Lecture 15: Matrix Factorization

> 课件链接：Hsuan-Tien Lin - matrix factorization
>
> **Matrix Factorization(矩阵分解)**
>
> - Linear Network Hypothesis：线性网络形式的假说
> - Basic Matrix Factorization：基本矩阵分解
> - Stochastic Gradient Descent：随机梯度下降
> - Summary of Extraction Models：萃取模型的总结

1. Linear Network Hypothesis：线性网络形式的假说

假设我们需要构建一套针对用户的电影**推荐系统**。我们所拥有的数据是一些用户对一些电影的打分，我们希望这个推荐系统具有的能力是：预测某个用户对一个没有看过的电影的评分。

对第m个电影来说的数据集$\mathcal{D}_m$为：n表示用户的index，m表示电影的index

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

可见，数据中的输入特征就是一个简单的编号，例如：1126,5566,6211等。这种ID类型的特征，被称为**抽象的特征(abstract feature)**，因为其内在的含义往往不是那么明显。同时，由于某个人不一定看过所有部电影，且某部电影不一定被所有人看过，因此r_{nm}可能有一部分是缺失的。

对分类特征(categorical feature)进行二元向量编码(binary vector encoding)

一些常见的分类特征有：

- ID：1126，5566，6211......
- 血型：A，B，AB，O
- 程序语言：Java，C，C++，Python......

目前所学的大多数模型都是在**数值特征**上操作的，除了决策树(RF，GBDT)可以直接处理分类特征。因此，需要将分类特征编码以转换为数值特征——encoding——其中，**binary vector encoding**最常用。例如，对于血型进行编码：

