# Матричные разложения

#### Авторы:

Гринберг Петр Пантелеев Даниил Тряпицын Александр

• QR-разложение

$$A=QR,\;A,\;Q\in\mathbb{C}^{m imes m},\;R\in\mathbb{C}^{m imes n},\;Q^*Q=I,\;R:\uparrow\triangle$$

• QR-разложение

$$A=QR,\;A,\;Q\in\mathbb{C}^{m imes m},\;R\in\mathbb{C}^{m imes n},\;Q^*Q=I,\;R:\uparrow\triangle$$

• Thin QR:

$$A=egin{pmatrix} Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} egin{pmatrix} R_1 \ 0 \end{pmatrix} = Q_1 R_1$$

• QR-разложение

$$A=QR,\;A,\;Q\in\mathbb{C}^{m imes m},\;R\in\mathbb{C}^{m imes n},\;Q^*Q=I,\;R:\uparrow\triangle$$

• Thin QR:

$$A=egin{pmatrix} Q_1 & Q_2 \end{pmatrix} egin{pmatrix} R_1 \ 0 \end{pmatrix} = Q_1 R_1$$

import numpy as np
np.linalg.qr(A)

• Грамм-Шмидт (долго)

- Грамм-Шмидт (долго)
- ullet Матрицы Хаусхолдера:  $H(v) = 1 vv^*, \|v\|_2 = 1$

$$orall a,b\in\mathbb{C}^n, \|a\|_2=\|b\|_2, \exists \gamma\in\mathbb{C}: |\gamma|=1, v\in\mathbb{C}^n: \|v\|_2=1\Rightarrow H(v)a=\gamma b$$

Зануляем элементы под главной диагональю:

$$H_1H_2...H_nA=R$$

# QR-разложение: зачем надо?

# QR-разложение: зачем надо?

• Ортопроекторы – не нужно считать обратные:

$$A(A^TA)^{-1}A^T = QR(R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^T = QRR^{-1}R^{-T}R^TQ^T = QQ^T$$

# QR-разложение: зачем надо?

• Ортопроекторы – не нужно считать обратные:

$$A(A^TA)^{-1}A^T = QR(R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^T = QRR^{-1}R^{-T}R^TQ^T = QQ^T$$

• Используется в ALS, в алгоритмах для поиска SVD, NMF и др.

$$A=USV^*, U^*U=I=V^*V, S= ext{diag}(\sigma_1,...,\sigma_n)$$
  $\sigma_1\geq ... \geq \sigma_r>0, \sigma_{r+1}=...=\sigma_n=0$ 

• SVD-разложение

$$A=USV^*, U^*U=I=V^*V, S= ext{diag}(\sigma_1,...,\sigma_n)$$
  $\sigma_1\geq ...\geq \sigma_r>0, \sigma_{r+1}=...=\sigma_n=0$ 

ullet Thin SVD: обрезается до  $k=\min(m,n)$ 

$$A=USV^*, U^*U=I=V^*V, S= ext{diag}(\sigma_1,...,\sigma_n)$$
  $\sigma_1\geq ...\geq \sigma_r>0, \sigma_{r+1}=...=\sigma_n=0$ 

- ullet Thin SVD: обрезается до  $k=\min(m,n)$
- ullet Compact SVD: обрезается до  $r=\mathrm{rk}(A)$

$$A=USV^*, U^*U=I=V^*V, S= ext{diag}(\sigma_1,...,\sigma_n)$$
  $\sigma_1\geq ...\geq \sigma_r>0, \sigma_{r+1}=...=\sigma_n=0$ 

- ullet Thin SVD: обрезается до  $k=\min(m,n)$
- ullet Compact SVD: обрезается до  $r=\mathrm{rk}(A)$
- ullet Truncated SVD: обрезается до заданного t

$$A=USV^*, U^*U=I=V^*V, S= ext{diag}(\sigma_1,...,\sigma_n)$$
 $\sigma_1\geq ...\geq \sigma_r>0, \sigma_{r+1}=...=\sigma_n=0$ 

- ullet Thin SVD: обрезается до  $k=\min(m,n)$
- ullet Compact SVD: обрезается до  $r=\mathrm{rk}(A)$
- ullet Truncated SVD: обрезается до заданного t

# **SVD**-разложение: важное свойство

# **SVD**-разложение: важное свойство

#### Теорема (Эккарт-Янг):

Пусть  $k < \operatorname{rk}(A) = r$  и  $A_k$  - truncated SVD с t = k. Тогда:

$$\min_{B: \ \mathrm{rk}(\mathrm{B}) \leq k} \|A - B\| = \|A - A_k\|$$

Где || || - любая инвариантная норма.

