28 Jun 生成扩散模型漫谈（二十）：从ReFlow到WGAN-GP

By 苏剑林 | 2023-06-28 | 23586位读者 引用

上一篇文章《生成扩散模型漫谈（十九）：作为扩散ODE的GAN》中，我们介绍了如何将GAN理解为在另一个时间维度上的扩散ODE，简而言之，GAN实际上就是将扩散模型中样本的运动转化为生成器参数的运动！然而，该文章的推导过程依赖于Wasserstein梯度流等相对复杂和独立的内容，没法很好地跟扩散系列前面的文章连接起来，技术上显得有些"断层"。

在笔者看来，《生成扩散模型漫谈（十七）：构建ODE的一般步骤（下）》所介绍的ReFlow是理解扩散ODE的最直观方案，既然可以从扩散ODE的角度理解GAN，那么必定存在一个从ReFlow理解GAN的角度。经过一番尝试，笔者成功从ReFlow推出了类似WGAN-GP的结果。

理论回顾

之所以说"ReFlow是理解扩散ODE的最直观方案"，是因为它本身非常灵活，以及非常贴近实验代码——它能够通过ODE建立任意噪声分布到目标数据分布的映射，而且训练目标非常直观，不需要什么"弯弯绕绕"就可以直接跟实验代码对应起来。

具体来说，假设$\boldsymbol{x}_0 \sim p_0(\boldsymbol{x}_0)$是先验分布采样的随机噪声，$\boldsymbol{x}_1 \sim p_1(\boldsymbol{x}_1)$是目标分布采样的真实样本，ReFlow允许我们指定任意从$\boldsymbol{x}_0$到$\boldsymbol{x}_1$的运动轨迹。简单起见，ReFlow选择的是直线，即

$$\boldsymbol{x}_t = (1-t)\boldsymbol{x}_0 + t\boldsymbol{x}_1 \tag{1}$$

现在我们求出它满足的ODE：

$$\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0 \tag{2}$$

这个ODE很简单，但是却不实用，因为我们想要的是通过ODE由$\boldsymbol{x}_0$生成$\boldsymbol{x}_1$，但上述ODE却将我们要生成的目标放在了方程里边，可谓是"因果倒置"了。为了弥补这个缺

陷，ReFlow的思路很简单：学一个$\boldsymbol{x}_t$的函数去逼近$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0$，学完之后就用它来取代$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0$，即

$$\boldsymbol{\varphi}^* = \mathop{\text{argmin}}_{\boldsymbol{\varphi}} \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}_0\sim p_0(\boldsymbol{x}_0),\boldsymbol{x}_1\sim p_1(\boldsymbol{x}_1)}\left[\frac{1}{2}\Vert\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{x}_t, t) - (\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0)\Vert^2\right] \tag{3}$$

以及

$$\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0 \quad\Rightarrow\quad \frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt} = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\varphi}^*}(\boldsymbol{x}_t, t) \tag{4}$$

之前我们已经证明过，在$\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\varphi}}(\boldsymbol{x}_t, t)$具有无限拟合能力的假设下，新的ODE确实能够实现从分布$p_0(\boldsymbol{x}_0)$到分布$p_1(\boldsymbol{x}_1)$的样本变换。

相对运动

ReFlow的重要特性之一，是它没有限制先验分布$p_0(\boldsymbol{x}_0)$的形式，这意味着我们可以将先验分布换成任意我们想要的分布，比如，由一个生成器$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z})$变换而来的分布：

$$\boldsymbol{x}_0\sim p_0(\boldsymbol{x}_0)\quad\Leftrightarrow\quad \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z}),\,\boldsymbol{z}\sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}) \tag{5}$$

代入式(3)训练完成后，我们就可以利用式(4)，将任意$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z})$变换为真实样本$\boldsymbol{x}_1$了。

然而，我们并不满足于此。前面说过，GAN是将扩散模型中样本的运动转化为生成器参数的运动，这个ReFlow的框架中同样可以如此：假设生成器当前参数为$\boldsymbol{\theta}_{\tau}$，我们期望$\boldsymbol{\theta}_{\tau}\to\boldsymbol{\theta}_{\tau+1}$的变化能模拟式(4)前进一小步的效果

$$\boldsymbol{\theta}_{\tau+1} = \mathop{\text{argmin}}_{\boldsymbol{\theta}}\mathbb{E}_{\boldsymbol{z}\sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I})}\Big[\big\Vert \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z}) - \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}_{\tau}}(\boldsymbol{z}) - \epsilon\,\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\varphi}^*}(\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}_{\tau}}(\boldsymbol{z}), 0)\big\Vert^2\Big] \tag{6}$$

