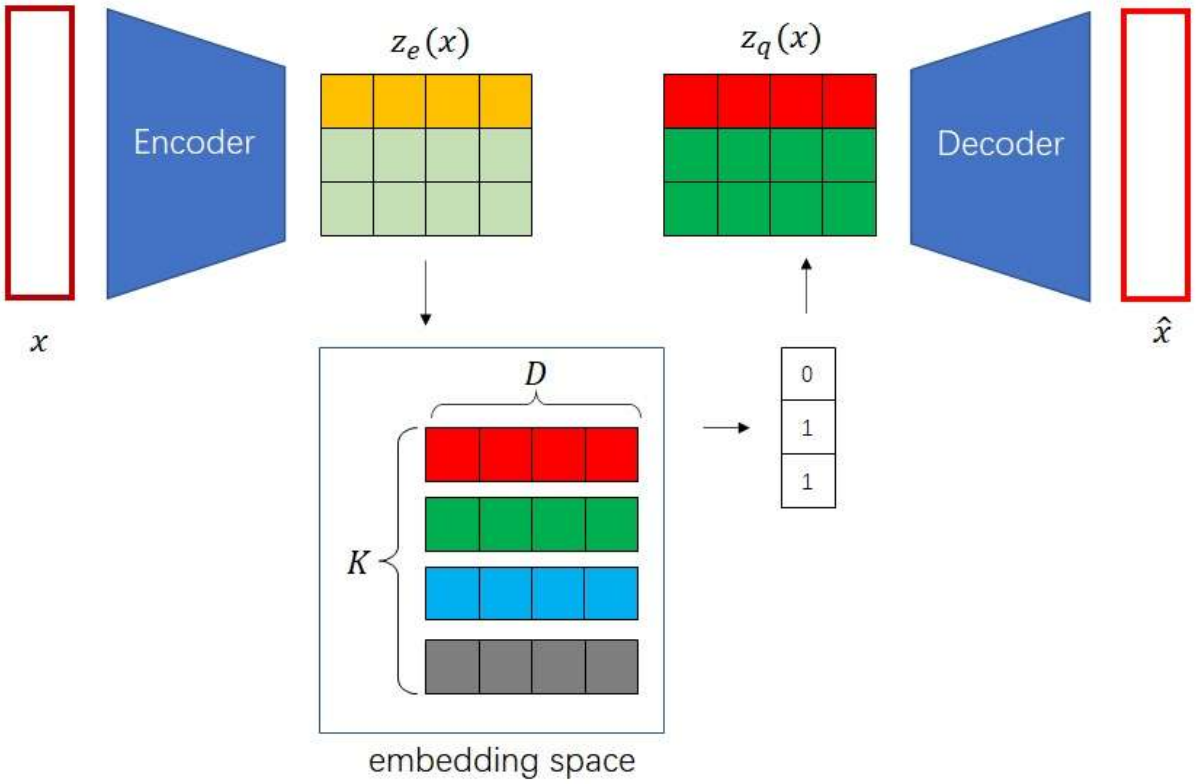
VQ-VAE：首个提出 codebook 机制的生成模型

目录

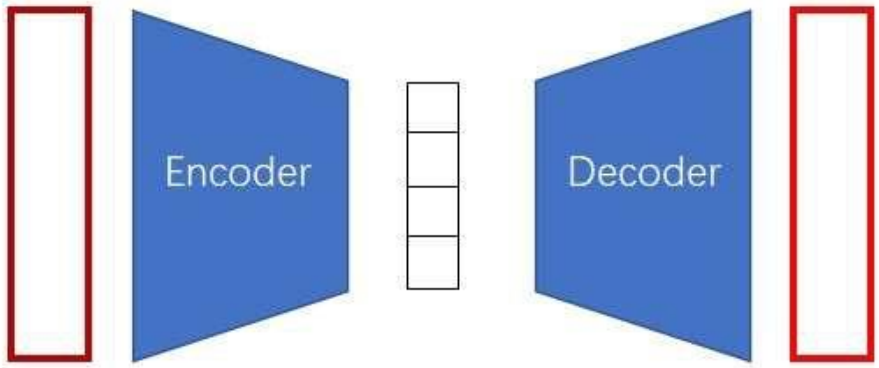


近两年，有许多图像生成类任务的前沿工作都使用了一种叫做"codebook"的机制。追溯起来，codebook机制最早是在VQ-VAE论文中提出的。相比于普通的VAE，VQ-VAE能利用codebook机制把图像编码成离散向量，为图像生成类任务提供了一种新的思路。VQ-VAE的这种建模方法启发了无数的后续工作，包括声名远扬的Stable Diffusion。

