1 **对抗训练浅谈：意义、方法和思考（附Keras实现）**

Mar By 苏剑林 | 2020-03-01 | 20127位读者 引用

当前，说到深度学习中的对抗，一般会有两个含义：一个是生成对抗网络（Generative Adversarial Networks，GAN），代表着一大类先进的生成模型；另一个则是跟对抗攻击、对抗样本相关的领域，它跟GAN相关，但又很不一样，它主要关心的是模型在小扰动下的稳健性。本博客里以前所涉及的对抗话题，都是前一种含义，而今天，我们来聊聊后一种含义中的“对抗训练”。

本文包括如下内容：

1、对抗样本、对抗训练等基本概念的介绍；

2、介绍基于快速梯度上升的对抗训练及其在NLP中的应用；

3、给出了对抗训练的Keras实现（一行代码调用）；

4、讨论了对抗训练与梯度惩罚的等价性；

5、基于梯度惩罚，给出了一种对抗训练的直观的几何理解。

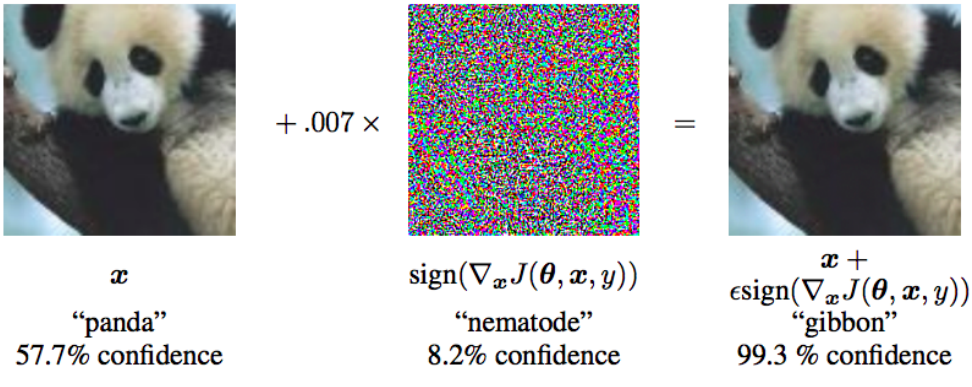
方法介绍

近年来，随着深度学习的日益发展和落地，对抗样本也得到了越来越多的关注。在CV领域，我们需要通过对模型的对抗攻击和防御来增强模型的稳健型，比如在自动驾驶系统中，要防止模型因为一些随机噪声就将红灯识别为绿灯。在NLP领域，类似的对抗训练也是存在的，不过NLP中的对抗训练更多是作为一种正则化手段来提高模型的泛化能力！

这使得对抗训练成为了NLP刷榜的“神器”之一，前有微软通过RoBERTa+对抗训练在GLUE上超过了原生RoBERTa，后有我司的同事通过对抗训练刷新了CoQA榜单。这也成功引起了笔者对它的兴趣，遂学习了一番，分享在此。

基本概念

要认识对抗训练，首先要了解“对抗样本”，它首先出现在论文《Intriguing properties of neural networks》之中。简单来说，它是指对于人类来说“看起来”几乎一样、但对于模型来说预测结果却完全不一样的样本，比如下面的经典例子：



对抗样本经典例子。来自论文《Explaining and Harnessing Adversarial Examples》

理解对抗样本之后，也就不难理解各种相关概念了，比如“对抗攻击”，其实就是想办法造出更多的对抗样本，而“对抗防御”，就是想办法让模型能正确识别更多的对抗样本。所谓对抗训练，则是属于对抗防御的一种，它构造了一些对抗样本加入到原数据集中，希望增强模型对对抗样本的鲁棒性；同时，如本文开篇所提到的，在NLP中它通常还能提高模型的表现。

