# Глава 1
# Выбор субоптимальной структуры модели

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

## 1.1. Вероятностная модель

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

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

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

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

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

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

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

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

Перечислим свойства, которыми обладает распределение Gumbel-Softmax:

1. Реализация $\hat{\gamma}_l$, т.е. $l$-й компоненты случайной величины $\boldsymbol{\gamma}$ порождается следующим образом:

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

   где $\hat{\boldsymbol{\gamma}} \sim -\log\bigl(-\log \mathcal{U}(0,1)^K\bigr)$.
2. Свойство округления: $p(\gamma_{l_1} > \gamma_{l_2}, l_1 \neq l_2 | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) = \frac{s_l}{\sum_{l'} s_{l'}}$.
3. При устремлении температуры к нулю реализация $\hat{\gamma}$ случайной величины концентрируется на вершинах симплекса:

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

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

$$\lim_{\lambda_{\text{temp}} \to \infty} p(\boldsymbol{\gamma} | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) = \begin{cases} \infty, \boldsymbol{\gamma} = \frac{1}{K}, l \in \{1, \ldots, K\}, \\ 0, \text{ иначе.} \end{cases} \tag{1.1}$$

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

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

$$p(\boldsymbol{\gamma} | \mathbf{s}, \lambda_{\text{temp}}) \propto \frac{\lambda_{\text{temp}}^{K-1}}{\left(\sum_{l=1}^{K} s_l \gamma_l^{-\frac{K-1}{K}\lambda_{\text{temp}}} \prod_{l'=1}^{K} [l \neq l'] \gamma_l^{\frac{1}{K}\lambda_{\text{temp}}}\right)^K}. \tag{1.2}$$

Заметим, что числитель $\lambda_{\text{temp}}^{K-1}$ имеет меньшую скорость сходимости, чем знаменатель, поэтому для вычисления предела достаточно проанализировать только знаменатель. Знаменатель под степенью $(-K)$ представляется суммой слагаемых следующего вида:

$$\left(\frac{\prod_{l' \neq l} \gamma_{l'}^{\frac{1}{K}}}{\gamma_l^{\frac{K-1}{K}}}\right)^{\lambda_{\text{temp}}}. \tag{1.3}$$

Рассмотрим два случая: когда вектор $\boldsymbol{\gamma}$ лежит не в центре симплекса, и когда $\boldsymbol{\gamma}$ лежит в центре симплекса. Пусть хотя бы для одной компоненты $l$ выполнено: $\gamma_l \neq \frac{1}{K}$. Пусть $l'$ соответствует индексу максимальной компоненты вектора $\boldsymbol{\gamma}$. Для $l = l'$ предел выражения (1.3) при $\lambda_{\text{temp}}$ стремится к бесконечности. Для $l \neq l'$ предел выражения (1.3) при $\lambda_{\text{temp}}$ стремится к нулю. Возводя сумму пределов в степень $(-K)$ получаем предел плотности, равный нулю.

Рассмотрим второй случай. Пусть $\gamma_l = \frac{1}{K}$ для всех $l$. Тогда выражение (1.2) с точностью до множителя упрощается до $\lambda_{\text{temp}}^{K-1}$. 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.** Репараметризацией случайной величины $\psi$, распределенную по распределению $q$ с параметрами $\boldsymbol{\theta}_\psi$ назовем представление величины с помощью другой случайной величины, имеющей распределение, не зависящее от параметров $\boldsymbol{\theta}$:

$$\psi \sim q \iff \hat{\psi} \sim g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}_\psi),$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — случайная величина, чье распределение не зависит от параметров $\boldsymbol{\theta}_\psi$, $g$ — некоторая детерминированная функция, $\hat{\psi}$ — реализация случайной величины $\psi$.

Идею репараметризации поясним на следующем примере.

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

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

Продифференцируем данное выражение по параметрам $\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}$ вариационного распределения $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$:

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

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

$$\mathbf{w} \sim q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) \iff \hat{\mathbf{w}} \sim g(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}).$$

Тогда справедливо следующее выражение:

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

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

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 [**?**].

(а) (б) (в) (г)

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) $\lambda_{\text{temp}} = 5, \mathbf{s} = [10, 0.1, 0.1]$.

