

Глава 1

Выбор субоптимальной структуры модели

В данной главе рассматривается задача выбора структуры модели глубокого обучения. Предлагается ввести вероятностные предположения о распределениях параметров и структуры модели. Проводится градиентная оптимизация параметров и гиперпараметров модели на основе байесовского вариационного вывода. В качестве оптимизируемой функции для гиперпараметров модели предлагается обобщенная функция обоснованности. Показано, что данная функция позволяет проводить оптимизацию, соответствующую нескольким критериям выбора структуры модели: методу максимального правдоподобия, последовательному увеличению и снижению сложности модели, полному перебору структуры модели, а также получению 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 параметры модели распределены нормально с нулевым средним:

$$\mathbf{w}_k^{i,j} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \gamma_k^{i,j} (\mathbf{A}_k^{i,j})^{-1}),$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\frac{\lambda_{\text{temp}}^{K-1}}{\left(\sum_{l=1}^K s_l \gamma_l^{-\frac{K-1}{K} \lambda_{\text{temp}}} \sum_{l'=1}^K [l \neq l'] s_{l'} \gamma_{l'}^{-\frac{1}{K} \lambda_{\text{temp}}}\right)^K}$$

Заметим, что числитель $\lambda_{\text{temp}}^{K-1}$ имеет меньшую скорость сходимости, чем знаменатель. Знаменатель является суммой слагаемых вида:

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

Пусть хотя бы для одного l : $\gamma_l \neq \frac{1}{K}$. Пусть l' соответствует индексу максимальной компоненты вектора γ . Для $l = l'$ предел выражения (1.2) при λ_{temp} стремится к бесконечности. Для $l \neq l'$ предел выражения (1.2) при λ_{temp} стремится к нулю. Возводя сумму пределов в степень $-K$ получаем предел плотности, равный нулю.

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

□

Первое свойство Gumbel-Softmax распределения позволяет использовать репараметризацию при вычислении градиента в вариационном выводе (англ. reparametrization trick). Идея подхода заключается в следующем. Рассмотрим для примера математическое ожидание логарифма правдоподобия выборки модели по некоторому непрерывному распределению q :

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

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

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

Первое слагаемое в общем виде сложно вычислить. Пусть распределение q можно представить как функцию от непараметрического распределения:

$$q(\mathbf{w}) = q(g(\varepsilon)).$$

Тогда

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

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

Пример распределения Gumbel-Softmax при различных параметрах представлен на Рис. 1.1. В качестве альтернативы для априорного распределения на структуре выступает распределение Дирихле и равномерное распределение. Выбор в качестве распределения на структуре произведения Gumbel-Softmax распределения обоснован выбором этого же распределения в качестве вариационного.

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

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

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. Калибруя метапарамы λ_1, λ_2 можно получить более сильную или

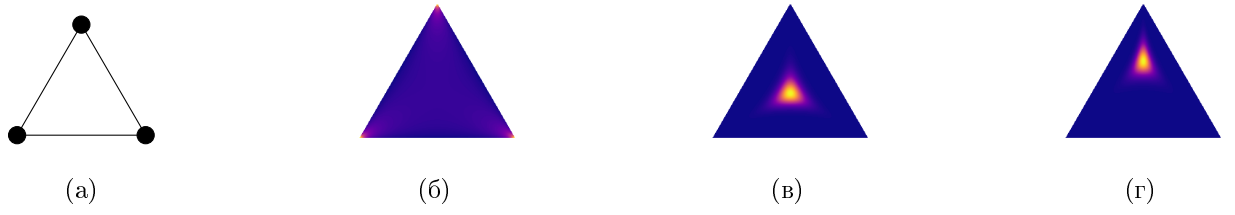


Рис. 1.1. Пример распределения Gumbel-Softmax при различных значениях параметров: а) $\lambda_{temp} \rightarrow 0$, б) $\lambda_{temp} = 1, \mathbf{s} = [1, 1, 1]$, в) $\lambda_{temp} = 5, \mathbf{s} = [1, 1, 1]$, г) $\lambda_{temp} = 5, \mathbf{s} = [10, 0.1, 0.1]$.

