Вероятностные тематические модели
без интегралов и распределений Дирихле

Воронцов Константин Вячеславович
ВЦ РАН • МФТИ • ВМК МГУ • ШАД Яндекс

Семинар в одной крупной компании • 21 марта 2014

Содержание

Задача определения тематики коллекции документов

Тема — это набор терминов, неслучайно часто совместно встречающихся в относительно узком подмножестве документов.

Дано:

W — словарь, множество слов (терминов)

D — множество (коллекция, корпус) текстовых документов

n_{dw} — сколько раз термин $w \in W$ встретился в документе $d \in D$

Найти:

$p(w|t)$ — какими терминами w определяется каждая тема t

$p(t|d)$ — к каким темам t относится каждый документ d

Критерии:

внутренний — точность описания коллекции моделью $p(w|d)$

внешний — качество решения конечной задачи

Цели тематического моделирования (topic modeling)

- Тематический поиск документов и объектов по тексту любой длины или по любому объекту
- Категоризация, классификация, аннотирование, суммаризация текстовых документов

Типичные приложения:

- Поиск научной информации
- Поиск экспертов (expert search), рецензентов, проектов
- Выявление трендов и фронта исследований
- Анализ и агрегирование новостных потоков
- Рубрикация документов, изображений, видео, музыки
- Рекомендательные сервисы (коллаборативная фильтрация)
- Аннотация генома и другие задачи биоинформатики

Дополнительная информация

- повышает адекватность тематической модели
- позволяет выявить темы нетекстовых объектов

Виды дополнительной информации:

- последовательность слов документа d: $\{w_1, \ldots, w_{n_d}\}$
- разбиение документа на предложения, разделы
- метаданные: год, авторы, источник, и т.д.
- цитаты и/или гиперссылки: исходящие, входящие
- рубрикатор(ы)
- словари, тезаурусы, онтологии предметных областей
- изображения внутри документов
- именованные сущности в тексте документов
- пользователи документов
- теги, ключевые слова, привязанные к документам

Проблемы

- как строить комбинированные и могоцелевые модели?
- как учитывать все дополнительные данные сразу?
- как обеспечивать интерпретируемость тем?
- как определять правильное число тем?
- как восстанавливать иерархию тем?
- как автоматически именовать темы?
- как учитывать лингвистические знания?
- как строить модели на десятки тысяч тем?
- как строить модели сверхбольших коллекций?
- как делать визуализацию и навигацию по темам?

Вероятностная формализация постановки задачи

Базовые предположения:

- каждое слово в документе связано с некоторой темой $t \in T$
- $D \times W \times T$ — дискретное вероятностное пространство
- коллекция D — выборка троек $(d_i, w_i, t_i)_{i=1}^n \sim p(d, w, t)$
- d_i, w_i — наблюдаемые, темы t_i — скрытые
- гипотеза условной независимости: $p(w|d,t) = p(w|t)$

Вероятностная модель порождения документа d:

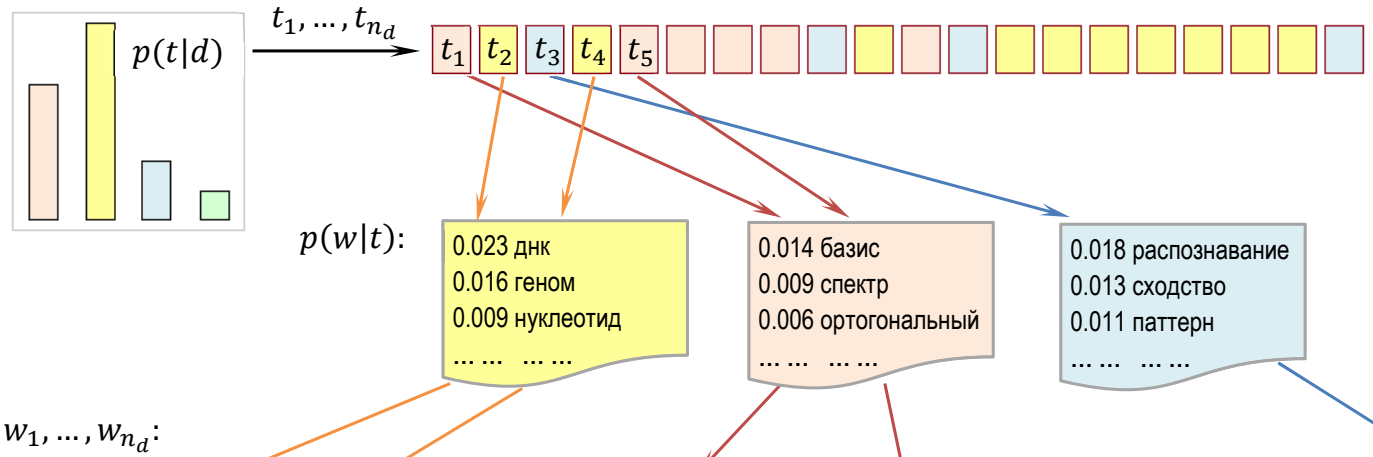
$$p(w|d) = \sum_{t \in T} p(w|d,t)\, p(t|d) = \boxed{\sum_{t \in T} p(w|t)\, p(t|d)}$$

Дано $\hat{p}(w|d) \equiv n_{dw}/n_d$, **найти:**

- $\phi_{wt} \equiv p(w|t)$ — распределение терминов в темеах $t \in T$;
- $\theta_{td} \equiv p(t|d)$ — распределение тем в документах $d \in D$.

Вероятностная модель порождения документа d

Вероятностная тематическая модель: $p(w|d) = \sum_{t \in T} p(w|t)p(t|d)$



Разработан спектрально-аналитический подход к выявлению размытых протяженных повторов в геномных последовательностях. Метод основан на разномасштабном оценивании сходства нуклеотидных последовательностей в пространстве коэффициентов разложения фрагментов кривых GC- и GA-содержания по классическим ортогональным базисам. Найдены условия оптимальной аппроксимации, обеспечивающие автоматическое распознавание повторов различных видов (прямых и инвертированных, а также тандемных) на спектральной матрице сходства. Метод одинаково хорошо работает на разных масштабах данных. Он позволяет выявлять следы сегментных дупликаций и мегасателлитные участки в геноме, районы синтении при сравнении пары геномов. Его можно использовать для детального изучения фрагментов хромосом (поиска размытых участков с умеренной длиной повторяющегося паттерна).

Задача максимизации правдоподобия

Задача: найти максимум правдоподобия

$$\sum_{d\in D}\sum_{w\in d} n_{dw} \ln \sum_{t\in T} \phi_{wt}\theta_{td} \to \max_{\Phi,\Theta},$$

при ограничениях неотрицательности и нормировки

$$\phi_{wt} \geqslant 0; \quad \sum_{w\in W} \phi_{wt} = 1; \qquad \theta_{td} \geqslant 0; \quad \sum_{t\in T} \theta_{td} = 1$$

Интерпретация: найти стохастическое матричное разложение

$$\|F - \Phi\Theta\|_{\mathrm{KL}} \to \min_{\Phi,\Theta}$$

$F = \big(\hat{p}(w|d)\big)_{W\times D}$ — известная матрица исходных данных,
$\Phi = \big(\phi_{wt}\big)_{W\times T}$ — искомая матрица терминов тем $\phi_{wt} = p(w|t)$,
$\Theta = \big(\theta_{td}\big)_{T\times D}$ — искомая матрица тем документов $\theta_{td} = p(t|d)$.

EM-алгоритм, вероятностный латентный семантический анализ PLSA — Probabilistic Latent Semantic Analysis [Hofmann, 1999]

E-шаг. Выразим $p(t|d,w)$ через ϕ_{wt}, θ_{td} по формуле Байеса:

$$p(t|d,w) = \frac{\phi_{wt}\theta_{td}}{\sum\limits_{s\in T}\phi_{ws}\theta_{sd}}$$

$n_{dwt} = n_{dw}p(t|d,w)$ — оценка числа троек (d,w,t) в коллекции

M-шаг. Частотные оценки условных вероятностей:

$$\phi_{wt} = \frac{n_{wt}}{n_t} \equiv \frac{\sum\limits_{d\in D} n_{dwt}}{\sum\limits_{d\in D}\sum\limits_{w\in d} n_{dwt}}, \qquad \theta_{td} = \frac{n_{dt}}{n_d} \equiv \frac{\sum\limits_{w\in d} n_{dwt}}{\sum\limits_{w\in W}\sum\limits_{t\in T} n_{dwt}},$$

или краткая запись:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} \qquad \theta_{td} \propto n_{dt}$$

Недостатки классического PLSA и способы их устранения

1. PLSA вынужден хранить 3D-матрицу $p(t|d,w)$;
   PLSA медленно сходится на больших коллекциях;
   PLSA искажает модель при добавлении документа;
   — рациональный алгоритм, онлайновый алгоритм
2. PLSA неверно оценивает вероятности новых слов:
   если $n_w = 0$, то $\hat{p}(w|t) = 0$ для всех $t \in T$
   — робастные модели с шумом и фоном
3. PLSA переобучается, т.к. $\dim(\Phi, \Theta) = |D| \cdot |T| + |W| \cdot |T|$
   — регуляризация (LDA), привлечение внешних данных
4. PLSA не позволяет управлять *разреженностью* Φ и Θ, т.к.
   (в начале $\phi_{wt} = 0$) $\Leftrightarrow$ (в финале $\phi_{wt} = 0$)
   (в начале $\theta_{td} = 0$) $\Leftrightarrow$ (в финале $\theta_{td} = 0$)
   — эвристики постепенного разреживания

Рациональный EM-алгоритм

Идея: E-шаг встраивается внутрь M-шага

Вход: коллекция D, число тем $|T|$, число итераций $i_{\max}$;
Выход: распределения Θ и Φ;

инициализация ϕ_{wt}, θ_{td} для всех $d \in D,\ w \in W,\ t \in T$;
для всех итераций $i = 1, \ldots, i_{\max}$
  $n_{wt}, n_{dt}, n_t, n_d := 0$ для всех $d \in D,\ w \in W,\ t \in T$;
  для всех $d \in D,\ w \in d$
    $p(t|d,w) \propto \phi_{wt}\theta_{td}$ для всех $t \in T$;
    $n_{wt}, n_{dt}, n_t, n_d \mathrel{+}= n_{dw}p(t|d,w)$ для всех $t \in T$;
  $\phi_{wt} := n_{wt}/n_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
  $\theta_{td} := n_{dt}/n_d$ для всех $d \in D,\ t \in T$;

Онлайновый EM-алгоритм

инициализировать ϕ_{wt} для всех $w \in W,\ t \in T$;
$n_{wt} := 0,\ n_t := 0$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
для всех пакетов $D_j,\ j = 1, \ldots, J$
  $\tilde{n}_{wt} := 0,\ \tilde{n}_t := 0$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
  для всех $d \in D_j$
    инициализировать θ_{td} для всех $t \in T$;
    повторять
      $p(t|d,w) \propto \phi_{wt}\theta_{td}$ для всех $t \in T$;
      $\theta_{td} := \frac{1}{n_d} \sum\limits_{w \in d} n_{dw} p(t|d,w)$ для всех $t \in T$;
    пока θ_d не сойдётся;
    $\tilde{n}_{wt}, \tilde{n}_t \mathrel{+}= n_{dw} p(t|d,w)$ для всех $w \in d,\ t \in T$;
  $n_{wt} := \rho_j n_{wt} + \tilde{n}_{wt};\ \ n_t := \rho_j n_t + \tilde{n}_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;
  $\phi_{wt} := n_{wt}/n_t$ для всех $w \in W,\ t \in T$;

Латентное размещение Дирихле

Оценки условных вероятностей $\phi_{wt} \equiv p(w|t)$, $\theta_{td} \equiv p(t|d)$:

- в PLSA — несмещённые оценки максимума правдоподобия:

$$\phi_{wt} = \frac{n_{wt}}{n_t}, \qquad \theta_{td} = \frac{n_{td}}{n_d}$$

- в LDA — сглаженные байесовские оценки:

$$\phi_{wt} = \frac{n_{wt} + \beta_w}{n_t + \beta_0}, \qquad \theta_{td} = \frac{n_{td} + \alpha_t}{n_d + \alpha_0}.$$

- различия между LDA и PLSA практически исчезают
  - на больших данных
  - при использовании робастного алгоритма

David Blei, Andrew Ng, Michael Jordan. Latent Dirichlet allocation Journal of Machine Learning Research, 2003. — No. 3. — Pp. 993–1022.

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.

Робастная модель с фоновой и шумовой компонентами

Гипотеза: каждый термин в документе (d, w)
— либо связан с какой-то темой t,
— либо специфичен для данного документа (шум),
— либо является общеупотребительным (фон).

Модель смеси тематической, шумовой и фоновой компонент (SWB — Special Words with Background):

$$p(w|d) = \frac{p_0(w|d) + \gamma\pi_{dw} + \varepsilon\pi_w}{1 + \gamma + \varepsilon}; \qquad p_0(w|d) = \sum_{t\in T} \phi_{wt}\theta_{td},$$

$\pi_{dw} \equiv p_{\text{ш}}(w|d)$ — *шумовая* компонента, γ — параметр;
$\pi_w \equiv p_{\text{ф}}(w)$ — *фоновая* компонента, ε — параметр.

Chemudugunta C., Smyth P., Steyvers M. Modeling general and specific aspects of documents with a probabilistic topic model // Advances in Neural Information Processing Systems, MIT Press, 2006. — Vol. 19. — Pp. 241–248.