Столбцы V и числа  $\sigma_i^2$  являются соб. векторами и соб. знач.  $A^TA$ 

Столбцы V и числа  $\sigma_i^2$  являются соб. векторами и соб. знач.  $A^TA$ 

1. Задача сводится к поиску с.в. и с.з. у  $A^T A, AA^T, \begin{pmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix}$ 

Столбцы V и числа  $\sigma_i^2$  являются соб. векторами и соб. знач.  $A^TA$ 

- 1. Задача сводится к поиску с.в. и с.з. у  $A^T A, AA^T, \begin{pmatrix} 0 & A^T \ A & 0 \end{pmatrix}$
- 2. Приводим A к бидиагональной (B)

$$PAQ=B$$
, где  $P=H_1,...H_k, Q=H_1^\prime,...,H_{k^\prime}^\prime$ 

Столбцы V и числа  $\sigma_i^2$  являются соб. векторами и соб. знач.  $A^TA$ 

- 1. Задача сводится к поиску с.в. и с.з. у  $A^T A, AA^T, \begin{pmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix}$
- 2. Приводим A к бидиагональной (B)

$$PAQ=B$$
, где  $P=H_1,...H_k, Q=H_1^\prime,...,H_{k^\prime}^\prime$ 

3. QR-алгоритм для T=C, где C - одна из матриц в п.1 с B

# NMF (Non-negative matrix factorization)

# NMF (Non-negative matrix factorization)

Пусть  $V \in \mathbb{R}^{m imes n}$  такова, что  $v_{ij} \geq 0$ . Тогда NMF это W, H:

$$W,H=\mathop{
m argmin}\limits_{W\in\mathbb{R}^{m imes r},H\in\mathbb{R}^{r imes n}}\|V-WH\|$$
 где  $w_{ij}\geq 0, h_{ij}\geq 0$ 

Выбор нормы зависит от постановки задачи. r - желаемый ранг

# NMF (Non-negative matrix factorization)

Пусть  $V \in \mathbb{R}^{m imes n}$  такова, что  $v_{ij} \geq 0$ . Тогда NMF это W, H:

$$W,H=\mathop{
m argmin}\limits_{W\in\mathbb{R}^{m imes r},H\in\mathbb{R}^{r imes n}}\|V-WH\|$$
 где  $w_{ij}\geq 0, h_{ij}\geq 0$ 

Выбор нормы зависит от постановки задачи. r - желаемый ранг

```
from sklearn.decomposition import NMF
model = NMF(n_components=r)
W = model.fit_transform(V)
H = model.components_
```

• Неитерационный алгоритм: NP-полная задача

- Неитерационный алгоритм: NP-полная задача
- Итерационный алгоритм:

$$W_0, H_0 = {
m init}{
m WH}(), \qquad W_{k+1} = f(W_k, H_k, V), \qquad H_{k+1} = f(W_{k+1}, H_k, V)$$

Обычно используются различные варианты ALS алгоритма

- Неитерационный алгоритм: NP-полная задача
- Итерационный алгоритм:

$$W_0, H_0 = {
m init}{
m WH}(), \qquad W_{k+1} = f(W_k, H_k, V), \qquad H_{k+1} = f(W_{k+1}, H_k, V)$$

Обычно используются различные варианты ALS алгоритма

Для инициализации:

1. Первые r столбцов V в W , H - случайная

- Неитерационный алгоритм: NP-полная задача
- Итерационный алгоритм:

$$W_0, H_0 = {
m init}{
m WH}(), \qquad W_{k+1} = f(W_k, H_k, V), \qquad H_{k+1} = f(W_{k+1}, H_k, V)$$

Обычно используются различные варианты ALS алгоритма

Для инициализации:

- 1. Первые r столбцов V в W, H случайная
- 2. g(A),g(B) для A,B из  $V\sim ASB^T$  truncated SVD с t=r

