Курс «Введение в машинное обучение»

Обучаемая векторизация данных

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Введение в машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ.ФПМИ.ИС.ИАД • 13 марта 2025

Содержание

Метод главных компонент (Principal Component Analysis, PCA)

Дано: выборка объектов $\{x_i\}_{i=1}^{\ell}$,
$f_1(x), \ldots, f_n(x)$ — числовые признаки объектов

Найти:
$g_1(x), \ldots, g_m(x)$ — новые числовые признаки, $m \leqslant n$, и линейную реконструкцию старых признаков $f_j(x)$ по новым:

$$\hat{f}_j(x) = \sum_{t=1}^{m} g_t(x) u_{jt}, \quad j = 1, \ldots, n, \quad \forall x \in X,$$

Критерий: точность реконструкции f_j на обучающей выборке:

$$Q = \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{n} \big(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i)\big)^2 \to \min_{\{g_t(x_i)\},\{u_{jt}\}}$$

Это обучение без учителя и линейный автокодировщик.

Задача низкорангового матричного разложения

Матрицы «объекты–признаки», старая и новая:

$$\underset{\ell\times n}{F} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_1(x_\ell) & \ldots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}; \quad \underset{\ell\times m}{G} = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \ldots & g_m(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ g_1(x_\ell) & \ldots & g_m(x_\ell) \end{pmatrix}.$$

Матрица линейного преобразования новых признаков в старые:

$$\underset{n\times m}{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & \ldots & u_{1m} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ u_{n1} & \ldots & u_{nm} \end{pmatrix}; \qquad \hat{F} = GU^{\mathsf{T}} \overset{\text{хотим}}{\approx} F.$$

Критерий в матричном виде — ищем одновременно G и U:

$$Q(G,U) = \sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{n}\big(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i)\big)^2 = \big\|GU^{\mathsf{T}} - F\big\|^2 \to \min_{G,U},$$

Основная теорема метода главных компонент

Теорема

Если $m \leqslant \operatorname{rk} F$, *то минимум* $\left\|GU^{\mathsf{T}} - F\right\|^2$ *достигается, когда столбцы* U *— это с.в. матрицы* $F^{\mathsf{T}}F$, *соответствующие* m *максимальным с.з.* $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$, *и* $G = FU$, *при этом:*

1. *матрица* U *ортонормирована:* $U^{\mathsf{T}}U = I_m$;
2. *матрица* G *ортогональна:* $G^{\mathsf{T}}G = \Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$;
3. $U\Lambda = F^{\mathsf{T}}FU$; $G\Lambda = FF^{\mathsf{T}}G$;
4. $Q = \left\|GU^{\mathsf{T}} - F\right\|^2 = \|F\|^2 - \operatorname{tr}\Lambda = \lambda_{m+1} + \cdots + \lambda_n$.

При $m = n$ разложение $F = GU^{\mathsf{T}}$ является точным $(Q = 0)$ и совпадает с сингулярным разложением $F = (G\Lambda^{-\frac{1}{2}}) \cdot \Lambda^{\frac{1}{2}} \cdot U^{\mathsf{T}}$

Вопрос: как доказывать эту теорему, какие есть идеи?

Использовано тождество: $\|F\|^2 = \operatorname{tr}(F^{\mathsf{T}}F) = \lambda_1 + \cdots + \lambda_n$

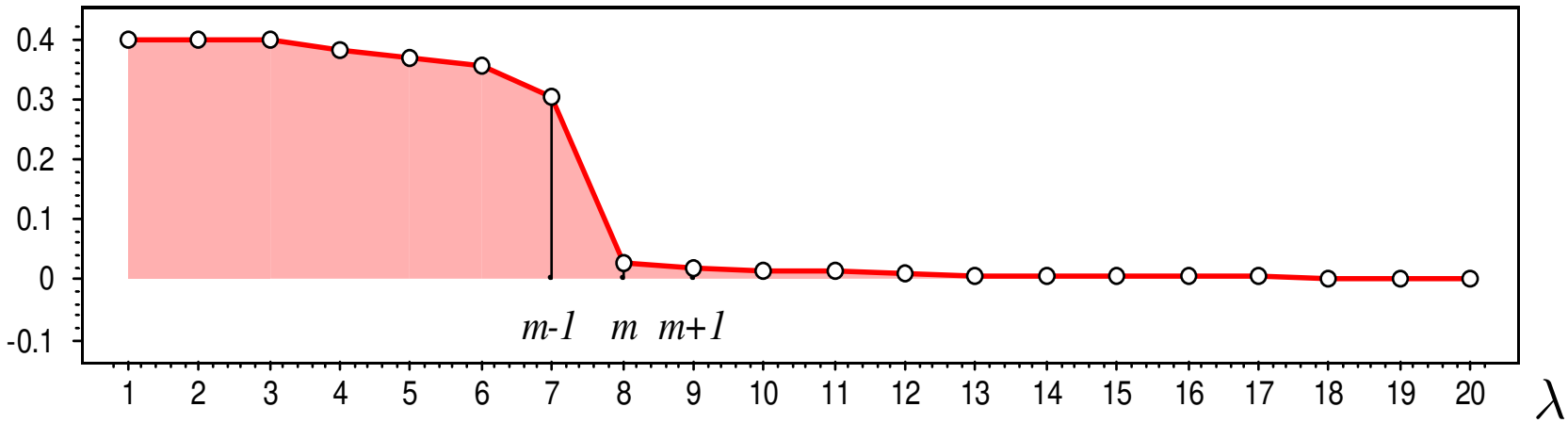
Эффективная размерность выборки

Упорядочим с.з. $F^\mathsf{T}F$ по убыванию: $\lambda_1 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$.

Эффективная размерность выборки — наименьшее целое m, при котором относительная погрешность достаточно мала:

$$E_m = \frac{\|GU^\mathsf{T} - F\|^2}{\|F\|^2} = \frac{\lambda_{m+1} + \cdots + \lambda_n}{\lambda_1 + \cdots + \lambda_n} \leqslant \varepsilon.$$

Критерий «крутого склона»: находим m: $E_{m-1} \gg E_m$:



Вопрос: что в таком случае можно сказать о признаках $(f_j)_{j=1}^n$?

Разреженное низкоранговое матричное разложение

Дано: матрица $F = (f_{ij})_{\ell \times n}$, $(i,j) \in \Omega \subseteq \{1,\dots,\ell\} \times \{1,\dots,n\}$

Найти: матрицы $G = (g_{it})_{\ell \times m}$ и $U^{\mathsf{T}} = (u_{tj})_{m \times n}$

Критерий: $\|F - GU^{\mathsf{T}}\|_{\Omega}^2 = \sum_{(i,j)\in\Omega} \left(f_{ij} - \sum_t g_{it} u_{tj}\right)^2 \to \min_{G,U}$

Классический SVD становится неприменим, когда

- данные разреженные: $|\Omega| < \ell n$, часто $|\Omega| \ll \ell n$
- функция потерь неквадратичная
- матричное разложение неотрицательное: $g_{it} \geqslant 0$, $u_{tj} \geqslant 0$
  или стохастическое: $\sum_t g_{it} = 1$, $\sum_t u_{tj} = 1$, $g_{it} \geqslant 0$, $u_{tj} \geqslant 0$

Ситуации применения:

