Вероятностные тематические модели
Лекция $5\frac{2}{3}$.
Байесовский вывод для модели LDA

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Вероятностные тематические модели (курс лекций, К.В.Воронцов)»

ВМК МГУ • ~~28 марта 2023~~ (для самостоятельного изучения)

Содержание

Напоминание. Задача тематического моделирования

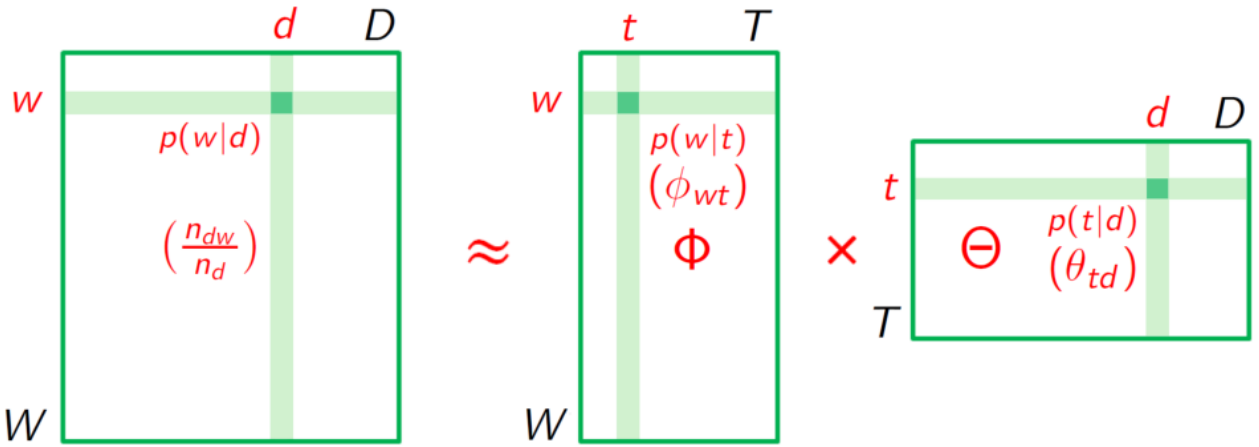
Дано: коллекция текстовых документов

- n_{dw} — частоты термов в документах, $\hat{p}(w|d) = \frac{n_{dw}}{n_d}$

Найти: параметры тематической модели $p(w|d) = \sum_{t \in T} \phi_{wt}\theta_{td}$

- $\phi_{wt} = p(w|t)$ — вероятности термов w в каждой теме t
- $\theta_{td} = p(t|d)$ — вероятности тем t в каждом документе d

Это задача стохастического матричного разложения:



Напоминание. Распределение Дирихле в модели LDA

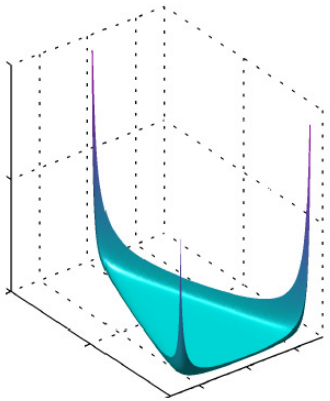
Гипотеза: вектор-столбцы $\phi_t = (\phi_{wt})_{w \in W}$ и $\theta_d = (\theta_{td})_{t \in T}$ порождаются распределениями Дирихле, $\alpha \in \mathbb{R}^{|T|}$, $\beta \in \mathbb{R}^{|W|}$:

$$\mathrm{Dir}(\phi_t|\beta) = \frac{\Gamma(\beta_0)}{\prod_w \Gamma(\beta_w)} \prod_w \phi_{wt}^{\beta_w - 1}, \quad \phi_{wt} > 0; \quad \beta_0 = \sum_w \beta_w, \ \beta_w > 0;$$

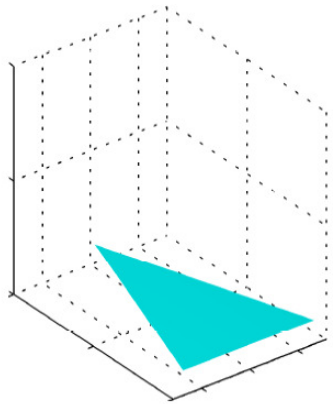
$$\mathrm{Dir}(\theta_d|\alpha) = \frac{\Gamma(\alpha_0)}{\prod_t \Gamma(\alpha_t)} \prod_t \theta_{td}^{\alpha_t - 1}, \quad \theta_{td} > 0; \quad \alpha_0 = \sum_t \alpha_t, \ \alpha_t > 0;$$

Пример:

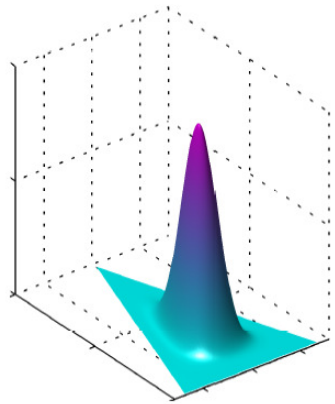
$\mathrm{Dir}(\theta|\alpha)$,
$|T| = 3$,
$\theta, \alpha \in \mathbb{R}^3$



$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0.1$

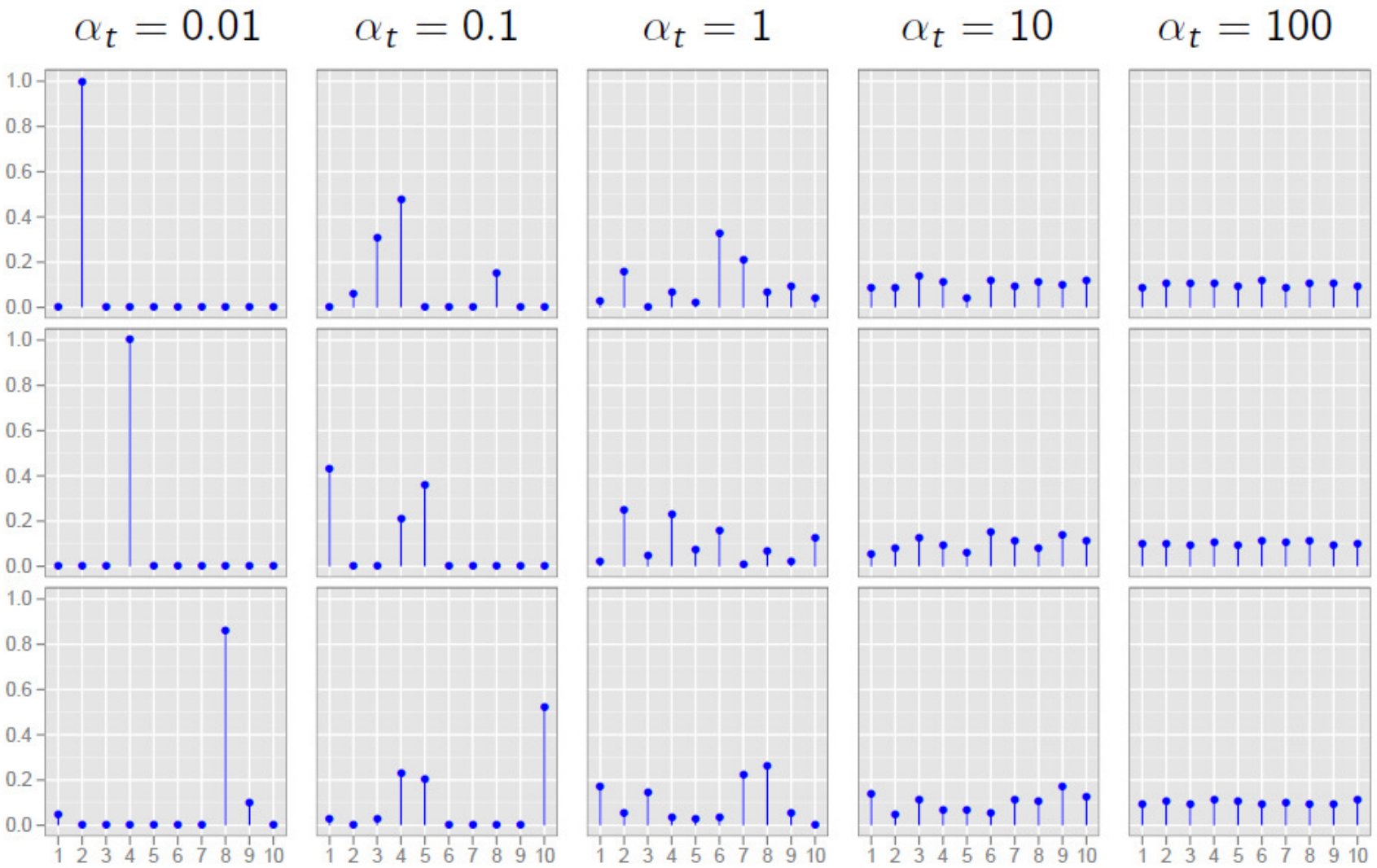


$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1$



$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 10$

Пример. Выборки из трёх 10-мерных векторов $\theta \sim \mathrm{Dir}(\theta|\alpha)$



