变分自编码器

xbZhong

2025-06-20

本页PDF

VAE（Variational Autoencoder 变分自编码器）

- 与 **AE** 结构相似，但是用了特殊技巧使得 **VAE的decoder** 对于一个 **随机的向量** 可以产生结果较好的图

自编码器(AE)与VAE的对比

自编码器(AE)的局限性

- 自编码器将输入图像压缩为低维潜在向量，然后通过解码器重建图像
- 关键局限：形成的是严格的一对一映射关系
    - 特定输入 → 特定潜在向量 → 特定重建图像
- 潜在空间不连续，缺乏良好的插值特性
- 无法生成新的、有意义的样本

VAE的突破

- VAE不是学习确定的潜在向量，而是学习概率分布
- 每个输入被映射到潜在空间中的分布(通常是高斯分布)，由均值向量(μ)和方差向量(σ^2)确定
- **核心思想**：通过学习分布而非单点表示，实现了潜在空间的连续性和平滑性
- 通过**学习分布而非固定点**，VAE能够在潜在空间中的相邻点产生**相似但不完全相同**的图像，使得整个潜在空间**连续且有意义**，从而可以从中随机采样生成新的图像。

核心概念

- $P(x)$ 为真实数据的分布，但我们并不知道
- z 是 x 的特征，作为解码器的输入，解码器会将 z 映射到 $P(x)$ 上，输出 x 的条件分布
    - 在这里假设 z 服从标准正态分布，但 z 是**无法穷举**的，因为**特征**是一个抽象的东西
- VAE的真正**训练目标**是**最大化数据的边缘似然 P(x)**
    - $P(x) = \int P(z)P(x|z)$
    - z 是一个正态分布(通常是标准正态分布 $N(0, I)$)
    - 解码器将 z 空间中的每个点映射到 x 空间中的概率分布
    - 最终的 $P(x)$ 正是这些单个正态分布的积分(叠加)

