Байесовский выбор наиболее правдоподобной структуры модели глубокого обучения

О. Ю. Бахтеев

Научный руководитель: д.ф.-м.н. В.В. Стрижов Московский Физико-Технический Институт (Государственный Университет)

> Интеллектуализация обработки информации ИОИ-2018 11.10.2018

Задача выбора структуры модели

Рассматривается задача регресси или классификации:

$$f(\mathbf{x}): \mathbb{R}^n \to \mathbb{Y}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{X}, |\mathbf{X}| = m.$$

Рассмотрим задачу выбора структуры для однослойной нейросети в задаче классификации:

$$f(\mathbf{x}) = \mathsf{softmax}(\mathbf{W}^\mathsf{T} \mathbf{f}_1(\mathbf{x})),$$

$$\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) = \gamma_{0,1}^1 \mathbf{g}_{0,1}^1(\mathbf{x}) + \dots + \gamma_{0,1}^K \mathbf{g}_{0,1}^K(\mathbf{x}) = \gamma_{0,1}^1 \mathrm{tanh}(\mathbf{W}_1^\mathsf{T}\mathbf{x}) + \dots + \gamma_{0,1}^K \mathrm{tanh}(\mathbf{W}_K^\mathsf{T}\mathbf{x}),$$

где $\mathbf{W}_1,\dots,\mathbf{W}_K$ — матрицы одинаковой размерности с различным количеством нулевых строк, $\{\mathbf{g}_{0,1}^i\}_{i=1}^K$ — базовые функции для скрытого слоя нейросети.

Структура модели Г = $[\gamma_{0,1}]$ определяется вершиной булевого K-мерного куба.

Задача выбора структуры модели: усложненный пример

Рассмотрим задачу выбора структуры для однослойной нейросети с неизвестной функцией активации:

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{softmax}(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{f}_{K+1}(\mathbf{x})),$$

$$\mathbf{f}_{K+1}(\mathbf{x}) = \gamma_{1,K+1}\mathbf{g}_{1,K+1}(\mathbf{x}) + \dots + \gamma_{K,K+1}\mathbf{g}_{K,K}(\mathbf{x}) = \gamma_{1,K+1}\mathbf{f}_{1}(\mathbf{x}) + \dots + \gamma_{K,K+1}\mathbf{f}_{K}(\mathbf{x}),$$

$$\mathbf{f}_{i}(\mathbf{x}) = \gamma_{0,i}^{1}\mathbf{g}_{0,i}^{1}(\mathbf{x}) + \gamma_{0,i}^{2}\mathbf{g}_{0,i}^{2}(\mathbf{x}) = \gamma_{0,i}^{1}\operatorname{tanh}(\mathbf{W}_{i}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}) + \gamma_{0,i}^{2}\sigma(\mathbf{W}_{i}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}), \quad i = 1, \dots K.$$

Структура модели Г $= [\gamma_0, \dots, \gamma_{K+1}]$ определяется вершиной булевого K-мерного куба.

Пример для более сложной структуры. Сложная нейросеть.

2018

4 / 27

Выбор структуры модели: базовые определия

- Модель глубокого обучения суперпозиция дифференцируемых функций.
- Качество модели определяется параметрами модели.
- Оптимизация параметров определяется гиперпараметрами и структурными параметрами модели.
- Гиперпараметры параметры распределения параметров модели.
- Структурные параметры параметры, определяющие структуры модели.

Выбор структуры модели глубокого обучения

Цель работы:

Развитие теории исследования метода байесовскогго выбора модели глубокого обучения Задачи:

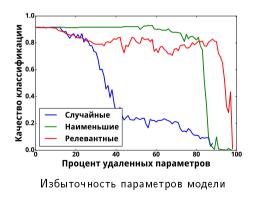
- Предложить алгоритм оптимизации параметров, гиперпараметров и структурных параметров моделей глубокого обучения.
- Предожить метод выбора ниболее правдоподобной структурной модели.
- Исследовать свойства оптимизационных алгоритмов выбора модели.

Основные проблемы

- Многоэкстремальность задачи оптимизации параметров модели.
- Вычислительная сложность оптимизации.
- Большое количество параметров и гиперпараметров.

Проблемы обучения сетей

Правдоподобие моделей с избыточным количеством параметров не меняется при удалении параметров.



