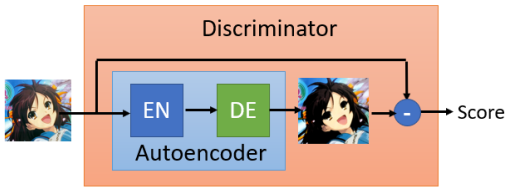
# 生成模型---能量视角下的生成对抗网络

## 目 录

之前我写过一套笔记介绍一系列的 GANs，其中有一个模型叫做 EBGAN，它最有特色的地方是它的判别器，长成下面这个样子：



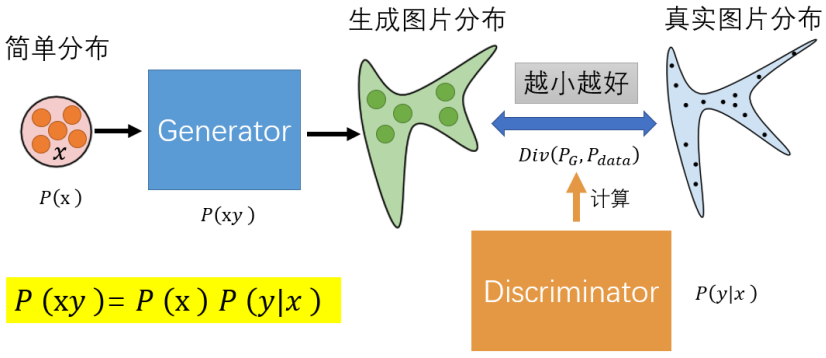

当时在介绍这个判别器的作用时，是说“其不再去鉴别输入图像是来自于$P_{data}$还是$P_g$，而是去鉴别输入图像的重构性高不高”。更详细点解释就是，图中 Autoencoder 是一个提前用真实样本训练好的网络，现在要鉴别一个输入图像是真还是假，只需把这张图放入 Autoencoder 中，如果它是真实图片的话通过此 Autoencoder 重构回的图像就基本是无损的（因为这个 Autoencoder 就是用真实样本训练出来的），而如果是假造图片的话重构图像就会与原图差别较大，因此这个 Autoencoder 输出和输入图片的差异就能够作为这个判别器的打分值。

其实上述的这种判别器，如果细细一想的话，会让人觉得非常奇怪，因为它不符合我们在理论上对于 GANs 的认知：判别器的根本目的是要计算两个分布之间的散度（Divergence），从而为生成器提供梯度的正确引导。但是在上述的这个判别器中，它只用到了真实样本去训练，训练结果是无法计算出任何两个分布间的散度的，那么它该如何为生成器提供正确的引导呢？这样的 EBGAN 究竟是如何起作用的呢？

带着困惑我去阅读了原 paper 和很多相关笔记，然后神奇地发现，我们原有对于 GANs 的认知没有错误但不充分，那是一种基于 PBM（Possibility Based Model）的认知方法，但是其实对于 GANs 的认知还有另外一个维度，那就是把 GANs 视作一种 EBM（Energy Based Model）模型。