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

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

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

где $\lambda_1, \lambda_2 \in \boldsymbol{\lambda}$ — метапараметры оптимизации. Использование обратного гамма-распределения в качестве распределения гиперпараметров можно найти в [?, ?]. В данной работе обратное распределение выступает как регуляризатор гиперпараметров. Варьируя метапарамы $\lambda_1, \lambda_2$ получается более сильная или более слабая регуляризация [?]. Пример распределений inv-gamma$(\lambda_1, \lambda_2)$ для разных значений метапараметров $\lambda_1, \lambda_2$ 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.
2. Структура модели $\boldsymbol{\Gamma}$, содержащая все структурные параметры $\{\boldsymbol{\gamma}^{j,k}, (j,k) \in E\}$ распределены по распределению Gumbel-Softmax.
3. Гиперпараметры: $\mathbf{h} = [\text{diag}(\mathbf{A}), \mathbf{s}]$, где $\mathbf{A}$ — конкатенация матриц $\mathbf{A}^{j,k}, (j,k) \in E$, $\mathbf{s}$ — конкатенация параметров Gumbel-Softmax распределений $\mathbf{s}^{j,k}, (j,k) \in E$, где $E$ — множество ребер, соответствующих графу рассматриваемого параметрического семейства.
4. Метапараметры: $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\text{temp}}]$. Эти параметры не подлежат оптимизации и задаются экспертно.

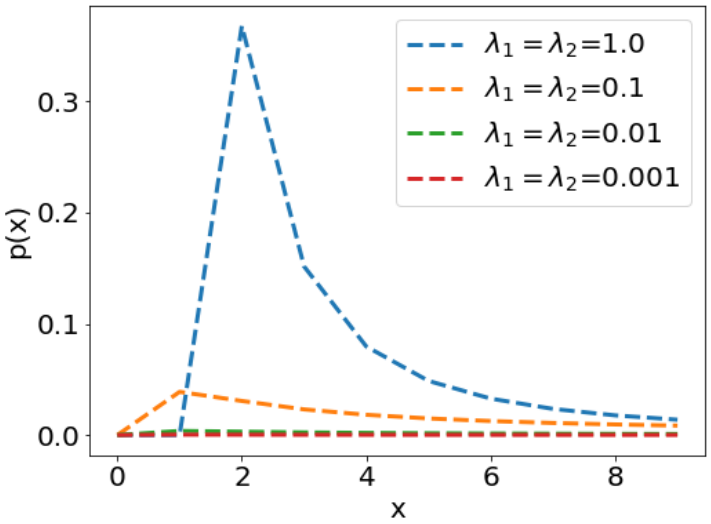



Рис. 1.2. Графики обратных гамма распределений для различных значений метапараметров.

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

## 1.2. Вариационная оценка для обоснованности вероятностной модели

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

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

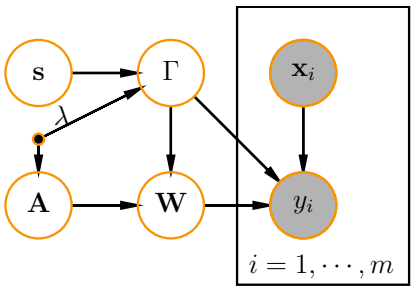



Рис. 1.3. График предлагаемой вероятностной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

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

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

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

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

Для вычисления обоснованности

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

из (1.4) предлагается использовать вариационную оценку обоснованности.

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

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

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

$$q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}) \approx q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}).$$

Тогда справедлива следующая оценка:

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

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

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

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

*Доказательство.* Рассмотрим обоснованность:

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

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

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

Используя неравенство Йенсена получим

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

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

Декомпозируем распределение $q$ по свойству условной дивергенции:

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

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

□

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 $\theta_{\text{temp}}$. 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:

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

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

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

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

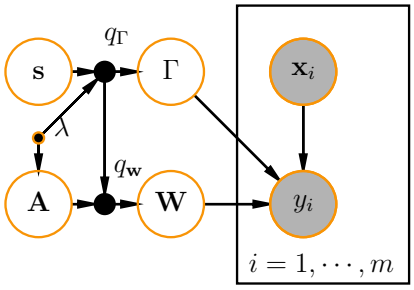



Рис. 1.4. График предлагаемой вероятностной вариационной модели в формате плоских нотаций. Переменные обозначены белыми и серыми кругами, константы обозначены обведенными черными кругами. Вариационное распределение обозначено черным кругом. Наблюдаемые переменные обозначены серыми кругами.

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

Обобщим понятие относительной вариационной плотности на случай произвольных непрерывных распределений.

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

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

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

**Теорема 2.** Пусть

1. заданы компактные множества $U_\mathbf{h} \subset \mathbb{H}, U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{w}} \subset \Theta_\mathbf{w}, U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{\Gamma}} \subset \Theta_\mathbf{\Gamma}$;
2. 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 $U_{\boldsymbol{\theta}_\mathbf{\Gamma}}$:

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

3. 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 $U_\mathbf{h}, U_{\boldsymbol{\theta}}$.

4. Решение задачи вида

$$\mathbf{h}^* = \arg\min_{\mathbf{h}\in U_{\mathbf{h}}} D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big) \tag{1.6}$$

единственно для любого $\boldsymbol{\theta} \in U_{\boldsymbol{\theta}}$.