Исходная модель классификации 5. 9.0 8.0 Удалено 60% Качество ₆ 0.8 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 Дисперсия шума

Неустойчивость модели

Правдоподобие модели

Пусть заданы априорное распределение параметров и структуры $p(W, \Gamma)$. Модель f оптимальна, если достигается максимум правдоподобия модели:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = \int_{\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}) p(\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}) d\mathbf{W} d\mathbf{\Gamma}.$$



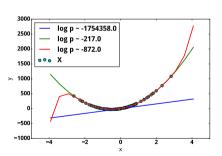


Схема выбора модели по правдоподобию

Пример: полиномы

Выбор оптимальной модели

Основные проблемы выбора оптимальной модели

- Интеграл правдоподобия невычислим аналитически.
- Задача оптимизации многоэкстремальна и невыпукла.

Требуется

Предложить метод поиска субоптимального решения задачи оптимизации, позвяоляюещго проводить оптимизацию в различных режимах:

- Оптимизация правдоподобия.
- Последовательное увеличиение сложности модели.
- Последовательное снижение сложности модели.
- Полный перебор вариантов структуры модели.

Вариационная нижняя оценка правдоподобия

Правдоподобие модели:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \mathbf{m}, c_{\mathsf{temp}}) = \\ \int_{\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}) p(\mathbf{W}|\mathbf{A}, \mathbf{\Gamma}) p(\mathbf{\Gamma}|\mathbf{m}, c_{\mathsf{temp}}) d\mathbf{W} d\mathbf{\Gamma}.$$

Пусть q — непрерывное распределение.

$$\begin{split} \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{A},\mathbf{m},c_{\mathsf{temp}}) \geq \\ \geq \int q(\mathbf{W}) \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1},c_{\mathsf{temp}}) d\mathbf{W} d\mathbf{\Gamma} - \\ - \int q(\mathbf{w}) \log \frac{p(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1},\mathbf{m},c_{\mathsf{temp}})}{q(\mathbf{W},\mathbf{\Gamma})} d\mathbf{W} d\mathbf{\Gamma} = \\ \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1},c_{\mathsf{temp}}) - \mathbb{D}_{KL}(p(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1},\mathbf{m},c_{\mathsf{temp}}) || q(\mathbf{W},\mathbf{\Gamma})). \end{split}$$

Постановка задачи

TODO: ослабить? Как писать заголовки для этих слайдов? TODO: Что мы считаем моделью?

Задан граф V, E.

Для каждого ребра $(j,k)\in E$ определен вектор **базовых функций \mathbf{g}_{j,k}** мощностью $K_{j,k}$. Граф V,E со множеством функций $\mathfrak{G}=\{\mathbf{g}_{j,k}\}_{(j,k)\in E}$ называется **моделью**, если функция, задаваемая рекурсивно как

$$f_j(\mathbf{x}) = \sum_{k \in Adj(v_j)} \langle \gamma_{j,k}, \mathbf{g}_{j,k} \rangle (f_k(\mathbf{x})), \quad f_0(\mathbf{x}) = \mathbf{x},$$

является непрерывной дифференцируемой функцией из \mathbb{R}^n во множество \mathbb{Y} при любых значениях векторов γ .

Обозначим за вектор **параметров модели W** конкатенацию параметров всех подмоделей $\{f_j\}_{j=1}^{|V|}$.

Распределение на структуре

Пусть для каждого ребра (j,k) задан нормированный положительный вектор $\gamma_{j,k} \in \mathbb{R}_+^{|K_{j,k}|}$, определяющий веса баховых функций из $\mathbf{g}(j,k)$. Будем считать, что вектор $\gamma_{j,k}$ распределен по распределению Gumbel-Softmax:

$$p(\gamma) = (K_{j,k} - 1)! c_{\mathsf{temp}}^{K_{j,k} - 1} \left(\prod_{h=1}^{K_{j,k} - 1} \alpha_h \gamma_h^{-c_{\mathsf{temp}} - 1} \right) \left(\sum_{h=1}^{u} \alpha_h \gamma_h^{-c_{\mathsf{temp}}} \right),$$

где $lpha_1,\ldots,lpha_h$ — параметры сдвига распределения, c_{temp} — температура распределения.

Обозначим за **структуру** модели Γ множество всех векторов $\gamma_{j,k}$. Обозначим за \mathbf{m} параметры сдвига всех распределений, соответствующих структуре Γ .

Вариационный вывод: распределение структурных параметров

Для каждого элемента структуры γ зададим распределение весов базовых функций по распределению Gumbel-Softmax с параметрами $\hat{\alpha}_1,\ldots,\hat{\alpha}_u,c$, где параметр c — общий для всех весов.

