)\log\left(p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)\right)+H(q(\mathbf{z};\phi))\\&=\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta)-\log q(\mathbf{z};\phi)\right]\\&=\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[r(\mathbf{z},\phi)\right]\\&=\mathbf{E}_{q(\mathbf{z};\phi)}\left[r(g(\epsilon;\phi),\phi)\right]\\&=\frac{1}{K}\sum_k r(g(\epsilon^k;\phi),\phi)\end{aligned}\tag{20}$$

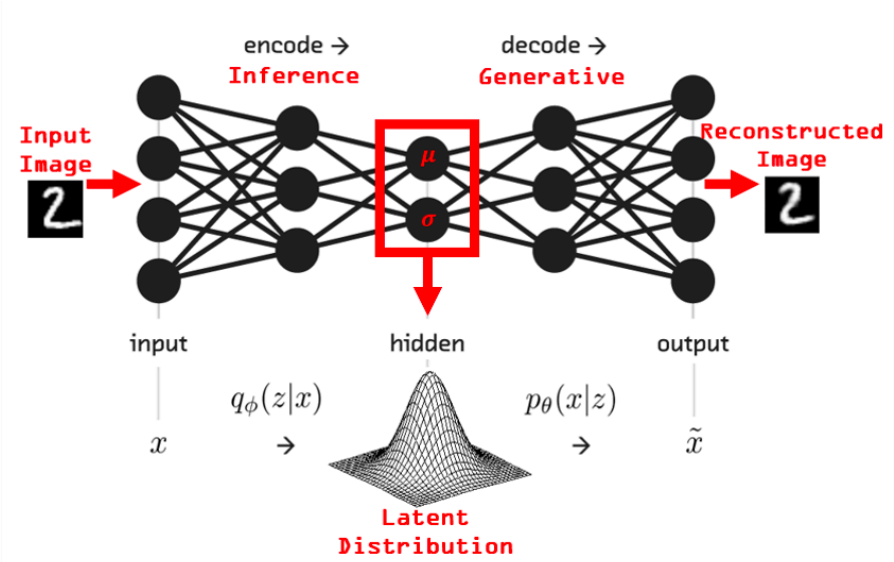
摊销

现在我们已经得到了对于每一个样本$\mathbf{x}^i$对应的最佳变分参数ϕ^i，但是如果数据集过大，对每一个样本都存储一个ϕ是很昂贵的，因此我们可以再定义一个函数f_λ来将每一个样本映射到其对应的最佳变分参数，即$\mathbf{x}^i \mapsto \phi^i$，接下来我们就可以把后验分布变成以下形式：

$$q(\mathbf{z}|\mathbf{x}^i) = q_\lambda(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \tag{21}$$

我们可以在上面的推断中把$q(\mathbf{z};\phi^i)$替换为$q_\phi(\mathbf{z},\mathbf{x})$

总结 (VAE模型整体架构)



$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\mathbf{x};\theta,\phi) &= \mathbf{E}_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta) - \log q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\right] \\ &= \mathbf{E}_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}\left[\log p(\mathbf{z},\mathbf{x};\theta) - \log p(\mathbf{z}) + \log p(\mathbf{z}) - \log q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\right] \\ &= \mathbf{E}_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}\left[\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z};\theta)\right] - D_{KL}(q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x}) \parallel p(\mathbf{z}))\end{aligned} \tag{22}$$

> 我们需要最大化第一项并最小化第二项
>
> 其中第一项为重建损失，衡量解码器生成的数据与真实数据的相似程度，对应于解码器
>
> 第二项为KL正则项，约束编码器输出的分布$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$接近先验分布$p(\mathbf{z})$，对应于编码器

模型架构

- **编码器（推断网络）**：将输入数据$\mathbf{x}$映射到潜在空间，输出潜在变量$\mathbf{z}$的分布参数（均值μ和方差σ^2），即：

$$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{z};\mu_\phi(\mathbf{x}),\sigma_\phi(\mathbf{x})) \tag{23}$$

  > 其中ϕ为编码器参数。

- **解码器（生成网络）**：从潜在变量$\mathbf{z}$重构数据$\mathbf{x}$，输出生成分布的参数

$$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x};\mu_\theta(\mathbf{z}),\sigma^2_\theta(\mathbf{z})) \tag{24}$$

