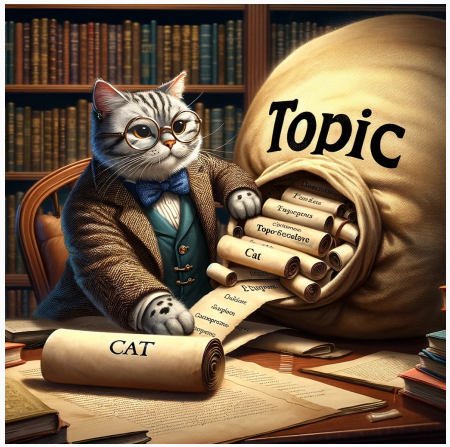
ТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

11 апреля 2024 г.



Random facts:

- 11 апреля — Международный день освобождения узников нацистских концлагерей; 11 апреля 1945 г. был освобождён Бухенвальд, где узники успешно подняли восстание
- 11 апреля 1868 г. Токугава Ёсинобу сдал замок Эдо имперским войскам, чем завершил славную историю сёгуната Токугава
- 11 апреля 1894 г. Великобритания объявила протекторат над Угандой, а 11 апреля 1957 г. согласилась на самоуправление Сингапура; с другой стороны, 11 апреля 1899 г. Испания передала США Пуэрто-Рико
- 11 апреля 1917 г. В.И. Ленин сформулировал «Апрельские тезисы», в которых призвал бороться за республику Советов
- 11 апреля 1961 г. Боб Дилан дебютировал в Нью-Йорке, а 11 апреля 1982 г. в «Комсомольской правде» вышла статья «Рагу из синей птицы», направленная против группы «Машина времени»; впрочем, в редакцию пришло несколько мешков писем в поддержку группы, и серьёзных последствий публикация не имела
- 11 апреля 1967 г. в лондонском Национальном театре прошла премьера первой пьесы Тома Стоппарда «Розенкранц и Гильденстерн мертвы»

Наивный байесовский классификатор

Категоризация текстов

- Классическая задача машинного обучения и information retrieval – категоризация текстов.
- Дан набор текстов, разделённый на категории. Нужно обучить модель и потом уметь категоризовать новые тексты.
- Атрибуты $a_1, a_2, \ldots, a_n$ – это слова, v – тема текста (или атрибут вроде «спам / не спам»).
- Bag-of-words model: забываем про порядок слов, составляем словарь. Теперь документ – это вектор, показывающий, сколько раз каждое слово из словаря в нём встречается.

Naive Bayes

- Заметим, что даже это – сильно упрощённый взгляд: для слов ещё довольно-таки важен порядок, в котором они идут...
- Но и это ещё не всё: получается, что $p(a_1, a_2, \dots, a_n | x = v)$ – это вероятность *в точности такого набора слов* в сообщениях на разные темы. Очевидно, такой статистики взять неоткуда.
- Значит, надо дальше делать упрощающие предположения.
- Наивный байесовский классификатор – самая простая такая модель: давайте предположим, что все слова в словаре условно независимы при условии данной категории.

Naive Bayes

- Иначе говоря:

$$p(a_1, a_2, \dots, a_n | x = v) = p(a_1 | x = v) p(a_2 | x = v) \dots p(a_n | x = v).$$

- Итак, наивный байесовский классификатор выбирает v как

$$v_{NB}(a_1, a_2, \dots, a_n) = \arg\max_{v \in V} p(x = v) \prod_{i=1}^{n} p(a_i | x = v).$$

- В парадигме классификации текстов мы предполагаем, что разные слова в тексте на одну и ту же тему появляются независимо друг от друга. Однако, несмотря на такие бредовые предположения, naive Bayes на практике работает очень даже неплохо (и этому есть разумные объяснения).

Многомерная модель

- Но в деталях реализации наивного байесовского классификатора есть тонкости.
- Сейчас мы рассмотрим два разных подхода к naive Bayes, которые дают разные результаты: мультиномиальный (multinomial) и многомерный (multivariate).

Многомерная модель

- В многомерной модели документ – это вектор бинарных атрибутов, показывающих, встретилось ли в документе то или иное слово.
- Когда мы подсчитываем правдоподобие документа, мы перемножаем вероятности того, что встретилось каждое слово из документа и вероятности того, что не встретилось каждое (словарное) слово, которое не встретилось.
- Получается модель многомерных испытаний Бернулли. Наивное предположение в том, что события «встретилось ли слово» предполагаются независимыми.

