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 ее обоснованности. Показано, что данная функция оптимизирует ряд 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:

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

где $(\mathbf{A}_l^{j,k})^{-1}$ — диагональная матрица, $l \in \{1,\dots,K^{j,k}\}$, где $K^{j,k}$ — количество базовых функций для ребра $K^{j,k}$. 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 $\gamma_l^{j,k} \in (0,1)$.

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

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

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

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

где $\mathbf{s}^{j,k} \in (0,\infty)^{Kj,k}$ — гиперпараметр, отвечающий за смещенность плотности распределения относительно точек симплекса на $K^{j,k}$ вершинах, $\lambda_{\text{temp}} > 0$ —

метапараметр температуры, отвечающий за концентрацию плотности вблизи вершин симплекса или в центре симплекса.

Перечислим свойства, которыми обладает распределение Gumbel-Softmax:

1. Компонента l случайной величины $\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$ представима следующим образом:
$$\boldsymbol{\gamma}_l^{j,k} = \frac{\exp(\log s_l^{j,k} + g_l^{j,k})/\lambda_{\text{temp}}}{\sum_{l'=1}^{K^{j,k}} \exp(\log s_{l'}^{j,k} + g_{l'}^{j,k})/\lambda_{\text{temp}}},$$
где $g^{j,k} \sim -\log\bigl(-\log \mathcal{U}(0,1)^{K^{j,k}}\bigr)$.
2. Свойство округления: $p(\boldsymbol{\gamma}_{l_1} > \boldsymbol{\gamma}_{l_2}, l_1 \neq l_2 | \mathbf{s}^{j,k}, \lambda_{\text{temp}}) = \frac{s_l^{j,k}}{\sum_{l'} s_{l'}^{j,k}}$.
3. При устремлении температуры к нулю реализация $\hat{\boldsymbol{\gamma}}^{j,k}$ случайной величины концентрируется на вершинах симплекса:
$$p(\lim_{\lambda_{\text{temp}} \to 0} \hat{\gamma}_l^{j,k} = 1 | \mathbf{s}^{j,k}, \lambda_{\text{temp}}) = \frac{s_l}{\sum_{l'} s_{l'}^{j,k}}.$$
4. При устремлении температуры к бесконечности плотность распределения концентрируется в центре симплекса:
$$\lim_{\lambda_{\text{temp}} \to \infty} p(\boldsymbol{\gamma}^{j,k} | \mathbf{s}^{j,k}, \lambda_{\text{temp}}) = \begin{cases} \infty, \boldsymbol{\gamma}^{j,k} = \frac{1}{K^{j,k}}, l \in \{1, \dots, K^{j,k}\}, \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases} \tag{1.1}$$

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

Доказательство. Формула плотности с точностью до множителя записывается следующим образом :
$$p(\boldsymbol{\gamma}^{j,k} | \mathbf{s}^{j,k}, \lambda_{\text{temp}}) \propto \frac{(\lambda_{\text{temp}})^{K^{j,k}-1}}{\left(\sum_{l=1}^{K^{j,k}} s_l^{j,k} (\boldsymbol{\gamma}_l^{j,k})^{-\frac{K^{j,k}-1}{K}\lambda_{\text{temp}}} \prod_{l'=1}^{K^{j,k}} [l \neq l'] (\boldsymbol{\gamma}_l^{j,k})^{\frac{1}{K^{j,k}}\lambda_{\text{temp}}}\right)^{K^{j,k}}}. \tag{1.2}$$

Заметим, что числитель $(\lambda_{\text{temp}})^{K^{j,k}-1}$ имеет меньшую скорость сходимости, чем знаменатель, поэтому для вычисления предела достаточно проанализировать только знаменатель. Знаменатель под степенью $(-K^{j,k})$ представляется суммой слагаемых следующего вида:
$$\left(\frac{\prod_{l' \neq l} \gamma_{l'}^{\frac{1}{K^{j,k}}}}{\gamma_l^{\frac{K-1}{K^{j,k}}}}\right)^{\lambda_{\text{temp}}}. \tag{1.3}$$

Рассмотрим два случая: когда вектор $\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$ лежит не в центре симплекса, и когда $\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$ лежит в центре симплекса. Пусть хотя бы для одной компоненты l выполнено: $\boldsymbol{\gamma}_l^{j,k} \neq \frac{1}{K^{j,k}}$. Пусть l' соответствует индексу максимальной компоненты вектора $\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$:

$$l' = \underset{l \in \{1,\dots,K^{j,k}\}}{\arg\max}\ \boldsymbol{\gamma}_l^{j,k}.$$

Для $l = l'$ предел выражения (1.3) при $\lambda_{\text{temp}} \to \infty$ стремится к бесконечности. Для $l \neq l'$ предел выражения (1.3) при $\lambda_{\text{temp}} \to \infty$ стремится к нулю. Возводя сумму пределов в степень $(-K^{j,k})$ получаем предел плотности, равный нулю.

Рассмотрим второй случай. Пусть $\gamma_l^{j,k} = \frac{1}{K^{j,k}}$ для всех компонент вектора $\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$. Тогда выражение (1.2) с точностью до множителя упрощается до $(\lambda_{\text{temp}})^{K^{j,k}-1}$. Предел данного выражения стремится к бесконечности. Таким образом, предел плотности Gumbel-Softmax равен выражению (1.1), что и требовалось доказать.

□

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

Определение 1. Случайную величину ψ с распределеним q с параметрами $\boldsymbol{\theta}_\psi$ назовем репараметризованной через случайную величину ε, чье распределение не зависит от параметров $\boldsymbol{\theta}_\psi$, если:

$$\psi = g(\varepsilon, \boldsymbol{\theta}_\psi)$$

где g — некоторая непрерывная функция.

Идею репараметризации поясним на следующем примере.

Пример 1. Пусть структура $\boldsymbol{\Gamma}$ зафиксирована для модели $\mathbf{f}$. Рассмотрим математическое ожидание логарифма правдоподобия выборки модели по некоторому непрерывному распределению $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$:

$$\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \log\ p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) = \int_{\mathbf{w}} \log\ p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) d\mathbf{w}.$$

Продифференцируем данное выражение по параметрам $\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}$ вариационного распределения $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$, полагая что оно удовлетворяет необходимым условиям для переноса оператора дифференцирования под знак интеграла:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) = \int_{\mathbf{w}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) \nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) d\mathbf{w}.$$

Это выражение в общем виде не имеет аналитического решения. Пусть распределение $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ для параметров $\mathbf{w}$ подлежит репараметризации через случайную величину $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\mathbf{w} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}).$$

Тогда справедливо следующее выражение:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) = \nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \mathsf{E}_{\varepsilon} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{g}(\boldsymbol{\varepsilon}), \boldsymbol{\Gamma}) =$$

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

$$= \int_{\boldsymbol{\varepsilon}} \nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{g}(\boldsymbol{\varepsilon}), \boldsymbol{\Gamma}) p(\boldsymbol{\varepsilon}) d\boldsymbol{\varepsilon} = \mathsf{E}_{\boldsymbol{\varepsilon}} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{g}(\boldsymbol{\varepsilon}), \boldsymbol{\Gamma}).$$

Таким образом, распределение, позволяющее произвести репараметризацию, является более удобным для вычисления интегральных оценок вида $\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma})$, а также позволяет повысить точность приближенного вычисления значений таких функций [**?**]. Подробный анализ репараметризации для генеративных моделей глубокого обучения представлен в [**?**].