> 其中θ为解码器参数

潜在变量生成与重参数化

- **采样潜在变量**：从编码器输出的分布中采样$\mathbf{z}$：

$$\mathbf{z} = \mu_\phi(\mathbf{x}) + \sigma_\phi(\mathbf{x}) \cdot \epsilon,\ \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}) \tag{25}$$

- **重参数化技巧**将随机采样过程转换为确定性计算，使梯度可通过神经网络反向传播。

训练过程

1. 采样样本$\mathbf{x}^i$
2. 通过从$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x}^i)$中采样，将其映射到浅变量$\hat{\mathbf{z}}$（编码器）（相当于是从图像中提取一些特征）
3. 通过从$p(\mathbf{x}|\hat{\mathbf{z}};\theta)$（解码器）采样来重构$\hat{\mathbf{x}}$（相当于从特征中采样，组成一个类似的带有这些特征的图片）
4. 计算损失并反向传播：通过梯度下降优化θ, ϕ，最大化ELBO。

生成新数据

- 从先验分布$p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$中采样$\mathbf{z}$。
- 通过解码器生成数据$\mathbf{x} \sim p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$。

核心优势与特点

- **无监督特征学习**：潜在变量$\mathbf{z}$编码数据的高层语义（如姿态、颜色）。
- **生成多样性**：通过采样$\mathbf{z}$生成多样化样本。
- **正则化潜在空间**：KL散度约束潜在空间结构，支持插值（如从“微笑”到“不微笑”的渐变）。

宏观层面思考：为什么需要优化潜在空间?

VAE的核心目标是生成与训练数据相似的新数据，同时还能捕捉数据的内在结构。潜在空间（latent space）在这里就像一个“压缩的蓝图”，它把高维的原始数据（比如图片、声音）映射到一个低维的、更有组织的形式。如果这个潜在空间没有被优化好，模型就没法很好地完成生成任务，也无法真正理解数据的规律。

1. **数据的结构化表示**
   想象一下，假如你要把一堆杂乱无章的照片整理成一个相册，你需要找到一种方法来“总结”每张照片的主题（比如风景、人像）。潜在空间就是这个“总结”的地方。VAE通过优化潜在空间，确保每个点（潜在变量）都能对应数据的某种有意义的特征。如果不优化，潜在空间可能会变得混乱，像一堆随机的数字，失去了表示能力。
2. **生成能力的需要**
   VAE不仅仅是压缩数据，它还要能解码潜在空间的点，生成新的样本。为了让生成的样本既有多样性又符合数据的分布，潜在空间需要被塑造成一个连续且规则的结构（通常假设服从标准正态分布）。优化潜在空间就是在调教这个“生成工厂”的布局，让它既能覆盖数据的多样性，又不会生成完全离谱的结果。
3. **平衡重建和正则化**
   VAE的损失函数有两个部分：重建误差（让生成的样本尽量接近输入）和KL散度（让潜在空间的分布接近一个简单的先验分布，比如正态分布）。优化潜在空间就是在两者之间找平衡。如果不优化，模型可能会过分专注于重建输入（像普通的自编码器），但潜在空间会变得无序，无法用来生成新数据或进行推断。

从更广义的角度看，VAE的潜在空间优化是在试图“提炼数据的本质”。它有点像人类大脑处理信息的方式：我们看到的世界是复杂的高维数据（视觉、听觉等），但大脑会把这些压缩成更简单的概念（比如“猫”“树”）。VAE通过优化潜在空间，试图模仿这种能力，让机器也能从杂乱的数据中提取规律，进而理解和创造。

如果不优化潜在空间，VAE就退化成了一个普通的压缩工具，失去了生成模型的灵魂——无法探索数据的可能性，也无法真正“理解”数据的深层结构。所以，优化潜在空间是VAE能从“模仿”走向“创造”的关键一步。

在VAE里怎么用先验分布?

VAE通过编码器把输入数据$\mathbf{x}$映射到潜在变量$\mathbf{z}$，但这些$\mathbf{z}$的分布（叫做$q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$）一开始是杂乱的，可能每个数据点映射出来的$\mathbf{z}$都不一样。VAE用KL散度“惩罚”这个分布，让它尽量靠近先验分布$p(\mathbf{z})$（比如$\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$）。这就像在说：“嘿，你的潜在空间别太花哨，尽量按我的简单规矩来！”

最终，训练好的模型可以用这个简单的先验分布来采样（比如从$\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$里随便挑个数），然后通过解码器生成新的数据。因为潜在空间已经被调教得接近先验分布，所以生成的东西既有规律，又能反映数据的特性。

为什么要让潜在空间的分布接近简单的先验分布?