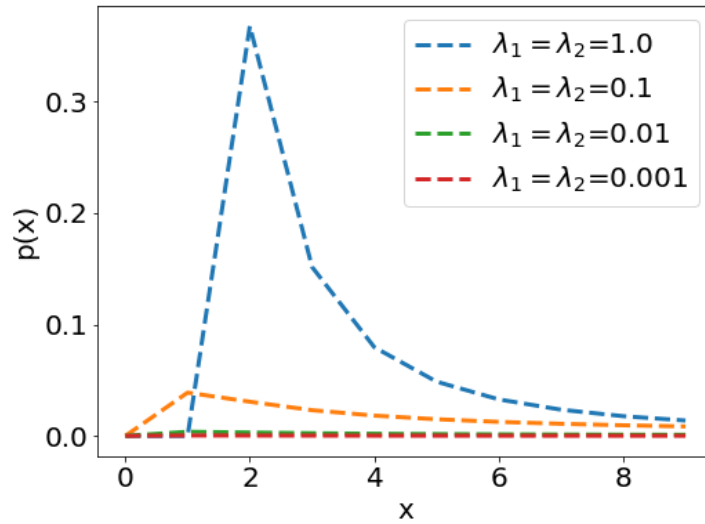


Рис. 1.2. Графики обратных гамма распределений для различных значений метапараметров.

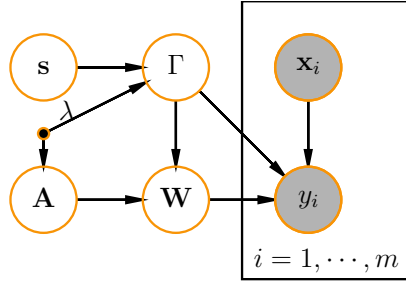


Рис. 1.3. График предлагаемой вероятностной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

более слабую регуляризацию [?]. Пример распределений $\text{inv-gamma}(\lambda_1, \lambda_2)$ для разных значений метапараметров λ_1, λ_2 изображен на Рис. 1.2.

Таким образом, предлагаемая вероятностная модель содержит следующие компоненты:

1. Параметры \mathbf{w} модели, распределенные нормально.
2. Структура модели Γ распределены 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.
4. Метапараметры: $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2]$.

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

1.2. Вариационная оценка для обоснованности вероятностной модели

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

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

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

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

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

Для вычисления обоснованности

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

из (1.3) предлагается использовать вариационную оценку обоснованности.

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

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

Тогда справедлива следующая оценка:

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

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

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

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

Доказательство. Используя неравенство Йенсена получим

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

Декомпозируем распределение q по свойству условной дивергенции:

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

□

В качестве вариационного распределения $q_{\mathbf{w}}$ предлагается использовать нормальное распределение, не зависящее от структуры модели Γ :

$$q_{\mathbf{w}} = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}_q),$$

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

В качестве вариационного распределения q_{Γ} предлагается использовать произведение распределений Gumbel-Softmax. Конкатенацию параметров концентрации распределений обозначим \mathbf{s}_q . Его температуру обозначим θ_{temp} .

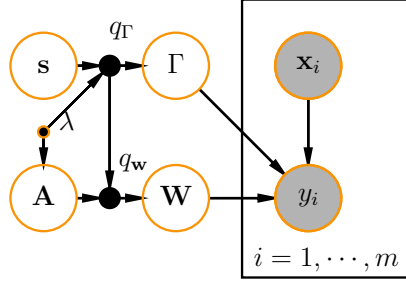


Рис. 1.4. График предлагаемой вероятностной вариационной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Вариационное распределение обозначено черным кругом. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

Вариационными параметрами распределения q являются параметры распределений $q_{\mathbf{w}}$, q_{Γ} :

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

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

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

Определение 1. Параметрической сложностью $C_p(\boldsymbol{\theta})$ модели с вариационными параметрами $\boldsymbol{\theta}$ на компакте $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ назовем минимальную дивергенцию между вариационным и априорным распределением:

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

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

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

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

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

Обобщим понятие относительной вариационной плотности на случай произвольных распределений.