Многомерная модель

- Математически: пусть $V = \{w_t\}_{t=1}^{|V|}$ – словарь. Тогда документ d_i – это вектор длины $|V|$, состоящий из битов B_{it}; $B_{it} = 1$ iff слово w_t встречается в документе d_i.
- Правдоподобие принадлежности d_i классу c_j:

$$p(d_i \mid c_j) = \prod_{t=1}^{|V|} \left(B_{it} p(w_t \mid c_j) + (1 - B_{it})(1 - p(w_t \mid c_j))\right).$$

- Для обучения такого классификатора нужно обучить вероятности $p(w_t \mid c_j)$.

Многомерная модель

- Обучение – дело нехитрое: пусть дан набор документов $D = \{d_i\}_{i=1}^{|D|}$, которые уже распределены по классам c_j (возможно, даже вероятностно распределены), дан словарь $V = \{w_t\}_{t=1}^{|V|}$, и мы знаем биты B_{it} (знаем документы).
- Тогда можно подсчитать оптимальные оценки вероятностей того, что то или иное слово встречается в том или ином классе (при помощи лапласовой оценки):

$$p(w_t \mid c_j) = \frac{1 + \sum_{i=1}^{|D|} B_{it} p(c_j \mid d_i)}{2 + \sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i)}.$$

Многомерная модель

- Априорные вероятности классов можно подсчитать как $p(c_j) = \frac{1}{|D|}\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i)$.
- Тогда классификация будет происходить как

$$c = \arg\max_j p(c_j)p(d_i \mid c_j) =$$

$$= \arg\max_j \left(\frac{1}{|D|}\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i)\right) \prod_{t=1}^{|V|} \left(B_{it}p(w_t \mid c_j) + (1 - B_{it})(1 - p(w_t \mid c_j))\right) =$$

$$= \arg\max_j \left(\log(\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i)) + \sum_{t=1}^{|V|} \log\left(B_{it}p(w_t \mid c_j) + (1 - B_{it})(1 - p(w_t \mid c_j))\right)\right).$$

Мультиномиальная модель

- В мультиномиальной модели документ – это последовательность событий. Каждое событие – это случайный выбор одного слова из того самого «bag of words».
- Когда мы подсчитываем правдоподобие документа, мы перемножаем вероятности того, что мы достали из мешка те самые слова, которые встретились в документе. Наивное предположение в том, что мы достаём из мешка разные слова независимо друг от друга.
- Получается мультиномиальная генеративная модель, которая учитывает количество повторений каждого слова, но не учитывает, каких слов *нет* в документе.

Мультиномиальная модель

- Математически: пусть $V = \{w_t\}_{t=1}^{|V|}$ – словарь. Тогда документ d_i – это вектор длины $|d_i|$, состоящий из слов, каждое из которых «вынуто» из словаря с вероятностью $p(w_t \mid c_j)$.
- Правдоподобие принадлежности d_i классу c_j:

$$p(d_i \mid c_j) = p(|d_i|)|d_i|! \prod_{t=1}^{|V|} \frac{1}{N_{it}!} p(w_t \mid c_j)^{N_{it}},$$

  где N_{it} – количество вхождений w_t в d_i.
- Для обучения такого классификатора тоже нужно обучить вероятности $p(w_t \mid c_j)$.

Мультиномиальная модель

- Обучение: пусть дан набор документов $D = \{d_i\}_{i=1}^{|D|}$, которые уже распределены по классам c_j (возможно, даже вероятностно распределены), дан словарь $V = \{w_t\}_{t=1}^{|V|}$, и мы знаем вхождения N_{it}.
- Тогда можно подсчитать апостериорные оценки вероятностей того, что то или иное слово встречается в том или ином классе (не забываем сглаживание – правило Лапласа):

$$p(w_t \mid c_j) = \frac{1 + \sum_{i=1}^{|D|} N_{it} p(c_j \mid d_i)}{|V| + \sum_{s=1}^{|V|} \sum_{i=1}^{|D|} N_{is} p(c_j \mid d_i)}.$$

Мультиномиальная модель

- Априорные вероятности классов можно подсчитать как $p(c_j) = \frac{1}{|D|}\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i)$.
- Тогда классификация будет происходить как

$$
\begin{aligned}
c &= \arg\max_j p(c_j)p(d_i \mid c_j) = \\
&= \arg\max_j \left(\frac{1}{|D|}\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i) \right) p(|d_i|)|d_i|! \prod_{t=1}^{|V|} \frac{1}{N_{it}!} p(w_t \mid c_j)^{N_{it}} = \\
&= \arg\max_j \left(\log \left(\sum_{i=1}^{|D|} p(c_j \mid d_i) \right) + \sum_{t=1}^{|V|} N_{it} \log p(w_t \mid c_j) \right).
\end{aligned}
$$

Как можно обобщить наивный байес

- В наивном байесе есть два сильно упрощающих дело предположения:
  - мы знаем метки тем всех документов;
  - у каждого документа только одна тема.
- Мы сейчас уберём оба эти ограничения.
- Во-первых, что можно сделать, если мы не знаем метки тем, т.е. если датасет неразмеченный?