在这篇文章中，我将先以易懂的逻辑带领大家一步一步领悟VQ-VAE的核心思想，再介绍VQ-VAE中关键算法的具体形式，最后把VQ-VAE的贡献及其对其他工作的影响做一个总结。通过阅读这篇文章，你不仅能理解VQ-VAE本身的原理，更能知道如何将VQ-VAE中的核心机制活学活用。

从 AE 到 VQ-VAE

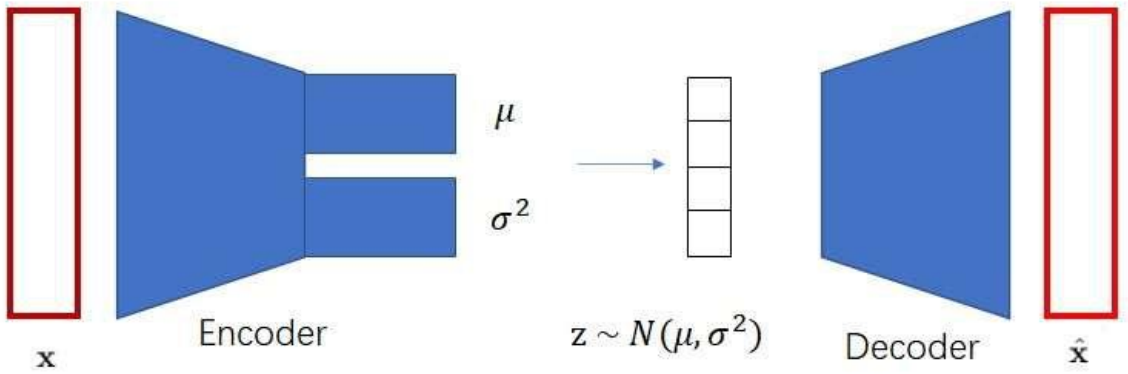
为什么VQ-VAE想要把图像编码成离散向量？让我们从最早的自编码器（Autoencoder, AE）开始一步一步谈起。AE是一类能够把图片压缩成较短的向量的神经网络模型，其结构如下图所示。AE包含一个编码器$e()$和一个解码器$d()$。在训练时，输入图像$\mathbf{x}$会被编码成一个较短的向量$\mathbf{z}$，再被解码回另一幅长得差不多的图像$\hat{\mathbf{x}}$。网络的学习目标是让重建出来的图像$\hat{\mathbf{x}}$和原图像$\mathbf{x}$尽可能相似。



解码器可以把一个向量解码成图片。换一个角度看，解码器就是一个图像生成模型，因为它可以根据向量来生成图片。那么，AE可不可以用来做图像生成呢？很可惜，AE的编码器编码出来的向量空间是不规整的。也就是说，解码器只认识经编码器编出来的向量，而不认识其他的向量。如果你把自己随机生成出来的向量输入给解码器，解码器是生成不出有意义的图片的。AE不能够随机生成图片，所以它不能很好地完成图像生成任务，只能起到把图像压缩的作用。