- снижение размерности вектора признаков, $m \ll n$
- выявление латентной внутренней структуры данных
- восстановление пропущенных значений (missing values)

Модель латентных факторов (LFM, Latent Factor Model)

В рекомендательных системах:

f_{ij} — выбор (покупка, лайк, рейтинг) клиентом i товара j

$g_i = (g_{it})_t$ — латентный вектор интересов (embedding) клиента i

$u_j = (u_{tj})_t$ — латентный вектор интересов (embedding) товара j

Метод стохастического градиента:

выбираем $(i,j) \in \Omega$ в случайном порядке;

градиентный шаг для задачи $\varepsilon_{ij}^2 \to \min\limits_{g_i,u_j}$, где $\varepsilon_{ij} = f_{ij} - \sum\limits_t g_{it}u_{tj}$:

$$g_{it} := g_{it} + \eta\varepsilon_{ij}u_{tj}, \quad t = 1,\ldots,m$$

$$u_{tj} := u_{tj} + \eta\varepsilon_{ij}g_{it}, \quad t = 1,\ldots,m$$

B1: как повлияет регуляризация $\varepsilon_{ij}^2 + \lambda\|g_i\|^2 + \mu\|u_j\|^2 \to \min\limits_{g_i,u_j}$?

B2: как ввести ограничения $g_{it} \geqslant 0$, $u_{tj} \geqslant 0$?

Tacáks G., Pilászy I., Németh B., Tikk D. Scalable collaborative filtering approaches for large recommendation systems // JMLR, 2009, No. 10, Pp. 623–656.

Ещё примеры задач неотрицательного матричного разложения

Разделение смеси веществ в жидкостной хроматографии

$$f(t,\lambda) = \sum_i c_i(t)s_i(\lambda)$$

дано: $f(t,\lambda)$ — концентрация на выходе УФ-детектора
найти: $c_i(t)$ — хроматограмма i-го вещества, t — время
$s_i(\lambda)$ — спектр i-го вещества, λ — длина волны

Латентный семантический анализ текстовой коллекции (вероятностное тематическое моделирование)

$$f_{wd} = \sum_t \phi_{wt}\theta_{td}$$

дано: $f_{wd} = p(w|d)$ — частота слова w в документе d
найти: $\phi_{wt} = p(w|t)$ — распределение слов w в теме t
$\theta_{td} = p(t|d)$ — распределение тем t в документе d

В: приведите ещё примеры парно-сепарабельных функций.

Дистрибутивная гипотеза и виды семантической близости слов

Смысл слова есть множество всех контекстов его употребления

- Words that occur in the same contexts tend to have similar meanings [Harris, 1954].
- You shall know a word by the company it keeps [Firth, 1957].

Синтагматическая близость слов:
сочетаемость слов в одном контексте
(здание–строитель, кран–вода, функция–точка)

Парадигматическая близость слов:
взаимозаменяемость слов в одном контексте
(здание–дом, кран–смеситель, функция–отображение)

Z.Harris. Distributional structure. 1954.
J.R.Firth. A synopsis of linguistic theory 1930-1955. Oxford, 1957.
P.Turney, P.Pantel. From frequency to meaning: vector space models of semantics. 2010.

Обучение векторных представлений слов (word2vec)

Дано: $\{w_1, \ldots, w_n\}$ — текст, последовательность слов (токенов)
$C_i = \{\ldots, w_i, \ldots\}$ — контекст слова w_i, например, $\pm k$ слов

Найти: векторы u_w (embedding), кодирующие смысл слов w

Критерий: log-loss для бинарной классификации пар слов:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{w \in C_i} \Big(\log p(+1|w, w_i) + \log p(-1|\bar{w}, w_i) \Big) \to \max_{U,V}$$

$p(y|w, w_i) = \sigma\big(y\langle u_w, v_{w_i}\rangle\big)$ — модель классификации, $y = \pm 1$;
$y = +1$, если w находится в контексте слова w_i;
$y = -1$, если w не находится в контексте слова w_i;
$\bar{w}$ сэмплируется из $p(w)^{3/4}$ (skip-gram negative sampling, SGNS)

В: какой смысл вводить два вектора v_w, u_w?

T.Mikolov et al. Efficient estimation of word representations in vector space, 2013.

Связь word2vec с матричными разложениями

d — размерность векторов слов v_w и u_w словаря W
$V = (v_w)_{W \times d}$ — матрица предсказывающих векторов слов
$U = (u_w)_{W \times d}$ — матрица предсказываемых векторов слов

SGNS строит матричное разложение $P \approx UV^{\mathsf{T}}$ матрицы Shifted PMI (Point-wise Mutual Information):

$$P_{ab} = \ln \frac{n_{ab} n}{n_a n_b} - \ln k,$$

n_{ab} — частота пары слов a, b в окне $\pm k$ слов,
n_a, n_b — число пар с участием слова a и b соответственно,
n — число всех пар слов в коллекции.

В качестве эвристики используют также Shifted Positive PMI:

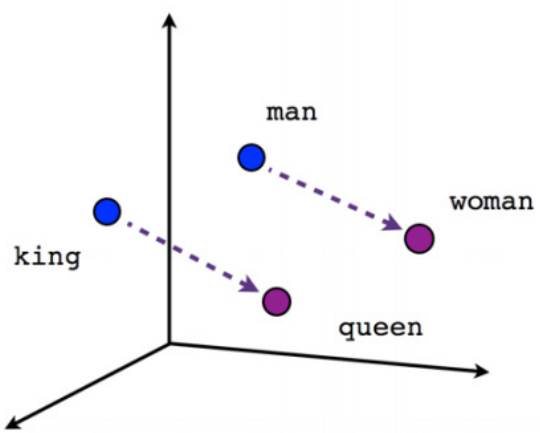
$$P^+_{ab} = \left(\ln \frac{n_{ab} n}{n_a n_b} - \ln k \right)_+.$$

O.Levy, Y.Goldberg. Neural word embedding as implicit matrix factorization. 2014.

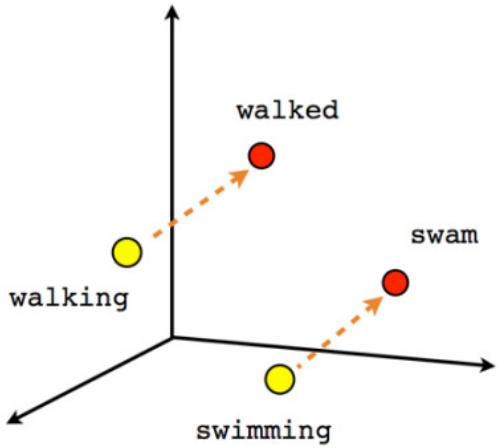
Проверка на задачах семантической близости и аналогии слов

Задача семантической близости слов:
по выборке пар слов (a, b) оценивается корреляция Спирмена между $\cos(v_a, v_b)$ и экспертными оценками близости слов