Пример распределения Gumbel-Softmax при различных параметрах представлен на Рис. 1.1. В качестве альтернативы для априорного распределения структуры выступает распределение Дирихле. В качестве предельного случая, когда все структуры $\boldsymbol{\Gamma} \in \mathbb{\Gamma}$ равнозначны, выступает равномерное распределение. Выбор в качестве распределения стрктуры произведения распределений Gumbel-Softmax обоснован выбором этого 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. Варьированием метапараметров 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 $\lim_{\lambda_1, \lambda_2 \to 0} \text{inv-gamma}(\lambda_1, \lambda_2)$.

Таким образом, предлагаемая вероятностная модель содержит следующие компоненты:

1. Параметры $\mathbf{w}$ модели, распределенные нормально.

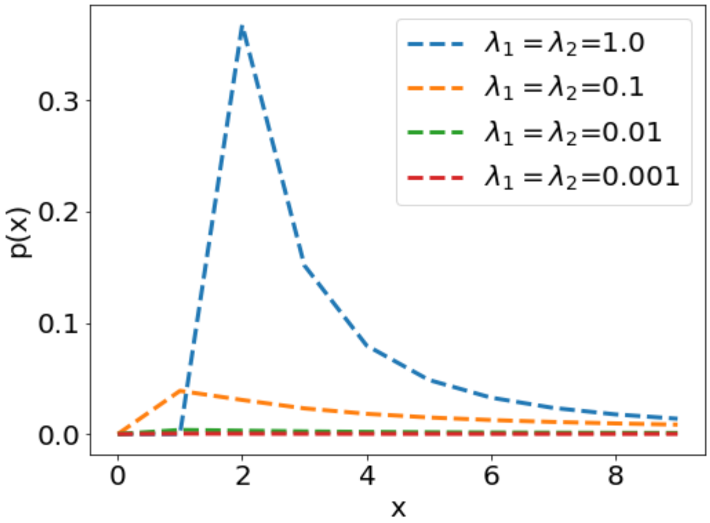


Рис. 1.2. Графики обратных гамма распределений для различных значений метапараметров.

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

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

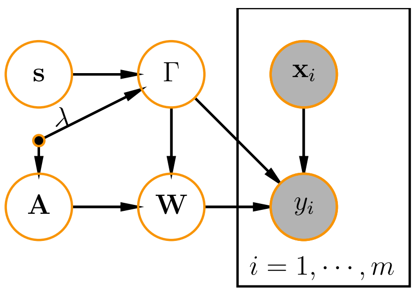


Рис. 1.3. TODO: сделать лябмду красивой (снова). График предлагаемой вероятностной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

1.2. Вариационная оценка обоснованности вероятностной модели

Задача выбора структуры $\mathbf{\Gamma}$ и параметров $\mathbf{w}$ заключается в получении оценок на апостериорное распределение $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$. Оно зависит от гиперпараметров $\mathbf{h}$. В качестве критерия выбора гиперпараметров предлагается использовать апостериорную вероятность гиперпараметров:

$$p(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{h}\in\mathbb{H}}. \tag{1.4}$$

Структура модели и параметры модели выбираются на основе полученных значений гиперпараметров:

$$\mathbf{w}^*, \mathbf{\Gamma}^* = \operatorname*{arg\,max}_{\mathbf{w}\in\mathbb{W}, \mathbf{\Gamma}\in\mathbb{\Gamma}} p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}^*, \boldsymbol{\lambda}),$$

где $\mathbf{h}^*$ — решение задачи оптимизации (1.4).

Для вычисления обоснованности модели

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

из (1.4) предлагается использовать нижнюю вариационную оценку обоснованности.

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

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

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

Тогда справедлива следующая оценка:

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \geq \tag{1.5}$$

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})||p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) -$$
$$- D_{\text{KL}}\big(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})||p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big),$$

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

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

Доказательство. Перепишем обоснованность:

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

$$= \log \iint_{\boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{w}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \frac{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\Gamma} d\mathbf{w} =$$

$$= \log \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})}{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}.$$

Используя неравенство Йенсена получим

$$\log \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})}{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \geq \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})}{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} =$$

$$-\mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

Декомпозируем распределение q по свойству условной дивергенции:

$$D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) =$$

$$= D_{\mathrm{KL}}\big(q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}) || p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) + \mathsf{E}_{\boldsymbol{\Gamma} \sim q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})} \mathsf{E}_{\mathbf{w} \sim q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \log \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \right). \quad (1.6)$$

□

В качестве вариационного распределения $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ предлагается использовать нормальное распределение, не зависящее от структуры модели $\boldsymbol{\Gamma}$:

$$q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_q, \mathbf{A}_q),$$

где $\mathbf{A}_q$ — диагональная матрица с диагональю $\boldsymbol{\alpha}_q$.

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

$$\boldsymbol{\theta} = [\boldsymbol{\mu}_q, \boldsymbol{\alpha}_q, \mathbf{s}_q, \theta_{\text{temp}}].$$

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 $C_p(\boldsymbol{\theta}|U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\lambda})$ модели с вариационными параметрами $\boldsymbol{\theta}$ на компакте $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ назовем минимальную дивергенцию между вариационным и априорным распределением:

$$C_p(\boldsymbol{\theta}|U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\lambda}) = \min_{\mathbf{h} \in U_{\mathbf{h}}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

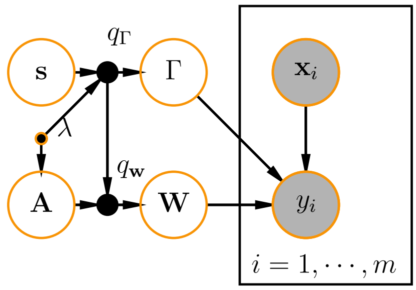


Рис. 1.4. График предлагаемой вероятностной вариационной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Вариационное распределение обозначено черным кругом. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

Параметрическая сложность модели соответствует минимальной по $\mathbf{h} \in U_\mathbf{h}$ 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 [**?**]:

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

где параметру модели w соответствуют вариационные параметры μ_q, α_q: $q_\mathbf{w}(w|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_\mathbf{w}) \sim \mathcal{N}(\mu_q, \alpha_q)$.

Обобщим понятие относительной вариационной плотности на случай произвольных непрерывных распределений.

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

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

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

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

Сформулируем и докажем теорему о связи относительной плотности и параметрической сложности модели. Предварительно докажем две вспомогательные леммы.

