

ДОСЛІДЖЕННЯ РОЛІ ТЕОРІЇ ОПТИМАЛЬНОГО ТРАНСПОРТУ В ПОЄДНАННІ РОЗ'ЄДНАНИХ МОД ПІД ЧАС ГЕНЕРАЦІЇ ДАНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ FLOW MATCHING

Вінницький національний технічний університет

Анотація

При навчанні моделей Flow Matching на наборах даних із наявним розділенням мод (наприклад, з вираженням розділення на кластери даних у просторі представлення ознак) вибір траєкторії генерації суттєво впливає на здатність моделі відтворювати структуру простору. Проста інтерполяція між вибірками з різних мод може проходити через області простору представлення даних з низькою щільністю, що призводить до генерації нереалістичних та невалідних прикладів даних з поганою апроксимацією цільового розподілу. Натомість OT-орієнтовані шляхи (оптимально транспортне відображення між прикладами) дозволяють моделі вивчати перехід між різними модами через траєкторії, які описують області з наявними та валідними даними. Даний підхід дозволяє моделям краще описувати бажаний розподіл та генерувати реалістичні приклади.

Ключові слова: Flow Matching, оптимальний транспорт, багатомодальні розподіли, генеративні моделі, інтерполяція.

Abstract

When training Flow Matching models on datasets with separated modes (e.g., clearly separated data clusters in feature space), the choice of generation path significantly impacts the model's ability to represent the structure of the space. Simple interpolation between samples from different modes may pass through regions of the representation space with low data density, leading to the generation of unrealistic and invalid samples, and resulting in poor approximation of the target distribution. In contrast, OT-based paths (optimal transport mappings between samples) enable the model to learn transitions between modes through trajectories that lie in regions with valid and meaningful data. This approach allows models to better capture the desired distribution and generate more realistic examples.

Keywords: Flow Matching, optimal transport, multimodal distributions, generative models, interpolation.

Вступ

Генеративні моделі відіграють вагомую роль у галузі машинного навчання дозволяючи генерувати нові приклади даних на основі знань про існуючі. Протягом тривалого періоду досліджень було створено різноманіття архітектур та підходів, які вирішували допомагали синтезувати нові дані, такі як Variational AutoEncoder, Generative Adversarial Network, Diffusion Models і т.д. Проте одним із перспективних підходів запропонованим для вирішення даної задачі поєднуючи у собі продуктивність попередніх найкращих поколінь архітектур та вимагаючи меншу кількість ресурсів - Flow Matching [1, 2, 3]. Flow Matching - це новий метод, який формулює задачу генерації нових даних, як задачу навчання поля векторів, що наближає потік генерації між розподілом джерела та цільовим розподілом. У всіх галузях дані мають складний, багато модальний розподіл, де окремі моди можуть бути слабко зв'язані або повністю відокремленими регіонами з низькою щільністю даних. Це створює суттєві виклики для генеративних моделей, оскільки інтерполяційні шляхи можуть проходити через області, як не містять валідні приклади.

У цьому контексті постає питання як можливо обирати більш інформативні та семантично обґрунтовані траєкторії генерації? Одним із таких, теоретично обґрунтованих рішень, є використання Теорії Оптимально Транспорту (ОТ) [2, 4], що дозволяє побудувати шляхи, які мінімізують витрати на перенесення маси між розподілами та уникати проходження через області з низькою щільністю даних.

У цій роботі досліджується, як вибір траєкторії - від простої інтерполяції до ОТ-орієнтованих підходів - допомагає поліпшити якість генерації у задачах, де дані представлені з розділеними модами.

Результати дослідження

Під час дослідження було проаналізовано вплив вибору траєкторій у Flow Matching на якість генерації даних у випадку багатомодальних розподілів. Результати експериментів на синтетичних 2D-наборах даних показали, що застосування простої лінійної інтерполяції між вибірками з різних мод призводить до проходження через області простору з дуже низькою щільністю, де не існує валідних прикладів. Це, у свою чергу, призводить до генерації не репрезентативних точок і суттєвого зниження якості апроксимації цільового розподілу.

