1J2-J-6-02

双曲空間上での単語および文章の意味の構造の埋め込みとその可視的な分析

Visualization and Analysis of the Hierarchical Correlation among Words and Documents in Hyperbolic Space

橋本 大輝　　堀 浩一
Daiki Hashimoto　　Koichi Hori

東京大学工学部航空宇宙工学科
Department of Aeronautics and Astronautics. University of Tokyo

In areas such as Aerospace Engineering where many areas come together to form one complicated area of study, it could be difficult to grasp its entire structure especially for students who has just began learning it. We address this problem by visualizing the hierarchical relationship of different papers in such areas in hyperbolic space to give an overview of the area and suggest which papers to read in what kind of order according to the users interest. We also discoverd ways to find new insights in relationship among different topics by using Wasserstein Metrics with the created visualization.

1. はじめに

航空宇宙工学などの技術及び学問分野は、様々な分野の成果とその複雑な関係の元成り立っている。よって特に初めてその分野を学ぶ人にとって、その全体像を把握するのが難しいことが多い。さらにその分野の中で研究をし未解決の問題に取り組もうとした場合にはその問題にかかわる要素がとてつもなく多いため、何に着目して研究を進めるべきかを判断するのは困難を極めるかもしれない。

本論文ではこういった分野の理解に役立つようにその分野に関わる論文群をその意味により Poincare Embedding に基づき双曲空間上に埋め込むことで論文の内容とその抽象度に従って木構造状に整理し可視化し、分野全体を俯瞰できるような仕組みを提案する。

さらに可視化された構造を Wasserstein Distance などを用いて分析することで、今後その分野に取り組む際にどのような点に着目うるかを考える補助になる情報を視覚的に提供する仕組みを提案する。

これにより文章間の関係を大まかに捉えた可視化を作成することができ、それを分析することによりその分野に関する新たな知見を得ることに役立った。

提案手法と同様に文章のトピックを階層構造上に整理することを試みたものに Hierarchical Topic Models[1] や Pachinko Allocation Model[2] がある。特に Hierarchical Topic Model は NIPS のアブストラクトを対象にトピックの階層構造の生成を行っており、提案手法と似た題材を扱っているが、提案手法では論文からトピックを抽出しその階層構造を生成するだけではなく、各論文を一要素として扱って論文の階層構造を生成した。また提案手法では生成した階層構造を生成したあとこれを用いた分析手法について触れているという点でも異なる。

本論文の構成は以下のとおりである。2 章では Poincare Embedding と Wasserstein Distance といった提案手法に用いた技術や理論についてその概要を説明する。3 章では提案手法について説明し、4 章では arxiv の論文のアブストラクトに対して行った実験の考察を行う。最後に、5 章ではまとめと今後の課題について述べる。

連絡先: 橋本大輝、東京大学、daisea3e1203@gmail.com

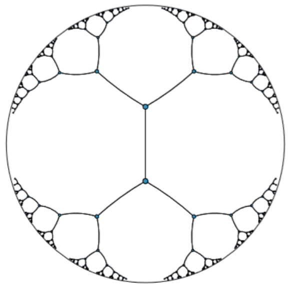

図 1: 二分木の双曲空間への埋め込み。[4] より引用

2. 関連研究及び理論

本章では提案手法に関連する Poincare Embedding と Wasserstein Distance について述べる。

2.1 Poincare Embedding

Poincare Embedding[4] では埋め込みを一般的なユークリッド空間上ではなく、負の曲率を持つ曲がった空間である双曲空間のモデルの一つであるポワンカレの円盤モデル上に行っており、これによって階層構造の埋め込みを高い精度で行っている。

双曲空間とはまっすぐなユークリッド空間と異なり負の曲率を持つ曲がった空間のことで、木構造との親和性が高い空間[3] である。木構造は双曲空間には**図 1** のように中心から遠いほどより深いノード配置されるように自然な形で埋め込まれる。Poincare Embedding は入力として”哺乳類、犬”のような上位概念と下位概念のペアの集合を用い、ペアとして与えられた要素がなるべく近くに配置されるように双曲空間の一モデルであるポワンカレの円盤モデル上で最適化を行うことで双曲空間への埋め込みを行う。

より具体的には、$\mathcal{D} = \{(u\,v)\}$ を要素 u と v にみられる上位概念、下位概念の関係、$\mathcal{N}(u) = \{v|(u,v) \notin \mathcal{D}\} \cup \{u\}$ を u と上位概念、下位概念の関係がみられない要素の集合とする。このとき $d(u,v)$ を要素 u と v のポワンカレの円盤モデル上での距離

$$d(u,v) = arcosh\left(1 + 2\frac{\|u-v\|^2}{(1-\|u\|^2)(1-\|v\|^2)}\right) \qquad (1)$$