Лемма 1. Пусть

1. Вариационное распределение $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ и априорное распределение $p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ являются абсолютно непрерывными и унимодальными на $U_{\mathbf{h}}, U_{\boldsymbol{\theta}}$. Их мода и матожидание совпадают:
$$\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w};$$
$$\text{mode } q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) = \mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w}.$$
2. Заданы компактные множества $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}, U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \subset \Theta_{\mathbf{w}}, U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}} \subset \Theta_{\mathbf{\Gamma}}$.
3. Мода априорного распределения $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ не зависит от гиперпараметров $\mathbf{h}$ на $U_{\mathbf{h}}$ и структуры $\mathbf{\Gamma}$ на $U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}}$:
$$\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}_1, \mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}) = \text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}_1, \mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{m}$$
для любых $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}, \mathbf{\Gamma}_1, \mathbf{\Gamma}_2 \in U_{\mathbf{\Gamma}}$.
4. Параметры модели $\mathbf{w}$ имеют конечные вторые моменты по распределениям:
$$\int_{\mathbf{\Gamma}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) d\mathbf{\Gamma}, \quad \int_{\mathbf{\Gamma}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) d\mathbf{\Gamma}.$$
5. Вариационное распределение $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ является липшецевым по $\mathbf{w}$.
6. Значение $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ не равно нулю при $\boldsymbol{\theta} \in U_{\boldsymbol{\theta}}$.

Тогда
$$\left|\mathsf{E}_{q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})} \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - 1\right| \leq$$
$$\leq \frac{C_l}{\min_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}} \in U_{\boldsymbol{\theta}}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \iint_{\mathbf{\Gamma}, \mathbf{w}} |\mathbf{w}| |q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma},$$
где C_l — максимальная константа Липшица для $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ на $U_{\boldsymbol{\theta}}$.

Доказательство. Для произвольного $\boldsymbol{\theta} = [\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}]$ рассмотрим выражение:
$$\left|\mathsf{E}_{q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})} \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - 1\right| =$$
$$\left|\int_{\mathbf{\Gamma}} \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\right) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{\Gamma} - 1\right| =$$
представляя единицу как дробь с равными знаменателем и числителем
$$= \left|\int_{\mathbf{\Gamma}} \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} - \frac{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\text{mode } p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\right) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{\Gamma}\right| =$$
заменяя моду на матожидание (по условию теоремы)
$$= \left|\int_{\mathbf{\Gamma}} \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} - \frac{q_{\mathbf{w}}(\mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\right) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{\Gamma}\right| \leq$$

занося модуль под знак интеграла

$$\leq \int_{\mathbf{\Gamma}} \left| \frac{q_{\mathbf{w}}(\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w})|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} - \frac{q_{\mathbf{w}}(\mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})d\mathbf{\Gamma} \right| \leq$$

используя липшецевость функции $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$

$$\frac{C_l}{\min_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \int_{\mathbf{\Gamma}} |\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w} - \mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})d\mathbf{\Gamma} \leq$$

расписывая матожидание через интеграл

$$\leq \frac{C_l}{\min_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})d\mathbf{w}d\mathbf{\Gamma},$$

□

Лемма 2. Пусть

1. Вариационное распределение $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ и априорное распределение $p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ являются абсолютно непрерывными.
2. Решение задачи

$$\mathbf{h}^* = \arg\min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) \qquad (1.7)$$

   единственно для любого $\boldsymbol{\theta} \in U_{\boldsymbol{\theta}}$.
3. Задана бесконечная последовательность векторов вариационных параметров $\boldsymbol{\theta}[1],\boldsymbol{\theta}[2],\dots,\boldsymbol{\theta}[i],\dots \in U_{\boldsymbol{\theta}}$, такая что $\lim_{i\to\infty} C_p(\boldsymbol{\theta}[i]|U_{\mathbf{h}},\boldsymbol{\lambda}) = 0$. Тогда следующее выражение стремится к нулю:

$$\iint_{\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}} |p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h}[i],\boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i])d\mathbf{\Gamma}d\mathbf{w},$$

   где $\boldsymbol{\theta}[i] = [\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i],\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]]$, $\mathbf{h}[i]$ — решение задачи (1.7) для $\boldsymbol{\theta}[i]$.

Доказательство. Воспользуемся неравенством Пинскера:

$$||F_q((\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})_i) - F_p(\mathbf{h}_i)||_{\mathrm{TV}} \leq \sqrt{\frac{1}{2}\widehat{\mathrm{KL}}\left(p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})\right)},$$

где $||\cdot||_{\mathrm{TV}}$ — расстояние по вариации, F_q, F_p — функции распределения $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}), p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$, $\widehat{\mathrm{KL}}\left(p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})\right)$ — дивергенция при фиксированной структуре $\mathbf{\Gamma}$:

$$\int_{\mathbf{w}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) \log\left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\right) d\mathbf{w}.$$

По условию дивергенция (1.6) стремится к нулю при $i \to \infty$. Она декомпозируется на два неотрицательных слагаемых, поэтому оба они стремятся к нулю. Рассмотрим второе слагаемое:

$$0 = \lim_{i \to \infty} \mathsf{E}_{\mathbf{\Gamma} \sim q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i])} \mathsf{E}_{\mathbf{w} \sim q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])} \log \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])}{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda})} \right) =$$

расписывая матожидание как интеграл

$$\lim_{i \to \infty} \left| \int_{\mathbf{\Gamma}} \int_{\mathbf{w}} \log \left(\frac{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])}{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda})} \right) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} \right| \geq$$

по неравенству Пинскера

$$\geq \lim_{i \to \infty} \int_{\mathbf{\Gamma}} ||F_q(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - F_p(\mathbf{h}_i)||^2_{\mathrm{TV}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma} \geq 0.$$

Отсюда

$$\lim_{i \to \infty} \int_{\mathbf{\Gamma}} ||F_q(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - F_p(\mathbf{h}_i)||^2_{\mathrm{TV}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma} = 0.$$

По неравенству Йенсена

$$0 \leq \left(\int_{\mathbf{\Gamma}} ||F_q(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - F_p(\mathbf{h}_i)||_{\mathrm{TV}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma} \right)^2 \leq$$

$$\int_{\mathbf{\Gamma}} ||F_q(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - F_p(\mathbf{h}_i)||^2_{\mathrm{TV}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma}.$$

Тогда по свойству степени предела

$$\lim_{i \to \infty} \int_{\mathbf{\Gamma}} ||F_q(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - F_p(\mathbf{h}_i)||_{\mathrm{TV}} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma} = 0.$$

По теореме Шеффе данное выражение можно переписать как:

$$\lim_{i \to \infty} \frac{1}{2} \iint_{\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}} |p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{\Gamma} d\mathbf{w} = 0, \qquad (1.8)$$

что и требовалось доказать. □

Теорема 2. Пусть выполнены условия Леммы 1 и Леммы 2. Тогда следующее выражение стремится к единице:

$$\lim_{i \to \infty} \mathsf{E}_{q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i])} \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i], \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda}) = 1.$$

Доказательство. По Лемме 2

$$\mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\rho(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) \leq$$

$$\leq \frac{C_l}{\min_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{m}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} \iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma}.$$

Докажем что величина

$$\iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma}$$

стремится к нулю. Определим случайную величину $\boldsymbol{\nu}(t), t \geq 0$ следующим образом:

$$\boldsymbol{\nu}(t) = \mathbf{max}(-t\cdot\mathbf{1}, \mathbf{min}(t\cdot\mathbf{1},\mathbf{w})).$$

Данная величина совпадает с $\mathbf{w}$ при $|\mathbf{w}| < t$ и принимает значение t или $-t$ при $|\mathbf{w}| \geq t$. Тогда для любого $t > 0$ справедливо:

$$\iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma} \leq$$

по неравенству треугольника и используя выражение $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \boldsymbol{\nu}(t) - \boldsymbol{\nu}(t)$

$$\leq \iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)||p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma}+ \tag{1.9}$$

$$+\iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\boldsymbol{\nu}(t)||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma}.$$