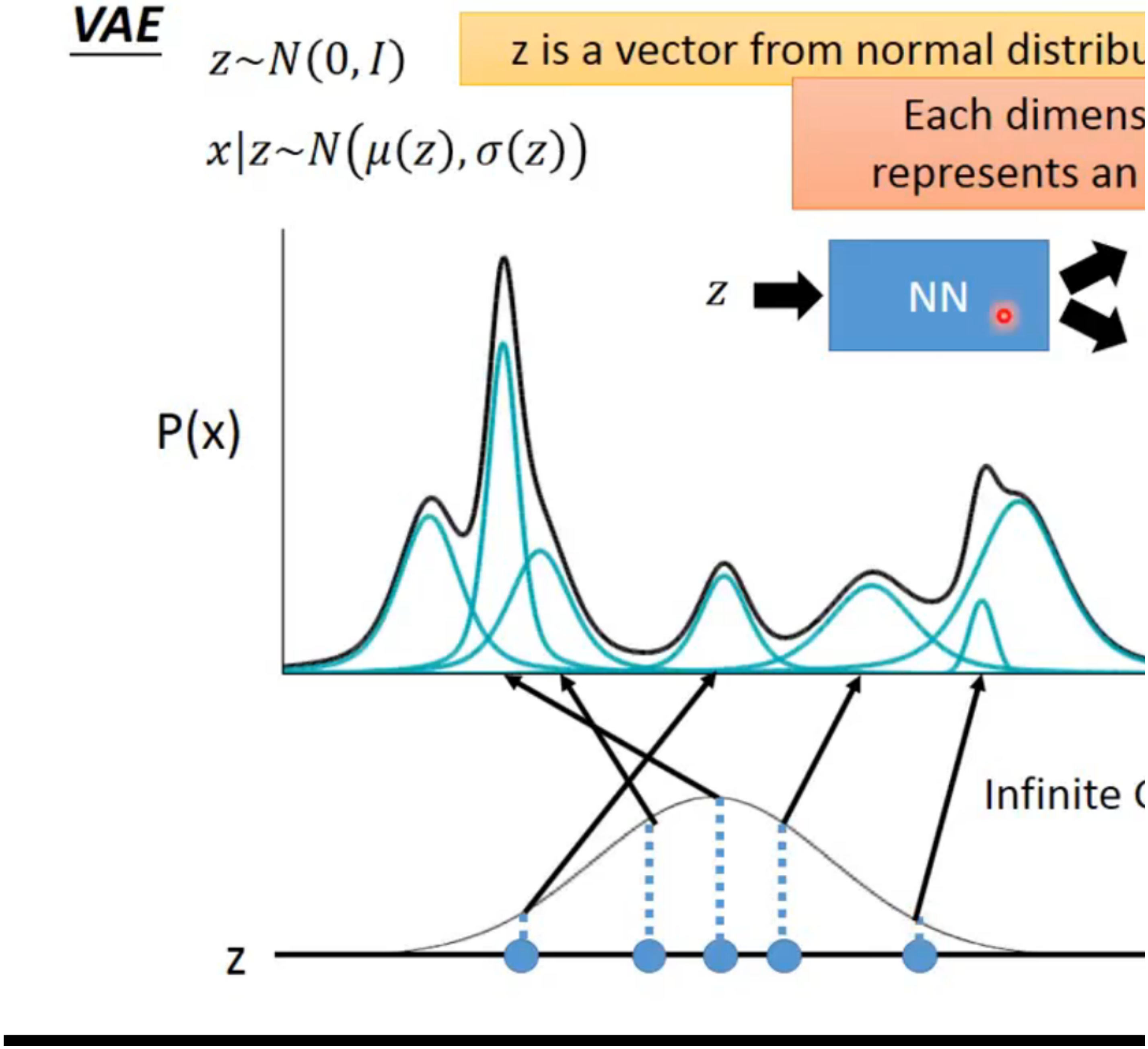


image-20250430233601234

- **Decoder**：将潜在变量 z 作为输入，通过神经网络 (NN) 输出条件分布 $P(x|z)$ 的参数，即均值 $\mu(z)$ 和方差 $\sigma(z)$。这决定了给定 z 时 x 的概率分布 $\boldsymbol{P(x|z)}$
- **Encoder**：将观测数据 x 作为输入，通过另一个神经网络 (NN') 输出近似后验分布 $q(z|x)$ 的参数，即均值 $\mu'(x)$ 和方差 $\sigma'(x)$。这用于近似真实但难以计算的后验分布 $\boldsymbol{P(z|x)}$

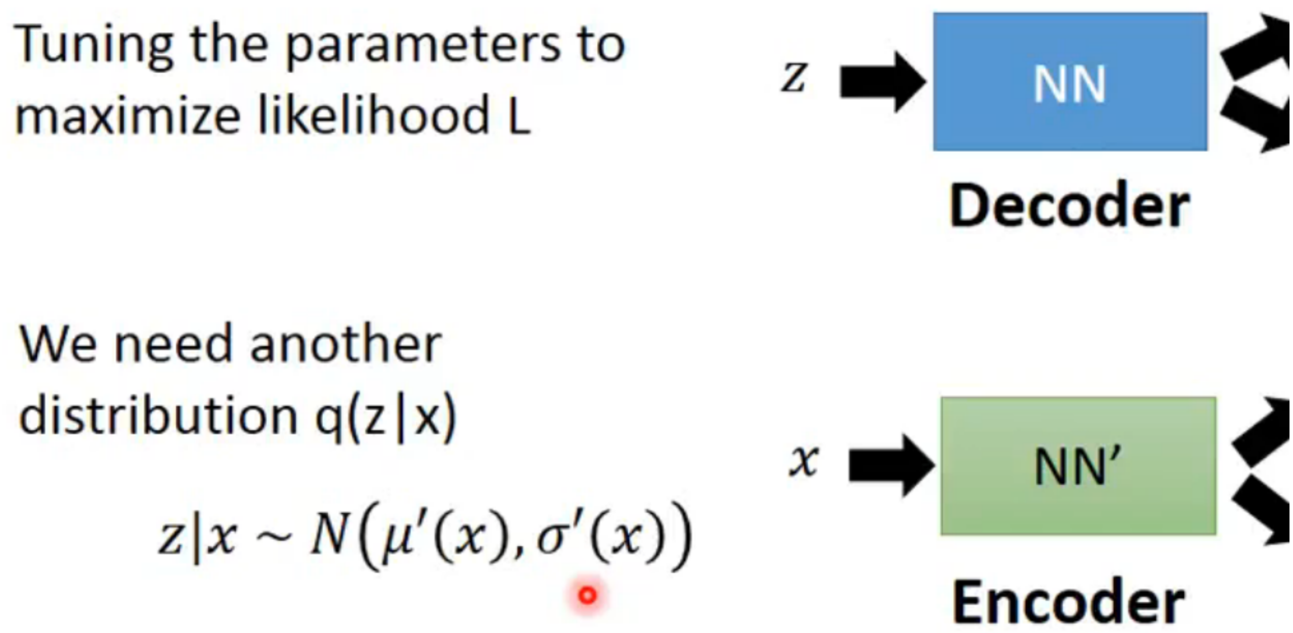
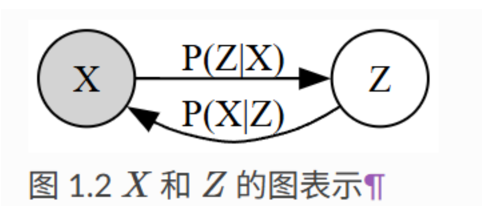