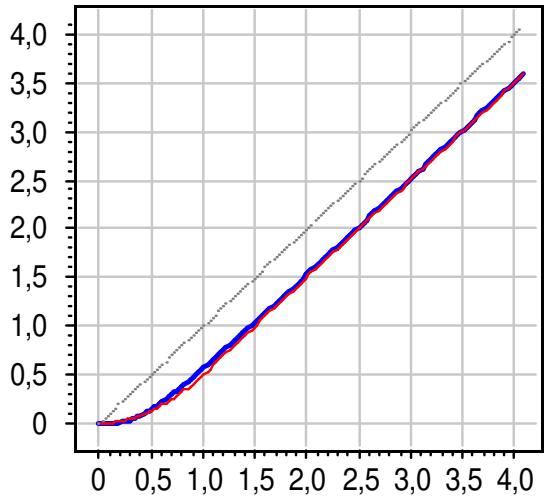
Некоторые свойства распределения Дирихле

1. Матожидание: $\mathrm{E}\theta_t = \int \theta_t \mathrm{Dir}(\theta|\alpha)\, d\theta = \frac{\alpha_t}{\alpha_0} = \underset{t}{\mathrm{norm}}(\alpha_t)$
2. Мода: $\hat{\theta}_t = \frac{\alpha_t - 1}{\alpha_0 - T} = \underset{t}{\mathrm{norm}}(\alpha_t - 1)$
3. Дисперсия: $\mathrm{D}\theta_t = \frac{\alpha_t(\alpha_0 - \alpha_t)}{\alpha_0^2(\alpha_0+1)}$
4. Матожидание ln: $\mathrm{E}\ln\theta_t = \int \ln\theta_t \mathrm{Dir}(\theta|\alpha)\, d\theta = \psi(\alpha_t) - \psi(\alpha_0)$

где $\psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$ — дигамма-функция.

Простая, но очень точная аппроксимация экспоненты от дигамма-функции:

$$E(x) = \exp(\psi(x)) \approx \begin{cases} \frac{x^2}{2}, & 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ x - \frac{1}{2}, & 1 \leqslant x \end{cases}$$



Подходы к оцениванию параметров вероятностных моделей

$X = (d_i, w_i)_{i=1}^n$ — наблюдаемые, $Z = (t_i)_{i=1}^n$ — скрытые
$\Omega = (\Phi, \Theta)$ — параметры, $\gamma = (\beta, \alpha)$ — гиперпараметры

Максимизация регуляризованного правдоподобия:

$$\ln p(X|\Omega) + R(\Omega) = \ln \sum_Z p(X, Z|\Omega) + R(\Omega) \;\to\; \max_\Omega$$

Максимизация апостериорной вероятности:

$$\ln p(\Omega|X, \gamma) + \text{const} = \ln \sum_Z p(X, Z|\Omega) + \ln p(\Omega|\gamma) \;\to\; \max_\Omega$$

Вариационный байесовский вывод:

$$\text{вывести } p(Z, \Omega|X, \gamma) \propto p(X, Z|\Omega, \gamma)\, p(\Omega|\gamma)$$

Сэмплирование Гиббса:

$$\text{вывести } p(Z|X, \gamma) \text{ и сэмплировать из него } Z$$

$$\text{вывести } p(\Omega|X, Z, \gamma) \propto p(X, Z|\Omega, \gamma)\, p(\Omega|\gamma)$$

Основная идея Variational Bayesian inference

$X = (d_i, w_i)_{i=1}^n$ — исходные данные, *наблюдаемые переменные*
$Z = (t_i)_{i=1}^n$ — *скрытые переменные*

$p(\Phi|\beta) = \prod_{t\in T} \mathrm{Dir}(\phi_t|\beta)$ — априорное распределение на Φ
$p(\Theta|\alpha) = \prod_{d\in D} \mathrm{Dir}(\theta_d|\alpha)$ — априорное распределение на Θ

Задача: найти апостериорное распределение $p(Z, \Phi, \Theta|X, \beta, \alpha)$.

Основная идея: найти его приближение в виде произведения $n + |T| + |D|$ распределений по блокам переменных t_i, ϕ_t, θ_d:

$$q(Z, \Phi, \Theta) = \prod_{i=1}^{n} q_i(t_i) \prod_{t\in T} q_t(\phi_t) \prod_{d\in D} q_d(\theta_d)$$

Обозначив $(Z, \Phi, \Theta) = Y$, $(\beta, \alpha) = \gamma$, перейдём к общей задаче

Основная теорема вариационного байесовского вывода

Теорема. Решение задачи $\mathrm{KL}\big(q(Y) \,\big\|\, p(Y|X,\gamma)\big) \to \min_q$ в семействе факторизованных распределений $q(Y) = \prod_j q_j(Y_j)$ по переменным Y_j, $j \in J$, удовлетворяет системе уравнений

$$\ln q_j(Y_j) = \mathrm{E}_{q\setminus j} \ln p(X, Y|\gamma) + \mathrm{const},$$

где $\mathrm{E}_{q\setminus j}$ — матожидание по всем переменным кроме Y_j,
const — ln нормировочного множителя распределения q_j.

Для решения этой системы используют метод простой итерации.

Идея доказательства: расписываем $\mathrm{KL}(\cdot\|\cdot)$ и сводим задачу к

$$\sum_{Y_j} q_j(Y_j) \underbrace{\sum_{Y\setminus Y_j} \prod_{i\neq j} q_i(Y_i) \ln p(X, Y|\gamma)}_{\mathrm{E}_{q\setminus j} \ln p(X,Y|\gamma)} - \sum_{Y_j} q_j(Y_j) \ln q_j(Y_j) \;\to\; \min_q$$

Доказательство

1. В оптимизационной задаче можно перекидывать X через условную черту:

$$\sum_Y q(Y) \ln \frac{p(Y|X,\gamma)}{q(Y)} \to \max_q \Leftrightarrow \sum_Y q(Y) \ln \frac{p(X,Y|\gamma)}{q(Y)} - \sum_Y q(Y) \ln p(X|\gamma) \to \max_q$$

2. Будем минимизировать KL-дивергенцию поочерёдно по всем Y_j.
Применим факторизацию и вынесем слагаемое с $q_j(Y_j)$ вперёд:

$$\sum_{Y_j} q_j(Y_j) \underbrace{\sum_{Y \setminus Y_j} \prod_{i \neq j} q_i(Y_i) \ln p(X,Y|\gamma)}_{\mathsf{E}_{q \setminus j} \ln p(X,Y|\gamma)} - \sum_{Y_j} q_j(Y_j) \underbrace{\sum_{Y \setminus Y_j} \prod_{i \neq j} q_i(Y_i) \sum_{k \in J} \ln q_k(Y_k)}_{\ln q_j(Y_j) + \text{const}} \to \max_{q_j}$$

3. Почему вторую фигурную скобку можно заменить на $\ln q_j(Y_j)$:

$$\underbrace{\sum_{Y \setminus Y_j} \prod_{i \neq j} q_i(Y_i) \sum_{k \neq j} \ln q_k(Y_k)}_{\text{не зависит от } q_j} + \underbrace{\sum_{Y \setminus Y_j} \prod_{i \neq j} q_i(Y_i)}_{1} \ln q_j(Y_j)$$