The 33rd Annual Conference of the Japanese Society for Artificial Intelligence, 2019

とすると

$$\mathcal{L} = \sum_{(u,v)\in\mathcal{D}} \log \frac{e^{-d(u,v)}}{\sum_{v'\in\mathcal{N}(u)} e^{-d(u,v')}} \tag{2}$$

を最大化することで埋め込みを作成する。

2.2 Wasserstein Distance

Wasserstein Distance とは確率分布同士の距離のことで、提案手法ではこの中でも特に Earth Movers Distance と呼ばれる距離の 1 乗に関する Wasserstein Distance を用いる。

1 次の Wasserstein Distance は最適輸送問題の解と捉えると理解がしやすい。

例えばある町 A に n 個の工場 A_i(ただし k は 1 から n の整数)、町 B に m 個の倉庫 B_j(ただし l は 1 から m の整数) があり、工場 A_i から倉庫 B_j までの距離が d_{ij} ある中、町 A の町 B まで商品を輸送することを考える。この時工場 A_i から倉庫 B_j に運ぶ商品の数を f_{ij} とすると、輸送にかかるコストは

$$\mathcal{W}' = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} d_{ij} f_{ij} \tag{3}$$

と定義することができる。工場 A_i には商品が w_{A_i} 個あり、工場 B_j には商品を w_{B_j} 個運ぶ必要があるという制限の中で $\mathcal{W}'$ を f について最小化し f^* を求め、これを f^* で平均をとると

$$\mathcal{W}_\infty = \frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} d_{ij} f^*_{ij}}{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} f^*_{ij}} \tag{4}$$

となり、これが Wasserstein Distance となる。このように Wasserstein Distance はある集合からある集合へ要素が移動する際の最小コストととらえることができる。

Wasserstein Distance は上記のように集合同士の距離尺度として使用することができ、Word Mover's Distance[5] では文章を単語の集合とみなし word2vec と Wasserstein Distance を併用することで文章の距離を類似度として求めている。さらに Wasserstein Distance を用いた集合間の重心 (Wasserstein Barycenter) を考えることもでき、こちらも 3D モデルのモーフィングなどに用いられている [6]。

3. 提案手法

提案手法では文章集合から word2vec および doc2vec を用いてベクトルを作成し、これらを類似度をもとに双曲空間に埋め込んだ。さらに双曲空間で発見した集合に対し word2vec 及び doc2vec 空間上で Wasserstein Barycenter を求めることで双曲空間に現れる情報の補足および分析を行う。

Poincare Embedding は前述のとおり入力に上位概念下位概念のペアを用いるが、word2vec や doc2vec からこれらを求めることは難しい。よって入力に上位概念下位概念のペアではなく類似度を用いて双曲空間上への埋め込みを行っている [7] を参考に 2 において $\mathcal{D} = \{(uv)\}$ を全ての要素、$\mathcal{N}$ を各 $\mathcal{D}$ に対して v に比べ u に似ていない要素の集合として 2 のように最適化を行うことで word2vec および doc2vec 空間上での類似度から双曲空間の埋め込みを作成した。

また結果を可視化しやすいように埋め込みは 2 次元の双曲線空間上に行ったが、word2vec や doc2vec は数百次元で情報を表現しているため、2 次元の空間に埋め込みを行う際には多大な情報のロスが予測される。したがってこれを観測し、さらに補うために提案手法では Wasserstein Barycenter を用いた。

まず双曲空間内で集合をいくつか見つけ、それらの word2vec、もしくは doc2vec 空間上での Wasserstein Barycenter を求めることで全集合の重心となるような集合を計算する。するとこれは word2vec および doc2vec 空間上で各集合に関わりの深い集合を表しているはずなので、これを双曲空間で改めて可視化することで双曲空間と word2vec 及び doc2vec 空間の対応を観測する。Wasserstein Barycenter を用いた観測に関しては実験結果および考察で詳しく記す。

4. 実験と評価

プレプリントサーバ arXiv にアップロードされた論文のうち機械学習のカテゴリに類する論文のアブストラクトを対象に word2vec と doc2vec のモデルを作成し双曲空間上への埋め込みを行い、その分析を行った。