image-20250501000147212

数学推导

有疑问可以参考[1. 变分自编码器（Variational Autoencoder） — 张振虎的博客 张振虎 文档]

> **X为可观测变量（Observed variable），Z 为不可观测变量（Unobserved variable）**
>
> **X为图片样本，Z表示潜在空间中的数据**
>
> - 从X到Z相当于给定X求Z的条件概率 $P(Z|X)$
> - 从Z到X相当于给定Z求X的条件概率 $P(X|Z)$
>
> 
>
>
> 图 1.2 X 和 Z 的图表示¶
>
> image-20250502115738249
>
> **完整的模型表示是二者的联合概率分布 $P(X, Z)$**
>
> 我们用 □ 来表示观测样本的集合，**如果X和Z都可以观测到**，那么 □ = $\{(z^{(1)}, x^{(1)}), \cdots, (z^{(N)}, x^{(N)})\}$，则目标损失函数为：
> $$ \mathcal{L}(\theta;\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^N \ln p_{\theta}(z^{(i)},x^{(i)}) \tag{1.1} $$
> 但是我们并**没有Z的观测样本**，此时观测样本集合为 □ = $\{x^{(1)}, \cdots, x^{(N)}\}$，目标损失函数变成
> $$ \mathcal{L}(\theta;\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^N \ln{p_{\theta}(x^{(i)})} = \sum_{i=1}^N \ln{\int_{z}{p_{\theta}(x^{(i)},z)dz}} \tag{1.2} $$
> **积分难以计算，无法直接求解**
>
> ## 证据下界
>
> 补充 Jensen 不等式
> $$ \text{对于凹函数 } f(x) \text{，有如下关系} \\ f(\mathbb{E}[X]) \geq \mathbb{E}[f(X)] \\ \text{而对于凸函数，不等号方向相反} $$
> 定义一个**变量Z的概率密度函数** $q_{\phi}(z|x)$
>
> 推导出公式(1.2)的下界函数
> $$ \begin{aligned} \mathcal{L}(\theta;x) &= \ln p_{\theta}(x) \\ &=\ln \int_z{p_{\theta}(x,z)} \\ &=\ln \int_z{q_{\phi}(z|x)\frac{p_{\theta}(x,z)}{q_{\phi}(z|x)}} \quad \text{同时乘除}q_{\phi}(z|x)\text{，等于没变化}\\ &= \ln \mathbb{E}_{q_{\phi}(z|x)}[\frac{p_{\theta}(x,z)}{q_{\phi}(z|x)}] \\ &\geq \mathbb{E}_{q_{\phi}(z|x)} \ln{[\frac{p_{\theta}(x,z)}{q_{\phi}(z|x)}]} \quad \text{根据Jensen不等式} \\ &=\int_z{q_{\phi}(z|x)}\ln{[\frac{p_{\theta}(x,z)}{q_{\phi}(z|x)}]} \\ &= [\int_z{q_{\phi}(z|x)\ln{p_{\theta}(x,z)}} - \int_z{q_{\phi}(z|x)}\ln{q_{\phi}(z|x)}] \\ &\triangleq \mathcal{L}(q,\theta) \end{aligned} $$
> 找到**下界函数**（ELBO） $\mathcal{L}(q, \theta)$
> $$ \begin{aligned} \mathcal{L}(q,\theta) &=[\int_z{q_{\phi}(z|x)\ln{p_{\theta}(x,z)}} - \int_z{q_{\phi}(z|x)}\ln{q_{\phi}(z|x)}] \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p_{\theta}(x,z)}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z|x)}] \end{aligned} $$
> 而 $p(x, z) = p(z)p(x|z) = p(x)p(z|x)$，说明有两种分解方法变换**下界函数ELBO**
>
> ### 第一种形式