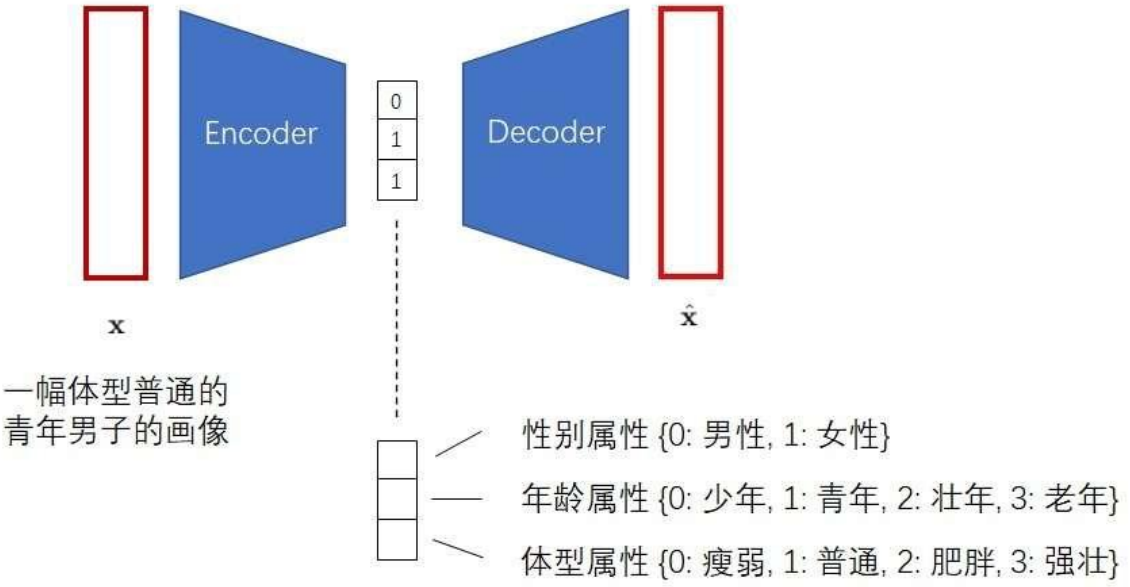
AE离图像生成只差一步了。只要AE的编码空间比较规整，符合某个简单的数学分布（比如最常见的标准正态分布），那我们就可以从这个分布里随机采样向量，再让解码器根据这个向量来完成随机图片生成了。VAE就是这样一种改进版的AE。它用一些巧妙的方法约束了编码向量$\mathbf{z}$，使得$\mathbf{z}$满足标准正态分

布。这样，解码器不仅认识编码器编出的向量，还认识其他来自标准正态分布的向量。训练完成后，我们就可以扔掉编码器，用来自标准正态分布的随机向量和解码器来实现随机图像生成了。



VAE的实现细节就不在这里赘述了，是否理解它对理解VQ-VAE没有影响。我们只需知道VAE可以把图片编码成符合标准正态分布的向量即可。让向量符合标准正态分布的原因是方便随机采样。同时，需要强调的是，VAE编码出来的向量是**连续向量**，也就是向量的每一维都是浮点数。如果把向量的某一维稍微改动0.0001，解码器还是认得这个向量，并且会生成一张和原向量对应图片差不多的图片。

但是，VAE生成出来的图片都不是很好看。VQ-VAE的作者认为，VAE的生成图片之所以质量不高，是因为图片被编码成了连续向量。而实际上，把图片编码成**离散向量** 会更加自然。比如我们想让画家画一个人，我们会说这个是男是女，年龄是偏老还是偏年轻，体型是胖还是壮，而不会说这个人性别是0.5，年龄是0.6，体型是0.7。因此，VQ-VAE会把图片编码成离散向量，如下图所示。