Рассмотрим первое слагаемое суммы (1.9). Т.к. вторые моменты $\mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w}^2, \mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}^2$ конечны, то случайная величина $\mathbf{w}$ равномерно интегрируема как при маргинальном распределении $\int_{\boldsymbol{\Gamma}} q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})d\boldsymbol{\Gamma}$, так и при маргинальном распределении $\int_{\boldsymbol{\Gamma}} q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})d\boldsymbol{\Gamma}$. По определению равномерной интегрируемости для $\mathbf{w}$ для любого числа ε существует число t_0, такое что для любого $t \geq t_0$, любого $\mathbf{h} \in U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\theta} \in U_{\boldsymbol{\theta}}$, справедливо выражение:

$$\mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}|\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)| = \iint_{\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}} |\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)|q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma} \leq \varepsilon,$$

$$\mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}|\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)| = \iint_{\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}} |\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)|p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma} \leq \varepsilon.$$

Тогда

$$\iint_{\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}-\boldsymbol{\nu}(t)||p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|d\mathbf{w}d\boldsymbol{\Gamma} \leq$$

так как модуль разностей меньше или равен суммы модулей

$$\iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)| p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) + \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)| q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) d\mathbf{\Gamma} d\mathbf{w} < 2\varepsilon$$

для любого $t \geq t_0$. Обозначим за $\varepsilon(t)$ минимальное число ε, удовлетворяющее предыдущим неравенствам. Тогда

$$\iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)||p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})| d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} \leq 2\varepsilon(t),$$

где $\lim_{t\to\infty} \varepsilon(t) = 0$.

Рассмотрим второе слагаемое.

$$\iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\boldsymbol{\nu}(t)||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})| d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} \leq$$

по ограниченности функции $\boldsymbol{\nu}(t)$

$$\leq t \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma}.$$

Переходя к пределу в (1.9) получим:

$$\lim_{i\to\infty} \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}_i, \boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} =$$

добавим предел по t*, от которого не зависит данное выражение*

$$= \lim_{t\to\infty} \lim_{i\to\infty} \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w}||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} \leq$$

из выше написанных неравенств

$$\lim_{t\to\infty} \lim_{i\to\infty} \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)||p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i])| d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} +$$

$$+ \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |\boldsymbol{\nu}(t)||q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}[i], \boldsymbol{\lambda})| q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) d\mathbf{w} d\mathbf{\Gamma} \leq$$

$$\lim_{t\to\infty} 2\varepsilon(t) + \lim_{t\to\infty} \lim_{i\to\infty} t \iint_{\mathbf{\Gamma},\mathbf{w}} |q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}[i]) - p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}_i, \boldsymbol{\lambda}) q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}[i]) = 0.$$

Последнее равенство следует из Леммы 2. Таким образом выражение $\left|\int_{\mathbf{\Gamma}} \frac{q_{\mathbf{w}}(\mathrm{mode} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}{q_{\mathbf{w}}(\mathrm{mode} p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})} q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) d\mathbf{\Gamma}\right|$ стремится к единице, что и требовалось доказать. $\square$

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

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

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

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

При этом сама последовательность распределений $\boldsymbol{\theta}_i$ 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, испольюзующих вариационное распределение $q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ для аппроксимации неизвестного апостериорного распределения параметров $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$.

Рассмотрим основные статистические критерии выбора вероятностных моделей.

1. Критерий максимального правдоподобия:

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \to \max_{\mathbf{w}\in U_{\mathbf{w}}, \mathbf{\Gamma}\in U_{\mathbf{\Gamma}}}.$$

   Для использования данного критерия в качестве задачи выбора модели предлагается следующее обобщение:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log\ p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}). \qquad (1.10)$$

   Данное обобщение (1.10) эквивалентно критерию правдоподобия при выборе в качестве $q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ 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 $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}},$$

$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \to \max_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}},$$

2. Метод максимальной апостериорной вероятности.

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma})p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{w}\in U_{\mathbf{w}}, \mathbf{\Gamma}\in U_{\mathbf{\Gamma}}}.$$

Аналогично предыдущему методу сформулируем вариационное обобщение данной задачи:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \tag{1.11}$$

$$= \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\bigl(\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) + \log p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr).$$

Т.к. в рамках данной задачи (1.11) 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. Полный перебор структуры:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) = p'|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \tag{1.12}$$

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:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - \tag{1.13}$$

$$-|\{w : D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr) < \lambda_{\text{prune}}\}|,$$

где

$$\mathbf{h} = \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{h}'\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr), \tag{1.14}$$

λ_{prune} — метапараметр алгоритма, $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ — область определения задачи по гиперпараметрам. Предложенное обобщение (1.13) применимо только в случае, если выражение (1.14) определено однозначно, т.е. существует единственный вектор гиперпараметров $\mathbf{h} \in U_{\mathbf{h}}$, доставляющий минимум дивергенции $D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr)$.

5. Информационный критерий Шварца:

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

Переформулируем данный критерий аналогично критерию AIC:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \tag{1.15}$$

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - \log m|\{w : D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) < \lambda_{\mathrm{prune}}\}|,$$

метапараметр λ_{prune} определен аналогично (1.14).

6. Метод вариационной оценки обоснованности:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \tag{1.16}$$

$$= \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}},$$

$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) =$$

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}},$$

В рамках данной задачи функции $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ и $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ совпадают, все гиперпараметры $\mathbf{h}$ подлежат оптимизации.

7. Валидация на отложенной выборке:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}_{\mathrm{train}}|\mathbf{X}_{\mathrm{train}}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) + p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}},$$

$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{X}_{\mathrm{test}}|\mathbf{y}_{\mathrm{test}}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) \to \max_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}}, \tag{1.17}$$

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

Каждый из рассмотренных критериев 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.

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

Определение 4. Двухуровневую задачу оптимизации будем называть *обобщающей* на компакте

$$U = U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}} \times U_{\mathbf{h}} \times U_{\boldsymbol{\lambda}} \subset \mathbb{O}_{\mathbf{w}} \times \mathbb{O}_{\boldsymbol{\Gamma}} \times \mathbb{H} \times \lambda,$$

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

$$\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}) = \arg\max_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{O}} L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$$

определено однозначно при любых значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$.

