

Глава 1

Выбор субоптимальной структуры модели

В данной главе рассматривается задача выбора структуры модели глубокого обучения. Предлагается ввести вероятностные предположения о распределении параметров и распределении структуры модели. Проводится градиентная оптимизация параметров и гиперпараметров модели на основе байесовского вариационного вывода. В качестве оптимизируемой функции для гиперпараметров модели предлагается обобщенная функция обоснованности. Показано, что данная функция оптимизирует несколько критериев выбора структуры модели: метод максимального правдоподобия, последовательное увеличение и снижению сложности модели, полный перебор структуры модели, а также получение максимума вариационной оценки обоснованности модели. Решается двухуровневая задача оптимизации: на первом уровне проводится оптимизация нижней оценки обоснованности модели по вариационным параметрам модели. На втором уровне проводится оптимизация гиперпараметров модели.

1.1. Вероятностная модель

Определим априорные распределения параметров и структуры модели следующим образом. Пусть для каждого ребра $(j, k) \in E$ и каждой базовой функции $\mathbf{g}_l^{j,k}$ параметры модели $\mathbf{w}_l^{j,k}$ распределены нормально с нулевым средним:

$$\mathbf{w}_l^{j,k} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \gamma_l^{j,k} (\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1}),$$

где $(\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1}$ — диагональная матрица. Априорное распределение $p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h})$ параметров $\mathbf{w}_l^{j,k}$ зависит не только от гиперпараметров $\mathbf{A}_k^{j,k}$, но и от структурного параметра $\gamma_l^{j,k}$.

В качестве априорного распределения для структуры $\mathbf{\Gamma}$ предлагается использовать произведение распределений Gumbel-Softmax (\mathcal{GS}) [?]:

$$p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \prod_{(j,k) \in E} p(\gamma^{j,k} | \mathbf{s}^{j,k}, \lambda_{\text{temp}}),$$

где для каждого структурного параметра γ с количеством базовых функций K вероятность $p(\gamma|\mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}})$ определена следующим образом:

$$p(\gamma|\mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) = (K-1)! \lambda_{\text{temp}}^{K-1} \prod_{l=1}^K s_l \gamma_l^{-\lambda_{\text{temp}}-1} \left(\sum_{l=1}^K s_l \gamma_l^{-\lambda_{\text{temp}}} \right)^{-K},$$

где $\mathbf{s} \in (0, \infty)^K$ — гиперпараметр, отвечающий за смещенность плотности распределения относительно точек симплекса на K вершинах, λ_{temp} — метапараметр температуры, отвечающий за концентрацию плотности вблизи вершин симплекса или в центре симплекса.

- Перечислим свойства, которыми обладает распределение Gumbel-Softmax:
1. Реализация $\hat{\gamma}_l$, т.е. l -й компоненты случайной величины γ порождается следующим образом:

$$\hat{\gamma}_l = \frac{\exp(\log s_l + \hat{g}_l)/\lambda_{\text{temp}}}{\sum_{l'=1}^K \exp(\log s_{l'} + \hat{g}_{l'})/\lambda_{\text{temp}}},$$

где $\hat{\mathbf{g}} \sim -\log(-\log \mathcal{U}(0, 1)^K)$.

2. Свойство округления: $p(\gamma_{l_1} > \gamma_{l_2}, l_1 \neq l_2 | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) = \frac{s_{l_1}}{\sum_{l'} s_{l'}}$.
3. При устремлении температуры к нулю реализация $\hat{\gamma}$ случайной величины концентрируется на вершинах симплекса:

$$p\left(\lim_{\lambda_{\text{temp}} \rightarrow 0} \hat{\gamma}_l = 1 | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}\right) = \frac{s_l}{\sum_{l'} s_{l'}}.$$

4. При устремлении температуры к бесконечности плотность распределения концентрируется в центре симплекса:

$$\lim_{\lambda_{\text{temp}} \rightarrow \infty} p(\gamma | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) = \begin{cases} \infty, \gamma_l = \frac{1}{K}, l \in \{1, \dots, K\}, \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases} \quad (1.1)$$

Доказательства первых трех утверждений приведены в [?]. Докажем утверждение 4.

Доказательство. Формула плотности записывается следующим образом с точностью до множителя:

$$p(\gamma | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) \propto \frac{\lambda_{\text{temp}}^{K-1}}{\left(\sum_{l=1}^K s_l \gamma_l^{-\frac{K-1}{K} \lambda_{\text{temp}}} \sum_{l'=1}^K [l \neq l'] s_{l'} \gamma_{l'}^{-\frac{1}{K} \lambda_{\text{temp}}} \right)^K}.$$

Заметим, что числитель $\lambda_{\text{temp}}^{K-1}$ имеет меньшую скорость сходимости, чем знаменатель, поэтому для вычисления предела достаточно проанализировать только знаменатель. TODO: пояснение. Он представлен суммой слагаемых вида:

$$\left(\frac{\prod_{l' \neq l} \gamma_{l'}^{\frac{1}{K}}}{\gamma_l^{\frac{K-1}{K}}} \right)^{\lambda_{\text{temp}}}, \quad (1.2)$$

возведенных в степень $(-K) < 0$.

Рассмотрим два случая: когда вектор **гамма** лежит не в центре симплекса, и когда **гамма** лежит в центре симплекса. Пусть хотя бы для одной компоненты l выполнено: $\gamma_l \neq \frac{1}{K}$. Пусть l' соответствует индексу максимальной компоненты вектора γ . Для $l = l'$ предел выражения (1.2) при λ_{temp} стремится к бесконечности. Для $l \neq l'$ предел выражения (1.2) при λ_{temp} стремится к нулю.

Возводя сумму пределов в степень $(-K)$ получаем предел плотности, равный нулю.

Рассмотрим второй случай. Пусть $\gamma = \frac{1}{K}$. Тогда выражение (1.2) с точностью до множителя упрощается до λ^{K-1} . Предел данного выражения стремится к бесконечности. Таким образом, предел плотности Gumbel-Softmax равен выражению (1.1), что и требовалось доказать. \square

Первое свойство Gumbel-Softmax распределения позволяет использовать репараметризацию при вычислении градиента в вариационном выводе (англ. reparametrization trick).

Определение 1. Репараметризацией случайной величины \mathbf{w} , распределенную по распределению q с параметрами $\boldsymbol{\theta}$ назовем представление величины с помощью другой случайной величины, имеющей распределение, не зависящее от параметров $\boldsymbol{\theta}$:

$$\hat{\mathbf{w}} \sim q \iff \hat{\mathbf{w}} \sim g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}),$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — случайная величина, чье распределение не зависит от параметров $\boldsymbol{\theta}$, g — некоторая детерминированная функция.

Идею репараметризации поясним на следующем примере.