ここではまず埋め込みの結果とその分析の結果を紹介し、次に Wasserstein Barycenter を用いた結果の分析の結果を紹介する。総じて word2vec を埋め込んだ結果からは明確に階層構造を見て取ることはできなかったが、doc2vec を埋め込んだ結果からは階層構造を比較的よく見て取ることができた。ここでは紙面の都合上 doc2vec の結果のみについて述べる。

4.1 文章の埋め込み

ここでは埋め込みの対象となる文章を全文章から一様分布に従い 200 から 500 個ランダムに選択した場合の埋め込みの結果について記す。

200 個の文章に対するある埋め込みは**図 2** のようになった。

右下の部分を見ると、機械学習で作成した分類器の脆弱性に関する事柄である Adversarial Example や Adversarial Attack[*1]、また逆にこれを見つけることに関する"fake news detection"などの文章が集まっており、かつ外側を見ると"towards adversarial configurations for software product lines"など寄り具体的な適用例が集まっており、ある程度階層構造をなしている様が見て取れる。したがってこのように階層構造をなしている集合に自分の気になる内容を含む論文があった場合中心に近い論文から順番に見て必要に応じて読むことで効率良くその話題の理解を進めることができる。

左端にベイズ統計をもとにした研究に関する論文、上に最適化や次元削減に関する論文が集まるなど、ある程度角度により話題の分布が見て取れたが、単語の場合と同様な理由からかすべての場所で明確な階層構造を見て取れたわけではなかった。一方で単語の場合と違い、複数の分野にまたがっている論文も多いなか一つ点あたりの意味が多くはっきりとしているので考察はこちらのほうが楽であった。

ある程度階層構造をなしていた脆弱性に関する話題を扱った論文群に対して考察を進める。

左下の点に"defense against the dark arts: an overview of adversarial example security research and future research directions"[9] という論文があり、これはほかの階層構造から外れている。一方でこれは IEEE Security and Privacy で行われたレクチャーのまとめであり、タイトルからもわかるように将来の研究の方向性まで含めて 論じており様々な分野にまたがる内容を含んでおり抽象度が高い。またこの論文は近年の機械学習（解くにディープニューラルネット）の進歩をまとめたページが数ページにわたりあり、他の脆弱性に関する話題の

*1 おもに深層学習により学習した分類器が正しく識別できていたデータに、人では知覚できない程のノイズを乗せることで識別を誤らせることができる分類器の脆弱性のこと [8]