使用 z 的后验 $p(z|x)$ 进行分解
$$ \begin{aligned} \mathcal{L}(q,\theta) &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p_{\theta}(x,z)}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z|x)}] \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p_{\theta}(x)}+\ln{p_{\theta}(z|x)}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z|x)}] \\ &= \underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p_{\theta}(x)}]}_{\text{与z无关，期望符号可以直接去掉}}+\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(z|x)}}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z|x)}] \\ &= \underbrace{\ln{p_{\theta}(x)}}_{\text{观察数据对数似然/证据}}+\underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(z|x)}}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z|x)}]}_{\text{KL散度}} \\ &= \underbrace{\ell(\theta;x)}_{\text{观察数据对数似然/证据}}-\underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p_{\theta}(z|x))}_{\text{KL散度}} \end{aligned} $$
整理后可得到
$$ \underbrace{\ell(\theta;x)}_{\text{观察数据对数似然/证据}} = \underbrace{\mathcal{L}(q,\theta)}_{\text{下界函数ELBO}} + \underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p_{\theta}(z|x))}_{\text{KL散度}} $$

第二种形式（主要优化方向）

$$ \begin{aligned} \mathcal{L}(q,\theta) &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p_{\theta}(x,z)}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z)}] \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p(z)}+\ln{p_{\theta}(x|z)}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z)}] \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{p(z)}]+\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z)}] \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}]+\underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p(z)}}] - \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[\ln{q_{\phi}(z)}]}_{\text{KL散度}} \\ &= \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}] - \underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p(z))}_{q_{\phi}(z)\text{和先验}p(z)\text{的KL散度}} \end{aligned} $$

根据前文的结论，当 $q_{\phi}(z)$ 等于 z 的后验 $p_{\theta}(z|x)$ 时，下界函数 $\mathcal{L}(q,\theta)$ 和观测数据的对数似然函数 $\ell(\theta;x)$ 是相等的。因此，我们令 $q_{\phi}(z) = p_{\theta}(z|x)$， 为了符号区分这里记作 $q_{\phi}(z) = q_{\phi}(z|x)$，可得
$$ \begin{aligned} \mathcal{L}(q,\theta) &= \underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x)}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}]}_{\text{重建项(reconstruction term)}}-\underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p(z))}_{\text{先验匹配项(prior matching term)}} \\ &= \ell(\theta;x) \end{aligned} $$

疑难杂点

分布	含义	是否学习	网络对应
$p(z)$	潜变量的先验分布	否，通常固定为N(0,I)	无
$q_{\phi}(z\|x)$	近似后验分布	是，学习参数ϕ	编码器
$p_{\theta}(x\|z)$	条件生成分布	是，学习参数θ	解码器
$p_{\theta}(z\|x)$	真实后验分布	理论上是，但难以直接计算	无
$p_{\theta}(x)$	数据的边缘分布	理论上是，但难以直接优化	整个VAE

- $p(z)$ 是未看见任何数据之前对 z 的**假设分布**，通常是正态分布
- $p(z|x)$ 是看到数据之后 z 的分布，为**真实后验**
- 实际情况中真实后验**难以计算**（因为要对 z 积分，但是我们不知道 z 的特征），不采用第一种方式进行训练，而使用第二种我们对 z 假设的分布进行训练
- 我们希望编码器的输出可以接近我们假设的 z 的分布，可以使得 **ELBO** 最大，从而使对数似然最大

后验分布-编码器

后验分布 $q_{\phi}(z|x)$ 是一个**高斯分布**，但我们不知道其均值和方差。这里我们分别用 μ_z 和 Σ_z 表示后验分布的均值参数和方差参数， 此时有 $q_{\phi}(z|x) = \mathcal{N}(\mu_z, \Sigma_z)$，由于模型假设 Z 的各维度之间是相互独立的， 因此其协方差 Σ_z 是一个对角矩阵，非对角线位置元素值为 0 ，对角线元素是**未知参数**。

在 VAE 中，Z 是一个 **随机变量**，不能从 X 直接映射到 Z ，但是输入变量 X 是通过影响 Z 的均值参数和方差参数间接影响到 Z，就是说均值参数 μ_z 和方差参数 Σ_z 是和 x 相关的，即：
$$ \begin{aligned} \mu_z &= \mu_{\phi}(x) = \text{encoder}_{\phi}(x) \\ \Sigma_z &= \Sigma_{\phi}(x) = \text{encoder}_{\phi}(x) \end{aligned} $$

KL散度-正则项

$$ \begin{aligned} KL(q_{\phi}(z)||p(z)) &= KL(\mathcal{N}(\mu_z,\Sigma_z)||\mathcal{N}(0,I)) \\ &= \frac{1}{2}(\text{tr}(\Sigma_z)+\mu_z^T\mu_z-k-\log{\det(\Sigma_z)}) \end{aligned} $$