Определение 2. Относительной вариационной плотностью параметра $w \in \mathbf{w}$ при условии структуры Γ и гиперпараметров \mathbf{h} назовем отношение моды вариационного распределения параметра к моде априорного распределению параметра:

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

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

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

Теорема 2. Пусть

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

$$p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_1) = p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h}_2) = p(\mathbf{w}, \Gamma) \forall \mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_{\mathbf{h}}.$$

3. вариационное распределение $q_{\mathbf{w}}$ и априорное распределение $p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h})$ являются абсолютно непрерывными и унимодальными на $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}, U_{\boldsymbol{\theta}}$.
4. мода и матожидание вариационного распределение q и априорного распределение $p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h})$ совпадают.
5. задана последовательность $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots$ — бесконечная последовательность векторов вариационных параметров, такая что $\lim_{i \rightarrow \infty} C_p(\boldsymbol{\theta}_i|U_{\mathbf{h}}) = 0, \boldsymbol{\theta} \in U_{\boldsymbol{\theta}}$.
6. \mathbf{h}_i .

\mathbf{h}_i . Тогда матожидание вариационной плотности данной последовательности стремится к единице:

$$\mathbb{E}_q \rho(\mathbf{w}|\Gamma, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})^{-1} \rightarrow 1.$$

Доказательство. Воспользуемся неравенством Пинскера:

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

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

Рассмотрим разность мод:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{q_{\Gamma}} \text{mode } q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) - \mathbb{E}_{p(\Gamma|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})} \text{mode } p(\mathbf{w}|\Gamma, \mathbf{h}) &= \\ &= \mathbb{E}_q \mathbf{w} - \mathbb{E}_{p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h})} \mathbf{w}. \end{aligned}$$

Т.к. вторые моменты величины \mathbf{w} конечны для вариационного и априорного распределения, то функции $\mathbb{E}_{q(\mathbf{w}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma)} \mathbf{w}, \mathbb{E}_{p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h})}$ абсолютно интегрируемы, что в сочетании со слабой сходимостью позволяет записать:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (\mathbb{E}_q \mathbf{w} - \mathbb{E}_{p(\mathbf{w}, \Gamma|\mathbf{h})} \mathbf{w}) = 0.$$

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

$$\mathbb{E}_q \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})^{-1}$$

Т.к. функция ограничена, то предел можно внести под знак интеграла:

$$\begin{aligned} \lim_{i \rightarrow \infty} \mathbb{E}_q \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})^{-1} &= \\ &= \mathbb{E}_q \lim_{i \rightarrow \infty} \rho(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})^{-1} = 1. \end{aligned}$$

□

Теорема утверждает, что при устремлении параметрической сложности модели к нулю, параметры модели становятся неинформативными и подлежащими удалению в среднем по всем возможным значениям структуры $\mathbf{\Gamma}$ модели. Заметим, что теорема применима для случая, когда последовательность вариационных распределений q не имеет предела. Так, в случае, если структура $\mathbf{\Gamma}$ определена однозначно, последовательность q_i может являться последовательностью нормальных распределений, чье матожидание стремится к нулю. Априорным распределением $p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}) = p(\mathbf{w}|\mathbf{h})$ при этом может являться семейство нормальных распределений с нулевым средним.

1.3. Обобщающая задача

Рассмотрим основные критерии выбора вероятностных моделей.

1. Критерий максимального правдоподобия:

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

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

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

Данное обобщение эквивалентно методу правдоподобия при выборе в качестве q эмпирического распределения параметров и структуры. Метод не предполагает оптимизации гиперпараметров. Для формального соответствия данной задачи задаче выбора положим $L = Q$.

2. Метод максимальной апостериорной вероятности.

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

Аналогично предыдущему методу сформулируем вариационное обобщение данной задачи:

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

В рамках данной задачи оптимизации параметры априорных распределений \mathbf{A}, \mathbf{s} выступают в качестве метапараметров и не подлежат оптимизации.

3. Перебор структуры:

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

где p' — некоторое распределение на структуре, выступающее в качестве метапараметра.

4. Критерий Акаике:

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

Заметим, что в условия выбора модели на параметрическом множестве моделей данный критерий не имеет смысла, т.к. количество параметров для каждой модели одинаково. Предлагается следующая переформулировка:

$$L = Q = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - |\{w : C_p(\theta | U_{\mathbf{h}}) < \lambda\}|, \quad (1.8)$$

где λ — метапараметр алгоритма, $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ — область определения задачи по гиперпараметрам.