Упрощённая робастная тематическая модель

Если PLSA не может предсказать слово w в документе d

$$p_0(w|d) = \sum_{t \in T} \phi_{wt}\theta_{td} = 0,$$

то естественно считать такие слова w нетематическими:

$$p(w|d) = \nu_d p_0(w|d) + \big[p_0(w|d) = 0\big]\pi_{dw},$$

где $\pi_{dw} = \frac{n_w}{n}$ — униграммная модель языка.

Нормировочный множитель ν_d находится аналитически:

$$\nu_d = \sum_{w \in W} \big[p_0(w|d) > 0\big]\pi_{dw}$$

Внутренний критерий для сравнения моделей

Перплексия тестовой коллекции D' (hold-out perplexity):

$$\mathcal{P}(D') = \exp\left(-\frac{\sum\limits_{d\in D'}\sum\limits_{w\in d''} n_{dw}\ln p(w|d)}{\sum\limits_{d\in D'}\sum\limits_{w\in d''} n_{dw}}\right),$$

$d = d' \sqcup d''$ — случайное разбиение тестового документа на две половины равной длины;

параметры ϕ_{wt} оцениваются по обучающей коллекции D;
параметры θ_{td} оцениваются по первой половине d';
перплексия вычисляется по второй половине d''.

Интерпретация перплексии:
1) чем меньше, тем лучше;
2) если документ состоит из n_d равновероятных слов, то $\mathcal{P} = n_d$

Эксперименты с робастными PLSA и LDA

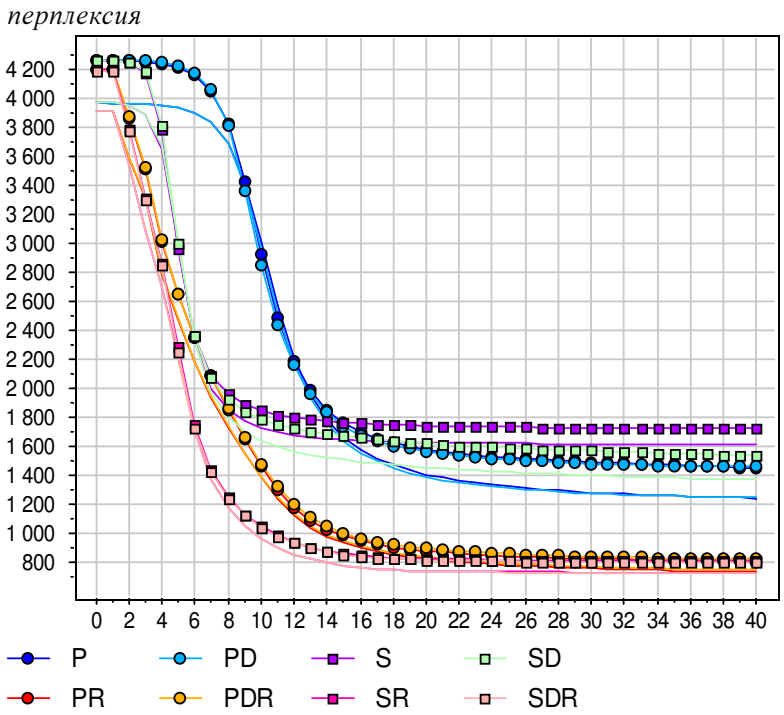
Использовались две коллекции:

- NIPS:
  - $|D| = 1566$ статей конференции NIPS на английском языке;
  - суммарной длины $n \approx 2.3 \cdot 10^6$,
  - словарь $|W| \approx 1.3 \cdot 10^4$.
  - Контрольная коллекция: $|D'| = 174$.
- RuDis:
  - $|D| = 2000$ авторефератов диссертаций на русском языке;
  - суммарной длины $n \approx 8.7 \cdot 10^6$,
  - словарь $|W| \approx 3 \cdot 10^4$.
  - Контрольная коллекция: $|D'| = 200$.

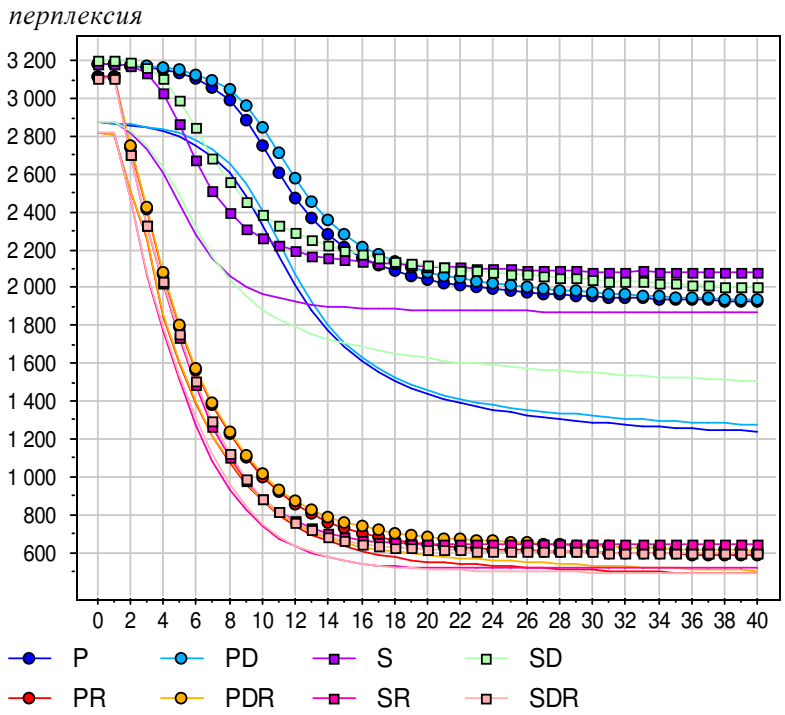
Предобработка: лемматизация, удаление стоп-слов.

Строятся графики зависимости перплексии от числа итераций (проходов коллекции); число итераций 40; число тем $|T| = 100$;

Эксперименты с робастными PLSA и LDA



RuDis



NIPS

Обозначения:
- P – PLSA
- D – LDA ($\alpha_t = 0.5,\ \beta_w = 0.01$)
- S – сэмплирование ($s = n_{dw}$)
- R – робастность (шум $\gamma = 0.3$, фон $\varepsilon = 0.01$)

Выводы

1. LDA не уменьшает переобучение,
   а лишь точнее моделирует вероятности редких слов
2. Робастный PLSA лучше, чем LDA

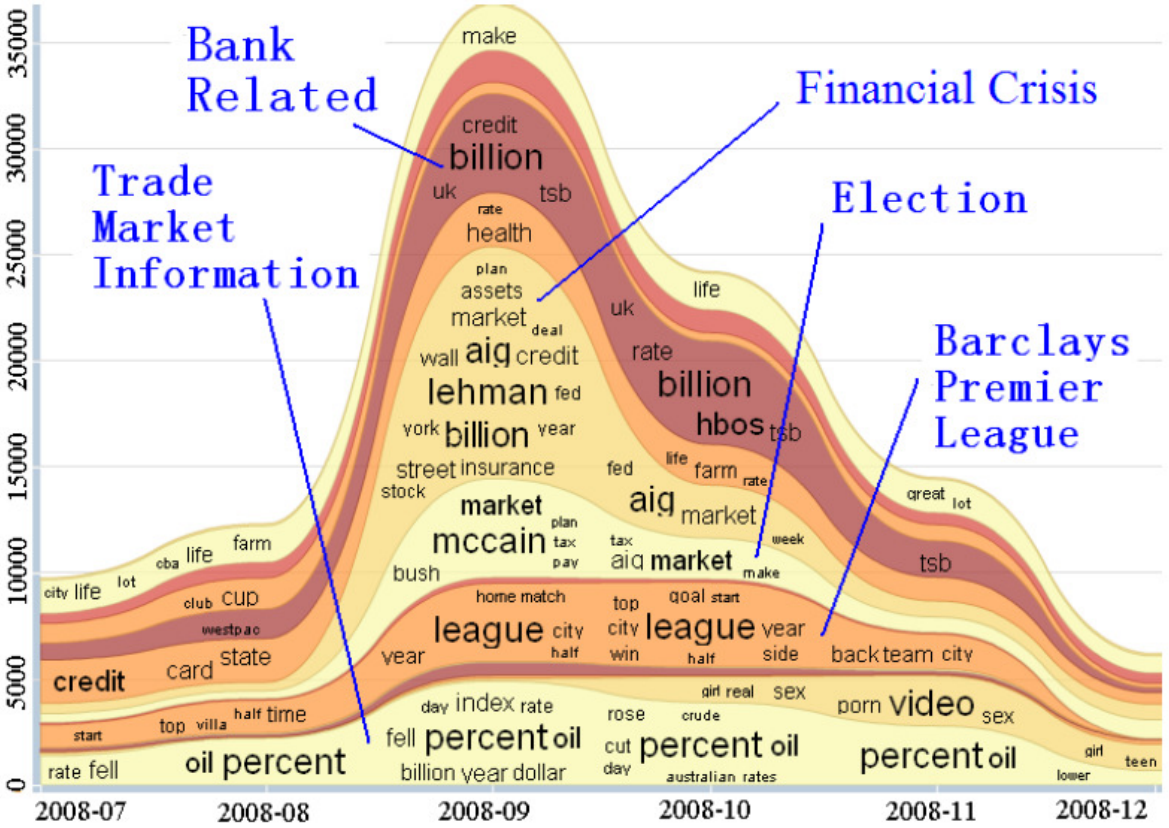
Недостатки LDA:

1. Противоречит гипотезе разреженности
2. Не имеет убедительных лингвистических обоснований
3. Усложняет построение композитных моделей

Potapenko A. A., Vorontsov K. V., Robust PLSA Performs Better Than LDA // European Conference on Information Retrieval ECIR-2013, Moscow, 24–27 March 2013. — Pp. 784–787.

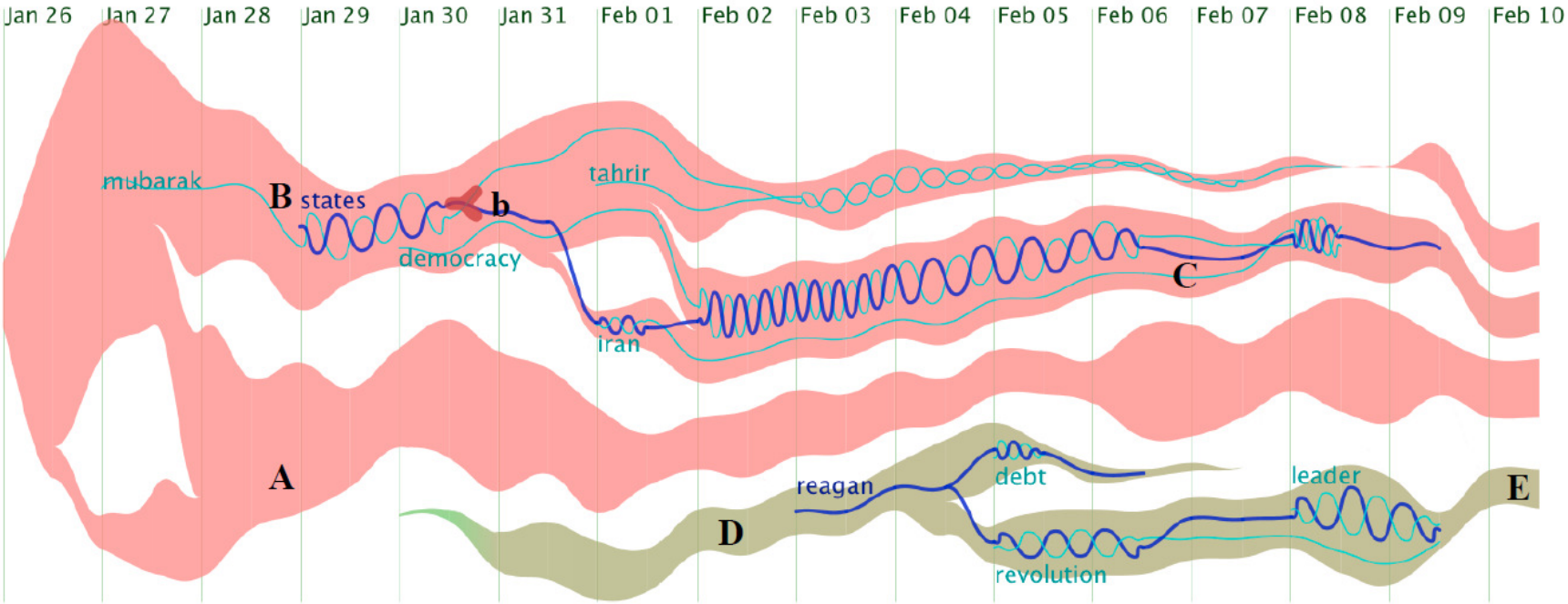
Воронцов К.В., Потапенко А.А. Модификации EM-алгоритма для вероятностного тематического моделирования // Машинное обучение и анализ данных, 2013. — Т. 1, № 6. — С. 657–686.

Динамические модели, учитывающие время



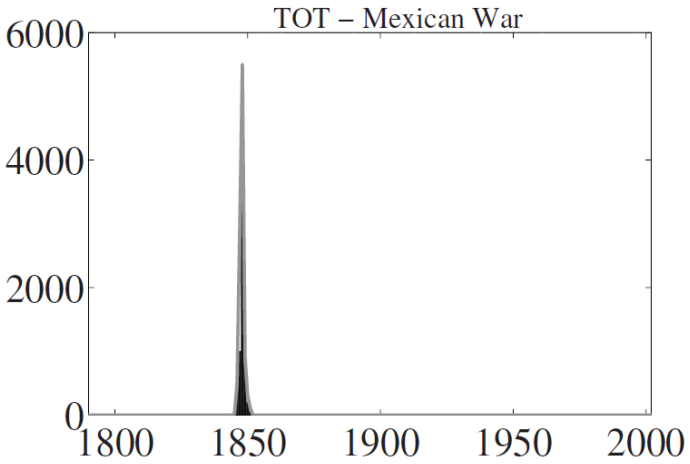
Jianwen Zhang, Yangqiu Song, Changshui Zhang, Shixia Liu Evolutionary Hierarchical Dirichlet Processes for Multiple Correlated Time-varying Corpora // KDD'10, July 25–28, 2010.