Пример 1. Пусть структура Γ определена для модели \mathbf{f} однозначно. Рассмотрим математическое ожидание логарифма правдоподобия выборки модели по некоторому непрерывному распределению q :

$$\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \int_{\mathbf{w}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) q(\mathbf{w}) d\mathbf{w}.$$

Продифференцируем данное выражение по параметрам $\boldsymbol{\theta}$ вариационного распределения q :

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \int_{\mathbf{w}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} q(\mathbf{w}) d\mathbf{w}.$$

Выражение общем виде не имеет аналитического решения. Пусть распределение q для параметров \mathbf{w} подлежит репараметризации. Тогда справедливо следующее выражение:

$$\begin{aligned} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) &= \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathbb{E}_{\boldsymbol{\varepsilon}} \log p(\mathbf{y}|g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}), \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \\ &= \int_{\boldsymbol{\varepsilon}} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \log p(\mathbf{y}|g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}), \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) p(\boldsymbol{\varepsilon}) d\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\varepsilon}} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \log p(\mathbf{y}|g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}), \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}). \end{aligned}$$

Таким образом, распределение, позволяющее произвести репараметризацию, является более удобным для вычисления интегральных оценок. Кроме того, данный подход позволяет значительно повысить точность вычисления градиента от функций, зависящих от случайных величин [?].

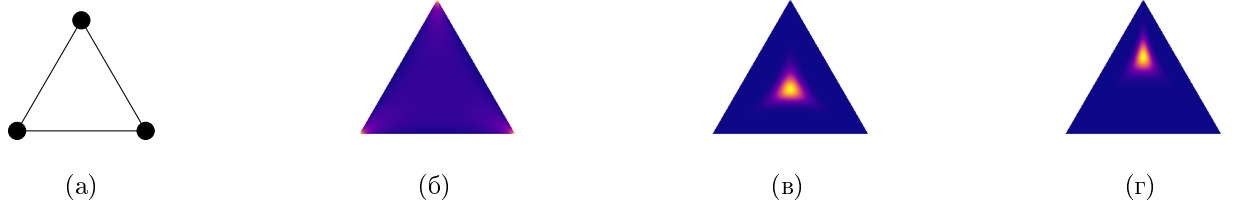


Рис. 1.1. Пример распределения Gumbel-Softmax при различных значениях параметров: а) $\lambda_{temp} \rightarrow 0$, б) $\lambda_{temp} = 1, \mathbf{s} = [1, 1, 1]$, в) $\lambda_{temp} = 5, \mathbf{s} = [1, 1, 1]$, г) $\lambda_{temp} = 5, \mathbf{s} = [10, 0.1, 0.1]$.

Пример распределения Gumbel-Softmax при различных параметрах представлен на Рис. 1.1. В качестве альтернативы для априорного распределения на структуре выступает распределение Дирихле. В качестве предельного случая, когда все структуры равнозначны, выступает равномерное распределение. Выбор в качестве распределения на структуре произведения Gumbel-Softmax распределения обоснован выбором этого же распределения в качестве вариационного.

Заметим, что предлагаемое априорное распределение неоднозначно: одно и то же распределение можно получить с различными значениями гиперпараметра $\mathbf{A}_l^{j,k}$ и структурного параметра $\gamma_l^{j,k}$. В качестве регуляризатора для матрицы $(\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1}$ предлагается использовать обратное гамма-распределение:

$$(\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1} \sim \text{inv-gamma}(\lambda_1, \lambda_2),$$

где $\lambda_1, \lambda_2 \in \boldsymbol{\lambda}$ — метапараметры оптимизации. Использование обратного гамма-распределения в качестве распределения гиперпараметров можно найти в [?, ?]. В данной работе обратное распределение выступает как регуляризатор гиперпараметров. Варьируя метапарамы λ_1, λ_2 получается более сильная или более слабая регуляризация [?]. Пример распределений $\text{inv-gamma}(\lambda_1, \lambda_2)$ для разных значений метапараметров λ_1, λ_2 изображен на Рис. 1.2. Оптимизации без регуляризации соответствует случай предельного распределения $\lim_{\lambda_1, \lambda_2 \rightarrow 0} \text{inv-gamma}(\lambda_1, \lambda_2)$.

Таким образом, предлагаемая вероятностная модель содержит следующие компоненты:

1. Параметры \mathbf{w} модели, распределенные нормально.
2. Структура модели $\boldsymbol{\Gamma}$, содержащая все структурные параметры $\{\gamma^{j,k}, (j, k) \in E\}$ распределены по распределению Gumbel-Softmax.
3. Гиперпараметры: $\mathbf{h} = [\text{diag}(\mathbf{A}), \mathbf{s}]$, где \mathbf{A} — конкатенация матриц $\mathbf{A}_l^{j,k}, (j, k) \in E$, \mathbf{s} — конкатенация параметров Gumbel-Softmax распределений $\mathbf{s}^{j,k}, (j, k) \in E$, где E — множество ребер, соответствующих графу рассматриваемого параметрического семейства.
4. Метапараметры: $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{temp}]$. Эти параметры не подлежат оптимизации и задаются экспертно.

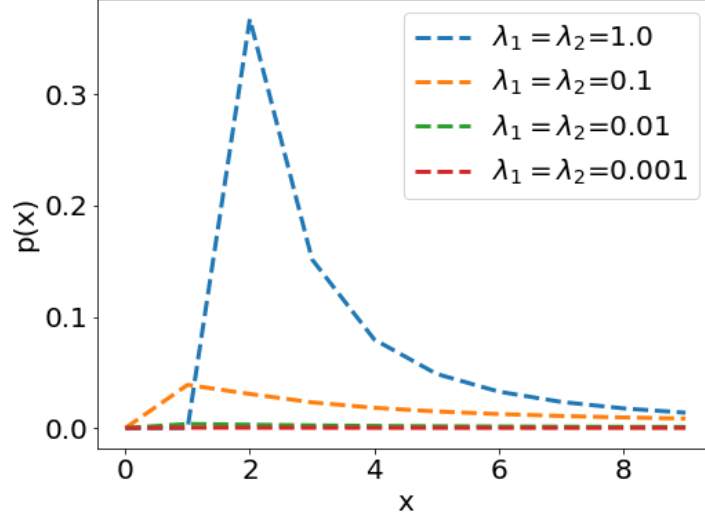


Рис. 1.2. Графики обратных гамма распределений для различных значений метапараметров.

График вероятностной модели в формате плоских нотаций представлен на Рис. 1.3.

1.2. Вариационная оценка для обоснованности вероятностной модели

В качестве критерия выбора структуры модели предлагается использовать апостериорную вероятность гиперпараметров:

$$p(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \max_{\mathbf{h} \in \mathbb{H}}, \quad (1.3)$$

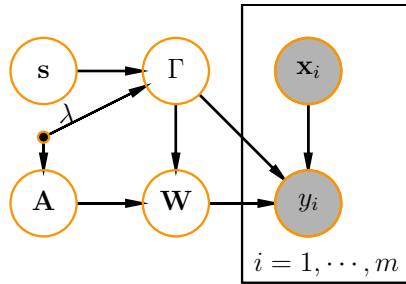


Рис. 1.3. График предлагаемой вероятностной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

где структура модели и параметры модели выбираются на основе полученных значений гиперпараметров:

$$\Gamma^* = \arg \max_{\Gamma \in \mathbb{T}} p(\Gamma | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}^*),$$

$$\mathbf{w}^* = \arg \max_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}} p(\mathbf{w} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \Gamma^*, \mathbf{h}^*),$$

где \mathbf{h}^* — решение задачи оптимизации (1.3).