Для реализации \emph{h} -й компоненты случайной величины γ справедлива следующая формула:

$$\hat{\gamma}^h = \exp\left(\log\left(\alpha_h + \mathsf{Gum}_h\right)c^{-1}\right) \sum_{h=1}^I \exp\left(\log\left(\alpha_I + \mathsf{Gum}_I\right)c^{-1}\right),$$

где Gum $\sim -\log(-\log \mathcal{U}(0,1))$.

Вариационный вывод: распределение параметров

Пусть $\mathbf{W} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})$ и структура модели $\mathbf{\Gamma}$ определена однозначно. Пусть $q_{\mathbf{W}} = \mathcal{N}(\mu_q, \mathbf{A}_q^{-1}), \quad \boldsymbol{\theta} = [\mu_q, \mathbf{A}_q^{-1}].$ Тогда вариационная оценка имеет вид:

$$\int_{\mathbf{W}} q(\mathbf{W}) \log p(\mathfrak{D}, \mathbf{W}, \mathbf{A}^{-1}) d\mathbf{W} - D_{\mathsf{KL}} (q_{\mathbf{W}}(\mathbf{W}) || p(\mathbf{W} | \mathbf{A}^{-1})) \simeq \frac{m}{2}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \log p(\mathbf{x}_{i}|\mathbf{W}_{i}) - D_{\mathsf{KL}}(q_{\mathbf{W}}(\mathbf{W})||p(\mathbf{W}|\mathbf{A}^{-1})) = -L(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{A}^{-1}, \mathfrak{D}),$$

где $\mathbf{W}_i \sim q_{\mathbf{W}}$.

Дивергенция $D_{\mathsf{KL}}(q_{\mathsf{W}}(\mathsf{w})||p(\mathsf{W}|\mathsf{A}^{-1}))$ вычисляется аналитически:

$$D_{\mathsf{KL}} \big(q_{\mathbf{W}}(\mathbf{W}) || p(\mathbf{w} | \mathbf{A}^{-1}) \big) = \frac{1}{2} \big(\mathsf{tr}(\mathbf{A} \mathbf{A}_q^{-1}) + \boldsymbol{\mu}_q^\mathsf{T} \mathbf{A} \boldsymbol{\mu}_q - n + \mathsf{ln} \ |\mathbf{A}^{-1}| - \mathsf{ln} \ |\mathbf{A}_q^{-1}| \big).$$

Вариационная оценка на основе мультистарта

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{A}) \geq \mathsf{E}_{q(\mathbf{W})} \log \, p(\mathbf{y},\mathbf{W}|\mathbf{X},\mathbf{A}^{-1}) - \mathsf{E}_{q_{\mathbf{W}}}(-\log(q_{\mathbf{W}})).$$

Теорема [Бахтеев, 2016]. Пусть L — функция потерь, градиент которой — непрерывно-дифференцируемая функция с константой Липшица \mathcal{C} . Пусть $\boldsymbol{\theta} = [\mathbf{W}^1, \dots, \mathbf{W}^k]$ — начальные приближения оптимизации модели. Пусть β — шаг градиентного спуска, такой что:

$$\beta < \frac{1}{C},$$

$$\quad \circ \ \beta^{(-1)} > \mathsf{max}_{r \in \{1, \dots, k\}} \ \lambda_{\mathsf{max}}(\mathsf{H}(\mathsf{W}^r)).$$

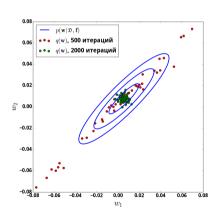
Тогда

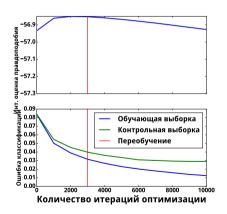
$$\mathsf{E}_{q_{\mathsf{W}}^{\tau}}(-\log(q_{\mathsf{W}}^{\tau})) - \mathsf{E}_{q_{\mathsf{W}}^{\tau-1}}(-\log(q_{\mathsf{W}}^{\tau-1})) \sim \frac{1}{k} \sum_{r=1}^{k} \left(\beta \mathit{Tr}[\mathsf{H}(\mathsf{W}^{r})] - \beta^{2} \mathit{Tr}[\mathsf{H}(\mathsf{W}^{r})\mathsf{H}(\mathsf{w}^{r})]\right) + o_{\beta \to 0}(1),$$

где ${f H}$ — гессиан функции потерь L, $q_{f W}^{ au}$ — распределение $q_{f W}^{ au}$ в момент оптимизации au.