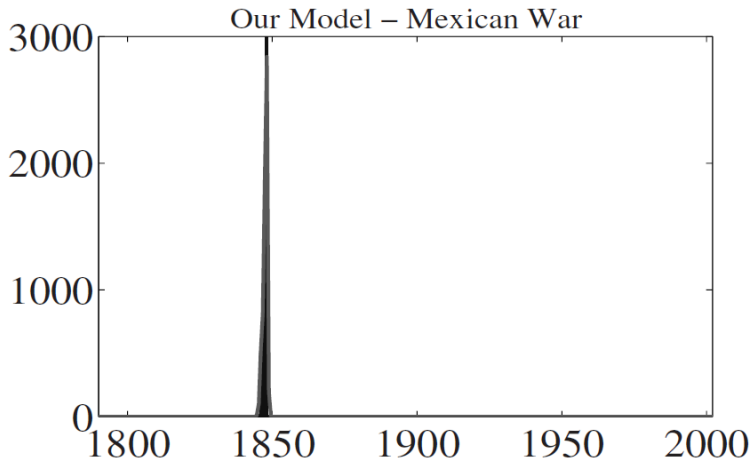
Динамические модели эволюции тем



Weiwei Cui, Shixia Liu, Li Tan, Conglei Shi, Yangqiu Song, Zekai J. Gao, Xin Tong, Huamin Qu TextFlow: Towards Better Understanding of Evolving Topics in Text // IEEE Transactions On Visualization And Computer Graphics, Vol. 17, No. 12, December 2011.

Совмещение динамической и n-граммной модели



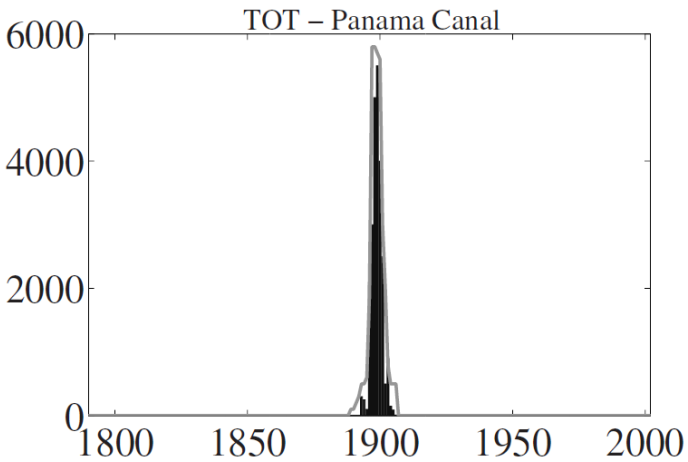


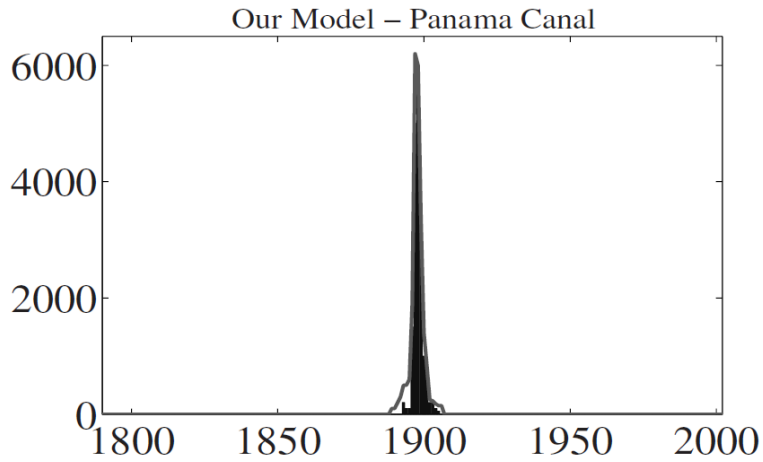
1. mexico	8. territory
2. texas	9. army
3. war	10. peace
4. mexican	11. act
5. united	12. policy
6. country	13. foreign
7. government	14. citizens

1. east bank	8. military
2. american coins	9. general herrera
3. mexican flag	10. foreign coin
4. separate independent	11. military usurper
5. american commonwealth	12. mexican treasury
6. mexican population	13. invaded texas
7. texan troops	14. veteran troops

Shoaib Jameel, Wai Lam. An *N*-Gram Topic Model for Time-Stamped Documents // 35'th ECIR 2013, Moscow, March 24–27. — pp. 292–304.

Совмещение динамической и n-граммной модели





1. government	8. spanish
2. cuba	9. island
3. islands	10. act
4. international	11. commission
5. powers	12. officers
6. gold	13. spain
7. action	14. rico

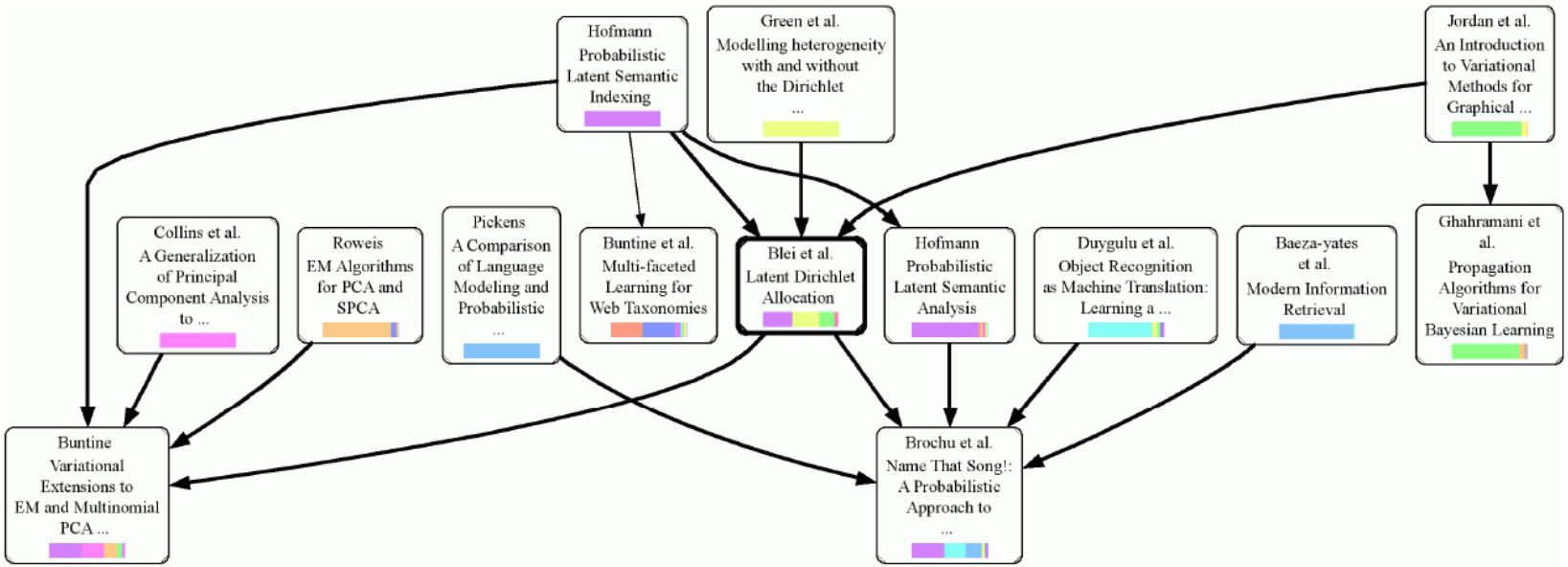
1. panama canal	8. united states senate
2. isthmian canal	9. french canal company
3. isthmus panama	10. caribbean sea
4. republic panama	11. panama canal bonds
5. united states government	12. panama
6. united states	13. american control
7. state panama	14. canal

Shoaib Jameel, Wai Lam. An *N*-Gram Topic Model for Time-Stamped Documents // 35'th ECIR 2013, Moscow, March 24–27. — pp. 292–304.

Модели, учитывающие цитирования или гиперссылки

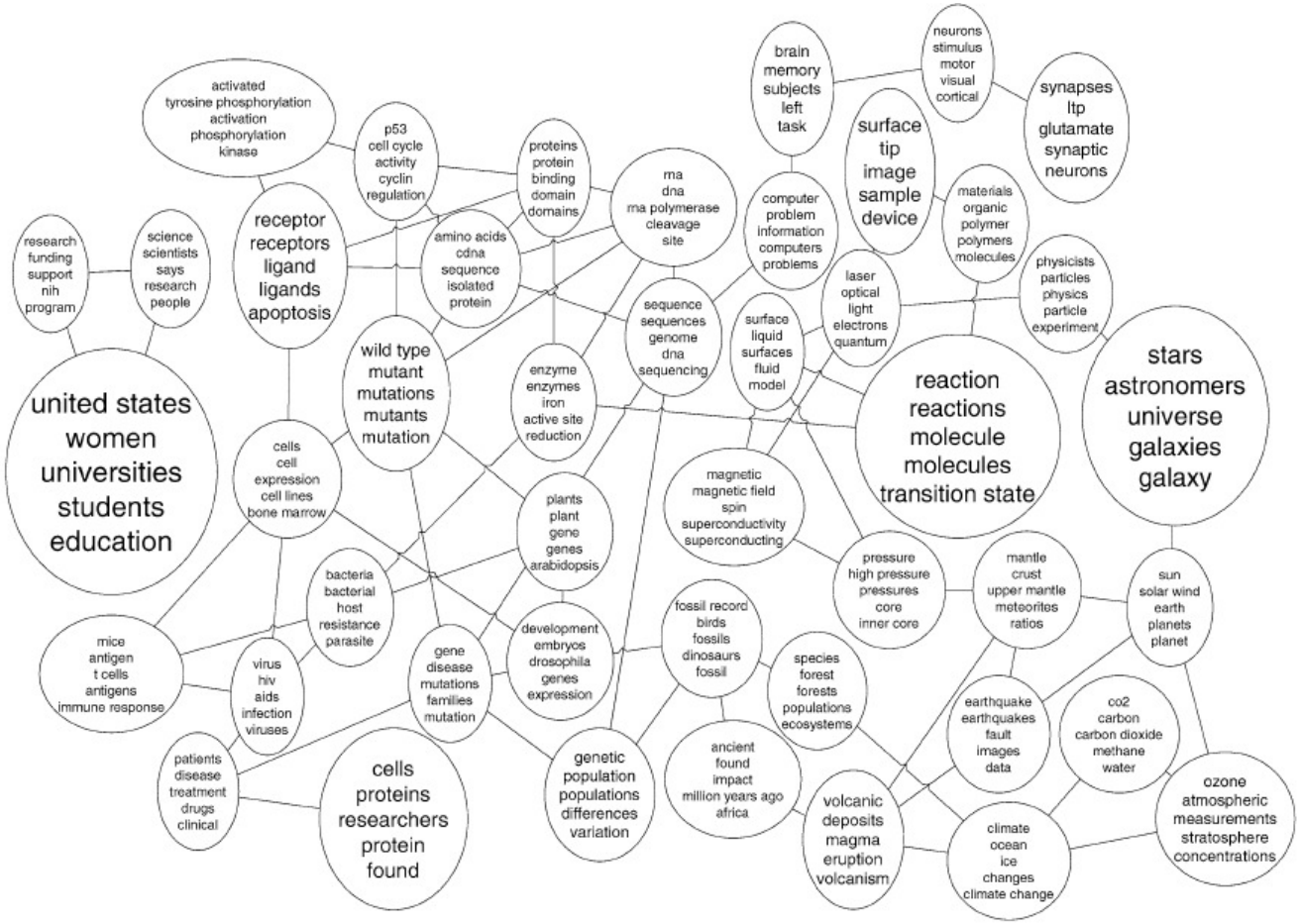
Учёт ссылок уточняет тематическую модель

Тематическая модель выявляет самые влиятельные ссылки



Laura Dietz, Steffen Bickel, Tobias Scheffer. Unsupervised prediction of citation influences // ICML-2007, Pp. 233–240.

Выявление взаимосвязей между темами



D. Blei, J. Lafferty. A correlated topic model of Science // Annals of Applied Statistics, 2007. Vol. 1, Pp. 17-35.

Иерархические тематические модели

Для выявления иерархии тем используется модель HDP — иерархический процесс Дирихле, обобщение модели LDA.