生成能力的可控性
VAE的目标不仅是重建数据，还要能生成新的、合理的样本。如果潜在空间的分布是混乱的、不可预测的，那么从里面采样（比如随机挑一个点来生成数据）就会变得很困难。假设我们让潜在空间接近一个简单的先验分布（比如标准正态分布$\mathcal{M}(0,\mathbf{I})$），我们就可以轻松地从中采样，因为我们很熟悉正态分布的性质。这样，生成过程就变得可控且高效——你随便从$\mathcal{M}(0,\mathbf{I})$里挑个数，就能生成一个像样的样本。

避免过拟合，增加泛化性
如果潜在空间的分布完全由数据自由决定（没有先验约束），模型可能会过分记住训练数据，导致潜在空间变得过于复杂，甚至每个数据点都被“硬编码”到一个特定的潜在变量上。这样虽然重建效果很好，但生成新样本时就容易失控，生成的可能是一些奇怪的东西。让潜在空间接近简单先验分布（通过KL散度正则化），就像给模型加了个“纪律约束”，防止它过于“任性”，从而提升泛化能力。

连续性和平滑性
一个接近简单先验分布的潜在空间（比如正态分布）通常是连续且平滑的。这意味着潜在空间里相邻的点生成的样本也会有相似的特征。比如在一张人脸生成模型中，潜在空间里两个靠近的点可能生成两张脸，只是鼻子大小略有不同。如果分布不规则，潜在空间可能会出现“断层”，采样时稍微偏一点就生成完全不相关的东西，失去了结构的意义。

数学上的方便性
简单先验分布（比如正态分布）有解析形式，计算起来方便。在VAE中，KL散度用来衡量潜在分布$q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$和先验分布$p(\mathbf{z})$的差距。如果$p(\mathbf{z})$是个简单的正态分布，KL散度可以直接算出来，优化过程就更稳定。如果先验分布太复杂，计算和优化都会变得麻烦。

为什么不直接定义一个简单的潜在空间就好了?

这里有个关键问题：潜在空间不是我们能完全手动指定的东西，它必须从数据中“学”出来。原因如下：

1. **数据驱动的本质**
   VAE是个生成模型，它的潜在空间需要反映数据的真实分布。如果我们强行定义一个简单的潜在空间（比如直接说“潜在变量就是正态分布”），但不通过训练去调整它，那这个空间可能完全无法捕捉数据的特征。比如，你硬定义一个$为什么不直接定义一个简单的潜在空间就好了?
2. **编码器和解码器的协调**
   VAE有两个部分：编码器（把输入$\mathbf{x}$映射到潜在变量$\mathbf{z}$）和解码器（从$\mathbf{z}$生成输出）。编码器学到的潜在分布$q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$是数据驱动的，取决于输入$\mathbf{x}$。如果我们直接定义一个固定的潜在空间，但不让编码器去适应它，编码器和解码器就会“脱节”——编码器可能把数据映射到完全不符合先验的地方，解码器也不知道怎么处理这些点。

3. **优化过程的必要性**
   VAE通过优化损失函数（重建误差 + KL散度）来“拉近” $q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$和$p(\mathbf{z})$的距离。这个过程其实是在动态调整潜在空间，让它既能反映数据的特性，又尽量贴近简单的先验分布。如果直接定义一个先验而不优化，模型就失去了学习的灵活性，无法在“数据真实性”和“生成可控性”之间找到平衡。
4. **直接定义的局限性**
   如果你直接定义潜在空间为某个分布（比如正态分布），但不通过训练去约束编码器输出，编码器可能会输出任意分布（比如均值方差完全不规则）。这样，采样时你还是得从那个定义的分布里挑点，但解码器面对编码器给出的混乱输入，根本没法正常工作。换句话说，直接定义解决不了潜在空间和模型整体一致性的问题。

宏观比喻

想象潜在空间是个“模具”，而数据是“面团”。我们希望模具简单好用（接近先验分布），但又能做出符合面团特性（数据分布）的形状。直接定义一个模具而不调整，可能会完全压不出面团的样子；而通过优化，我们让模具在保持简单的同时，慢慢适应面团的特性，最终既能批量生产（生成），又能保证质量（符合数据规律）。

所以，VAE不直接定义一个潜在空间，而是通过训练让它“逐渐靠近”简单先验分布，这样既保留了数据的特性，又保证了生成过程的可控性和实用性。