4. Введём $r(Y_j) \propto \exp\big(\mathsf{E}_{q \setminus j} \ln p(X,Y|\gamma)\big)$, тогда $\mathrm{KL}\big(q_j(Y_j) \big\| r(Y_j)\big) \to \min_{q_j}$
5. Точное решение данной задачи $q_j(Y_j) = r(Y_j)$, следовательно,

$$\ln q_j(Y_j) = \mathsf{E}_{q \setminus j} \ln p(X,Y|\gamma) + \text{const}.$$

■

Основная теорема для частного случая модели LDA

Обозначим $Y = (Z, \Phi, \Theta)$, $\gamma = (\beta, \alpha)$, $J = \{1, \ldots, n\} \sqcup T \sqcup D$:

$$\ln q_j = \mathsf{E}_{q \setminus j} \ln p(X, Z, \Phi, \Theta | \beta, \alpha) + \text{const}$$

Нам предстоит брать матожидания $\mathsf{E}_{q \setminus j}$ по всем (кроме одного) распределениям $q_t(\phi_t)$, $q_d(\theta_d)$, $q_i(t_i)$ от

$$\ln p(X, Z, \Phi, \Theta | \beta, \alpha) = \ln p(X, Z | \Phi, \Theta) p(\Phi | \beta) p(\Theta | \alpha) =$$

$$= \ln \prod_{i=1}^{n} p(d_i, w_i, t_i | \Phi, \Theta) + \ln \prod_{t \in T} \mathrm{Dir}(\phi_t | \beta) + \ln \prod_{d \in D} \mathrm{Dir}(\theta_d | \alpha) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \ln \phi_{w_i t_i} \theta_{t_i d_i} + \sum_{t,w} (\beta_w - 1) \ln \phi_{wt} + \sum_{d,t} (\alpha_t - 1) \ln \theta_{td} + \text{const}.$$

Замечание, сильно упрощающее выкладки:
если слагаемое S не зависит от j-й переменной, то $\mathsf{E}_{q_j} S = \text{const}$.

Распределения для блока переменных $q_t(\phi_t)$

Уравнение для распределения переменной $\phi_t \in \mathbb{R}^W$:

$$\begin{aligned}
\ln q_t(\phi_t) &= \sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}_{q_i(t_i)}[t_i = t] \ln \phi_{w_i t_i} + \sum_{w \in W} (\beta_w - 1) \ln \phi_{wt} + \text{const} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \sum_{w \in W} [w_i = w] q_i(t) \ln \phi_{wt} + \sum_{w \in W} (\beta_w - 1) \ln \phi_{wt} + \text{const} = \\
&= \sum_{w \in W} \Bigg(\underbrace{\sum_{i=1}^{n} [w_i = w] q_i(t)}_{n_{wt}} + \beta_w - 1 \Bigg) \ln \phi_{wt} + \text{const} = \\
&= \ln \mathrm{Dir}(\phi_t | \tilde{\beta}_t).
\end{aligned}$$

Это распределение Дирихле с параметрами $\tilde{\beta}_{wt} = n_{wt} + \beta_w$,
n_{wt} — оценка числа генераций терма w из темы t.
При больших n_{wt} оно сконцентрировано в точке $\phi_{wt} = \underset{w}{\mathrm{norm}}(\tilde{\beta}_{wt})$.

Распределения для блока переменных $q_d(\theta_d)$

Уравнение для распределения переменной $\theta_d \in \mathbb{R}^T$:

$$\begin{aligned}
\ln q_d(\theta_d) &= \sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}_{q_i(t_i)}[d_i = d] \ln \theta_{t_i d_i} + \sum_{t \in T} (\alpha_t - 1) \ln \theta_{td} + \text{const} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} [d_i = d] \sum_{t \in T} q_i(t) \ln \theta_{td} + \sum_{t \in T} (\alpha_t - 1) \ln \theta_{td} + \text{const} = \\
&= \sum_{t \in T} \Bigg(\underbrace{\sum_{i=1}^{n} [d_i = d] q_i(t)}_{n_{td}} + \alpha_t - 1 \Bigg) \ln \theta_{td} + \text{const} = \\
&= \ln \mathrm{Dir}(\theta_d | \tilde{\alpha}_d).
\end{aligned}$$

Это распределение Дирихле с параметрами $\tilde{\alpha}_{td} = n_{td} + \alpha_t$,
n_{td} — оценка числа термов темы t в документе d.
При больших n_{td} оно сконцентрировано в точке $\theta_{td} = \underset{t}{\mathrm{norm}}(\tilde{\alpha}_{td})$.

Распределения для блока переменных $q_i(t_i)$

Уравнение для распределения переменной $t_i \in T$:

$$\ln q_i(t) = \mathsf{E}_{q\setminus i}\big(\ln \phi_{w_i t_i} + \ln \theta_{t_i d_i}\big) + \text{const} =$$
$$= \mathsf{E}_{q_t(\phi_t)} \ln \phi_{w_i t} + \mathsf{E}_{q_d(\theta_d)} \ln \theta_{t_i d} + \text{const} =$$

воспользуемся тем, что $q_t(\phi_t)$ и $q_d(\theta_d)$ уже найдены:

$$= \psi\big(n_{w_i t} + \beta_{w_i}\big) - \psi\Big(\textstyle\sum_w (n_{wt} + \beta_w)\Big) +$$
$$+ \psi\big(n_{td_i} + \alpha_t\big) - \psi\Big(\textstyle\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t)\Big) + \text{const}$$

Воспользуемся приближением $\exp(\psi(x)) \approx x - \frac{1}{2}$:

$$q_i(t) = \underset{t\in T}{\text{norm}} \left(\frac{n_{w_i t} + \beta_{w_i} - \frac{1}{2}}{\sum_w (n_{wt} + \beta_w) - \frac{1}{2}} \cdot \frac{n_{td_i} + \alpha_t - \frac{1}{2}}{\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t) - \frac{1}{2}} \right)$$

Похоже на обычную формулу E-шага $p(t|d_i, w_i) = \underset{t\in T}{\text{norm}}(\phi_{w_i t}\theta_{td_i})$

Собираем всё воедино

В итерационном процессе чередуются два шага:

1) распределение термов (d_i, w_i) по темам, $E(x) = \exp(\psi(x))$:

$$q_i(t) = \underset{t \in T}{\text{norm}} \left(\frac{E\left(n_{w_i t} + \beta_{w_i}\right)}{E\left(\sum_w (n_{wt} + \beta_w)\right)} \cdot \frac{E\left(n_{td_i} + \alpha_t\right)}{E\left(\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t)\right)} \right)$$

2) аккумулирование счётчиков n_{wt} и n_{td}:

$$n_{wt} = \sum_{i=1}^{n} [w_i = w]\, q_i(t) \qquad n_{td} = \sum_{i=1}^{n} [d_i = d]\, q_i(t)$$

Точечные оценки параметров по матожиданию или моде:

$$\mathrm{E}\phi_{wt} = \underset{w \in W}{\text{norm}}\left(n_{wt} + \beta_w\right) \qquad \mathrm{E}\theta_{td} = \underset{t \in T}{\text{norm}}\left(n_{td} + \alpha_t\right)$$

$$\hat{\phi}_{wt} = \underset{w \in W}{\text{norm}}\left(n_{wt} + \beta_w - 1\right) \qquad \hat{\theta}_{td} = \underset{t \in T}{\text{norm}}\left(n_{td} + \alpha_t - 1\right)$$

Промежуточный итог

- Из-за факторизации вариационный байесовский вывод даёт лишь приближённое решение, тем не менее,
- формулы для MAP и VB очень похожи [Asuncion]:
  — при $n_{wt}, n_{td} \gg 1$ различия неощутимы,
  — при $n_{wt}, n_{td} \lesssim 1$ тема t незначима для w или d.
- Можно добавить M-шаг для оптимизации β, α [Wallach].
- Некуда добавлять регуляризаторы $R(\Phi, \Theta)$.
- Нужны матрицы Φ, Θ, а не распределения $p(\Phi, \Theta|X)$.
- Начинает смущать разнообразие оценок... какая лучше?

Asuncion A., Welling M., Smyth P., Teh Y. W. On smoothing and inference for topic models. Int'l conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence, 2009.

Hanna Wallach, David Mimno, Andrew McCallum. Rethinking LDA: why priors matter. Neural Information Processing Systems, 2009.