5. Параметры модели $\mathbf{w}$ имеют конечные вторые моменты по маргинальным распределениям $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$:

$$\mathsf{E}_q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})\mathbf{w}^2 = \mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w}^2 < \infty;$$

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

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

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

$$\operatorname{mode} q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}) = \mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}w;$$

7. задана бесконечная последовательность векторов вариационных параметров $\boldsymbol{\theta}_1,\boldsymbol{\theta}_2,\ldots,\boldsymbol{\theta}_i \in U_{\boldsymbol{\theta}}$, такая что $\lim_{i\to\infty} C_p(\boldsymbol{\theta}_i|U_{\mathbf{h}},\boldsymbol{\lambda}) = 0$.

Тогда следующее выражение стремится к единице:

$$\mathsf{E}_{q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})}\boldsymbol{\rho}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})^{-1} \to 1.$$

*Доказательство.* Воспользуемся неравенством Пинскера:

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

где $||\cdot||_{\mathrm{TV}}$ — расстояние по вариации, $F_q, F_p$ — функции распределения $q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}), p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$. Т.к. дивергенция состоит из двух неотрицательных величин, то обе они стремятся к нулю. Рассотрим вторую величину:

$$\lim 0 = D_{\mathrm{KL}}\big(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}), p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|| =\big)| \int_{\boldsymbol{\Gamma}} D_{\mathrm{KL}}\big(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}), p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})|| \geq\big) \int_{\boldsymbol{\Gamma}}$$

Отсюда $\lim_{i\to\infty} ||F_q(\boldsymbol{\theta}) - F_p(\mathbf{h})||_{\mathrm{TV}} = 0$. По теореме Шеффе данное выражение можно переписать как:

$$\lim \frac{1}{2} \iint_{\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}} |p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})| d\boldsymbol{\Gamma} d\mathbf{w} = 0.$$

Для произвольного $\boldsymbol{\theta}_j$ рассмотрим выражение:

$$|\int_{\boldsymbol{\Gamma}} \frac{q(\mathsf{E}\mathbf{w})}{q(\mathbf{M})} - \frac{q(\mathsf{E}\mathbf{w})}{q(\mathbf{M})}| \leq \int_{\boldsymbol{\Gamma}} |\frac{q_j(\mathsf{E}\mathbf{w})}{q(\mathbf{M})} - \frac{q(\mathsf{E}\mathbf{w})}{q(\mathbf{M})}| \leq \frac{\max L}{\min q(\mathbf{M})} \int_{\boldsymbol{\Gamma}} |\mathsf{E}\mathbf{w} - \mathsf{E}\mathbf{w}| \leq$$

$$\leq L \int_{\mathbf{\Gamma}} |\mathbf{w}||q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) - p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})|.$$

Т.к. вторые моменты $\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w}^2, \mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}^2$ конечны, то случайная величина $\mathbf{w}$ равномерно интегрируема как при маргинальном распределении $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$, так и при маргинальном распределении $p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$. 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 $|\mathbf{w}| \geq t$,

По определению равномерной интегрируемости для $\mathbf{w}$ для любого числа $\varepsilon$ существует число $t_0$, такое что для любого $t \geq t_0$ справедливо выражение:

$$\mathsf{E}|\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)| \leq \varepsilon.$$

где матожидание берется по распределениям $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ и $p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$. Тогда

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

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

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

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

Обозначим за $\mathbf{h}_i$ — решение задачи (1.6) для вектора $\boldsymbol{\theta}_i$. Т.к. $|\boldsymbol{\nu}(t)|$ — ограничена, то

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

$$= t \int_{\mathbf{\Gamma}} \int_{\mathbf{w}} |p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|d\mathbf{\Gamma}d\mathbf{w} \to_{i\to\infty} 0.$$

$$\lim_{i\to\infty} \int_{\mathbf{\Gamma}} |\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w} - \mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}| \leq \int_{\mathbf{\Gamma}} \int_{\mathbf{w}} |\mathbf{w} - \boldsymbol{\nu}(t)||p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})|d\mathbf{w}$$

для любого $t$. Устремляя $t$ к бесконечности, получим $\lim_{i\to\infty} \int_{\mathbf{\Gamma}} |\mathsf{E}_{q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})}\mathbf{w} - \mathsf{E}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})}\mathbf{w}| = 0$. Таким образом, мода $q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$ стремится в среднем к моде априорного распределения $\mathbf{M}$. □

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

$$L = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log \; p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}). \tag{1.7}$$

Данное обобщение (1.7) эквивалентно критерию правдоподобия при выборе в качестве $q(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})$ эмпирического распределения парамтетров и структуры. Метод не предполагает оптимизации гиперпараметров $\mathbf{h}$. Для формального соответствия данной задачи задаче выбора модели (**??**), т.е. двухуровневой задачи оптимизации, положим $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda})$ :

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

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

2. Метод максимальной апостериорной вероятности.