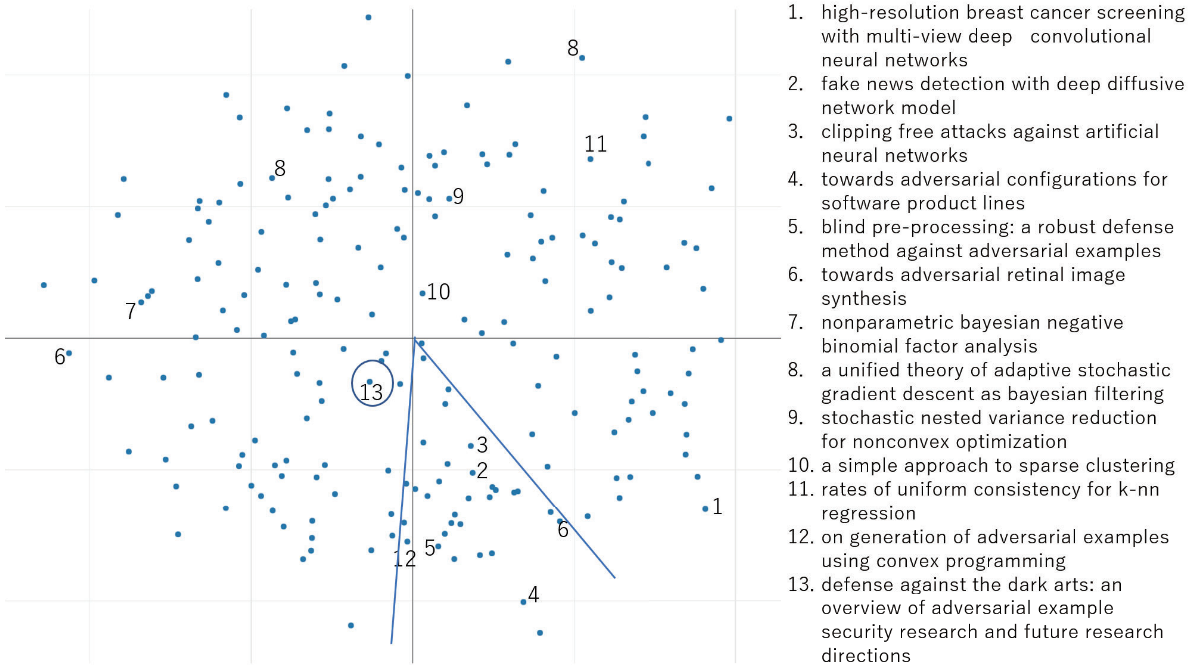

図 2: 200 個の文章に対するポワンカレの円盤モデル上での埋め込み。

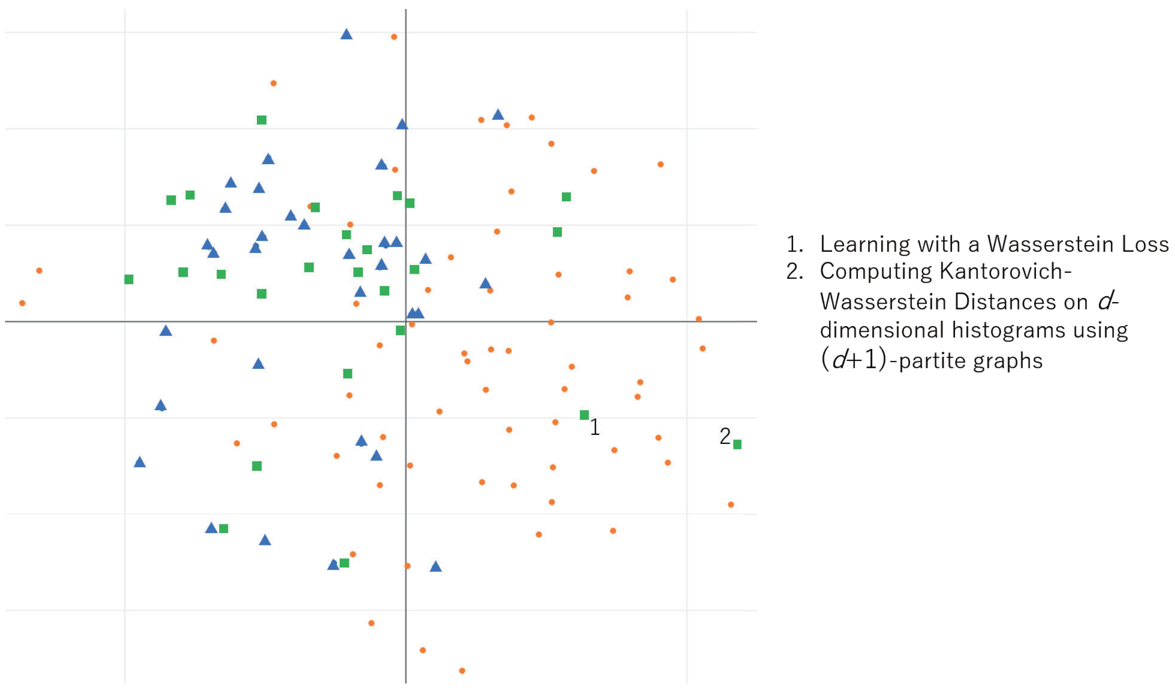

図 3: 三角が gan または generative を Abstract に含む点、丸がその他、四角が barycenter に指定された点を表す。

み扱った論文に比べ中心に来ていることも含めて点の配置は妥当だといえる。

さらにこの点の後ろに gan に関する論文が複数ある。[9] では画像を中心にセキュリティに関して言及しており、gan も効果的に adversarial example を生成する手法として近年認知されたとある。将来のセキュリティーに関する論文として gan との関連度は高いと思われ、階層構造に注目し例外を探しこれに注目することで話題同士の接点を知ることのできる良い例でもあった。

4.2 Wasserstein Barycenter を用いた分析

Wasserstein Barycenter を利用して二つの異なる場所に散布する話題の重心に当たる集合を計算することででも両方の話題と関連が深い点を探すことができ、階層構造からずれた点を探すことに役立つ。

アブストラクトに wasserstein という単語が含まれている論文のみの埋め込みに対し。gan または generative という単語を Abstract に含む文章と含まない文章の集合の Wasserstein Barycenter をとった結果が**図 3** である。緑の点の多くは左上または左下に集中しており、gan や generative といった話題の近くに分布している。一方で点 1 や点 2 と表される論文は gan や generative といった単語を含む点に遠いにも関わらず二つの話題に関連する Barycenter として計算されている。