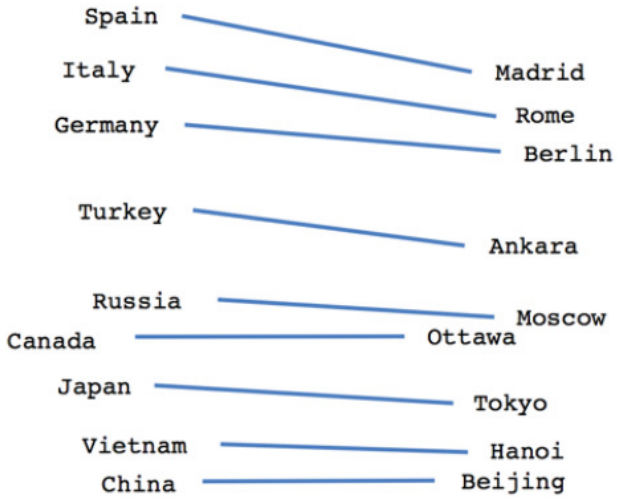
Задача семантической аналогии слов:
по трём словам угадать четвёртое



Male-Female



Verb tense



Country-Capital

Модель векторных представлений FastText

Идея: векторное представление слова w определяется как сумма векторов всех его буквенных n-грамм $G(w)$:

$$u_w = \sum_{g \in G(w)} u_g$$

В Skip-gram вместо векторов слов u_w обучаются векторы u_g

Пример: $G(\text{дармолюб}) = \{<\text{да}, \text{арм}, \text{рмо}, \text{мол}, \text{олю}, \text{люб}, \text{юб}>\}$

Преимущества:

- Это решает проблемы новых слов и слов с опечатками
- Подходит для обработки текстов социальных медиа
- Словарь 2- и 3-грамм много меньше словаря слов
- Существует много предобученных моделей

Bojanowski et al. Enriching word vectors with subword information. 2016.

Модели векторных представлений для текстов и графов

word2vec: *эмбединги* (векторные представления) слов
T.Mikolov et al. Efficient estimation of word representations in vector space. 2013.

paragraph2vec: эмбединги фрагментов или документов
Q.Le, T.Mikolov. Distributed representations of sentences and documents. 2014.

sent2vec: эмбединги предложений
M.Pagliardini et al. Unsupervised learning of sentence embeddings using compositional n-gram features. 2017.

FastText: эмбединги символьных *n*-грамм
`https://github.com/facebookresearch/fastText`

node2vec: эмбединги вершин графа
A.Grover, J.Leskovec. Node2vec: scalable feature learning for networks. 2016.

graph2vec: более общие эмбединги на графах
A.Narayanan et al. Graph2vec: learning distributed representations of graphs. 2017.

StarSpace: эмбединги чего угодно от Facebook AI Research
L.Wu, A.Fisch, S.Chopra, K.Adams, A.B.J.Weston. StarSpace: embed all the things! 2018.

BERT: эмбединги фраз и предложений от Google AI Language
J.Devlin et al. BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2018.

GPT-3: эмбединги, предобученные по 570Gb текстов от OpenAI
T.B.Brown et al. Language Models are Few-Shot Learners. 2020.

Многомерное шкалирование (multidimensional scaling, MDS)

Дано: $(i,j) \in E$ — выборка рёбер графа $\langle V, E \rangle$,
R_{ij} — расстояния между вершинами ребра (i,j).
Например, в IsoMAP R_{ij} — длина кратчайшего пути по графу.

Найти: векторные представления вершин $z_i \in \mathbb{R}^d$, так, чтобы близкие (по графу) вершины имели близкие векторы.

Критерий стресса (stress):

$$\sum_{(i,j)\in E} w(R_{ij})\big(\rho(z_i,z_j) - R_{ij}\big)^2 \to \min_Z, \quad Z \in \mathbb{R}^{V\times d},$$

где $\rho(z_i,z_j) = \|z_i - z_j\|$ — обычно евклидово расстояние,

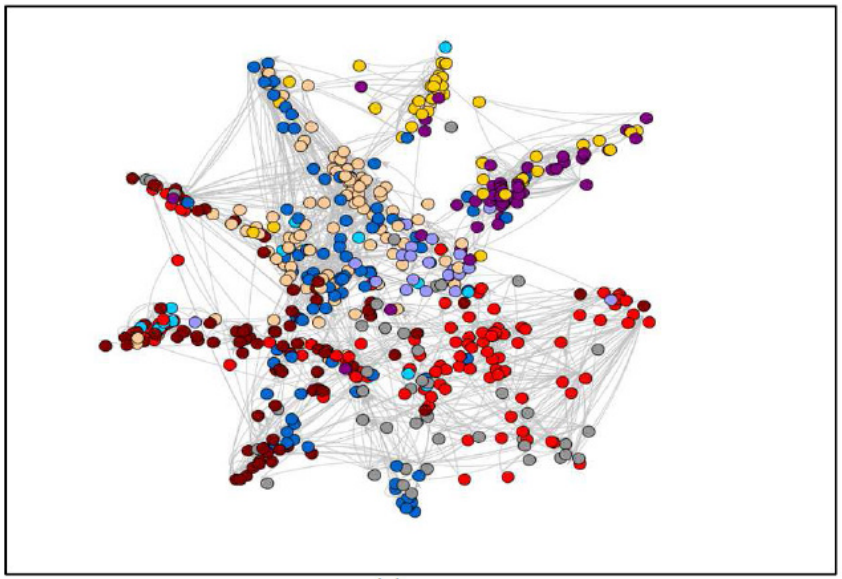
Обычно решается методом стохастического градиента (SG).

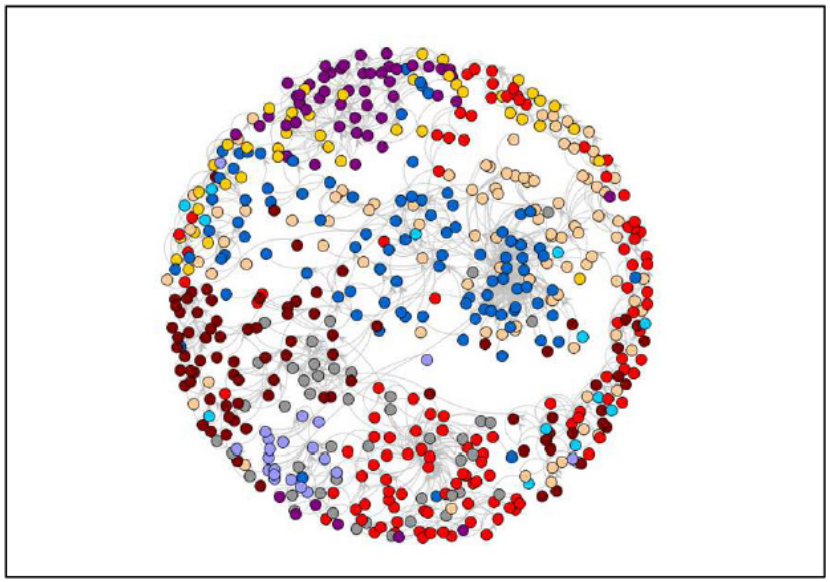
Вопрос: как лучше задавать веса $w(R_{ij}) = 1$? R_{ij}? $\frac{1}{R_{ij}}$?

I.Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

Многомерное шкалирование для визуализации данных

При $d = 2$ осуществляется проекция выборки на плоскость





- Используется для визуализации кластерных структур
- Форму облака точек можно настраивать весами и метрикой
- Недостаток — искажения неизбежны
- Наиболее популярная разновидность метода — t-SNE

Laurens van der Maaten, Geoffrey Hinton. Visualizing data using t-SNE. 2008

Графовые разложения (graph factorization)

Дано: $(i,j) \in E$ — выборка рёбер графа $\langle V, E \rangle$,
S_{ij} — близость между вершинами ребра (i,j).
Например, $S_{ij} = [(i,j) \in E]$ — матрица смежности вершин.