- $A = [1\ 0\ 0\ 0]^T$
- $B = [0\ 1\ 0\ 0]^T$
- $AB = [0\ 0\ 1\ 0]^T$
- $O = [0\ 0\ 0\ 1]^T$

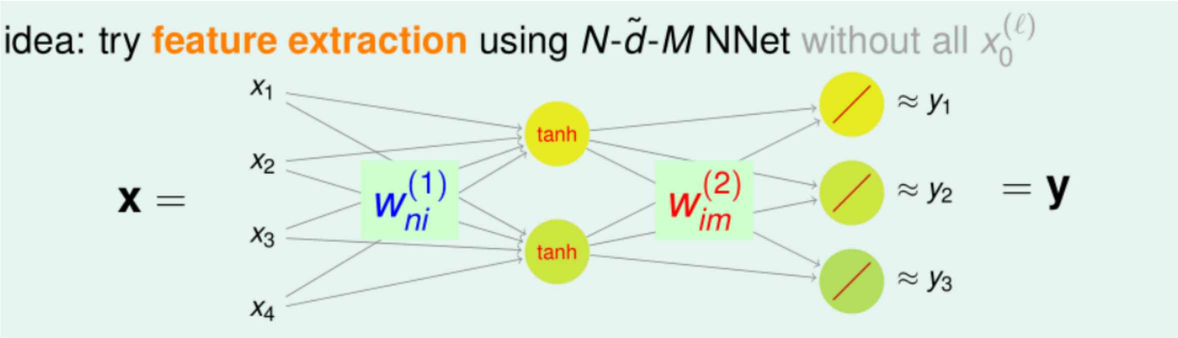
经过编码后，数据集变为：

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

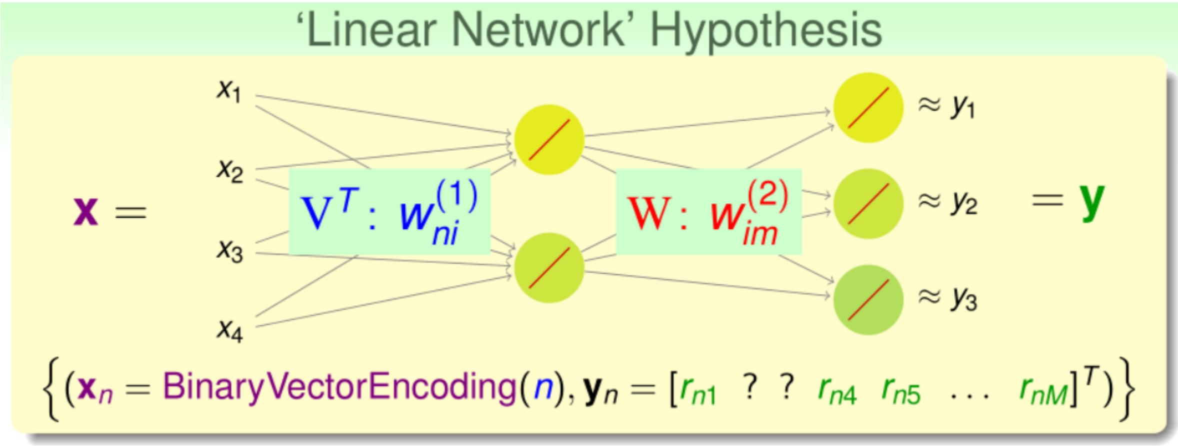
将所有电影的资料整合起来，$\mathcal{D}$：

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

使用神经网络进行特征萃取



其中，$\mathbf{x}$是表示某个用户的稀疏向量，只有一个位置是1，其余是0；$\mathbf{y}$是该用户对于所有M个电影的评分向量，**中间层就是萃取出的特征**。由于输入向量中只有一个位置是1，因此可以忽略中间层的tanh变换：



重命名权重矩阵：

- 第一层的所有权重：$\left[w_{ni}^{(1)}\right] = \mathbf{V}^T$，$\mathbf{V}^T$是$N \times \tilde{d}$
- 第二层的所有权重：$\left[w_{im}^{(2)}\right] = \mathbf{W}$，$\mathbf{W}$是$\tilde{d} \times M$

Hypothesis：

$$h(\mathbf{x}) = \mathbf{W}^T\mathbf{V}\mathbf{x}$$

对某一个用户，其输出为：

$$h(\mathbf{x}_n) = \mathbf{W}^T\mathbf{V}\mathbf{x}_n = \mathbf{W}^T\mathbf{v}_n$$

其中$\mathbf{v}_n$是矩阵$\mathbf{V}$的第n列。

接下来，就是学习$\mathbf{V}$与$\mathbf{W}$。

2. Basic Matrix Factorization：基本矩阵分解

对第m部电影，线性模型为(取输出的第m个分量)：

$$h_m(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_m^T\mathbf{V}\mathbf{x} = \mathbf{w}_m^T\Phi(\mathbf{x})$$

可以看到，所有的电影模型共用一个转换Φ，将抽象的特征x转换成具体的描述。其中，$\Phi(\mathbf{x}_n) = \mathbf{v}_n$。对于所有$D_m$(第m个电影来说的数据集)，我们希望：

$$r_{nm} = y_n \approx \mathbf{w}_m^T\mathbf{v}_n$$

将求解模型转换为最佳化E_{in}的问题：

$$E_{in}(\{\mathbf{w}_m\},\{\mathbf{v}_n\}) = constant \cdot \sum_{user\ n\ rated\ movie\ m} \left(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n\right)^2$$

解决上述最佳化问题，等价于通过最上面非常简单的两层线性网络，同时学到了两个东西：

- transform：$\mathbf{V}$
- linear models：$\mathbf{W}$

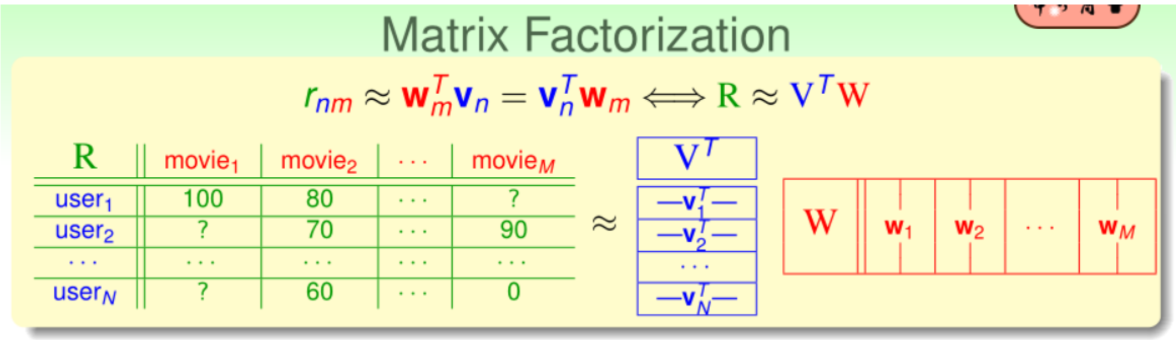
矩阵分解(Matrix Factorization)

$$r_{nm} \approx \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n = \mathbf{v}_n^T \mathbf{w}_m$$