上述是模型训练过程目标函数的一项，k 是向量的维度，他的作用相当于一个**正则项**，使得后验 $q_{\phi}(z|x)$ 尽量接近 z 先验。

生成分布-解码器

$\underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x)}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}]}_{\text{重建项(reconstruction term)}}$ 对应着解码器的部分，从变量 Z 重建回 X。z 到 x 的映射是通过为 z 和 X 的均值参数 μ_x 建立映射函数实现的。这里并没有建立从 z 到 X 方差参数 Σ_x 之间的映射， 这是因为模型为了简单，**假设 X 的方差为常量，即单位方差 I**
$\mu_x = \mu_{\theta}(z) = \text{decoder}_{\theta}(z)$
因为编码器的输出是 Z 的分布，所以没办法用解析计算的方式计算它的积分。这时可以借助**马尔科夫链蒙特卡洛法**，即**采样法近似实现**。其实就是从后验概率分布 $q_{\phi}(z|x)$ 随机采样很多个 z 值，代入进去算平均值。
$$ \mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x)}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}] \approx \frac{1}{L}\sum_{l=1}^L[\ln{p_{\theta}(x|z^{(l)})}] $$
采样次数 L 可以作为模型的超参数，可以人为指定，根据作者的经验 $L = 1$ 其实也可以。 然而这有产生了新的问题，从编码器网络到解码器网络中间有个**随机采样**，即 z 是通过随机采样参数的， 而随机采样过程是**不可导**的，这导致梯度不能从解码器传递到编码器。VAE 的作者， 在这里采用**重参数化**（reparameterization trick）的技巧来解决这个问题。

参数重整

重参数化的思想其实很简单，就是稍微调整了一下采样的方法

我们要从后验分布 $q_{\phi}(x|z)$ 中随机采样 z 的值，这个后验分布是一个高斯分布 $\mathcal{N}(\mu_z,\Sigma_z)$，直接从这个分布中采样会导致模型不可导，梯度无法传递。这里可以利用高斯分布的一个特点来改变采样过程，**任意均值和方差的高斯分布都可以从一个标准正态分布 $\mathcal{N}(0,I)$ 变换得到**，我们用符号 ϵ 表示一个多维标准正态分布，即 $\epsilon\sim\mathcal{N}(0,I)$，任意另一个高斯分布 $\mathcal{N}(\mu_z,\Sigma_z)$ 的值可以通过下式直接计算得到

$$ \begin{aligned} z &= \mu_z + \sqrt{\Sigma_z} \odot \epsilon \\ &=\mu_{\theta}(x)+\sqrt{\Sigma_{\phi}(x)} \odot \epsilon,\epsilon \sim \mathcal{N}(0,I) \end{aligned} $$

也就是说，可以先从标准正态分布 $\mathcal{N}(0,I)$ 随机采样一个值，然后通过上述公式计算得到 z 的值，其中 $\odot$ 表示元素乘法。这就相当于在 encoder 的输出 $\mu_{\phi}(x)$ 的基础上加上高斯噪声，再乘上 encoder 的另一个输出 $\sqrt{\Sigma_{\phi}(x)}$，随机采样的是高斯噪声 ϵ，而它不影响模型的梯度传递

损失函数推导

回顾一下**多维正态分布的表达式**

$$ p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}}\exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma ^{-1}(x-\mu)\} $$

在前面我们假设 $p_{\theta}(x|z)$ 是**一个单位方差的高斯分布**，根据高斯分布的概率密度函数，$p_{\theta}(x|z)$ 的形式为

$$ \begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}}\exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma ^{-1}(x-\mu)\} \\ & \propto \exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu_x)^T(x-\mu_x)\} \\ &= \exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu_{\theta}(z))^T(x-\mu_{\theta}(z))\} \\ &= \exp\{-\frac{1}{2}(x-\text{decoder}(z))^T(x-x-\text{decoder}(z))\} \\ \end{aligned} $$