Найти: векторные представления вершин, так, чтобы близкие (по графу) вершины имели близкие векторы.

Критерий для неориентированного графа (S симметрична):

$$\left\| S - ZZ^{\mathsf{T}} \right\|_E = \sum_{(i,j)\in E} \left(\langle z_i, z_j \rangle - S_{ij} \right)^2 \to \min_Z, \quad Z \in \mathbb{R}^{V \times d}$$

Критерий для ориентированного графа (S несимметрична):

$$\left\| S - \Phi\Theta^{\mathsf{T}} \right\|_E = \sum_{(i,j)\in E} \left(\langle \phi_i, \theta_j \rangle - S_{ij} \right)^2 \to \min_{\Phi,\Theta}, \quad \Phi, \Theta \in \mathbb{R}^{V \times d}$$

Обычно решается методом стохастического градиента (SG).

I.Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

Векторные представления графов как автокодировщики

Рассмотренные выше методы векторных представлений графов суть автокодировщики для реконструкции данных о рёбрах:

- word2vec: $[w_j \in C_i] \to \exp\langle u_j, v_i \rangle$
- многомерное шкалирование: $R_{ij} \to \|z_i - z_j\|$
- SNE: $P(i \text{ является соседом } j) \to RDF(\|z_i - z_j\|)$
- графовые разложения: $S_{ij} \to \langle z_i, z_j \rangle$ или $S_{ij} \to \langle \phi_i, \theta_j \rangle$

Вход кодировщика:

- W_{ij} — данные о ребре графа (i, j)

Выход кодировщика:

- векторные представления вершин z_i

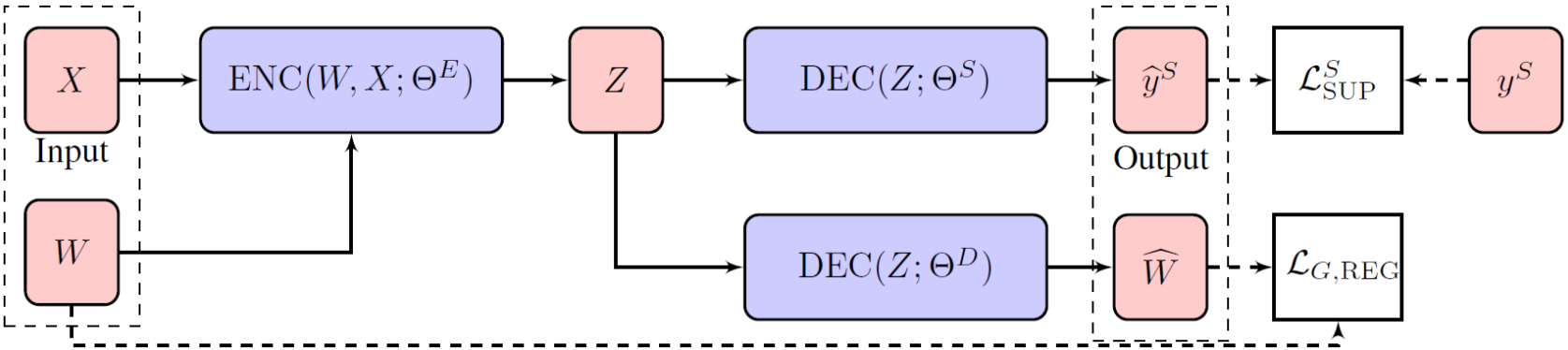
Выход декодировщика:

- аппроксимация $\hat{W}_{ij}$, вычисляемая по (z_i, z_j)

I.Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

GraphEDM: обобщённый автокодировщик на графах

Graph Encoder Decoder Model — обобщает более 30 моделей:



$W \in \mathbb{R}^{V \times V}$ — входные данные о рёбрах
$X \in \mathbb{R}^{V \times n}$ — входные данные о вершинах, признаковые описания
$Z \in \mathbb{R}^{V \times d}$ — векторные представления вершин графа
$\mathrm{DEC}(Z; \Theta^D)$ — декодер, реконструирующий данные о рёбрах
$\mathrm{DEC}(Z; \Theta^S)$ — декодер, решающий supervised-задачу
y^S — (semi-)supervised данные о вершинах или рёбрах
$\mathcal{L}$ — функции потерь

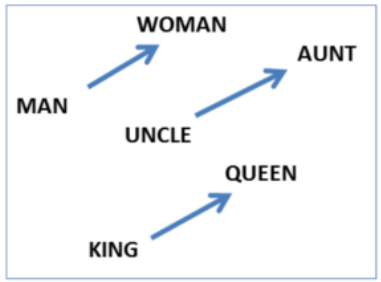
I.Chami et al. Machine learning on graphs: a model and comprehensive taxonomy. 2020.

Эволюция подходов машинного обучения в анализе текстов

Декомпозиция задач по уровням пирамиды NLP

- морфологический анализ, лемматизация, опечатки
- синтаксический анализ, выделение терминов, NER
- семантический анализ, выделение фактов, тем

Модели векторных представлений (эмбедингов) слов на основе матричных разложений



- модели дистрибутивной семантики:
  word2vec [Mikolov, 2013], FastText [Bojanowski, 2016]
- тематические модели LDA [Blei, 2003], ARTM [2014]

Нейросетевые модели локальных контекстов

- рекуррентные нейронные сети
- модели внимания и трансформеры:
  BERT [2018], GPT-3 [2020], GPT-4 [2023]

$$\text{softmax}\left(\frac{Q \times K^T}{\sqrt{d}}\right) V$$

Трасформер для машинного перевода

Трасформер (transformer) — это нейросетевая архитектура для трансформации векторов слов в контекстно-зависимые

Схема преобразований данных в машинном переводе:

