3 Apr

变分自编码器（三）：这样做为什么能成？

By 苏剑林 | 2018-04-03 | 187706位读者 引用

话说我觉得我自己最近写文章都喜欢长篇大论了，而且扎堆地来～之前连续写了三篇关于Capsule的介绍，这次轮到VAE了，本文是VAE的第三篇探索，说不准还会有第四篇～不管怎么样，数量不重要，重要的是能把问题都想清楚。尤其是对于VAE这种新奇的建模思维来说，更加值得细细地抠。

这次我们要关心的一个问题是：VAE为什么能成？

估计看VAE的读者都会经历这么几个阶段。**第一个阶段是刚读了VAE的介绍，然后云里雾里的，感觉像自编码器又不像自编码器的，反复啃了几遍文字并看了源码之后才知道大概是怎么回事；第二个阶段就是在第一个阶段的基础上，再去细读VAE的原理，诸如隐变量模型、KL散度、变分推断等等，细细看下去，发现虽然折腾来折腾去，最终居然都能看明白了。**

这时候读者可能就进入第三个阶段了。在这个阶段中，我们会有诸多疑问，尤其是可行性的疑问：“为什么它这样反复折腾，最终出来模型是可行的？我也有很多想法呀，为什么我的想法就不行？”

前文之要

让我们再不厌其烦地回顾一下前面关于VAE的一些原理。

VAE希望通过隐变量分解来描述数据X的分布

$$p(x)=\int p(x|z)p(z)dz,\quad p(x,z) = p(x|z)p(z) \tag{1}$$

然后对$p(x|z)$用模型$q(x|z)$拟合，$p(z)$用模型$q(z)$拟合，为了使得模型具有生成能力，$q(z)$定义为标准正态分布。

理论上，我们可以使用边缘概率的最大似然来求解模型：

$$\begin{aligned}q(x|z) =&\mathop{\text{argmax}}_{q(x|z)} \int \tilde{p}(x)\ln\left(\int q(x|z)q(z)dz\right)dx\\ =&\mathop{\text{argmax}}_{q(x|z)} \mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[\ln\left(\int q(x|z)q(z)dz\right)\right]\end{aligned}\tag{2}$$

但是由于圆括号内的积分没法显式求出来，所以我们只好引入KL散度来观察联合分布的差距，最终目标函数变成了

$$\begin{aligned}\mathcal{L} =&\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[-\int p(z|x)\ln q(x|z)dz+\int p(z|x)\ln \frac{p(z|x)}{q(z)}dz\right]\\ =&\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\big[-\ln q(x|z)\big]+\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\Big[\ln \frac{p(z|x)}{q(z)}\Big]\right]\end{aligned}\tag{3}$$

通过最小化$\mathcal{L}$来分别找出$p(z|x)$和$q(x|z)$。前一文《变分自编码器（二）：从贝叶斯观点出发》也表明$\mathcal{L}$有下界$-\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\big[\ln \tilde{p}(x)\big]$，所以比较$\mathcal{L}$与$-\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\big[\ln \tilde{p}(x)\big]$的接近程度就可以比较生成器的相对质量。

采样之惑

在这部分内容中，我们试图对VAE的原理做细致的追问，以求能回答VAE为什么这样做，最关键的问题是，为什么这样做就可行。

采样一个点就够

对于(3)式，我们后面是这样处理的：

1、留意到$\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\Big[\ln \frac{p(z|x)}{q(z)}\Big]$正好是$p(z|x)$和$q(z)$的散度$KL\Big(p(z|x)\Big\Vert q(z)\Big)$，而它们俩都被我们都假设为正态分布，所以这一项可以算出来；

2、$\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\big[-\ln q(x|z)\big]$这一项我们认为只采样一个就够代表性了，所以这一项变成了$-\ln q(x|z),\,z\sim p(z|x)$。