Для вычисления обоснованности

$$p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda) = \iint_{\Gamma, \mathbf{w}} p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma, \lambda) p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h}, \lambda) p(\Gamma | \mathbf{h}, \lambda) d\Gamma d\mathbf{w}$$

из (1.3) предлагается использовать вариационную оценку обоснованности.

Теорема 1. Пусть $q(\mathbf{w}, \Gamma | \boldsymbol{\theta}) = q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}, \Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) q_{\Gamma}(\Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma})$ — вариационное распределение с параметрами $\boldsymbol{\theta} = [\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}]$, аппроксимирующее апостериорное распределение структуры и параметров:

$$q(\mathbf{w}, \Gamma | \boldsymbol{\theta}) \approx p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda),$$

$$q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) \approx p(\mathbf{w} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \Gamma, \mathbf{h}, \lambda),$$

$$q_{\Gamma}(\Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) \approx p(\Gamma | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda).$$

Тогда справедлива следующая оценка:

$$\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda) \geq \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}_{\Gamma \sim q_{\Gamma}} \mathbb{E}_{\mathbf{w} \sim q_{\mathbf{w}}} \log p(\mathbf{y} | \mathbf{w}, \Gamma, \mathbf{X}) - D_{\text{KL}}(q_{\Gamma}(\Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) | p(\Gamma | \mathbf{h}, \lambda)) - \\ & - D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h})), \end{aligned}$$

где $D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h}))$ вычисляется по формуле условной дивергенции [?]:

$$D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h})) = \mathbb{E}_{\Gamma \sim q_{\Gamma}} \mathbb{E}_{\mathbf{w} \sim q_{\mathbf{w}}} \log \left(\frac{q(\mathbf{w} | \Gamma)}{p(\mathbf{w} | \mathbf{h}, \Gamma)} \right).$$

Доказательство. TODO: пояснения. Используя неравенство Йенсена получим

$$\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda) \geq$$

$$\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{w}, \Gamma, \mathbf{X}) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma | \boldsymbol{\theta}) | p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h}, \lambda)).$$

Декомпозируем распределение q по свойству условной дивергенции:

$$\begin{aligned} & D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma | \boldsymbol{\theta}) | p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h})) = \\ & = D_{\text{KL}}(q_{\Gamma}(\Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) | p(\Gamma | \mathbf{h}, \lambda)) + D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h}, \lambda)). \end{aligned}$$

□

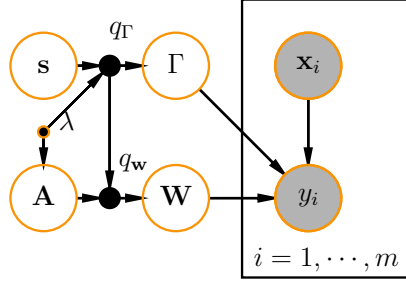


Рис. 1.4. График предлагаемой вероятностной вариационной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Вариационное распределение обозначено черным кругом. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

В качестве вариационного распределения q_W предлагается использовать нормальное распределение, не зависящее от структуры модели Γ :

$$q_W = \mathcal{N}(\mu_q, \mathbf{A}_q),$$

где \mathbf{A}_q — диагональная матрица с диагональю α_q .

В качестве вариационного распределения q_Γ предлагается использовать произведение распределений Gumbel-Softmax. Конкатенацию параметров концентрации распределений обозначим \mathbf{s}_q . Его температуру, общую для всех структурных параметров $\gamma \in \Gamma$, обозначим θ_{temp} . Вариационными параметрами распределения q являются параметры распределений q_W, q_Γ :

$$\theta = [\mu_q, \alpha_q, \mathbf{s}_q, \theta_{\text{temp}}].$$

График вероятностной вариационной модели в формате плоских нотаций представлен на Рис. 1.4.

Для анализа сложности полученной модели введем понятие *параметрической сложности*.

Определение 2. Параметрической сложностью $C_p(\theta|U_h, \lambda)$ модели с вариационными параметрами θ на компакте $U_h \subset \mathbb{H}$ назовем минимальную дивергенцию между вариационным и априорным распределением:

$$C_p(\theta|U_h, \lambda) = \min_{\mathbf{h} \in U_h} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\theta) | p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \lambda)).$$

Параметрическая сложность модели соответствует ожидаемой длине описания параметров модели при условии заданного параметрического априорного распределения [?].

Одним из критериев удаления неинформативных параметров в вероятностных моделях является отношение вариационной плотности параметров в моде распределения к вариационной плотности параметра в нуле [?]:

$$\frac{q_{\mathbf{w}}(w = \mu_q | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(w = 0 | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} = \exp \left(-\frac{2\alpha_q^2}{\mu_q^2} \right),$$

где $q_{\mathbf{w}}(w | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) \sim \mathcal{N}(\mu_q, \alpha_q)$.

Обобщим понятие относительной вариационной плотности на случай произвольных непрерывных распределений.

Определение 3. Относительной вариационной плотностью параметра $w \in \mathbf{w}$ при условии структуры $\boldsymbol{\Gamma}$ и гиперпараметров \mathbf{h} назовем отношение вариационной плотности в моде вариационного распределения параметра к вариационной плотности в моде априорного распределению параметра:

$$\rho(w | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{q(\text{mode } q(w | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q(\text{mode } p(w | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}.$$

Относительной вариационной плотностью вектора параметров \mathbf{w} назовем следующее выражение:

$$\rho(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \prod_{w \in \mathbf{w}} \rho(w | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}).$$

Сформулируем и докажем теорему о связи относительной плотности и параметрической сложности модели:

Теорема 2. Пусть

1. заданы компактные множества $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}, U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}} \subset \Theta$;
2. Мода априорного распределения $p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ не зависит от гиперпараметров \mathbf{h} на $U_{\mathbf{h}}$ и структуры $\boldsymbol{\Gamma}$ на $U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}}$:

$$\text{mode } p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}_1, \mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}) = \text{mode } p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{M} \forall \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\Gamma}_1, \boldsymbol{\Gamma}_2 \in U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}}.$$

3. вариационное распределение $q_{\mathbf{w}}$ и априорное распределение $p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h})$ являются абсолютно непрерывными и унимодальными на $U_{\mathbf{h}}, U_{\boldsymbol{\theta}}$.
4. Параметры модели \mathbf{w} имеют конечные вторые моменты по распределениям $q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}), p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$:

$$\mathbb{E}_q \mathbf{w}^2 = \mathbb{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}} \mathbb{E}_{q_{\mathbf{w}}} \mathbf{w}^2 < \infty;$$

$$\mathbb{E}_{p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \mathbf{w}^2 = \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \mathbb{E}_{p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \mathbf{w}^2 < \infty;$$

5. мода и матожидание вариационного распределения $q_{\mathbf{w}}$ и априорного распределения $p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ совпадают:

$$\text{mode } p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbb{E}_{p(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \mathbf{w};$$

$$\text{mode } q(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) = \mathbb{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \mathbf{w};$$

6. задана бесконечная последовательность векторов вариационных параметров $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_i \in U_\theta$, такая что $\lim_{i \rightarrow \infty} C_p(\theta_i | U_h, \lambda) = 0$. Тогда следующее выражение стремится к единице:

$$E_{q_\Gamma} \rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1} \rightarrow 1.$$