Кластеризация

- Тогда это превращается в задачу кластеризации.
- Её можно решать EM-алгоритмом (Expectation-Maximization, используется в ситуациях, когда есть много скрытых переменных, причём если бы мы их знали, модель стала бы простой):
  - на E-шаге считаем ожидания того, какой документ какой теме принадлежит;
  - на M-шаге пересчитываем наивным байесом вероятности $p(w \mid t)$ при фиксированных метках.
- Это простое обобщение.

Тематическое моделирование

Как ещё можно обобщить наивный байес

- В прошлый раз мы много говорили о наивном байесе и начали его обобщать.
- Пока обобщили на обучение без учителя (кластеризацию).
- А ещё в наивном байесе у документа только одна тема.
- Но это же не так! На самом деле документ говорит о многих темах (но не слишком многих).
- Давайте попробуем это учесть.

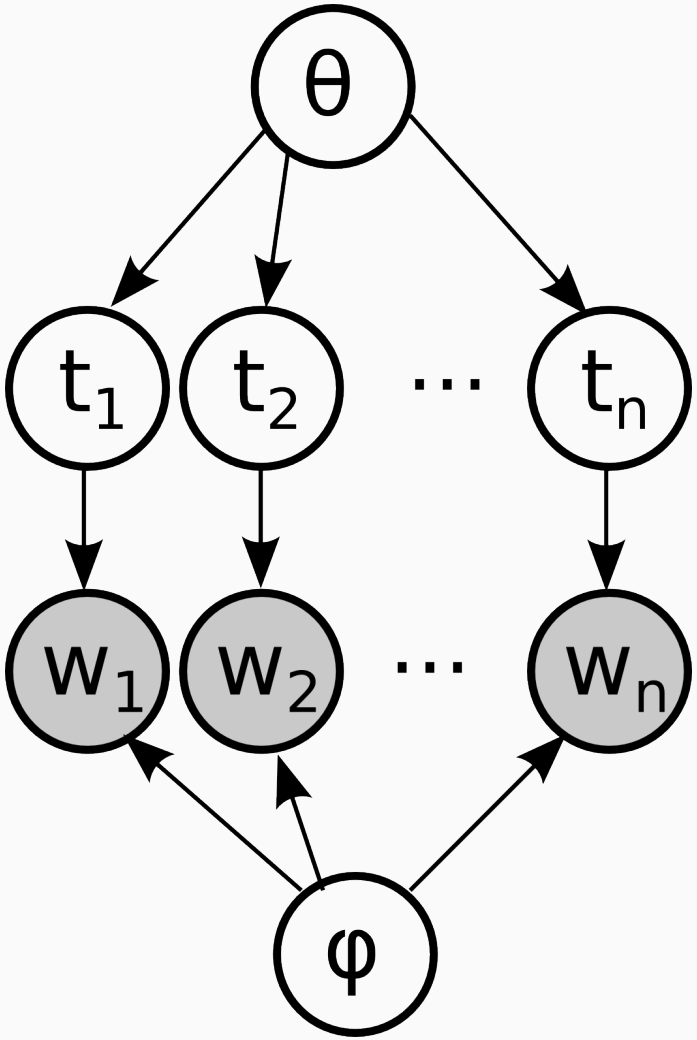
pLSA

- Рассмотрим такую модель:
  - каждое слово в документе d порождается некоторой темой $t \in T$;
  - документ порождается некоторым распределением на темах $p(t \mid d)$;
  - слово порождается именно темой, а не документом: $p(w \mid d, t) = p(w \mid d)$;
  - итого получается такая функция правдоподобия:

$$p(w \mid d) = \sum_{t \in T} p(w \mid t) p(t \mid d).$$

- Эта модель называется probabilistic latent semantic analysis, pLSA (Hoffmann, 1999).

pLSA: графическая модель документа



Пример

- Получается как-то так:

Алгоритм 2. Рациональный EM-алгоритм для тематической модели (2).

Вход: коллекция D, число тем $|T|$, начальные приближения матриц Φ и Θ;
Выход: параметры модели Φ и Θ;

повторять
  обнулить n_{wt}, n_{td}, n_t для всех $d \in D,\ w \in W,\ t \in T$;
  для всех $d \in D,\ w \in d$
    $n_{tdw} := n_{dw}\varphi_{wt}\theta_{td} \,/\, \sum_\tau \varphi_{w\tau}\theta_{\tau d}$ для всех $t \in T$;
    увеличить n_{wt}, n_{td}, n_t на n_{tdw} для всех $t \in T$;
  $\varphi_{wt} := n_{wt}/n_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
  $\theta_{td} := n_{td}/n_d$ для всех $d \in D,\ t \in T$;
пока Φ и Θ не сойдутся;

- Как её обучать? Мы можем оценить $p(w \mid d) = \frac{n_{wd}}{n_d}$, а нужно найти:
  - $\phi_{wt} = p(w \mid t)$;
  - $\theta_{td} = p(t \mid d)$.
- Максимизируем правдоподобие

$$p(D) = \prod_{d \in D} \prod_{w \in d} p(d, w)^{n_{dw}} = \prod_{d \in D} \prod_{w \in d} \left[\sum_{t \in T} p(w \mid t) p(t \mid d) \right]^{n_{dw}}.$$

- Как максимизировать такие правдоподобия?