最后下界函数 $ELBO$ 的形式为

$$ \begin{aligned} \mathcal{L}(q,\theta) &= \underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}]}_{对应解码过程} - \underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p(z))}_{对应编码过程} \\ &= \frac{1}{L}\sum_{l=1}^L[\ln{p_{\theta}(x|z^{(l)})}] - KL(\mathcal{N}(\mu_z,\Sigma_z)||\mathcal{N}(0,I)) \\ &\propto \frac{1}{L}\sum_{l=1}^L[-\frac{1}{2}(x-\mu_x)^T(x-\mu_x)] - [\frac{1}{2}(\text{tr}(\Sigma_z)+\mu_z^T\mu_z-k-\log{\det(\Sigma_z)})]\\ & \propto -\frac{1}{L}\sum_{l=1}^L[(x-\mu_x)^T(x-\mu_x)] - [(\text{tr}(\Sigma_z)+\mu_z^T\mu_z-k-\log{\det(\Sigma_z)})]\\ \end{aligned} $$

其中：

$$ \begin{aligned} \mu_x &= \mu_{\theta}(z^{(l)}) = \text{decoder}(z^{(l)}) \\ z^{(l)} &= \mu_z + \sqrt{\Sigma_z} \odot \epsilon, \epsilon \sim \mathcal{N}(0,I)\\ \mu_z &= \mu_{\phi}(x) = \text{encoder}(x)_{\mu_z}\\ \Sigma_z &= \Sigma_{\phi}(x) = \text{encoder}(x)_{\Sigma_z} \end{aligned} $$

由于我们是通过极大化 $\mathcal{L}(q,\theta)$ 进行参数求解，其中有一些参数项可以去掉，最后可以等价于同时极小化下面两项

$$ \frac{1}{L}\sum_{l=1}^L[\underbrace{(x-\mu_x)^T(x-\mu_x)}_{均方误差}] $$

和

$(\text{tr}(\Sigma_z)+{\mu_z}^T\mu_z-k-\log\det(\Sigma_z))$

可以见得，第一项是均方误差，第二项是正则项。

个人理解

- 重建项是为了能够通过 z 还原出 x
- 先验匹配项是希望编码器生成的 z 的分布可以接近我们给定的分布
  - 使用的时候在给定的分布里抽样即可，这样解码器就能正确还原
- 编码器接收 x，将 x 映射到不同均值，不同方差的正态分布，解码器根据不同均值和不同方差采样出来的点去还原图像
  - 由于每张图像具有不同的特征，所以编码器要为每张图像输出属于他自己的高斯分布

$$ \mathcal{L}(q,\theta) = \underbrace{\mathbb{E}_{z \sim q_{\phi}(z|x)}[{\ln{p_{\theta}(x|z)}}]}_{\text{重建项(reconstruction term)}}- \underbrace{KL(q_{\phi}(z|x)||p(z))}_{\text{先验匹配项(prior matching term)}} $$

训练流程

1. 输入图像 x
2. 编码器输出该图像对应的分布 μ,σ
3. 从分布中采样出 z
4. 解码器用 z 生成图像 $\hat{x}$
5. 对比 x 和 $\hat{x}$，计算重建误差
6. 同时计算这个分布与 $\mathcal{N}(0,1)$ 的 KL 距离
7. 两部分误差加在一起做反向传播更新参数

AE（Auto-encoder 自编码器）

基本概念：

自编码器是一种特殊的神经网络，主要目的是**学习如何压缩和重建数据**。想象一下，你要把一张照片通过一个狭窄的管道传输，然后在**另一端重新组装成**原来的样子。自编码器就是学习如何**进行这种压缩和重建**的过程

核心特点：

试图将输入数据编码成一个低维表示（称为潜在空间或编码），然后再从这个低维表示重建原始输入数据

主要组成部分

自编码器主要由三个部分组成：

1. 编码器（**Encoder**）：
   - 将输入数据转换为较低维度的表示（称为“潜在表示”或“编码”）
   - 相当于压缩过程
   - 通常由几层神经网络组成，逐渐减少神经元数量
2. 潜在空间（**Latent Space**）：
   - 编码后的数据存在的压缩表示空间
   - 通常维度比原始数据小得多
   - 包含了数据的主要特征信息

3. 解码器（**Decoder**）：
    - 将潜在表示转换回原始数据维度
    - 相当于解压缩过程
    - 结构通常是编码器的镜像，神经元数量逐渐增加

工作流程

1. 输入数据（如图像）进入编码器
2. 编码器将数据压缩到潜在空间（例如，从784维压缩到32维）
3. 解码器尝试从潜在空间重建原始输入
4. 比较重建结果与原始输入的差异（称为“重建误差”）
5. 通过反向传播调整编码器和解码器的参数，使重建误差最小化

自编码器的用途包括：

- 数据降维
- 特征学习
- 异常检测
- 图像去噪
- 生成模型的基础