• LU-разложение:

$$A = LU$$

Где L - унинижнетреугольная, U - верхнетреугольная

• LU-разложение:

$$A = LU$$

Где L - унинижнетреугольная, U - верхнетреугольная

ullet LDL:  $A=LDL^*$  для  $A=A^*$ 

• LU-разложение:

$$A = LU$$

Где L - унинижнетреугольная, U - верхнетреугольная

- ullet LDL:  $A=LDL^*$  для  $A=A^*$
- ullet Холецкого:  $A=LL^*$ , L нижнетреугольная для  $A=A^*>0$

#### LU-разложение

• LU-разложение:

$$A = LU$$

Где L - унинижнетреугольная, U - верхнетреугольная

- ullet LDL:  $A=LDL^*$  для  $A=A^*$
- ullet Холецкого:  $A=LL^*$ , L нижнетреугольная для  $A=A^*>0$

```
from scipy.linalg import lu
P, L, U = lu(A)
```

## LU-разложение: как считать и зачем?

## LU-разложение: как считать и зачем?

• Как считать:

По очереди Гаусс для каждого столбца

$$Z_n...Z_1A=U$$

## LU-разложение: как считать и зачем?

• Как считать:

По очереди Гаусс для каждого столбца

$$Z_n...Z_1A=U$$

• Зачем:

Хотим решить  $Ax=b\Leftrightarrow$  умножить b на  $A^{-1}$ 

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b$$

$$Ly = b, Ux = y$$

## Применения в Машинном Обучении

#### Имеем:

набор данных большой размерности

#### Имеем:

набор данных большой размерности

#### Хотим:

уменьшить число признаков, сохранив как можно больше информации

• Чтобы избежать переобучения

• Чтобы избежать переобучения

• Можно сильно уменьшить размер матрицы данных

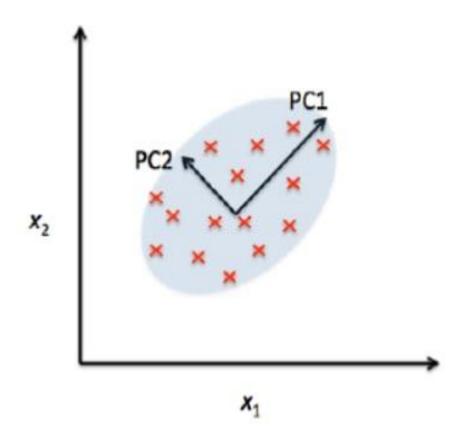
• Чтобы избежать переобучения

• Можно сильно уменьшить размер матрицы данных

• В некоторых задачах помогает избавиться от шумов

#### Основная идея:

Перенаправим оси признаков так, чтобы их разброс был виднее



#### Шаг 1: Стандартизация

1. Вычитаем из каждого признака среднее по нему

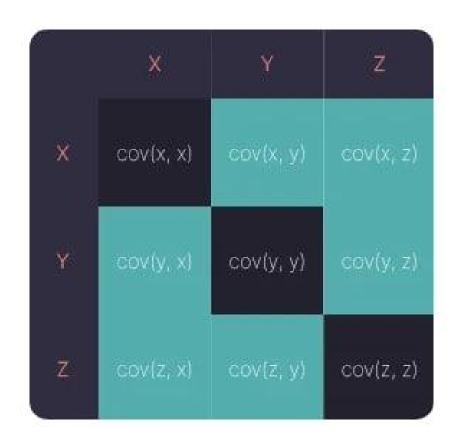
2. Делим каждый признак на RMSD

RMSD = 
$$\sqrt{rac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-ar{x})^2}{n}}=\sqrt{MSE(x)}$$

## **Шаг 2: Матрица** ковариаций

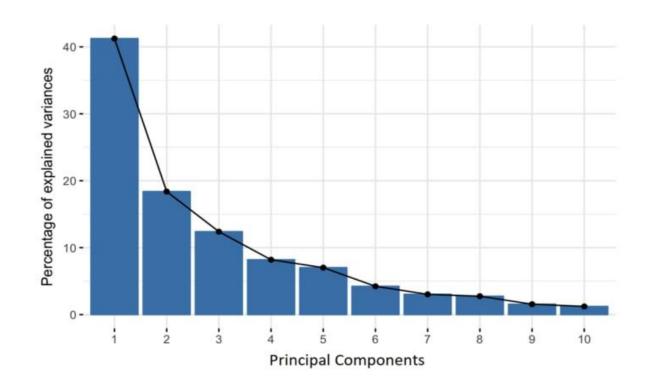
$$var(x)=rac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-ar{x})^2}{n}$$

$$cov(x,y) = rac{\sum (x_i - ar{x})(y_i - ar{y})}{n}$$



#### Шаг 3: Собственные векторы

- 1. Считаем собственные векторы матрицы ковариаций
- 2. Сортируем их по убыванию собственных значений



