



图 1: 变分自编码器的网络结构

推断网络和生成网络的目标都是最大化证据下界 $ELBO$ (evidence lower bound)

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; \mathbf{x}) = \mathbb{E}_{\mathbf{z} \sim q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \phi)} [\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)] - D_{KL}[q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \phi) \| p(\mathbf{z}; \theta)] \quad (1)$$

其中, $\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)$ 是边缘对数似然 (marginal log likelihood), $ELBO$ 也叫做“边缘对数似然的下界 (a lower bound on the marginal log likelihood)”

最大化 $ELBO$ 等价于最大化 Eq.(1) 中的期望 \mathbb{E} 、最小化 D_{KL} .

期望 \mathbb{E} 一般通过采样的方式进行计算。对于每个样本 \mathbf{x} , 根据 $q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \phi)$ 采集 M 个 $\mathbf{z}^{(m)}$,

$$\mathbb{E}_{\mathbf{z} \sim q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \theta)} [\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)] \approx \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}^{(m)}; \theta) \quad (2)$$

如果采用随机梯度 (stochastic gradients) 方法, 每次从数据集中采集一个 \mathbf{x} , 然后根据 $q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \phi)$ 采集一个隐变量 \mathbf{z} , 则目标函数变为

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; \mathbf{x}) = \log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta) - D_{KL}[q(\mathbf{z}|\mathbf{x}; \phi) \| p(\mathbf{z}; \theta)] \quad (3)$$

即: 最大化 $\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta) \Rightarrow$ 最小化 $-\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)$

\therefore 训练目标: 最小化 $\underbrace{-\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)}_{\text{generation_loss}}$ 和 $\underbrace{D_{KL}}_{\text{latent_loss}}$

Auto-Encoding Variational Bayes - Appendix C.1 给出了 $\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}; \theta)$ 的计算公式。公式中的 \mathbf{y} 就是代码中的 `x_reconstr_mean`. Appendix B 给出了 D_{KL} 的计算公式。其他参数的计算公式的出处亦注释在代码中。

代码中定义 encoder network 和 decoder network 时的 `layer_2` 相当于论文 Auto-Encoding Variational Bayes 给出的众多公式中的 \mathbf{h} . 论文的示例网络 MLP 只有一层隐藏层, 而代码中定义了两层隐藏层, 因此需要一个转移方程 `transfer_func` 来完成层与层之间的转移.