Min-Max

总的来说，对抗训练可以统一写成如下格式

$$\min_{\theta} \mathbb{E}_{(x,y)\sim\mathcal{D}} \left[\max_{\Delta x\in\Omega} L(x+\Delta x, y; \theta)\right] \tag{1}$$

其中$\mathcal{D}$代表训练集，x代表输入，y代表标签，θ是模型参数，$L(x, y; \theta)$是单个样本的loss，Δx是对抗扰动，Ω是扰动空间。这个统一的格式首先由论文《Towards Deep Learning Models Resistant to Adversarial Attacks》提出。

这个式子可以分步理解如下：

1、往属于x里边注入扰动Δx，Δx的目标是让$L(x+\Delta x, y; \theta)$越大越好，也就是说尽可能让现有模型的预测出错；

2、当然Δx也不是无约束的，它不能太大，否则达不到“看起来几乎一样”的效果，所以Δx要满足一定的约束，常规的约束是$\|\Delta x\| \leq \epsilon$，其中$\epsilon$是一个常数；

3、每个样本都构造出对抗样本$x+\Delta x$之后，用$(x+\Delta x, y)$作为数据对去最小化loss来更新参数θ（梯度下降）；

4、反复交替执行1、2、3步。

由此观之，整个优化过程是max和min交替执行，这确实跟GAN很相似，不同的是，GAN所max的自变量也是模型的参数，而这里max的自变量则是输入（的扰动量），也就是说要对每一个输入都定制一步max。

快速梯度

现在的问题是如何计算Δx，它的目标是增大$L(x+\Delta, y; \theta)$，而我们知道让loss减少的方法是梯度下降，那反过来，让loss增大的方法自然就是梯度上升，因此可以简单地取

$$\Delta x = \epsilon \nabla_x L(x, y; \theta) \tag{2}$$

当然，为了防止Δx过大，通常要对$\nabla_x L(x, y; \theta)$做些标准化，比较常见的方式是

$$\Delta x = \epsilon \frac{\nabla_x L(x, y; \theta)}{\|\nabla_x L(x, y; \theta)\|} \quad 或 \quad \Delta x = \epsilon \text{sign}(\nabla_x L(x, y; \theta)) \tag{3}$$

有了Δx之后，就可以代回式(1)进行优化

$$\min_\theta \mathbb{E}_{(x,y)\sim\mathcal{D}} \left[L(x + \Delta x, y; \theta)\right] \tag{4}$$

这就构成了一种对抗训练方法，被称为**Fast Gradient Method（FGM）**，它由GAN之父Goodfellow在论文《Explaining and Harnessing Adversarial Examples》首先提出。

此外，对抗训练还有一种方法，叫做**Projected Gradient Descent（PGD）**，其实就是通过多迭代几步来达到让$L(x + \Delta x, y; \theta)$更大的$\Delta x$（如果迭代过程中模长超过了$\epsilon$，就缩放回去，细节请参考《Towards Deep Learning Models Resistant to Adversarial Attacks》。）。但本文不旨在对对抗学习做完整介绍，而且笔者认为它不如FGM漂亮有效，所以本文还是以FGM为重点。关于对抗训练的补充介绍，建议有兴趣的读者阅读富邦同学写的《功守道：NLP中的对抗训练 + PyTorch实现》。

回到NLP

对于CV领域的任务，上述对抗训练的流程可以顺利执行下来，因为图像可以视为普通的连续实数向量，Δx也是一个实数向量，因此$x + \Delta x$依然可以是有意义的图像。但NLP不一样，NLP的输入是文本，它本质上是one hot向量（如果还没认识到这一点，欢迎阅读《词向量与Embedding究竟是怎么回事？》），而两个不同的one hot向量，其欧氏距离恒为$\sqrt{2}$，因此对于理论上不存在什么“小扰动”。