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

Аналогично предыдущему методу сформулируем вариационное обобщение данной задачи:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\big(\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) + \log p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big). \tag{1.8}$$

Т.к. в рамках данной задачи (1.8) не предполагается оптимизации гиперпараметров $\mathbf{h}$, положим параметры распределения $p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})$ фиксированными:

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

3. Перебор структуры:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma})[q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}) = p'] \tag{1.9}$$

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

4. Критерий Акаике:

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

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:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - |\{w : D_{\text{KL}}\big(\boldsymbol{\theta}||\mathbf{h}\big) < \lambda_{\text{prune}}\}| \tag{1.10}$$

где

$$\mathbf{h} = \arg\min_{\mathbf{h}'\in U_{\mathbf{h}}} D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})\big), \tag{1.11}$$

$\lambda_{\text{prune}}$ — метапараметр алгоритма, $U_{\mathbf{h}} \subset \mathbb{H}$ — область определения задачи по гиперпараметрам. Предложенное обобщение (1.10) применимо только в случае, если выражение (1.11) определено однозначно, т.е. существует единственный вектор гиперпараметров на $U_{\mathbf{h}}$, доставляющий минимум дивергенции $D_{\text{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}), p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})||.\big)$

5. Информационный критерий Шварца:

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

Переформулируем данный критерий аналогично критерию AIC:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = Q(\mathbf{h}|\mathbf{y},\mathbf{X},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda}) = BIC_\lambda = \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - \log m|\{w : D_{\mathrm{KL}}\big(q \tag{1.12}$$

метапараметр $\lambda_{\text{prune}}$ определен аналогично (1.11).

6. Метод вариационной оценки обоснованности:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) - D_{\mathrm{KL}}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}), p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})||+\big)p(\mathbf{h} \tag{1.13}$$

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

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:

$$L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) = \mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}) + p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}) \to \boldsymbol{\theta}, \tag{1.14}$$

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

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

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

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

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

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

$$\boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}) = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}\in\Theta} L(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h})$$

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

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

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

такие что для любых векторов гиперпараметров, удовлетворяющих неравенству

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

выполняется неравенство

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

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

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

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

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

параметрическая сложность первой модели меньше, чем второй:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(b) $Q(\mathbf{h}_1) < Q(\mathbf{h}_2)$ при $\boldsymbol{\lambda}'$.

7. Критерий нерперывности: функции $L$ и $Q$ 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 $p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{s}, \boldsymbol{\lambda})$ значимо высока. При этом соответствующие вариационные распределения $q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ могут оказаться достаточно близки. Возможным дополнением этого критерия был бы критерий, позволяющий переходить от структуры к структуре, если соответствующие распределения $q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ 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 (1.7),(1.8),(1.9),(1.10),(1.12),(1.14) не являются обобщающими.

*Доказательство.* Задачи (1.7),(1.8),(1.9),(1.10),(1.12) не имеют гиперпараметров $\mathbf{h}$, подлежащих оптимизации, поэтому не могут оптимизировать вариационную оценку.

При использовании валидации на отложенной выборки (1.14) в функцию валидации $Q$ не входит ни один метапараметр, поэтому критерий перебора структур 6 для нее также не выполняется.

□

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

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

Тогда задача (1.13) не является обобщающей.

*Доказательство.* Пусть выполнены условия критерия 6 о переборе структур, и $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ — локальные оптимумы функции $Q$ 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

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

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

Сокращая равные слагаемые в равенстве получим:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda})) = \nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathrm{D}_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\lambda}')),$$

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

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

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

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

Таким образом, метапараметры $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}'$ отличаются лишь на метапараметры $\lambda_1, \lambda_2$ регуляризации ковариационной матрицы $\mathbf{A}^{-1}$. Возьмем в качестве векторов гиперпараметров $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ гиперпараметры, отличающиеся только параметрами распределения структуры:

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

Метапараметры $\lambda_1, \lambda_2$ не влияют на значение функции $Q$ при гиперпараметрах, отличающихся только параметрами распределения структуры, поэтому значение функции $Q$ для них будет неизменно при любых значениях $\lambda_1, \lambda_2$. Приходим к противоречию: значение $Q$ не меняется при изменении метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$.