Доказательство. Воспользуемся неравенством Пинскера:

$$\|F_q(\theta) - F_p(\mathbf{h})\|_{\text{TV}} \leq \sqrt{2D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma | \theta) \| p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h}))},$$

где $\|\cdot\|_{\text{TV}}$ — расстояние по вариации, F_q, F_p — функции распределения $q(\mathbf{w}, \Gamma | \theta)$ и $p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h}, \lambda)$. Отсюда $\lim_{i \rightarrow \infty} \|F_q(\theta) - F_p(\mathbf{h})\|_{\text{TV}} = 0$. Из сходимости по вариации следует слабая сходимость распределений. Рассмотрим разность усредненных мод:

$$\begin{aligned} E_{q_\Gamma} \text{mode } q_w(\mathbf{w} | \theta_w, \Gamma) - E_{p(\Gamma | \mathbf{h}, \lambda)} \text{mode } p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h}) &= \\ &= E_{q_\Gamma} E_{q_w} \mathbf{w} - E_{p(\Gamma | \mathbf{h}, \lambda)} E_{p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h}, \lambda)} \mathbf{w} = \\ &= E_q \mathbf{w} - E_{p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h})} \mathbf{w}. \end{aligned}$$

Т.к. вторые моменты величины \mathbf{w} конечны для вариационного и априорного распределения, то функции $E_q \mathbf{w}, E_{p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h})} \mathbf{w}$ равномерно интегрируемы. Если случайные величины слабо сходятся и являются равномерно интегрируемыми, то предел выражению можно поставить под знак интеграла:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (E_q \mathbf{w} - E_{p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h})} \mathbf{w}) = 0.$$

Т.к. вторые моменты случайных величин конечны, то конечны и первые моменты:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} E_q \mathbf{w} = \lim_{i \rightarrow \infty} E_{p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h})} \mathbf{w} = \mathbf{M}.$$

Таким образом в пределе усредненные по структуре моды вариационного распределения $q_w(\mathbf{w} | \Gamma, \theta)$ и априорного распределения $p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h})$ совпадают. Т.к. наибольшее значение распределения q_w сосредоточено в моде распределения q_w , то $\rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1}$ ограничена сверху единицей. Рассмотрим матожидание функции, обратной к отношению вариационных плотностей:

$$E_q \rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1}$$

Т.к. функция $\rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1}$ ограничена, то предел можно внести под знак интеграла:

$$\begin{aligned} \lim_{i \rightarrow \infty} E_q \rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1} &= E_q \lim_{i \rightarrow \infty} \rho(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_w, \mathbf{h}, \lambda)^{-1} = \\ &= E_q \lim_{i \rightarrow \infty} \prod_{w \in \mathbf{w}} \frac{q(\text{mode } p(w | \Gamma, \mathbf{h}, \lambda) | \Gamma, \theta_w)}{q(\text{mode } q(w | \Gamma, \theta_w) | \Gamma, \theta_w)} = \\ &= E_q \frac{q_w(\mathbf{M})}{q_w(\mathbf{M})} = E_{q_\Gamma} \frac{q_w(\mathbf{M})}{q_w(\mathbf{M})} = 1. \end{aligned}$$

□

Теорема утверждает, что при устремлении параметрической сложности модели к нулю, все параметры модели подлежат удалению в среднем по всем возможным значениям структуры $\mathbf{\Gamma}$ модели. Заметим, что теорема применима для случая, когда последовательность вариационных распределений q не имеет предела. Так, в случае, если структура $\mathbf{\Gamma}$ определена однозначно, последовательность q_i может являться последовательностью нормальных распределений, чье матожидание стремится к нулю:

$$q_i \sim \mathcal{N}((\boldsymbol{\mu}_q)_i, (\mathbf{A}_q^{-1})_i), (\boldsymbol{\mu}_q)_i \rightarrow \mathbf{0}.$$

Априорным распределением $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = p(\mathbf{w} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ при этом может являться семейство нормальных распределений с нулевым средним:

$$p(\mathbf{w} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1}).$$

При этом сама последовательность распределений q_i не обязана иметь предел.

1.3. Обобщающая задача

В данном разделе проводится анализ основных критериев выбора моделей, а также предлагается их обобщение на случай моделей, использующих вариационное распределение q для аппроксимации неизвестного апостериорного распределения параметров $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$.

Рассмотрим основные статистические критерии выбора вероятностных моделей.

1. Критерий максимального правдоподобия:

$$\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \rightarrow \max_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}, \mathbf{\Gamma} \in \Gamma}.$$

Метод заключается в максимизации правдоподобия выборки и подвержен переобучению. Для использования данного метода в качестве задачи выбора модели предлагается следующее обобщение:

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}). \quad (1.5)$$

Данное обобщение (1.5) эквивалентно критерию правдоподобия при выборе в качестве q эмпирического распределения параметров и структуры. Метод не предполагает оптимизации гиперпараметров \mathbf{h} . Для формального соответствия данной задачи задаче выбора модели (??), т.е. двухуровневой задачи оптимизации, положим $L = Q$:

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\theta}}$$

$$Q = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}).$$

2. Метод максимальной апостериорной вероятности.

$$\log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \max_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}, \mathbf{\Gamma} \in \mathbb{\Gamma}}.$$

Аналогично предыдущему методу сформулируем вариационное обобщение данной задачи:

$$L = Q = \mathbb{E}_q(\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) + \log p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\lambda})). \quad (1.6)$$

Т.к. в рамках данной задачи (1.6) не предполагается оптимизации гиперпараметров \mathbf{h} , положим параметры распределения $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ фиксированными:

$$\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{s}, \text{diag}(\mathbf{A})].$$

3. Перебор структуры:

$$L = Q = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w} | \mathbf{X}) [q_{\mathbf{\Gamma}} = p'] \quad (1.7)$$

где p' — некоторое распределение на структуре $\mathbf{\Gamma}$, выступающее в качестве метапараметра.

4. Критерий Акаике:

$$\text{AIC} = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - |\mathbb{W}|.$$

Т.к. все рассматриваемые модели принадлежат одному параметрическому семейству моделей \mathfrak{F} , то количество параметров у всех рассматриваемых моделей совпадает. Тогда критерий Акаике совпадает с критерием максимального правдоподобия. Для использования критерия Акаике для сравнения моделей, принадлежащих одному параметрическому семейству \mathfrak{F} предлагается следующая переформулировка:

$$L = Q = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - |\{w : D_{\text{KL}}(\theta, \mathbf{h}) < \lambda_{\text{prune}}\}|, \quad (1.8)$$

где

$$\mathbf{h} = \arg \min_{\mathbf{h}' \in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) | p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}', \boldsymbol{\lambda})), \quad (1.9)$$

λ_{prune} — метапараметр алгоритма, $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ — область определения задачи по гиперпараметрам. Предложенное обобщение (1.8) применимо только в случае, если выражение (1.9) определено однозначно, т.е. существует единственный вектор гиперпараметров на $U_{\mathbf{h}}$, доставляющий минимум дивергенции $D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) | p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}))$.

5. Информационный критерий Шварца:

$$\text{BIC} = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - 0.5 \log(m) |\mathbb{W}|.$$

Переформулируем данный критерий аналогично критерию AIC:

$$L = Q = \text{BIC}_{\lambda} = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - \log(m) |\{w : D_{\text{KL}}(\theta, \mathbf{h}) < \lambda_{\text{prune}}\}|, \quad (1.10)$$

метапараметр λ_{prune} определен аналогично (1.9).