一个自然的想法是像论文《Adversarial Training Methods for Semi-Supervised Text Classification》一样，将扰动加到Embedding层。这个思路在操作上没有问题，但问题是，扰动后的Embedding向量不一定能匹配上原来的Embedding向量表，这样一来对Embedding层的扰动就无法对应上真实的文本输入，这就不是真正意义上的对抗样本了，因为对抗样本依然能对应一个合理的原始输入。

那么，在Embedding层做对抗扰动还有没有意义呢？有！实验结果显示，在很多任务中，在Embedding层进行对抗扰动能有效提高模型的性能。

实验结果

既然有效，那我们肯定就要亲自做实验验证一下了。怎么通过代码实现对抗训练呢？怎么才能做到用起来尽可能简单呢？最后用起来的效果如何呢？

思路分析

对于CV任务来说，一般输入张量的shape是(b, h, w, c)，这时候我们需要固定模型的batch size（即b），然后给原始输入加上一个shape同样为(b, h, w, c)、全零初始化的`Variable`，比如就叫做Δx，那么我们可以直接求loss对x的梯度，然后根据梯度给Δx赋值，来实现对输入的干扰，完成干扰之后再执行常规的梯度下降。

对于NLP任务来说，原则上也要对Embedding层的输出进行同样的操作，Embedding层的输出shape为(b, n, d)，所以也要在Embedding层的输出加上一个shape为(b, n, d)的Variable，然后进行上述步骤。但这样一来，我们需要拆解、重构模型，对使用者不够友好。

不过，我们可以退而求其次。Embedding层的输出是直接取自于Embedding参数矩阵的，因此我们可以直接对Embedding参数矩阵进行扰动。这样得到的对抗样本的多样性会少一些（因为不同样本的同一个token共用了相同的扰动），但仍然能起到正则化的作用，而且这样实现起来容易得多。

代码参考

基于上述思路，这里给出Keras下基于FGM方式对Embedding层进行对抗训练的参考实现：

https://github.com/bojone/keras_adversarial_training

核心代码如下：

```
def adversarial_training(model, embedding_name, epsilon=1):
    """给模型添加对抗训练
    其中model是需要添加对抗训练的keras模型，embedding_name
    则是model里边Embedding层的名字。要在模型compile之后使用。
    """
    if model.train_function is None:  # 如果还没有训练函数
        model._make_train_function()  # 手动make
    old_train_function = model.train_function  # 备份旧的训练函数

    # 查找Embedding层
    for output in model.outputs:
        embedding_layer = search_layer(output, embedding_name)
        if embedding_layer is not None:
            break
    if embedding_layer is None:
        raise Exception('Embedding layer not found')

    # 求Embedding梯度
    embeddings = embedding_layer.embeddings  # Embedding矩阵
    gradients = K.gradients(model.total_loss, [embeddings])  # Embedding梯度
    gradients = K.zeros_like(embeddings) + gradients[0]  # 转为dense tensor

    # 封装为函数
    inputs = (model._feed_inputs +
              model._feed_targets +
              model._feed_sample_weights)  # 所有输入层
    embedding_gradients = K.function(
        inputs=inputs,
        outputs=[gradients],
        name='embedding_gradients',
    )  # 封装为函数

    def train_function(inputs):  # 重新定义训练函数
        grads = embedding_gradients(inputs)[0]  # Embedding梯度
        delta = epsilon * grads / (np.sqrt((grads**2).sum()) + 1e-8)  # 计算扰动
        K.set_value(embeddings, K.eval(embeddings) + delta)  # 注入扰动
```

```
        outputs = old_train_function(inputs)  # 梯度下降
        K.set_value(embeddings, K.eval(embeddings) - delta)  # 删除扰动
        return outputs

    model.train_function = train_function  # 覆盖原训练函数
```

定义好上述函数后，给Keras模型增加对抗训练就只需要一行代码了：

```
# 写好函数后，启用对抗训练只需要一行代码
adversarial_training(model, 'Embedding-Token', 0.5)
```

