

# LDA: ВАРИАЦИОННЫЙ ВЫВОД

---

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

19 марта 2021 г.

---

*Random facts:*

- 19 марта 1474 г. в Венеции приняли закон об охране изобретений — первый в мире закон об охране авторского права
- 19 марта 1514 г. Тристан да Кунья привёз папе римскому в подарок от португальского короля индийского слона
- 19 марта 1697 г. началось «Великое посольство» Петра I — первый в истории визит русского царя в Европу
- 19 марта 1927 г. в штате Вашингтон мясник обнаружил в желудке цыплёнка шесть самородков золота, а 19 марта 1934 г. совхозник Митрофан Никитин расстрелял из револьвера гроб Ленина в Мавзолее
- 19 марта 1974 г. группа Jefferson Airplane проапгрейдилась и сменила название на Jefferson Starship

# ТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

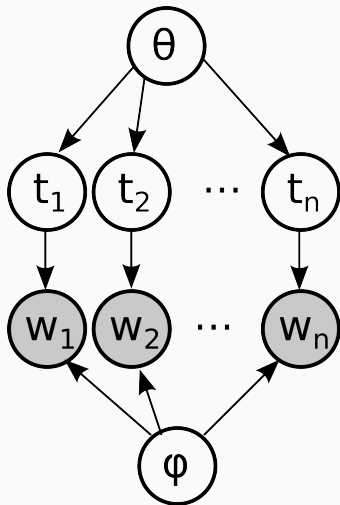
---

- А ещё в наивном байесе у документа только одна тема.
- Но это же не так! На самом деле документ говорит о многих темах (но не слишком многих).
- Давайте попробуем это учесть.

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

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

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



- Получается как-то так:

---

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

---

**Вход:** коллекция  $D$ , число тем  $|T|$ , начальные приближения матриц  $\Phi$  и  $\Theta$ ;

**Выход:** параметры модели  $\Phi$  и  $\Theta$ ;

1 **повторять**

2     обнулить  $n_{wt}$ ,  $n_{td}$ ,  $n_t$  для всех  $d \in D$ ,  $w \in W$ ,  $t \in T$ ;

3     **для всех**  $d \in D$ ,  $w \in d$

4          $n_{tdw} := n_{dw} \varphi_{wt} \theta_{td} / \sum_{\tau} \varphi_{w\tau} \theta_{\tau d}$  для всех  $t \in T$ ;

5         увеличить  $n_{wt}$ ,  $n_{td}$ ,  $n_t$  на  $n_{tdw}$  для всех  $t \in T$ ;

6      $\varphi_{wt} := n_{wt} / n_t$  для всех  $w \in W$ ,  $t \in T$ ;

7      $\theta_{td} := n_{td} / n_d$  для всех  $d \in D$ ,  $t \in T$ ;

8 **пока**  $\Phi$  и  $\Theta$  не сойдутся;

---

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

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

- Как максимизировать такие правдоподобия?

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

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

- А на M-шаге пересчитываем параметры модели:

$$\begin{aligned} n_{wt} &= \sum_d n_{dwt}, & n_t &= \sum_w n_{wt}, & \phi_{wt} &= \frac{n_{wt}}{n_t}, \\ n_{td} &= \sum_{w \in d} n_{dwt}, & \theta_{td} &= \frac{n_{td}}{n_d}. \end{aligned}$$

- Вот и весь вывод в pLSA.



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

---

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

---

**Вход:** коллекция  $D$ , число тем  $|T|$ , начальные приближения матриц  $\Phi$  и  $\Theta$ ;

**Выход:** параметры модели  $\Phi$  и  $\Theta$ ;

1 **повторять**

2     обнулить  $n_{wt}$ ,  $n_{td}$ ,  $n_t$  для всех  $d \in D$ ,  $w \in W$ ,  $t \in T$ ;

3     **для всех**  $d \in D$ ,  $w \in d$

4          $n_{tdw} := n_{dw} \varphi_{wt} \theta_{td} / \sum_{\tau} \varphi_{w\tau} \theta_{\tau d}$  для всех  $t \in T$ ;

5         увеличить  $n_{wt}$ ,  $n_{td}$ ,  $n_t$  на  $n_{tdw}$  для всех  $t \in T$ ;

6      $\varphi_{wt} := n_{wt} / n_t$  для всех  $w \in W$ ,  $t \in T$ ;

7      $\theta_{td} := n_{td} / n_d$  для всех  $d \in D$ ,  $t \in T$ ;

8 **пока**  $\Phi$  и  $\Theta$  не сойдутся;

---

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

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

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

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

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

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

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

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

LDA

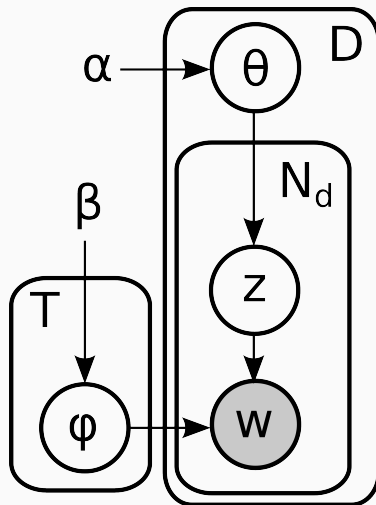
---

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

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



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



# LDA: ЧТО ПОЛУЧАЕТСЯ [BLEI, 2012]

## Topics

gene 0.04  
dna 0.02  
genetic 0.01  
...

life 0.02  
evolve 0.01  
organism 0.01  
...

brain 0.04  
neuron 0.02  
nerve 0.01  
...

data 0.02  
number 0.02  
computer 0.01  
...

