# 能量视角下的GAN模型（一）：GAN = “挖坑” + “跳坑”

30 Jan By 苏剑林 | 2019-01-30 | 31858位读者

在这个系列中，我们尝试从能量的视角理解GAN。我们会发现这个视角如此美妙和直观，甚至让人拍案叫绝。

本视角直接受启发于Benjio团队的新作《Maximum Entropy Generators for Energy-Based Models》，这篇文章前几天出现在arxiv上。当然，能量模型与GAN的联系由来已久，并不是这篇文章的独创，只不过这篇文章做得仔细和完善一些。另外本文还补充了自己的一些理解和思考上去，力求更为易懂和完整。

“看那挖坑的人，有啥不一样～”

作为第一篇文章，我们先来给出一个直白的类比推导：GAN实际上就是一场前仆后继（前挖后跳？）的“挖坑”与“跳坑”之旅～

总的来说，本文的大致内容如下：

1、给出了GAN/WGAN的清晰直观的能量图像；

2、讨论了判别器（能量函数）的训练情况和策略；

3、指出了梯度惩罚一个非常漂亮而直观的能量解释；

4、讨论了GAN中优化器的选择问题。

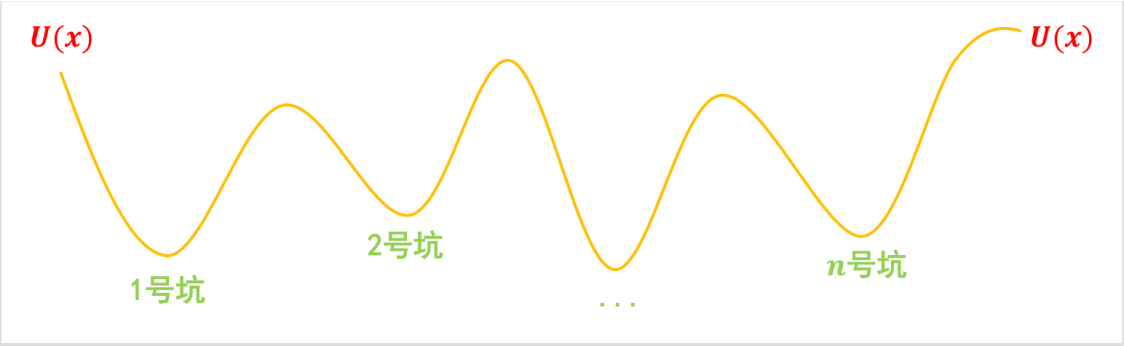
## 前“挖”后“跳” #

在这部分中，我们以尽量通俗的比喻来解释什么是能量视角下的GAN。

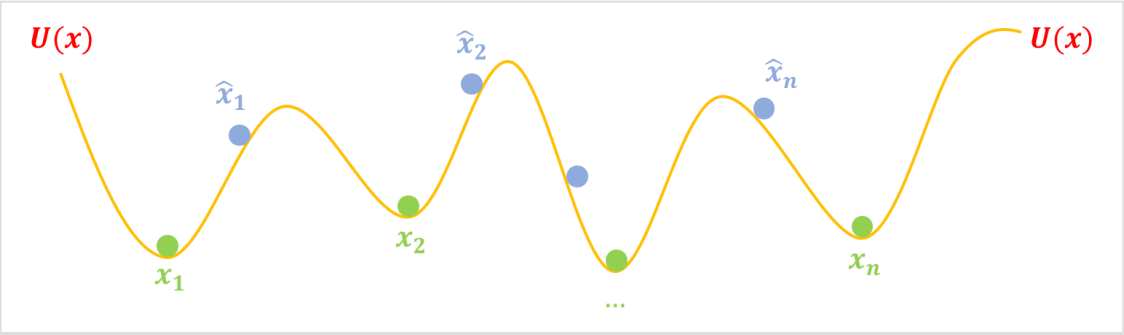
首先我们有一批样本$x_1, x_2, \dots, x_n$，我们希望能找到一个生成模型，这个模型有能力造出一批新的样本$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_n$，我们希望这批新样本跟原样本很相似。怎么造呢？很简单，分两步走。

### “挖坑” #

第一步，挖坑：我们把真实样本$x_1, x_2, \dots, x_n$看成一个个坐标，在这些坐标处挖很多坑，这些坑的分布可以用一个能量函数$U(x)$描述，这样一来真实样本$x_1, x_2, \dots, x_n$相当于都被放在坑底了，然后我们再把造出来的假样本$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_n$放到“坑腰”：