#### Шаг 4: Матрица признаков

1. Выбираем t главных компонент, которые дают нужное приближение

2. Записываем их по столбцам, получаем матрицу признаков

#### Шаг 5: Результат

А - Стандартизированная исходная матрица данных

F - Матрица признаков

А' - Новая матрица данных

$$\underbrace{\mathbf{A'}}_{m \times t} = \underbrace{\mathbf{A}}_{m \times n} \times \underbrace{\mathbf{F}}_{n \times t}$$

## При чем тут матричные разложения?

# При чем тут матричные разложения?

**Ответ**: при поиске главных компонент ищется SVD от матрицы данных

С - матрица ковариации

$$A = U imes S imes V^T$$

В матрице  $S^2$  собственные значения С В матрице  $V^T$  собственные векторы С

#### Не стоит использовать, если:

- 1. В данных почти нет корреляции
- 2. Есть классы, зависимые от каких-то признаков
- 3. Нормализация данных невозможна
- 4. Важна интерпретируемость

#### В остальных случаях:

## LSA (Latent Semantic Analysis)

#### LSA (Latent Semantic Analysis)

#### Имеем:

матрица term-document

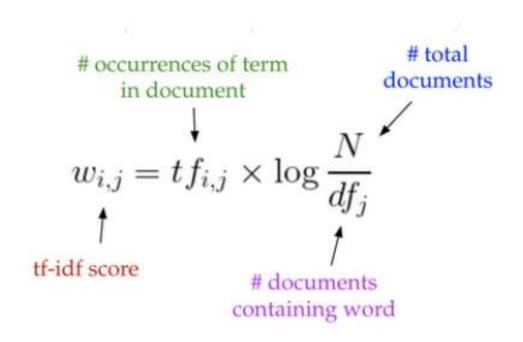
#### term-document

• Обычно слова на тексты

• Внутри ячеек частоты использования в тексте

• Часто в ячейках tf-idf

## tf-idf



Большие веса имеют термы, часто встречающиеся в одном тексте, но редко среди всех текстов

### LSA (Latent Semantic Analysis)

#### Имеем:

матрица term-document

#### Хотим:

избавиться от шумов, разреженности

• Считать зависимости для пар term-term

• Считать зависимости для пар term-document

• Считать зависимости для пар document-document

#### Основная идея:

Найдем SVD и обрежем часть сингулярных чисел в матрице S, чтобы убрать часть зависимостей

$$A' = U_t \begin{vmatrix} \sigma_1 \\ V_t^T \end{vmatrix}$$

$$Approx U_t imes S_t imes V_t^T$$

#### Какое взять t?

• Подбирается эмпирически

• Для маленьких А обычно 5-10%

• Для больших А до 1-2%, иногда меньше

### LSA (Latent Semantic Analysis)

По сути весь алгоритм заключается в нахождении Truncated SVD

from sklearn.decomposition import TruncatedSVD

На практике обычно используются 2 дополнения этого алгоритма:

- pLSA (Probabilistic LSA) вероятностный подход к LSA
- LDA (Latent Dirichlet Allocation) тот же вероятностный подход, но на основе распределения Дирихле

#### NMF in Topic Modelling

#### Имеем:

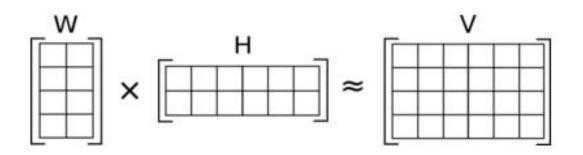
матрица term-document

#### Хотим:

Уменьшить веса менее значимых слов в наборе данных

#### Основная идея:

Посчитать NMF-разложение



В матрице H эмбеддинги, в матрице W семантические связи термов с текстами

W: распределение текстов (вертикаль) по темам (горизонталь)

Н: распределение тем (вертикаль) по словам (горизонталь)

#### NMF in Topic Modelling

Весь алгоритм по сути это нахождение NMF-разложения

from sklearn.decomposition import NMF

Есть 2 вида встроенных алгоритмов оптимизации:

- Coordinate Decent Solver ('cd')
- Multiplicative Update Solver ('mu')

# BOIPOCH?

## Матричные разложения

Рекомендательные системы

Источник части картиночек: https://www.youtube.com/watch?v=ZspR5PZemcs



## Постановка задачи

#### Дано:

- Множество пользователей
- Множество фильмов
- R<sub>mu</sub> Ratings оценка фильма m пользователем u. В этой матрицы могут быть пропуски.