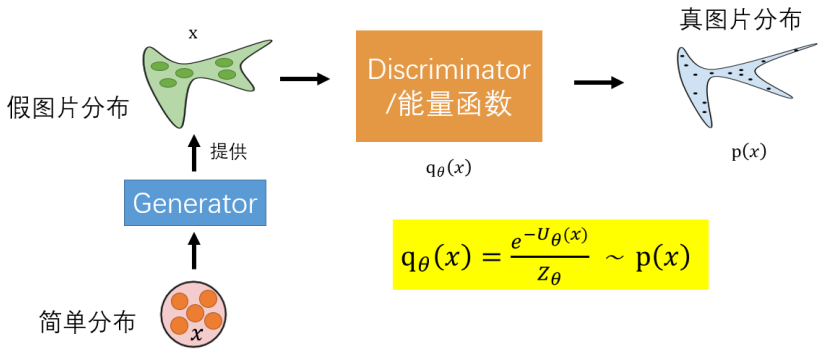
下面先简要介绍一下这两种思维方法的差异。

# 1.PBM 与 EBM 的比较



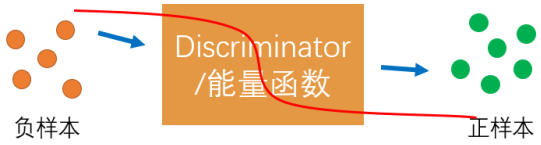

基于概率模型（PBM）的 GANs

首先将 GANs 视作一种 PBM，也就是基于概率的模型，这是被大众普遍接受的认知方法，因为熟悉 GANs 理论的朋友会知道，判别器的本质是计算样本 x 属于类别 y 的条件概率 P（y|x）（其中 y 只有正负两类所以判别器就是一个二分类器）,生成器的本质是计算样本 x 在整个分布中的生成概率，也就是联合概率 P（xy）。那么概率的计算，需要基于样本的统计才能实现，这意味每一个样本都需要有明确的正/负维度，也就是喂给判别器的输入非负即正（正指真实样本，负指生成样本），无它。只有这样，判别器才能基于概率正确计算出正负样本分布间的散度（Divergence），进而帮助生成器产生更逼近正样本的负样本出来。



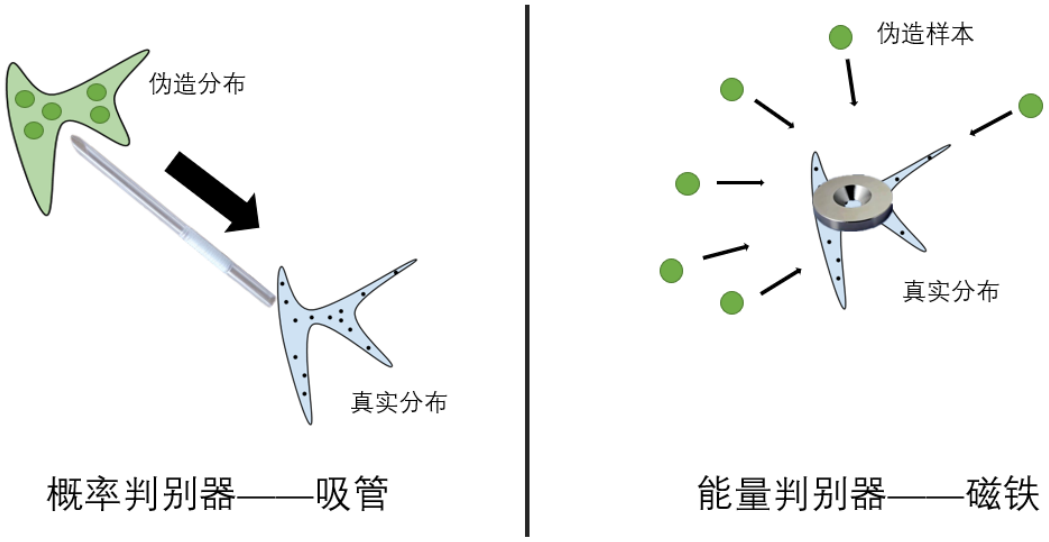

基于能量模型（EBM）的 GANs

但是对于 EBM，也就是基于能量的模型而言，它就不需要所有样本都具有明确的正/负维度了。因为它用一种更灵活的、称之为“能量”的东西去代替了概率计算。




能量的含义很抽象，我们不妨用一个能量函数 U(x)去衡量它，正样本本身具有最低的能量函数，样本越远离正样本能量值就越高。并且能量具有吸引力，也就是能量值低的样本会吸引能量值高的样本向自己靠近。后文会对能量模型有更清晰的介绍。

现在不妨比较一下两种模型的异同。在 GANs 视角下，二者都具有生成器与判别器，但是对于 PBM 模型而言生成器是核心，而对于 EBM 模型而言判别器是核心。这是因为，在 PBM 理论中，一开始只设计了生成器，没有判别器，但是因为生成器的计算中缺失正负样本间的散度，不得已再构造了一个判别器去学习计算这个散度，进而辅助生成器；而在 EBM 理论中，一开始只构造了判别器，没有生成器，但是因为判别器的计算中缺失负样本，不得已再构造了一个生成器去学习提供负样本，进而辅助判别器。后文会有关于 EBM 理论的更详细的介绍。