需要指出的是，由于每一步算对抗扰动也需要计算梯度，因此每一步训练一共算了两次梯度，因此每步的训练时间会翻倍。

效果比较

为了测试实际效果，笔者选了中文CLUE榜的两个分类任务：IFLYTEK和TNEWS，模型选择了中文BERT base。在CLUE榜单上，BERT base模型在这两个数据上的成绩分别是60.29%和56.58%，经过对抗训练后，成绩为62.46%、57.66%，分别提升了2%和1%！

	IFLYTEK	TNEWS
无对抗训练	60.29%	56.58%
加对抗训练	62.46%	57.66%

训练脚本请参考：task_iflytek_adversarial_training.py。

当然，同所有正则化手段一样，对抗训练也不能保证每一个任务都能有提升，但从目前大多数“战果”来看，它是一种非常值得尝试的技术手段。此外，BERT的finetune本身就是一个非常玄乎（靠人品）的过程，前些时间论文《Fine-Tuning Pretrained Language Models: Weight Initializations, Data Orders, and Early Stopping》换用不同的随机种子跑了数百次finetune实验，发现最好的结果能高出好几个点，所以如果你跑了一次发现没提升，不妨多跑几次再下结论。

延伸思考

在这一节中，我们从另一个视角对上述结果进行分析，从而推出对抗训练的另一种方法，并且得到一种关于对抗训练的更直观的几何理解。

梯度惩罚

假设已经得到对抗扰动Δx，那么我们在更新θ时，考虑对$L(x+\Delta x, y; \theta)$的展开：

$$\begin{aligned}&\min_\theta \mathbb{E}_{(x,y)\sim\mathcal{D}}\left[L(x+\Delta x, y; \theta)\right]\\ \approx\ &\min_\theta \mathbb{E}_{(x,y)\sim\mathcal{D}}\left[L(x, y; \theta) + \langle\nabla_x L(x, y; \theta), \Delta x\rangle\right]\end{aligned} \tag{5}$$

对应的θ的梯度为

$$\nabla_\theta L(x, y; \theta) + \langle\nabla_\theta\nabla_x L(x, y; \theta), \Delta x\rangle \tag{6}$$

代入$\Delta x = \epsilon \nabla_x L(x, y; \theta)$，得到

$$\begin{aligned}&\nabla_\theta L(x, y; \theta) + \epsilon \langle \nabla_\theta \nabla_x L(x, y; \theta), \nabla_x L(x, y; \theta) \rangle \\ &= \nabla_\theta \left(L(x, y; \theta) + \frac{1}{2}\epsilon \|\nabla_x L(x, y; \theta)\|^2 \right)\end{aligned} \tag{7}$$

这个结果表示，对输入样本施加$\epsilon \nabla_x L(x, y; \theta)$的对抗扰动，一定程度上等价于往loss里边加入“梯度惩罚”

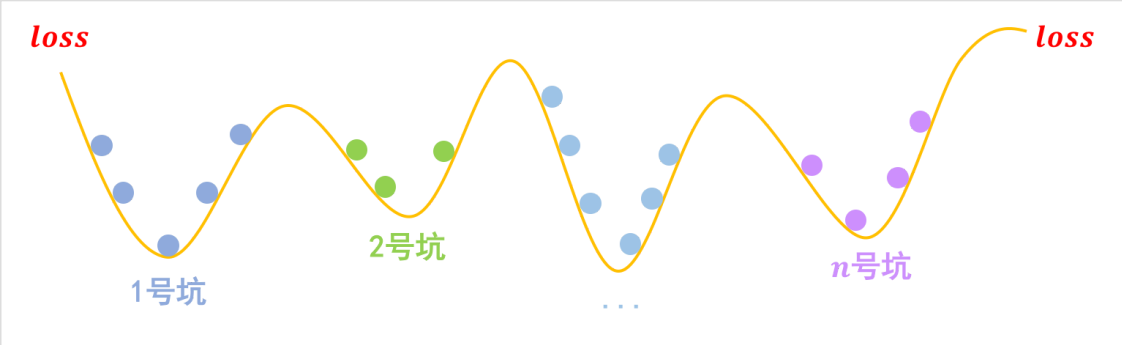
$$\frac{1}{2}\epsilon \|\nabla_x L(x, y; \theta)\|^2 \tag{8}$$