6. Метод вариационной оценки обоснованности:

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\Gamma, \mathbf{w}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\theta}}, \quad (1.11)$$

$$Q = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\Gamma, \mathbf{w}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \max_{\mathbf{h}},$$

В рамках данной задачи функции L и Q совпадают, все гиперпараметры \mathbf{h} подлежат оптимизации.

7. Валидация на отложенной выборке:

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}_{\text{train}}, \mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\theta}}, \quad (1.12)$$

$$Q = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{w}, \Gamma) \rightarrow \max_{\mathbf{h}},$$

где $(\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}), (\mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{y}_{\text{test}})$ — разбиение выборки на обучающую и контрольную подвыборку. В рамках данной задачи, все гиперпараметры \mathbf{h} подлежат оптимизации.

Каждый из рассмотренных критерии удовлетворяет хотя бы одному из перечисленных свойств:

- 1) модель, оптимизируемая согласно критерию, доставляет максимум правдоподобия выборки;
- 2) модель, оптимизируемая согласно критерию, доставляет максимум оценки обоснованности;
- 3) для моделей, доставляющих сопоставимые значения правдоподобия выборки, выбирается модель с меньшим количеством информативных параметров.
- 4) критерий позволяет производить перебор структур для отбора наилучших модели.

Формализуем рассмотренные критерии. Оптимизационную задачу, которая удовлетворяет всем перечисленным свойствам при некоторых значениях метапараметров, будет называть *обобщающей*.

Определение 4. Двухуровневую задачу оптимизации будем называть *обобщающей* на компакте $U = U_{\boldsymbol{\theta}} \times U_{\mathbf{h}} \times U_{\boldsymbol{\lambda}} \subset \Theta \times \mathbb{H} \times \mathbb{A}$, если она удовлетворяет следующим критериям.

1. Область определения каждого параметра $w \in \mathbf{w}$, гиперпараметра $h \in \mathbf{h}$ и метапараметра $\lambda \in \boldsymbol{\lambda}$ не является пустым множеством и не является точкой.
2. Для каждого значения гиперпараметров \mathbf{h} оптимальное решение нижней (??) задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*$ определено однозначно при любых значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$.

3. Критерий максимизации правдоподобия выборки: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_\lambda$ и

$$K_1 > 0, K_1 < \max_{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h} Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2),$$

такие что для любых векторов гиперпараметров, удовлетворяющих неравенству

$$\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h, Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_1,$$

выполняется неравенство

$$\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) > \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2), \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}).$$

4. Критерий минимизации параметрической сложности: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_\lambda$ и

$$K_2 > 0, K_2 < \max_{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h} Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2),$$

такие что для любых векторов гиперпараметров $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h$, удовлетворяющих неравенству

$$Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_2,$$

параметрическая сложность первой модели меньше, чем второй:

$$C_p(\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)|U_h, \boldsymbol{\lambda}) < C_p(\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2)|U_h, \boldsymbol{\lambda}).$$

5. Критерий приближения оценки обоснованности: существует значение гиперпараметров $\boldsymbol{\lambda}$, такое что значение функций потерь L и валидации Q пропорционален вариационной оценке обоснованности модели:

$$Q \propto L \propto \mathbb{E}_q p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}) - D_{KL}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})).$$

для всех $\boldsymbol{\theta} \in U_\theta, \mathbf{h} \in U_h$.

6. Критерий перебора оптимальных структур: существует набор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$ и константа

$$K_3 > 0, K_3 < \max_{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2} D_{KL}(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})|p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})),$$

такие что для локальных оптимумов задачи оптимизации $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$, полученных при метапараметрах $\boldsymbol{\lambda}$ и удовлетворяющих неравенствам

$$D_{KL}(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})|p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) > K_3, p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})|p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})) > K_3,$$

$$Q(\mathbf{h}_1) > Q(\mathbf{h}_2),$$

существует значение метапараметров $\boldsymbol{\lambda}'$, такие что

- (a) Соответствие между вариационными параметрами $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2)$ сохраняется при $\boldsymbol{\lambda}'$.
- (b) $Q(\mathbf{h}_1) < Q(\mathbf{h}_2)$ при $\boldsymbol{\lambda}'$.

7. Критерий непрерывности: функции L и Q непрерывны по метопараметрам $\lambda \in U_\lambda$.

Первый критерий является техническим и используется для исключения из рассмотрения вырожденных задач оптимизации. Второй критерий говорит о том, что решение первого и второго уровня должны быть согласованы и определены однозначно. Критерии 3-5 определяют возможные критерии оптимизации, которые должны приближаться обобщающей задачей. Критерий 6 говорит о возможности перехода между различными структурами модели. Отметим, что данное условие крайне важно в условиях оптимизации моделей глубокого обучения, которые отличаются многоэкстремальностью. Отметим также, что данный критерий говорит о том, что мы можем перейти от одного набора гиперпараметров \mathbf{h}_1 к другим \mathbf{h}_2 , если они соответствуют локальным оптимумам задачи оптимизации и дивергенция соответствующих априорных распределений на структурах $p(\Gamma|\mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}})$. При этом соответствующие вариационные распределения $q(\Gamma|\theta_\Gamma)$ могут оказаться достаточно близки. Возможным дополнением этого критерия был бы критерий, позволяющий переходить от структуры к структуре, если соответствующие распределения $q(\Gamma|\theta_\Gamma)$ различаются значительно. Последний критерий говорит о том, что обобщающая задача должна позволять производить переход между различными методами выбора параметров и структуры модели непрерывно.

Теорема 3. Рассмотренные задачи (1.5), (1.6), (1.7), (1.8), (1.10), (1.12) не являются обобщающими.

Доказательство. Задачи (1.5), (1.6), (1.7), (1.8), (1.10) не имеют гиперпараметров \mathbf{h} , подлежащих оптимизации, поэтому не могут оптимизировать вариационную оценку.

При использовании валидации на отложенной выборке (1.12) в функцию валидации Q не входит ни один метопараметр, поэтому критерий перебора структур 6 для нее также не выполняется. □

Теорема 4. Пусть q_Γ — абсолютно непрерывное распределение с дифференцируемой плотностью, такой что градиент плотности является нулевым не более чем счетное количество раз. Тогда задача (1.11) не является обобщающей.