#### Хочется:

Для каждого пользователя в выдавать k наиболее интересных ему фильмов. По смыслу — заполнять пропуски в R.

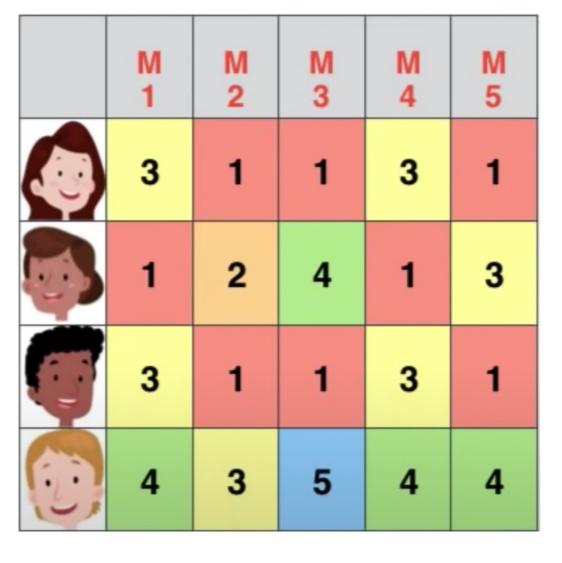












#### Подходы к задаче

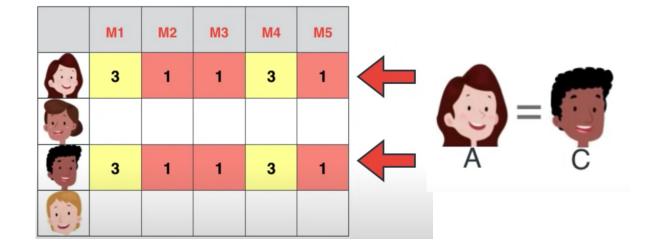
• Контентная фильтрация — рекомендуем пользователю, основываясь на контенте фильмов

M1 M2 M3 M4 M5

3 3 1 1 1 3 3 4 4 4



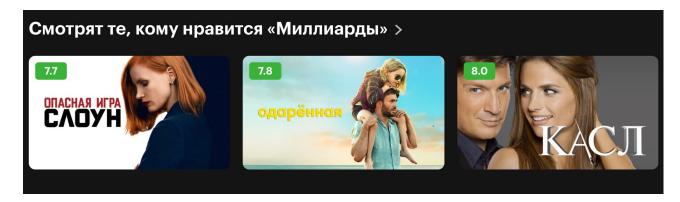
• Коллаборативная фильтрация – рекомендуем пользователю, основываясь на статистике

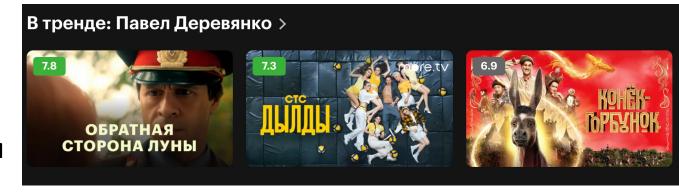


### Наивная интуиция

- 1. Для каждого фильма находим k ближайших (наиболее похожих) фильмов
- 2. Для пользователя берем последний понравившийся ему фильм X (тут может быть много разных эвристик)
- 3. Берем k ближайший к фильму X и называем рубрику «потому что вы смотрели X»

Можно делать и по актерам, если придумать как агрегировать оценку для актера по оценкам фильмов





## Наивная реализация

• Для каждого фильма находим k ближайших фильмов по евклидовым расстояниям между соответствующими столбцами оценок:

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$

• По косинусным расстояниям:

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}}$$

• По коэффициенту корреляции Пирсона:

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 (y_i - \bar{y})^2}}$$

Curse of dimensionality – при большом количестве пользователей (размерности пространства векторов оценок) – евклидовы расстояния распределены плотно

Не учитываются различия в пользователях — есть оптимисты, есть пессимисты

Не посчитаешь в рантайме – большое число пользователей. О(|М||U|)
 Для предпосчета требуется огромные вычислительные ресурсы. О(|М|²|U|)

#### Наивная реализация

#### Все еще остаются проблемы:

- 1. Вычислительная сложность:
  - рантайм O(|M||U|)
  - предподсчет O(|M|<sup>2</sup>|U|)
- 2. Новые фильмы не будут иметь оценок, пока их не посмотрят много пользователей рекомендации по этому фильму будут плохими, а сам фильм почти не будем рекомендовать
- 3. Популярные фильмы будем рекомендовать чаще (по сути противоположность предыдущему пункту)
- 4. Нет рекомендаций для новых пользователей
- 5. Выглядит хиленько, никаких связей фильмов друг с другом и пользователей друг с другой не учитываем

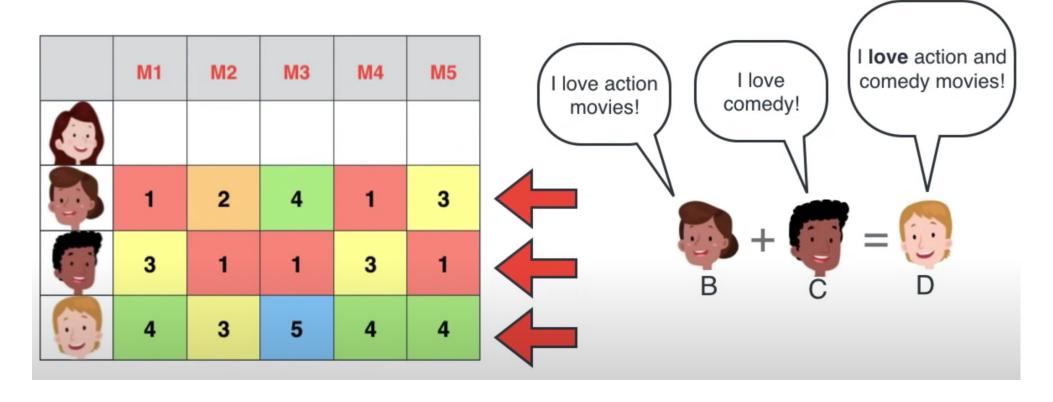
#### Наивная реализация еще

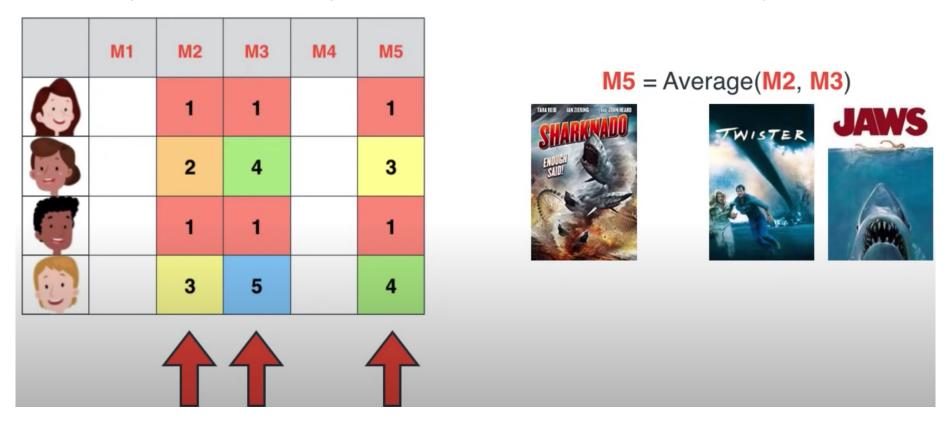
Есть еще ряд наивных реализаций со схожим списком проблем

- Выбрать сначала сколько-то наиболее похожих пользователей, а потом взять топ по оценкам из их фильмов
- Выбрать несколько самых оцененных пользователем фильмов, а потом взять топ по оценкам из похожих на них фильмов
- Выбрать несколько самых оцененных пользователем фильмов, а потом взять топ по произведению оценок и похожести из похожих на них фильмов

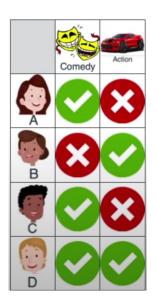
• ...