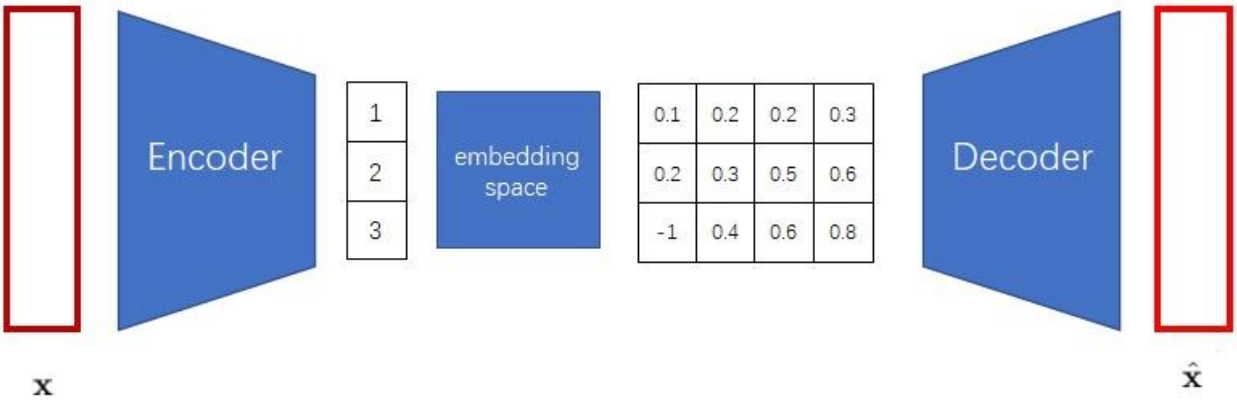


把图像编码成离散向量后，又会带来两个新的问题。第一个问题是，神经网络会默认输入满足一个连续的分布，而不善于处理离散的输入。如果你直接输入0, 1, 2这些数字，神经网络会默认1是一个处于0, 2中间的一种状态。为了解决这一问题，我们可以借鉴NLP中对于离散单词的处理方法。为了处理离散的输入单词，NLP模型的第一层一般都是词嵌入层，它可以把每个输入单词都映射到一个独一无二的连续向量上。这样，每个离散的数字都变成了一个特别的连续向量了。

单词 / 意义	Man (5391)	Woman (9853)	King (4914)	Queen (7157)	Apple (456)	Orange (6257)
Gender	−1	1	-0.95	0.97	0.00	0.01
Royal	0.01	0.02	0.93	0.95	-0.01	0.00
Age	0.03	0.02	0.70	0.69	0.03	-0.02
Food	0.09	0.01	0.02	0.01	0.95	0.97

吴恩达《深度学习专项》中词嵌入的示意图，每一列是一个词嵌入

我们可以把类似的嵌入层加到VQ-VAE的解码器前。这个嵌入层在VQ-VAE里叫做"embedding space（嵌入空间）"，在后续文章中则被称作"codebook"。



VQVAE

离散向量的另一个问题是它不好采样。回忆一下，VAE之所以把图片编码成符合正态分布的连续向量，就是为了能在图像生成时把编码器扔掉，让随机采样出的向量也能通过解码器变成图片。现在倒好，VQ-VAE把图片编码了一个离散向量，这个离散向量构成的空间是不好采样的。VQ-VAE不是面临着和AE一样的问题嘛。

这个问题是无解的。没错！VQ-VAE根本不是一个图像生成模型。它和AE一样，只能很好地完成图像压缩，把图像变成一个短得多的向量，而不支持随机图像生成。VQ-VAE和AE的唯一区别，就是VQ-VAE会编码出离散向量，而AE会编码出连续向量。

可为什么VQ-VAE会被归类到图像生成模型中呢？这是因为VQ-VAE的作者利用VQ-VAE能编码离散向量的特性，使用了一种特别的方法对VQ-VAE的离散编码空间采样。VQ-VAE的作者之前设计了一种图像生成网络，叫做PixelCNN。PixelCNN能拟合一个离散的分布。比如对于图像，PixelCNN能输出某个像素的某个颜色通道取0~255中某个值的概率分布。这不刚好嘛，VQ-VAE也是把图像编码成离散向量。换个更好理解的说法，VQ-VAE能把图像映射成一个「小图像」。我们可以把PixelCNN生成图像的方法搬过来，让PixelCNN学习生成「小图像」。这样，我们就可以用PixelCNN生成离散编码，再利用VQ-VAE的解码器把离散编码变成图像。

让我们来整理一下VQ-VAE的工作过程。

1. 训练VQ-VAE的编码器和解码器，使得VQ-VAE能把图像变成「小图像」，也能把「小图像」变回图像。
2. 训练PixelCNN，让它学习怎么生成「小图像」。
3. 随机采样时，先用PixelCNN采样出「小图像」，再用VQ-VAE把「小图像」翻译成最终的生成图像。

到这里，我们已经学完了VQ-VAE的核心思想。让我们来总结一下。VQ-VAE不是一个VAE，而是一个AE。它的目的是把图像压缩成离散向量。或者换个角度说，它提供了把大图像翻译成「小图像」的方法，也提供了把「小图像」翻译成大图像的方法。这样，一个随机生成大图像的问题，就被转换成了一个等价的随机生成一个较小的「图像」的问题。有一些图像生成模型，比如PixelCNN，更适合拟合离散分布。可以用它们来完成生成「小图像」的问