Вариационная оценка с использованием градиентного спуска

Максимизация вариационной оценки эквивалентна минимизации $D_{KL}(q(\mathbf{W})||p(\mathbf{W}|\mathfrak{D},\mathbf{A}^{-1}))$. Градиентный спуск не минимизирует $D_{\mathsf{KL}}(q(\mathsf{W})||p(\mathsf{W}|\mathfrak{D},\mathsf{A}^{-1}))$.





Оптимизация параметров вариационного распределения

Оптимизацию параметров вариационного распределения будем проводить по следующему функционалу:

$$L = \mathsf{E}_q \log p(\mathsf{y}|\mathsf{X},\mathsf{W},\mathsf{\Gamma}.\mathsf{A}^{-1},c_{\mathsf{temp}}) - c_{\mathsf{reg}} \mathsf{D}_{\mathsf{KL}}(p(\mathsf{w},\mathsf{\Gamma}|\mathsf{A}^{-1},\mathsf{m},c_{\mathsf{temp}}) || q(\mathsf{W}),q(\mathsf{\Gamma})) \to \mathsf{max}$$

Теорема

Пусть $c_{\text{reg}} > 0$. Тогда функция L сходится по вероятности к вариационной нижней оценке правдоподобия для подвыборки $\mathfrak D$ мощностью $c_{\text{reg}} \, m$:

$$L \to^{p} c_{\text{reg}} m \int q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}) \log \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \mathbf{m}, c_{\text{temp}})}{q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma})} d\mathbf{W} d\mathbf{\Gamma}$$

Теорема

Пусть $c_{\rm reg}>0$. При устремлении $c_{\rm temp}$ к нулю задача становится эквивалентна дискретной задаче оптимизации:

$$\underset{\mathbf{A},\{\gamma_{j,k}\in\Delta^{K_{j,k}-1},(j,k)\in\mathcal{E}\}}{\operatorname{arg max}} \mathbb{E}_{q}|_{\text{og }p}(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{W},\mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1},c_{\operatorname{temp}}) - c_{\operatorname{reg}}\mathsf{D}_{\mathit{KL}}(p(\mathbf{w},\mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1},\mathbf{m},c_{\operatorname{temp}})||q(\mathbf{W}),q(\mathbf{\Gamma})),$$

где $\Delta^{K_{j,k}-1}$ — множество векторов, соответствующих вершинам $(K_{i,k}-1)$ -сипмлекса.

Оптимизация параметров априорного распределения

Оптимизацию параметров априорного распределения будем проводить по следующему функционалу:

$$Q = c_{\mathsf{train}} \mathsf{E}_q \mathsf{log} \ p(\mathsf{y}|\mathsf{X}, \mathsf{W}, \mathsf{\Gamma}.\mathsf{A}^{-1}, c_{\mathsf{prior}}) - c_{\mathsf{prior}} \mathsf{D}_{\mathsf{KL}}(p(\mathsf{W}, \mathsf{\Gamma}|\mathsf{A}^{-1}, \mathsf{m}, c_{\mathsf{temp}}) || q(\mathsf{W}, \mathsf{\Gamma})) - \\ - c_{\mathsf{comb}} \sum_{p' \in \mathsf{P}} \mathsf{D}_{\mathsf{KL}}(\mathsf{\Gamma}|p') \to \mathsf{max},$$

где Р — множество (возможно пустое) распределений на структуре модели.

Общая задача оптимизации

Общая задача оптимизации — двухуровневая:

$$\begin{split} \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{m}} &= \arg\max_{\mathbf{A}, \mathbf{m}} Q = \\ &= c_{\mathsf{train}} \mathsf{E}_{\hat{q}} \mathsf{log} \; p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\mathsf{prior}}) - c_{\mathsf{prior}} \mathsf{D}_{\mathit{KL}}(p(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\mathsf{temp}}) || \hat{q}(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma})) - \\ &- c_{\mathsf{comb}} \sum_{p' \in \mathsf{P}} \mathsf{D}_{\mathit{KL}}(\mathbf{\Gamma}|p'), \end{split}$$

при

$$\hat{q} = \arg\max_{q} L = \mathsf{E}_q \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}.\mathbf{A}^{-1}, c_{\mathsf{temp}}) - c_{\mathsf{reg}} \mathsf{D}_{\mathit{KL}}(p(\mathbf{w}, \mathbf{\Gamma}|\mathbf{A}^{-1}, \mathbf{m}, c_{\mathsf{temp}}) || q(\mathbf{W}), q(\mathbf{\Gamma}))$$

Оператор оптимизации

Обозначим за \mathbf{h} гиперпараметры \mathbf{A}, \mathbf{m} .

