Gumbel distribution

Андрей Филатов

22 сентября 2021

Цель

Научиться сэмплировать примеры дискретного распределения $z_i \in \{1, \ldots, K\}$ параметризированного через логарифмы ненормализированных вероятностей x_i:

Предложение:

Воспользуемся softmax:

$$\pi_k = \frac{1}{z} \exp(x_k) \quad \text{where } z = \sum_{j=1}^{K} \exp(x_j)$$

$$z_i = Cat(\{\pi_1, \ldots, \pi_k\})$$

Мотивация

Softmax

$$\pi_k = \frac{1}{z}\exp(x_k) \quad \text{where } z = \sum_{j=1}^{K}\exp(x_j)$$

$$y_i = Cat(\{\pi_1, \ldots, \pi_k\})$$

Проблема

Мы не сможем посчитать градиенты через сэмплирование. Для подсчета градиентов нужен другой метод.

Gumbel Max Trick

Будем сэмплировать из дискретного распределения следующим образом:

$$y = \arg\max_{i \in \{1, \cdots, K\}} x_i + g_i,$$

где $g_1, \ldots, g_k$ н.о.р. из Gumbel(0,1).

Gumbel distribution

Определение

Случайная величина принадлежит к распределению Гумбеля *Gumbel*(μ, β), если её функция распределения имеет вид:

$$F(x; \mu, \beta) = e^{-e^{-(x-\mu)/\beta}}$$

Свойства

- $\mathbb{E}(X) = \mu + \gamma\beta$, где $\gamma \approx 0.5772$
- $\mathbb{V}(X) = \frac{\pi^2}{6}\beta^2$
- $\text{Gumbel}(0,1) = -\log(-\log(\text{Uniform}(0,1))$

Покажем, что через сэмплирование вероятности совпадают с softmax:

$$\Pr(z_k \text{ is largest} \mid z_k, \{x_{k'}\}_{k'=1}^{K}) = \prod_{k' \neq k} \exp\{-\exp\{-(z_k - x_{k'})\}\}$$

$$\Pr(k \text{ is largest} \mid \{x_{k'}\}) = \int \exp\{-(z_k - x_k) - \exp\{-(z_k - x_k)\}\} \times \prod_{k' \neq k} \exp\{-\exp\{-(z_k - x_{k'})\}\} \, \mathrm{d}z_k$$

Упростим выражение:

$$\Pr(k \text{ is largest} \mid \{x_{k'}\}) = \int \exp\{-z_k + x_k - {} - \exp\{-z_k\} \sum_{k'=1}^{K} \exp\{x_k\}\} \, \mathrm{d}z_k$$

$$\Pr(k \text{ is largest} \mid \{x_{k'}\}) = \int \exp\{-z_k + x_k - \\ - \exp\{-z_k\} \sum_{k'=1}^{K} \exp\{x_k\}\} \, \mathrm{d}z_k$$

Посчитаем интеграл:

$$\Pr(k \text{ is largest} \mid \{x_{k'}\}) = \frac{\exp\{x_k\}}{\sum_{k'=1}^{K} \exp\{x_{k'}\}}$$

Применения в анализе данных

- Gumbel-softmax: $z = softmax((\log(\pi_i) + g)/\tau)$
- Dynamic programming/Linear programming как релаксация максимума

Источники

- https://timvieira.github.io/blog/post/2014/07/31/gumbel-max-trick/
- https://lips.cs.princeton.edu/the-gumbel-max-trick-for-discrete-distributions/
- https://francisbach.com/the-gumbel-trick/
- https://datascience.stackexchange.com/questions/58376/gumbel-softmax-trick-vs-softmax-with-temperature