□

В качестве обобщающей задачи оптимизации предлагается оптимизационную задачу следующего вида:

$$\mathbf{h}^* = \arg\max_{\mathbf{h}} Q = \tag{1.15}$$

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

$$-\lambda^{\text{prior}}_{\mathrm{Q}}\mathrm{D}_{KL}\big(q^*(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f})\big) -$$

$$- \sum_{p' \in \mathbf{P}, \lambda \in \boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{struct}}} \lambda \mathrm{D}_{KL}(\boldsymbol{\Gamma}|p') + \log p(\mathbf{h}|\mathbf{f}),$$

$$q^* = \arg\max_q L = \mathsf{E}_q \log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \lambda_{\mathrm{temp}}, \mathbf{f}) \qquad (L^*)$$

$$-\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}} \mathrm{D}_{KL}\big(q^*(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \lambda_{\mathrm{temp}}, \mathbf{f})\big),$$

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

**Теорема 5.** Пусть:

1) задано непустое множество непрерывных по параметрам распределений на структуре $\mathbf{P}$, где хотя бы одно распределение принадлежит Gumbel-Softmax-распределению.
2) вариационное распределение $q = q_{\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}) q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ является абсолютно непрерывным, плотность которого непрерывна по метапараметрам $\boldsymbol{\lambda}$;
3) задан компакт $U = U_{\boldsymbol{\theta}} \times U_{\mathbf{h}} \times U_{\boldsymbol{\lambda}} \subset \Theta \times \mathbb{H} \times \mathbb{\Lambda}$, где параметры распределений $\mathbf{P} \in \mathbb{\Lambda}$, область $U_{\boldsymbol{\theta}}$ декомпозируется на две области $U_{\boldsymbol{\theta}} = U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}} \times U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}}$;
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 $\mathbf{h}$ оптимальное решение нижней задачи оптимизации $\boldsymbol{\theta}^*$ определено однозначно при любых значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda} \in U_{\lambda}$;
6) область значений метапараметров $\lambda_{\mathrm{likelihood}}^{\mathrm{Q}}, \lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{prior}}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{struct}}, \lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}$ включает отрезок от нуля до единицы;
7) существует значение метапараметров $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\mathrm{likelihood}}^{\mathrm{Q}}$, такое что

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

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

8) существует значение метапараметров $\lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{prior}}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\mathrm{temp}}$, такое что

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

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

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

9) существуют значения метапараметров $\lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{prior}}, \lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{likelihood}}, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_{\mathrm{temp}}$, такие что

$$\max_{\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}} - \min_{\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}} < \frac{\max_{\mathbf{h}} Q - \min_{\mathbf{h}} Q}{\max_{\lambda_{\mathrm{struct}}}}$$

при $\boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{struct}} = 0$.

Тогда задача (1.15) является обобщающей на $U$.

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

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

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

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

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

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

Отсюда следует выполнение критерия 3:

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

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

$$K_2 = \max_{\mathbf{h}} \log\, p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) - \min_{\mathbf{h}} \log\, p(\mathbf{h}|\boldsymbol{\lambda}) + \max_{\mathbf{h}} \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})) -$$

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

$$- \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}} \mathsf{E}_q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w}).$$

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

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

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

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

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

$$= Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) - \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) +$$
$$+ \min_{\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_2)|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})) - D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})) >$$
$$> K_2 - \log p(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) + \log p(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \min_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda}))$$
$$-D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})).$$

Рассмотрим разность:

$$\min_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})) - D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda})) =$$

$$= \min_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\boldsymbol{\lambda})) - \frac{1}{\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_1)\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w}) +$$

$$+ \max_{\boldsymbol{\theta}}(\frac{1}{\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w}) - D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda}))) \geq$$

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

$$+ \max_{\boldsymbol{\theta}}(\min_{\boldsymbol{\theta}'} \frac{1}{\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}')}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w}) - D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda}))) \geq$$

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

$$+ \min_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}}}\mathsf{E}_{q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})}\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w}) - \min_{\boldsymbol{\theta}} D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1,\boldsymbol{\lambda}))) \geq$$

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

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

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

Докажем критерий 5. Пусть $\lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{likelihood}} = \lambda_{\mathrm{L}}^{\mathrm{prior}} = \lambda_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{prior}} > 0$, $\boldsymbol{\lambda}_{\mathrm{Q}}^{\mathrm{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда функции $L$ и $Q$ можно записать как:

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

что и требовалось доказать.

Докажем критерий 6. Пусть задан вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}$, удовлетворяющий девятому условию теоремы и $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$. Возьмем в качестве $K_4$ следующее выражение:

$$K_4 = \frac{\max_{\mathbf{h}} Q - \min_{\mathbf{h}} Q}{\max_{\lambda_{\mathrm{struct}}}}.$$

Пусть вектор метапараметров $\boldsymbol{\lambda}'$ отличается от $\boldsymbol{\lambda}$ лишь метапараметром $\boldsymbol{\lambda}_{\text{struct}}$. Для обоих векторов метапараметров нижняя задача оптимизации $L$ совпадает, поэтому выполняется первое условие критерия.

Без ограничения общности предположим, что $Q(\mathbf{h}_1) - Q(\mathbf{h}_2) > 0$ при $\boldsymbol{\lambda}$. Также без ограничения общности будем полгаать, что множестве $\mathbf{P}$ состоит только из одного распределения на структуре $\boldsymbol{\Gamma}$, равного распределению на структуре $p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda})$.