## Documents

### Seeking Life's Bare (Genetic) Necessities

COLD SPRING HARBOR, NEW YORK—How many **genes** does an **organism** need to survive? Last week at the genome meeting here, two genome researchers with radically different approaches presented complementary views of the basic genes needed for **life**. One research team, using **computer** analyses to compare known **genomes**, concluded that today's **organisms** can be sustained with just 250 genes, and that the earliest life forms required a mere 128 **genes**. The other researcher mapped genes in a simple parasite and estimated that for this organism, 800 genes are plenty to do the job—but that anything short of 100 wouldn't be enough.

Although the numbers don't match precisely, those **predictions**

\* Genome Mapping and Sequencing, Cold Spring Harbor, New York, May 8 to 12.

"are not all that far apart," especially in comparison to the 75,000 **genes** in the human genome, notes Siv Anderson at Uppsala University in Sweden, who arrived at the 800 number. But coming up with a consensus answer may be more than just a **genetic** numbers game, particularly as more and more **genomes** are completely mapped and sequenced. "It may be a way of organizing any newly **sequenced genomes**," explains Arcady Mushegian, a **computational** molecular biologist at the National Center for Biotechnology Information (NCBI) in Bethesda, Maryland. Comparing an



Stripping down. Computer analysis yields an estimate of the minimum modern and ancient genomes.

SCIENCE • VOL. 272 • 24 MAY 1996

## Topic proportions and assignments



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

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

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

- Правдоподобие набора слов  $w$  оценивается как

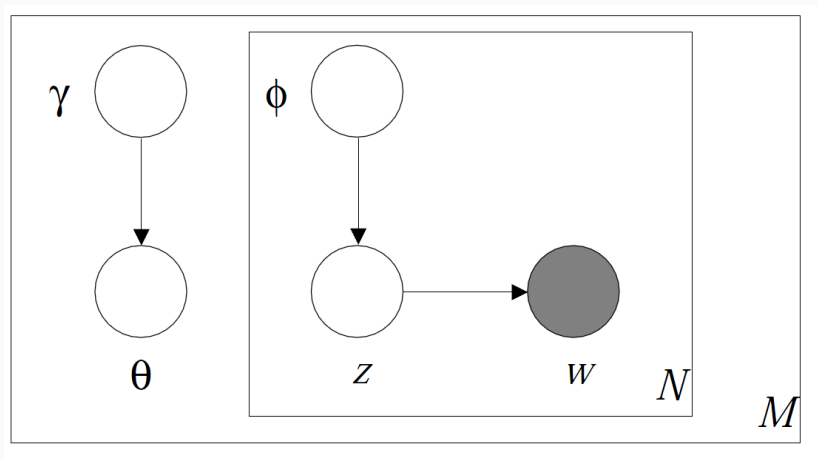
$$p(w | \alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\sum_i \alpha_i)}{\prod_i \Gamma(\alpha_i)} \int \left[ \prod_{i=1}^k \theta_i^{\alpha_i - 1} \right] \left[ \prod_{n=1}^N \sum_{i=1}^k \prod_{j=1}^V (\theta_i \beta_{ij})^{w_n^j} \right] d\theta,$$

и это трудно посчитать, потому что  $\theta$  и  $\beta$  путаются друг с другом.

- Вариационное приближение – рассмотрим семейство распределений

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

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



- Теперь можно искать минимум KL-расстояния:

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

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

$$\begin{aligned} \log p(w | \alpha, \beta) &= \log \int_{\theta} \sum_z p(\theta, z, w | \alpha, \beta) d\theta = \\ &= \log \int_{\theta} \sum_z \frac{p(\theta, z, w | \alpha, \beta) q(\theta, z)}{q(\theta, z)} d\theta \geq \\ &\geq E_q [\log p(\theta, z, w | \alpha, \beta)] - E_q [\log q(\theta, z)] =: L(\gamma, \phi; \alpha, \beta). \end{aligned}$$



- Распишем произведения:

$$L(\gamma, \phi; \alpha, \beta) = E_q [p(\theta | \alpha)] + E_q [p(z | \theta)] + E_q [p(w | z, \beta)] - E_q [\log q(\theta)] - E_q [\log q(z)].$$

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

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

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

- Теперь можно выписать каждый из пяти членов.

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

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

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

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

- Потом максимизируем по  $\gamma_i$ ,  $i$ -й компоненте апостериорного Дирихле-параметра.
- Получится

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

- Соответственно, для вывода нужно просто пересчитывать  $\phi_{ni}$  и  $\gamma_i$  друг через друга, пока оценка не сойдётся.

- Теперь давайте попробуем оценить параметры  $\alpha$  и  $\beta$  по корпусу документов  $D$ .
- Мы хотим найти  $\alpha$  и  $\beta$ , которые максимизируют

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

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

$$\begin{aligned} p(w_d \mid \alpha, \beta) &= \\ &= L(\gamma, \phi; \alpha, \beta) + \text{KL}(q(\theta, z \mid w_d, \gamma\phi) \parallel p(\theta, z \mid w_d, \alpha, \beta)). \end{aligned}$$

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

- Для  $\beta$  это тоже делается нехитро:

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

- Для  $\alpha_i$  получается система уравнений, которую можно решить методом Ньютона.

Спасибо за внимание!