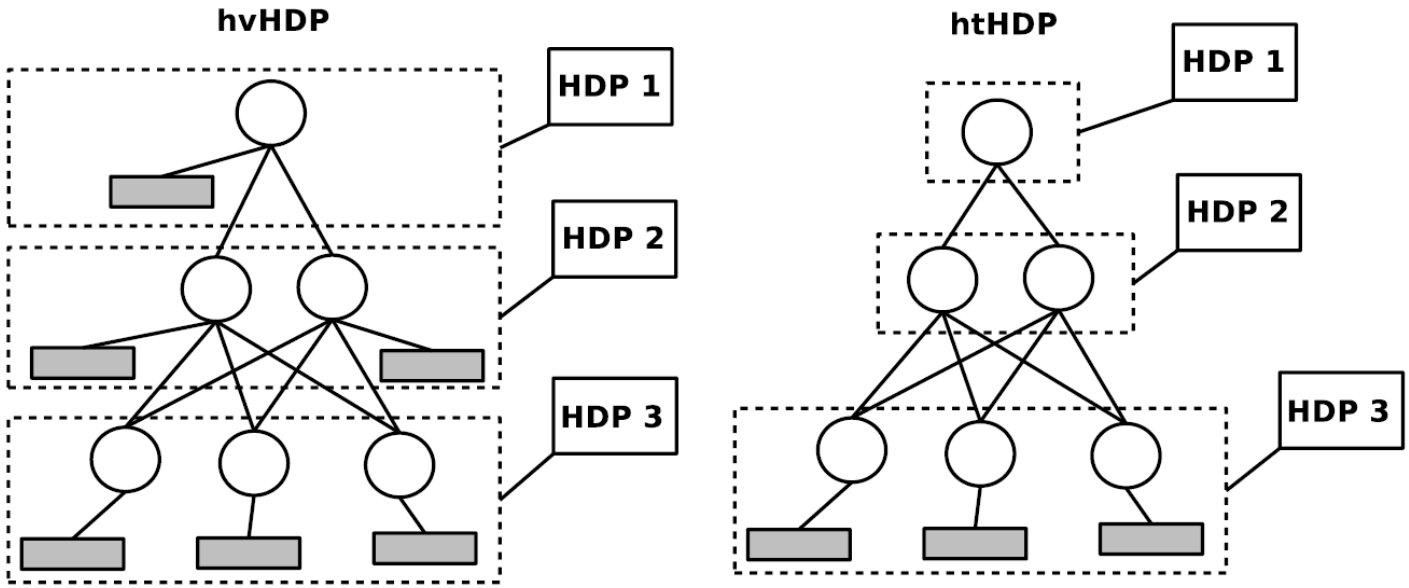
Задача построения иерархии и задача оценивания её качества признаются открытыми научными проблемами.

- "Despite recent activity in the field of HPTMs, determining the hierarchical model that best fits a given data set, in terms of the structure and size of the learned hierarchy, still remains a challenging task and an open issue."
- "The evaluation of topic models is also an open issue."

E. Zavitsanos, G. Paliouras, G. A. Vouros. Non-Parametric Estimation of Topic Hierarchies from Texts with Hierarchical Dirichlet Processes // Journal of Machine Learning Research 12 (2011) 2749-2775.

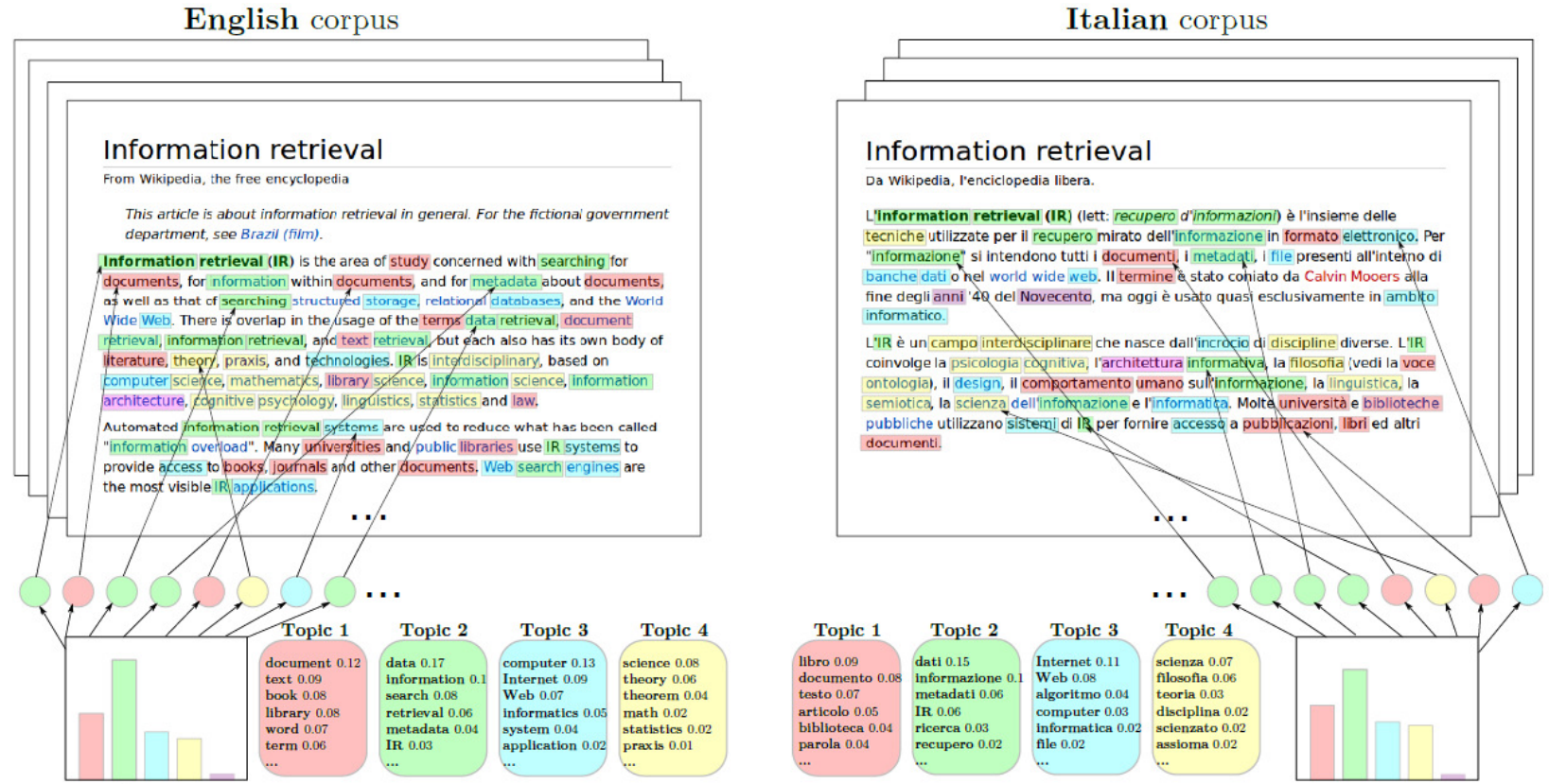
Две восходящие стратегии построения иерархии

- hvHDP: внутренние вершины — темы, имеющие $p(w|t)$
- htHDP: внутренние вершины — кластеры тем



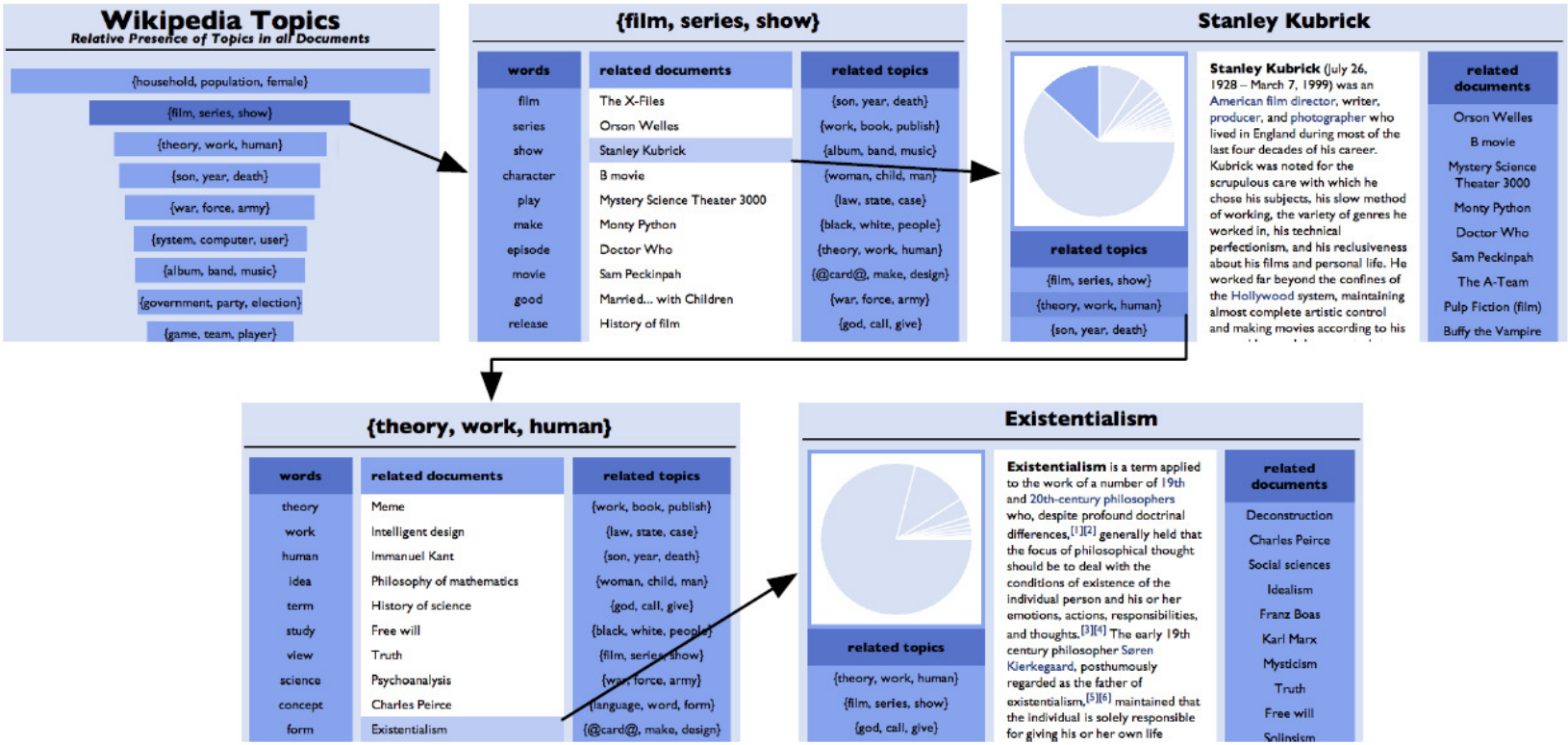
E. Zavitsanos, G. Paliouras, G. A. Vouros. Non-Parametric Estimation of Topic Hierarchies from Texts with Hierarchical Dirichlet Processes // Journal of Machine Learning Research 12 (2011) 2749-2775.

Многоязычные модели



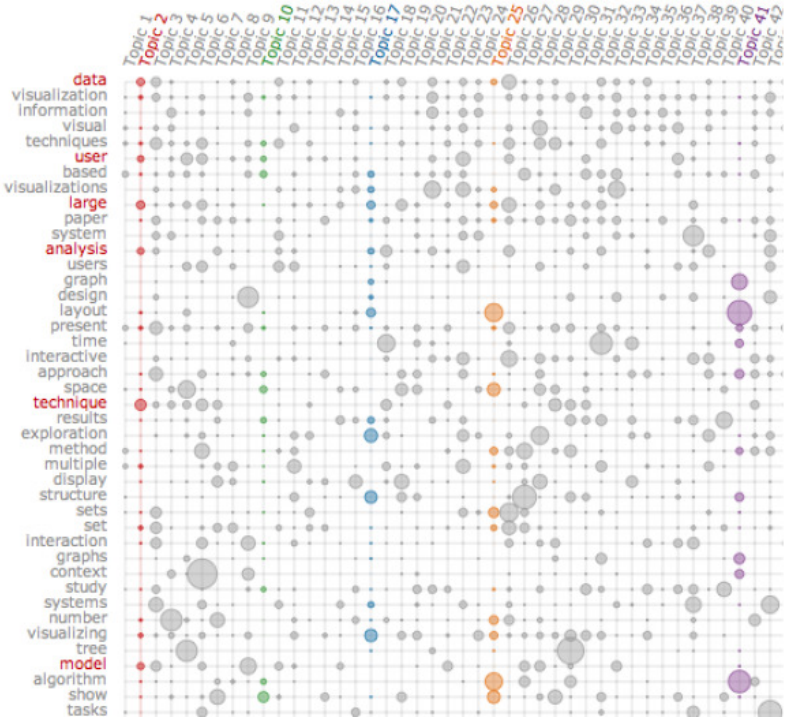
I. Vulić, W. De Smet, J. Tang, M.-F. Moens. Probabilistic topic modeling in multilingual settings: a short overview of its methodology with applications // NIPS, 7–8 December 2012. — Pp. 1–11.