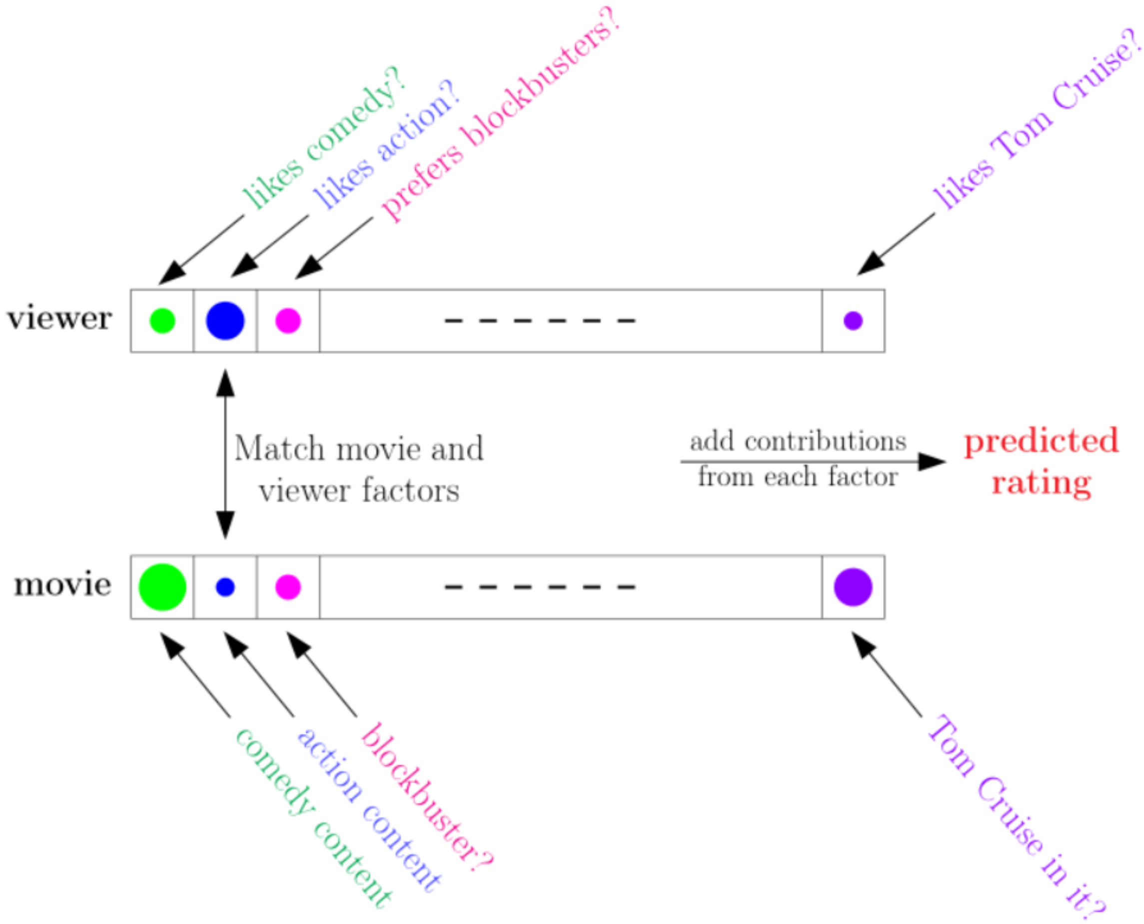
也就是：

$$\mathbf{R} \approx \mathbf{V}^T \mathbf{W}$$

如下图：



从一些已经知道的某些用户对某些电影的评分(known rating)出发，学习一些factors——$\mathbf{v}_n$和$\mathbf{w}_m$，最后能够用他们来做预测：