经过这样的处理，整个loss就可以明确写出来了：

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[-\ln q(x|z) + KL\Big(p(z|x)\Big\Vert q(z)\Big)\right],\quad z\sim p(z|x) \tag{4}$$

等等，可能有读者看不过眼了：$KL\Big(p(z|x)\Big\Vert q(z)\Big)$事先算出来，相当于是采样了无穷多个点来估算这一项；而$\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\big[-\ln q(x|z)\big]$却又只采样一个点，大家都是loss的一部分，这样不公平待遇真的好么？

事实上，$\mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\left[\ln \frac{p(z|x)}{q(z)}\right]$也可以只采样一个点来算，也就是说，可以通过全体都只采样一个点，将(3)式变为

$$\begin{aligned}\mathcal{L} =&\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[-\ln q(x|z) + \ln \frac{p(z|x)}{q(z)}\right]\\ =&\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\Big[-\ln q(x|z) + \ln p(z|x) - \ln q(z)\Big],\quad z\sim p(z|x)\end{aligned} \tag{5}$$

这个loss虽然跟标准的VAE有所不同，但事实上也能收敛到相似的结果。

为什么一个点就够？

那么，为什么采样一个点就够了呢？什么情况下才是采样一个点就够？

首先，我举一个“采样一个点不够”的例子，让我们回头看(2)式，它其实可以改写成：

$$q(x|z) = \mathop{\text{argmax}}_{q(x|z)}\,\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\Big[\ln\Big(\mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[q(x|z)\big]\Big)\Big] \tag{6}$$

如果采样一个点就够了，不，这里还是谨慎一点，采样k个点吧，那么我们可以写出

$$q(x|z) = \mathop{\text{argmax}}_{q(x|z)}\,\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[\ln\left(\frac{1}{k}\sum_{i=1}^k q(x|z_i)\right)\right],\quad z_1,\dots,z_k\sim q(z) \tag{7}$$

然后就可以梯度下降训练了。

然而，这样的策略是**不成功**的。实际中我们能采样的数目k，一般要比每个batch的大小要小，这时候最大化$\ln\left(\frac{1}{k}\sum\limits_{i=1}^{k} q(x|z_i)\right)$就会陷入一个“资源争夺战”的境地：**每次迭代时，一个batch中的各个x_i都在争夺$z_1, z_2, \dots, z_k$，谁争夺成功了，$q(x|z)$就大（说白了，哪个x_i能找到专属于它的z_j，这意味着z_j只能生成x_i，不能生成其它的，那么$z(x_i|z_j)$就大），但是每个样本都是平等的，采样又是随机的，我们无法预估每次“资源争夺战”的战况。这完全就是一片混战！**如果数据集仅仅是mnist，那还好一点，因为mnist的样本具有比较明显的聚类倾向，所以采样数母k超过10，那么就够各个x_i分了；但如果像人脸、imagenet这些没有明显聚类倾向、类内方差比较大的数据集，各个z完全是不够分的，一会x_i抢到了z_j，一会x_{i+1}抢到了z_j，训练就直接失败了。

因此，正是这种“僧多粥少”的情况导致上述模型(7)训练不成功。可是，为什么VAE那里采样一个点就成功了呢?