如果对抗扰动是$\epsilon \nabla_x L(x, y; \theta)/\|\nabla_x L(x, y; \theta)\|$，那么对应的梯度惩罚项则是$\epsilon \|\nabla_x L(x, y; \theta)\|$（少了个$1/2$，也少了个2次方）。

事实上，这个结果不是新的，据笔者所知，它首先出现论文《Improving the Adversarial Robustness and Interpretability of Deep Neural Networks by Regularizing their Input Gradients》里。只不过这篇文章不容易搜到，因为你一旦搜索“adversarial training gradient penalty”等关键词，出来的结果几乎都是WGAN-GP相关的东西。

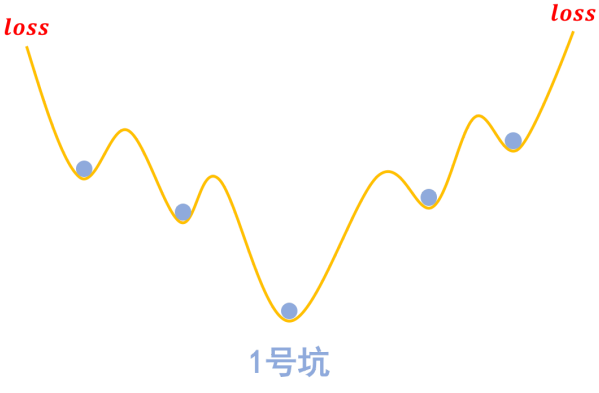
几何图像

事实上，关于梯度惩罚，我们有一个非常直观的几何图像。以常规的分类问题为例，假设有n个类别，那么模型相当于挖了n个坑，然后让同类的样本放到同一个坑里边去：



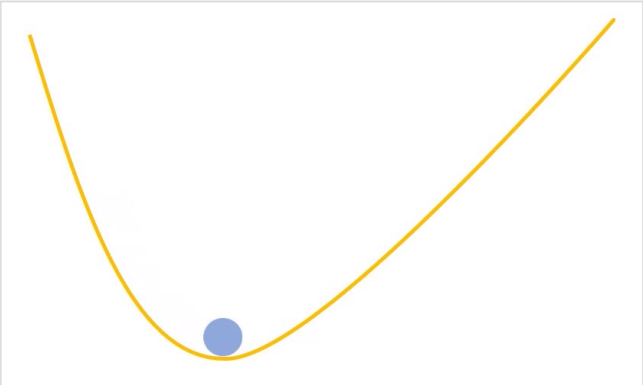
分类问题就是挖坑，然后将同类样本放在同一个坑内

梯度惩罚则说“同类样本不仅要放在同一个坑内，还要放在坑底”，这就要求每个坑的内部要长这样：



对抗训练希望每个样本都在一个“坑中坑”的坑底

为什么要在坑底呢？因为物理学告诉我们，坑底最稳定呀，所以就越不容易受干扰呀，这不就是对抗训练的目的么？



“坑底”最稳定。受到干扰后依然在坑底附近徘徊，不容易挑出坑（跳出坑往往意味着分类错误）

那坑底意味着什么呢？极小值点呀，导数（梯度）为零呀，所以不就是希望$\|\nabla_x L(x,y;\theta)\|$越小越好么？这便是梯度惩罚(8)的几何意义了。类似的“挖坑”、“坑底”与梯度惩罚的几何图像，还可以参考《能量视角下的GAN模型（一）：GAN = “挖坑” + “跳坑”》。

