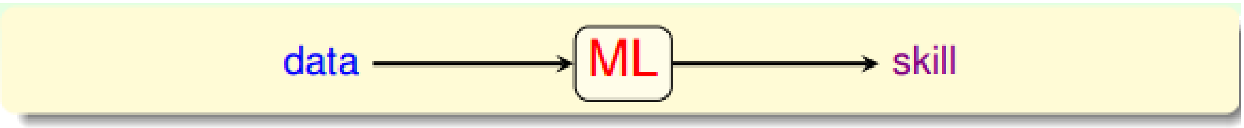
台湾大学林轩田机器学习技法课程学习笔记15 -- Matrix Factorization

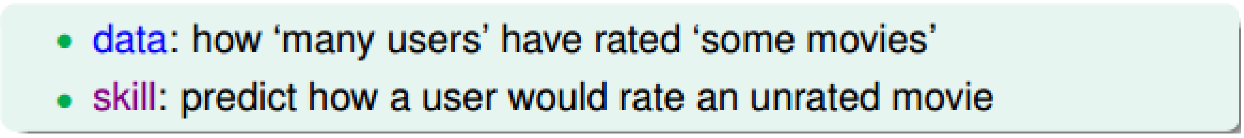
> 作者：红色石头
> 微信公众号：AI有道（ID：redstonewill）

上节课我们主要介绍了Radial Basis Function Network。它的原理就是基于距离相似性（distance-based similarities）的线性组合（linear aggregation）。我们使用k-Means clustering算法找出具有代表性的k个中心点，然后再计算与这些中心点的distance similarity，最后应用到RBF Network中去。

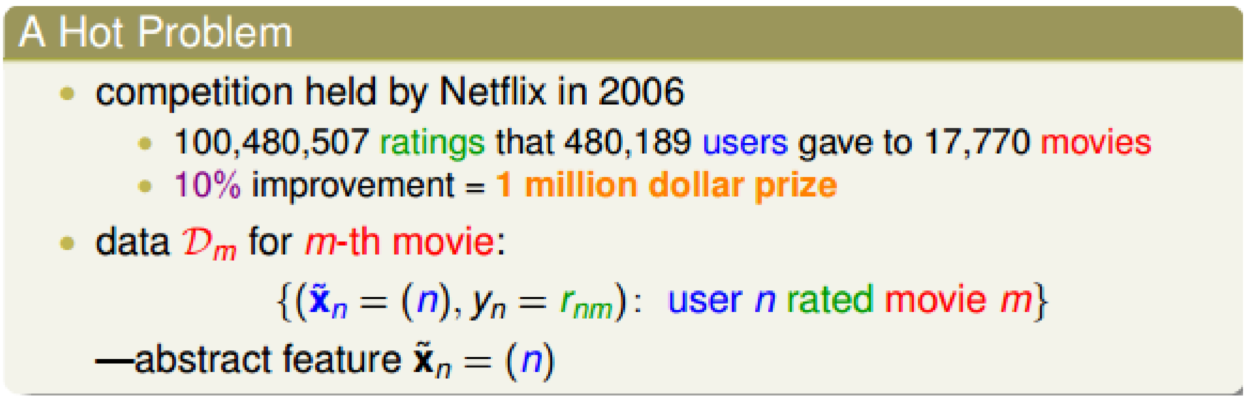
LinearNetwork Hypothesis

回顾一下，我们在机器学习基石课程的第一节课就提到过，机器学习的目的就是让机器从数据data中学习到某种能力skill。我们之前举过一个典型的推荐系统的例子。就是说，假如我们手上有许多不同用户对不同电影的排名rank，通过机器学习，训练一个模型，能够对用户没有看过的某部电影进行排名预测。





一个典型的电影推荐系统的例子是2006年Netflix举办的一次比赛。数据包含了480189个用户和17770部电影，总共1亿多个排名信息。该推荐系统模型中，我们用$\breve{x}_n = (n)$表示第n个用户，这是一个抽象的特征，常常使用数字编号来代替具体哪个用户。输出方面，我们使用$y_m = r_{nm}$表示第n个用户对第m部电影的排名数值。



下面我们来进一步看看这些抽象的特征，$\breve{x}_n = (n)$是用户的ID，通常用数字表示。例如1126,5566,6211等。这些编号并没有数值大小上的意义，只是一种ID标识而已。

这类特征被称为类别特征（categorical features）。常见的categorical features包括：IDs，blood type，programming languages等等。而许多机器学习模型中使用的大部分都是数值特征（numerical features）。例如linear models，NNet模型等。但决策树（decision tree）是个例外，它可以使用categorical features。所以说，如果要建立一个类似推荐系统的机器学习模型，就要把用户ID这种categorical features转换为numerical features。这种特征转换其实就是训练模型之前一个编码（encoding）的过程。