- EM-алгоритмом. На E-шаге ищем, сколько слов w в документе d из темы t:

$$n_{dwt} = n_{dw} p(t \mid d, w) = n_{dw} \frac{\phi_{wt}\theta_{td}}{\sum_{s \in T} \phi_{ws}\theta_{sd}}.$$

- А на M-шаге пересчитываем параметры модели:

$$n_{wt} = \sum_d n_{dwt}, \qquad n_t = \sum_w n_{wt}, \quad \phi_{wt} = \frac{n_{wt}}{n_t},$$
$$n_{td} = \sum_{w \in d} n_{dwt}, \quad \theta_{td} = \frac{n_{td}}{n_d}.$$

- Вот и весь вывод в pLSA.

- Можно даже не хранить всю матрицу n_{dwt}, а двигаться по документам, каждый раз добавляя n_{dwt} сразу к счётчикам n_{wt}, n_{td}.

Алгоритм 2. Рациональный EM-алгоритм для тематической модели (2).

Вход: коллекция D, число тем $|T|$, начальные приближения матриц Φ и Θ;
Выход: параметры модели Φ и Θ;

повторять
  обнулить n_{wt}, n_{td}, n_t для всех $d \in D,\ w \in W,\ t \in T$;
  для всех $d \in D,\ w \in d$
    $n_{tdw} := n_{dw}\varphi_{wt}\theta_{td} \,/\, \sum_\tau \varphi_{w\tau}\theta_{\tau d}$ для всех $t \in T$;
    увеличить n_{wt}, n_{td}, n_t на n_{tdw} для всех $t \in T$;
  $\varphi_{wt} := n_{wt}/n_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
  $\theta_{td} := n_{td}/n_d$ для всех $d \in D,\ t \in T$;
пока Φ и Θ не сойдутся;

pLSA

- Чего тут не хватает?
  - Во-первых, разложение такое, конечно, будет сильно не единственным.
  - Во-вторых, параметров очень много, явно будет оверфиттинг, если корпус не на порядки больше числа тем.
  - А совсем хорошо было бы получать не просто устойчивое решение, а обладающее какими-нибудь заданными хорошими свойствами.
- Всё это мы можем решить как?

- Правильно, регуляризацией. Есть целая наука о разных регуляризаторах для pLSA (К.В. Воронцов).
- В общем виде так: добавим регуляризаторы R_i в логарифм правдоподобия:

$$\sum_{d \in D} \sum_{w \in d} n_{dw} \ln \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} + \sum_i \tau_i R_i(\Phi, \Theta).$$

- Тогда в EM-алгоритме на M-шаге появятся частные производные R:

$$n_{wt} = \left[\sum_{d \in D} n_{dwt} + \phi_{wt}\frac{\partial R}{\partial \phi_{wt}}\right]_+,$$

$$n_{td} = \left[\sum_{w \in d} n_{dwt} + \theta_{td}\frac{\partial R}{\partial \theta_{td}}\right]_+$$

- Чтобы доказать, EM надо рассмотреть как решение задачи оптимизации через условия Каруша-Куна-Такера.

- И теперь мы можем кучу разных регуляризаторов вставить в эту модель:
  - регуляризатор сглаживания (позже, это примерно как LDA);
  - регуляризатор разреживания: максимизируем KL-расстояние между распределениями ϕ_{wt} и θ_{td} и равномерным распределением;
  - регуляризатор контрастирования: минимизируем ковариации между векторами ϕ_t, чтобы в каждой теме выделилось своё лексическое ядро (характерные слова);
  - регуляризатор когерентности: будем награждать за слова, которые в документах стоят ближе друг к другу;
  - и так далее, много всего можно придумать.

LDA

LDA

- Развитие идей pLSA – LDA (Latent Dirichlet Allocation).
- Это фактически байесовский вариант pLSA, сейчас нарисуем картинки, добавим априорные распределения и посмотрим, как сработают наши методы приближённого вывода.
- Задача та же: смоделировать большую коллекцию текстов (например, для information retrieval или классификации).