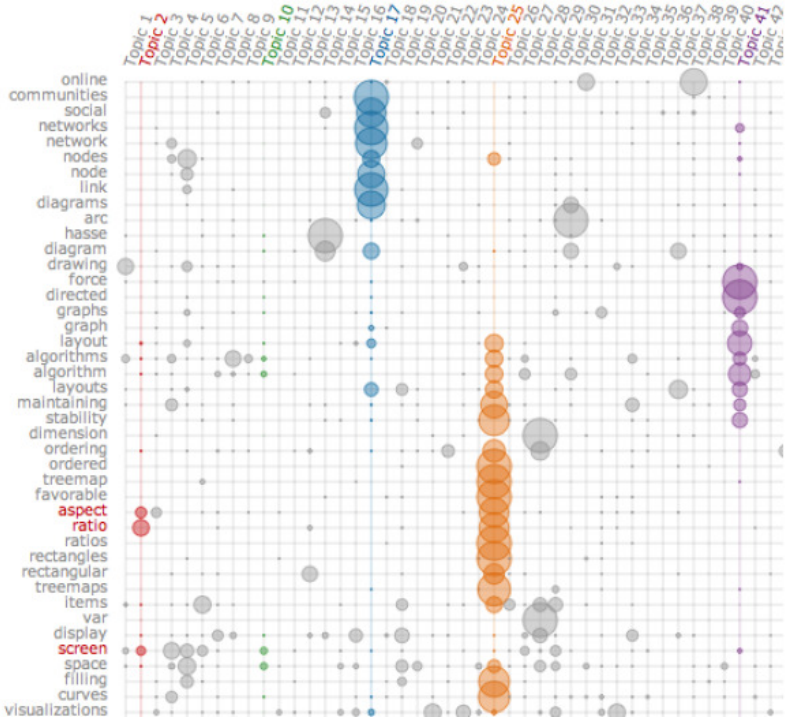
Визуализация тематической модели



A. Chaney, D. Blei. Visualizing topic models // International AAAI Conference on Social Media and Weblogs, 2012.

Визуализация тематической модели



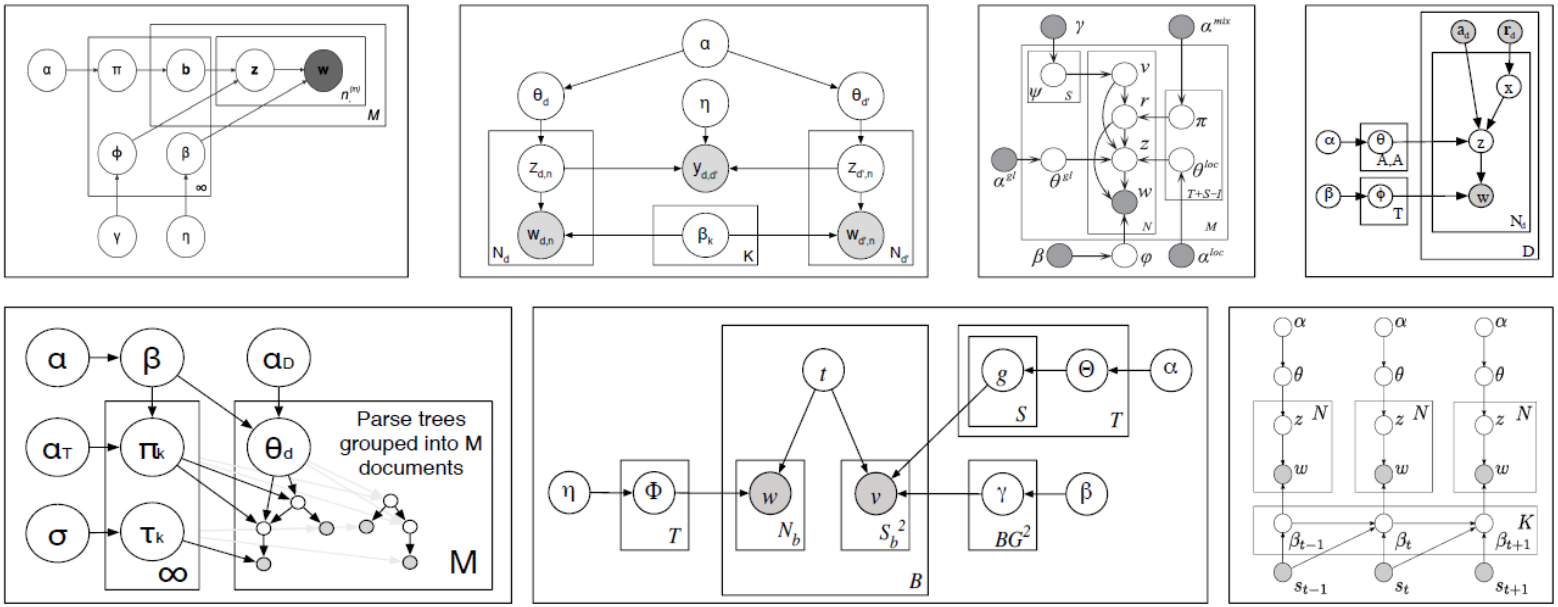


Jason Chuang, Christopher D. Manning, Jeffrey Heer.

Termite: Visualization Techniques for Assessing Textual Topic Models // Advanced Visual Interfaces, 2012

Генеральная линия развития тематических моделей

- Основа — распределения Дирихле, процессы Дирихле
- Математический аппарат — байесовский вывод
- Язык описания — графические модели



Ali Daud, Juanzi Li, Lizhu Zhou, Faqir Muhammad.
Knowledge discovery through directed probabilistic topic models: a survey.
Frontiers of Computer Science in China, Vol. 4, No. 2., 2010, Pp. 280–301.
(русский перевод на www.MachineLearning.ru)

Эксперимент на модельных данных

Модельные коллекции порождаются заданными матрицами Φ_0 и Θ_0 при $|D| = 500$, $|W| = 1000$, $|T| = 30$, $n_d \in [100, 600]$.

Отклонение восстановленных распределений $p(i|j)$ от исходных модельных распределений $p_0(i|j)$ измеряются средним расстоянием Хеллингера:

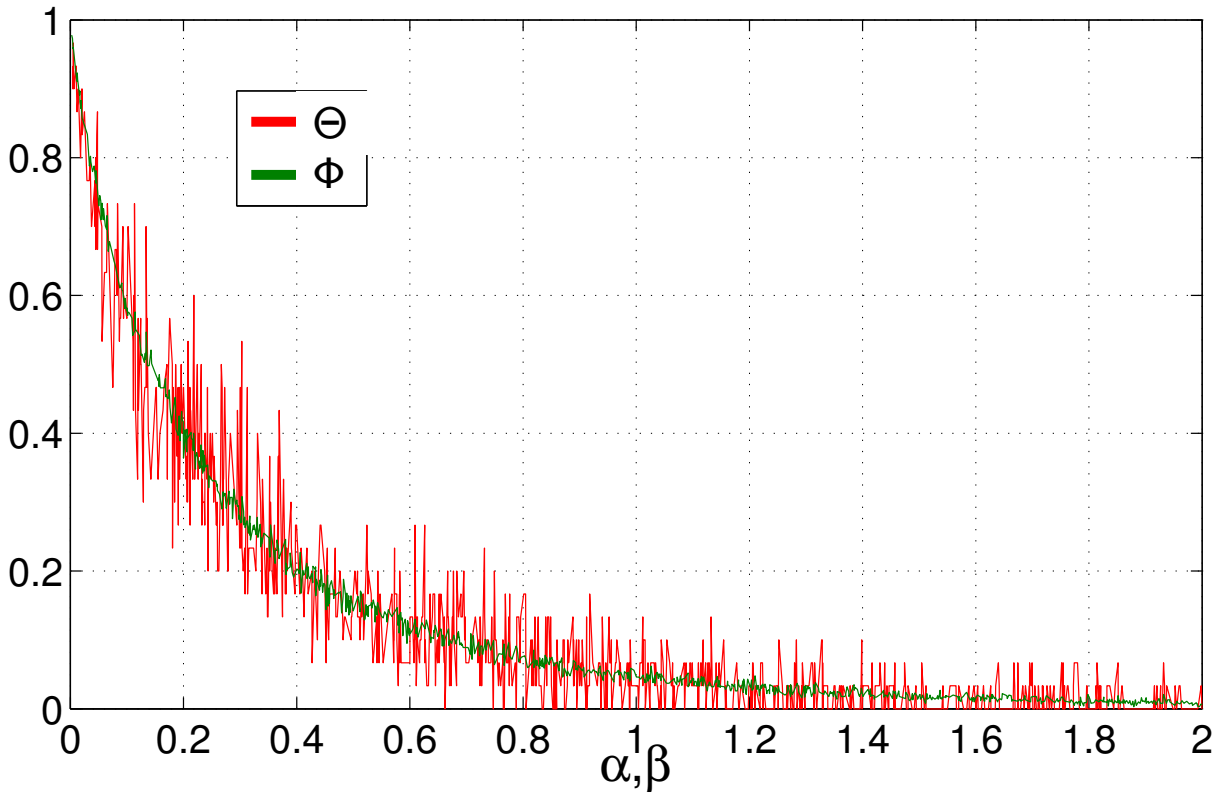
$$H(p, p_0) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \sqrt{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(\sqrt{p(i|j)} - \sqrt{p_0(i|j)} \right)^2},$$

как для самих матриц Φ и Θ, так и для их произведения:

$$D_\Phi(\Phi, \Phi_0) = H(\Phi, \Phi_0);$$
$$D_\Theta(\Theta, \Theta_0) = H(\Theta, \Theta_0);$$
$$D_{\Phi\Theta}(\Phi\Theta, \Phi_0\Theta_0) = H(\Phi\Theta, \Phi_0\Theta_0).$$

Генерация модельных данных различной степени разреженности

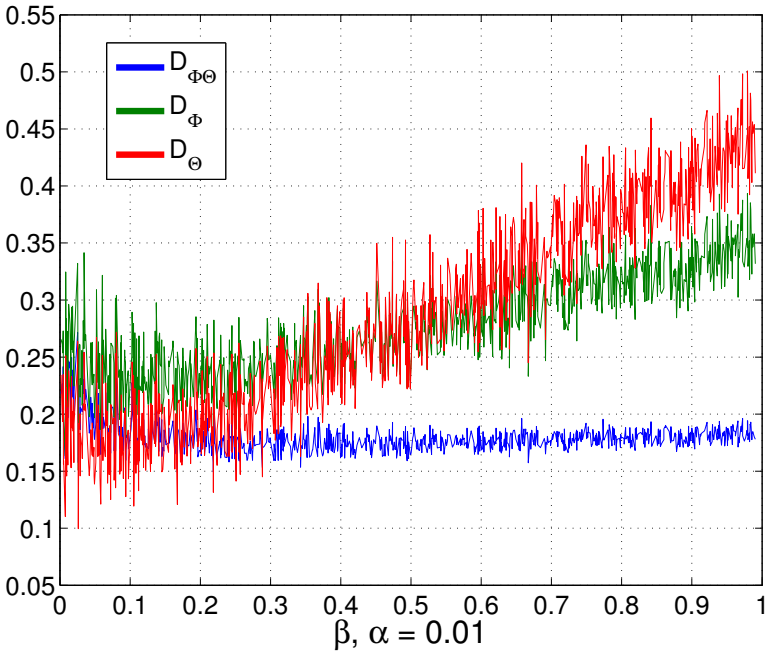
Зависимость разреженности (доли почти нулевых элементов) распределений $\theta_d^0 \sim \mathrm{Dir}(\alpha)$ и $\phi_t^0 \sim \mathrm{Dir}(\beta)$ от параметров α и β симметричного распределения Дирихле:



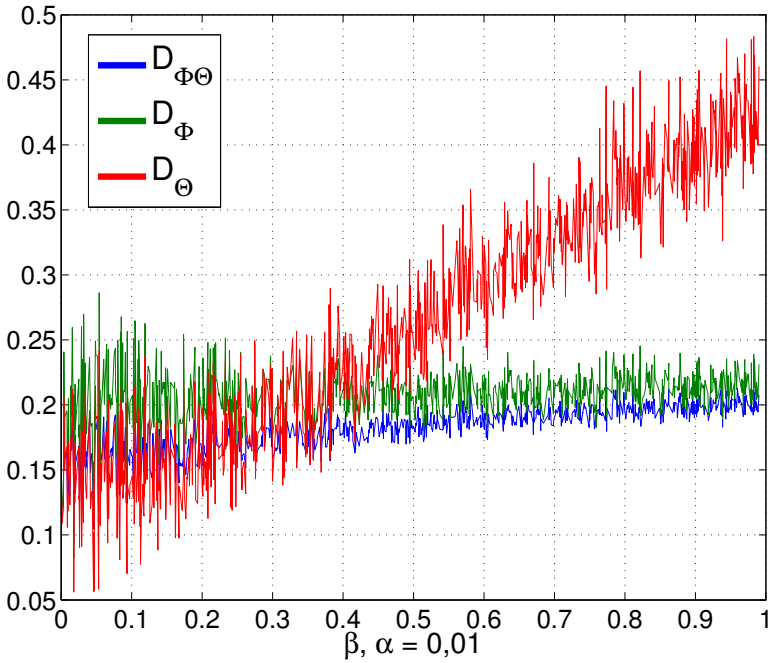
Эксперимент: неустойчивость восстановления Φ, Θ

Зависимость точности восстановления матриц Φ, Θ и ΦΘ от разреженности матрицы Φ_0