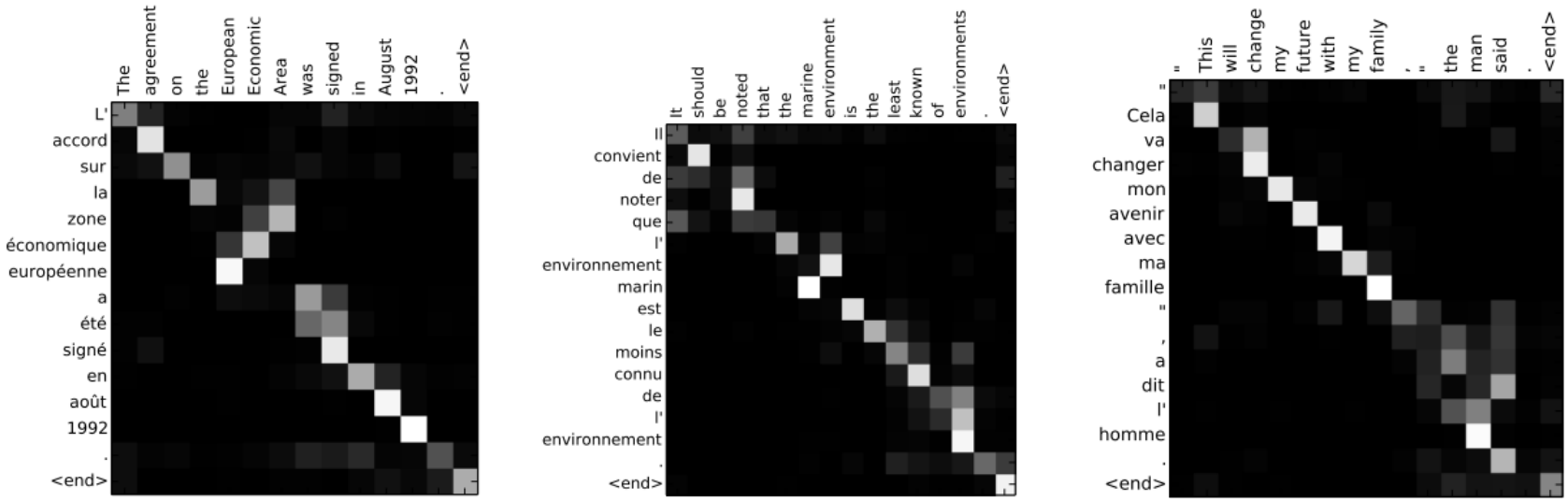
- $S = (w_1, \ldots, w_n)$ — слова предложения на входном языке
  $\downarrow$ обучаемая или пред-обученная векторизация слов
- $X = (x_1, \ldots, x_n)$ — векторы слов входного предложения
  $\downarrow$ трансформер-кодировщик
- $Z = (z_1, \ldots, z_n)$ — контекстно-зависимые векторы слов
  $\downarrow$ трансформер-декодировщик, похож на кодировщика
- $Y = (y_1, \ldots, y_m)$ — векторы слов выходного предложения
  $\downarrow$ генерация слов из построенной языковой модели
- $\tilde{S} = (\tilde{w}_1, \ldots, \tilde{w}_m)$ — слова предложения на выходном языке

Vaswani et al. (Google) Attention is all you need. 2017.

Модели внимания для машинного перевода

$X = (x_1, \ldots, x_n)$ — векторы слов входного предложения
$Y = (y_1, \ldots, y_m)$ — векторы слов выходного предложения

Модель внимания оценивает матрицу семантического сходства $A_{ti} = a(x_i, y_t)$ — насколько входное слово x_i важно (требует внимания) для обработки выходного слова y_t



Bahdanau et al. Neural machine translation by jointly learning to align and translate. 2015.

Модель внимания Query–Key–Value

q — *вектор-запрос* для трансформации в вектор-контекст z
$K = (k_1, \ldots, k_n)$ — *векторы-ключи*, сравниваемые с запросом
$X = (x_1, \ldots, x_n)$ — *векторы-значения*, образующие контекст

Модель внимания — трёхслойная сеть, вычисляющая z как выпуклую комбинацию векторов x_i, релевантных запросу q:

$$z = \text{Attn}(q, K, X) = \sum_i x_i \,\text{SoftMax}_i\, a(k_i, q),$$

где $a(k, q)$ — *оценка релевантности* ключа k запросу q,
например $a(k, q) = k^\mathsf{T} q$ или $k^\mathsf{T} W q$ с матрицей параметров W

Модель внутреннего внимания (самовнимания, self-attention):

$$z_i = \text{Attn}(W_q x_i, W_k X, W_v X)$$

трансформирует входную последовательность $X = (x_1, \ldots, x_n)$
в выходную последовательность векторов контекста $(z_1, \ldots, z_n)$

Архитектура трансформера-кодировщика

1. Добавляются позиционные векторы p_i:
$h_i = x_i + p_i, \quad H = (h_1, \ldots, h_n)$
$d = \dim x_i, p_i, h_i = 512$
$\dim H = 512 \times n$

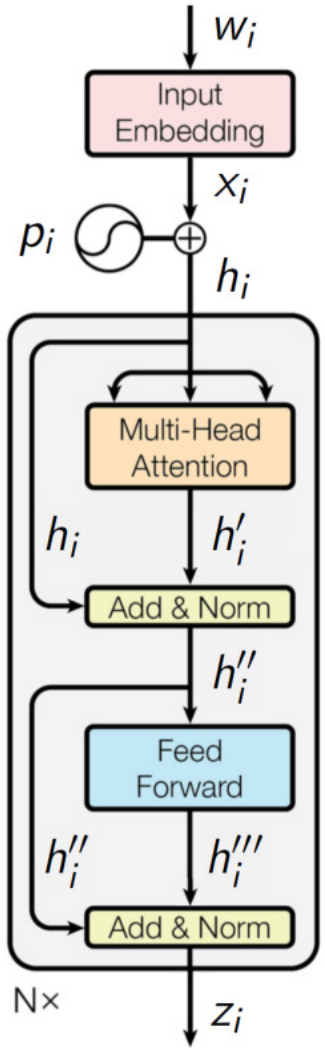
2. Многомерное самовнимание:
$h_i^j = \text{Attn}(W_q^j h_i, W_k^j H, W_v^j H)$
$j = 1, \ldots, J = 8$
$\dim h_i^j = 64$
$\dim W_q^j, W_k^j, W_v^j = 64 \times 512$

3. Конкатенация (multi-head attention):
$h'_i = \text{MH}_j(h_i^j) \equiv \left[h_i^1 \cdots h_i^J\right]$
$\dim h'_i = 512$

4. Сквозная связь + нормировка уровня:
$h''_i = \text{LN}(h'_i + h_i; \mu_1, \sigma_1)$
$\dim h''_i, \mu_1, \sigma_1 = 512$

5. Полносвязная 2х-слойная сеть FFN:
$h'''_i = W_2\,\text{ReLU}(W_1 h''_i + b_1) + b_2$
$\dim W_1 = 2048 \times 512$
$\dim W_2 = 512 \times 2048$

6. Сквозная связь + нормировка уровня:
$z_i = \text{LN}(h'''_i + h''_i; \mu_2, \sigma_2)$
$\dim z_i, \mu_2, \sigma_2 = 512$



Несколько дополнений и замечаний

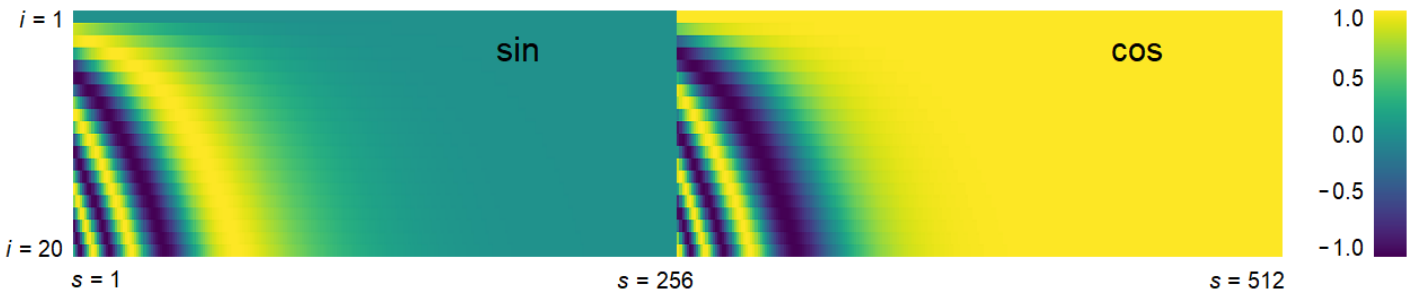
- $N = 6$ блоков $h_i \to \square \to z_i$ соединяются последовательно
- эмбединги слов $x_i \in \mathbb{R}^d$ — обучаемые или пред-обученные
- нормировка уровня (Layer Normalization), $x, \mu, \sigma \in \mathbb{R}^d$:

$$\mathrm{LN}_s(x; \mu, \sigma) = \sigma_s \frac{x_s - \bar{x}}{\sigma_x} + \mu_s, \quad s = 1, \ldots, d,$$