これは単語での"defense against the dark arts: an overview of adversarial example security research and future research directions" と同様に階層構造の外部に位置する点を見つけたことになる。実際"learning with a wasserstein loss"[10] は Wasserstein Distance を分類器の学習の際のロスとして用いることについて書かれており、2015 年に掲載されているにもかかわらず Wasserstein GAN でのものとよく似た立ち位置で Wasserstein Distance を扱っている。"Computing Kantorovich-Wasserstein Distances on d-dimensional histograms using (d+1)-partite graphs"[11] も中心距離から離れているが multipartite graph(多部グラフ) を用いるというほかの論文ではあまり用いられない手法を用いて特定の条件下で効率よく Wasserstein Distance を計算する手法を紹介している今年の 5 月に掲載された新しい論文で、Wasserstein Distance の計算全体にかかわるものである。このように Barycenter は二つの話題の接点に当たるような点を提示しており、階層構造からずれた点を自動的に探索し話題間のつながりを見つける点を提示するなどして話題間の関係を探り、今後注目すべき話題を探る際に活用することができた。

5. おわりに

双曲空間上での埋め込みにより単語や文章の階層構造をある程度可視化し、また可視化された階層構造をもとに考察を行うことで直感的に話題間の関係などの情報を得ることができた。特に文章の埋め込みだとこれは行いやすく、adversarial examples などの例では実際にその階層構造のずれから話題間の関係を導くことができた。一方で次元の不足などから完全に何らかの基準のもとに階層構造をなしているような可視化は観察することができず、wasserstein という単語を含む文章のみを埋め込むなどして文章の話題の範囲を狭めるなどしないと双曲空間上での明確な話題の分離は見られなかった。Wasserstein Barycenter を用いた分析では話題と話題の接点となる点の探索に用いることができ、階層構造のずれをみつけそこから新たな情報を導くことができた。

提案手法の延長として、他にも w2v や d2v 以外の埋め込みを双曲空間に埋め込んで同じような分析を行うことが考えられる。

参考文献

[1] Blei, David M. and Jordan, Michael I. and Griffiths, Thomas L. and Tenenbaum, Joshua B.: Hierarchical Topic Models and the Nested Chinese Restaurant Process, *Proceedings of the 16th International Conference on Neural Information Processing Systems, pp. 17-24* (2003)

[2] Li, Wei and Mccallum, Andrew: Pachinko allocation: DAG-structured mixture models of topic correlations *Proceedings of the 23rd International Conference on Machine Learning, pp. 577 - 584* (2006)

[3] Krioukov, Dmitri and Papadopoulos, Fragkiskos and Kitsak, Maksim and Vahdat, Amin and Boguñá, Marián, Hyperbolic geometry of complex networks, *Phys. Rev. E 82, pp. 18* (2010)

[4] Nickel, Maximillian and Kiela, Douwe: Poincaré Embeddings for Learning Hierarchical Representations, *Advances in Neural Information Processing Systems 30, pp. 6338 - 6347* (2017)

[5] Matt Kusner and Yu Sun and Nicholas Kolkin and Kilian Weinberger, From Word Embeddings To Document Distances, *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning, pp. 957-966* (2015)

[6] Justin Solomon and Fernando de Goes and Gabriel Peyré and Marco Cuturi and Adrian Butscher and Andy Nguyen and Tao Du and Leonidas J. Guibas, Convolutional wasserstein distances: efficient optimal transportation on geometric domains, *ACM Trans. Graph. vol 34, pp. 66:1 - 66:11* (2015)

[7] Nickel, Maximillian and Kiela, Douwe, Learning Continuous Hierarchies in the Lorentz Model of Hyperbolic Geometry, *Proceedings of Machine Learning Research vol 80, pp. 3779 - 3788* (2018)

[8] Ian Goodfellow, Explaining and Harnessing Adversarial Examples, *arXiv preprint arXiv:1806.04169* (2018)

[9] Ian Goodfellow, Defense Against the Dark Arts: An overview of adversarial example security research and future research directions, *arXiv preprint arXiv:1806.04169* (2018)

[10] Charlie Frogner and Chiyuan Zhang and Hossein Mobahi and Mauricio Araya-Polo and Tomaso A. Poggio, Learning with a Wasserstein Loss, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS) 28,* (2015)

[11] Gennaro Auricchioand Federico Bassettiand Stefano Gualandiand Marco Veneroni, Computing Kantorovich-Wasserstein Distances on d-dimensional histograms using (d+1)-partite graphs, *arXiv preprint arXiv:1805.07416* (2018)