VAE回顾

VAE的目标是最大化对数似然函数

$$\sum_i \log p_\theta(\mathrm{x}^{(i)}) = \sum_i KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x}^{(i)})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x}^{(i)})) + \sum_i \mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x}^{(i)})$$

其中，

$\mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x}^{(i)}) = \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x})}[\log p_\theta(\mathrm{x},\mathrm{z}) - \log q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x})] = -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x}^{(i)})||p_\theta(\mathrm{z})) + \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x}^{(i)})}\log p_\theta(\mathrm{x}^{(i)}|\mathrm{z})$

由于KL散度非负，对数似然函数的变分下界即为上式中的$\mathcal{L}$项。一般来说，$p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x}^{(i)})$是未知的，或者难以获得显式表达式的，因此，直接优化对数似然函数是不可行的，一般转而优化它的变分下界，即上式中的$\mathcal{L}$项。Diederik P.Kingma和Max Welling提出了两个算法SGVB和AEVB去估计$\mathcal{L}$。

CVAE

VAE用的训练集是数据$\{\mathbf{x}^{(i)}\}_{i=1}^N$。当生成数据时，由隐变量$\mathbf{z}$控制生成数据$\mathbf{x}$，如果我们现在有的数据不只是$\mathbf{x}$，我们还有关于数据$\mathbf{x}$的一些额外信息$\mathbf{y}$，最简单的，以手写数字为例，它的标签0-9，那么我们是否能够利用上这些额外的信息呢?

CVAE-1

一个简答的想法，考虑条件概率分布$p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y})$，套用原来的VAE模型，我们不难作出以下推导：

$KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})) = \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log\frac{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}{p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}$
$= \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log\frac{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y})}{p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y})}$
$= \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log\frac{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y})}{p_\theta(\mathrm{x},\mathrm{z}|\mathrm{y})}$
$= KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{x},\mathrm{z}|\mathrm{y})) + \log p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y}))$

于是

$$\log p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y})) = KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})) + \mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y})$$

其中，

$\mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y}) = -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{x},\mathrm{z}|\mathrm{y}))$
$= \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}[\log p_\theta(\mathrm{x},\mathrm{z}|\mathrm{y}) - \log q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})]$
$= -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{y})) + \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y},\mathrm{z})$

类似于VAE，套用SGVB算法，再做一下reparameterization，取适当的分布和网络，我们就得到了一个CVAE模型。

我们姑且称这个版本的CVAE为CVAE-1模型，没错，CVAE模型不止一个......

CVAE-2

此外，与CGAN一样，我们一般假设额外信息$\mathbf{y}$与隐变量$\mathbf{z}$没有直接的关系，因此条件概率$p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{y}) = p_\theta(\mathrm{z})$，于是变分下界可以写成

$$\mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y}) = -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z})) + \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y},\mathrm{z})$$

这在文献[3]中提到过。姑且称这个版本为CVAE-2模型。

CVAE-3

这就完了吗？文献[2]会告诉你，不要着急，我们也提出了一种CVAE。文中提出的方法不是产生数据$\mathbf{x}$，而是直接考虑预测问题：预测数据$\mathbf{x}$的标签$\mathbf{y}$。什么意思呢？它的似然函数是$p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{x})$而不是$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{y})$。而这个推导也不难，事实上，把$\mathbf{y}$看成我们要生成的“数据”，$\mathbf{x}$看成是“标签”，在上面推导的结果里面直接交换$\mathbf{x},\mathbf{y}$的位置，就得到了

$$\log p_\theta(\mathrm{y}|\mathrm{x})) = KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})) + \mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y})$$

其中，

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y}) = -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{y},\mathrm{z}|\mathrm{x}))\\
&= \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}[\log p_\theta(\mathrm{y},\mathrm{z}|\mathrm{x}) - \log q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})]\\
&= -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x})) + \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log p_\theta(\mathrm{y}|\mathrm{x},\mathrm{z})
\end{aligned}$$

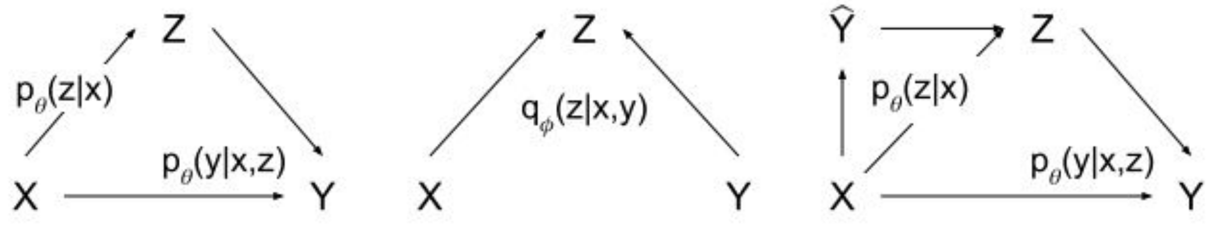
同样地，对$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x},\mathbf{y})$做一下reparameterization，写成$\mathbf{z} = g_\phi(\mathbf{x},\mathbf{y},\epsilon), \epsilon \sim \mathcal{N}(0,I)$。再取适当的分布和网络，就可以了。值得一提的是，我们会在模型中设定适当的分布$p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{x},\mathbf{z})$，当训练完了以后，可以把模型当成一个分类器，预测输入$\mathbf{x}$的标签：

$$\mathrm{y}^* = \arg\max_{\mathrm{y}} p_\theta(\mathrm{y}|\mathrm{x},\mathrm{z}^*), \quad \mathrm{z}^* = \mathbb{E}[\mathrm{z}|\mathrm{x}]$$