PLSA



LDA

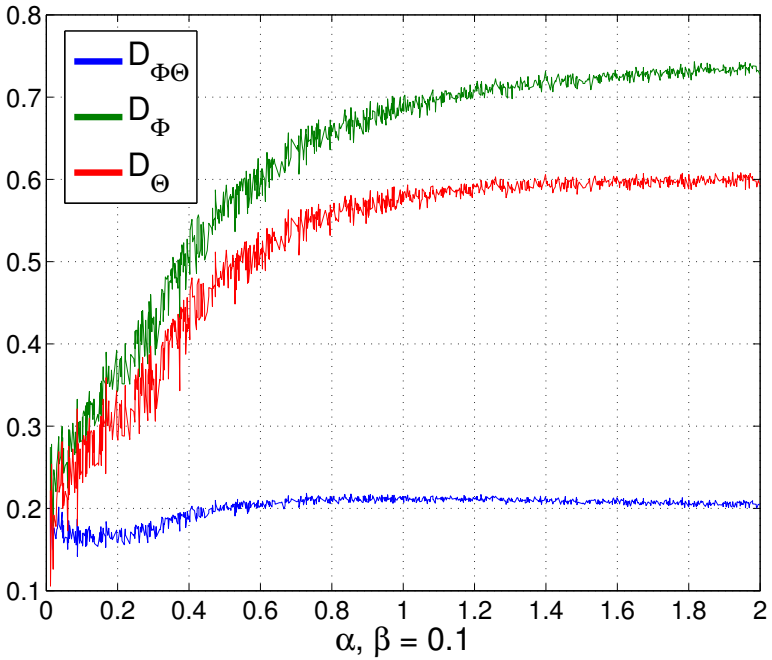


Чем больше нулей в Φ, Θ, тем точнее они восстанавливаются

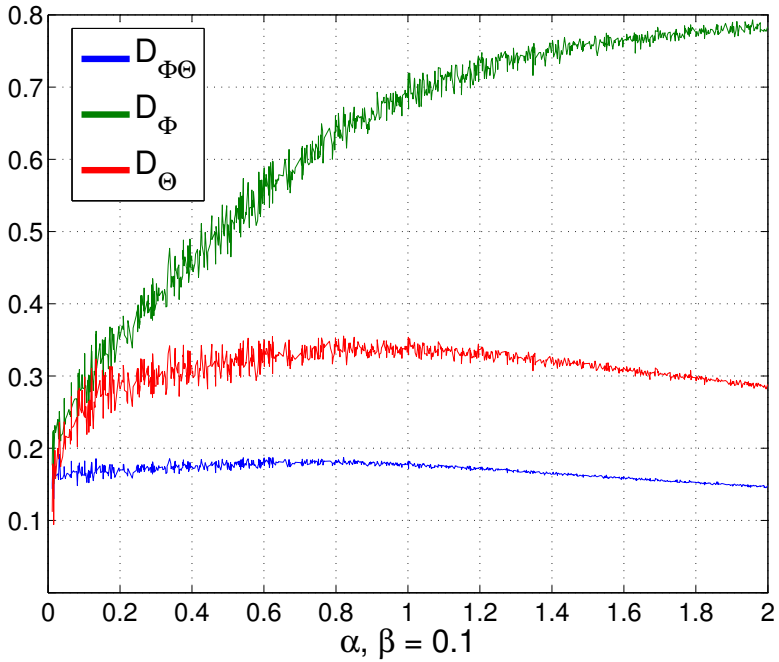
Эксперимент: неустойчивость восстановления Φ, Θ

Зависимость точности восстановления матриц Φ, Θ и ΦΘ от разреженности матрицы Θ_0

PLSA



LDA



Выводы

1. Произведение $\Phi\Theta$ восстанавливается устойчиво, точность восстановления не зависит от разреженности исходных модельных данных Φ_0, Θ_0
2. Матрицы Φ, Θ восстанавливаются неустойчиво, результат зависит от случайной инициализации
3. Методы PLSA и LDA одинаково неустойчивы (сглаживание не спасает от неединственности)
4. Устойчивое восстановление матриц Φ, Θ происходит только при сильной разреженности (более 80% нулей)

Реализация экспериментов:
Виталий Глушаченков. Магистерская диссертация. МФТИ, 2013.
Михаил Колупаев. Курсовая работа. ВШЭ, 2013.

Причина неустойчивости тематических моделей

Задача стохастического матричного разложения:

$$\hat{F} \approx F = \Phi\Theta$$

$\hat{F} = \left(n_{dw}/n_d\right)_{W\times D}$ — известная матрица исходных данных;
$F = \left(p(w|d)\right)_{W\times D}$ — матрица тематической модели;
$\Phi = \left(\phi_{wt}\right)_{W\times T}$ — искомая матрица терминов тем $\phi_{wt} = p(w|t)$;
$\Theta = \left(\theta_{td}\right)_{T\times D}$ — искомая матрица тем документов $\theta_{td} = p(t|d)$.
Все матрицы неотрицательные, с нормированными столбцами.

Проблема неединственности матричного разложения:

$$F = \Phi\Theta = (\Phi S)(S^{-1}\Theta) = \Phi'\Theta'$$

для любых невырожденных $S_{T\times T}$ таких, что $\Phi', \Theta' > 0$.

Регуляризация — это выбор лучшего из множества разложений

Многокритериальная оптимизация тематической модели

Пусть, наряду с правдоподобием, требуется максимизировать ещё n критериев $R_i(\Phi, \Theta)$, $i = 1, \ldots, n$ — *регуляризаторов*.
Метод многокритериальной оптимизации — *скаляризация*.

Задача максимизации регуляризованного правдоподобия:

$$\underbrace{\sum_{d \in D} \sum_{w \in d} n_{dw} \ln \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td}}_{\text{log-likelihood } L(\Phi,\Theta)} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \tau_i R_i(\Phi, \Theta)}_{R(\Phi,\Theta)} \to \max_{\Phi,\Theta},$$

при ограничениях неотрицательности и нормировки

$$\phi_{wt} \geqslant 0; \quad \sum_{w \in W} \phi_{wt} = 1; \qquad \theta_{td} \geqslant 0; \quad \sum_{t \in T} \theta_{td} = 1$$

где $\tau_i > 0$ — *коэффициенты регуляризации*.

Обоснование регуляризованного EM-алгоритма PLSA

Теорема

Если Φ, Θ — решение задачи максимизации регуляризованного правдоподобия, то оно удовлетворяет системе уравнений

$$\begin{cases} \text{E-шаг:} \quad n_{dwt} = n_{dw} \dfrac{\phi_{wt}\theta_{td}}{\sum\limits_{s \in T} \phi_{ws}\theta_{sd}}; \\ \text{M-шаг:} \\ \phi_{wt} = \dfrac{n_{wt}}{n_t}; \quad n_{wt} = \left(\sum\limits_{d \in D} n_{dwt} + \phi_{wt} \dfrac{\partial R}{\partial \phi_{wt}} \right)_+; \quad n_t = \sum\limits_{w \in W} n_{wt}; \\ \theta_{td} = \dfrac{n_{td}}{n_d}; \quad n_{td} = \left(\sum\limits_{w \in d} n_{dwt} + \theta_{td} \dfrac{\partial R}{\partial \theta_{td}} \right)_+; \quad n_d = \sum\limits_{t \in T} n_{td} \end{cases}$$

При $R(\Phi, \Theta) = 0$ получаем формулы обычного EM-PLSA.

Дивергенция Кульбака–Лейблера

Функция расстояния между распределениями $P = (p_i)_{i=1}^n$ и $Q = (q_i)_{i=1}^n$:

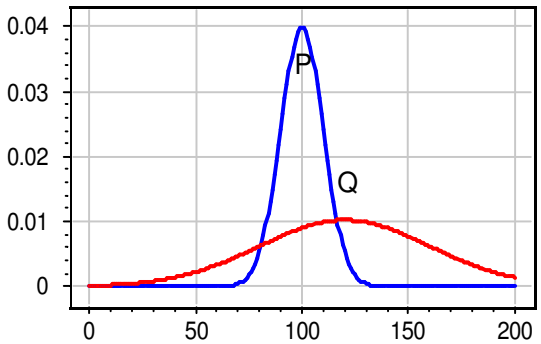
$$\mathrm{KL}(P\|Q) \equiv \mathrm{KL}_i(p_i\|q_i) = \sum_{i=1}^n p_i \ln \frac{p_i}{q_i}.$$

1. $\mathrm{KL}(P\|Q) \geqslant 0$; $\quad \mathrm{KL}(P\|Q) = 0 \;\Leftrightarrow\; P = Q$;

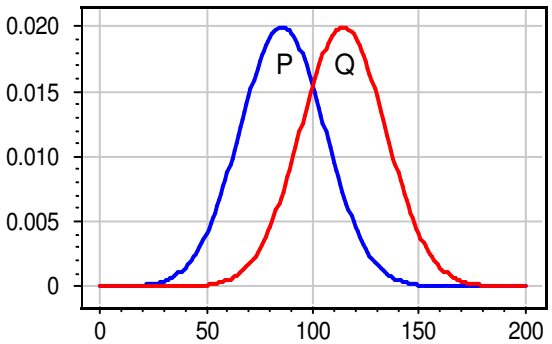
2. Минимизация KL эквивалентна максимизации правдоподобия:

$$\mathrm{KL}(P\|Q(\alpha)) = \sum_{i=1}^n p_i \ln \frac{p_i}{q_i(\alpha)} \to \min_\alpha \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^n p_i \ln q_i(\alpha) \to \max_\alpha.$$

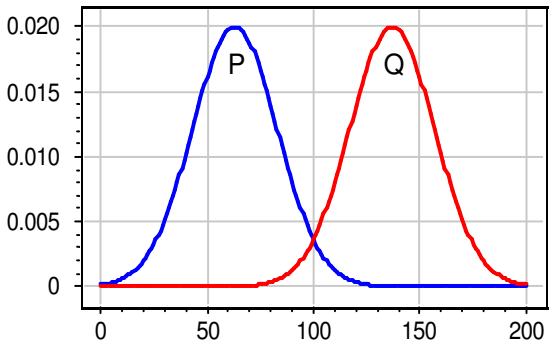
3. Если $\mathrm{KL}(P\|Q) < \mathrm{KL}(Q\|P)$, то P сильнее вложено в Q, чем Q в P:



$\mathrm{KL}(P\|Q) = 0.442$
$\mathrm{KL}(Q\|P) = 2.966$



$\mathrm{KL}(P\|Q) = 0.444$
$\mathrm{KL}(Q\|P) = 0.444$



$\mathrm{KL}(P\|Q) = 2.969$
$\mathrm{KL}(Q\|P) = 2.969$

Регуляризатор №1: Сглаживание (совпадает с LDA)

Гипотеза сглаженности:

распределения ϕ_{wt} близки к заданным распределениям β_w

распределения θ_{td} близки к заданным распределениям α_t

$$\sum_{t\in T} \mathrm{KL}_w(\beta_w \| \phi_{wt}) \to \min_{\Phi}; \qquad \sum_{d\in D} \mathrm{KL}_t(\alpha_t \| \theta_{td}) \to \min_{\Theta}.$$

Максимизируем сумму этих регуляризаторов:

$$R(\Phi,\Theta) = \beta_0 \sum_{t\in T}\sum_{w\in W} \beta_w \ln \phi_{wt} + \alpha_0 \sum_{d\in D}\sum_{t\in T} \alpha_t \ln \theta_{td} \to \max.$$

Подставляем, получаем формулы M-шага LDA:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} + \beta_0\beta_w, \qquad \theta_{td} \propto n_{dt} + \alpha_0\alpha_t.$$

Этого вы не найдёте в *D.Blei, A.Ng, M.Jordan.* Latent Dirichlet allocation // Journal of Machine Learning Research, 2003. — Vol. 3. — Pp. 993–1022.

Регуляризатор №1: Сглаживание (совпадает с LDA)

Выводы:

- Найдено альтернативное обоснование LDA:
  оказывается, это всего лишь притягивание столбцов Φ, Θ
  к заданным распределениям (β_w), (α_t),
  причём $\beta_0\beta_w$ и $\alpha_0\alpha_t$ — параметры распределений Дирихле
- Формулы M-шага LDA получены без байесовского вывода:
  — без предположения об априорном распределении
  — без интегрирования по пространству параметров модели
  — без требования сопряжённости
- Распределение Дирихле утрачивает свою «особую роль»,
  это один из многих регуляризаторов, и не самый лучший

Регуляризатор №2: Частичное обучение (обобщение LDA)

Пусть известно, что
1) документы $d \in D_0$ относятся к темам $T_d \subset T$,
2) к темам $t \in T_0$ относятся термины $W_t \subset W$.

ϕ^0_{wt} — распределение, равномерное на W_t
θ^0_{td} — распределение, равномерное на T_d

Максимизируем сумму этих регуляризаторов:

$$R(\Phi, \Theta) = \beta_0 \sum_{t \in T_0} \sum_{w \in W_t} \phi^0_{wt} \ln \phi_{wt} + \alpha_0 \sum_{d \in D_0} \sum_{t \in T_d} \theta^0_{td} \ln \theta_{td} \to \max$$

Подставляем, получаем обобщение LDA:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} + \beta_0 \phi^0_{wt} \qquad \theta_{td} \propto n_{dt} + \alpha_0 \theta^0_{td}$$

Nigam K., McCallum A., Thrun S., Mitchell T. Text classification from labeled and unlabeled documents using EM // Machine Learning, 2000, no. 2–3.

Регуляризатор №2: Частичное обучение (второе обобщение LDA)

Гипотеза: вместо логарифма можно взять любую другую монотонно возрастающую функцию μ

$$R(\Phi,\Theta) = \beta_0 \sum_{t\in T_0}\sum_{w\in W_t} \phi^0_{wt}\mu(\phi_{wt}) + \alpha_0 \sum_{d\in D_0}\sum_{t\in T_d} \theta^0_{td}\mu(\theta_{td}) \to \max$$

Подставляем, получаем ещё одно обобщение LDA:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} + \beta_0\phi^0_{wt}\phi_{wt}\mu'(\phi_{wt}) \qquad \theta_{td} \propto n_{dt} + \alpha_0\theta^0_{td}\theta_{td}\mu'(\theta_{td})$$

При $\mu(z) = z$ максимизируется сумма ковариаций $\text{cov}(\theta^0_d, \theta_d)$.

Преимущество ковариационного регуляризатора:
Если θ^0_{td} равномерно на T_d, то ковариация не накладывает ограничений на распределение θ_{td} между темами из T_d.

Регуляризатор №3: Разреживание (третье обобщение LDA)

Гипотеза разреженности: среди ϕ_{wt}, θ_{td} много нулей.

Чем сильнее разрежено распределение, тем ниже его энтропия.
Максимальной энтропией обладает равномерное распределение.