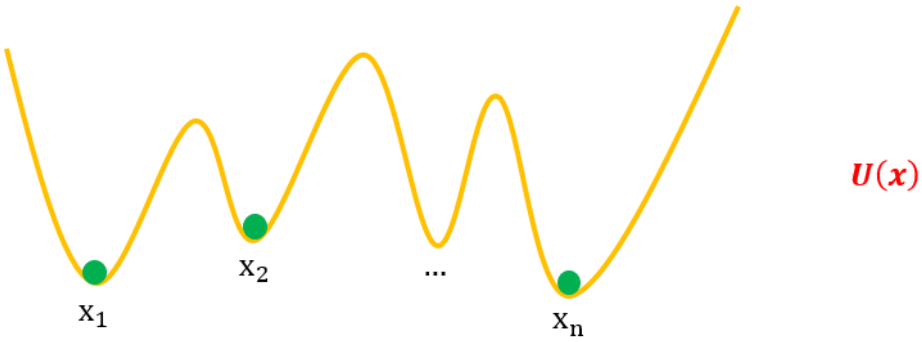

另外，从宏观上来看，PBM 比较依赖于正样本和负样本，而 EBM 可以不依赖于负样本。换言之，PBM 中的判别器就好比是一根吸管（如上图），它需要明确知道正、负样本的接口在哪，才能帮助生成器顺着这根吸管将负样本朝正样本靠近；但是 EBM 中的判别器就好比是一块磁铁，只需把它安置在正样本上，就能借用能量的优势将周围的负样本吸引向自身。

# 2.EBM 的设计思维

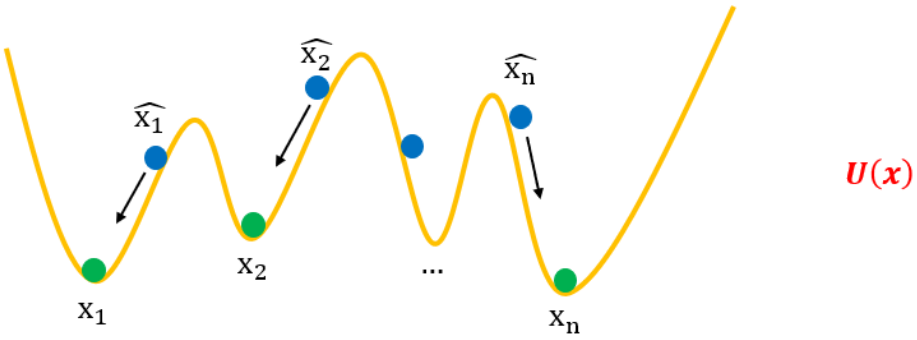
在这一节我们将会介绍能量模型到底是一种什么模型，首先我们需要解释能量是什么。能量本身这个词是来自于物理学中的一个数学概念，能量模型是 AI 大牛 Yann LeCun 于 2006 年发表的论文《A Tutorial on Energy-Based Learning》中提出的方法，这篇 paper 长达 59 页，可想而知能量模型是一种多么复杂的模型。那在本文中为了更通俗地讲解，我们摒弃掉复杂繁晦的数学建模，借用苏剑林老师在 PaperWeekly 中撰写的专文《能量视角下的 GAN 模型》，我们用更直白有趣的方法来理解能量模型。

能量的概念，可以理解为“坑”，而能量模型下的 GANs，就是一个不断“挖坑”与“跳坑”的过程。


一开始，能量函数只是一条平直的直线。




然后将真样本 $x_1, x_2, \dots x_n$依次放在$\boldsymbol{U(x)}$上，压出一条凹凸不平的函数，将其固定住，$\boldsymbol{U(x)}$就构成了一个能量函数。




接下来我们得到一批生成样本，$\hat{x_1}, \hat{x_2}, \dots \hat{x_n}$，将它们任意放置于$\boldsymbol{U(x)}$上。然后固定住 U(x)，松开$\hat{x_1}, \hat{x_2}, \dots \hat{x_n}$，于是$\hat{x_1}, \hat{x_2}, \dots \hat{x_n}$就会顺着“能量”的坡度慢慢滚落到坑底，而坑底代表着真实样本，所以$\hat{x_1}, \hat{x_2}, \dots \hat{x_n}$都变得很像真样本了。