一个点确实够了

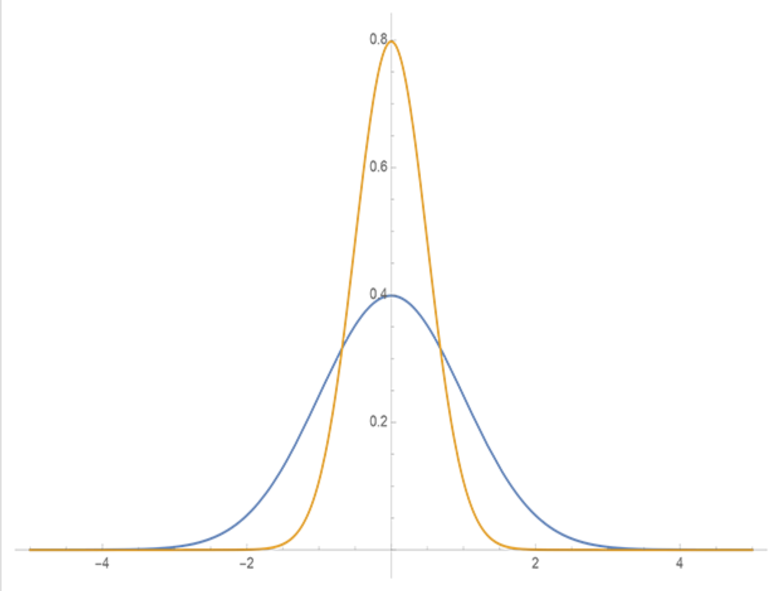
这就得再分析一下我们对$q(x|z)$的想法了，我们称$q(x|z)$为生成模型部分，一般情况下我们假设它为伯努利分布或高斯分布，考虑到伯努利分布应用场景有限，这里只假设它是正态分布，那么

$$q(x|z)=\frac{1}{\prod\limits_{k=1}^{D}\sqrt{2\pi\sigma_{(k)}^2(z)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left\Vert\frac{x-\mu(z)}{\sigma(z)}\right\Vert^2\right)\tag{8}$$

其中$\mu(z)$是用来计算均值的网络，$\sigma^2(z)$是用来计算方差的网络，很多时候我们会固定方差，那就只剩一个计算均值的网络了。

注意，$q(x|z)$只是一个概率分布，我们从$q(z)$中采样出z后，代入$q(x|z)$后得到$q(x|z)$的具体形式，理论上我们还要从$q(x|z)$中再采样一次才得到x。但是，我们并没有这样做，我们直接把均值网络$\mu(z)$的结果就当成x。而能这样做，表明$q(x|z)$是一个方差很小的正态分布（如果是固定方差的话，则训练前需要调低方差，如果不是正态分布而是伯努利分布的话，则不需要考虑这个问题，它只有一组参数），每次采样的结果几乎

都是相同的（都是均值$\mu(z)$），此时x和z之间“几乎”具有一一对应关系，接近确定的函数$x = \mu(z)$。



标准正态分布（蓝）和小方差正态分布（橙）

而对于后验分布$p(z|x)$中，我们假设了它也是一个正态分布。既然前面说z与x几乎是一一对应的，那么这个性质同样也适用验分布$p(z|x)$，这就表明后验分布也会是一个方差很小的正态分布（读者也可以自行从mnist的encoder结果来验证这一点），这也就意味着每次从$p(z|x)$中采样的结果几乎都是相同的。**既然如此，采样一次跟采样多次也就没有什么差别了，因为每次采样的结果都基本一样呀。所以我们就解释了为什么可以从(3)式出发，只采样一个点计算而变成(4)式或(5)式了。**

后验之妙

前面我们初步解释了为什么直接在先验分布$q(z)$中采样训练不好，而在后验分布中$p(z|x)$中采样的话一个点就够了。事实上，利用KL散度在隐变量模型中引入后验分布是一个非常神奇的招数。在这部分内容中，我们再整理一下相关内容，并且给出一个运用这个思想的新例子。

后验的先验

可能读者会有点逻辑混乱：你说$q(x|z)$和$p(z|x)$最终都是方差很小的正态分布，可那是最终的训练结果而已，在建模的时候，理论上我们不能事先知道$q(x|z)$和$p(z|x)$的方差

有多大，那怎么就先去采样一个点了？

我觉得这也是我们**对问题的先验认识**。当我们决定用某个数据集X做VAE时，这个数据集本身就带了很强的约束。比如mnist数据集具有784个像素，事实上它的独立维度远少于784，最明显的，有些边缘像素一直都是0，mnist相对于所有28*28的图像来说，是一个非常小的子集；再比如前几天写的作诗机器人，“唐诗”这个语料集相对于一般的语句来说是一个非常小的子集；甚至我们拿上千个分类的imagenet数据集来看，它也是无穷尽的图像中的一个小子集而已。