- **categorical** features, e.g.
  - IDs
  - blood type: A, B, AB, O
  - programming languages: C, C++, Java, Python, . . .
- many ML models operate on **numerical** features
  - **linear** models
  - **extended linear** models such as NNet

  —except for **decision trees**
- need: **encoding** (**transform**) from categorical to numerical

一种最简单的encoding方式就是binary vector encoding。也就是说，如果输入样本有N个，就构造一个维度为N的向量。第n个样本对应向量上第n个元素为1，其它元素都是0。下图就是一个binary vector encoding的例子。

binary vector encoding:

$$\mathtt{A} = [1\ 0\ 0\ 0]^T, \mathtt{B} = [0\ 1\ 0\ 0]^T,$$
$$\mathtt{AB} = [0\ 0\ 1\ 0]^T, \mathtt{O} = [0\ 0\ 0\ 1]^T$$

经过encoding之后，输入x_n是N维的binary vector，表示第n个用户。输出y_n是M维的向量，表示该用户对M部电影的排名数值大小。注意，用户不一定对所有M部电影都作过评价，未评价的恰恰是我们要预测的（下图中问号？表示未评价的电影）。

encoded data $\mathcal{D}_m$ for *m*-th movie:

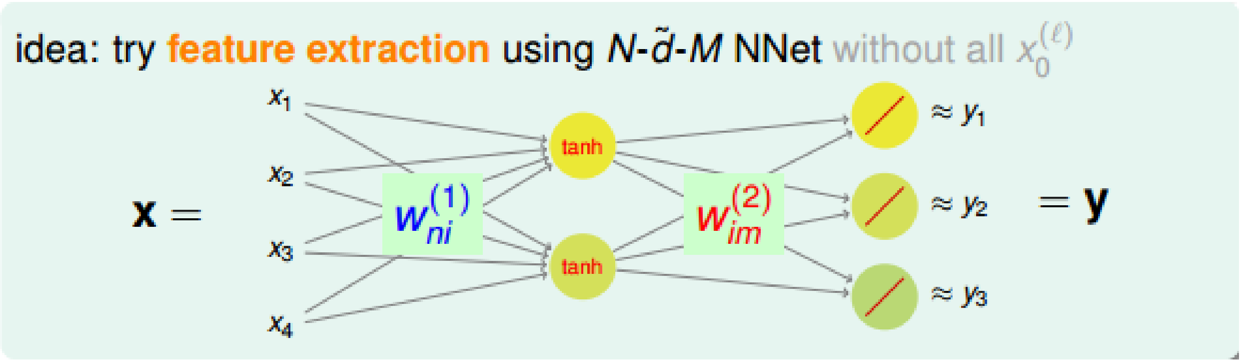
$$\left\{(\mathbf{x}_n = \text{BinaryVectorEncoding}(n), y_n = r_{nm}) : \text{ user } n \text{ rated movie } m\right\}$$

or, joint data $\mathcal{D}$

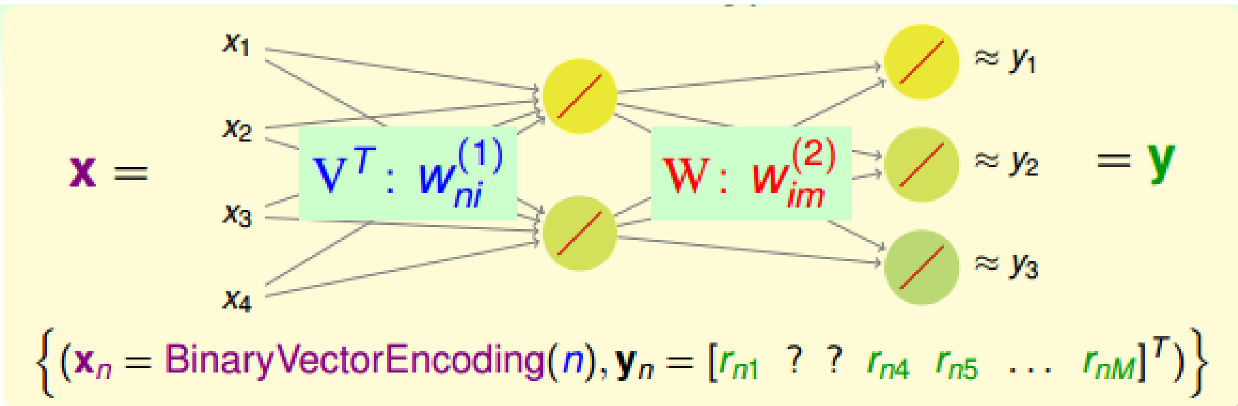
$$\left\{(\mathbf{x}_n = \text{BinaryVectorEncoding}(n), \mathbf{y}_n = [r_{n1}\ \ ?\ \ ?\ \ r_{n4}\ \ r_{n5}\ \ \ldots\ \ r_{nM}]^T)\right\}$$