3. Критерий максимизации правдоподобия выборки: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$ и $K_1 > 0$,

$$K_1 < \max_{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}} Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2), \boldsymbol{\lambda}),$$

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

$$Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2), \boldsymbol{\lambda}) > K_1,$$

выполняется неравенство

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1))} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) > \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2))} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}).$$

4. Критерий минимизации параметрической сложности: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$ и $K_2 > 0$,

$$K_2 < \max_{\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}} Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2), \boldsymbol{\lambda}),$$

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

$$Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1), \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2), \boldsymbol{\lambda}) > K_2,$$

параметрическая сложность первой модели меньше, чем второй:

$$C_p(\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)|U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\lambda}) < C_p(\boldsymbol{\theta}^*(h_2)|U_{\mathbf{h}}, \boldsymbol{\lambda}).$$

5. Критерий приближения оценки обоснованности: существует значение гиперпараметров $\boldsymbol{\lambda}$, такое что значение функций потерь $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ и валидации $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})$ пропорционален вариационной оценки обоснованности модели:
$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}),\boldsymbol{\lambda}) \propto$$
$$\propto \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}'(\mathbf{h}))} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}'(\mathbf{h}))||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$$
для всех $\mathbf{h} \in U_{\mathbf{h}}$, где в качестве гиперпараметров $\mathbf{h}$ рассматриваются все гиперпараметры модели: $\mathbf{h} = [\mathbf{A},\mathbf{s}]$, где
$$\boldsymbol{\theta}'(\mathbf{h}) = \operatorname*{arg\,max}_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\mathbf{h}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big).$$
6. Критерий перебора оптимальных структур: существует константа $K_3 > 0$, такая что существует хотя бы одна пара гиперпараметров $\mathbf{h}_1,\mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}$, удовлетворяющая неравенствам:
$$D_{\text{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})||p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\lambda})\big) > K_3, D_{\text{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\lambda})||p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})\big) > K_3$$
и набор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$, такие что для локальных оптимумов $\mathbf{h}_1,\mathbf{h}_2$ задачи оптимизации $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})$, полученных при метапараметрах $\boldsymbol{\lambda}$ и удовлетворяющих неравенствам
$$D_{\text{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})||p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\lambda})\big) > K_3, D_{\text{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\lambda})||p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})\big) > K_3,$$
$$Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) > Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}),$$
существует значение метапараметров $\boldsymbol{\lambda}' \neq \boldsymbol{\lambda}$, такие что
   (a) соответствие между вариационными параметрами $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1),\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2)$ сохраняется при $\boldsymbol{\lambda}'$,
   (b) выполняется неравенство $Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) < Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})$ при $\boldsymbol{\lambda}'$.
7. Критерий нерперывности: функции $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ и $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})$ непрерывны по метапараметрам $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$.

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. 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 $p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ значимо высока. При этом соответствующие вариационные распределения $q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ могут оказаться достаточно близки, несмотря на значимые различия априорных распределений. Поэтому возможным дополнением этого критерия был бы критерий, позволяющий переходить от структуры к структуре, если соответствующие распределения $q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})$ различаются значимо. 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 (1.10),(1.11),(1.12),(1.13),(1.15),(1.17) не являются обобщающими.

Доказательство. Задачи (1.10),(1.11),(1.12),(1.13),(1.15) не имеют гиперпараметров $\mathbf{h}$, подлежащих оптимизации, поэтому не могут приближать вариационную оценку.

При использовании валидации на отложенной выборки (1.17) в функцию валидации $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ не входит ни один метапараметр, поэтому критерий перебора структур 6 для нее также не выполняется.

□

Теорема 4. Пусть $q_{\mathbf{\Gamma}}$ — абсолютно непрерывное распределение с дифференцируемой плотностью, такой что:

1. Градиент плотности $\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}} q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})$ является нулевым не более чем счетное количество раз.
2. Выражение $\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}} q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})\log p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ ограничено на $U_{\boldsymbol{\theta}}$ некоторой случайной величиной с конечным первым моментом.

Тогда задача (1.16) не является обобщающей.

Доказательство. Пусть выполнены условия критерия 6 о переборе структур, и $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ — локальные оптимумы функции $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ при метапараметрах $\boldsymbol{\lambda}$. По условию критерия соответствтие $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)$ и $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2)$ должны сохраняться, т.е. для некоторого $\boldsymbol{\lambda}'$ решение нижней задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)$ должно совпадать с решением $\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)$ при метапараметрах $\boldsymbol{\lambda}$. Тогда

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)} \log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})) =$$

$$= \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)} \log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) - \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}')).$$

Сокращая равные слагаемые в равенстве получим:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda})) = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}')),$$

Из второго условия теоремы следует, что по теореме Лебега о мажорируемой сходимости осуществим переход дифференцирования под знак интеграла:

$$\int_{\mathbf{\Gamma} \in \mathbb{\Gamma}} \nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\Gamma}} q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)(\log\, p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}) - \log\, p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}'))d\mathbf{\Gamma} = 0.$$

Т.к. выражение $\nabla_{\boldsymbol{\theta}_{\Gamma}} q(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)$ принимает нулевое значение в счетном количестве точек, то выражение $\log\, p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}) - \log\, p(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}')$ равно нулю почти всюду, что означает что метапараметр температуры λ_{temp} равен при разных значениях метапараметров:

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

Таким образом, метапараметры $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}'$ 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 $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ при гиперпараметрах, отличающихся только параметрами распределения структуры, поэтому значение функции Q для них будет неизменно при любых значениях λ_1, λ_2. Приходим к противоречию: значение $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ не меняется при изменении метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$.

$\square$

В качестве обобщающей задачи оптимизации предлагается оптимизационную задачу следующего вида:

$$\mathbf{h}^* = \arg\max_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \tag{1.18}$$

$$= \lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) -$$

$$-\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr) -$$

$$- \sum_{p', \lambda \in \mathbf{P}, \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}} \lambda D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*)||p'\bigr) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}),$$

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \tag{L^*}$$

$$= \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr),$$

где $\mathbf{P}$ — непустое множество распределений на структуре $\boldsymbol{\Gamma}$, $\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}}, \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}, \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$ — некоторые числа. Множество распределений $\mathbf{P}$ отвечает за перебор структур $\boldsymbol{\Gamma}$ в процессе оптимизации модели. Более подробное объяснение данного множества дано ниже.

Теорема 5. Пусть:

1) Задано непустое множество непрерывных по параметрам распределений на структуре $\mathbf{P}$, чьи плотности не принимают нулевое значение, где хотя бы одно распределение $p_1 \in \mathbf{H}$ является Gumbel-Softmax распределением и для любого значения $\mathbf{s} \in U_{\mathbf{h}}, \lambda_{\text{temp}} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$ существует значение параметров распределения p_1, такое что $p_1 = p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$.

2) Вариационное распределение $q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ является абсолютно непрерывным, плотность которого непрерывна по метапараметрам $\boldsymbol{\lambda}$ и не принимает нулевое значение.
3) Задан компакт $U = U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{w}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{\Gamma}} \times U_\mathbf{h} \times U_{\boldsymbol{\lambda}}$, где параметры распределений $\mathbf{P} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$.
4) Область определения каждого параметра $w \in \mathbf{w}$, гиперпараметра $h \in \mathbf{h}$ и метапараметра $\lambda \in \boldsymbol{\lambda}$ не является является пустым и не является точкой.
5) Для каждого значения гиперпараметров $\mathbf{h} \in U_\mathbf{h}$ оптимальное решение нижней задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*$ определено однозначно на $U_{\boldsymbol{\theta}} = U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{w}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{\Gamma}}$ при любых значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$.
6) Область значений метапараметров $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}}, \lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}}, \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}, \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$ включает отрезок от нуля до единицы.
7) Существует значение метапараметров $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0, \lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} > 0 \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$, такое что

$$\max_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) < \max_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$$