- Матрица R наверняка разреженная каждый пользователь посмотрел не слишком много фильмов
- Хорошо бы разложить R ≈ U @ M [Rating = User @ Movie], где ограничить ширину U (высоту M). Что делать с пропусками?
- U по строкам пользователи, по столбцами "свойство фильма" (комедия, драма, ...), значение насколько свойство нравится пользователю
- М по строкам "свойства фильмов", по столбцам насколько свойство описывает фильм



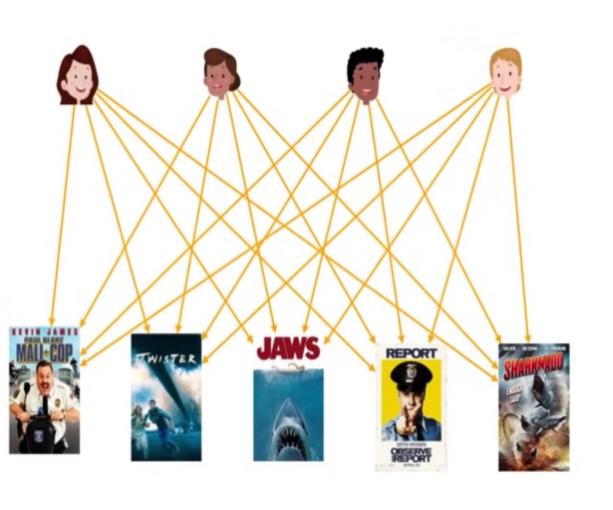


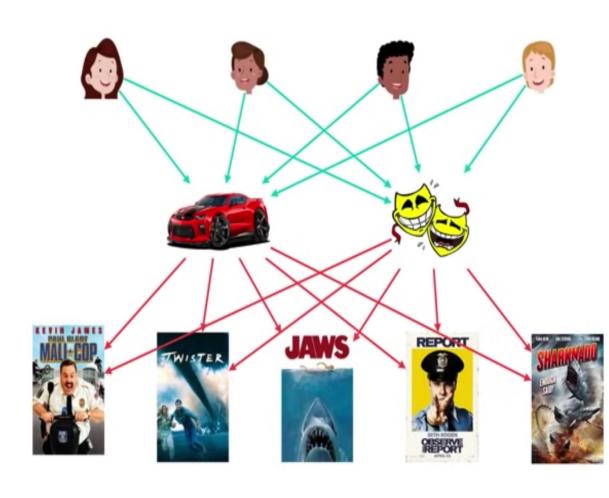
	M1	M2	МЗ	M4	M5
Comedy	3	1	1	3	1
Action	1	2	4	1	3



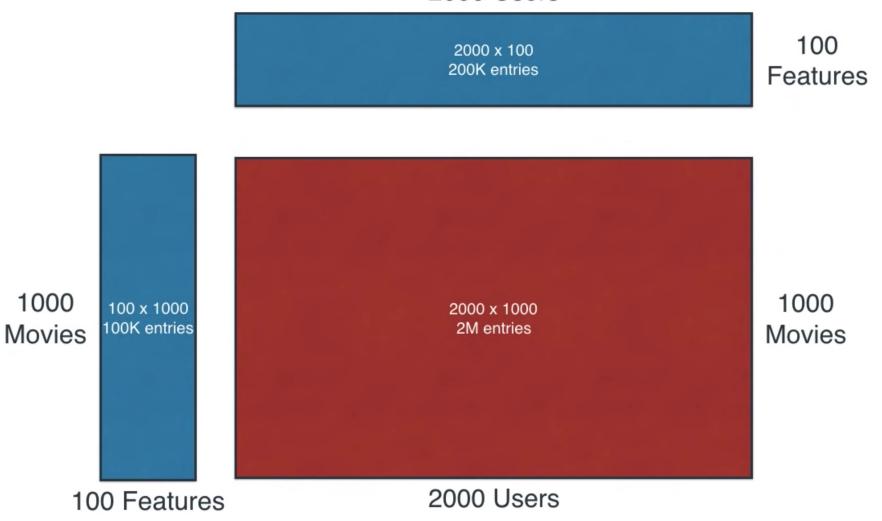
- 65	M1	M2	МЗ	M4	M5
	3	1	1	3	1
	1	2	4	1	3
	3	1	1	3	1
	4	3	5	4	4