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

$$Q(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}') - Q(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}') = Q(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \lambda'_{\text{struct}} D_{\text{KL}}(p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_2, \boldsymbol{\lambda}')|p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}_1, \boldsymbol{\lambda}')) >$$

$$> Q(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2|\boldsymbol{\lambda}) + \lambda'_{\text{struct}} K_4 = Q(\mathbf{h}_1|\boldsymbol{\lambda}) - Q(\mathbf{h}_2 + |\boldsymbol{\lambda}) + \max_{\mathbf{h}} Q - \min_{\mathbf{h}} Q = 0,$$

что и требовалось доказать.

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

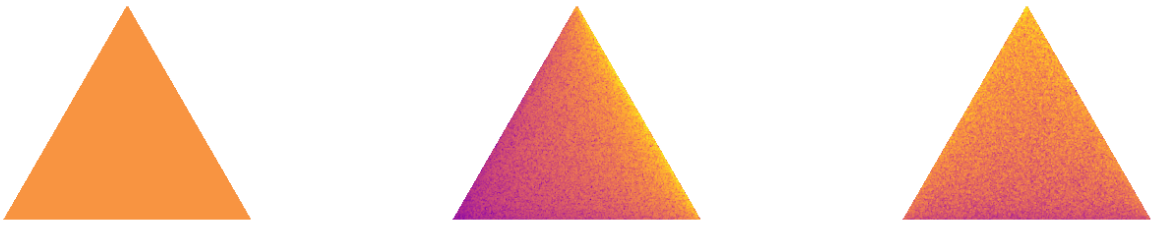
Метапараметрами данной задачи (1.15) являются коэффициенты $\lambda_{\text{Q}}^{\text{prior}}, \lambda_{\text{L}}^{\text{prior}}$, отвечающие за регуляризацию верхней и нижней задачи оптимизации, коэффициент $\lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}}$ отвечает за максимизацию правдоподобия, а также параметры распрделений $\mathbf{P}$ и вектор коэффициентов перед ними $\boldsymbol{\lambda}_{\text{Q}}^{\text{struct}}$.

В предельном случае, когда температура $\lambda_{\text{temp}}$ 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 $Q$, когда $\lambda_{\text{likelihood}}^{\text{Q}} = \lambda_{\text{Q}}^{\text{prior}} = 0$. Пусть модель использует один структурный параметр, в качестве априорного распределения на структуре задано распределение Gumbel-Softmax с $\lambda_{\text{temp}} = 1.0$. Пусть в качестве множества распределений $\mathbf{P}$ 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 $\boldsymbol{\lambda}_{\text{Q}}^{\text{struct}}$ 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 $Q$ от гиперпараметра $\mathbf{s}$ при различных значениях метапараметров $\boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}}$. Темные точки на графике соответсвуют наименее предпочтительным значениям гиперпараметра. а) $\boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = [0, 0]$, б) $\boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = [1, 0]$, в) $\boldsymbol{\lambda}_Q^{\text{struct}} = [1, 1]$.

## 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 $m \gg 0$, $\lambda^L_{\text{prior}} > 0$, $\frac{m}{\lambda^L_{\text{prior}}} \in \mathbb{N}$, $\frac{m}{\lambda^L_{\text{prior}}} \gg 0$. Тогда оптимизация функции

$$L = \mathsf{E}_q \log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}) - \lambda^L_{\text{prior}} \mathrm{D}_{KL}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}})$$

эквивалентна оптимизации вариационной оценки обоснованности $\mathsf{E}_q \log\, p(\hat{\mathbf{y}}|\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) - \mathrm{D}_{KL}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \lambda_{\text{temp}})$ для произвольной случайной подвыборки $\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{X}}$ мощности $\frac{m}{\lambda^L_{\text{prior}}}$ из генеральной совопкупности.

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

$$\frac{1}{m}L = \frac{1}{m}\mathsf{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\lambda^L_{\text{prior}}}{m} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})). \quad (1.16)$$

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

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

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

$$\frac{1}{m_0}\mathsf{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{m_0} D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) \approx \quad (1.17)$$

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

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

Таким образом, задачи оптимизации функций (1.16),(1.17) совпадают, что и требовалось доказать. □

Таким образом, для достаточно большого $m$ и $\lambda_L^{\text{prior}} > 0, \lambda_L^{\text{prior}} \neq 1$ оптимизация параметров и гиперпараметров эквивалентна нахождению оценки обоснованности для выборки другой мощности: чем выше значение $\lambda_L^{\text{prior}}$, 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 $\lambda^Q_{\text{likelihood}} = \lambda^L_{\text{prior}} = \lambda^Q_{\text{prior}} = 1, \boldsymbol{\lambda}^Q_{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда:

1. Задача оптимизации (1.15) доставляет максимум апостериорной вероятности гиперпараметров с использованием вариационной оценки обоснованности:
$$\log\hat{p}(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f}) + \log p(\mathbf{h}|\mathbf{f}) \to \max_{\mathbf{h}}.$$

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

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

*Доказательство.* При $\lambda^Q_{\text{likelihood}} = \lambda^L_{\text{prior}} = 1$ как верхняя, так и нижняя задачи оптимизации (1.15) эквивалентны оптимизации вариационной оценки обоснованности, поэтому первое утверждение выполняется.