при $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = \mathbf{0}, \lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} = 0$.
8) Существует значение метапараметров $\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} > 0, \lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} > 0, \lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0, \lambda_{\text{temp}} > 0 \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$, такое что

$$\max_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} \frac{1}{\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} \frac{1}{\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) +$$

$$+ \max_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) -$$

$$\min_{\mathbf{h}\in U_\mathbf{h}, \boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) + \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{1}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) -$$

$$- \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{1}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) <$$

$$< \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) -$$

$$- \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{h}\in U_\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big)$$

при $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = \mathbf{0}, \lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} = 0$.
9) Существуют значения метапараметров $\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} > 0, \lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} > 0, \lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0, \lambda_{\text{temp}} > 0 \in U_{\boldsymbol{\lambda}}$, такие что существуют гиперпараметры $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_\mathbf{h}$:

$$D_{\text{KL}}\big(p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big) <$$

$$< \frac{\max_\mathbf{h} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - \min_\mathbf{h} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})}{\max_{\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}}},$$

$$D_{\mathrm{KL}}\big(p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\lambda})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})\big) <$$
$$< \frac{\max_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})}{\max_{\boldsymbol{\lambda}_{\text{struct}}^{\text{Q}}}}.$$

при $\boldsymbol{\lambda}_{\text{struct}}^{\text{Q}} = \mathbf{0}$. TODO - как написать?
Тогда задача (1.18) является обобщающей на U.

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

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

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

Пусть $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}$ — гиперпараметры, удовлетворяющие условию третьего критерия:

$$Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) > K_1$$

. Тогда

$$Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1))} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) -$$

$$-\lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2))} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) + \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) - \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) > K_1.$$

Отсюда следует выполнение критерия 3:

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

Т.к. $\lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}} > 0$:

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

Докажем критерий 4. Пусть $\boldsymbol{\lambda}$ удовлетворяют восьмому условию теоремы и $\lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}} = 0, \boldsymbol{\lambda}_{\text{struct}}^{\text{Q}} = \mathbf{0}$. Пусть

$$K_2 = \max_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) +$$

$$+ \max_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) -$$

$$\min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}},\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) + \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) -$$

$$\min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}).$$

Пусть $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}, Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) > K_2$. Рассмотрим разность параметрических сложностей двух векторов:

$$C_p(\boldsymbol{\theta}_2) - C_p(\boldsymbol{\theta}_1) = \min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) -$$

$$-\min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) \geq$$

оценим снизу, а также добавим и вычтем $D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big)$

$$\geq \min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})\big) +$$

$$+ D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big) =$$

сведем выражение до $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$

$$= Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) +$$

$$+ \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big) >$$

воспользуемся неравенством $Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) > K_2$

$$> K_2 - \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{Q}}} \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big)$$

$$-D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

Рассмотрим разность:

$$\min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda})\big) =$$

т.к. $\boldsymbol{\theta}_2$ *— решение нижней задачи оптимизации:*

$$\min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) +$$

$$\max_{\boldsymbol{\theta}}\big(\frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big)\big) \geq$$

получим оценку снизу:

$$\geq \min_{\mathbf{h}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) +$$

$$\max_{\boldsymbol{\theta}} \left(\min_{\boldsymbol{\theta}'} \frac{1}{\lambda_{\text{prior}}^{\text{L}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}')} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) \right) \geq$$

оценим первое слагаемое

$$\geq \min_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma})+$$

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{h}_2,\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) \geq$$

оценим последнее слагаемое

$$\geq \min_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) - \max_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma})$$

$$+ \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - \max_{\mathbf{h}}\min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big).$$

Складывая полученную оценку с $K_2 - \log \frac{1}{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}} p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \log \frac{1}{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}} p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda})$ получаем разность параметрических сложностей больше нуля, что и требовалось доказать.

Докажем критерий 5. Пусть $\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}} = \lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}} = \lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} = 1$, $\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда функции $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ и $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})$ можно записать как:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big),$$

$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big)+$$
$$+\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}).$$

Двухуровневая задача оптимизации совпадает с оптимизацией вариационной оценки обоснованности, что и требовалось доказать.

Докажем критерий 6. Пусть задан вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$, удовлетворяющий девятому условию теоремы и $\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}} = \mathbf{0}$. Пусть заданы векторы гиперпараметров $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$, такие что $Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) > 0$. Возьмем в качестве K_4 следующее выражение:

$$K_4 = \frac{\max_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda})}{\max_{\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}}}}.$$

Пусть вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}'$ отличается от $\boldsymbol{\lambda}$ лишь метапараметром $\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}}$. Для обоих векторов метапараметров нижняя задача оптимизации $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ совпадает, поэтому выполняется первое условие критерия.

По условию теоремы во множество $\mathbf{P}$ входит хотя бы одно распределение Gumbel-Softmax:

$$p_1 \sim \mathcal{GS}, p \in \mathbf{P}.$$

Положим для $\boldsymbol{\lambda}'$ метапараметр перед данным распределением $\lambda^{Q}_{\text{struct}} \in \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$ равным максимальному значению. Положим также значение параметров данного распределения равным параметрам распределения $p(\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$:

$$p_1 = p(\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}).$$

Для остальных распределений $p' \in \mathbf{P}$ положим коэффициент $\lambda^{Q}_{\text{struct}} \in \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$ равным нулю. Тогда справедливо следующее неравенство:

$$Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}') - Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}') =$$

$$= Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) + \max_{\lambda^{Q}_{\text{struct}}} \lambda^{Q}_{\text{struct}} D_{\text{KL}}\big(p(\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})||p(\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) =$$

$$= Q(\mathbf{h}_2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_1|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) + \max_{\lambda^{Q}_{\text{struct}}} \lambda^{Q}_{\text{struct}} K_4 > 0.$$

что и требовалось доказать.

Докажем критерий 7. Достаточным условием непрерывности функций $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$, $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ является непрерывность входящих в нее слагаемых.

Слагаемое $\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma})$ не зависит от метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$. Слагаемое $\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$ непрерывно по метапараметрам по свойству обратного гамма-распределения.

Достаточным условием непрерывности функций вида $D_{\text{KL}}\big(p_1||p_2\big)$ является непрерывность по метапараметрам функций $p_1(\log p_1 - \log p_2)$ почти всюду и ограниченность интегрируемой функцией. Априорные распределения задаются нерперывными функциями плотности $p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}), p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$, не принимающими нулевое значение, и являющимися непрерывными по метапараметрам. Функция $q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ принимает нулевое значение лишь в конечном количество точек, поэтому функция $q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})(\log q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) - \log p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}))$ почти всюду непрерывна по метапараметрам. Она ограничена на компакте $U_{\boldsymbol{\lambda}}$, поэтому слагаемое $D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big)$ является непрерывным по метапараметрам. Выражения вида $p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})(\log p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \log p), p \in \mathbf{P}$ также являются непрерывными по метапараметрам и ограниченными, поэтому слагаемые вида $D_{\text{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})||p\big)$ являются непрерывными. Поэтому функции $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}), Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ являются непрерывными по метапараметрам, что и требовалось доказать. □

Метапараметрами данной задачи (1.18) являются коэффициенты $\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}, \lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}}$, отвечающие за регуляризацию верхней и нижней задачи оптимизации, коэффициент $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}}$ отвечает за максимизацию правдоподобия, а также параметры распрделений $\mathbf{P}$ и вектор коэффициентов перед ними $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$.