上述就是在能量视角下 GANs 训练过程的最简单的展示。

我们可以基于这一设想开始初步数学建模。

首先考虑判别器——“挖坑”的过程。我们希望真样本能放到“坑底”，假样本能放到“坑腰”，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：

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

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 来自 z~q(z) 是标准正态分布。

进一步，我们还希望真样本要在坑底，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：

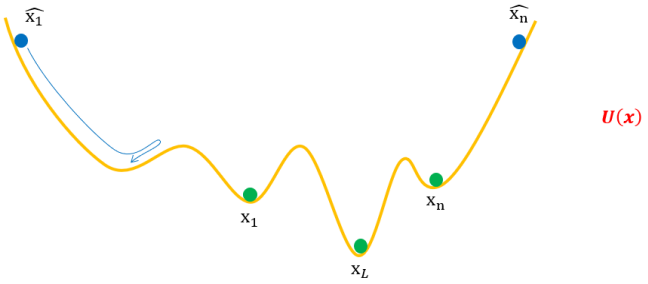
$$\begin{aligned} U =& \arg\min_U \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big] - \mathbb{E}_{x\sim q(x)}\big[U(x)\big] + \lambda\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U(x)\|^2\big] \\ =& \arg\min_U \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U(x)\big] - \mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[U(G(z))\big] + \lambda\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x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

值得说明的是，上述的 U(x)函数在实际训练中一定是要做限制处理的，否则神经网络可以将 U(x)（x~p(x)）无限拉低，U(x)（x~q(x)）无限拔高，这样模型就永远不会收敛。对应的解决方法可以参考 WGAN 中的梯度裁剪，WGAN-GP 中的梯度惩罚，以及 SNGAN 中的 lipschitsz 限制，这些都在 GANs 介绍系列文章中有详细说明，在此就不细述。

接下来我们可以构建生成器——“跳坑”的过程。此时坑挖好了， U(x)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：

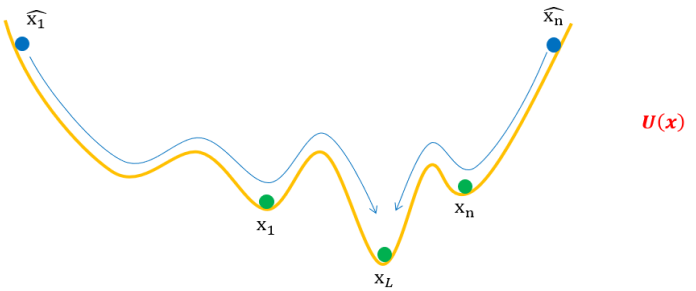
$$G = \arg\min_G \mathbb{E}_{z\sim q(z)}\big[U(G(z))\big]$$

至此，我们就完成了“填坑模型”的初步建模过程。但是，真实情况的“坑”并非都像上面的图那么简单，因为“坑的模型”本身就会有很多坑，我们需要格外小心才行。



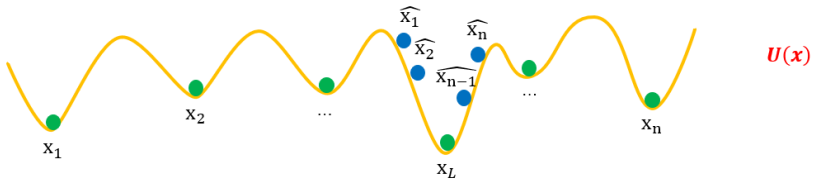

比如，上图中假样本$\hat{x}_1$慢慢下滑，并不一定能到达 x1 的坑，而是到达一个中间的坑，这个中间的坑并非代表真样本，可能仅仅是“次真”的样本，所以我们需要不断地改进假样本，也需要不断地把坑修正过来（比如争取能下一步把阻碍前进的峰“削掉”）。