Сэмплирование Гиббса (Gibbs Sampling)

Основная идея:

- $Z \sim p(Z|X,\gamma)$ — сэмплировать скрытые переменные
- $p(\Phi,\Theta|X,Z,\gamma)$ — найти апостериорное распределение параметров модели при известных X, Z и $\gamma = (\beta,\alpha)$

Основная теорема о сходимости сэмплирования Гиббса

Процесс сэмплирования одномерных случайных величин

$$t_i^{(k+1)} \sim p(t_i|X,Z_{\setminus i},\gamma) = \frac{p(X,Z|\gamma)}{p(X,Z_{\setminus i}|\gamma)},$$

где k — номер итерации, $Z_{\setminus i} = (t_1^{(k+1)},\ldots,t_{i-1}^{(k+1)},t_{i+1}^{(k)},\ldots,t_n^{(k)})$, сходится к многомерному распределению $Z \sim p(Z|X,\gamma)$

Распределение Дирихле — сопряжённое к мультиномиальному

$p(\Phi, \Theta|\beta, \alpha)$ — априорное распределение Дирихле
$p(\Phi, \Theta|X, Z, \beta, \alpha)$ — апостериорное распределение тоже Дирихле

Вывод апостериорного распределения Φ, Θ при известных X, Z:

$$p(\Phi, \Theta|X, Z, \beta, \alpha) \propto p(\Phi, \Theta, X, Z|\beta, \alpha) \propto p(X, Z|\Phi, \Theta)p(\Phi, \Theta|\beta, \alpha)$$

$$\propto \prod_{d,w,t} (\phi_{wt}\theta_{td})^{n_{dwt}} \prod_{t\in T} \mathrm{Dir}(\phi_t|\beta) \prod_{d\in D} \mathrm{Dir}(\theta_d|\alpha)$$

$$\propto \prod_{t\in T}\prod_{d,w} \phi_{wt}^{n_{dwt}}\phi_{wt}^{\beta_w-1} \prod_{d\in D}\prod_{w,t} \theta_{td}^{n_{dwt}}\theta_{td}^{\alpha_t-1}$$

$$\propto \prod_{t\in T}\prod_{w} \phi_{wt}^{n_{wt}+\beta_w-1} \prod_{d\in D}\prod_{t} \theta_{td}^{n_{td}+\alpha_t-1}, \quad n_{wt} = \sum_d n_{dwt}, \quad n_{td} = \sum_w n_{dwt}$$

$$\propto \prod_{t\in T} \mathrm{Dir}(\phi_t|\tilde{\beta}_t) \prod_{d\in D} \mathrm{Dir}(\theta_d|\tilde{\alpha}_d), \quad \tilde{\beta}_{wt} = n_{wt}+\beta_w, \quad \tilde{\alpha}_{td} = n_{td}+\alpha_t$$

Распределение $p(X, Z|\beta, \alpha)$ для схемы сэмплирования Гиббса

Подынтегральное распределение мы только что вывели, но теперь будем аккуратнее с нормировочными множителями:

$$p(X, Z|\beta, \alpha) = \int_\Phi \int_\Theta p(X, Z|\Phi, \Theta) p(\Phi, \Theta|\beta, \alpha) d\Phi d\Theta =$$

$$= \int_\Phi \int_\Theta \prod_{w,t} \phi_{wt}^{n_{wt}} \prod_{t,d} \theta_{td}^{n_{td}} \prod_d p_d^{n_d} \prod_{t \in T} \mathrm{Dir}(\phi_t|\beta) \prod_{d \in D} \mathrm{Dir}(\theta_d|\alpha) d\Phi d\Theta =$$

$$= \prod_{t \in T} \frac{\Gamma(\sum_w \beta_w)}{\prod_w \Gamma(\beta_w)} \int_{\phi_t} \underbrace{\prod_w \phi_{wt}^{\tilde{\beta}_{wt}-1} d\phi_t}_{\propto \mathrm{Dir}(\phi_t|\tilde{\beta}_t)} \prod_{d \in D} p_d^{n_d} \frac{\Gamma(\sum_t \alpha_t)}{\prod_t \Gamma(\alpha_t)} \int_{\theta_d} \underbrace{\prod_t \theta_{td}^{\tilde{\alpha}_{td}-1} d\theta_d}_{\propto \mathrm{Dir}(\theta_d|\tilde{\alpha}_d)} =$$

$$= \prod_{t \in T} \frac{\Gamma(\sum_w \beta_w)}{\prod_w \Gamma(\beta_w)} \frac{\prod_w \Gamma(\tilde{\beta}_{wt})}{\Gamma(\sum_w \tilde{\beta}_{wt})} \prod_{d \in D} p_d^{n_d} \frac{\Gamma(\sum_t \alpha_t)}{\prod_t \Gamma(\alpha_t)} \frac{\prod_t \Gamma(\tilde{\alpha}_{td})}{\Gamma(\sum_t \tilde{\alpha}_{td})}$$

Распределение $p(X, Z_{\setminus i}|\beta, \alpha)$ для схемы сэмплирования Гиббса

Итак, мы только что получили распределение

$$p(X, Z|\beta, \alpha) =$$
$$= \prod_{t\in T} \frac{\Gamma(\sum_w \beta_w)}{\prod_w \Gamma(\beta_w)} \frac{\prod_w \Gamma(\tilde{\beta}_{wt})}{\Gamma(\sum_w \tilde{\beta}_{wt})} \prod_{d\in D} p_d^{n_d} \frac{\Gamma(\sum_t \alpha_t)}{\prod_t \Gamma(\alpha_t)} \frac{\prod_t \Gamma(\tilde{\alpha}_{td})}{\Gamma(\sum_t \tilde{\alpha}_{td})}$$

Распределение $p(X, Z_{\setminus i}|\beta, \alpha)$ отличается от него лишь тем, что оно построено по выборке без одной i-й точки (d_i, w_i, t_i):

$$p(X, Z_{\setminus i}|\beta, \alpha) =$$
$$\prod_{t\in T} \frac{\Gamma(\sum_w \beta_w)}{\prod_w \Gamma(\beta_w)} \frac{\prod_w \Gamma(\tilde{\beta}_{wt} - \delta^i_{wt})}{\Gamma(\sum_w (\tilde{\beta}_{wt} - \delta^i_{wt}))} \prod_{d\in D} p_d^{n_d} \frac{\Gamma(\sum_t \alpha_t)}{\prod_t \Gamma(\alpha_t)} \frac{\prod_t \Gamma(\tilde{\alpha}_{td} - \delta^i_{td})}{\Gamma(\sum_t (\tilde{\alpha}_{td} - \delta^i_{td}))}$$

где $\delta^i_{wt} = [w = w_i][t = t_i]$, $\delta^i_{td} = [t = t_i][d = d_i]$

Ещё чуть-чуть... осталось поделить одно на другое

Для сэмплирования Гиббса нужно одномерное распределение

$$p(t_i|X, Z_{\setminus i}, \beta, \alpha) = \frac{p(X, Z|\beta, \alpha)}{p(X, Z_{\setminus i}|\beta, \alpha)} =$$

В числителе и знаменателе сократятся все множители кроме i-х:

$$= \frac{\Gamma(n_{w_i t_i} + \beta_{w_i})\,\Gamma\big(\sum_w (n_{wt_i} + \beta_w) - 1\big)}{\Gamma(n_{w_i t_i} + \beta_{w_i} - 1)\,\Gamma\big(\sum_w (n_{wt_i} + \beta_w)\big)} \frac{\Gamma(n_{t_i d_i} + \alpha_{t_i})\,\Gamma\big(\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t) - 1\big)}{\Gamma(n_{t_i d_i} + \alpha_{t_i} - 1)\,\Gamma\big(\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t)\big)}$$

Воспользуемся свойством гамма-функции $\frac{\Gamma(x)}{\Gamma(x-1)} = x - 1$:

$$p(t|X, Z_{\setminus i}, \beta, \alpha) = \operatorname*{norm}_{t \in T} \left(\frac{n_{w_i t} + \beta_{w_i} - 1}{\sum_w (n_{wt} + \beta_w) - 1} \cdot \frac{n_{td_i} + \alpha_t - 1}{\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t) - 1} \right)$$

Похоже на обычную формулу E-шага $p(t|d_i, w_i) = \operatorname*{norm}_{t \in T}(\phi_{w_i t} \theta_{td_i})$

Собираем всё воедино

Выделены отличия от вариационного алгоритма

1) для каждого (d_i, w_i), $i = 1, \ldots, n$, сэмплирование темы t_i:

$$t_i \sim p_i(t) = \underset{t \in T}{\text{norm}} \left(\frac{n_{w_i t} + \beta_{w_i} - 1}{\sum_w (n_{wt} + \beta_w) - 1} \cdot \frac{n_{td_i} + \alpha_t - 1}{\sum_t (n_{td_i} + \alpha_t) - 1} \right)$$