Максимизируем дивергенцию между распределениями β_w, α_t (равномерными?) и искомыми распределениями ϕ_{wt}, θ_{td}:

$$R(\Phi,\Theta) = -\beta_0 \sum_{t\in T}\sum_{w\in W} \beta_w \ln \phi_{wt} - \alpha_0 \sum_{d\in D}\sum_{t\in T} \alpha_t \ln \theta_{td} \to \max.$$

Подставляем, получаем «анти-LDA»:

$$\phi_{wt} \propto \left(n_{wt} - \beta_0\beta_w\right)_+, \qquad \theta_{td} \propto \left(n_{dt} - \alpha_0\alpha_t\right)_+.$$

Varadarajan J., Emonet R., Odobez J.-M. A sparsity constraint for topic models — application to temporal activity mining // NIPS-2010 Workshop on Practical Applications of Sparse Modeling: Open Issues and New Directions.

Постепенное разреживание распределений ϕ_{wt} и θ_{td}

Эвристика:
постепенно увеличивать коэффициенты регуляризации α, β

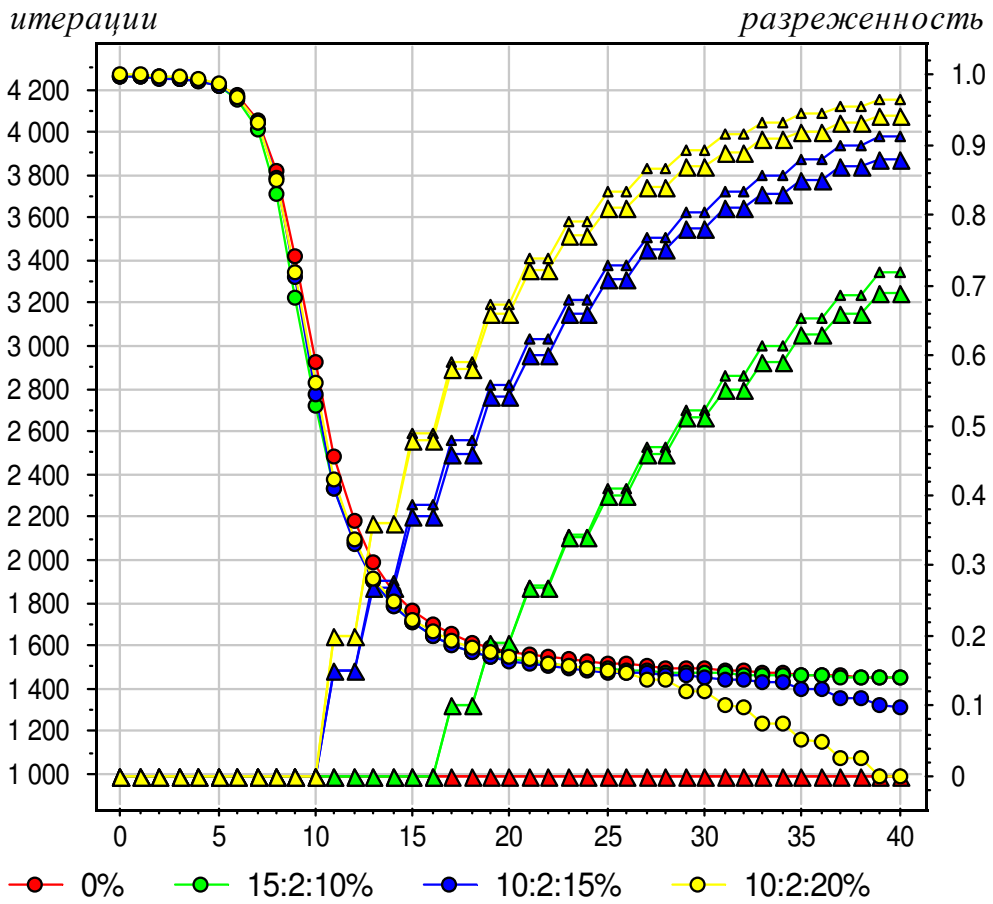
Реализация эвристики:
начиная с итерации i_0, в конце каждой δ-й итерации
обнуляем долю r наименьших значений в ϕ_t и θ_d,
так, чтобы сумма обнуляемых значений
не превышала R_θ для распределений θ_d,
не превышала R_ϕ для распределений ϕ_t

Обозначения параметров эвристики: $i_0{:}\delta{:}r$, th:R_θ, ph:R_ϕ

Воронцов К.В., Потапенко А.А. Модификации EM-алгоритма для вероятностного тематического моделирования // Машинное обучение и анализ данных, 2013. — Т. 1, № 6. — С. 657–686.

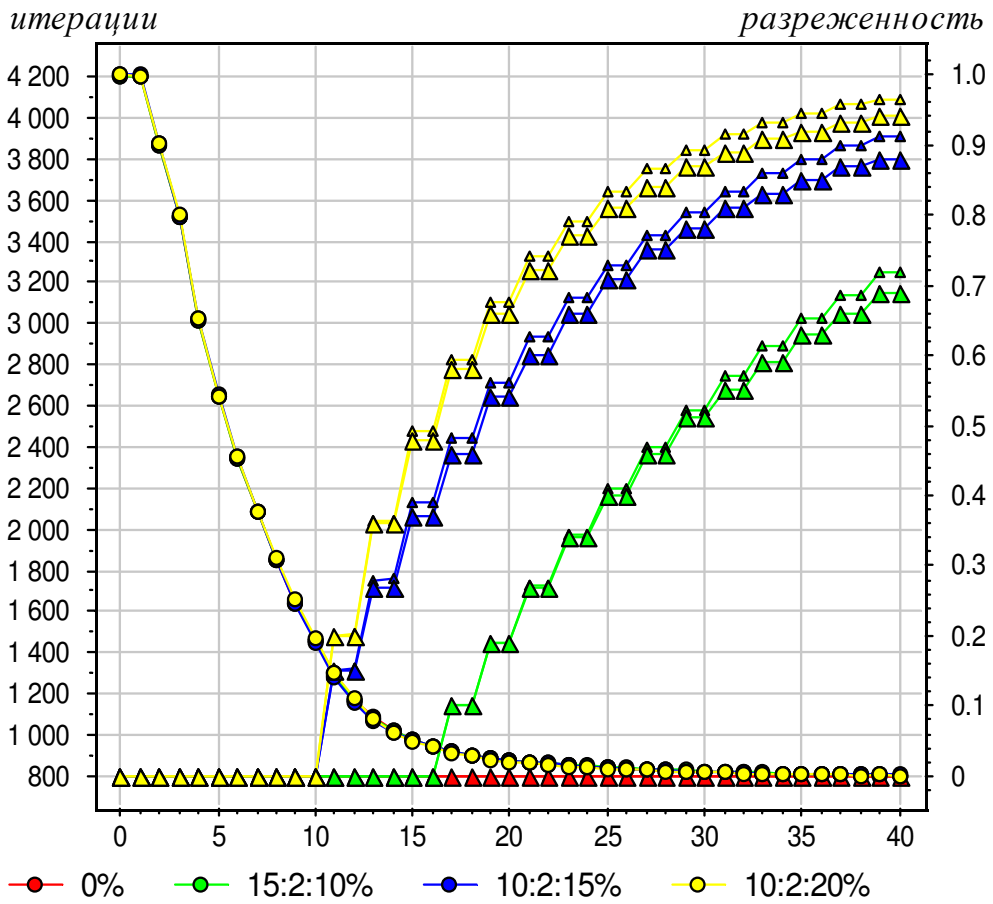
Разреживание распределений ϕ_{wt} и θ_{td}

упрощённая робастная модель,
разреживание через 2 итерации



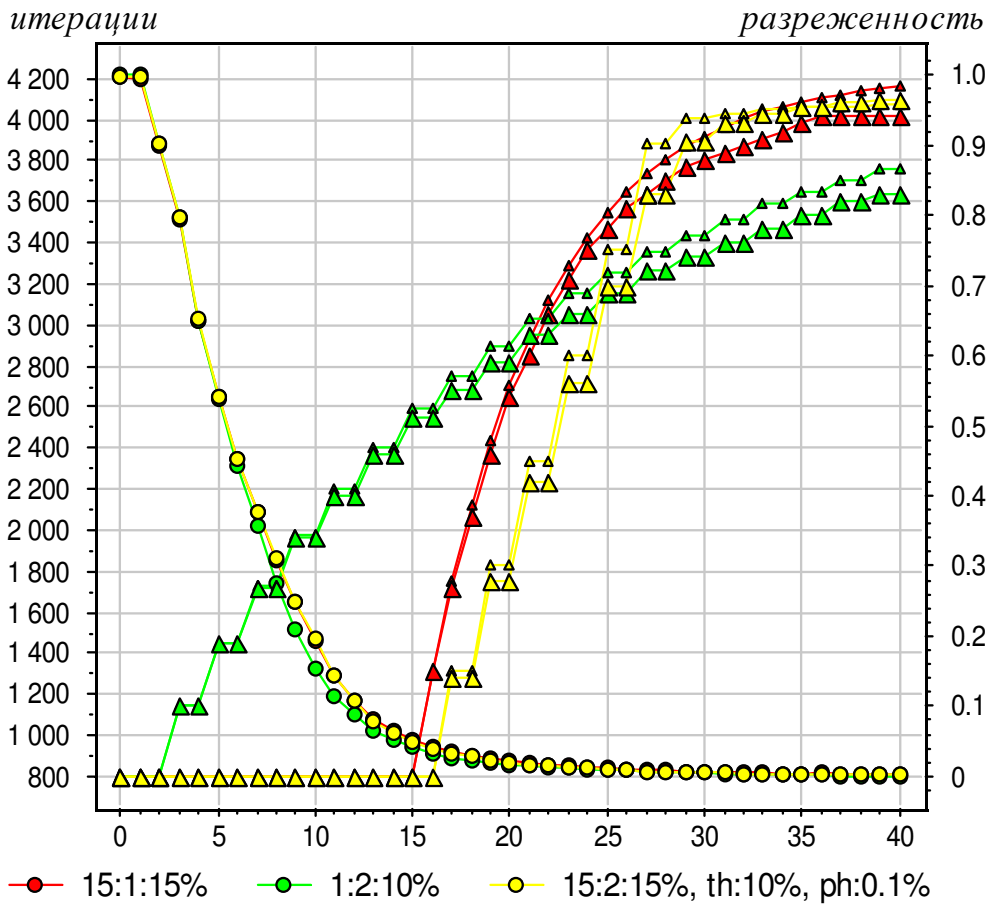
Разреживание распределений ϕ_{wt} и θ_{td}

робастная модель с фоном и шумом,
разреживание через 2 итерации



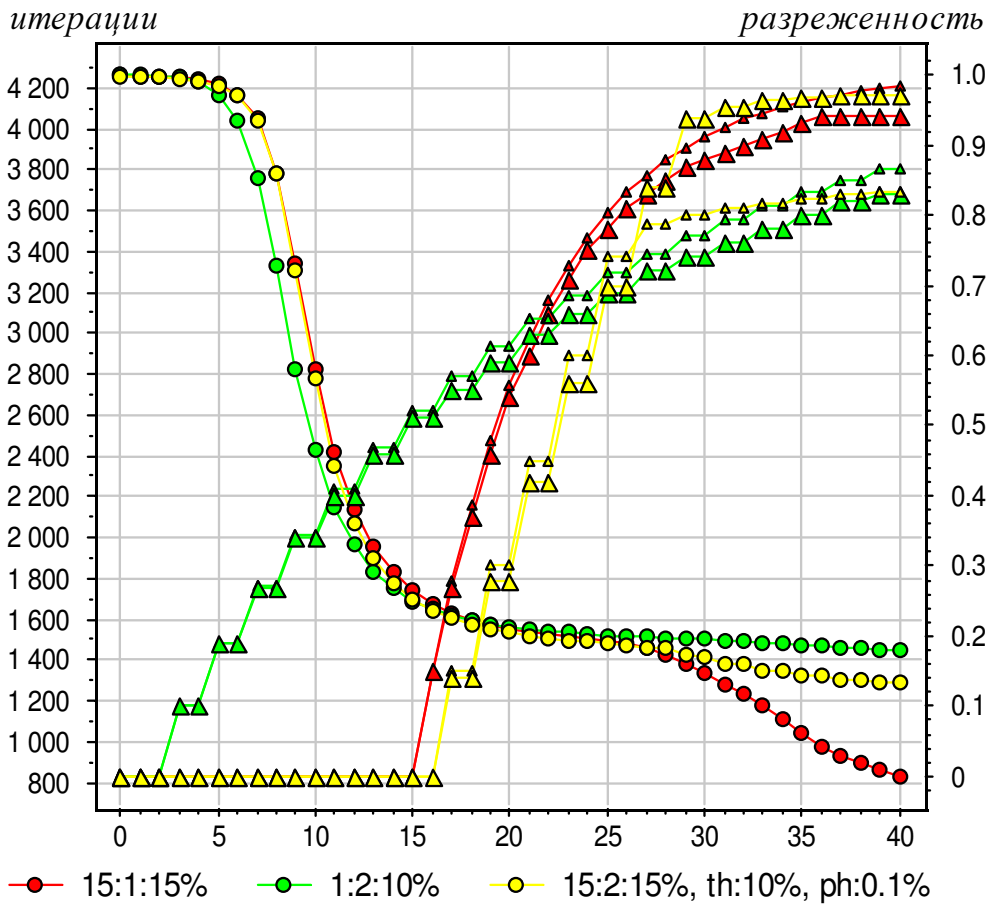
Разреживание распределений ϕ_{wt} и θ_{td}

робастная модель с фоном и шумом,
агрессивные стратегии разреживания $i_0{:}\delta{:}r$, th:R_θ, ph:R_ϕ



Разреживание распределений ϕ_{wt} и θ_{td}

упрощённая робастная модель без фона,
агрессивные стратегии разреживания $i_0{:}\delta{:}r$, th:R_θ, ph:R_ϕ



Выводы

1. Возможно достигать разреженности 95–99% без ухудшения перплексии
2. При числе тем $|T| = 100$ это означает, что в среднем каждое слово относится к 1–5 темам
3. При этом многие строки матрицы Φ обнуляются, т.е. слово оказывается нетематическим

Регуляризатор №4: Антикорреляция

Гипотеза некоррелированности тем:
чем различнее темы, тем лучше они интерпретируются.