我们也可以考虑在优化的时候添加动量，如下图所示：



但是这样也会导致新的问题：有的假样本越过最近的坑，到达更远的坑去，导致假样本聚集在某些真样本附近，进而出现 Mode Collapse（样本多样性丧失）问题。

另外，生成样本的初始分布也是一个容易导致多样性丧失的因素，如下图所示，当初始的假样本同时聚在个别坑附近时，同样会产生 Mode Collapse。




由此可以看出，目前我们构建的“坑的模型”，最大的一个隐患就是容易导致 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中加一个损失项，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：

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

接下来我们需要做的，就是找到这个 H(x)函数，这将会需要一些严密的数学推导。我们先在第三节构建更完备的理论基础，然后再在第四节求解 H(x)。

# 3.EBM 的理论分析

回到最开始生成模型在探讨的问题上：我们有一批数据 x1, x2, ⋯ , xn ~ p(x)，我们希望用一个概率模型去拟合这批数据的分布。

我们选取一种这样的模型：

$$q_\theta(x) = \frac{e^{-U_\theta(x)}}{Z_\theta}$$

其中 Uθ 是带参数 θ 的未定函数（即能量函数），而 Zθ 是归一化因子（即配分函数），Zθ 的表达式为：

$$Z_\theta = \int e^{-U_\theta(x)} dx$$

上式就是能量模型中最核心的表达式，但是，一定会有不少人困惑，这式子到底是如何得到的？下面就将提出三点问题，并一一解答。

第一个问题，为何能够选用这样的式子？首先来看一下大体规律，如果 x 属于真实图片，那么 Uθ（x）的值是最低的，也就是样本的概率值 qθ（x）的值是最高的；而如果 x 不属于真实图片，离真样本越远 Uθ（x）就越高，也就是样本的概率值 qθ（x）会越低。因此能量函数 qθ（x）是符合真实样本 p(x)的分布规律的，在调整参数θ的情况下让 qθ（x）完全逼近 p（x）是可能做到的。另外，如果将-Uθ(x)看作是通用的神经网络的表达式的话，qθ（x）就相当于加了一个 Softmax 层。

第二个问题，这个式子是如何被构造出来的？大致引述一下：

*MCMC（Markov Chain Monte Carlo）告诉我们，我们难以直接从某个给定的分布 q(x) 中采样出样本来，但是我们可以构造如下的随机过程：*

$$x_{n+1} = f(x_n, \alpha)$$

*其中 α 是一个便于实现的随机过程，比如从二元分布、正态分布采样等。*

*当我们取 f 为 Langevin 方程时，这一随机过程就变成了：*

$$x_{t+1} = x_t - \varepsilon \nabla_x U(x_t) + \sqrt{\varepsilon}\alpha, \quad \alpha \sim \mathcal{N}(\alpha; 0, 1)$$

*而对于 Langevin 方程，当 ε→0 时，它的静态分布就正好是能量分布：*

$$p(x) = \frac{e^{-U(x)}}{Z}$$

所以，原有表达式其实来自一种特定的随机过程在 ε→0 下的分布表达式。

第三个问题，选用这样的模型表达式优势在哪？简单来说，对这个式子求导并且取期望的结果，就刚好能拆分成真实分布与拟合分布的均值之差，进而能构造 GANs 网络。下面我们就会逐步解读如何应用这一能量模型去构建 GANs 网络。

现在我们已完成了建模，接下来需要求解参数θ。

将 qθ(x)取对数后，目标函数定义为：

$$\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[\log q_\theta(x)\right]$$

我们希望它越大越好，也就是希望下式越小越好：

$$L_\theta = \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[-\log q_\theta(x)\right]$$

为此，我们对 Lθ 使用梯度下降。由于：

$$\begin{aligned}
\nabla_\theta \log q_\theta(x) =& \nabla_\theta \log e^{-U_\theta(x)} - \nabla_\theta \log Z_\theta \\
=& -\nabla_\theta U_\theta(x) - \frac{1}{Z_\theta}\nabla_\theta Z_\theta \\
=& -\nabla_\theta U_\theta(x) - \frac{1}{Z_\theta}\nabla_\theta \int e^{-U_\theta(x)} dx \\
=& -\nabla_\theta U_\theta(x) + \frac{1}{Z_\theta}\int e^{-U_\theta(x)}\nabla_\theta U_\theta(x) dx \\
=& -\nabla_\theta U_\theta(x) + \int \frac{e^{-U_\theta(x)}}{Z_\theta}\nabla_\theta U_\theta(x) dx \\
=& -\nabla_\theta U_\theta(x) + \mathbb{E}_{x\sim q_\theta(x)}\left[\nabla_\theta U_\theta(x)\right]
\end{aligned}$$