总共有N个用户，M部电影。对于这样的数据，我们需要掌握每个用户对不同电影的喜爱程度及排名。这其实就是一个特征提取（feature extraction）的过程，提取出每个

用户喜爱的电影风格及每部电影属于哪种风格，从而建立这样的推荐系统模型。可供选择使用的方法和模型很多，这里，我们使用的是NNet模型。NNet模型中的网络结构是$N-\breve{d}-M$型，其中N是输入层样本个数，$\breve{d}$是隐藏层神经元个数，M是输出层电影个数。该NNet为了简化计算，忽略了常数项。当然可以选择加上常数项，得到较复杂一些的模型。顺便提一下，这个结构跟我们之前介绍的autoencoder非常类似，都是只有一个隐藏层。



说到这里，有一个问题，就是上图NNet中隐藏层的tanh函数是否一定需要呢？答案是不需要。因为输入向量x是经过encoding得到的，其中大部分元素为0，只有一个元素为1。那么，只有一个元素x_n与相应权重的乘积进入到隐藏层。由于$x_n=1$，则相当于只有一个权重值进入到tanh函数进行运算。从效果上来说，tanh(x)与x是无差别的，只是单纯经过一个函数的计算，并不影响最终的结果，修改权重值即可得到同样的效果。因此，我们把隐藏层的tanh函数替换成一个线性函数y=x，得到下图所示的结构。



由于中间隐藏层的转换函数是线性的，我们把这种结构称为Linear Network（与linear autoencoder比较相似）。看一下上图这个网络结构，输入层到隐藏层的权重$W_{ni}^{(1)}$维度是Nx$\breve{d}$，用向量V^T表示。隐藏层到输出层的权重$W_{im}^{(2)}$维度是$\breve{d}$xM，用矩阵W表示。把权重由矩阵表示之后，Linear Network的hypothesis 可表示为：

$$h(x)=W^TVx$$

如果是单个用户x_n，由于X向量中只有元素x_n为1，其它均为0，则对应矩阵V只有第n列向量是有效的，其输出hypothesis为：

$$h(x_n) = W^T v_n$$

- rename: V^T for $\left[w_{ni}^{(1)}\right]$ and W for $\left[w_{im}^{(2)}\right]$
- hypothesis: $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathrm{W}^T \mathrm{V}\mathbf{x}$
- per-user output: $\mathbf{h}(\mathbf{x}_n) = \mathrm{W}^T \mathbf{v}_n$, where $\mathbf{v}_n$ is n-th column of V

Basic Matrix Factorization

刚刚我们已经介绍了linear network的模型和hypothesis。其中Vx可以看作是对用户x的一种特征转换$\Phi(x)$。对于单部电影，其预测的排名可表示为：

$$h_m(x) = w_m^T \Phi(x)$$

linear network:

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathrm{W}^T \underbrace{\mathrm{V}\mathbf{x}}_{\mathbf{\Phi}(\mathbf{x})}$$

—for m-th movie, just linear model $h_m(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_m^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{x})$ subject to shared transform $\mathbf{\Phi}$

推导完linear network模型之后，对于每组样本数据（即第n个用户第m部电影），我们希望预测的排名$w_m^T v_n$与实际样本排名y_n尽可能接近。所有样本综合起来，我们使用squared error measure的方式来定义E_{in}，E_{in}的表达式如下所示：

- for every $\mathcal{D}_m$, want $r_{nm} = y_n \approx \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n$
- E_{in} over all $\mathcal{D}_m$ with squared error measure:

$$E_{\text{in}}(\{\mathbf{w}_m\}, \{\mathbf{v}_n\}) = \frac{1}{\sum_{m=1}^{M} |\mathcal{D}_m|} \sum_{\text{user } n \text{ rated movie } m} \left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2$$