Обозначим за heta параметры распределений $q_{\mathbf{W}}, q_{\mathbf{\Gamma}}$.

Определение

Оператором T назовем оператор стохастического градиентного спуска, производящий η шагов оптимизации:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = T \circ T \circ \cdots \circ T(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{A}^{-1}) = T^{\eta}(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{A}^{-1}), \tag{1}$$

где

$$T(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{A}^{-1}) = \boldsymbol{\theta} - \beta \nabla L(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{A}^{-1})|_{\widehat{\mathfrak{D}}},$$

 γ — длина шага градиентного спуска, θ_0 — начальное значение параметров θ , $\hat{\mathfrak{D}}$ — случайная подвыборка исходной выборки \mathfrak{D} .

начальное значение параметров $oldsymbol{ heta}.$

Оптимизация гиперпараметров

Перепишем итоговую задачу оптимизации:

$$\hat{\mathbf{h}} = \mathop{\mathsf{arg\,max}}_{\mathbf{h}} \mathcal{Q}(\mathcal{T}^{\eta}(oldsymbol{ heta}_0, \mathbf{A}^{-1})),$$

где $heta_0$ — н

Утверждение, Luketina et al., 2016

Пусть функции L и Q являются дважды дифференцируемыми и выпуклыми. Пусть гессиан функции функции L можно аппроксимировать единичной матрицей:

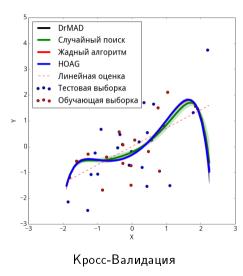
$$H(L, \theta) \approx I$$
.

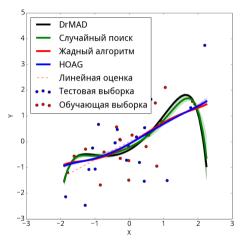
Тогда допустима следующая оптимизация гиперпараметров:

$$\mathbf{h}' = \mathbf{h} - \beta^h \nabla_{\mathbf{h}} Q(T(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{h}),$$

где β^h — шаг оптимизации гиперпараметров.

Оптимизация гиперпараметров: пример





Вариационная оценка

Оптимизация правдоподобия модели

Теорема

Пусть существуют параметры распределения $q(\mathbf{W},\mathbf{\Gamma})$, такие что

 $D_{\mathsf{KL}}(q(\mathsf{W}, \mathbf{\Gamma})|p(\mathsf{W}, \mathbf{\Gamma}|\mathsf{y}, \mathsf{X}, \mathsf{A}, \mathsf{m}, c_{\mathsf{temp}})) = 0.$

Тогда двухуровневая задача оптимизация эквивалентна исходной задаче оптимизации правдоподобия модели:

$$\underset{\mathbf{A},\mathbf{m}}{\operatorname{arg\,max}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\mathbf{A},\mathbf{m},c_{\operatorname{temp}})$$

при
$$c_{\text{reg}} = c_{\text{prior}} = c_{\text{train}} = 1, c_{\text{comb}} = 0.$$

Обозначим за $F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}, c_{\text{prior}}, c_{\text{comb}}, \mathbf{P}, c_{\text{temp}})$ множество экстремумов функции L при решении задачи двухуровневой оптимизации.

Параметрическая сложность

Назовем параметрической сложностью модели наименьшую дивергенцию между априорным распределением параметров и вариационным распредеделением параметров:

$$C_{\mathsf{param}} = \min_{\mathbf{A}, \mathbf{m}} \mathsf{D}_{\mathsf{KL}}(q(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma}) || p(\mathbf{W}, \mathbf{\Gamma} | \mathbf{A}, \mathbf{m}, c_{\mathsf{temp}})).$$

TODO: надо ли про bits-back?