题，填补上VQ-VAE生成图片的最后一片空缺。

VQ-VAE 设计细节

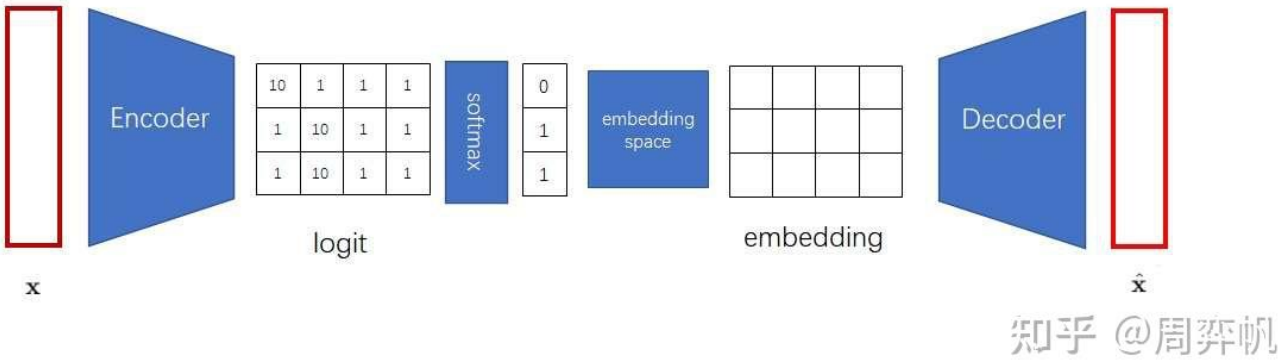
在上一节中，我们虽然认识了VQ-VAE的核心思想，但略过了不少实现细节，比如：

- VQ-VAE的编码器怎么输出离散向量。
- VQ-VAE怎么优化编码器和解码器。
- VQ-VAE怎么优化嵌入空间。

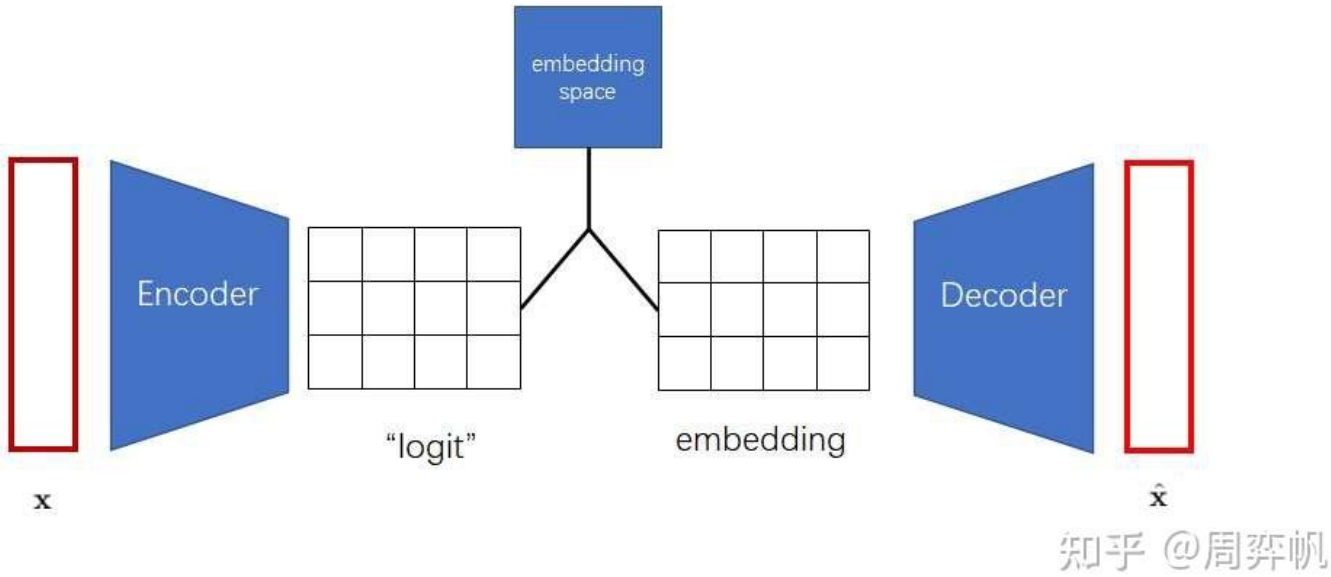
在这一节里，我们来详细探究这些细节。

输出离散编码

想让神经网络输出一个整数，最简单的方法是和多分类模型一样，输出一个Softmax过的概率分布。之后，从概率分布里随机采样一个类别，这个类别的序号就是我们想要的整数。比如在下图中，我们想得到一个由3个整数构成的离散编码，就应该让编码器输出3组logit，再经过Softmax与采样，得到3个整数。