$\bar{x} = \frac{1}{d}\sum_s x_s$ и $\sigma_x^2 = \frac{1}{d}\sum_s (x_s - \bar{x})^2$ — среднее и дисперсия x

- Позиции слов i кодируются векторами p_i, $i = 1, \ldots, n$;
чем больше $|i - j|$, тем больше $\|p_i - p_j\|$, n не ограничено:

$$p_{is} = \sin(i\, 10^{-8\frac{s}{d}}), \quad p_{i,s+\frac{d}{2}} = \cos(i\, 10^{-8\frac{s}{d}}), \quad s = 1, \ldots, \tfrac{d}{2}$$

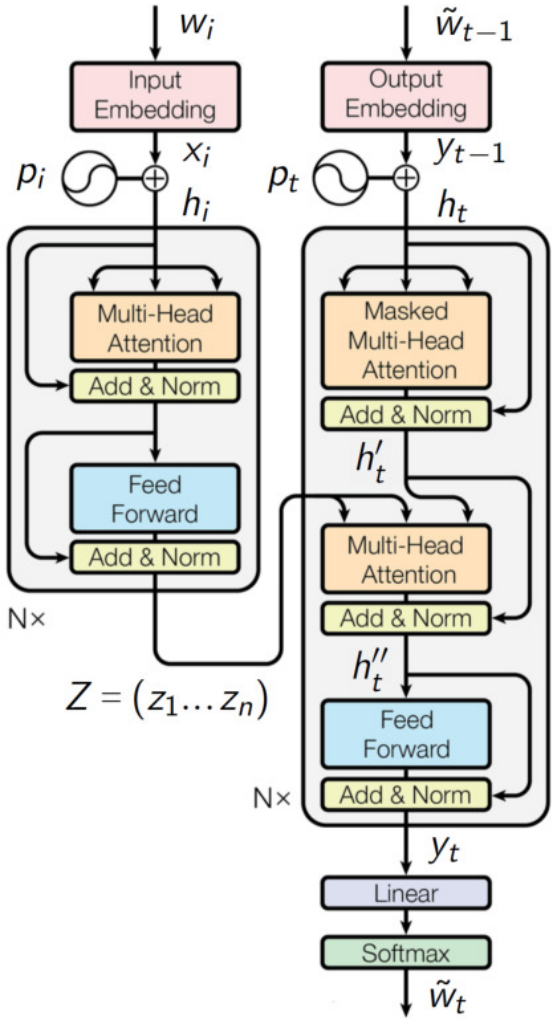


Архитектура трансформера декодировщика

Авторегрессионный синтез последовательности:
$y_0 = \langle \text{BOS} \rangle$ — вектор символа начала;
для всех $t = 1, 2, \ldots$:

1. Маскирование «данных из будущего»:
   $h_t = y_{t-1} + p_t; \quad H_t = (h_1, \ldots, h_t)$
2. Многомерное самовнимание:
   $h'_t = \text{LN} \circ \text{MH}_j \circ \text{Attn}(W^j_q h_t, W^j_k H_t, W^j_v H_t)$
3. Многомерное внимание на кодировку Z:
   $h''_t = \text{LN} \circ \text{MH}_j \circ \text{Attn}(\tilde{W}^j_q h'_t, \tilde{W}^j_k Z, \tilde{W}^j_v Z)$
4. Двухслойная полносвязная сеть:
   $y_t = \text{LN} \circ \text{FFN}(h''_t)$
5. Линейный предсказывающий слой:
   $p(\tilde{w}|t) = \text{SoftMax}_{\tilde{w}}(W_y y_t + b_y)$

генерация $\tilde{w}_t = \arg\max_{\tilde{w}} p(\tilde{w}|t)$ **пока** $\tilde{w}_t \neq \langle \text{EOS} \rangle$



Vaswani et al. (Google) Attention is all you need. 2017.

Критерии обучения и валидации для машинного перевода

Критерий для обучения параметров нейронной сети W по обучающей выборке предложений S с переводом $\tilde{S}$:

$$\sum_{(S,\tilde{S})} \sum_{\tilde{w}_t \in \tilde{S}} \ln p(\tilde{w}_t | t, S, W) \to \max_W$$

Критерий оценивания моделей (недифференцируемые) по выборке пар предложений «перевод S, эталон S_0»:

BiLingual Evaluation Understudy:

$$\text{BLEU} = \min\left(1, \frac{\sum \text{len}(S)}{\sum \text{len}(S_0)}\right) \text{mean}_{(S_0,S)} \left(\prod_{n=1}^{4} \frac{\#n\text{-грамм из } S, \text{ входящих в } S_0}{\#n\text{-грамм в } S} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Word Error Rate:

$$\text{WER} = \text{mean}_{(S_0,S)} \left(\frac{\#\text{вставок} + \#\text{удалений} + \#\text{замен}}{\text{len}(S)} \right)$$

Vaswani et al. (Google) Attention is all you need. 2017.

BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers)

Трансформер BERT — это кодировщик без декодировщика, предобучаемый на большой текстовой коллекции для решения широкого класса задач автоматической обработки текста

Схема преобразования данных в задачах NLP:

- $S = (w_1, \ldots, w_n)$ — токены предложения входного текста
  $\downarrow$ обучение эмбедингов вместе с трансформером
- $X = (x_1, \ldots, x_n)$ — эмбединги токенов входного предложения
  $\downarrow$ трансформер кодировщика
- $Z = (z_1, \ldots, z_n)$ — трансформированные эмбединги
  $\downarrow$ дообучение на конкретную задачу
- Y — выходной текст / разметка / классификация и т.п.

Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

Критерий MLM (masked language modeling) для обучения BERT

Критерий маскированного языкового моделирования MLM, строится автоматически по текстам (self-supervised learning):

$$\sum_{S} \sum_{i \in M(S)} \ln p(w_i | i, S, W) \to \max_{W},$$

где $M(S)$ — подмножество маскированных токенов из S,

$$p(w | i, S, W) = \underset{w \in V}{\mathrm{SoftMax}}(W_z z_i(S, W_T) + b_z)$$

— языковая модель, предсказывающая i-й токен предложения S;

$z_i(S, W_T)$ — контекстный эмбединг i-го токена предложения S на выходе трансформера-кодировщика с параметрами W_T;

$W = (W_T, W_z, b_z)$ — все параметры языковой модели

Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

Критерий NSP (next sentence prediction) для обучения BERT

Критерий предсказания связи между предложениями NSP, строится автоматически по текстам (self-supervised learning):

$$\sum_{(S,S')} \ln p\big(y_{SS'}|S,S',W\big) \to \max_{W},$$

где $y_{SS'} = [\text{за } S \text{ следует } S']$ — классификация пары предложений,

$$p(y|S,S',W) = \underset{y\in\{0,1\}}{\text{SoftMax}}\big(W_y\,\text{th}(W_s z_0(S,S',W_T) + b_s) + b_y\big)$$