Докажем второе утвреждение. Рассмотрим логарифм обоснованности модели:

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

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

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

Из данного равенства следует:

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

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

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

Докажем третье утверждение. Т.к. вариационное распределение $q$ декомпозируется на $q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}), q(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}})$, апостериорное распределение $p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}))$ декомпозируется на $p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$, $p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$, поэтому достижимо значение нулевое значение дивергенции: $D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})|p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})) = 0$. Она представима в следующем виде:

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

$$+D_{\mathrm{KL}}(q(\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}})|p(\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})).$$

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. Калибруя верхнюю оптимизацию;
2. Калибруя нижнюю оптимизацию;
3. Калибруя обе оптимизации.

Последний вариант соответствует теореме о калибровке. Рассмотрим различие варианта 1 и 2 на примере.

**Пример 3.** Пусть задана модель и выборка и мы хотим уменьшить вес априорного распределения. В случае, если мы калибруем нижнюю оптимизацию (->0), на первом уровне задача совпадает с задачей поиска наиболее правдоподобных параметров, при этом на верхнем уровне мы ищем те параметры, которые отвечают наилучшим с точки зрения обоснованности.

Если мы калибруем верхнюю оптимизацию или обе оптимизации, то это приведет к поиску наиболее правдоподобных параметров и гиперпараметров.

Таким образом, основная разница между калибровкой верхней и нижней оптимизации заключается в следующем: при калибровке нижнего уровня мы получаем модель, соответствующую критерию максимального правдоподобия. В случае калибровки верхнего уровня мы получаем модель с параметрами, полученными в соответствии с методом максимальной обоснованности, но при минимально возможной регуляризации априорным распределением.

**Теорема 8.** Пусть $\frac{\lambda^Q_{\text{prior}}}{\lambda^Q_{\text{likelihood}}} = \lambda^L_{\text{prior}}$. Тогда задачи оптимизации (1.15) представима в виде одноуровневой задачи оптимизации:

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

$$-\lambda^{\text{prior}}_{\text{Q}} \text{D}_{KL}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f})\big) -$$

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

*Доказательство.* Параметры вариационного распределения $q$ не зависят от слагаемых вида $\log p(\mathbf{h}|\mathbf{f})$ и $\text{D}_{KL}(\boldsymbol{\Gamma}|p'), p' \in \mathbf{P}$, поэтому нижняя задача оптимизации:

$$\log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f}) -$$

$$-\lambda^{\text{prior}}_{\text{L}} \text{D}_{KL}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f})\big) \to \max_{\boldsymbol{\theta}}$$

эквивалентна следующей задаче:

$$\log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma},\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f}) -$$

$$-\lambda^{\text{prior}}_{\text{L}} \text{D}_{KL}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f})\big) \to \max_{\boldsymbol{\theta}}$$

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

для любого вектора $\boldsymbol{\lambda}^{\text{struct}}_{\text{Q}}$. Т.к. выполнено равенство $\frac{\lambda^Q_{\text{prior}}}{\lambda^Q_{\text{likelihood}}} = \lambda^L_{\text{prior}}$, то нижняя задача оптимизации экивалентна следующей задаче:

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

$$-\lambda^{\text{prior}}_{\text{Q}} \text{D}_{KL}\big(q(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\boldsymbol{\theta})||p(\mathbf{w},\boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h},\lambda_{\text{temp}},\mathbf{f})\big) -$$

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

а значит верхняя и нижняя задачи совпадают:

$$\mathbf{h} = \arg\max_{\mathbf{h}'} Q(\mathbf{h}, \boldsymbol{\theta}^*(\mathbf{h}')),$$

где

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

Из свойства

$$\max_{\mathbf{h}} \max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h}) = \max_{\boldsymbol{\theta},\mathbf{h}} Q(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{h})$$