Условия 7-9 теоремы задают вид области U, на которой представленная оптимизационная задача является обобщающей. Условие 7 выполняется при небольшом разбросе значений $\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$ в зависимости от λ_1, λ_2. Т.к. эти метапараметры выполняют роль регуляризатора, для области гиперпараметров $U_{\mathbf{h}}$, выбранной адекватно, данное условие выполняется.

В случае, если $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ — нормальное распределение, а $q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ — распределение Gumbel-softmax, такие что для любого $\mathbf{h}$ существует $\boldsymbol{\theta}$:

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

а также полагая что $\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$ приблизительно равен для всех $\mathbf{h} \in U_{\mathbf{h}}$, восьмое условие можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned}\max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{1}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \\ - \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}} \frac{1}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) < \\ < \max_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) - \\ - \min_{\boldsymbol{\theta}\in U_{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).\end{aligned}$$

Это условие говорит, что существует набор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$, такой что максимальная разница дивергенций на U больше, чем максимальная разница между усредненными по $q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ логарифмами правдоподобия выборки, поделенными на $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}}$. Данное условие будет выполняться при достаточно больших $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}}$.

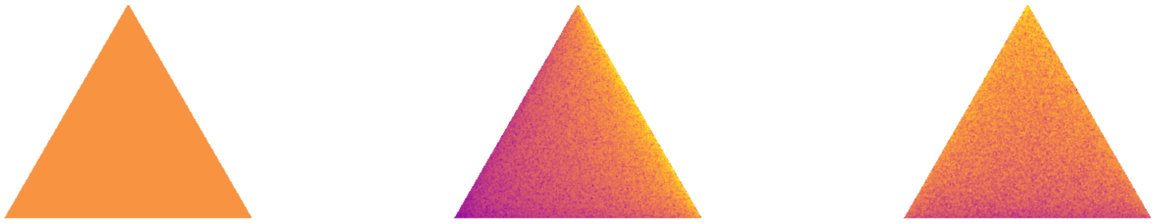
Условие 9 выполняется при достаточно больших значениях метапараметра $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$.

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 $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$ порождает последовательность задач оптимизаций, схожую с перебором структур. Рассмотрим следующий пример.

Пример 2. Рассмотрим вырожденный случай поведения функции $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$, когда $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} = \lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} = 0$. Пусть модель использует один структурный параметр, в качестве априорного распределения на структуре задано распределение Gumbel-Softmax с λ_{temp}. Пусть в качестве множества распределений $\mathbf{P}$ используется два распределения Gumbel-Softmax, сконцентрированных близко к вершинам симплекса:

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

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 $\boldsymbol{\lambda}^{\text{struct}}_{\text{Q}}$ и значений гиперпараметра $\mathbf{s}$ распределения на структуре. Видно, что варьируя коэффициенты метапараметров получается последовательность оптимизаций, схожая с полным перебором структуры.



(а) (б) (в)

Рис. 1.5. Пример зависимости функции $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ от гиперпараметра $\mathbf{s}$ при различных значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$. Темные точки на графике соответсвуют наименее предпочтительным значениям гиперпараметра. а) $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = [0, 0]$, б) $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = [1, 0]$, в) $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = [1, 1]$.

1.4. Анализ обобщающей задачи

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

Теорема 6. Пусть $m \gg 0$, $\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} > 0$, $\frac{m}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \in \mathbb{N}$, $\frac{m}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}} \gg 0$. Тогда оптимизация функции

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr)$$

эквивалентна оптимизации вариационной оценки обоснованности

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\hat{\mathbf{y}}|\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr)$$

для произвольной случайной подвыборки $\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{X}}$ мощности $\frac{m}{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}}$ из генеральной совопкупности.

Доказательство. Рассмотрим величину $\frac{1}{m}L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$:

$$\frac{1}{m}L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{m}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \frac{\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}}{m} D_{\text{KL}}\bigl(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\bigr). \tag{1.19}$$

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

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

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

$$\frac{1}{m_0}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - \frac{1}{m_0}D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) \approx \tag{1.20}$$

$$\approx \mathsf{E}_{y,\mathbf{x}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - \frac{1}{m_0}D_{\text{KL}}\big(p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})||q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})\big) =$$

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

Таким образом, задачи оптимизации функций (1.19),(1.20) совпадают, что и требовалось доказать. □

Теорема показывает, что для достаточно большого m и $\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} > 0, \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} \neq 1$ оптимизация параметров и гиперпараметров эквивалентна нахождению оценки обоснованности для выборки другой мощности: чем выше значение $\lambda^{\text{L}}_{\text{prior}}$, 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 7. Пусть $\lambda^{\text{Q}}_{\text{prior}} = \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} = \lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} = 1, \boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда:

1. Задача оптимизации (1.18) доставляет максимум апостериорной вероятности гиперпараметров с использованием вариационной оценки обоснованности:

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) +$$

$$+\log p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{h}}.$$

2. Вариационное распределение $q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ приближает апостериорное распределение $p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ наилучшим образом:

$$D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) \to \min_{\boldsymbol{\theta}}.$$

3. Если существуют такие значения параметров $\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}$, что $p(\mathbf{w}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}), p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$, то решение задачи оптимизации $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ доставляет эти значения вариационных параметров.

Доказательство. Так как параметры $\boldsymbol{\theta}$ не зависят от слагаемых при коэффициентах $\boldsymbol{\lambda}^{\text{Q}}_{\text{struct}}$, а также от $\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$, то при $\lambda^{\text{Q}}_{\text{likelihood}} = \lambda^{\text{L}}_{\text{prior}} = 1$ как верхняя, так и нижняя задачи оптимизации (1.18) эквивалентны оптимизации вариационной оценки обоснованности, поэтому первое утверждение выполняется.

Докажем второе утверждение. Рассмотрим логарифм обоснованности модели:

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log\frac{p(\mathbf{y},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} + D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr) =$$

$$= \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr) +$$
$$+ D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr).$$

Из данного равенства следует:

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr) =$$

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr),$$

где правая часть равенства соответствует вариационной оценки обоснованности. Выражение $\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ не зависит от вариационного распределения $q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$, поэтому максимизации вариационной оценки эквивалентна минимизации дивергенции $D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr)$.

Докажем третье утверждение. Т.к. вариационное распределение $q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ декомпозируется на $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}), q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$, апостериорное распределение $p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ декомпозируется на $p(\mathbf{w}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}), p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$, поэтому достижимо значение нулевое значение дивергенции: $D_{\mathrm{KL}}\bigl(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\bigr) = 0$. Она представима в следующем виде (1.6). Отсюда следует что соотстветсвующие вариационные и апостериорные распределения совпадают. □

Таким образом, предлагаемая обобщающая задача позволяет производить оптимизацию вариационной оценки обоснвоанности, а также оптимизацию обоснованности для выбор с другим эффекитвным размером. Чем больше размер выборки, тем больше влияние априорного распределения, которое выступает в качестве регуляризатора. Можно регулировать сложность модели следующим образом:

1. Варьируя сложность на верхнем уровне оптимизации оптимизации с использованием коэффициента $\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}$;
2. Варьируя сложность на нижнем уровне оптимизации оптимизации с использованием коэффициента $\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}$;
3. Варьируя сложность на обоих уровнях оптимизации.

Рассмотрим различие вариантов 1-3 на примере.