Теорема

Пусть $f \in F(1, 1, c_{\mathsf{prior}}, 0, \{\}, c_{\mathsf{temp}})$. При устремлении c_{prior} к бесконечности параметрическая сложность модели f устремляется к нулю.

$$\lim_{c_{\mathsf{prior}}\to\infty} C_{\mathsf{param}}(f) = 0$$

Теорема

Пусть $f_1 \in F(1,1,c_{\mathsf{prior}},0,\{\},c_{\mathsf{temp}}), f_2 \in F(1,1,c_{\mathsf{prior}},0,\{\},c'_{\mathsf{temp}}), c_{\mathsf{prior}} < c'_{\mathsf{prior}}$. Пусть вариационные параметры моделей f_1 и f_2 лежат в области U, в которой соответствующие функции L и Q являются локально-выпуклыми. Тогда модель f_1 имеет параметрическую сложность, не большую чем у f_2 .

$$C_{\text{param}}(f_1) \leq C_{\text{param}}(f_2).$$

Структурная сложность

Назовем структурной сложностью модели энтропию вариационного распределения структуры модели:

$$C_{\text{struct}} = -\mathsf{E}_{q_{\Gamma}}\log q_{\Gamma}(\Gamma).$$

Теорема

Пусть $f \in F(c_{\text{reg}}, c_{\text{train}}, c_{\text{prior}}, 0, \{\}, c_{\text{temp}})$. При устремлении c_{temp} к нулю структурная сложность модели f устремляется к нулю.

$$\lim_{c_{\mathsf{temp}}\to\infty} C_{\mathsf{struct}}(f) = 0$$

Теорема

Пусть $f_1 \in F(c_{\mathsf{reg}}, c_{\mathsf{train}}, c_{\mathsf{prior}}, 0, \{\}, c_{\mathsf{temp}}), f_2 = \in \lim_{c'_{\mathsf{temp}} \to \infty} F(c_{\mathsf{reg}}, c_{\mathsf{train}}, c_{\mathsf{prior}}, 0, \{\}, c_{\mathsf{temp}'})$. Пусть вариационные параметры моделей f_1 и f_2 лежат в области U, в которой соответствующие функции L и Q являются локально-выпуклыми. Тогда разница структурных сложностей моделей ограничена выражением:

$$C_{\text{struct}}(f_1) - C_{\text{struct}}(f_2) \leq E_q \log p(y|X, W, \Gamma.A^{-1}, c_{\text{temp}}) - E_q' \log p(y|X, W, \Gamma.A^{-1}, c_{\text{temp}}).$$

Полный перебор

Рассмотрим последовательность $N = \prod_{(j,k) \in E} K_{j,k}$ моделей, полученных в ходе оптимизаций вида:

$$egin{aligned} f_1 &\in F(c_{\mathsf{reg}}, 0, 0, \{\}, 0, c_{\mathsf{temp}}), \ &f_2 &\in F(1, 0, 0, \{q_1(m{\Gamma})\}, 0, c_{\mathsf{temp}}), q_1 \in f_1, \ &f_3 &\in F(1, 0, 0, \{q_1(m{\Gamma}), q_2(m{\Gamma})\}, 0, c_{\mathsf{temp}}), q_2 \in f_2. \end{aligned}$$

TODO: формализовать что такое q_1, q_2

Теорема

Вариационные распределения структур q_{Γ} последовательности $\mathfrak{F}=\{\lim_{c_{\mathrm{temp}}\to 0}f_1,\dots,\lim_{c_{\mathrm{temp}}\to 0}f_N\}$ вырождаются в дельта-функции вида $\delta(\hat{\Gamma})$, где $\hat{\Gamma}$ — точка на декартовом произведении вершин симплексов структуры модели. Вариационные распределения последовательности \mathfrak{F} проходят все возможные комбинации структур модели. ТОDO: пояснить про дискретность структуры?

Заключение

???

Исследование основывается на следующих работах

- Graves A. Practical variational inference for neural networks //Advances in Neural Information Processing Systems. – 2011
- Maclaurin D., Duvenaud D., Adams R. Gradient-based hyperparameter optimization through reversible learning //International Conference on Machine Learning. — 2015
- Luketina J. et al. Scalable gradient-based tuning of continuous regularization hyperparameters //International Conference on Machine Learning. - 2016
- J. Fu et al., DrMAD: Distilling Reverse-Mode Automatic Differentiation for Optimizing Hyperparameters of Deep Neural Networks // IJCAI - 2016
- Pedregosa F. Hyperparameter optimization with approximate gradient //International Conference on Machine Learning. – 2016. –