上式中，灰色的部分是常数，并不影响最小化求解，所以可以忽略。接下来，我们就要求出E_{in}最小化时对应的V和W解。

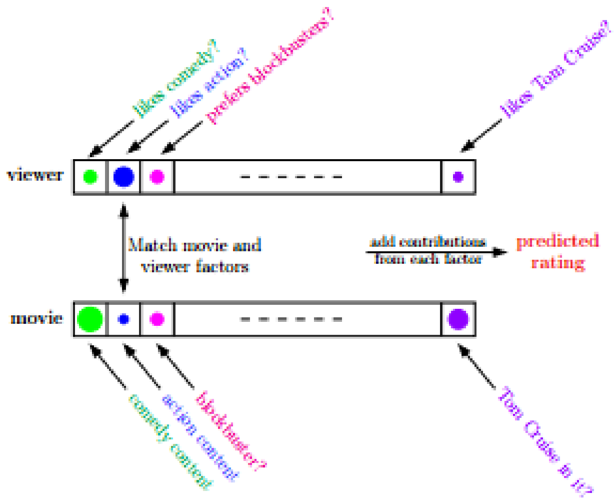
我们的目标是让真实排名与预测排名尽可能一致，即$r_{nm} \approx w_m^T v_n = v_n^T w_m$。把这种近似关系写成矩阵的形式：$R \approx V^T W$。矩阵R表示所有不同用户不同电影的排名情况，维度是NxM。这种用矩阵的方式进行处理的方法叫做Matrix Factorization。

$$r_{nm} \approx \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n = \mathbf{v}_n^T \mathbf{w}_m \Longleftrightarrow \mathrm{R} \approx \mathrm{V}^T \mathrm{W}$$

R	movie_1	movie_2	⋯	movie_M
user_1	100	80	⋯	?
user_2	?	70	⋯	90
⋯	⋯	⋯	⋯	⋯
user_N	?	60	⋯	0

$$\approx \quad \mathrm{V}^T = \begin{bmatrix} -\mathbf{v}_1^T- \\ -\mathbf{v}_2^T- \\ \cdots \\ -\mathbf{v}_N^T- \end{bmatrix} \quad \mathrm{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 & \cdots & \mathbf{w}_M \end{bmatrix}$$

上面的表格说明了我们希望将实际排名情况R分解成两个矩阵（V和W）的乘积形式。V的维度是$\breve{d}$xN的，N是用户个数，$\breve{d}$可以是影片类型，例如（喜剧片，爱情片，悬疑片，动作片，...）。根据用户喜欢的类型不同，赋予不同的权重。W的维度是$\breve{d}$xM，M是电影数目，$\breve{d}$同样是影片类型，该部电影属于哪一类型就在那个类型上占比较大的权重。当然，$\breve{d}$维特征不一定就是影片类型，还可以是其它特征，例如明显阵容、年代等等。



Matrix Factorization Model

learning:

known rating

→ learned factors $\mathbf{v}_n$ and $\mathbf{w}_m$

→ unknown rating prediction

similar modeling can be used for other abstract features

那么，Matrix Factorization的目标就是最小化E_{in}函数。E_{in}表达式如下所示：

$$\begin{aligned}\min_{\mathrm{W},\mathrm{V}} E_{\text{in}}(\{\mathbf{w}_m\},\{\mathbf{v}_n\}) &\propto \sum_{\text{user } n \text{ rated movie } m} \left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2 \\ &= \sum_{m=1}^{M} \left(\sum_{(\mathbf{x}_n, r_{nm}) \in \mathcal{D}_m} \left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2 \right)\end{aligned}$$

E_{in}中包含了两组待优化的参数，分别是v_n和w_m。我们可以借鉴上节课中k-Means的做法，将其中第一个参数固定，优化第二个参数，然后再固定第二个参数，优化第一个参数，一步一步进行优化。

当v_n固定的时候，只需要对每部电影做linear regression即可，优化得到每部电影的$\breve{d}$维特征值w_m。

当w_m固定的时候，因为V和W结构上是对称的，同样只需要对每个用户做linear regression即可，优化得到每个用户对$\tilde{d}$维电影特征的喜爱程度v_n。

- two sets of variables:
  can consider **alternating minimization, remember? :-)**
- when $\mathbf{v}_n$ fixed, minimizing $\mathbf{w}_m \equiv$ minimize E_{in} within $\mathcal{D}_m$
  —simply per-movie (per-$\mathcal{D}_m$) **linear regression** without w_0
- when $\mathbf{w}_m$ fixed, minimizing $\mathbf{v}_n$?
  —per-user linear regression without v_0

  by **symmetry** between users/movies

这种算法叫做alternating least squares algorithm。它的处理思想与k-Means算法相同，其算法流程图如下所示：

Alternating Least Squares

1. initialize $\tilde{d}$ dimension vectors $\{\mathbf{w}_m\}, \{\mathbf{v}_n\}$
2. **alternating optimization** of E_{in}: repeatedly
   1. optimize $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_M$:
      update $\mathbf{w}_m$ by m-th-movie linear regression on $\{(\mathbf{v}_n, r_{nm})\}$
   2. optimize $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_N$:
      update $\mathbf{v}_n$ by n-th-user linear regression on $\{(\mathbf{w}_m, r_{nm})\}$

   until **converge**

alternating least squares algorithm有两点需要注意。第一是initialize问题，通常会随机选取v_n和w_m。第二是converge问题，由于每次迭代更新都能减小E_{in}，E_{in}会趋向于0，则保证了算法的收敛性。