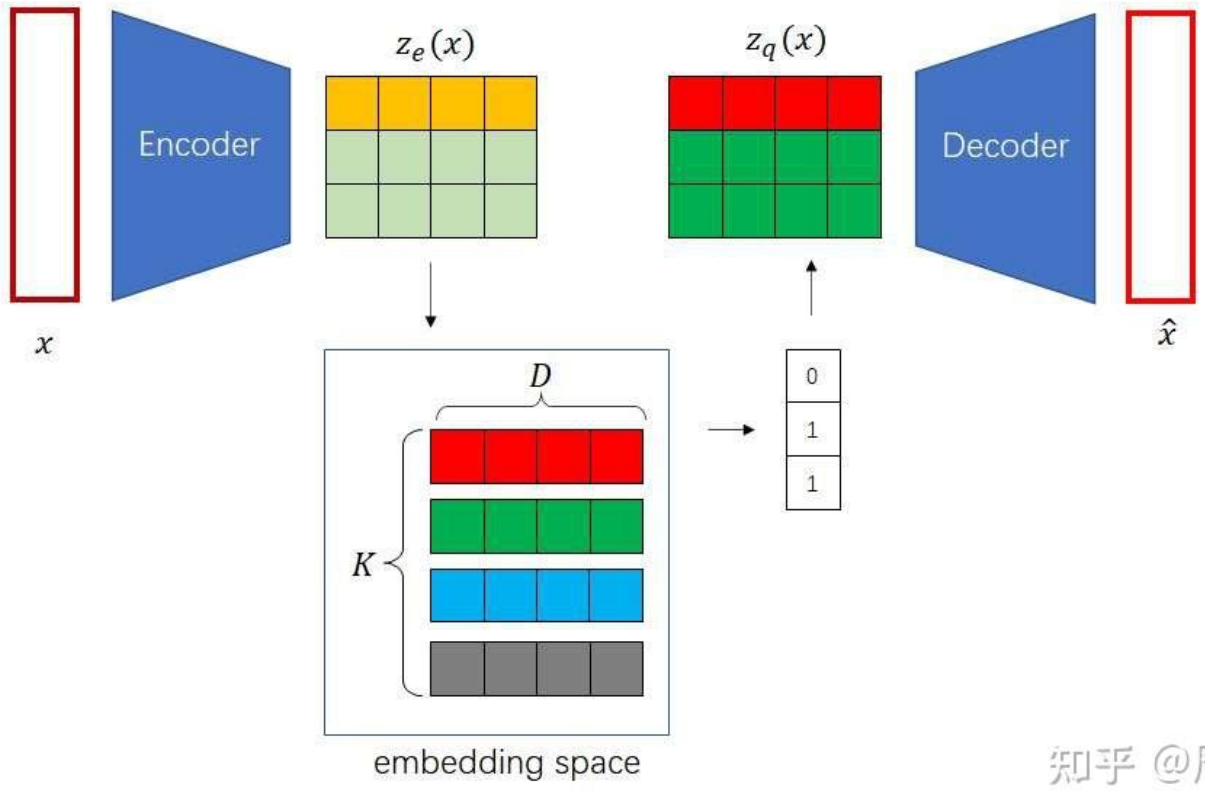


但是，这么做不是最高效的。得到离散编码后，下一步我们又要根据嵌入空间把离散编码转回一个向量。可见，获取离散编码这一步有一点多余。能不能把编码器的输出张量（它之前的名字叫logit）、解码器的输入张量embedding、嵌入空间直接关联起来呢?