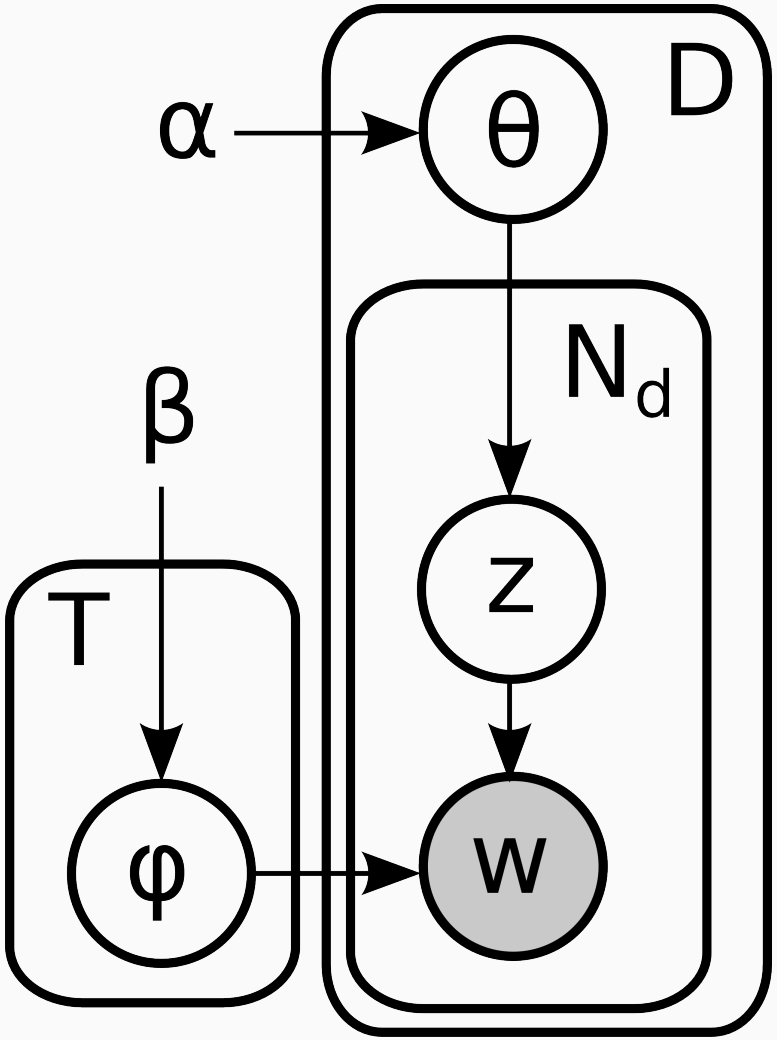
LDA

- У одного документа может быть несколько тем. Давайте построим иерархическую байесовскую модель:
  - на первом уровне – смесь, компоненты которой соответствуют «темам»;
  - на втором уровне – мультиномиальная переменная с априорным распределением Дирихле, которое задаёт «распределение тем» в документе.