上面的预测涉及到求期望，除非有显式结果，否则一般采用均值去近似期望：

$$\mathrm{y}^* = \arg\max_{\mathrm{y}} \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} p_\theta(\mathrm{y}|\mathrm{x},\mathrm{z}^{(l)}), \quad \mathrm{z}^{(l)} \sim p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{x})$$

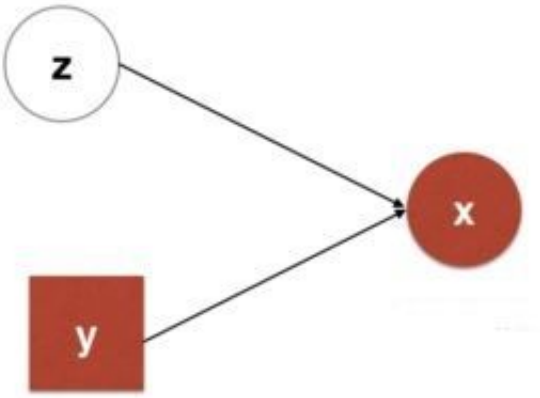
姑且这个模型称为CVAE-3，它的图模型结构如下：



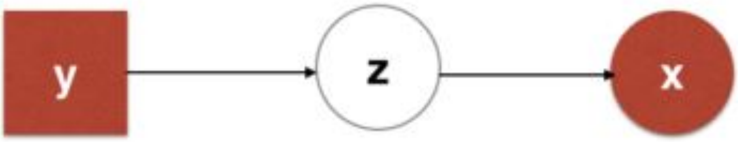
(b) CGM (generation) (c) CGM (recognition) (d) recurrent connection

CVAE-4

非常抱歉地告诉你，CVAE模型还没完。文献[3]提出了CMMA模型（conditional multimodal autoencoder），实际上它也可以看成是条件版本的VAE。一般来说，我们考虑的CVAE或者CGAN的图模型是长这样的：



它的特点是$\mathbf{z},\mathbf{y}$一般是相互独立的。而CMMA考虑的图模型是长这样的：



这个模型的特点是隐变量是由额外信息$\mathbf{y}$确定的，$p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y},\mathrm{z}) = p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{z})$ 。整个推导过程跟CVAE-1一模一样，应用$p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{y},\mathrm{z}) = p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{z})$ 以后，变分下界可以简化为：

$$\mathcal{L}(\theta,\phi;\mathrm{x},\mathrm{y}) = -KL(q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})||p_\theta(\mathrm{z}|\mathrm{y})) + \mathbb{E}_{q_\phi(\mathrm{z}|\mathrm{x},\mathrm{y})}\log p_\theta(\mathrm{x}|\mathrm{z})$$

姑且称CMMA模型为CVAE-4。CVAE-4模型将标签信息编码到隐变量$\mathbf{z}$中，作者指出，这样做的效果更好。

当然，针对具体的问题，还有一些不一样的CVAE设计，例如，文献[1]用CVAE做半监督学习，用到的CVAE又与上面介绍的有所不同。根据具体问题，有些模型还会对目标函数添加一些惩罚项。

VAE是个贝叶斯模型，它的条件概率版本根据取条件概率的形式的不同，自然会出现多种多样的模型。

代码

\1. [RuiShu/cvae: Conditional variational autoencoder implementation in Torch]

\2. [kastnerkyle/SciPy2015: Talk for SciPy2015 "Deep Learning: Tips From The Road"]

\3. [Tutorial on Variational Autoencoders]

\4. [dpkingma/nips14-ssl: Code for reproducing results of NIPS 2014 paper "Semi-Supervised Learning with Deep Generative Models"]

\5. [jramapuram/CVAE: Convolutional Variational Autoencoder]

参考文献

\1. Kingma D P, Mohamed S, Rezende D J, et al. Semi-supervised learning with deep generative models[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. 2014: 3581-3589.

\2. Sohn K, Lee H, Yan X. Learning structured output representation using deep conditional generative models[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. 2015: 3483-3491.

\3. Pandey G, Dukkipati A. Variational methods for conditional multimodal learning: Generating human faces from attributes. arXiv preprint[J]. arXiv, 2016, 1603.

\4. Walker J, Doersch C, Gupta A, et al. An uncertain future: Forecasting from static images using variational autoencoders[C]//European Conference on Computer Vision. Springer International Publishing, 2016: 835-851.

\5. Doersch C. Tutorial on variational autoencoders[J]. arXiv preprint arXiv:1606.05908, 2016.