VQ-VAE使用了如下方式关联编码器的输出与解码器的输入：假设嵌入空间已经训练完毕，对于编码器的每个输出向量$z_e(x)$，找出它在嵌入空间里的最近邻$z_q(x)$，把$z_e(x)$替换成$z_q(x)$作为解码器的输入。

> 求最近邻，即先计算向量与嵌入空间K个向量每个向量的距离，再对距离数组取一个`argmin`，求出最近的下标（比如图中的0, 1, 1），最后用下标去嵌入空间里取向量。下标构成的数组（比如图中的[0, 1, 1]）也正是VQ-VAE的离散编码。



就这样，我们知道了VQ-VAE是怎么生成离散编码的。VQ-VAE的编码器其实不会显式地输出离散编码，而是输出了多个「假嵌入」$z_e(x)$。之后，VQ-VAE对每个$z_e(x)$在嵌入空间里找最近邻，得到真正的嵌入$z_q(x)$，把$z_q(x)$作为解码器的输入。

虽然我们现在能把编码器和解码器拼接到一起，但现在又多出了一个问题：怎么让梯度从解码器的输入$z_q(x)$传到$z_e(x)$？从$z_e(x)$到$z_q(x)$的变换是一个从数组里取值的操作，这个操作是求不了导的。我们在下一小节里来详细探究一下怎么优化VQ-VAE的编码器和解码器。

优化编码器和解码器

为了优化编码器和解码器，我们先来制订一下VQ-VAE的整体优化目标。由于VQ-VAE其实是一个AE，误差函数里应该只有原图像和目标图像的重建误差。

> 或者非要从VAE的角度说也行。VQ-VAE相当于输出了一个one-hot离散分布。假设输入图像x的离散编码z是k，则分布中仅有$q(z=k|x)=1$，$q(z=others|x)=0$。令离散编码z的先验分布是均匀分布（假设不知道输入图像x，每个离散编码取到的概率是等同的），则先验分布$q(z)$和后验分布$q(z|x)$的KL散度是常量。因此，KL散度项不用算入损失函数里。理解此处的数学推导意义不大，还不如直接理解成VQ-VAE其实是一个AE。

$$L_{reconstruct}=||x-decoder(z_q(x))||_2^2 \tag{1}$$

但直接拿这个误差来训练是不行的。误差中，$z_q(x)$是解码器的输入。从编码器输出$z_e(x)$到$z_q(x)$这一步是不可导的，误差无法从解码器传递到编码器上。要是可以把$z_q(x)$的梯度直接原封不动地复制到$z_e(x)$上就好了。

VQ-VAE使用了一种叫做"straight-through estimator"的技术来完成梯度复制。这种技术是说，前向传播和反向传播的计算可以不对应。你可以为一个运算随意设计求梯度的方法。基于这一技术，VQ-VAE使用了一种叫做sg(stop gradient，停止梯度)的运算：

$$sg(x)=\begin{cases}x\ (in\ forward\ propagation)\\0\ (in\ backward\ propagation)\end{cases} \tag{2}$$

也就是说，前向传播时，sg里的值不变；反向传播时，sg按值为0求导，即此次计算无梯度。（反向传播其实不会用到式子的值，只会用到式子的梯度。反向传播用到的loss值是在前向传播中算的）

基于这种运算，我们可以设计一个把梯度从$z_e(x)$复制到$z_q(x)$的误差：

$$L_{reconstruct}=||x-decoder(z_e(x)+sg(z_q(x)-z_e(x)))||_2^2 \tag{3}$$

也就是说，前向传播时，就是拿解码器输入$z_q(x)$来算误差。

$$L_{reconstruct} = ||x - decoder(z_q(x))||_2^2 \tag{4}$$

而反向传播时，按下面这个公式求梯度，等价于把解码器的梯度全部传给$z_e(x)$。

$$L_{reconstruct} = ||x - decoder(z_e(x))||_2^2 \tag{5}$$

这部分的PyTorch实现如下所示。在PyTorch里，`(x).detach()`就是$sg(x)$，它的值在前向传播时取`x`，反向传播时取`0`。

```
L = x - decoder(z_e + (z_q - z_e).detach())
```