— вероятностная модель бинарной классификации пар (S,S'), $z_0(S,S',W_T)$ — контекстный эмбединг токена $\langle\texttt{CLS}\rangle$ для пары предложений, записанной в виде $\langle\texttt{CLS}\rangle\ S\ \langle\texttt{SEP}\rangle\ S'\ \langle\texttt{SEP}\rangle$

Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

Ещё несколько замечаний про трансформеры

- **Fine-tuning:** для дообучения на задаче задаётся модель $f(Z(S, W_T), W_f)$, выборка $\{S\}$ и критерий $\mathscr{L}(S, f) \to \max$
- **Multi-task learning:** для дообучения на наборе задач $\{t\}$ задаются модели $f_t(Z(S, W_T), W_t)$, выборки $\{S\}_t$ и сумма критериев $\sum_t \lambda_t \sum_S \mathscr{L}_t(S, f_t) \to \max$
- *GLUE*, *SuperGLUE*, *Russian SuperGLUE*, *MERA*, *SLAVA* — наборы тестовых задач на понимание и генерацию языка
- Трансформеры обычно строятся не на словах, а на токенах, получаемых BPE (Byte-Pair Encoding) или WordPiece
- Первый трансформер: $N = 6$, $d = 512$, $J = 8$, весов 65M
- $\text{BERT}_{\text{BASE}}$, GPT1: $N = 12$, $d = 768$, $J = 12$, весов 110M
- $\text{BERT}_{\text{LARGE}}$: $N = 24$, $d = 1024$, $J = 16$, весов 340M

ChatGPT и GPT-4: проблески общего искусственного интеллекта

Sparks of Artificial General Intelligence: Early experiments with GPT-4

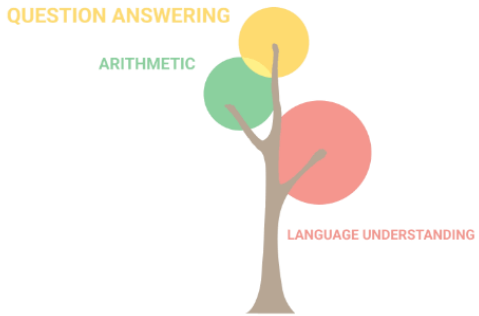
Sébastien Bubeck, Varun Chandrasekaran, Ronen Eldan, Johannes Gehrke, Eric Horvitz, Ece Kamar, Peter Lee, Yin Tat Lee, Yuanzhi Li, Scott Lundberg, Harsha Nori, Hamid Palangi, Marco Tulio Ribeiro, Yi Zhang

Microsoft Research *(27 March 2023)*

Новые способности модели, не закладывавшиеся при обучении:

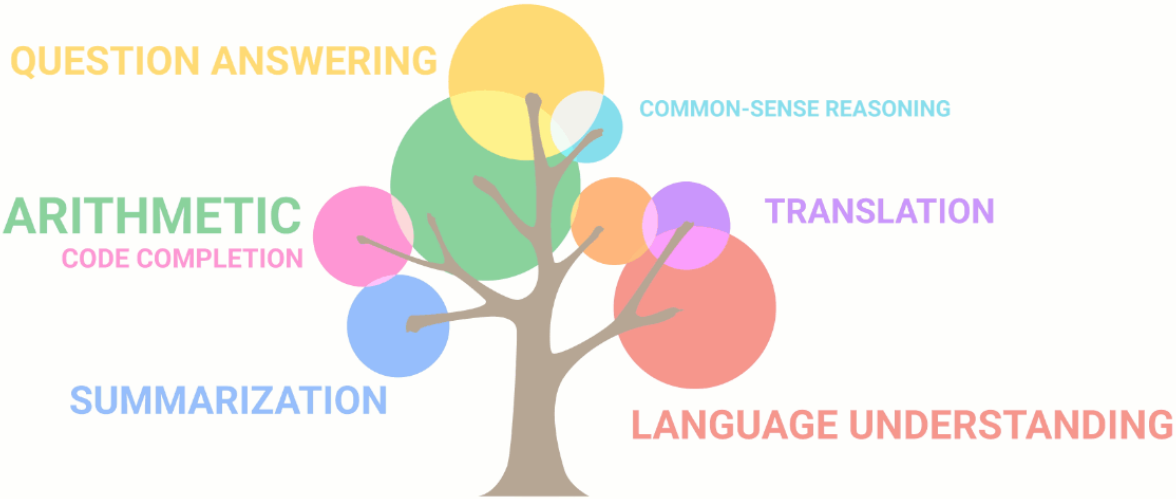
- объяснять свои ответы, перефразировать
- реферировать, генерировать планы, сценарии, шаблоны
- переводить на другие языки, строить аналогии, менять тональность, стиль, глубину изложения
- генерировать программный код на различных языках
- решать некоторые логические и математические задачи
- искать и исправлять собственные ошибки по подсказке

Эмерджентность — появление качественно новых способностей



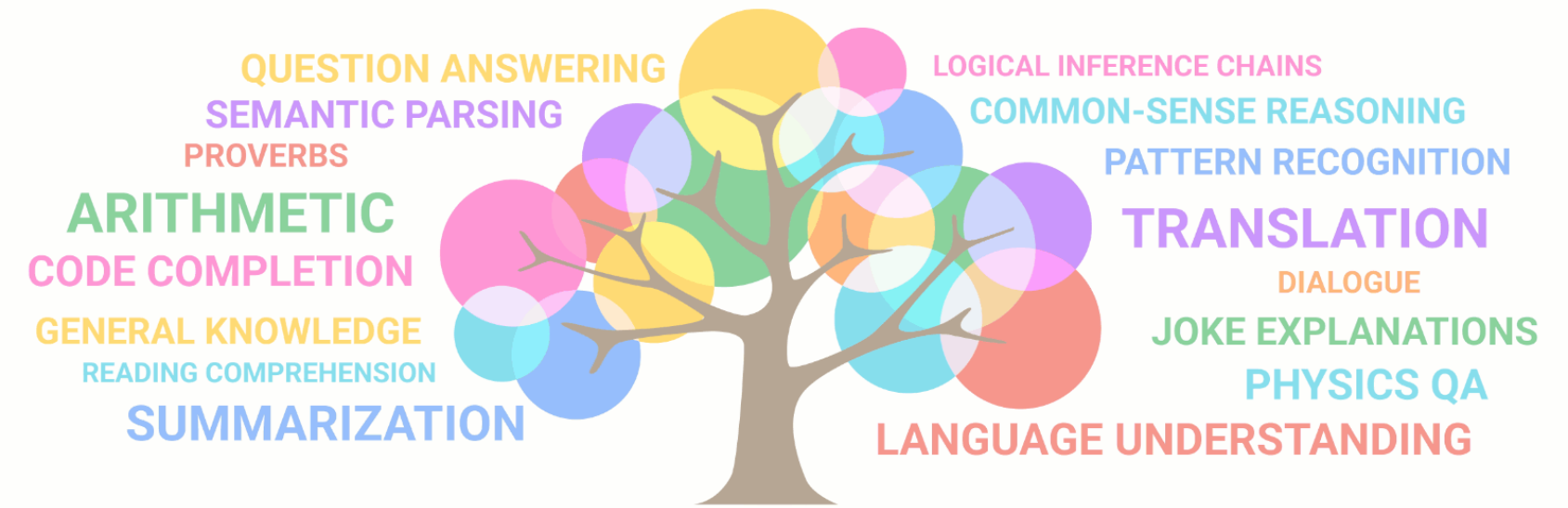
- GPT-2: 14/Feb/2019, контекст 768 слов (1,5 страницы)
- 1,5 млрд. параметров, корпус 10 млрд. токенов (40Gb)
- способность написать эссе, которое конкурсное жюри не смогло отличить от написанного человеком