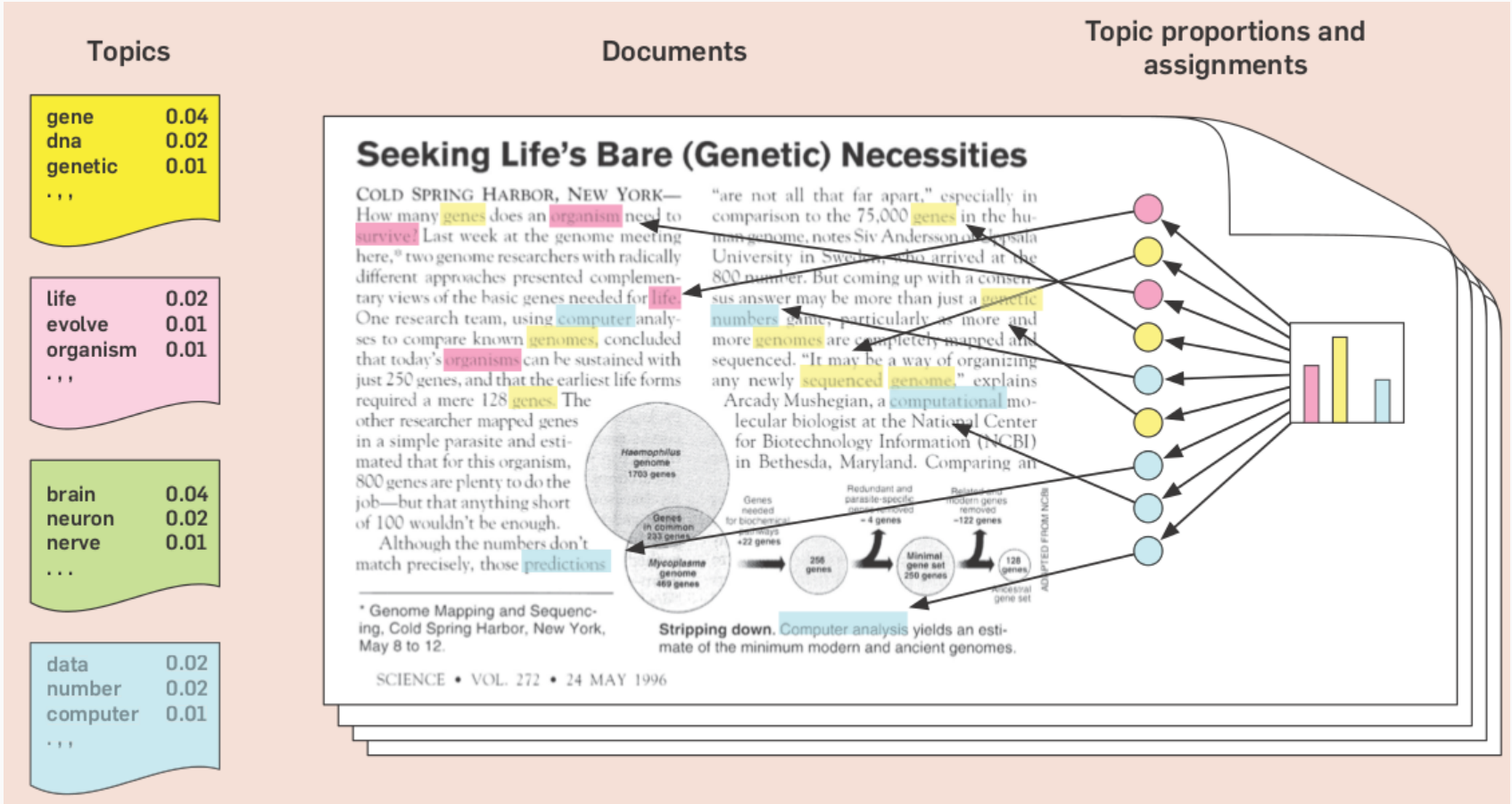
LDA

- Если формально: слова берутся из словаря $\{1, \dots, V\}$; слово – это вектор w, $w_i \in \{0, 1\}$, где ровно одна компонента равна 1.
- Документ – последовательность из N слов $\mathbf{w}$. Нам дан корпус из M документов $D = \{\mathbf{w}_d \mid d = 1..M\}$.
- Генеративная модель LDA выглядит так:
  - выбрать $\theta \sim \mathrm{Di}(\alpha)$;
  - для каждого из N слов w_n:
    - выбрать тему $z_n \sim \mathrm{Mult}(\theta)$;
    - выбрать слово $w_n \sim p(w_n \mid z_n, \beta)$ по мультиномиальному распределению.

LDA: графическая модель



LDA: что получается [Blei, 2012]



LDA: вывод

- Два основных подхода к выводу в сложных вероятностных моделях, в том числе LDA:
  - *вариационные приближения*: рассмотрим более простое семейство распределений с новыми параметрами и найдём в нём наилучшее приближение к неизвестному распределению;
  - *сэмплирование*: будем набрасывать точки из сложного распределения, не считая его явно, а запуская марковскую цепь под графиком распределения (частный случай – сэмплирование по Гиббсу).
- Сэмплирование по Гиббсу обычно проще расширить на новые модификации LDA, но вариационный подход быстрее и часто стабильнее.

Вывод в LDA

- Рассмотрим задачу байесовского вывода, т.е. оценки апостериорного распределения θ и z после нового документа:

$$p(\theta, \mathbf{z} \mid \mathbf{w}, \alpha, \beta) = \frac{p(\theta, \mathbf{z}, \mathbf{w} \mid \alpha, \beta)}{p(\mathbf{w} \mid \alpha, \beta)}.$$

- Правдоподобие набора слов $\mathbf{w}$ оценивается как

$$p(\mathbf{w} \mid \alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\sum_i \alpha_i)}{\prod_i \Gamma(\alpha_i)} \int \left[\prod_{i=1}^{k} \theta_i^{\alpha_i - 1}\right] \left[\prod_{n=1}^{N} \sum_{i=1}^{k} \prod_{j=1}^{V} (\theta_i \beta_{ij})^{w_n^j}\right] d\theta,$$

и это трудно посчитать, потому что θ и β путаются друг с другом.