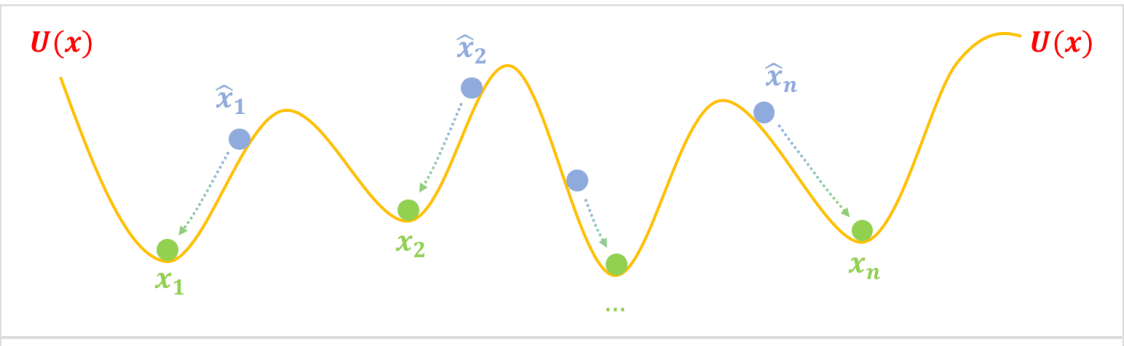

GAN第一步：“挖坑”




然后我们把真假样本放到适当的位置

### “跳坑” #

第二步，跳坑：把$U(x)$固定住，也就是不要再动坑了，然后把假样本$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \ldots, \hat{x}_n$松开，显然它们就慢慢从滚到坑底了，而坑底代表着真实样本，所以$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \ldots, \hat{x}_n$都变得很像真样本了：




GAN第二步：“跳坑”

这便是GAN的工作流程～

## 把GAN写下来 #

注意，上述两步不仅仅是简单的比喻，而是GAN的完整描述了。根据上述两个步骤，我们甚至可以直接把GAN训练公式写出来。

### 判别器 #

首先看“挖坑”，我们说了要将真样本放到坑底，假样本放到坑腰，以便后面假样本可以滚到坑底，这意味着假样本的“平均海拔”要高于真样本的“平均海拔”，也就是说

$$\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big] - \mathbb{E}_{x\sim q(x)}\big[U(x)\big] \tag{1}$$

尽量小，这里我们用$p(x)$表示真实样本的分布，$q(x)$表示假样本的分布。假样本通过$x = G(z)$生成，而$z \sim q(z)$是标准正态分布。

## 梯度惩罚 #

另外，我们还说真样本要在坑底，用数学的话说，坑底就是一个极小值点，导数等于0才好，即要满足$\nabla_x U(x) = 0$是最理想的，换成优化目标的话，那就是$\|\nabla_x U(x)\|^2$越小越好。两者综合起来，我们就得到$U$的优化目标

$$\begin{aligned} U =& \arg\min_U \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big] - \mathbb{E}_{x\sim q(x)}\big[U(x)\big] + \lambda \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U(x)\|^2\big] \\ =& \arg\min_U \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big] - \mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[U(G(z))\big] + \lambda \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U(x)\|^2\big] \end{aligned} \tag{2}$$

> **注：**以往对于梯度惩罚，我们总会有两个困惑：1、梯度惩罚究竟是以0为中心好还是以1为中心好；2、梯度惩罚要对真样本、假样本还是真假插值样本进行？现在，基于能量视角，我们可以得到“对真样本进行以0为中心的梯度惩罚”比较好，因为这意味着（整体上）要把真样本放在极小值点处～
>
> 至此，在能量视角下，我们对梯度惩罚有了一个非常直观的回答。

## 生成器 #

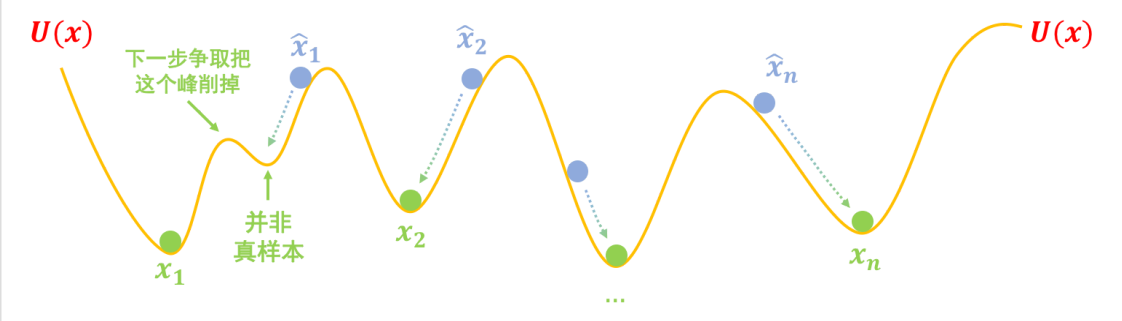
然后看“跳坑”，也就是坑挖好了，$U$固定了，我们让假样本滚到坑底，也就是让$U(x)$下降，滚到最近的一个坑，所以

$$G = \arg\min_G \mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[U(G(z))\big] \tag{3}$$