L约束

我们还可以从L约束（Lipschitz约束）的角度来看梯度惩罚。所谓对抗样本，就是输入的小扰动导致输出的大变化，而关于输入输出的控制问题，我们之前在文章《深度学习中的L约束：泛化与生成模型》就已经探讨过。一个好的模型，理论上应该是“输入的小扰动导致导致输出的小变化”，而为了做到这一点，一个很常用的方案是让模型满足L约束，即存在常数L，使得

$$\|f(x_1) - f(x_2)\| \leq L\|x_1 - x_2\| \tag{9}$$

这样一来只要两个输出的差距$\|x_1 - x_2\|$足够小，那么就能保证输出的差距也足够小。而《深度学习中的L约束：泛化与生成模型》已经讨论了，实现L约束的方案之一就是谱归一化（Spectral Normalization），所以往神经网络里边加入谱归一化，就可以增强模型的对抗防御性能。相关的工作已经被发表在《Generalizable Adversarial Training via Spectral Normalization》。

美中不足的是，谱归一化是对模型的每一层权重都进行这样的操作，结果就是神经网络的每一层都满足L约束，这是不必要的（我们只希望整个模型满足L约束，不必强求每一层都满足），因此理论上来说L约束会降低模型表达能力，从而降低模型性能。而在WGAN系列模型中，为了让判别器满足L约束，除了谱归一化外，还有一种常见的方案，那就是梯度惩罚。因此，梯度惩罚也可以理解为一个促使模型满足L约束的正则项，而满足L约束则能有效地抵御对抗样本的攻击。

代码实现

既然梯度惩罚号称能有类似的效果，那必然也是要接受实验验证的了。相比前面的FGM式对抗训练，其实梯度惩罚实现起来还容易一些，因为它就是在loss里边多加一项罢了，而且实现方式是通用的，不用区分CV还是NLP。

Keras参考实现如下：

```python
def sparse_categorical_crossentropy(y_true, y_pred):
    """自定义稀疏交叉熵
    这主要是因为keras自带的sparse_categorical_crossentropy不支持求二阶梯度。
    """
    y_true = K.reshape(y_true, K.shape(y_pred)[:-1])
    y_true = K.cast(y_true, 'int32')
    y_true = K.one_hot(y_true, K.shape(y_pred)[-1])
    return K.categorical_crossentropy(y_true, y_pred)


def loss_with_gradient_penalty(y_true, y_pred, epsilon=1):
    """带梯度惩罚的loss
    """
    loss = K.mean(sparse_categorical_crossentropy(y_true, y_pred))
    embeddings = search_layer(y_pred, 'Embedding-Token').embeddings
    gp = K.sum(K.gradients(loss, [embeddings])[0].values**2)
    return loss + 0.5 * epsilon * gp


model.compile(
    loss=loss_with_gradient_penalty,
    optimizer=Adam(2e-5),
    metrics=['sparse_categorical_accuracy'],
)
```

可以看到，定义带梯度惩罚的loss非常简单，就两行代码而已。需要指出的是，梯度惩罚意味着参数更新的时候需要算二阶导数，但是Tensorflow和Keras自带的loss函数不一定支持算二阶导数，比如`K.categorical_crossentropy`支持而`K.sparse_categorical_crossentropy`不支持，遇到这种情况时，需要自定重新定义loss。

效果比较

还是前面两个任务，结果如下表。可以看到，梯度惩罚能取得跟FGM基本一致的结果。

	IFLYTEK	TNEWS
无对抗训练	60.29%	56.58%
加对抗训练	62.46%	57.66%
加梯度惩罚	62.31%	57.81%

完整的代码请参考：task_iflytek_gradient_penalty.py。

本文小结

本文简单介绍了对抗训练的基本概念和推导，着重讲了其中的FGM方法并给出了Keras实现，实验证明它能提高一些NLP模型的泛化性能。此外，本文还讨论了对抗学习与梯度惩罚的联系，并给出了梯度惩罚的一种直观的几何理解。