Пример 3. Пусть $\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}} = 0$. Пусть требуется уменьшить вклад априорного распределения в итоговую оптимизацию. При варьировании нижней задачи оптимизации ($\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}} \to 0$) оптимизационная задача становится эквивалента методу максимального правдоподобия:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) \to \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}).$$

При этом верхняя задача $Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{h}}$ не имеет смысла, т.к. параметры $\boldsymbol{\theta}$ не зависят от гиперпараметров $\mathbf{h}$.

При варьировании только верхней задачи оптимизации ($\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}} \to 0, \lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}} = \lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} = 1$), на нижнем уровне задача $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ совпадает с задачей поиска обоснованных параметров при фиксированном $\mathbf{h}$:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

При этом на верхнем уровне оптимизации выбираются гиперпараметры $\mathbf{h}$, при которых параметры будут доставать максимум правдоподобия с точностью до регуляризации:

$$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) \to \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}).$$

Таким образом, варьирование сложности на верхнем оптимизации приводит к оптимизации параметров и гиперпараметров с большей регуляризацией, чем варьирование сложности на нижнем уровне оптимизации.

Следующая теорема анализирует оптимизацию при $\frac{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}}{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}}} = \lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}$. В частности, если $\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} = 1$, то такая оптимизация соответствует оптимизации вариационной оценки обоснованности на обеих уровнях оптимизации для выборки размера $[\frac{m}{\lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}}]$, о чем говорилось в Теореме 1.4.

Теорема 8. Пусть $\frac{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}}{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}}} = \lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}$. Тогда задача оптимизации (1.18) представима в виде одноуровневой задачи оптимизации:

$$\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big) -$$

$$- \sum_{p', \lambda \in \mathbf{P}, \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{struct}}} D_{\mathrm{KL}}\big(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})||p'\big) - \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\mathbf{h}, \boldsymbol{\theta}}.$$

Доказательство. Т.к. выполнено равенство $\frac{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}}}{\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}}} = \lambda^{\mathrm{L}}_{\mathrm{prior}}$, то нижняя задача оптимизации экивалентна следующей задаче:

$$\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) -$$

$$- \lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

Параметры $\boldsymbol{\theta}$ вариационного распределения $q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ не зависят от слагаемых вида $\log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$ и $D_{\mathrm{KL}}\big(p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})||p'\big), p' \in \mathbf{P}$, поэтому нижняя задача оптимизации эквивалентна следующей задаче:

$$\lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{likelihood}} \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) -$$

$$- \lambda^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{prior}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\big).$$

$$
- \sum_{p', \lambda \in \mathbf{P}, \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\text{struct}}} D_{\mathrm{KL}}\bigl(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})||p'\bigr) + \log p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}}
$$

для любого вектора $\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{Q}}_{\text{struct}}$.

Поэтому верхняя и нижняя задачи совпадают:

$$
\mathbf{h} = \arg\max_{\mathbf{h}'} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}),
$$

где

$$
\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}') = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\mathbf{h}'|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}).
$$

Из свойства

$$
\max_{\mathbf{h}} \max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = \max_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}} Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})
$$

следует доказательство теоремы. □

Список основных обозначений

$\mathbf{x}_i \in \mathbf{X}$ — вектор признакового описания i-го объекта
$y_i \in \mathbf{y}$ — метка i-го объекта
$\mathfrak{D}$ — выборка
$\mathbf{X} \subset \mathbb{X}$ — матрица, содержащая признаковое описание объектов выборки
$\mathbf{y} \subset \mathbb{Y}$ — вектор меток объектов выборки
m — количество объектов в выборке
n — количество признаков в признаковом описании объекта
$\mathbb{X} = \mathbb{R}^m$ — признаковое пространство объектов
$\mathbb{Y}$ — множество меток объектов
R — множество классов в задаче классификации
(V, E) — граф со множеством вершин V и множеством ребер E
$\mathbf{g}^{j,k}$ — вектор базовых функций для ребра (j, k)
$K^{j,k}$ — мощность вектора базовых функций для ребра (j, k)
$\mathbf{agg}_v$ — функция аггрегации для вершины v
$\boldsymbol{\gamma}^{j,k}$ — структурный параметр для ребра (j, k)
$\mathfrak{F}$ — параметрическое семейство моделей
U — область определения оптимизационной задачи
$\mathbf{w} \in \mathbb{W}$ — параметры модели
$\mathbb{W}$ — пространство параметров модели
$U_{\mathbf{w}} \subset \mathbb{W}$ — область определения параметров модели
$\boldsymbol{\Gamma} \in \mathbb{\Gamma}$ — структура модели
$\mathbb{\Gamma}$ — множество значений структуры модели
$U_{\boldsymbol{\Gamma}} \subset \mathbb{\Gamma}$ — область определения параметров модели
$\mathbf{h} \in \mathbb{H}$ — гиперпараметры модели
$\mathbb{H}$ — пространство гиперпараметров модели
$U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ — область определения гиперпараметров
$\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{\Theta}$ — параметры вариационного распределения
$\mathbb{\Theta}$ — пространство параметров вариационного распределения
$U_{\boldsymbol{\theta}} \subset \mathbb{\Theta}$ — область определения вариационных параметров модели
$\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}} \in \mathbb{\Theta}_{\mathbf{w}}$ — параметры вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение параметров модели
$\mathbb{\Theta}_{\mathbf{w}}$ — пространство параметров вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение параметров модели
$U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \subset \mathbb{\Theta}_{\mathbf{w}}$ — область определения параметров вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение параметров модели
$\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}} \in \mathbb{\Theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}$ — параметры вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение структуры модели
$\mathbb{\Theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}$ —пространство параметров вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение структуры модели
$U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}} \subset \mathbb{\Theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}$ — область определения параметров вариационного распределения, аппроксимирующего апостериорное распределение структуры модели

$\boldsymbol{\lambda} \in \lambda$ — вектор метапараметров
λ — пространство метапараметров
$U_{\boldsymbol{\lambda}} \subset \lambda$ — область определения метапараметров
$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma})$ — правдоподобие выборки
$p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — априорное распределение параметров и структуры модели
$p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda})$ — распределение гиперпараметров модели
$p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — априорное распределение структуры модели
$p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — априорное распределение параметров модели
$p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — апостериорное распределение параметров и структуры модели
$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — апостериорное распределение структуры модели
$p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — апостериорное распределение структуры модели
$p(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda})$ — апостериорное распределение гиперпараметров
$p(y, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{x}, \mathbf{h})$ — вероятностная модель глубокого обучения
$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — обоснованность модели
$q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ — вариационное распределение параметров и структуры модели
$q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ — вариационное распределение структуры модели
$q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ — вариационное распределение параметров модели
$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — функция потерь
$Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ — валидационная функция
$T(\boldsymbol{\theta}|L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}))$ — оператор оптимизации
$\mathfrak{Q}$ — семейство вариационные распределений
S — энтропия распределения
M — множество моделей без общей параметризации
$D_{\mathrm{KL}}\big(p_1||p_2\big)$ — дивергенция Кульбака-Лейблера между распределениями p_1 и p_2
$\mathbf{A}^{-1}$ — матрица коварианций параметров модели
$\mathbf{s}$ — конкатенация параметров концентрации на структуре модели