5. Информационный критерий Шварца:

$$\log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - 0.5 \log(m) |\{w : C_p(\theta | U_{\mathbf{h}}) < \lambda\}|.$$

Переформулируем данный критерий аналогично критерию AIC:

$$L = Q = BIC_{\lambda} = \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - \log(m) |\{w : C_p(w) < \lambda\}|. \quad (1.9)$$

6. Метод вариационной оценки обоснованности.

$$L = Q = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) - D_{\text{KL}}(q | p). \quad (1.10)$$

7. Hold-out кросс-валидация.

$$L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{h}), \quad (1.11)$$

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

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

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

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

Определение 3. Двухуровневую задачу оптимизации будем называть *обобщающей* на области $U \subset \Theta \times \mathbb{H} \times \Lambda$, если она удовлетворяет следующим свойствам:

1. Для каждого значения гиперпараметров \mathbf{h} оптимальное решение нижней задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*$ определено однозначно.
2. Свойство максимизации правдоподобия выборки: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_\lambda$ и $K_1 \in \mathbb{R}_+$, такие что для любых векторов гиперпараметров, удовлетворяющих неравенству $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h, Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_1$, выполняется неравенство $\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_1, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) > \log \mathbb{E}_q p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_2, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})$.
3. Свойство минимизации параметрической сложности: существует $\boldsymbol{\lambda} \in U_\lambda$ и $K_2 \in \mathbb{R}_+$, такие что для любых векторов гиперпараметров $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2 \in U_h$, удовлетворяющих неравенству $Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > K_2$ и при этом имеющие равенство ожидаемых правдоподобий выборок $\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}_1, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) = \log \mathbb{E}_q p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}_2, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})$, параметрическая сложность первой модели меньше, чем второй: $C_p(\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_1)|U_h) < C_p(\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}_2)|U_h)$.
4. Свойства приближения оценки обоснованности: существует значение гиперпараметров $\boldsymbol{\lambda}$, такое что оптимизация задачи эквивалента оптимизации вариационной оценки обоснованности модели: $\arg \max_{\mathbf{h} \in U_h} Q(\arg \max_{\boldsymbol{\theta} \in U_\theta} L) \approx \arg \max_{\mathbf{h} \in U_h} \mathbb{E}_q p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \mathbf{X}) - D_{KL}(q|p)$.
5. Свойство перебора структур: существует константа K_3 , такая что для любых двух векторов $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ и соответствующих векторов $\boldsymbol{\theta}_1^*, \boldsymbol{\theta}_2^* : D_{KL}(q_{\Gamma_2}, q_{\Gamma_1}) > K_3, D_{KL}(q_{\Gamma_1}, q_{\Gamma_2}) > K_3$ существуют значения гиперпараметров $\boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2$, такие что $Q(\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}_1) > Q(\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda}_1), Q(\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}_1) < Q(\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda}_2)$.
6. Свойство непрерывности: $\mathbf{h}^*, \boldsymbol{\theta}^*$ непрерывны по метопараметрам.

Первое свойство говорит о том, что решение первого и второго уровня должны быть согласованы и определены однозначно. Свойства 2-4 определяют возможные критерии оптимизации, которые должны приближаться обобщающей задачей. Свойство 5 говорит о возможности перехода между различными структурами модели. Отметим, что данное условие крайне важно в условиях оптимизации моделей глубокого обучения, которые отличаются многоэкстремальностью. Последнее свойство говорит о том, что обобщающая задача должна

позволять производить переход между различными критериями выбора параметров и структуры модели непрерывно.

Теорема 3. Рассмотренные задачи (1.5),(1.6),(1.7),(1.8),(1.9),(1.10),(1.11) не являются обобщающими.

Доказательство. TODO □

Теорема 4. Пусть задано непустое множество непрерывных по параметрам распределений на структуре \mathbf{P} . Пусть функции потерь и валидации L, Q являются непрерывно-дифференцируемыми на компакте $U \subset \Theta \times \mathbb{H} \times \mathbb{A}$, где параметры распределений $\mathbf{P} \in \mathbb{A}$. Тогда следующая задача является обобщающей на U .