所以（第二项对于 Ex~p(x)是常数，所以可以省略掉外边的 Ex~p(x)）：

$$\nabla_\theta L_\theta = \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[\nabla_\theta U_\theta(x)\right] - \mathbb{E}_{x\sim q_\theta(x)}\left[\nabla_\theta U_\theta(x)\right]$$

不妨观察一下这个式子的特点，它是分别在真实分布下和拟合分布下的均值之差，可以看作是对原始表达式作了“正相”和“负相”的分解，这是与 GANs 的思维很接近的部分。

把上式代入到梯度下降的更新公式中，得到：

$$\theta \leftarrow \theta - \varepsilon\left(\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[\nabla_\theta U_\theta(x)\right] - \mathbb{E}_{x\sim q_\theta(x)}\left[\nabla_\theta U_\theta(x)\right]\right)$$

至此我们就在理论上初步完成了对于能量模型的建模和求解，似乎是很容易就推导出来了。我们不妨尝试着把这一套公式放在神经网络（称之为判别网络）中去训练。

不过，很快我们就发现了问题，上述公式中的第二项，即满足 qθ(x)的 x 的采样是缺失的。因为 qθ(x)非常地复杂，所以试图人为地采样是不可取的，于是我们只好考虑，是否能再构造出一个神经网络（称之为生成网络），能够专门用来提供满足 qθ(x)的样本。

对于这个生成网络，我们记输入为 z，输出为 x，且满足：

$$z \sim q(z), \quad x = G_\varphi(z)$$

这里的 q(z) 代表着标准正态分布。也就是说，我们可以从标准正态分布中采样出一个 z 出来，然后通过固定的模型 Gφ 变换为我们想要的 x，通过这种方式得到的数据分布可以表示为：

$$q_\varphi(x)=\int \delta\big(x-G_\varphi(z)\big)q(z)dz$$

下面我们要做的就是让生成数据分布 qφ(x)逼近 qθ(x)，用 KL 散度去衡量 qφ(x)与 qθ(x)之间的相似性，表达式如下：

$$\begin{aligned}KL\big(q_\varphi(x)\|q_\theta(x)\big)&=\int q_\varphi(x)\log\frac{q_\varphi(x)}{q_\theta(x)}dx\\&=-H_\varphi(X)+\mathbb{E}_{x\sim q_\varphi(x)}\big[U_\theta(x)\big]+\log Z_\theta\end{aligned}$$

其中 $H_\varphi(X)=-\int q_\varphi(x)\log q_\varphi(x)dx$，代表 qφ(x) 的熵。

我们希望 qφ(x)与 qθ(x)之间的 KL 散度值最小，也就是求解出参数φ，使得：

$$\varphi=\arg\min_\varphi -H_\varphi(X)+\mathbb{E}_{x\sim q_\varphi(x)}\big[U_\theta(x)\big]$$

这一式子便是生成网络的损失函数，值得注意的是，在这个表达式中，-Hφ(X) 希望熵越大越好，这意味着多样性；$\mathbb{E}_{x\sim q_\varphi(x)}[U_\theta(x)]$希望图片势能越小越好，这意味着真实性。也就是说，φ对应的生成网络能够有效避免 Mode Collapse 问题，即生成样本是可靠的。

另外，回顾之前第二节最后提出的那个问题——待求解的熵 H（x），也就对应到了上式理论推导中的 Hφ(X)，而目前一堆理论推导下来，我们得到的结论是，如果我们构建一个生成网络去拟合生成样本的话，在用 KL 散度作损失函数的情况下，我们得到的生成样本是能够实现熵高的需求，也就是能解决当初在构思能量模型时对于 Mode Collapse 的担忧。

不过，φ的表达式还不足以构造完整的神经网络，因为只有第二项是分布的期望表达式，第一项 Hφ(X)还需要进一步变形求解。由于 Hφ(X)的求解比较复杂，这一过程将会被单独放在第四节介绍。现在不妨假设现在 Hφ(X)已经求解出了，因为这样能比较快地完成整套能量模型的理论推导。