Доказательство. Пусть выполнены условия критерия 6 о переборе структур. Тогда для некоторых векторов метопараметров λ, λ' :

$$\begin{aligned} & \nabla_\theta \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\theta_1)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - \nabla_\theta D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\theta_1)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_1, \lambda)) = \\ & = \nabla_\theta \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\theta_1)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - \nabla_\theta D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\theta_1)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_1, \lambda')). \end{aligned}$$

Сокращая равные слагаемые в равенстве получим:

$$\nabla_\theta D_{\text{KL}}(q(\Gamma|\theta_2)|p(\Gamma|\lambda)) = \nabla_\theta D_{\text{KL}}(q(\Gamma|\theta_2)|p(\Gamma|\lambda')),$$

$$\int_{\Gamma \in \mathbb{F}} \nabla_{\theta_{\Gamma}} q(\Gamma | \theta_2) (\log p(\Gamma | \lambda) - \log p(\Gamma | \lambda')) d\Gamma = 0.$$

Т.к. выражение $\nabla_{\theta_{\Gamma}} q(\Gamma | \theta_2)$ принимает нулевое значение в счетном количестве точек, то выражение $\log p(\Gamma | \lambda) - \log p(\Gamma | \lambda')$ равно нулю почти всюду, что означает что метапараметр температуры λ_{temp} равен:

$$\lambda_{\text{temp}} = \lambda'_{\text{temp}}, \quad \lambda_{\text{temp}} \in \lambda, \lambda'_{\text{temp}} \in \lambda'.$$

Таким образом, метапараметры λ, λ' отличаются лишь на метапараметры λ_1, λ_2 регуляризации ковариационной матрицы \mathbf{A}^{-1} . Возьмем в качестве векторов гиперпараметров $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ гиперпараметры, отличающиеся только параметрами распределения структуры:

$$\mathbf{h}_1 = [\mathbf{s}_1, \text{diag}(\mathbf{A}_1)], \mathbf{h}_2 = [\mathbf{s}_2, \text{diag}(\mathbf{A}_2)], \quad \mathbf{s}_1 \neq \mathbf{s}_2, \mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_2.$$

Метапараметры λ_1, λ_2 не влияют на значение функции Q при гиперпараметрах, отличающихся только параметрами распределения структуры, поэтому значение функции Q для них будет неизменно при любых значениях λ_1, λ_2 . \square

В качестве обобщающей задачи оптимизации предлагается оптимизационную задачу следующего вида:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^* &= \arg \max_{\mathbf{h}} Q = & (Q^*) \\ &= \lambda_{\text{likelihood}}^Q \mathbb{E}_{q^*} \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) - \\ &- \lambda_Q^{\text{prior}} D_{KL}(q^*(\mathbf{w}, \Gamma) || p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})) - \\ &- \sum_{p' \in \mathbf{P}, \lambda \in \lambda_Q^{\text{struct}}} \lambda D_{KL}(\Gamma | p') + \log p(\mathbf{h} | \mathbf{f}), \\ q^* &= \arg \max_q L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) & (L^*) \\ &- \lambda_L^{\text{prior}} D_{KL}(q^*(\mathbf{w}, \Gamma) || p(\mathbf{w}, \Gamma | \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})), \end{aligned}$$

где \mathbf{P} — непустое множество распределений на структуре Γ , $\lambda_Q^{\text{prior}}, \lambda_{\text{likelihood}}^Q, \lambda_Q^{\text{struct}}$ — некоторые числа. Множество распределений \mathbf{P} отвечает за перебор структур Γ в процессе оптимизации модели. Подробное объяснение данного множества дано ниже.

Теорема 5. Пусть:

- 1) задано непустое множество непрерывных по параметрам распределений на структуре \mathbf{P} ;
- 2) вариационное распределение $q = q_{\text{boldsymbol}\Gamma}(\Gamma | \theta_{\Gamma}) q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \Gamma, \theta_{\Gamma})$ является абсолютно непрерывным, плотность которого непрерывна по метапараметрам λ ;

- 3) задан компакт $U = U_{\boldsymbol{\theta}} \times U_{\mathbf{h}} \times U_{\boldsymbol{\lambda}} \subset \Theta \times \mathbb{H} \times \mathbb{A}$, где параметры распределений $\mathbf{P} \in \mathbb{A}$, область $U_{\boldsymbol{\theta}}$ декомпозируется на две области $U_{\boldsymbol{\theta}} = U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_{\Gamma}}$;
- 4) область определения каждого параметра $w \in \mathbf{w}$, гиперпараметра $h \in \mathbf{h}$ и метапараметра $\lambda \in \boldsymbol{\lambda}$ не является пустым и не является точкой;
- 5) для каждого значения гиперпараметров \mathbf{h} оптимальное решение нижней задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*$ определено однозначно при любых значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$;
- 6) область значений метапараметров $\lambda_{\text{likelihood}}^Q, \lambda_Q^{\text{prior}}, \boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}}, \lambda_L^{\text{prior}}$ включает отрезок от нуля до некоторого положительного числа;
- 7) существует значение метапараметров $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\text{likelihood}}^Q$, такое что

$$\max_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) < \max_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}) - \min_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}).$$

при $\boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = \mathbf{0}, \lambda_Q^{\text{prior}} = 0$.

Тогда задача (Q^*) является обобщающей на U .

Доказательство. Для доказательства теоремы требуется доказать критерии 1-7 из определения обобщающей задачи. Выполнение критериев 1 и 2 следует из условий задачи.

Докажем критерий 3. Пусть $\lambda_Q^{\text{prior}} = 0, \boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\text{likelihood}}^Q$ удовлетворяют седьмому условию теоремы. Возьмем в качестве K_1 следующее выражение:

$$K_1 = \max_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}).$$

Пусть $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}, Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_1$. Тогда

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) &= \lambda_Q^{\text{likelihood}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_1)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - \\ &- \lambda_Q^{\text{likelihood}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) + \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) - \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) > K_1. \end{aligned}$$

Отсюда следует выполнение критерия 3:

$$\lambda_Q^{\text{likelihood}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_1)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) - \lambda_Q^{\text{likelihood}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \Gamma) > 0.$$

Докажем критерий 4. Пусть $\lambda_Q^{\text{likelihood}} = 0, \boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Пусть

$$\begin{aligned} K_2 &= \max_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) + \max_{\mathbf{h}} \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - \\ &- \min_{\mathbf{h}, \boldsymbol{\theta}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) + \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_L^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) - \\ &- \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_L^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}). \end{aligned}$$

Пусть $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}$, $Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_1$. Рассмотрим разность параметрических сложностей двух векторов:

$$\begin{aligned}
C_p(\boldsymbol{\theta}_2) - C_p(\boldsymbol{\theta}_1) &= \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) + \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) \\
&\quad - \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) \geq \\
&\geq \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})) + \\
&\quad + D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) = \\
&\quad = Q(\mathbf{h}_2) - Q(\mathbf{h}_1) - \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \\
&\quad + \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) > \\
&\quad > K_2 - \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) \\
&\quad - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})).
\end{aligned}$$

Рассмотрим разность:

$$\begin{aligned}
&\min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) = \\
&= \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}_1) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) + \\
&\quad + \max_{\boldsymbol{\theta}} \left(\frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) \right) \geq \\
&\geq \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) + \\
&\quad + \max_{\boldsymbol{\theta}} \left(\min_{\boldsymbol{\theta}'} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}')} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) \right) \geq \\
&\geq \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) + \\
&\quad + \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) - \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})) \geq \\
&\geq \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) + \\
&\quad + \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}} \mathbb{E}_{q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) - \max_{\mathbf{h}} \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \Gamma|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})).
\end{aligned}$$

Складывая полученную оценку с $K_2 - \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda})$ получаем разность параметрических сложностей больше нуля.

Докажем критерий 5. Пусть $\lambda_Q^{\text{likelihood}} = \lambda_L^{\text{prior}} = \lambda_Q^{\text{prior}} > 0$, $\lambda_Q^{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда функции L и Q можно записать как:

$$L = Q \propto (\mathbb{E}_q p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}) - D_{KL}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}))),$$

что и требовалось доказать.