这样一来，我们就想着这个数据集X是可以投影到一个低维空间（隐变量空间）中，然后让低维空间中的隐变量跟原来的X集一一对应。读者或许看出来了：这不就是普通的自编码器嘛？是的，其实意思就是说，在普通的自编码器情况下，我们可以做到隐变量跟原数据集的一一对应（完全一一对应意味着$p(z|x)$和$q(x|z)$的方差为0），那么再引入高斯形式的先验分布$q(z)$后，粗略地看，这只是对隐变量空间做了平移和缩放，所以方差也可以不大。

所以，我们应该是事先猜测出$q(x|z)$和$p(z|x)$的方差很小，并且让模型实现这个估计。说白了，“采样一个”这个操作，是我们对数据和模型的先验认识，是对后验分布的先验，并且我们通过这个先验认识来希望模型能靠近这个先验认识去。

整个思路应该是：

> 1、有了原始语料集；
> 2、观察原始语料集，推测可以一一对应某个隐变量空间；
> 3、通过“采样一个”的方式，让模型去学会这个对应。

这部分内容说得有点凌乱～其实也有种多此一举的感觉，希望读者不要被我搞糊涂了。如果觉得混乱的话，忽视这部分吧～

耿直的IWAE

接下来的例子称为“重要性加权自编码器（Importance Weighted Autoencoders）”，简写为“IWAE”，它更加干脆、直接地体现出后验分布的妙用，它在某种程度上它还可以

看成是VAE的升级版。

IWAE的出发点是(2)式，它引入了后验分布对(2)式进行了改写

$$\int q(x|z)q(z)dz = \int p(z|x)\frac{q(x|z)q(z)}{p(z|x)}dz = \mathbb{E}_{z\sim p(z|x)}\left[\frac{q(x|z)q(z)}{p(z|x)}\right] \tag{8}$$

这样一来，(2)式由从$q(z)$采样变成了从$p(z|x)$中采样。我们前面已经论述了$p(z|x)$方差较小，因此采样几个点就够了：

$$\int q(x|z)q(z)dz = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{q(x|z_i)q(z_i)}{p(z_i|x)},\quad z_1,\dots,z_k\sim p(z|x) \tag{9}$$

代入(2)式得到

$$q(x|z) = \mathop{\text{argmax}}_{q(x|z)}\,\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[\ln\left(\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{q(x|z_i)q(z_i)}{p(z_i|x)}\right)\right],\quad z_1,\dots,z_k\sim p(z|x)$$

这就是IWAE。为了对齐$(4),(5)$式，可以将它等价地写成

$$\begin{aligned}&q(x|z) = \mathop{\text{argmin}}_{q(x|z),p(z|x)}\,\mathcal{L}_k,\\ &\mathcal{L}_k = \mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}\left[-\ln\left(\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{q(x|z_i)q(z_i)}{p(z_i|x)}\right)\right],\quad z_1,\dots,z_k\sim p(z|x)\end{aligned} \tag{11}$$

当$k=1$时，上式正好跟(5)式一样，所以从这个角度来看，IWAE是VAE的升级版。

从构造过程来看，在(8)式中将$p(z|x)$替换为z的任意分布都是可以的，选择$p(z|x)$只是因为它有聚焦性，便于采样。而当k足够大时，事实上$p(z|x)$的具体形式已经不重要了。这也就表明，**在IWAE中削弱了encoder模型$p(z|x)$的作用，换来了生成模型$q(x|z)$的提升。因为在VAE中，我们假设$p(z|x)$是正态分布，这只是一种容易算的近似，这个近似的合理性，同时也会影响生成模型$q(x|z)$的质量。可以证明，$\mathcal{L}_k$能比$\mathcal{L}$更接近下界$-\mathbb{E}_{x\sim\tilde{p}(x)}[\ln\tilde{p}(x)]$，所以生成模型的质量会更优。**