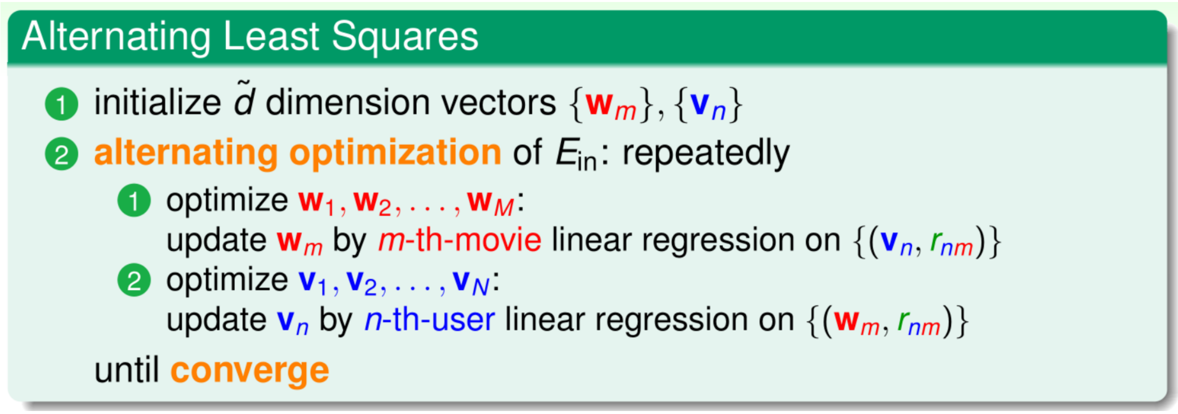
现在，需要解决的最优化问题是：

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{V}} E_{in}(\{\mathbf{w}_m\},\{\mathbf{v}_n\}) = \sum_{m=1}^{M}\Big(\sum_{(\mathbf{x}_n,r_{nm})\in\mathcal{D}_m}(r_{nm}-\mathbf{w}_m^T\mathbf{v}_n)^2\Big)$$

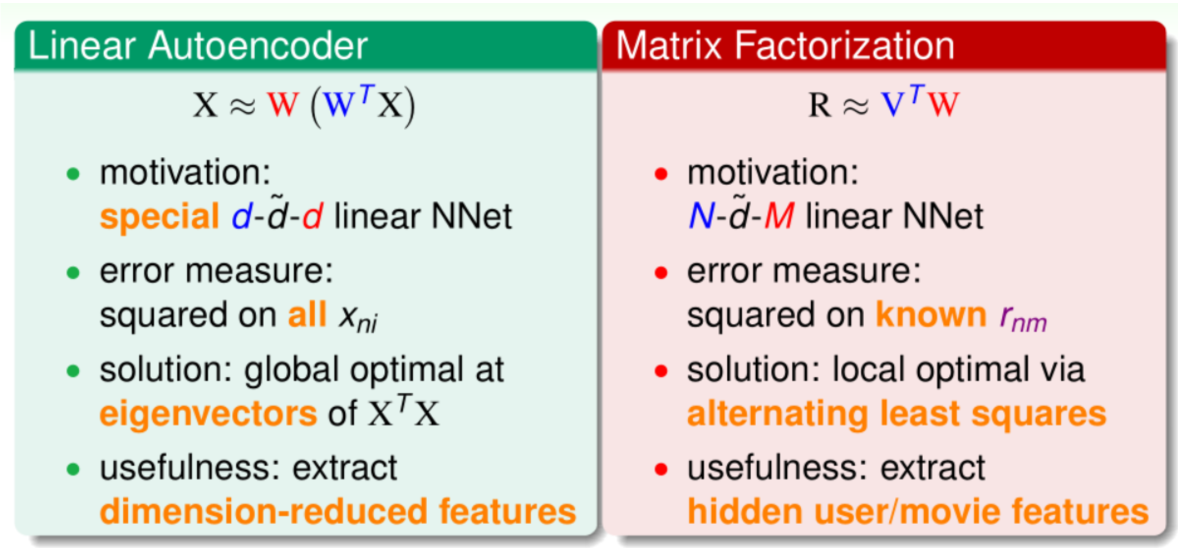
上述最优化问题有两组变量——alternating minimization：

- 当$\mathbf{v}_n$固定，最小化$\mathbf{w}_m$，等价于在电影m的数据集$\mathcal{D}_m$上最小化E_{in}——per-movie linear regression without w_0；
- 当$\mathbf{w}_m$固定，最小化$\mathbf{v}_n$，等价于在用户m的数据集$\mathcal{D}_n$上最小化E_{in}——per-user linear regression without v_0——对称的。