可以看到，判别器实际上就是在“造势”，而生成器就是让势能最低，这便是能量GAN的主要思想～

## 交替训练 #

如果真实情况的坑都像上面的图那么简单，那么可能就只需要两步就能训练完一个生成模型了。但是真实情况下的坑可能是很复杂的，比如下图中假样本$\hat{x}_1$慢慢下滑，并不一定能到达$x_1$的坑，而是到达一个中间的坑，这个中间的坑并非代表真样本，可能仅仅是“次真”的样本，所以我们需要不断地改进假样本，也需要不断地把坑修正过来（比如争取能下一步把阻碍前进的峰“削掉”）。这也就是说，我们需要反复、交替地执行$(1), (3)$两步。




真实情况下坑的分布可能更复杂

## 坑的学问 #

看，头脑中想象着几个坑，我们就可以把GAN的完整框架导出来了，而且还是先进的WGAN-GP的升级版：以0为中心的梯度惩罚。

GAN不过是一场坑的学问！

对这个GAN的进一步讨论，可以参考我之前写的博客《WGAN-div：一个默默无闻的WGAN填坑者》或者论文《Which Training Methods for GANs do actually Converge?》。

# 进一步思考 #

上述图景还能帮助我们回答很多问题。比如判别器能不能不要梯度惩罚？为什么GAN的训练、尤其是生成器的训练多数都不用带动量的优化器，或者就算用带动量的优化器，也要把动量调小一点？还有mode collapse（模式坍缩）是怎么发生呢？

## Hinge Loss #

梯度惩罚在理论上很漂亮，但是它确实太慢，所以从实践角度来看，其实能不用梯度惩罚的话最好不用梯度惩罚。但是如果不用梯度惩罚，直接最小化式$(1)$，很容易数值不稳定。

这不难理解，因为没有约束情况下，很容易对于真样本有$U(x)\to -\infty$，对于假样本有$U(x)\to +\infty$，也就是判别器优化得太猛了，差距拉得太大（无穷大）了。那么一个很自然的想法是，分别给真假样本分别设置一个阈值，$U(x)$的优化超过这个阈值就不要再优化了，比如：

$$\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\max(0,1+U(x))\big]+\mathbb{E}_{x\sim q(x)}\big[\max(0,1-U(x))\big] \tag{4}$$

这样一来，对于$x\sim p(x)$，如果$U(x) < -1$，则$\max(0,1+U(x))=0$，对于$x\sim q(x)$，$U(x) > 1$，则$\max(0,1-U(x))=0$，这两种情况下都不会在优化$U(x)$了，也就是说对于真样本$U(x)$不用太小，对于假样本$U(x)$不用太大，从而防止了$U(x)$过度优化了。

这个方案就是SNGAN、SAGAN、BigGAN都使用的hinge loss了。

当然，如果$U(x)$本身就是非负的[比如EBGAN中用自编码器的MSE作为$U(x)$]，那么可以稍微修改一下式$(4)$：

$$\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big]+\mathbb{E}_{x\sim q(x)}\big[\max(0,m-U(x))\big] \tag{5}$$