Эмерджентность — появление качественно новых способностей



- GPT-3: 11/Jun/2020, контекст 1536 слов (3 страницы)
- 175 млрд. параметров, корпус 500 млрд. токенов
- способность делать перевод на другие языки,
- решать логические и математические задачи,
- генерировать программный код по описанию

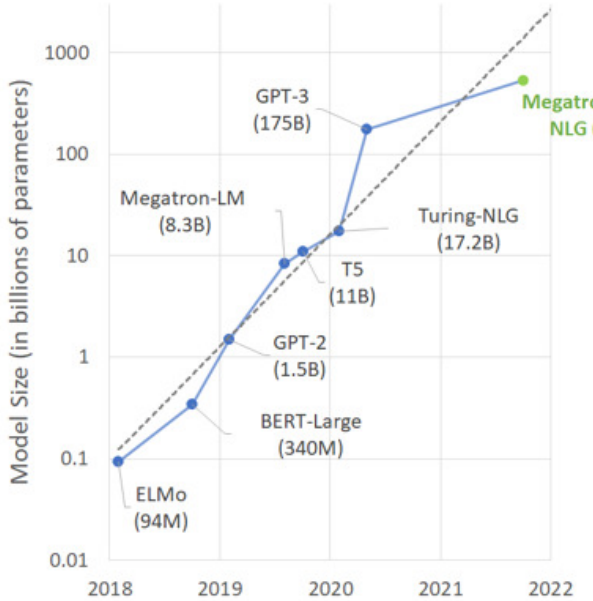
Эмерджентность — появление качественно новых способностей

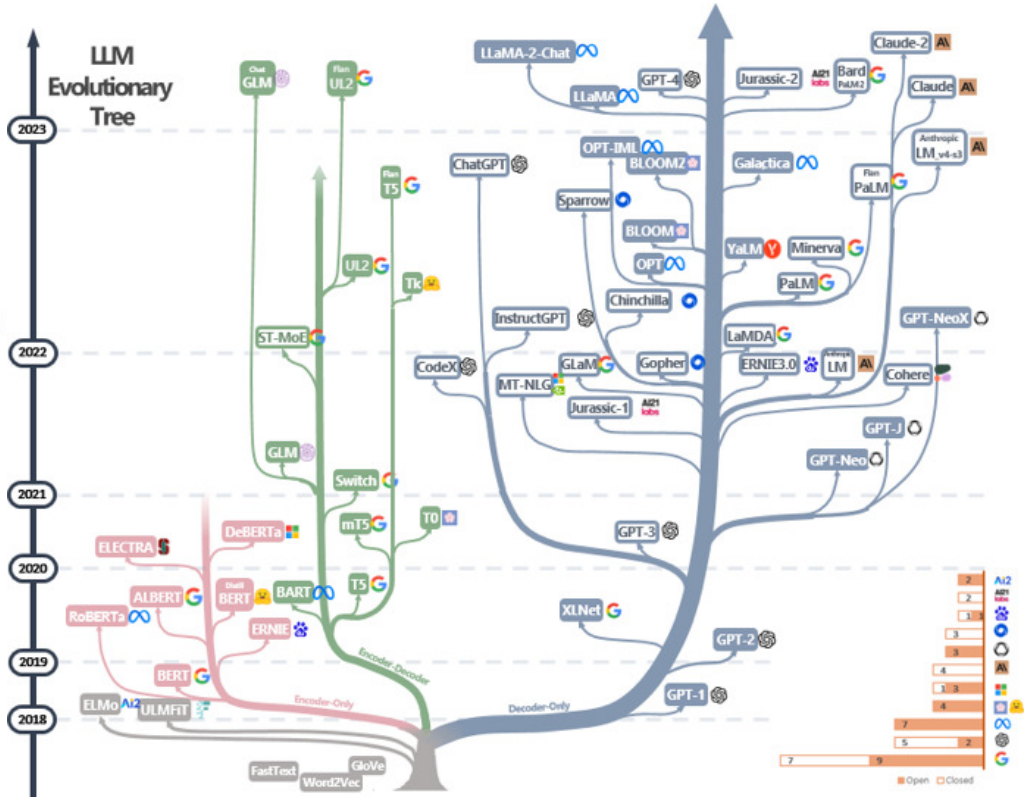


- GPT-4: 14/Mar/2023, контекст 24 000 слов (48 страниц)
- >1 трл. параметров, корпус >1Tb
- способность описывать и анализировать изображения,
- реагировать на подсказки вроде «Let's think step by step»,
- решать качественные физические задачи по картинке

Трансформеры: размер имеет значение

Рост числа параметров больших языковых моделей





Оценивание моделей требует многокритериального подхода — бенчмарков для измерения различных аспектов качества LLM на различных задачах NLU из различных областей.

Промптинг — новое программирование

Задать роли: «Ты ученик 11 класса, отличник,. . . »

Задать контекст: «. . . пишешь сочинение ЕГЭ по русскому языку. . . »

Задать входные данные: «. . . по тексту А. Куприна «. . . ». . . »

Дать инструкцию:
«. . . Сформулируй одну из проблем, поставленных автором текста. Прокомментируй проблему. Включи в комментарий два примера-иллюстрации из прочитанного текста, которые важны для понимания проблемы (избегай чрезмерного цитирования). Поясни значение каждого примера и укажи смысловую связь между ними. Сформулируй позицию автора (рассказчика). Вырази своё отношение к позиции автора по проблеме исходного текста (согласие или несогласие) и обоснуй его. . . »

Описать ограничения: «. . . объём сочинения – не менее 150 слов. . . »

Задать формат вывода: «. . . прозой, стихами, семистопным ямбом. . . »

Задать пример(ы) правильного выполнения задания

Демонстрационный вариант ЕГЭ 2020. Русский язык, 11 класс. ФИПИ, 2020.

Резюме

- Обучаемая векторизация сложно структурированных данных — одна из важнейших концепций ML/DL
- Представление текста в виде графа (системы локальных контекстов слов) сохраняет информацию о смысле текста
- Эмбединги графов обобщают многие задачи векторизации текстов, дискретных сигналов, изображений и др.
- Доказано, что модель внимания multi-head self-attention (MHSA) эквивалентна свёрточной сети [Cordonnier, 2020]

Open problems

- Возможно ли упростить архитектуру Трансформера, сильно сократив число параметров без потери качества?
- Общая теория промптинга должна быть лингвистической, коммуникативной. Но её пока нет.

Vaswani et al. Attention is all you need. 2017.
Xipeng Qiu et al. Pre-trained models for natural language processing: A survey. 2020.
Cordonnier et al. On the relationship between self-attention and convolutional layers. 2020