следует доказательство теоремы. □

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

$$\mathsf{E}_q \log\, p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}_1 \lambda_{\text{temp}}, \mathbf{f}) \approx \sum_{r=1}^{R} \log p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\alpha}_q \circ \hat{\epsilon}_r, \hat{\mathbf{\Gamma}}_r, \mathbf{X}),$$

$$D_{\text{KL}}\left(q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Gamma}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}}) | p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})\right) \approx \sum_{r=1}^{R} \Big( \log q_{\mathbf{\Gamma}}(\hat{\mathbf{\Gamma}}_r|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{\Gamma}})) - p(\hat{\mathbf{\Gamma}}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda}) \Big),$$

$$D_{\text{KL}}\left(q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \mathbf{\Gamma}) | p(\mathbf{w}|\mathbf{\Gamma}, \mathbf{h})\right) = \sum_{(j,k)\in E} \sum_{l=1}^{K^{j,k}} D_{\text{KL}} \Big( q_{\mathbf{w}}(\mathbf{w}_l^{j,k}|\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}, \gamma_l^{j,k}) | p(\mathbf{w}_l^{j,k}|\gamma_l^{j,k}, \mathbf{h}) \Big) \approx$$

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

$$- |\mathbf{w}_l^{j,k}| + \log \frac{|\hat{\gamma}^{j,k}[l]_r \mathbf{A}_l^{j,k}|}{|(\mathbf{A}_l^{j,k})_q|}),$$

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

Для решения двухуровневой задачи предлагается использовать градиентные методы.

**Теорема 9.** Пусть $T$ — оператор градиентного спуска. Пусть $Q, L$ — локально выпуклы и непрерывны в некоторой области $U_W \times U_\Gamma \times U_H \times U_\lambda \subset \mathbb{W} \times \mathbb{\Gamma} \times \mathbb{H} \times \mathbb{\Lambda}$, при этом $U_H \times U_\lambda$ — компакт. Тогда решение задачи градиентной оптимизации

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

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

*Доказательство.* TODO □

Следующие теоремы посвящены ассимптотическим свойствам представленной обобщающей задачи.

**Теорема 10.** Пусть $\lambda^Q_{\text{likelihood}} = \lambda^L_{\text{prior}} > 0, \boldsymbol{\lambda}^Q_{\text{struct}} = \mathbf{0}$. Тогда предел оптимизации

$$\lim_{\lambda^Q_{\text{prior}} \to \infty} \lim_{\eta \to \infty} T^\eta\big(Q, \mathbf{h}, T^\eta(L, \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{h})\big)$$

доставляет минимум параметрической сложности.

*Доказательство.* TODO □

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

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

*Доказательство.* TODO □

TODO: выводы **Эксперимент: пример 1**
**Эксперимент: пример 2**

## Список основных обозначений

$\mathbf{x}_i$ — вектор признакового описания $i$-го объекта
$y_i$ — метка $i$-го объекта
$\mathfrak{D}$ — выборка
$\mathbf{X}$ — матрица, содержащая признаковое описание объектов выборки
$\mathbf{y}$ — вектор меток объектов выборки
$m$ — количество объектов в выборке
$n$ — количество признаков в признаковом описании объекта
$\mathbb{X}$ — 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 $(j, k)$
$\Delta^K$ — симплекс на $K$ вершинах
$\bar{\Delta}^K$ — множество вершин симплекса на $K$ вершинах
$\mathfrak{F}$ — параметрическое семейство моделей
$U$ — область определения оптимизационной задачи
$\mathbf{w}$ — параметры модели
$\mathbb{W}$ — пространство параметров модели
$U_{\mathbf{w}}$ — область определения параметров модели
$\boldsymbol{\Gamma}$ — структура модели
$\mathbb{\Gamma}$ — множество значений структуры модели
$U_{\boldsymbol{\Gamma}}$ — область определения параметров модели
$\mathbf{h}$ — гиперпараметры модели
$\mathbb{H}$ — пространство гиперпараметров модели
$U_{\mathbf{h}}$ — область определения гиперпараметров
$\boldsymbol{\theta}$ — вариационные параметры модели
$\Theta$ — пространство вариационных параметров модели
$U_{\boldsymbol{\theta}}$ — область определения вариационных параметров модели
$\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}$ — вариационные параметры модели, аппроксимирующие параметры модели
$\Theta_{\mathbf{w}}$ — пространство вариационных параметров модели, аппроксимирующих параметры модели
$U_{\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{w}}}$ — область определения вариационных параметров модели, аппроксимирующих параметры модели
$\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}$ — вариационные параметры модели, аппроксимирующие структуру модели
$\Theta_{\boldsymbol{\Gamma}}$ — пространство вариационных параметров модели, аппроксимирующих структуру модели
$U_{\boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Gamma}}}$ — область определения вариационных параметров модели, аппроксимирующих структуру модели

$\boldsymbol{\lambda}$ — вектор метапараметров
$\lambda$ — пространство метапараметров
$U_{\boldsymbol{\lambda}}$ — область определения метапараметров
$p(\mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma}|\mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — 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
$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\Gamma})$ — правдоподобие выборки
$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\lambda})$ — 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
$\mathsf{S}$ — энтропия распределения
$M$ — множество моделей без общей параметризации