Докажем критерий 6. Пусть задан вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$, удовлетворяющий восьмому условию теоремы. Возьмем в качестве K_4 следующее выражение:

$$K_4 = 2 \frac{\max_{\mathbf{h}} Q - \min_{\mathbf{h}} Q}{\max_{\lambda_{\text{comb}}} Q}.$$

Пусть вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}'$ отличается от $\boldsymbol{\lambda}$ лишь метапараметром λ_{comb} . Для обоих векторов метапараметров нижняя задача оптимизации L одинакова, поэтому выполняется первое условие свойства. Без ограничения общности предположим, что $Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > 0$ при $\boldsymbol{\lambda}$. Положим распределение из \mathbf{P} имеющим то же распределение, что и априорное $\mathbf{P} = \{p'(\mathbf{\Gamma})\}, p(\mathbf{\Gamma}) \sim \text{GS}(\mathbf{s}', \lambda'_{\text{temp}})\}$.

Положим для $\boldsymbol{\lambda}$ параметр λ_{comb} равным нулю: $\lambda_{\text{comb}} = 0$. Положим для $\boldsymbol{\lambda}'$ параметр λ_{comb} равным максимальному значению: $\lambda_{\text{comb}} = \max \lambda'_{\text{comb}}$. Тогда при $\boldsymbol{\lambda}'$ неравенство

$$Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) < 0$$

по построению константы K_4 .

Докажем критерий 7. Достаточным условием непрерывности функций L , Q является непрерывность входящих в нее слагаемых. Т.к. априорные распределения задаются непрерывными функциями плотности, и функция плотности распределения структуры $\mathbf{\Gamma}$ ограничена на компакте, то дивергенция $D_{KL}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\gamma}))$ непрерывна по метапараметрам. Т.к. слагаемые функций оптимизации непрерывны, то непрерывна и сами функции оптимизации. \square

Метапараметрами данной задачи (Q^*) являются коэффициенты $\lambda_Q^{\text{prior}}, \lambda_L^{\text{prior}}$, отвечающие за регуляризацию верхней и нижней задачи оптимизации, коэффициент $\lambda_Q^{\text{likelihood}}$ отвечает за максимизацию правдоподобия, а также параметры распределений \mathbf{P} и вектор коэффициентов перед ними $\lambda_Q^{\text{struct}}$.

В предельном случае, когда температура λ_{temp} близка к нулю, а множество \mathbf{P} состоит из распределений, близких к дискретным, а соответствующим всем возможным структурам, калибровка $\lambda_Q^{\text{struct}}$ порождает последовательность задач оптимизаций, схожую с перебором структур. Рассмотрим следующий пример.

Пример 2. Рассмотрим вырожденный случай поведения функции Q , когда $\lambda_Q^{\text{likelihood}} = \lambda_Q^{\text{prior}} = 0$. Пусть модель использует один структурный параметр, в качестве априорного распределения на структуре задано распределение Gumbel-Softmax с $\lambda_{\text{temp}} = 1.0$. Пусть в качестве множества распределений \mathbf{P}

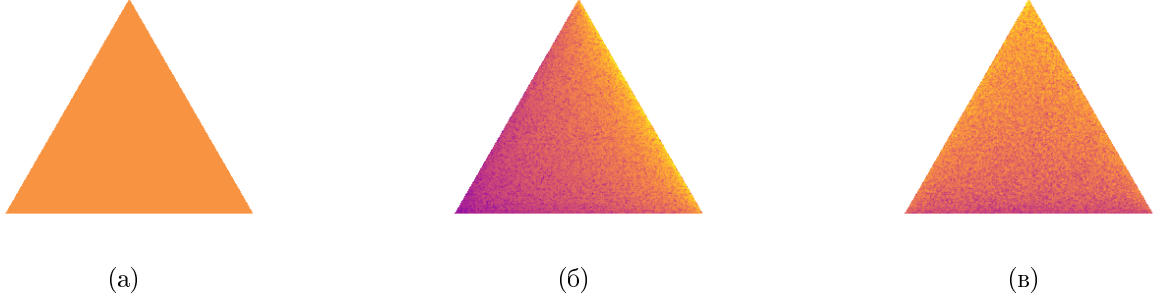


Рис. 1.5. Пример зависимости функции Q от гиперпараметра \mathbf{s} при различных значениях метапараметров $\lambda_Q^{\text{struct}}$. Темные точки на графике соответствуют наименее предпочтительным значениям гиперпараметра. а) $\lambda_Q^{\text{struct}} = [0, 0]$, б) $\lambda_Q^{\text{struct}} = [1, 0]$, в) $\lambda_Q^{\text{struct}} = [1, 1]$.

используется два распределения Gumbel-Softmax, сконцентрированных близко к вершинам симплекса:

$$\mathbf{P} = [\mathcal{GS}([0.95, 0.05, 0.05]^T, 1.0), \mathcal{GS}([0.95, 0.05, 0.05]^T, 1.0)].$$

Из определения распределения Gumbel-Softmax следует, что достаточно рассмотреть только значения параметра \mathbf{s} , находящиеся внутри симплекса. На рис. 1.5 изображены значения функции Q в зависимости от метапараметров

$$\lambda_Q^{\text{struct}}$$

и значений гиперпараметра \mathbf{s} распределения на структуре. Видно, что варьируя коэффициенты метапараметров получается последовательность оптимизаций, схожая с полным перебором структуры.

Обобщающая задача: переформулировка через градиент

Для вычисления приближенного значения функций Q и L предлагается использовать приближение методом Монте-Карло с порождением R реализаций величин \mathbf{w}, Γ :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_1 \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})} &\approx \sum_{r=1}^R \log p(\mathbf{y} | \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\alpha}_q \circ \hat{\epsilon}_r, \hat{\Gamma}_r, \mathbf{X}), \\ D_{\text{KL}}(q_{\Gamma}(\Gamma | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) | p(\Gamma | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) &\approx \sum_{r=1}^R \left(\log q_{\Gamma}(\hat{\Gamma}_r | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) - p(\hat{\Gamma}_r | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \right), \\ D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w} | \Gamma, \mathbf{h})) &= \sum_{(j,k) \in E} \sum_{l=1}^{K^{j,k}} D_{\text{KL}} \left(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}_l^{j,k} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \gamma_l^{j,k}) | p(\mathbf{w}_l^{j,k} | \gamma_l^{j,k}, \mathbf{h}) \right) \approx \end{aligned}$$

$$\approx - \sum_{(j,k) \in E} \sum_{l=1}^{K_{j,k}} \sum_{r=1}^R \frac{1}{2} \left((\hat{\gamma}_r^{j,k}[l])^{-1} \text{tr}((\mathbf{A}_l^{j,k})_q (\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1}) + (\boldsymbol{\mu}_l^{j,k})^\top \hat{\gamma}_r^{j,k}[l]^{-1} (\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1} \boldsymbol{\mu}_l^{j,k} - \right. \\ \left. - |\mathbf{w}_l^{j,k}| + \log \frac{|\hat{\gamma}_r^{j,k}[l]_r \mathbf{A}_l^{j,k}|}{|(\mathbf{A}_l^{j,k})_q|} \right),$$

где R — количество реализаций случайных величин, по котором вычисляется значения вариационной оценки обоснованности, $\hat{\epsilon}_r \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $\hat{\Gamma}_r = [\hat{\gamma}_r^{j,k}, (j, k) \in E]$ — реализация случайной величины, соответствующей структуре $\mathbf{\Gamma}$.