假设φ的完整表达式已知，即生成网络能提供缺失样本（x~qθ(x)）了。下面只需把这个生成网络代入到原判别网络中去，也就是判别网络的更新公式变更为：

$$\theta\leftarrow\theta-\varepsilon\Big(\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\nabla_\theta U_\theta(x)\big]-\mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[\nabla_\theta U_\theta(x)\big]\Big)$$

替换成θ的目标表达式就是：

$$\theta=\arg\min_\theta \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U_\theta(x)\big]-\mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big]$$

考虑到第二节当中提及的“真样本要在坑底”的限制，我们可以给θ再添加一个惩罚项。于是最终两个网络的训练表达式为：

$$\begin{aligned}\theta&=\arg\min_\theta \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U_\theta(x)\big]-\mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big]+\lambda\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U_\theta(x)\|^2\big]\\\varphi&=\arg\min_\varphi -H_\varphi(X)+\mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big]\end{aligned}$$

上述便是在能量模型下 GANs 的完整理论推导。

我们简要地做一个梳理，EBGAN 最开始从判别网络的角度出发，构建了一个能量模型希望能够拟合真实数据，但是在推导的过程中发现来自“负相”的样本是缺失的，于是又引入了生成网络希望能学会提供“负相”样本。在搭建生成网络时采用了一种容易采样的模型，于是困难的地方在于如何让生成样本逼近“负相”样本（第四节会解决）。解决好后，便能将生成网络代入到原判别网络，二者交替训练就构成了一个完整的 GANs 模型。

# 4.* Hφ(X)的求解

这一节我们要求解的式子如下：

$$H_\varphi(X) = -\int q_\varphi(x)\log q_\varphi(x)dx$$

代表 qφ(x) 的熵，而 qφ(x) 的理论表达式是：

$$q_\varphi(x) = \int \delta\big(x - G_\varphi(z)\big)q(z)dz$$

由此可以看出，Hφ(X) 由于嵌套了积分，想直接计算是非常困难的。我们可以考虑将熵的计算转化为其他的计算，譬如互信息 Iφ(x,z)（一种衡量两个东西相关性的指标）。

$$\begin{aligned} I_\varphi(X,Z) &= \iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{q_\varphi(x|z)}{q_\varphi(x)}dxdz \\ &= \iint q_\varphi(x|z)q(z)\log q_\varphi(x|z)dxdz - \iint q_\varphi(x|z)q(z)\log q_\varphi(x)dxdz \\ &= \int q(z)\int q_\varphi(x|z)q(z)\log q_\varphi(x|z)dx + H(X) \end{aligned}$$

在上式中可以看出，我们找到了 X,Z 的互信息与 X 的熵之间的关系，它们的差是：

$$\int q(z)\int q_\varphi(x|z)q(z)\log q_\varphi(x|z)dx \triangleq -H_\varphi(X|Z)$$

事实上 Hφ(X|Z) 称为“条件熵”。

现在我们考虑，求解熵是否能转化成求解互信息相关的东西。

如果我们处理的是离散型分布，那么因为 x=Gφ(z) 是确定性的，所以 qφ(x|z)≡1，那么 Hφ(X|Z) 为 0，即 Iφ(X,Z)=Hφ(X)。

如果是连续型分布，由于 qφ(x|z)=δ(x-G(z))是一个确定性的模型，也可以理解为均值为 G(z) 、方差为 0 的高斯分布 N(x;Gφ(z),0)。我们将其推广到常数方差的情况$\mathcal{N}(x;G(z),\sigma^2)$，代入计算发现是 Hφ(X|Z)的值是一个常数$H_\varphi(X|Z)\sim\log\sigma^2$，然后取 σ→0，不过发现结果是无穷大。无穷大原则上是不能计算的，但事实上方差也不需要等于 0，只要足够小，肉眼难以分辨即可。此时$H_\varphi(X|Z)\sim\log\sigma^2$依然是一个常数。