2) аккумулирование счётчиков n_{wt} и n_{td}:

$$n_{wt} = \sum_{i=1}^{n} [w_i = w][t_i = t] \qquad n_{td} = \sum_{i=1}^{n} [d_i = d][t_i = t]$$

Точечные оценки параметров по матожиданию или моде:

$$\mathrm{E}\phi_{wt} = \underset{w \in W}{\text{norm}} \left(n_{wt} + \beta_w \right) \qquad \mathrm{E}\theta_{td} = \underset{t \in T}{\text{norm}} \left(n_{td} + \alpha_t \right)$$

$$\hat{\phi}_{wt} = \underset{w \in W}{\text{norm}} \left(n_{wt} + \beta_w - 1 \right) \qquad \hat{\theta}_{td} = \underset{t \in T}{\text{norm}} \left(n_{td} + \alpha_t - 1 \right)$$

Алгоритм сэмплирования Гиббса

Вход: коллекция D, число тем $|T|$, параметры α, β;
Выход: распределения Φ и Θ;

$n_{wt}, n_{td}, n_t, n_d := 0$ для всех $d \in D,\ w \in W,\ t \in T$;
для всех итераций $k := 1, \ldots, k_{\max}$
  для всех $i = 1, \ldots, n$ взять документ $d := d_i$, терм $w := w_i$
    если $k \geqslant 2$ **то** $t := t_i$; $--n_{wt}$; $--n_{td}$; $--n_t$; $--n_d$;
    $p(t|d,w) = \underset{t \in T}{\text{norm}}\left(\frac{n_{wt}+\beta_w}{n_t+\beta_0} \cdot \frac{n_{td}+\alpha_t}{n_d+\alpha_0}\right)$ для всех $t \in T$;
    сэмплировать тему t из распределения $p(t|d,w)$;
    $t_i := t$; $++n_{wt}$; $++n_{td}$; $++n_t$; $++n_d$;
$\phi_{wt} := n_{wt}/n_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
$\theta_{td} := n_{td}/n_d$ для всех $d \in D,\ t \in T$;

Griffiths T., Steyvers M. Finding scientific topics. 2004.

Промежуточный итог

- Похожий алгоритм получится в ARTM, если на E-шаге вместо $p(t|d,w)$ брать $\hat{p}(t|d,w) = [t = t_i]$, $t_i \sim p(t|d,w)$.
- Формулы для MAP, VB и GS очень похожи [Asuncion]:
  — при $n_{wt}, n_{td} \gg 1$ различия неощутимы,
  — при $n_{wt}, n_{td} \lesssim 1$ тема t незначима для w или d.
- Необходимость задания априорных распределений:
  — сопряжённые — только распределения Дирихле,
  — не сопряжённые — сильно усложняют задачу.
- VB и GS не имеют удобных механизмов регуляризации, т.к. нет, собственно, и задачи оптимизации по (Φ, Θ)
- Проблема неустойчивости даже не ставится.

Asuncion A., Welling M., Smyth P., Teh Y. W. On smoothing and inference for topic models. Int'l conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence, 2009.

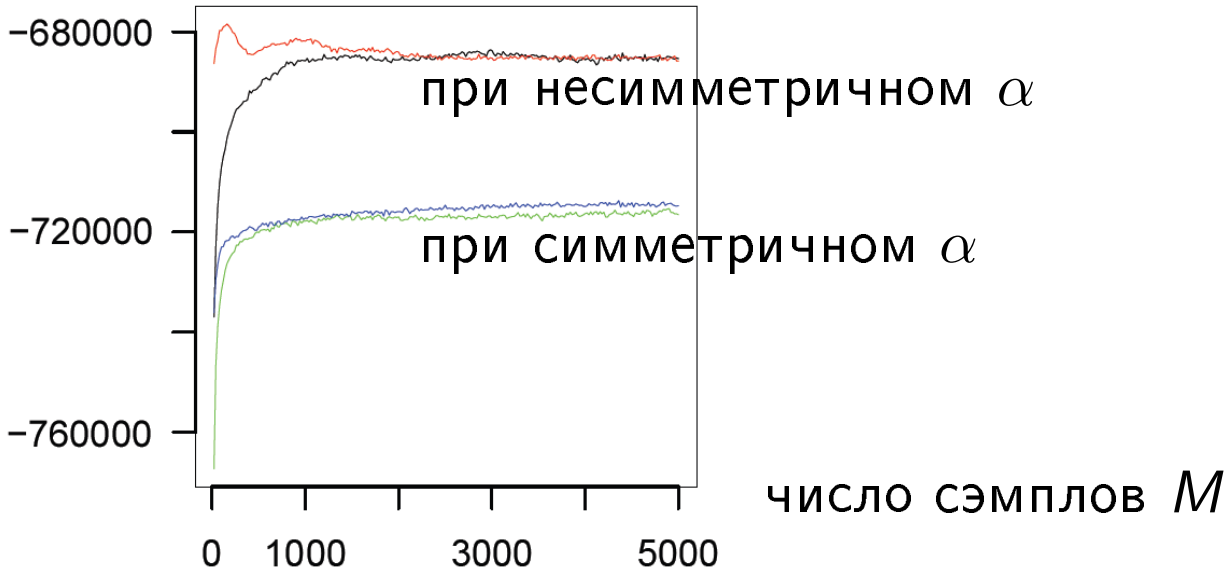
Проблема выбора гиперпараметров α и β

Стандартная рекомендация [2004]: $\alpha_t = 50/|T|$, $\beta_w = 0.01$.

Выводы по результатам более тонкого исследования [2009]:

- $p(t|d) \sim \mathrm{Dir}(\theta; \alpha)$, оптимизировать $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_T)$.
- $p(w|t) \sim \mathrm{Dir}(\phi; \beta)$, взять симметричное $\beta_1 = \cdots = \beta_T \ll 1$.

правдоподобие



H.Wallach, D.Mimno, A.McCallum. Rethinking LDA: why priors matter. NIPS, 2009.

Оптимизация гиперпараметра α

Обоснованность (evidence) модели на коллекции D:

$$P(D|\alpha) = \prod_{d \in D} \frac{\Gamma(\alpha_0)}{\Gamma(n_d + \alpha_0)} \prod_{t \in T} \frac{\Gamma(n_{td} + \alpha_t)}{\Gamma(\alpha_t)} \to \max_{\alpha}$$

Метод неподвижной точки [Minka, 2003] — итерационный процесс, встраиваемый между проходами по всей коллекции:

$$\alpha_t := \alpha_t \frac{\sum_d \psi(n_{td} + \alpha_t) - \psi(\alpha_t)}{\sum_d \psi(n_d + \alpha_0) - \psi(\alpha_0)},$$

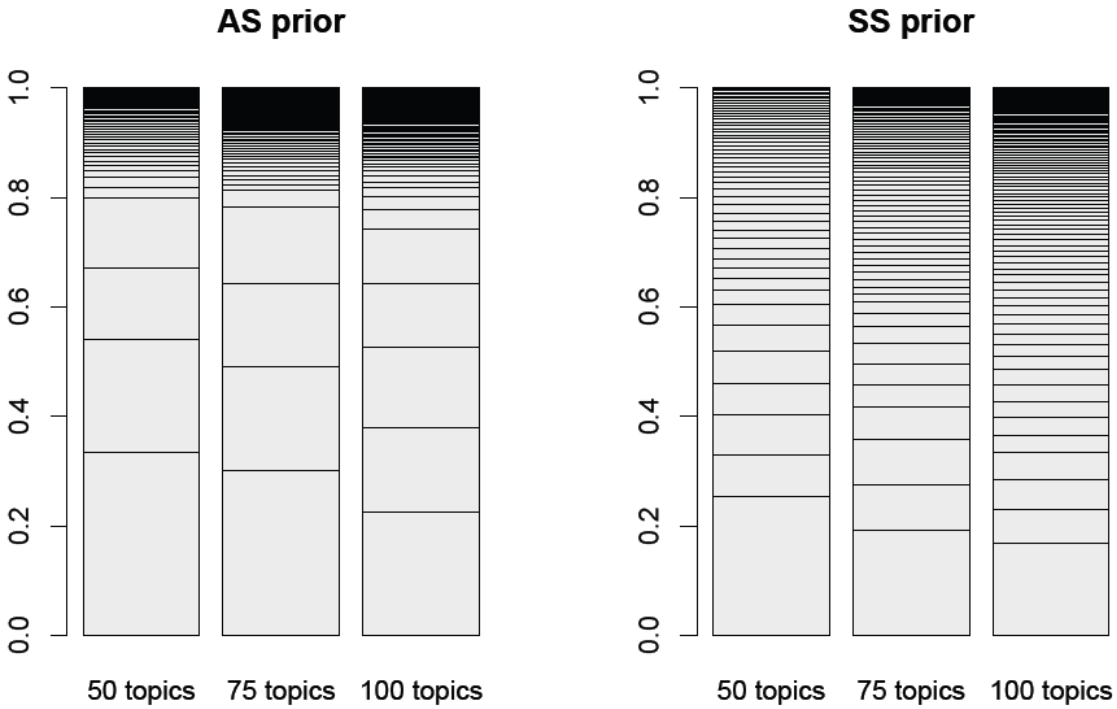
где $\psi(z) = \big(\ln \Gamma(z)\big)' = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ — дигамма-функция.