- **initialize**: usually just **randomly**
- **converge**:
  guaranteed as E_{in} **decreases** during alternating minimization

在上面的分析中，我们提过Matrix Factorization与Linear Autoencoder的相似性，下图列出了二者之间的比较。

Linear Autoencoder	Matrix Factorization
$\mathrm{X} \approx \mathrm{W}\left(\mathrm{W}^T \mathrm{X}\right)$	$\mathrm{R} \approx \mathrm{V}^T \mathrm{W}$
• motivation: special d-$\tilde{d}$-d linear NNet	• motivation: N-$\tilde{d}$-M linear NNet
• error measure: squared on all x_{ni}	• error measure: squared on known r_{nm}
• solution: global optimal at eigenvectors of $\mathrm{X}^T\mathrm{X}$	• solution: local optimal via alternating least squares
• usefulness: extract dimension-reduced features	• usefulness: extract hidden user/movie features

Matrix Factorization与Linear Autoencoder有很强的相似性，都可以从原始资料汇总提取有用的特征。其实，linear autoencoder可以看成是matrix factorization的一种特殊形式。

Stochastic Gradient Descent

我们刚刚介绍了alternating least squares algorithm来解决Matrix Factorization的问题。这部分我们将讨论使用Stochastic Gradient Descent方法来进行求解。之前的alternating least squares algorithm中，我们考虑了所有用户、所有电影。现在使用SGD，随机选取一笔资料，然后只在与这笔资料有关的error function上使用梯度下降算法。使用SGD的好处是每次迭代只要处理一笔资料，效率很高；而且程序简单，容易实现；最后，很容易扩展到其它的error function来实现。

$$E_{\text{in}}(\{\mathbf{w}_m\}, \{\mathbf{v}_n\}) \propto \sum_{\text{user } n \text{ rated movie } m} \underbrace{\left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2}_{\text{err(user } n, \text{ movie } m, \text{ rating } r_{nm})}$$

SGD: randomly pick one example within the $\sum$ &
update with gradient to per-example err, remember? :-)

- ‘efficient’ per iteration
- simple to implement
- easily extends to other err

对于每笔资料，它的error function可表示为：

$$\text{err(user } n, \text{ movie } m, \text{ rating } r_{nm}) = \left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2$$

上式中的err是squared error function，仅与第n个用户v_n，第m部电影w_m有关。其对v_n和w_m的偏微分结果为：

$$\nabla v_n = -2(r_{nm} - w_m^T v_n)w_m$$

$$\nabla w_m = -2(r_{nm} - w_m^T v_n)v_n$$

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{v}_{1126}} \quad & \mathrm{err}(\text{user } n, \text{ movie } m, \text{rating } r_{nm}) = \mathbf{0} \text{ unless } n = 1126 \\
\nabla_{\mathbf{w}_{6211}} \quad & \mathrm{err}(\text{user } n, \text{ movie } m, \text{rating } r_{nm}) = \mathbf{0} \text{ unless } m = 6211 \\
\nabla_{\mathbf{v}_n} \quad & \mathrm{err}(\text{user } n, \text{ movie } m, \text{rating } r_{nm}) = -2\left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)\mathbf{w}_m \\
\nabla_{\mathbf{w}_m} \quad & \mathrm{err}(\text{user } n, \text{ movie } m, \text{rating } r_{nm}) = -2\left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)\mathbf{v}_n
\end{aligned}$$

很明显，∇v_n和∇w_m都由两项乘积构成。（忽略常数因子2）。第一项都是$r_{nm} - w_m^T v_n$，即余数residual。我们在之前介绍的GBDT算法中也介绍过余数这个概念。∇v_n的第二项是w_m，而∇w_m的第二项是v_n。二者在结构上是对称的。

计算完任意一个样本点的SGD后，就可以构建Matrix Factorization的算法流程。SGD for Matrix Factorization的算法流程如下所示：

SGD for Matrix Factorization

initialize $\tilde{d}$ dimension vectors $\{\mathbf{w}_m\}, \{\mathbf{v}_n\}$ **randomly**