Натомість використання ОТ-базованих траєкторій дозволило суттєво покращити якість згенерованих прикладів. Побудова шляху перенесення між модами, що враховує структуру простору та розташування областей з низькою щільністю даних, забезпечила більш природний перехід між модами. Моделі, натреновані з такими траєкторіями, демонстрували вищу якість реконструкції та кращу здатність відтворювати складні структури даних, зокрема на багатомодальних підмножин MNIST, де моди відповідають різним цифрам.

Кількісна оцінка (FID, coverage, mode recall) підтвердила покращення при використанні ОТ-траєкторій порівняно з простою інтерполяцією. Особливо помітним є зростання модальної повноти: моделі з ОТ-траєкторіями здатні відтворювати всі моди даних, у той час як моделі з лінійними траєкторіями іноді повністю ігнорують віддалені або малочисельні моди. Це свідчить про важливість вибору геометрично обґрунтованих шляхів при навчанні генеративних моделей на складних розподілах.

У результаті досліджень було виявлено, що щільність даних уздовж обраних траєкторій корелює з якістю генерації: ОТ-орієнтовані траєкторії проходять через області з вищою емпіричною щільністю, що дозволяє моделі краще узагальнювати та уникати надмірного навчання на регіонах простору з не валідними даними. Таким чином, результати підтверджують перевагу ОТ-підходів у задачах Flow Matching на багатомодальних даних.

Висновок

Результат роботи підкреслює перспективу використання ОТ-орієнтованих підходів для вибору траєкторій генерації даних за допомогою Flow Matching. Проста інтерполяція між вибірками з різних мод часто призводить до проходження траєкторії через області з низькою щільністю даних.

Натомість використання ОТ-орієнтованих забезпечує кращу відповідність між модами, дозволяючи моделі покращити якість згенерованих результатів, но і також охоплювати всі моди розподілу, включно з тими, що розташовуються у ділянках з малою кількістю репрезентативних даних.

Отже для задач генерації даних за допомогою Flow Matching важливо враховувати геометрію простору під час побудови навчальних траєкторій. Застосування Теорії Оптимального Транспорту для побудови навчальних траєкторій допомагає в побудові оптимальних шляхів та є перспективним напрямком дослідження.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Yaron Lipman, Ricky T. Q. Chen, Heli Ben-Hamu, Maximilian Nickel, Matt Le, Flow Matching for Generative Modeling [Електронний ресурс] // arXiv preprint arXiv:2210.02747. – 2022. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2210.02747>

2. Alexander Tong, Kilian Fatras, Nikolay Malkin, Guillaume Huguette, Yanlei Zhang, Jarrid Rector-Brooks, Guy Wolf, Yoshua Bengio, Improving and Generalizing Flow-Based Generative Models with Minibatch Optimal Transport [Електронний ресурс] // arXiv preprint arXiv:2302.00482. – 2023. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2302.00482>
3. Doron Haviv, Aram-Alexandre Pooladian, Dana Pe'er, Brandon Amos, Wasserstein Flow Matching: Generative Modeling Over Families of Distributions [Електронний ресурс] // arXiv preprint arXiv:2411.00698. – 2024. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2411.00698>
4. Yexiong Lin, Yu Yao, Tongliang Liu, Beyond Optimal Transport: Model-Aligned Coupling for Flow Matching [Електронний ресурс] // arXiv preprint arXiv:2505.23346. – 2025. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2505.23346>

Кузняк Владислав Павлович - аспірант, кафедра інформаційних радіоелектронних технологій і систем, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, email: kuzniakvl@gmail.com

Vladyslav P. Kuzniak - graduate student, department of information radioelectronic technologies and systems, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail: kuzniakvl@gmail.com