Thomas Minka. Estimating a Dirichlet distribution. 2003.

Hanna Wallach. Structured Topic Models for Language. PhD thesis, University of Cambridge, 2008.

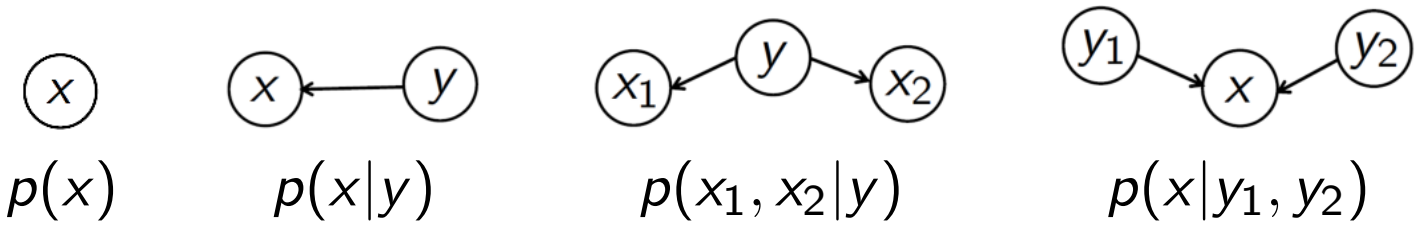
Преимущество оптимизации гиперпараметра α

- Правдоподобие существенно выше.
- Сходимость быстрее.
- Меньшая чувствительность к избыточному $|T|$.
- Более естественная несбалансированность тем.



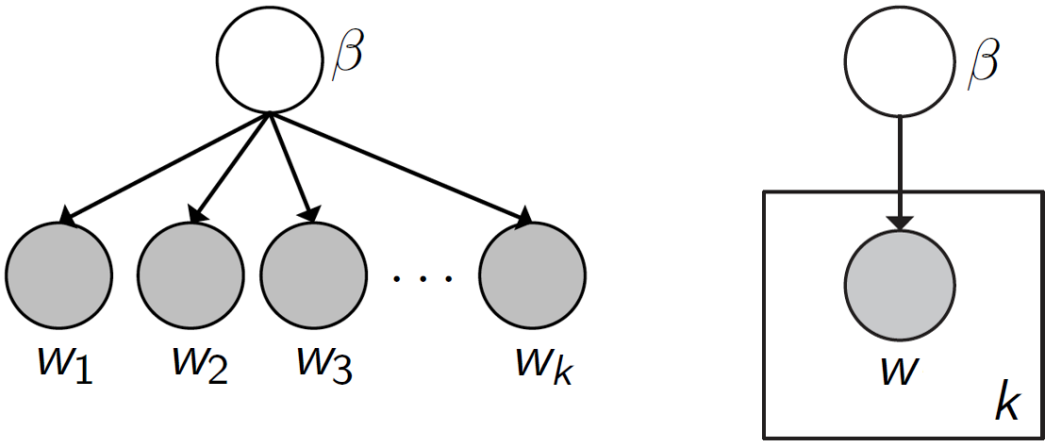
Язык графических нотаций «plate notation»

Графическое представление условных зависимостей



$p(x)$ $p(x|y)$ $p(x_1, x_2|y)$ $p(x|y_1, y_2)$

Графическое представление выборки $w_1, \ldots, w_k$, порождаемой распределением $\beta_w = p(w)$

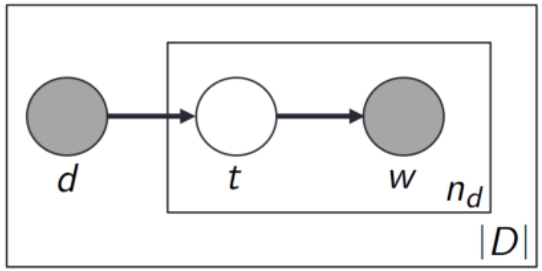


Графическая нотация для моделей PLSA и LDA

Модель PLSA:

каждый $d \in D$ порождает скрытые темы:
$t_i \sim p(t|d), \;\; i = 1, \ldots, n_d$;

каждая тема t_i порождает слово:
$w_i \sim p(w|t_i), \;\; i = 1, \ldots, n_d$.

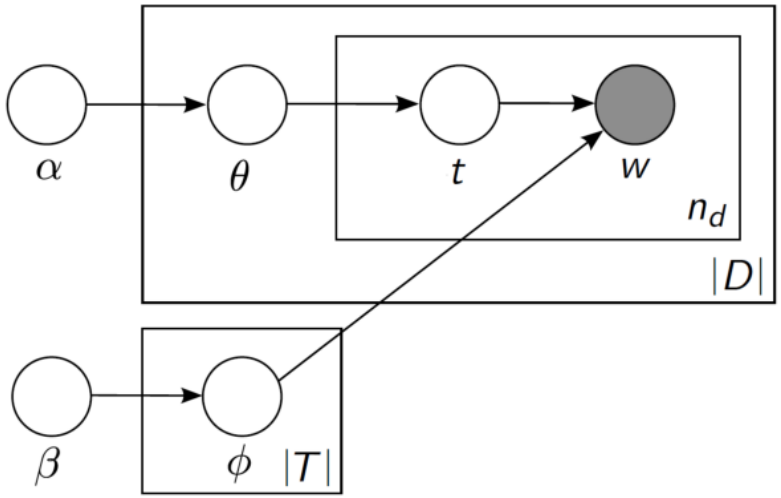


Модель LDA:

α порождает векторы документов:
$\theta_d \sim \mathrm{Dir}(\theta|\alpha), \;\; d \in D$;