其中$m > 0$。

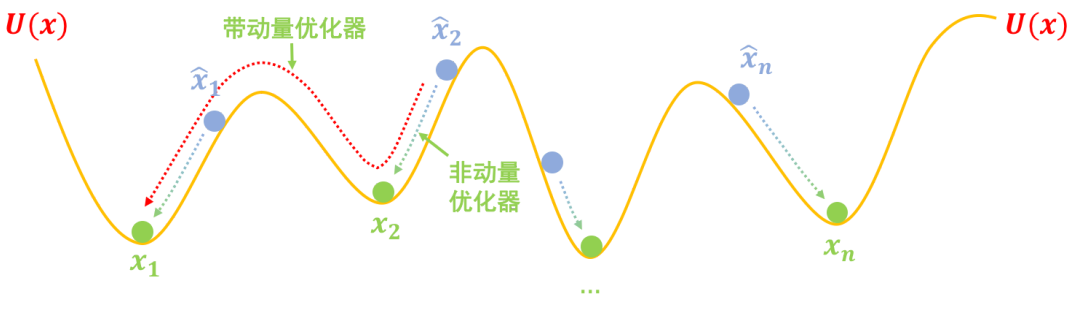
## 优化器 #

至于优化器的选择，其实从“跳坑”那张图我们就可以看出答案来。

带动量的优化器有利于我们更快地找到更好的极小值点，但是对于GAN来说，其实我们不需要跑到更好的极小值点，我们只需要跑到最近的极小值点，如果一旦跳出了最近的极小值点，跑到更低的极小值点，那么可能就丧失了多样性，甚至出现mode collapse。

比如下图中的$\hat{x}_2$，不带动量的优化算法能让$\hat{x}_2$跑到$x_2$处就停下来，如果带动量的话，那么可能越过$x_2$甚至跑到$x_1$去了。尽管$x_1$也是真样本，但是这样一来$\hat{x}_1,\hat{x}_2$同时向$x_1$靠拢，也许没有假样本能生成$x_2$了，从而丧失

了多样性。



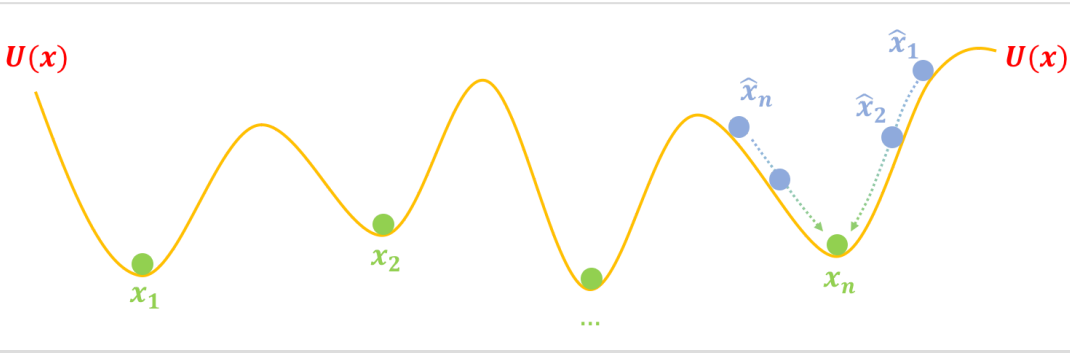

带动量与不带动量的优化轨迹比较：不带动量时，假样本只需要落到最近一个坑，如果带动量的话，可能越过最近的坑，到达更远的坑去，导致假样本聚集在某些真样本附近，丧失多样性

所以，在GAN的优化器中，动量不能太大，太大反而有可能丧失生成样本的多样性，或者造成其他的不稳定情况。同理，学习率也不能太大。总之，一切加速手段都不能太猛了。

## Mode Collapse #

什么是mode collapse？为什么会发生mode collapse？还是可以用这个图景来轻松解释。

前面我们画的图把假样本$\hat{x}$画得很合理，但是如果一旦初始化不好、优化不够合理等原因，使得$\hat{x}$同时聚在个别坑附近，比如：




mode collapse图示

这时候按照上述过程优化，所有假样本都都往$x_n$奔了，所以模型只能生成单一（个别）样式的样本，这就是mode collapse。

简单来看，mode collapse是因为假样本们太集中，不够“均匀”，所以我们可以往生成器那里加一个项，让假样本有均匀的趋势。这个项就是假样本的熵$H(X)=H(G(Z))$，我们希望假样本的熵越大越好，这意味着越混乱、越均匀，所以生成器的目标可以改为

$$G=\arg\min_G -H(G(Z))+\mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[U(G(z))\big] \tag{6}$$

这样理论上就能解决mode collapse的问题。至于$H(X)$怎么算，我们后面会详细谈到。

## 能量视角之美 #

对于GAN来说，最通俗易懂的视角当属“造假者-鉴别者”相互竞争的类比，这个视角直接导致了标准的GAN。但是，这个通俗的类比无法进一步延伸到WGAN乃至梯度惩罚等正则项的理解。

相比之下，能量视角相当灵活，它甚至能让我们直观地理解WGAN、梯度惩罚等内容，这些内容可以说是目前GAN领域最先进的部分成果了。虽然看起来能量视角比“造假者-鉴别者”形式上复杂一些，但其实它的物理意义也相当清晰，稍加思考，我们会感觉到它其实更为有趣、更具有启发性，有种“越嚼越有味”的感觉～