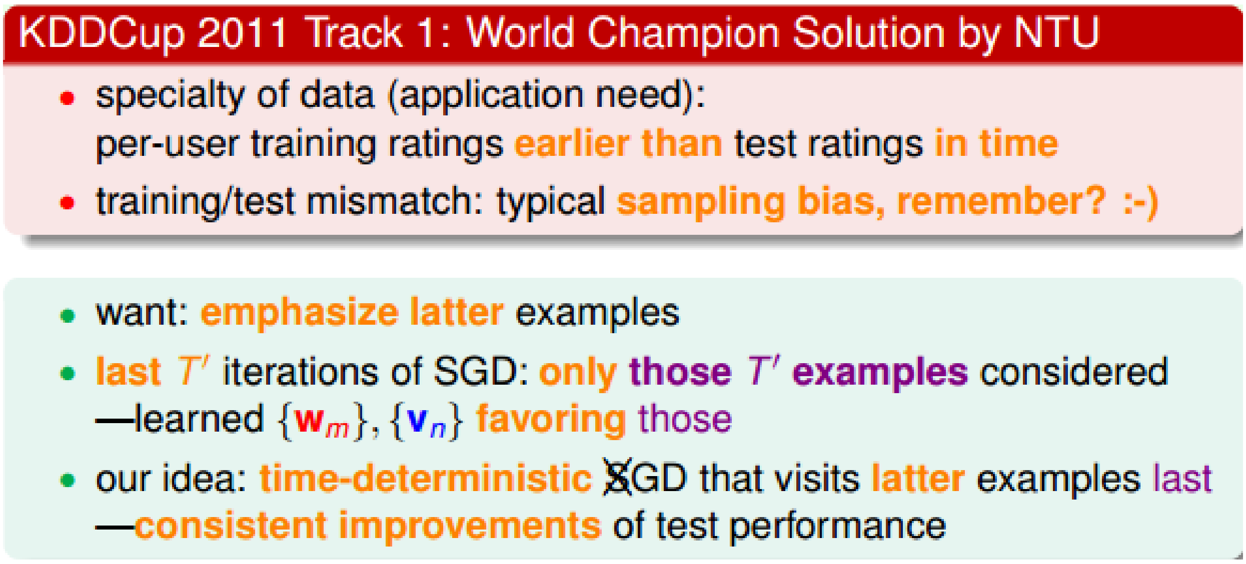
for $t = 0, 1, \ldots, T$

1. randomly pick (n, m) within all known r_{nm}
2. calculate residual $\tilde{r}_{nm} = (r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n)$
3. SGD-update:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_n^{new} &\leftarrow \mathbf{v}_n^{old} + \eta \cdot \tilde{r}_{nm} \mathbf{w}_m^{old} \\
\mathbf{w}_m^{new} &\leftarrow \mathbf{w}_m^{old} + \eta \cdot \tilde{r}_{nm} \mathbf{v}_n^{old}
\end{aligned}$$

在实际应用中，由于SGD算法简单高效，Matrix Factorization大多采用这种算法。

介绍完SGD for Matrix Factorization之后，我们来看一个实际的应用例子。问题大致是这样的：根据现在有的样本资料，预测未来的趋势和结果。显然，这是一个与时间先后有关的预测模型。比如说一个用户三年前喜欢的电影可能现在就不喜欢了。所以在使用SGD选取样本点的时候有一个技巧，就是最后T次迭代，尽量选择时间上靠后的样本放入到SGD算法中。这样最后的模型受这些时间上靠后的样本点影响比较大，也相对来说比较准确，对未来的预测会比较准。