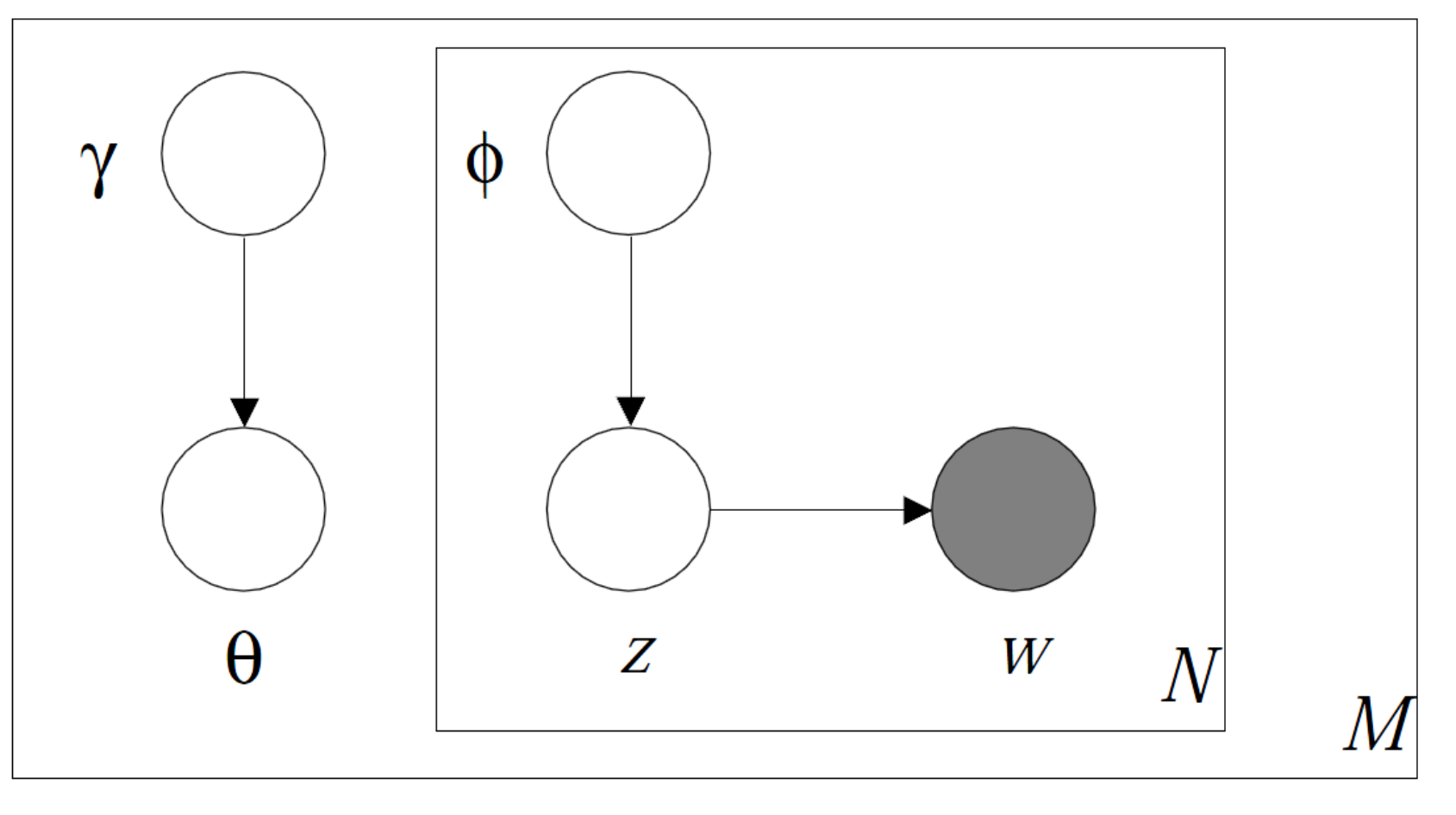
Вывод в LDA

- Вариационное приближение – рассмотрим семейство распределений

$$q(\theta, z \mid \mathbf{w}, \gamma, \phi) = p(\theta \mid \mathbf{w}, \gamma) \prod_{n=1}^{N} p(z_n \mid \mathbf{w}, \phi_n).$$

- Тут всё расщепляется, и мы добавили вариационные параметры γ (Дирихле) и ϕ (мультиномиальный).
- Заметим, что параметры для каждого документа могут быть свои – всё условно по $\mathbf{w}$.

LDA: вариационное приближение



LDA: вариационный вывод

- Теперь можно искать минимум KL-расстояния:

$$(\gamma^*, \phi^*) = \arg\min_{(\gamma,\phi)} \mathrm{KL}(q(\theta, z \mid \mathbf{w}, \gamma\phi) \| p(\theta, \mathbf{z} \mid \mathbf{w}, \alpha, \beta)).$$