通过这一技巧，我们完成了梯度的传递，可以正常地训练编码器和解码器了。

优化嵌入空间

到目前为止，我们的讨论都是建立在嵌入空间已经训练完毕的前提上的。现在，我们来讨论一下嵌入空间的训练方法。

嵌入空间的优化目标是什么呢？嵌入空间的每一个向量应该能概括一类编码器输出的向量，比如一个表示「青年」的向量应该能概括所有14-35岁的人的照片的编码器输出。因此，嵌入空间的向量应该和其对应编码器输出尽可能接近。如下面的公式所示，$z_e(x)$是编码器的输出向量，$z_q(x)$是其在嵌入空间的最近邻向量。

$$L_e = ||z_e(x) - z_q(x)||_2^2 \tag{6}$$

但作者认为，编码器和嵌入向量的学习速度应该不一样快。于是，他们再次使用了停止梯度的技巧，把上面那个误差函数拆成了两部分。其中，β控制了编码器的相对学习速度。作者发现，算法对β的变化不敏感，β取0.1~2.0都差不多。

$$L_e = ||sg(z_e(x)) - z_q(x)||_2^2 + \beta||z_e(x) - sg(z_q(x))||_2^2 \qquad (7)$$

> 其实，在论文中，作者分别讨论了上面公式里的两个误差。第一个误差来自字典学习算法里的经典算法Vector Quantisation(VQ)，也就是VQ-VAE里的那个VQ，它用于优化嵌入空间。第二个误差叫做专注误差，它用于约束编码器的输出，不让它跑到离嵌入空间里的向量太远的地方。

这样，VQ-VAE总体的损失函数可以写成：（由于算上了重建误差，我们多加一个α用于控制不同误差之间的比例）

$$\begin{aligned} L =& ||x - decoder(z_e(x) + sg(z_q(x) - z_e(x)))||_2^2 \\ &+ \alpha||sg(z_e(x)) - z_q(x)||_2^2 + \beta||z_e(x) - sg(z_q(x))||_2^2 \end{aligned} \qquad (8)$$

总结

VQ-VAE是一个把图像编码成离散向量的图像压缩模型。为了让神经网络理解离散编码，VQ-VAE借鉴了NLP的思想，让每个离散编码值对应一个嵌入，所有的嵌入都存储在一个嵌入空间（又称"codebook"）里。这样，VQ-VAE编码器的输出是若干个「假嵌入」，「假嵌入」会被替换成嵌入空间里最近的真嵌入，输入进解码器里。

VQ-VAE的优化目标由两部分组成：重建误差和嵌入空间误差。重建误差为输入图片和重建图片的均方误差。为了让梯度从解码器传到编码器，作者使用了一种巧妙的停止梯度算子，让正向传播和反向传播按照不同的方式计算。嵌入空间误差为嵌入和其对应的编码器输出的均方误差。为了让嵌入和编码器以不同的速度优化，作者再次使用了停止梯度算子，把嵌入的更新和编码器的更新分开计算。

训练完成后，为了实现随机图像生成，需要对VQ-VAE的离散分布采样，再把采样出来的离散向量对应的嵌入输入进解码器。VQ-VAE论文使用了PixelCNN来采样离散分布。实际上，PixelCNN不是唯一一种可用的拟合离散分布的模型。我们可以把它换成Transformer，甚至是diffusion模型。如果你当年看完VQ-VAE后立刻把PixelCNN换成了diffusion模型，那么恭喜你，你差不多提前设计出了Stable Diffusion。

可见，VQ-VAE最大的贡献是提供了一种图像压缩思路，把生成大图像的问题转换成了一个更简单的生成「小图像」的问题。图像压缩成离散向量时主要借助了嵌入空间，或者说"codebook"这一工具。这种解决问题的思路可以应用到所有图像生成类任务上，比如超分辨率、图像修复、图像去模糊等。所以近两年我们能看到很多使用了codebook的图像生成类工作。

代码实现请参考我后续写的文章

周弈帆：VQVAE PyTorch 实现教程

参考资料

PixelCNN的介绍可以参见我之前的文章：详解PixelCNN大家族。

VQ-VAE的论文为*Neural Discrete Representation Learning*。这篇文章不是很好读懂，建议直接读我的这篇解读。再推荐另一份还不错的中文解读 VQ-VAE的简明介绍：量子化自编码器 - 科学空间|Scientific Spaces。