该算法被称为**alternating least squares**：



与矩阵分解类似的是线性自编码器：前者常用于降维，后者常用于抽取隐藏的特征：



3. Stochastic Gradient Descent：随机梯度下降

除了使用ALS算法，我们还可以考虑使用SGD解决下面的最优化问题。

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{V}} E_{in}(\{\mathbf{w}_m\},\{\mathbf{v}_n\}) = \sum_{m=1}^{M}\Big(\sum_{(\mathbf{x}_n,r_{nm})\in\mathcal{D}_m}(r_{nm}-\mathbf{w}_m^T\mathbf{v}_n)^2\Big)$$

SGD：随机选择一个样本，然后用该样本错误衡量err的梯度来更新参数，迭代至收敛。优点是：

- 有效率；
- 易执行；
- 可以轻易地扩展到其他的err。

对某一笔资料的错误衡量：

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

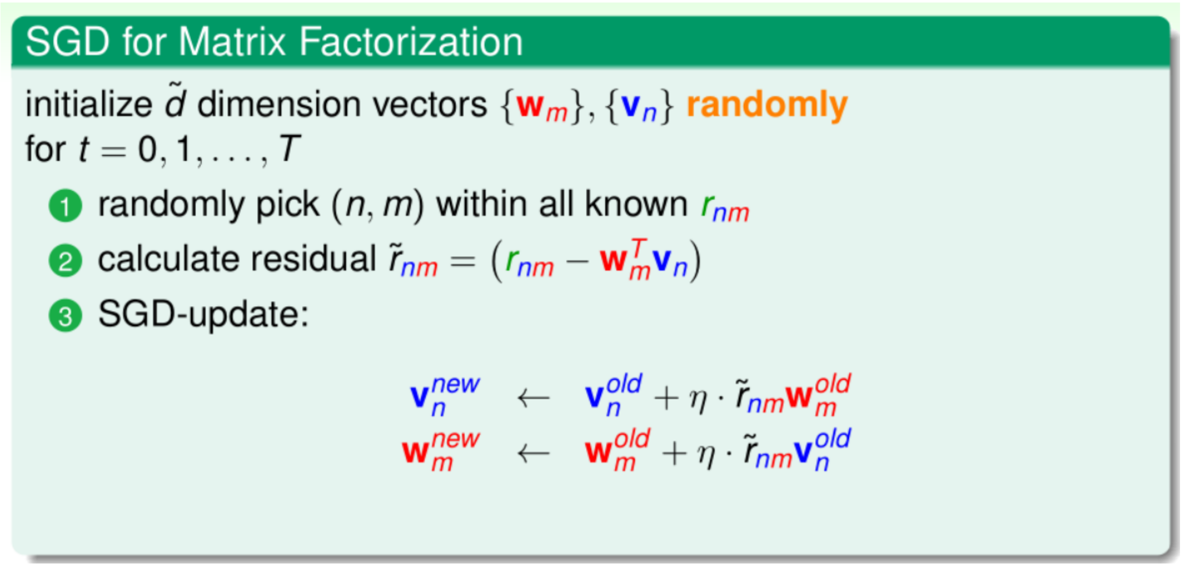
对所有的变数做偏微分，求得梯度，然后更新：变数是$\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_N$，$\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \cdots, \mathbf{w}_M$

- $\nabla_{\mathbf{v}_n} err = -2(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n)\mathbf{w}_m$
- $\nabla_{\mathbf{w}_m} err = -2(r_{nm} - \mathbf{w}_m^T \mathbf{v}_n)\mathbf{v}_n$
- 其他的向量不用更新，因为梯度是0。

