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)

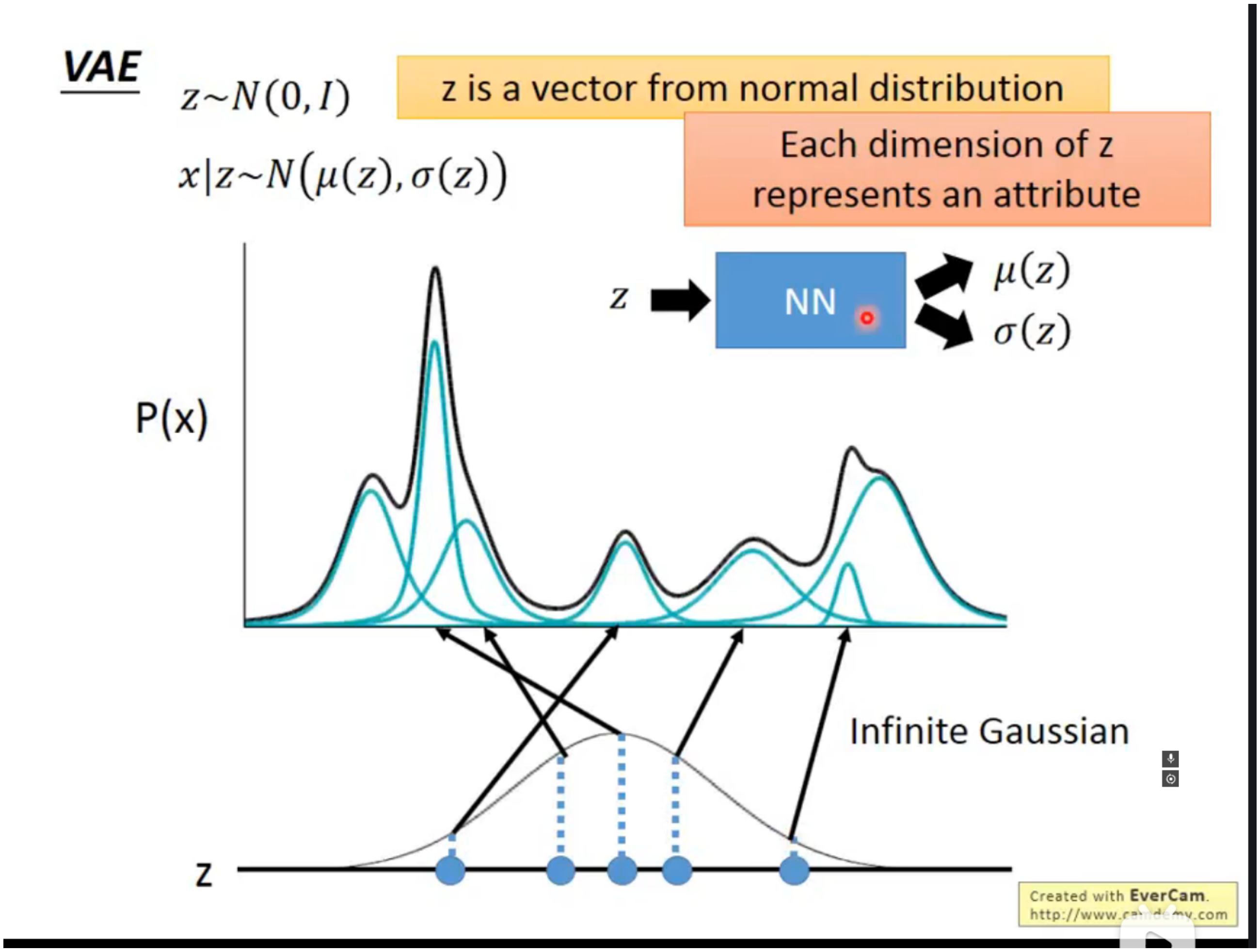


image-20250430233601234

- **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 $P(x|z)$
- **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 $P(z|x)$

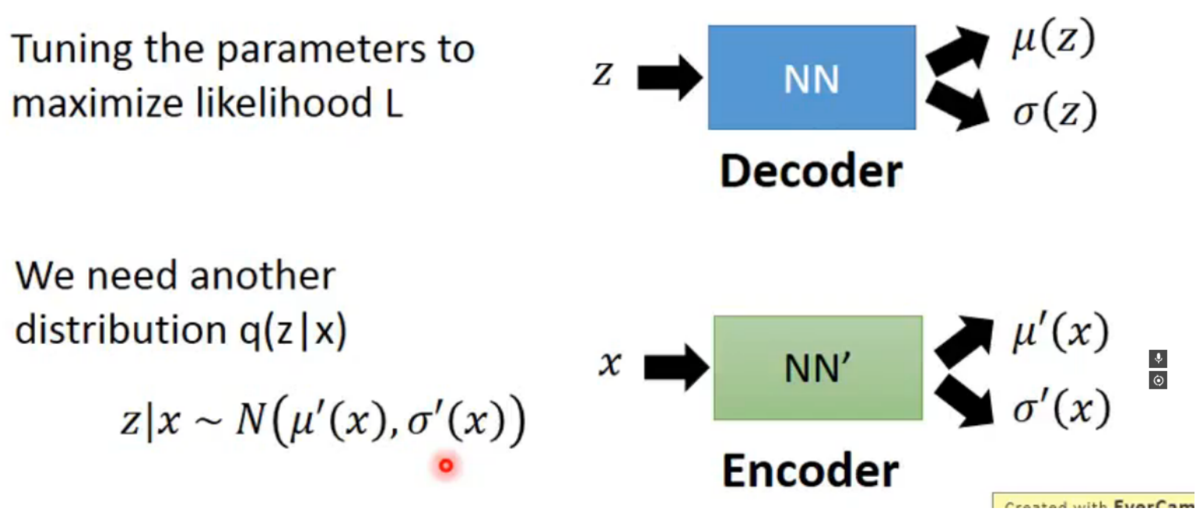
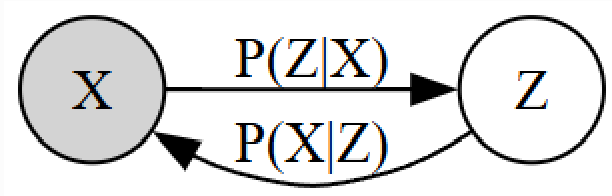


image-20250501000147212

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 $\mathcal{D}$ 来表示观测样本的集合，**如果X和Z都可以观测到**，那么 $\mathcal{D}=\{(z^{(1)},x^{(1)}),\cdots,(z^{(N)},x^{(N)})\}$，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 $\mathcal{D}=\{x^{(1)},\cdots,x^{(N)}\}$，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
>
> 对于凹函数 $f(x)$，有如下关系$f(\mathbb{E}[X])\geq\mathbb{E}[f(X)]$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

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

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

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

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

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

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