- Для этого сначала воспользуемся уже известной оценкой из неравенства Йенсена:

$$\log p(\mathbf{w} \mid \alpha, \beta) = \log \int_\theta \sum_{\mathbf{z}} p(\theta, \mathbf{z}, \mathbf{w} \mid \alpha, \beta) d\theta =$$

$$= \log \int_\theta \sum_{\mathbf{z}} \frac{p(\theta, \mathbf{z}, \mathbf{w} \mid \alpha, \beta) q(\theta, \mathbf{z})}{q(\theta, \mathbf{z})} d\theta \geq$$

$$\geq E_q \left[\log p(\theta, \mathbf{z}, \mathbf{w} \mid \alpha, \beta)\right] - E_q \left[\log q(\theta, \mathbf{z})\right] =: L(\gamma, \phi; \alpha, \beta).$$

LDA: вариационный вывод

- Распишем произведения:

$$L(\gamma, \phi; \alpha, \beta) = E_q\left[p(\theta \mid \alpha)\right] + E_q\left[p(\mathbf{z} \mid \theta)\right] + E_q\left[p(\mathbf{w} \mid \mathbf{z}, \beta)\right] - \\ - E_q\left[\log q(\theta)\right] - E_q\left[\log q(\mathbf{z})\right].$$

- Свойство распределения Дирихле: если $X \sim \mathrm{Di}(\alpha)$, то

$$E[\log(X_i)] = \Psi(\alpha_i) - \Psi(\sum_i \alpha_i),$$

  где $\Psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$ – дигамма-функция.
- Теперь можно выписать каждый из пяти членов.

LDA: вариационный вывод

$$L(\gamma, \phi; \alpha, \beta) = \log \Gamma(\sum_{i=1}^{k} \alpha_i) - \sum_{i=1}^{k} \log \Gamma(\alpha_i) + \sum_{i=1}^{k} (\alpha_i - 1) \left[\Psi(\gamma_i) - \Psi \left(\sum_{j=1}^{k} \gamma_j \right) \right] +$$
$$+ \sum_{n=1}^{N} \sum_{i=1}^{k} \phi_{ni} \left[\Psi(\gamma_i) - \Psi \left(\sum_{j=1}^{k} \gamma_j \right) \right] +$$
$$+ \sum_{n=1}^{N} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{V} w_n^j \phi_{ni} \log \beta_{ij} -$$
$$- \log \Gamma(\sum_{i=1}^{k} \gamma_i) + \sum_{i=1}^{k} \log \Gamma(\gamma_i) - \sum_{i=1}^{k} (\gamma_i - 1) \left[\Psi(\gamma_i) - \Psi \left(\sum_{j=1}^{k} \gamma_j \right) \right] -$$
$$- \sum_{n=1}^{N} \sum_{i=1}^{k} \phi_{ni} \log \phi_{ni}.$$

LDA: вариационный вывод

- Теперь осталось только брать частные производные этого выражения.
- Сначала максимизируем его по ϕ_{ni} (вероятность того, что n-е слово было порождено темой i); надо добавить λ-множители Лагранжа, т.к. $\sum_{j=1}^{k} \phi_{nj} = 1$.
- В итоге получится:

$$\phi_{ni} \propto \beta_{iv} e^{\Psi(\gamma_i) - \Psi\left(\sum_{j=1}^{k} \gamma_j\right)},$$

где v – номер того самого слова, т.е. единственная компонента $w_n^v = 1$.

LDA: вариационный вывод

- Потом максимизируем по γ_i, i-й компоненте апостериорного Дирихле-параметра.
- Получится

$$\gamma_i = \alpha_i + \sum_{n=1}^{N} \phi_{ni}.$$

- Соответственно, для вывода нужно просто пересчитывать ϕ_{ni} и γ_i друг через друга, пока оценка не сойдётся.

LDA: оценка параметров

- Теперь давайте попробуем оценить параметры α и β по корпусу документов D.
- Мы хотим найти α и β, которые максимизируют

$$\ell(\alpha, \beta) = \sum_{d=1}^{M} \log p(\mathbf{w}_d \mid \alpha, \beta).$$

- Подсчитать $p(\mathbf{w}_d \mid \alpha, \beta)$ мы не можем, но у нас есть нижняя оценка $L(\gamma, \phi; \alpha, \beta)$, т.к.

$$p(\mathbf{w}_d \mid \alpha, \beta) = \\ = L(\gamma, \phi; \alpha, \beta) + \mathrm{KL}(q(\theta, z \mid \mathbf{w}_d, \gamma\phi) \| p(\theta, \mathbf{z} \mid \mathbf{w}_d, \alpha, \beta)).$$

LDA: оценка параметров

- EM-алгоритм:
  1. найти параметры $\{\gamma_d, \phi_d \mid d \in D\}$, которые оптимизируют оценку (как выше);
  2. зафиксировать их и оптимизировать оценку по α и β.

LDA: оценка параметров

- Для β это тоже делается нехитро:

$$\beta_{ij} \propto \sum_{d=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_d} \phi_{dni} w_n^j.$$

- Для α_i получается система уравнений, которую можно решить методом Ньютона.

Спасибо!

Спасибо за внимание!