要注意，式(3)和式(4)中的t跟参数$\boldsymbol{\theta}_{\tau}$中的$\tau$不是同一含义，前者是ODE的时间参数，后者是训练进度，所以这里用了不同记号。此外，$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}_{\tau}}(\boldsymbol{z})$是作为ODE的$\boldsymbol{x}_0$出现的，所以往前推一小步时，得到的是$\boldsymbol{x}_{\epsilon}$，$\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{\varphi}^*}(\boldsymbol{x}_t, t)$中要代入的时间$t$是$0$。

现在，我们有了新的$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}_{\tau+1}}(\boldsymbol{z})$，理论上它产生的分布更加接近真实分布一些（因为往前推了一小步），接着把它当作新的$\boldsymbol{x}_0$代入到式(3)训练，训练完成后又可以代入到式(6)优化生成器，以此类推，就是一个类似GAN的交替训练过程。

WGAN-GP

那么，能否将这个过程定量地跟已有的GAN联系起来呢？能！还是带梯度惩罚的WGAN-GP。

首先我们来看损失函数(3)，将求期望的部分展开，结果是

$$\frac{1}{2}\Vert\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t, t)\Vert^2 - \langle\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t, t),\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0\rangle + \frac{1}{2}\Vert\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0\Vert^2 \tag{7}$$

第三项跟参数φ无关，去掉也不影响结果。现在我们假设$\boldsymbol{v}_{\varphi}$有足够强的拟合能力，以至于我们不需要显式输入t，那么上式作为损失函数，等价于

$$\frac{1}{2}\Vert\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)\Vert^2 - \langle\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t),\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0\rangle = \frac{1}{2}\Vert\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)\Vert^2 - \left\langle\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t),\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt}\right\rangle \tag{8}$$

$\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)$是一个输入输出维度相同的向量函数，我们进一步假设它是某个标量函数$D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)$的梯度，即$\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)=\nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)$，那么上式就是

$$\frac{1}{2}\Vert\nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)\Vert^2 - \left\langle\nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t),\frac{d\boldsymbol{x}_t}{dt}\right\rangle = \frac{1}{2}\Vert\nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)\Vert^2 - \frac{d D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)}{dt} \tag{9}$$

假设$D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)$的变化比较平稳，那么$\frac{d D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)}{dt}$应该与它在$t=0,t=1$两点处的差分$D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_1) - D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_0)$比较接近，于是上述损失函数近似于

$$\frac{1}{2}\Vert\nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)\Vert^2 - D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_1) + D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_0) \tag{10}$$

熟悉GAN的读者应该会觉得很眼熟，它正是带梯度惩罚的WGAN的判别器损失函数！甚至连梯度惩罚项的$\boldsymbol{x}_t$的构造方式(1)都一模一样（在真假样本之间线性插值）！唯一不同的是原始WGAN-GP的梯度惩罚是以1为中心，这里是以零为中心，但事实上《W

GAN-div：一个默默无闻的WGAN填坑者》、《从动力学角度看优化算法（四）：GAN的第三个阶段》等文章已经表明以零为中心的梯度惩罚通常效果更好。

所以说，在特定的参数化和假设之下，损失函数(3)其实就等价于WGAN-GP的判别器损失。至于生成器损失，在上一篇文章《生成扩散模型漫谈（十九）：作为扩散ODE的GAN》中我们已经证明了当$\boldsymbol{v}_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t) = \nabla_{\boldsymbol{x}_t} D_{\varphi}(\boldsymbol{x}_t)$时，式(6)单步优化的梯度等价于

$$\boldsymbol{\theta}_{\tau+1} = \mathop{\text{argmin}}_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_{\boldsymbol{z}\sim\mathcal{N}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{I})}[-D(\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z}))] \tag{11}$$

的梯度，而这正好也是WGAN-GP的生成器损失。

文章小结

在这篇文章中，笔者尝试从ReFlow出发推导了WGAN-GP与扩散ODE之间的联系，这个角度相对来说更加简单直观，并且避免了Wasserstein梯度流等相对复杂的概念。

如果您需要引用本文，请参考：

苏剑林. (Jun. 28, 2023). 《生成扩散模型漫谈（二十）：从ReFlow到WGAN-GP 》[Blog post]. Retrieved from https://spaces.ac.cn/archives/9668

```
@online{kexuefm-9668,
        title={生成扩散模型漫谈（二十）：从ReFlow到WGAN-GP},
        author={苏剑林},
        year={2023},
        month={Jun},
        url={\url{https://spaces.ac.cn/archives/9668}},
}
```