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

где

$$\begin{aligned} q^* &= \arg \max_q L = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) & (L^*) \\ &- \lambda_L^{\text{prior}} D_{KL}(q^*(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}) || p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})). \end{aligned}$$

Доказательство. Для доказательства теоремы требуется доказать критерии 1-6 из определения обобщающей задачи. Критерий 1 следует из условий задачи.

Докажем критерий 2. Пусть $\lambda_Q^{\text{prior}} = 0, \lambda_Q^{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Зафиксируем некоторое значение метапараметров λ_1, λ_2 . Т.к. $U_{\mathbf{h}}$ — компакт, возьмем в качестве константы K_1 разницу между максимальным и минимальным значением $p(\mathbf{h}|\mathbf{f})$:

$$K = \max_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\mathbf{f}) - \min_{\mathbf{h}} \log p(\mathbf{h}|\mathbf{f}).$$

Тогда $Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) = \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_1 \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) - \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_2, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) + \log p(\mathbf{h}_2|\mathbf{f}) - \log p(\mathbf{h}_1|\mathbf{f}) > K_1$. Отсюда следует $\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_1 \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) > \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_2 \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f})$. □

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

В предельном случае, когда множество температура λ_{temp} близка к нулю, а множество \mathbf{P} состоит из распределений, близких к дискретным, и соответствующих всем возможным структурам, калибровка $\lambda_Q^{\text{struct}}$ порождает последовательность задач оптимизаций, схожую с перебором структур. Для примера рассмотрим вырожденный случай поведения функции Q , когда $\lambda_{\text{likelihood}}^Q = \lambda_Q^{\text{prior}} = 0$.

Пусть в Пусть модель использует один структурный параметр, в качестве априорного распределения на структуре задано распределение Gumbel-Softmax с $\lambda_{\text{temp}} = 0.1$. Пусть в качестве множества распределений \mathbf{P} используется два распределения Gumbel-Softmax, сконцентрированных близко к вершинам симплекса:

$$\mathbf{P} = [\text{Gumbel-Softmax}([0.8, 0.1, 0.1]^T, 0.1), \text{Gumbel-Softmax}([0.1, 0.8, 0.1]^T, 0.1)].$$

Из определения распределения Gumbel-Softmax следует, что достаточно рассмотреть только значения параметра \mathbf{s} находящиеся внутри симплекса. На рис. ?? изображены значения функции Q в зависимости от мета-параметров и значения гиперпараметра \mathbf{s} распределения на структуре. Видно, что калибруя коэффициенты метапараметров получается последовательность оптимизаций, схожая с полным перебором структуры.

Обобщающая задача: переформулировка через градиент

Для вычисления приближенного значения вариационной оценки обоснованности (1.4) предлагается использовать приближение методом Монте-Каарло с порождением R реализаций величин \mathbf{w}, Γ :

$$\begin{aligned} & \sum_{r=1}^R \log p(\mathbf{y} | \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\alpha}_q \circ \hat{\epsilon}_r, \hat{\Gamma}_r, \mathbf{X}) - \sum_{r=1}^R \left(\log q_{\Gamma}(\hat{\Gamma}_r | \boldsymbol{\theta}_{\Gamma}) - p(\hat{\Gamma} | \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \right) - \\ & - \sum_{(i,j) \in E} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} \hat{D}_{\text{KL}} \left(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}_k^{i,j} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w}_k^{i,j} | \Gamma, \mathbf{h}) \right), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} & \hat{D}_{\text{KL}} \left(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}_k^{i,j} | \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \Gamma) | p(\mathbf{w}_k^{i,j} | \Gamma, \mathbf{h}) \right) = \\ & = \sum_{r=1}^R \frac{1}{2} \left((\hat{\gamma}_r^{i,j}[k])^{-1} \text{tr}(\mathbf{A}_q \mathbf{A}^{-1}) + \boldsymbol{\mu}^T \hat{\gamma}_r^{i,j}[k]^{-1} \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\mu} - |\mathbf{W}| + \log \frac{|\hat{\gamma}^{i,j}[r]_k \mathbf{A}|}{|\mathbf{A}_q|} \right), \end{aligned}$$

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

Обобщающая задача: адекватность задачи

Обобщающая задача: свойства коэффициентов

Решение задачи

Эксперимент: пример 1

Эксперимент: пример 2