直觉来讲，就是在IWAE中，$p(z|x)$的近似程度已经不是那么重要了，所以能得到更好的生成模型。不过代价是编码模型的质量就降低了，这也是因为$p(z|x)$的重要性降低了，模型就不会太集中精力训练$p(z|x)$了。所以**如果我们是希望获得好的encoder的话，IWAE是不可取的。**

还有一个工作《Tighter Variational Bounds are Not Necessarily Better》据说同时了提高了encoder和decoder的质量，不过我还没看懂～

重参之神

如果说后验分布的引入成功勾画了VAE的整个蓝图，那么重参数技巧就是那“画龙点睛”的“神来之笔”。

前面我们说，VAE引入后验分布使得采样从宽松的标准正态分布$q(z)$转移到了紧凑的正态分布$p(z|x)$。然而，尽管它们都是正态分布，但是含义却大不一样。我们先写出

$$p(z|x)=\frac{1}{\prod\limits_{k=1}^{d}\sqrt{2\pi\sigma_{(k)}^2(x)}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left\Vert\frac{z-\mu(x)}{\sigma(x)}\right\Vert^2\right)\tag{12}$$

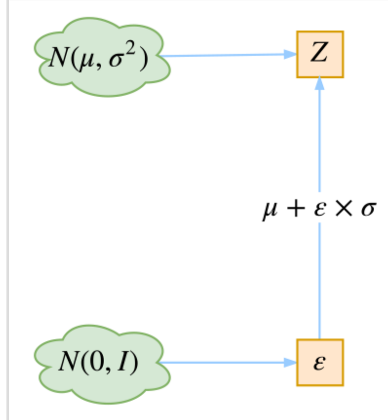
也就是说，$p(z|x)$的均值和方差都是要训练的模型。

让我们想象一下，当模型跑到这一步，然后算出了$\mu(x)$和$\sigma(x)$，接着呢，就可以构建正态分布然后采样了。可采样出来的是什么东西？是一个向量，并且这个向量我们看不出它跟$\mu(x)$和$\sigma(x)$的关系，所以相当于一个常向量，这个向量一求导就没了，从而在梯度下降中，我们无法得到任何反馈来更新$\mu(x)$和$\sigma(x)$。

这时候重参数技巧就闪亮登场了，它直截了当地告诉我们：

$$z=\mu(x)+\varepsilon\times\sigma(x),\quad \varepsilon\sim\mathcal{N}(0,I).$$

没有比这更简洁了，看起来只是一个微小的变换，但它明确地告诉了我们z跟$\mu(x),\sigma(x)$的关系！于是z求导就不再是0，$\mu(x),\sigma(x)$终于可以获得属于它们的反馈了。至此，模型一切就绪，接下来就是写代码的时间了～



重参数技巧

可见，“重参数”堪称绝杀呀～

本文之水

哆里哆嗦，又水了一文～

本文大概是希望把VAE后续的一些小细节说清楚，特别是VAE如何通过巧妙地引入后验分布来解决采样难题（从而解决了训练难题），并且顺道介绍了一下IWAE。

要求直观理解就难免会失去一点严谨性，这是二者不可兼得的事情。所以，对于文章中的毛病，望高手读者多多海涵，也欢迎批评建议～

如果您需要引用本文，请参考：

苏剑林. (Apr. 03, 2018). 《变分自编码器（三）：这样做为什么能成？》[Blog post]. Retrieved from https://spaces.ac.cn/archives/5383

```
@online{kexuefm-5383,
        title={变分自编码器（三）：这样做为什么能成？},
        author={苏剑林},
        year={2018},
        month={Apr},
        url={\url{https://spaces.ac.cn/archives/5383}},
}
```