又可以把要更新的两个向量的梯度写成：

$$-(residual)(the\ other\ feature\ vector)$$

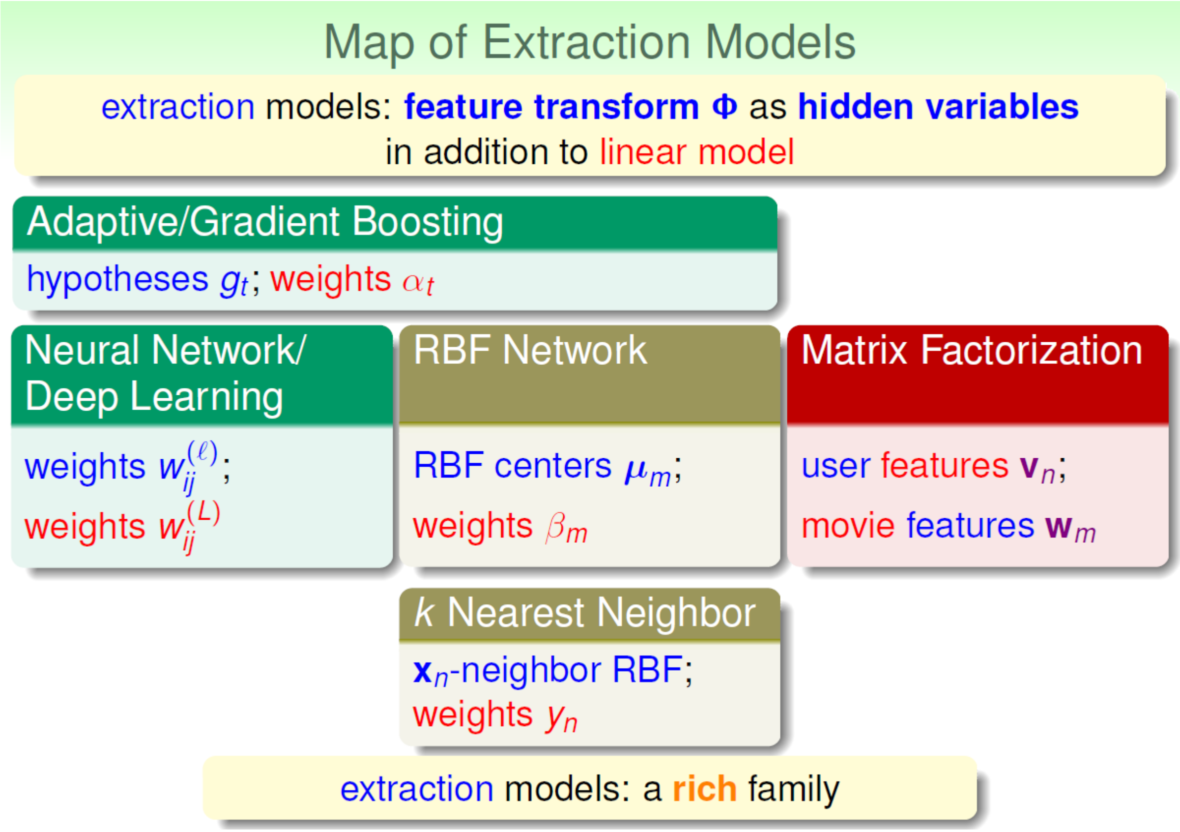
综上，矩阵分解SGD算法为：



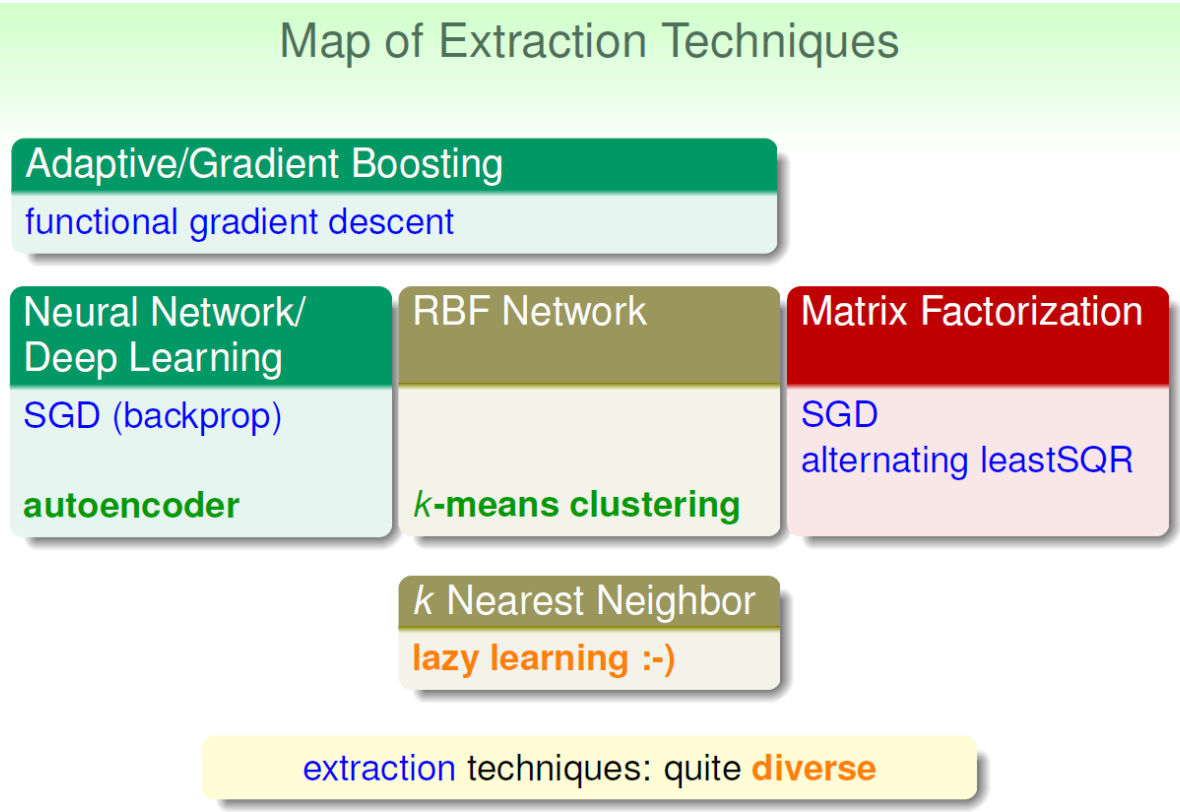
适用于大数据。

4. Summary of Extraction Models：萃取模型的总结

Extraction Models：能够自动萃取特征的模型，结构一般是：先进行特征转换，最后进行一步线性模型的操作。也就是说，这样的模型将特征转换纳入到学习的范围之内，自动进行特征萃取。



在训练Extraction Models时用到的一些技巧：



5. Summary

- 推荐系统具有两类对象。第一，用户；第二，电影(推荐商品)。因此，我们可以构建这样一个矩阵，该矩阵每一行表示某一个用户对于所有电影的评分情况，每一列表示某一部电影被所有用户的评分情况。我们拿到的训练数据集是该矩阵的一部分。我们需要我们的推荐系统能够"填空"，即根据训练数据预测某用户对于一部没有看过的电影的评分。
- 在这种情形中，我们的特征只有一个，就是用户id，或者说是用户的index。该特征为分类变量，而对于分类变量我们往往将其编码为独热变量，这种编码叫做binary vector encoding。