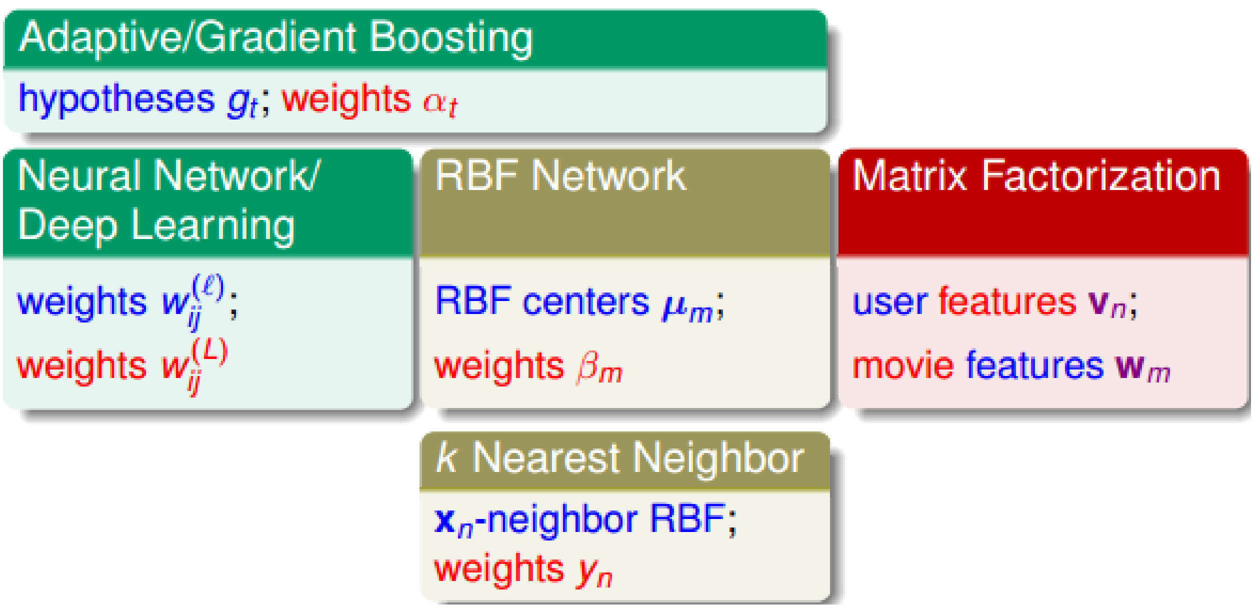


所以，在实际应用中，我们除了使用常规的机器学习算法外，还需要根据样本数据和问题的实际情况来修改我们的算法，让模型更加切合实际，更加准确。我们要学会灵活运用各种机器学习算法，而不能只是照搬。

Summary of Extraction Models

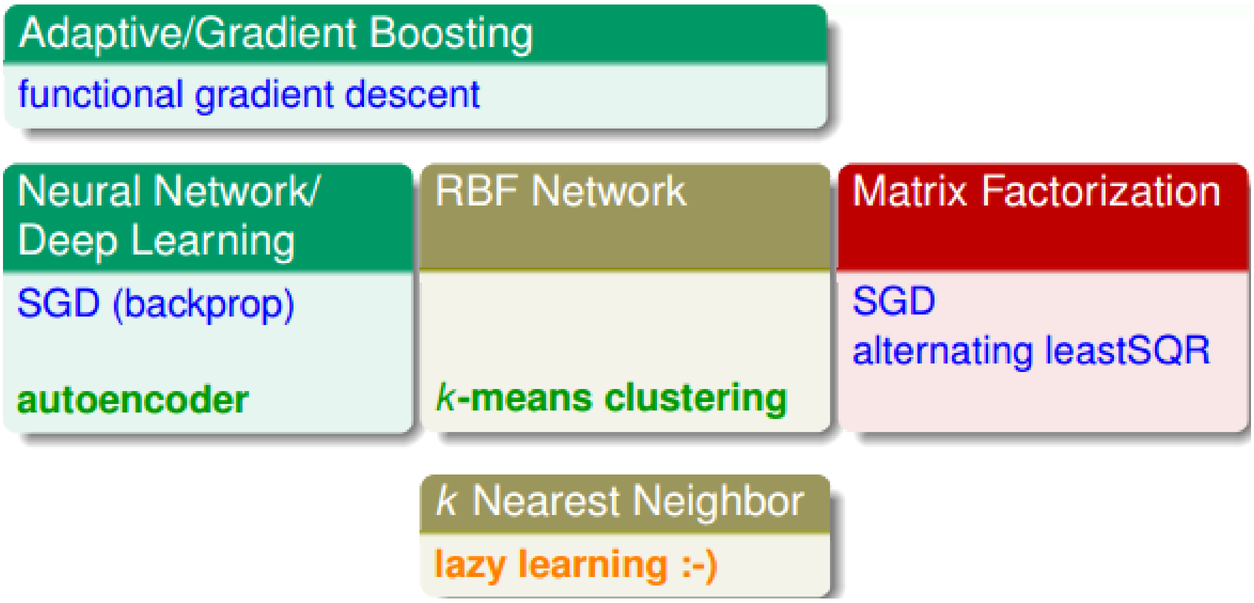
从第12节课开始到现在，我们总共用了四节课的时间来介绍Extraction Models。虽然我们没有给出Extraction Models明确的定义，但是它主要的功能就是特征提取和特征转换，将原始数据更好地用隐藏层的一些节点表征出来，最后使用线性模型将所有节点aggregation。这种方法使我们能够更清晰地抓住数据的本质，从而建立最佳的机器学习模型。