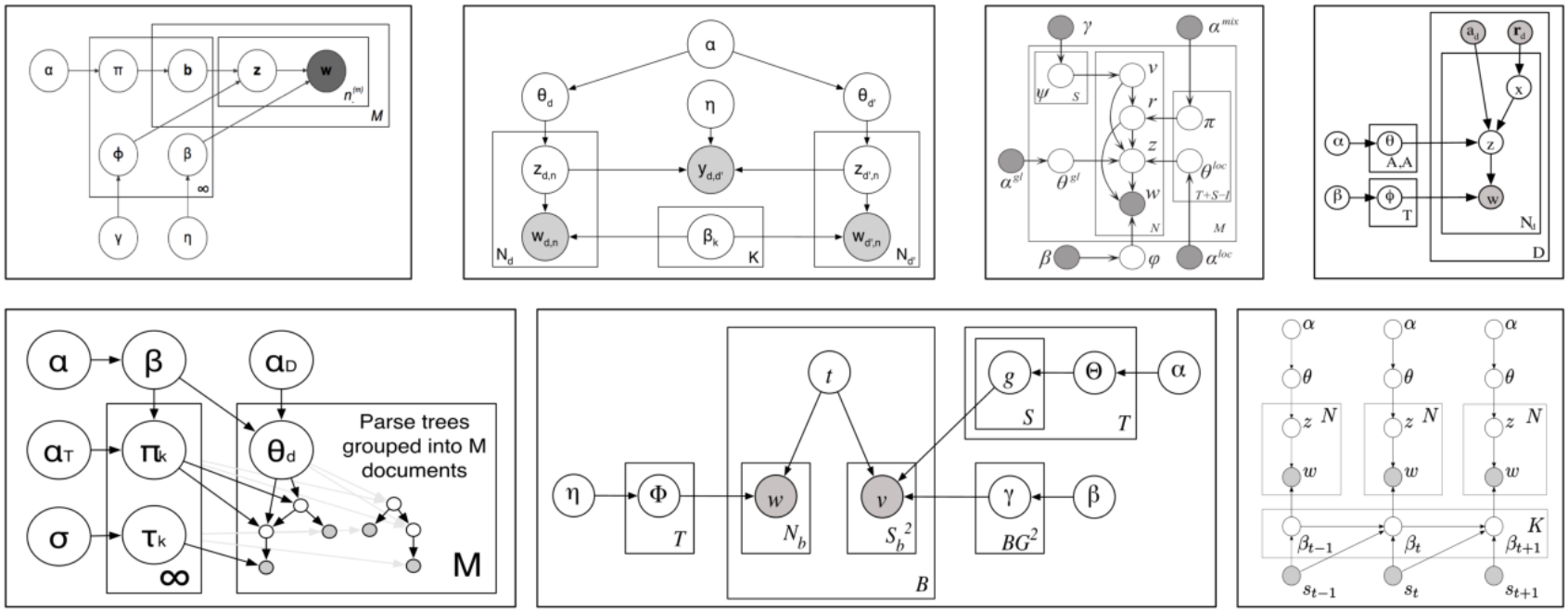
β порождает векторы тем:
$\phi_t \sim \mathrm{Dir}(\phi|\beta), \;\; t \in T$;

далее как в PLSA.



Графические нотации тематических моделей

Большое структурное разнообразие тематических моделей:



Для отображения специфических особенностей некоторых моделей приходится изобретать новые условные обозначения

David Blei. Probabilistic topic models // Communications of the ACM, 2012.

Обсуждение «Stop using Plate Notation»

Единственное достоинство и куча недостатков:

- + хорошо запоминающийся наглядный образ модели
- – множественность вариантов отображения одной модели
- – неполнота и неоднозначность интерпретации
- – не очевиден переход от картинки к модели и алгоритму
- – во многих статьях этот переход скрыт или скомкан

Один из эмоциональных комментариев:

Every now and then the topic comes up as to why algorithms and procedures are explained in obtuse forms across the entirety of the paper it is described in, usually we just conclude that *it would look too simple if it were explained any other way*.

Rob Zinkov. Stop using Plate Notation. 2013-07-28.
`http://zinkov.com/posts/2013-07-28-stop-using-plates`

Язык псевдокода порождающего процесса (generative story)

Пример: вероятностная порождающая модель LDA

Вход: гиперпараметры α, β;
Выход: коллекция документов $(d_i, w_i)_{i=1}^n$;
$\theta_d \sim \mathrm{Dir}(\theta|\alpha)$ — порождение векторов документов $d \in D$;
$\phi_t \sim \mathrm{Dir}(\phi|\beta)$ — порождение векторов тем $t \in T$;
для всех документов $d \in D$
  для всех позиций слов $i = 1, \ldots, n_d$ в документе d
    выбрать тему t_i из $p(t|d) = \theta_d$;
    выбрать слово w_i из $p(w|t_i) = \phi_{t_i}$;

- $+$ легко понимать модель, описание недвусмысленно
- $-$ не очевиден переход от модели к алгоритму
- $-$ во многих статьях этот переход скрыт или скомкан

Язык аддитивной регуляризации (почти шутка)

Мешок регуляризаторов под каждую прикладную задачу

Выявления этнорелевантного дискурса в социальных сетях:

$$\mathscr{L}\left(\text{PLSA}\right) + R\left(\text{interpretable}\right) + R\left(\text{n-gram}\right) + R\left(\text{seed words}\right) \to \max$$

Тематический поиск научных и научно-популярных статей:

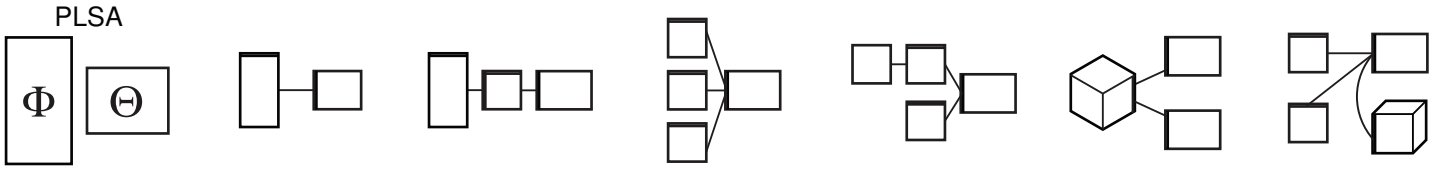
$$\mathscr{L}\left(\text{multimodal}\right) + R\left(\text{interpretable}\right) + R\left(\text{n-gram}\right) + R\left(\text{hierarchy}\right) \to \max$$

Выявление и прослеживание событий в новостном потоке:

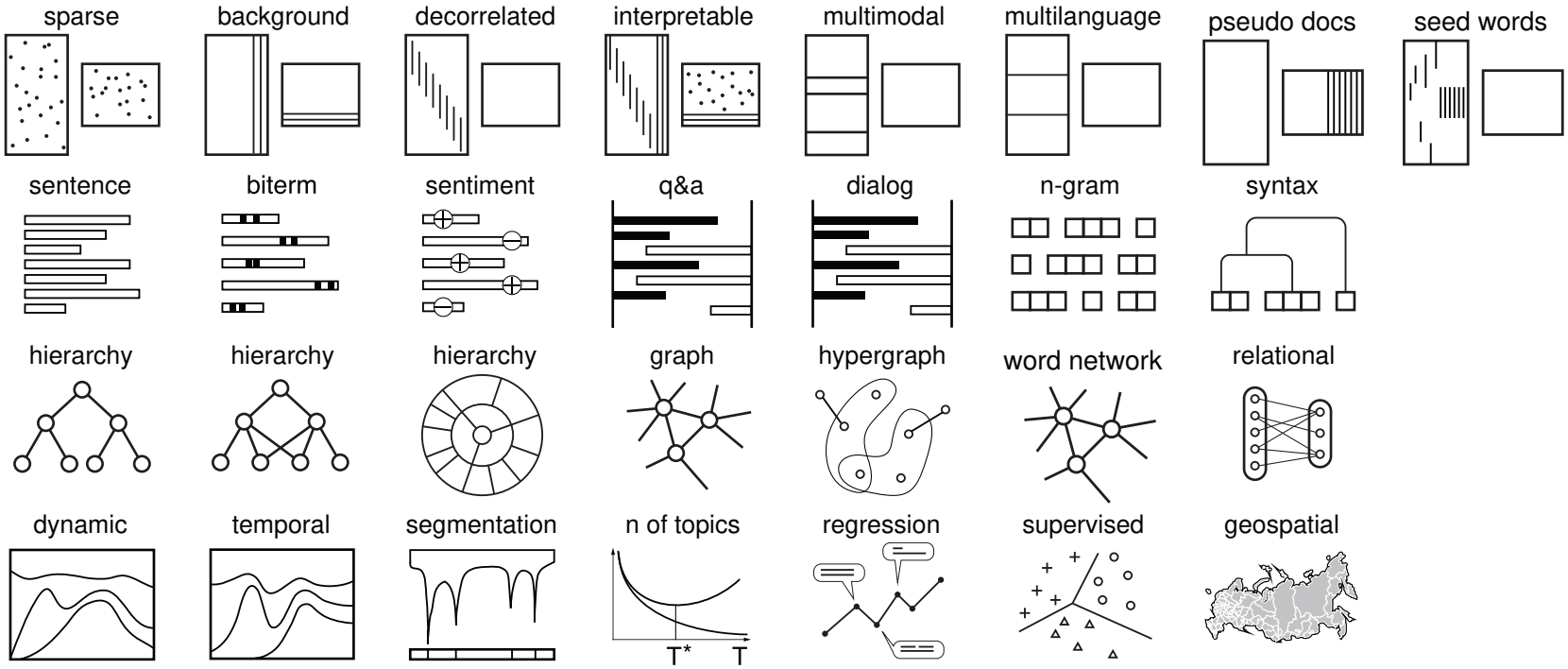
$$\mathscr{L}\left(\text{multimodal}\right) + R\left(\text{interpretable}\right) + R\left(\text{temporal}\right) + R\left(\text{sentiment}\right) \to \max$$

