

1 Příklad - Nejmensí ctverce

Základní rovnice kterou chceme naprogramovat.

$$\min_{\theta} -\mathbb{E}_{p_{\text{data}}(x,y)} [\alpha \log q_{\theta}(y|x) + (1 - \alpha) \log q_{\theta}(x|y)] \quad (1)$$

$$\approx \min_{\theta} -\mathbb{E}_{p_{\text{data}}(x,y)} \left[\alpha \log \frac{\exp(f_{\theta}(x)[y])}{\sum_{y'} \exp(f_{\theta}(x)[y'])} + (1 - \alpha) \log \frac{\exp(f_{\theta}(x)[y])}{\sum_{i=1}^K \exp(f_{\theta}(x_i)[y])} \right]. \quad (2)$$

Dle značení v článku **Joint Energy models** platí

$$p(x, y) = \frac{\exp(f_{\theta}(x)[y])}{Z(\theta)} \quad (3)$$

kde

$$f_{\theta}(x)[y] = -E_{\theta}(x, y). \quad (4)$$

Jak to přemést na nejmenší ctverce? Víme, že pro distribuce platí

$$p(x, y) = p(y, x) = p(y|x) \cdot p(x) \quad (5)$$

$$p(y|x) = \mathcal{N}(\theta_0 + \theta_1 x, \sigma^2), \quad (6)$$

případně pro vyšší řád $\theta_0 + \theta_1 x + \dots \theta_k x^k$. Distribuci $p(x)$ můžeme zvolit libovolně. Například pro jednoduchost

$$p(x) = \mathcal{N}(0, \sigma^2 \tau^2), \quad (7)$$

přičemž uvažujeme σ za známé a τ volíme dle potřeby. Z čehož plyne že

$$p(x, y) = \mathcal{N}(0, \sigma^2 \tau^2) \cdot \mathcal{N}(\theta_0 + \theta_1 x, \sigma^2) = \frac{1}{2\pi\sigma\tau} \exp\left(-\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2 \tau^2}\right) \quad (8)$$

a tudíž

$$f_{\theta}(x)[y] = -\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2 \tau^2}. \quad (9)$$

Tímto máme definovaný náš model. Je potřeba si však uvědomit, že první diskriminativní člen v rovnici (2) je standardní softmax sloužící pro klasifikaci. My v tomto okamžiku nechceme klasifikovat, ale nalezt nejlepší proklad danými body. Proto diskriminativní člen nahradíme druhou mocninou L_2 normy rozdílu $y - \theta_0 - \theta_1 x$. Tedy

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^N (y_i - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2 \quad (10)$$

Nyní dosadíme (9) a (10) do (2) a použijeme pravidla pro počítání s logaritmy.

$$\min_{\theta} \left\{ \alpha \text{SSE} - \mathbb{E}_{p_{\text{data}}(x,y)} [(1 - \alpha) \log q_{\theta}(x|y)] \right\} = \quad (11)$$

$$\min_{\theta} \left\{ \alpha \text{SSE} - \mathbb{E}_{p_{\text{data}}(x,y)} \left[(1 - \alpha) \log \frac{\exp(f_{\theta}(x)[y])}{\sum_x \exp(f_{\theta}(x_i)[y])} \right] \right\} = \quad (12)$$

$$\min_{\theta} \left\{ \alpha \text{SSE} - \mathbb{E}_{p_{\text{data}}(x,y)} \left[(1 - \alpha) \log \frac{\exp\left(-\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2 \tau^2}\right)}{\sum_x \exp\left(-\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x_i)^2}{2\sigma^2} - \frac{x_i^2}{2\sigma^2 \tau^2}\right)} \right] \right\} \quad (13)$$

Přičemž generativní člen $q_{\theta}(x|y)$ se dá zjednodušit do formy

$$\log q_{\theta}(x|y) = \left(-\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2 \tau^2}\right) - \log \sum_x \exp\left(-\frac{(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2}{2\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2 \tau^2}\right) \quad (14)$$