- 受到神经网络自动学习特征的启发，我们可以借助神经网络进行特征萃取，以获取更有意义、更加具体的特征。我们使用的神经网络结构是$N-\tilde{d}-M$。神经网络的输入是某用户index的独热编码向量，输出是该用户对于所有电影的评分。
- 神经网络第一层的权重矩阵记作V^T，第二层的权重矩阵记作W。因此有hypothesis：$h(\mathbf{x})=W^TV\mathbf{x}$。因此，用户n对于电影m的评分可以写作$\mathbf{w_m}^T\mathbf{v_n}$，也就是$\mathbf{v_n}^T\mathbf{w_m}$。我们希望，在训练数据上有$r_{nm}\approx\mathbf{v_n}^T\mathbf{w_m}$。这也可以看做是，将"大矩阵"R分解为两个矩阵$\mathbf{V}^T$与$\mathbf{W}$的乘积，因此叫做矩阵分解。对应的最优化问题如下：

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{V}} E_{in}(\{\mathbf{w}_m\},\{\mathbf{v}_n\})=\sum_{m=1}^{M}\Big(\sum_{(\mathbf{x}_n,r_{nm})\in\mathcal{D}_m}(r_{nm}-\mathbf{w}_m^T\mathbf{v}_n)^2\Big)$$

- 解决上述最优化问题有两种方法：
  - ALS：交替最小二乘法；
  - SGD：随机梯度下降。