所以，总的来说我们可以确定互信息 Iφ(X,Z) 与熵 Hφ(X) 只相差一个无关紧要的常数，所以 Hφ(X) 可以被替换为 Iφ(X,Z)。

现在回到第三节最后我们得到的训练表达式：

$$\begin{aligned} \theta &= \arg\min_\theta \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U_\theta(x)\big] - \mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big] + \lambda\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U_\theta(x)\|^2\big] \\ \varphi &= \arg\min_\varphi -H_\varphi(X) + \mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big] \end{aligned}$$

将 Hφ(X) 替换为 Iφ(X,Z)，得到：

$$\begin{aligned} \theta &= \arg\min_\theta \mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[U_\theta(x)\big] - \mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big] + \lambda\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\big[\|\nabla_x U_\theta(x)\|^2\big] \\ \varphi &= \arg\min_\varphi -I_\varphi(X,Z) + \mathbb{E}_{x=G_\varphi(z),z\sim q(z)}\big[U_\theta(x)\big] \end{aligned}$$

现在我们要最小化 −Iφ(X,Z) ，也就是最大化互信息 Iφ(X,Z)。

互信息估计的方法有两种，如果需要精确估计互信息的话，可以采用通过 f 散度的方式估计，由于这种方法太复杂，感兴趣的读者可以参阅苏剑林老师的另外一篇文章：https://kexue.fm/archives/6024；下面介绍另外一种不那么精确的方法，就是通过互信息下界的方式估计。

我们回顾一下互信息的定义：

$$I_\varphi(X,Z)=\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{q_\varphi(x|z)q(z)}{q_\varphi(x)q(z)}dxdz$$

记 qφ(z|x)=qφ(x|z)q(z)/qφ(x)，这代表精确的后验分布；然后对于任意近似的后验分布 p(z|x)，我们有：

$$\begin{aligned}I_\varphi(X,Z)&=\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{q_\varphi(z|x)}{q(z)}dxdz\\&=\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{p(z|x)}{q(z)}dxdz+\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{q_\varphi(z|x)}{p(z|x)}dxdz\\&=\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{p(z|x)}{q(z)}dxdz+\int q_\varphi(x)KL\Big(q_\varphi(z|x)\Big\|p(z|x)\Big)dz\\&\geq\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log\frac{p(z|x)}{q(z)}dxdz\\&=\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log p(z|x)-\underbrace{\iint q_\varphi(x|z)q(z)\log q(z)dxdz}_{=\int q(z)\log q(z)dz\text{ 是一个常数}}\end{aligned}$$

也就是说，互信息大于等于∬qφ(x|z)q(z)logp(z|x) 加上一个常数。如果最大化互信息，可以考虑最大化这个下界。由于 p(z|x) 是任意的，可以简单假设$p(z|x)=\mathcal{N}(z;E(x),\sigma^2)$，其中 E(x) 是一个带参数的编码器，代入计算并省去多余的常数，可以发现相当于在生成器加入一项 loss：

$$\mathbb{E}_{z\sim q(z)}\left[\|z-E(G(z))\|^2\right]$$

所以，基于互信息下界估计的思路，最终的训练表达式就变成了：

$$\theta=\arg\min_\theta\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[U_\theta(x)\right]-\mathbb{E}_{z\sim q(z)}\left[U_\theta(G_\varphi(z))\right]+\lambda_1\mathbb{E}_{x\sim p(x)}\left[\|\nabla_x U_\theta(x)\|^2\right]$$

$$\varphi,E=\arg\min_{\varphi,E}\mathbb{E}_{z\sim q(z)}\left[U_\theta(G_\varphi(z))+\lambda_2\|z-E(G_\varphi(z))\|^2\right]$$

综上，我们在本节实现了 Hφ(X) 的处理和求解，从而完成了整个 GAN 和能量模型的推导。

# 5. 致谢及引用

本总结资料大量参考苏剑林老师发表于 PaperWeekly 上的专文：

1. 《能量视角下的 GAN 模型：GAN = “挖坑” + “跳坑”》
地址：https://mp.weixin.qq.com/s/E7zlQvDuW8mXSuElTwt38w

2. 《能量视角下的 GAN 模型（二）：GAN = “分析” + “采样”》
地址：https://mp.weixin.qq.com/s/uGuywTY33SrYERDO522N1Q