Минимизируем ковариации между вектор-столбцами ϕ_t:

$$R(\Phi) = -\frac{\tau}{2} \sum_{t \in T} \sum_{s \in T \setminus t} \sum_{w \in W} \phi_{wt} \phi_{ws} \to \max,$$

Подставляем, получаем ещё один вариант разреживания — постепенное контрастирование строк матрицы Φ:

$$\phi_{wt} \propto \left(n_{wt} - \tau \phi_{wt} \sum_{s \in T \setminus t} \phi_{ws} \right)_+ .$$

Tan Y., Ou Z. Topic-weak-correlated latent Dirichlet allocation // 7th Int'l Symp. Chinese Spoken Language Processing (ISCSLP), 2010. — Pp. 224–228.

Регуляризатор №5: Максимизация когерентности тем

Гипотеза: тема лучше интерпретируется, если она содержит *когерентные* (часто встречающиеся рядом) слова $u, v \in W$.

Пусть C_{uv} — оценка когерентности, например $\hat{p}(v|u) = N_{uv}/N_u$.

$$R(\Phi, \Theta) = \tau \sum_{t \in T} \sum_{(u,v)} C_{uv} n_{ut} \ln \phi_{vt} \to \max,$$

Подставляем, получаем ещё один вариант сглаживания: векторы ϕ_{wt} притягиваются к эмпирическим оценкам распределений $p(w|t)$, вычисляемым по когерентным словам:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} + \tau \sum_{u \in W \setminus w} C_{uw} n_{ut}.$$

Mimno D., Wallach H. M., Talley E., Leenders M., McCallum A. Optimizing semantic coherence in topic models // Empirical Methods in Natural Language Processing, EMNLP-2011. — Pp. 262–272.

Регуляризатор №6: Связи между документами

Гипотеза: чем больше n_{dc} — число ссылок из d на c, тем более близки тематики документов d и c.

Минимизируем ковариации между вектор-столбцами связанных документов θ_d, θ_c:

$$R(\Phi, \Theta) = \tau \sum_{d,c \in D} n_{dc} \operatorname{cov}(\theta_d, \theta_c) \to \max,$$

Подставляем, получаем ещё один вариант сглаживания:

$$\theta_{td} \propto \hat{n}_{dt} + \tau \theta_{td} \sum_{c \in D} n_{dc} \theta_{tc}.$$

Dietz L., Bickel S., Scheffer T. Unsupervised prediction of citation influences // ICML 2007. — Pp. 233–240.

Регуляризатор №7: Классификация документов

Пусть C — множество классов документов (категории, пользователи, авторы, ссылки, годы, конференции,...)

Гипотеза:
классификация документа d объясняется его темами:

$$p(c|d) = \sum_{t \in T} p(c|t)p(t|d) = \sum_{t \in T} \psi_{ct}\theta_{td}$$

Минимизируем дивергенцию между моделью $p(c|d)$ и «эмпирической частотой» классов в документах m_{dc}:

$$R(\Psi, \Theta) = \tau \sum_{d \in D} \sum_{c \in C} m_{dc} \ln \sum_{t \in T} \psi_{ct}\theta_{td} \to \max$$

Rubin T. N., Chambers A., Smyth P., Steyvers M. Statistical topic models for multi-label document classification // Machine Learning, 2012, no. 1–2.

Регуляризатор №7: Классификация (EM-алгоритм)

E-шаг. По формуле Байеса:

$$p(t|d,w) = \frac{\phi_{wt}\theta_{td}}{\sum_{s\in T}\phi_{ws}\theta_{sd}} \qquad p(t|d,c) = \frac{\psi_{ct}\theta_{td}}{\sum_{s\in T}\psi_{cs}\theta_{sd}}$$

M-шаг. Максимизация регуляризованного правдоподобия:

$$\phi_{wt} \propto n_{wt} \qquad n_{wt} = \sum_{d\in D} n_{dw} p(t|d,w)$$

$$\theta_{td} \propto n_{dt} + \tau m_{dt} \qquad n_{dt} = \sum_{w\in W} n_{dw} p(t|d,w) \qquad m_{dt} = \sum_{c\in C} m_{dc} p(t|d,c)$$

$$\psi_{ct} \propto m_{ct} \qquad m_{ct} = \sum_{d\in D} m_{dc} p(t|d,c)$$

Регуляризатор №8: Категоризация документов

Снова регуляризатор для классификации:

$$R(\Psi,\Theta) = \tau \sum_{d\in D}\sum_{c\in C} m_{dc} \ln \sum_{t\in T} \psi_{ct}\theta_{td} \to \max$$

Недостаток: приходится задавать равномерное распределение

$$m_{dc} = n_d \frac{[c \in C_d]}{|C_d|}$$

Ковариационный регуляризатор:

$$R(\Psi,\Theta) = \tau \sum_{d\in D}\sum_{c\in C} m_{dc} \sum_{t\in T} \psi_{ct}\theta_{td} \to \max$$

приводит к естественному аналитическому решению

$$\psi_{ct} = \big[c = c^*(t)\big], \quad c^*(t) = \arg\max_{c\in C} \sum_{d\in D} m_{dc}\theta_{td}.$$

Регуляризатор №9: Динамическая тематическая модель

Пусть классы C — это годы публикации

Гипотеза:
тематика меняется медленно, поэтому вероятности ψ_{ct} в последовательные годы $(c-1, c)$ должны быть близки:

$$R_1(\Psi) = -\tau_1 \sum_{c \in C} \sum_{t \in T} \left| \psi_{ct} - \psi_{c-1,t} \right| \to \max .$$

Второй регуляризатор — разреживающий

$$R_2(\Psi) = -\tau_2 \sum_{c \in C} \sum_{t \in T} \ln \psi_{ct} \to \max .$$

Подбор траекторий регуляризации

Пусть задана линейная комбинация регуляризаторов:

$$R(\Phi, \Theta) = \sum_{i=1}^{n} \tau_i R_i(\Phi, \Theta)$$

Задача: выбрать вектор коэффициентов $\tau = (\tau_i)_{i=1}^{n}$

Ближайшие аналоги:

- Построение «Regularization Path» в задачах регрессии с двумя регуляризаторами L_1 и L_2 (Elastic Net)
- Постепенное разреживание тематической модели

Идея построения траектории в пространстве коэффициентов τ:
1) достичь сходимости нерегуляризованного PLSA,
2) усиливать регуляризаторы постепенно, в определённом порядке.

Комбинирование разреживания, сглаживания и декорреляции

Задача: достичь одновременно нескольких целей
без ухудшения правдоподобия (перплексии) модели

1. максимизировать разреженность Φ и Θ
2. повысить различность тем
3. улучшить интерпретируемость тем
4. выделить нетематические слова в отдельные темы
5. оставить в каждой теме «разумное» число слов

Данные: NIPS

- $|D| = 1566$ статей конференции NIPS на английском языке;
- суммарной длины $n \approx 2.3 \cdot 10^6$,
- словарь $|W| \approx 1.3 \cdot 10^4$.
- Контрольная коллекция: $|D'| = 174$.

Оценки качества модели

- Мера адекватности модели — перплексия
- Разреженность — доля нулевых элементов в Φ и Θ
- Интерпретируемость тем — когерентность [Newman, 2010]
  - не требует экспертных оценок
  - вычисляется автоматически
- Различность тем — предлагается три характеристики:
  - чистота темы
  - контрастность темы
  - размер ядра темы

Оценки интерпретируемости: когерентность

Когерентность темы t

$$\mathrm{PMI}_t = \frac{2}{k(k-1)} \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i}^{k} \mathrm{PMI}(w_i, w_j)$$

где w_i — i-й термин в порядке убывания ϕ_{wt}.

$\mathrm{PMI}(u, v) = \ln \frac{|D| N_{uv}}{N_u N_v}$ — поточечная взаимная информация (pointwise mutual information),

N_{uv} — число документов, в которых термины u, v хотя бы один раз встречаются рядом (в окне 10 слов),

N_u — число документов, в которых u встретился хотя бы 1 раз.

Newman D., Lau J.H., Grieser K., Baldwin T. Automatic evaluation of topic coherence // Human Language Technologies, HLT-2010, Pp. 100–108.

Оценки интерпретируемости: чистота и контрастность

Термин $w \in W$ *тематический*, если в распределении $p(t|w) \propto \phi_{wt} n_t$ доля вероятностной массы $\kappa = 50\%$ сконцентрирована не более чем в $\delta = 2\%$ тем.

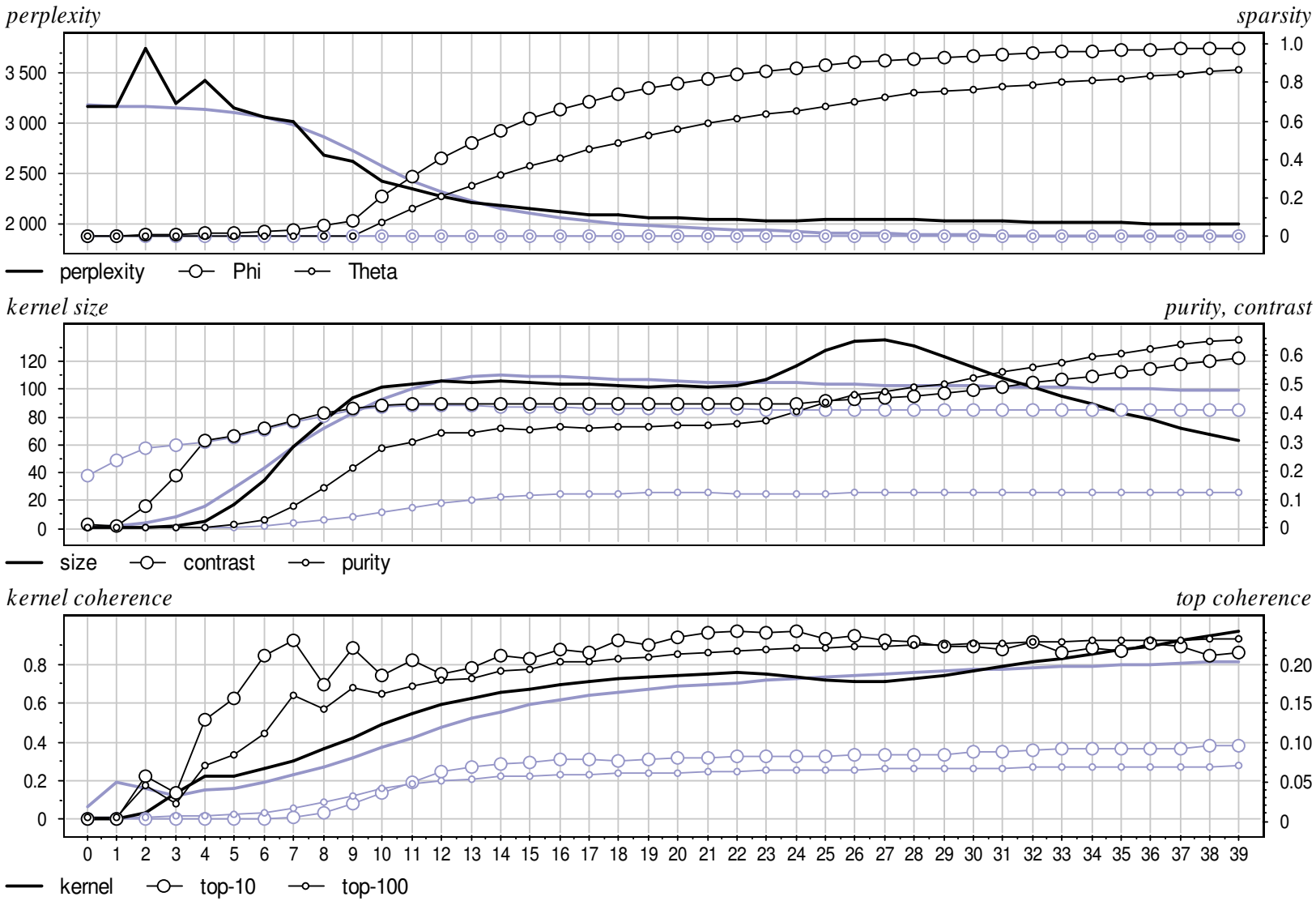
Ядро темы W_t — все её тематические термины.

Три показателя качества темы t:

- размер ядра: $|W_t|$;
- чистота темы: $\sum_{t \in W_t} p(w|t)$;
- контрастность темы: $|W_t|^{-1} \sum_{t \in W_t} p(t|w)$.

Vorontsov K. V., Potapenko A. A., Additive Regularization of Topic Models // Machine Learning Journal (подано).

Комбинирование разреживания, сглаживания и декорреляции



Выводы

Показана возможность одновременного

- усиления разреженности (до 98%)
- улучшения интерпретируемости (когерентности) тем
- повышения различности (чистоты и контрастности) тем
- при среднем размере ядер тем около 100 слов
- почти без потери перплексии (правдоподобия) модели

Воронцов Константин Вячеславович
voron@forecsys.ru

Страницы на www.MachineLearning.ru:

- Участник:Vokov
- Вероятностные тематические модели (курс лекций, К. В. Воронцов)
- Тематическое моделирование

Воронцов К. В. Аддитивная регуляризация тематических моделей коллекций текстовых документов // Доклады РАН, №3, 2014 (в печати).