下图所示的就是我们介绍过的所有Extraction Models，除了这四节课讲的内容之外，还包括之前介绍的Adaptive/Gradient Boosting模型。因为之前笔记中都详细介绍过，这里就不再一一总结了。



除了各种Extraction Models之外，我们这四节课还介绍了不同的Extraction

Techniques。下图所示的是对应于不同的Extraction Models的Extraction Techniques。



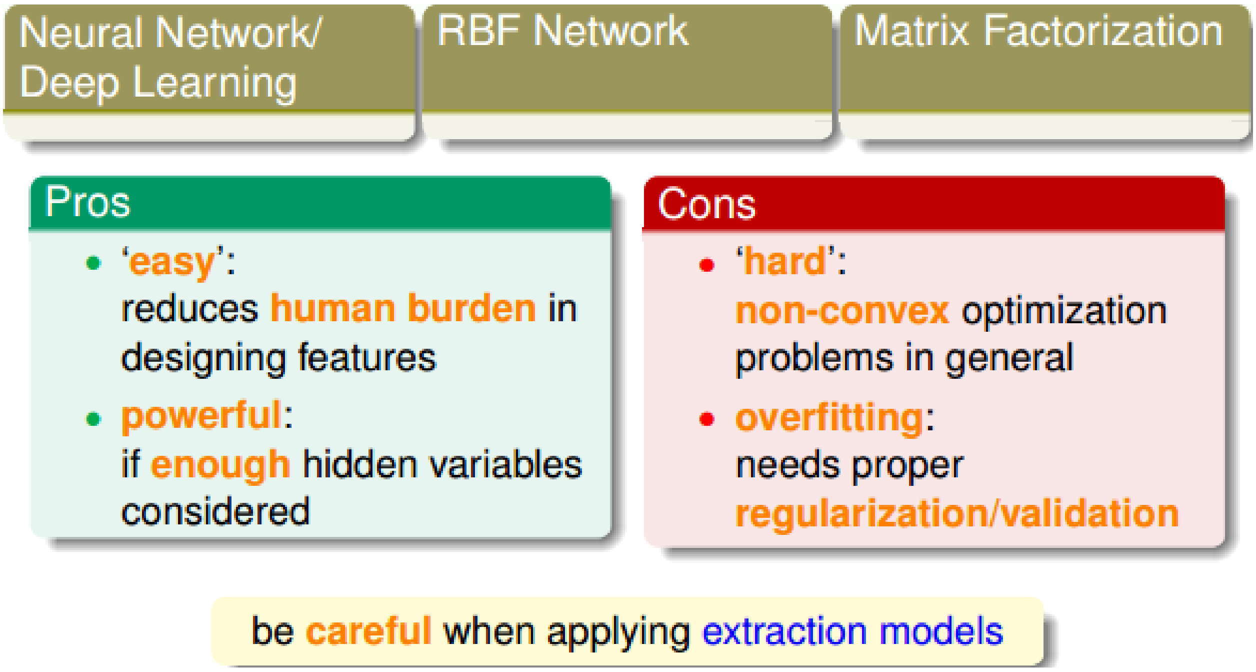
最后，总结一下这些Extraction Models有什么样的优点和缺点。从优点上来说：

- **easy：机器自己完成特征提取，减少人类工作量**
- **powerful：能够处理非常复杂的问题和特征提取**

另一方面，从缺点上来说：

- **hard：通常遇到non-convex的优化问题，求解较困难，容易得到局部最优解而非全局最优解**
- **overfitting：模型复杂，容易造成过拟合，需要进行正则化处理**

所以说，Extraction Models是一个非常强大的机器学习工具，但是使用的时候也要小心处理各种可能存在的问题。



总结

本节课主要介绍了Matrix Factorization。从电影推荐系统模型出发，首先，我们介绍了Linear Network。它从用户ID编码后的向量中提取出有用的特征，这是典型的feature extraction。然后，我们介绍了基本的Matrix Factorization算法，即alternating least squares，不断地在用户和电影之间交互地做linear regression进行优化。为了简化计算，提高运算速度，也可以使用SGD来实现。事实证明，SGD更加高效和简单。同时，我们可以根据具体的问题和需求，对固有算法进行一些简单的调整，来获得更好的效果。最后，我们对已经介绍的所有Extraction Models做个简单的总结。Extraction Models在实际应用中是个非常强大的工具，但是也要避免出现过拟合等问题。

注明：

文章中所有的图片均来自台湾大学林轩田《机器学习技法》课程