Для решения двухуровневой задачи предлагается использовать градиентные методы.

Теорема 6. Пусть T — оператор градиентного спуска. Пусть Q, L — локально выпуклы и непрерывны в некоторой области $U_W \times U_\Gamma \times U_H \times U_\lambda \subset \mathbb{W} \times \mathbb{\Gamma} \times \mathbb{H} \times \mathbb{A}$, при этом $U_H \times U_\lambda$ — компакт. Тогда решение задачи градиентной оптимизации

$$\mathbf{h}^* = T^\eta(Q, \mathbf{h}, T^\eta(L, \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{h}))$$

стремится к локальному минимуму $\mathbf{h}^* \in U$ исходной задачи оптимизации при $\eta \rightarrow \infty$, \mathbf{h}^* является непрерывной функцией по метопараметрам модели.

Доказательство. TODO □

1.4. Анализ обобщающей задачи

В данном разделе рассматриваются свойства предложенной задачи при различных значениях метопараметров, а также характер асимптотического поведения задач.

Теорема 7. Пусть $m \gg 0$, $\lambda_{\text{prior}}^L > 0$, $m \gg 0$, $\frac{m}{\lambda_{\text{prior}}^L} \in \mathbb{N}$. Тогда оптимизация функции

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) - \lambda_{\text{prior}}^L D_{KL}(q || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}))$$

эквивалентна оптимизации вариационной оценки обоснованности $\mathbb{E}_q \log p(\hat{\mathbf{y}} | \hat{\mathbf{X}}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) - L D_{KL}(q || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}))$ для произвольной случайной подвыборки $\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{X}}$ мощности $\frac{m}{\lambda_{\text{prior}}^L}$ из генеральной совокупности.

Доказательство. Рассмотрим величину $\frac{1}{m} L$:

$$\frac{1}{m} L = \frac{1}{m} \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\lambda_{\text{prior}}^L}{m} D_{KL}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})).$$

При $m \gg 0$ по усиленному закону больших чисел данная функция эквивалентна:

$$\frac{1}{m} L \approx \mathbb{E}_{y, \mathbf{x}} \mathbb{E}_q \log p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\lambda_{\text{prior}}^L}{m} D_{KL}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})).$$

Аналогично рассмотрим вариационную оценку обоснованности для произвольной выборки мощностью $m_0 = \frac{m}{\lambda_{\text{prior}}^L}$, усредненную на мощность выборки:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m_0} \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{m_0} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}) | p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) \approx \\ & \approx \mathbb{E}_{y, \mathbf{x}} \mathbb{E}_q \log p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{m_0} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}) | p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) = \\ & = \mathbb{E}_{y, \mathbf{x}} \mathbb{E}_q \log p(y | \mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\lambda_{\text{prior}}^L}{m} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \boldsymbol{\theta}) | p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})). \end{aligned}$$

Таким образом, задачи оптимизации совпадают, что и требовалось доказать. \square

Таким образом, для достаточно большого m и $\lambda_L^{\text{prior}} > 0, \lambda_L^{\text{prior}} \neq 1$ оптимизация параметров и гиперпараметров эквивалентна нахождению оценки обоснованности для выборки другой мощности: чем выше значение λ_L^{prior} , тем выше мощность выборки, для которой проводится оптимизация.

Следующие теоремы говорят о соответствии предлагаемой обобщающей задачи вероятностной модели. В частности, задача оптимизации параметров и гиперпараметров соответствует двухуровневому байесовскому выводу.

Теорема 8. Пусть задано параметрическое множество вариационных распределений: $q(\boldsymbol{\theta})$. Пусть $\lambda_{\text{likelihood}}^L = \lambda_{\text{prior}}^L = \lambda_{\text{prior}}^Q > 0, \boldsymbol{\lambda}_{\text{struct}}^Q = \mathbf{0}$. Тогда:

1. Задача оптимизации (Q^*) доставляет максимум апостериорной вероятности гиперпараметров с использованием вариационной оценки обоснованности:

$$\log \hat{p}(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) + \log p(\mathbf{h} | \mathbf{f}) \rightarrow \max_{\mathbf{h}}.$$

2. Вариационное распределение q приближает апостериорное распределение $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})$ наилучшим образом:

$$D_{\text{KL}}(q || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})) \rightarrow \min_{\boldsymbol{\theta}}.$$

Доказательство. TODO \square

Теорема 9. Пусть также распределение q декомпозируется на два независимых распределения для параметров \mathbf{w} и структуры $\mathbf{\Gamma}$ модели \mathbf{f} . Тогда вариационные распределения $q_{\mathbf{w}}, q_{\mathbf{\Gamma}}$ приближают апостериорные распределения $p(\mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}), p(\mathbf{w} | \mathbf{\Gamma}, \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})$ наилучшим образом:

$$D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{\Gamma}} || p(\mathbf{\Gamma} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})) \rightarrow \min, \quad D_{\text{KL}}(q_{\mathbf{w}} || p(\mathbf{w} | \mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \mathbf{f})) \rightarrow \min.$$

Доказательство. TODO \square

Следующие теоремы посвящены асимптотическим свойствам представленной обобщающей задачи.

Теорема 10. Пусть $\lambda_{\text{likelihood}}^Q = \lambda_{\text{prior}}^L > 0, \lambda_{\text{struct}}^Q = \mathbf{0}$. Тогда предел оптимизации

$$\lim_{\lambda_{\text{prior}}^Q \rightarrow \infty} \lim_{\eta \rightarrow \infty} T^\eta(Q, \mathbf{h}, T^\eta(L, \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{h}))$$

доставляет минимум параметрической сложности.

Доказательство. TODO □

Теорема 11. Пусть $\lambda_{\text{likelihood}}^L = 1, \lambda_{\text{struct}}^Q = \mathbf{0}$. Пусть $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ — результаты градиентной оптимизации при разных значениях гиперпараметров $\lambda_{\text{prior}}^{Q,1}, \lambda_{\text{prior}}^{Q,2}, \lambda_{\text{prior}}^{Q,1} < \lambda_{\text{prior}}^{Q,2}$, полученных при начальном значении вариационных параметров $\boldsymbol{\theta}_0$ и гиперпараметров \mathbf{h}_0 . Пусть $\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{h}_0$ принадлежат области U , в которой соответствующие функции L и Q являются локально-выпуклыми. Тогда:

$$C_p(\mathbf{f}_1) - C_p(\mathbf{f}_2) \geq \lambda_{\text{prior}}^L (\lambda_{\text{prior}}^L - \lambda_{\text{prior}}^{Q,1}) \sup_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h} \in U} |\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}}^2 D_{KL}(q|p) (\nabla_{\boldsymbol{\theta}}^2 L)^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} D_{KL}(q|p)|.$$

Доказательство. TODO □

TODO: выводы **Эксперимент: пример 1**

Эксперимент: пример 2