Язык аддитивной регуляризации: палитра регуляризаторов

Структуры матричных разложений в вероятностных моделях:



Регуляризаторы — дополнительные критерии и ограничения:



Общий взгляд на байесовское обучение, MAP и ARTM

Байесовский вывод апостериорного распределения $p(\Omega|X)$ (обычно приближённый) ради получения точечной оценки Ω:

$$\text{Posterior}(\Omega|X,\gamma) \;\propto\; p(X|\Omega)\,\text{Prior}(\Omega|\gamma)$$
$$\Omega := \arg\max_{\Omega} \text{Posterior}(\Omega|X,\gamma)$$

Максимизация апостериорной вероятности (MAP) даёт точечную оценку Ω напрямую, без вывода Posterior:

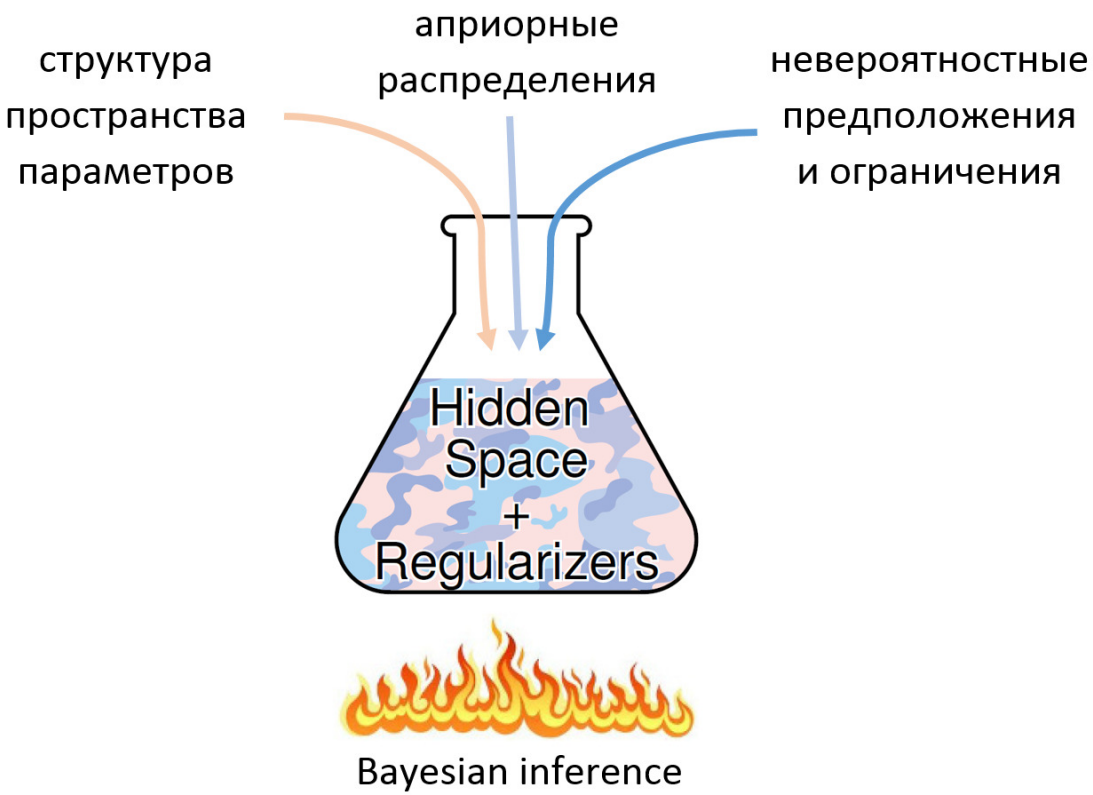
$$\Omega := \arg\max_{\Omega} \big(\ln p(X|\Omega) + \ln \text{Prior}(\Omega|\gamma)\big)$$

Многокритериальная аддитивная регуляризация (ARTM) обобщает MAP на любые регуляризаторы и их комбинации:

$$\Omega := \arg\max_{\Omega} \Big(\ln p(X|\Omega) + \sum_{i=1} \tau_i R_i(\Omega)\Big)$$

Алхимия байесовского вывода в тематическом моделировании

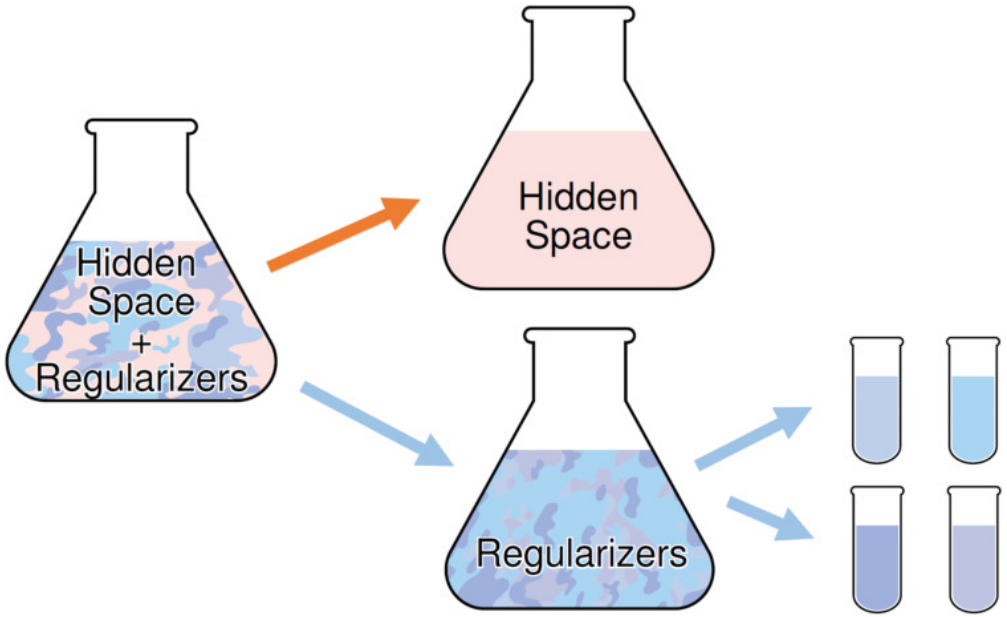
Вероятностная модель порождения данных объединяет в едином описании структуру пространства параметров, априорные распределения, дополнительные знания о задаче.



ARTM — алхимия на основе классической регуляризации

Структура пространства — набор единичных симплексов.
Регуляризаторы суммируются с весами, в любых сочетаниях,
и каждый описывает только одно дополнительное требование.

Декомпозиция — классический способ упрощения задачи



ARTM: модульный подход к синтезу требуемых моделей

Для построения композитных моделей в BigARTM не нужны ни математические выкладки, ни программирование «с нуля».

Этапы моделирования	Bayesian TM	ARTM	
	Анализ требований	Анализ требований	
Формализация:	Вероятностная модель порождения данных	Стандартные критерии	Свои критерии
Алгоритмизация:	Байесовский вывод для данной порождающей модели (VI, GS, EP)	Единый регуляризованный EM-алгоритм для любых моделей и их композиций	
Реализация:	Исследовательский код (Matlab, Python, R)	Промышленный код BigARTM (C++, Python API)	
Оценивание:	Исследовательские метрики, исследовательский код	Стандартные метрики	Свои метрики
	Внедрение	Внедрение	

-- нестандартизуемые этапы, уникальная разработка для каждой задачи

-- стандартизуемые этапы

Резюме

- Максимизация апостериорной вероятности (MAP) даёт точечные оценки (Φ, Θ) и полностью совместима с ARTM
- *Байесовский вывод* оценивает $p(\Phi, \Theta|X)$ вместо (Φ, Θ)
- Итерационный процесс в байесовских методах VB и GS для LDA не сильно отличается от EM-алгоритма в MAP

Проблемы байесовского обучения тематических моделей:

- Нам нужны лишь значения Φ, Θ, а не их распределения
- Prior Дирихле имеет слабые лингвистические обоснования
- Задача сильно усложняется для несопряжённых Prior
- Байесовский вывод уникален для каждой модели
- Нет ни общего алгоритма, ни модульной реализации
- Технически трудно обобщать и комбинировать модели