## Латентные признаки - интуиция





2000 Users



#### Матричные разложения - как получать

- SVD не масштабируется, не слишком гибкое, переобучится, пропуски
- rSVD не масштабируется, параметризованное, переобучится, пропуски
- rSVD с регуляризацией не масштабируется, параметризованное, может не переобучится, пропуски
- ALS с регуляризацией масштабируется, параметризованное, может не переобучится, пропуски
- SGD с регуляризацией масштабируется, параметризованное, может не переобучится, может игнорировать пропуски

## А как обучаться то?

- 1. Делить пользователей на train/test нехорошо, теряем пользователей
- 2. Делить фильмы на train/test нехорошо, теряем фильмы
- 3. Выбрасывать одну часть точек в train, другую в test, обучаться восстанавливать самодельные пропуски

	M1	M2	МЗ	M4	M5
F1	3	1	1	3	1
F2	1	2	4	1	3

	F1	F2
A A	1	0
B	0	1
C	1	0
D	1	1

	M1	M2	МЗ	M4	M5
	3	1	1	3	1
В	1	2	4	1	3
C	3	1	1	3	1
D	4	3	5	4	4

### А как предсказывать то?

- 1.  $R \approx U @ M [Rating = User @ Movie] = R_{rec}$ , где  $R_{rec}$  реконструированная (ожидаемая) матрица рейтингов, ограниченная рангом r.
- 2. Как вариант брать для данного пользователя из соответствующей строки топ k еще не просмотренных фильмов

## А почему это работает?

- 1. Давайте пробовать искать векторные представления  $u_i^T$  для пользователей и  $m_j$  для фильмов, такие что отмасштабированная оценка фильма ј пользователем і это  $<\!u_i^T\!$ ,  $m_i\!>$ . То есть  $R_{ij}=<\!u_i^T\!$ ,  $m_i\!>$
- 2. Тогда функционал потерь для нахождения имеет вид  $L(P, Q) = ||R UM||^2 + регуляризация$
- 3. При этом хорошо бы вычесть из R средние по столбцам и строкам, чтобы смотреть на «очищенные» данные
- 4. Теперь это просто задача приближения с регуляризацией и мы надеемся, что заполненные приближением Р значения будут предсказаниями

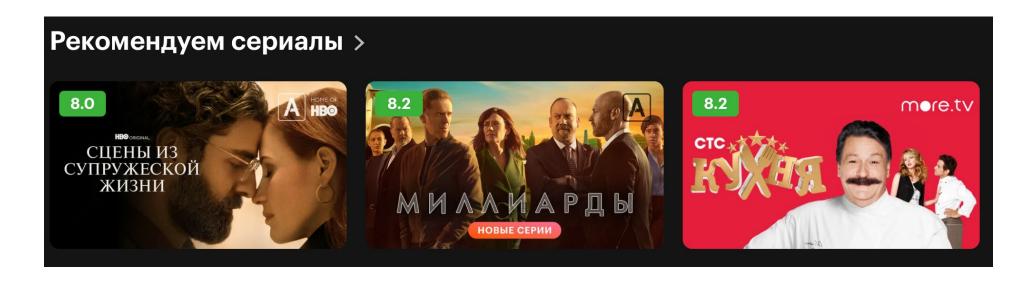
### А что с проблемами?

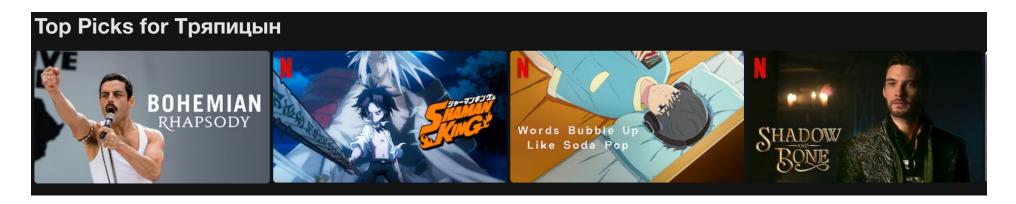
- 1. Вычислительная сложность:
  - рантайм O(|M|r) << O(|M||U|)</li>
  - предподсчет O(|M||U|r) << O(|M|<sup>2</sup>|U|)
- Новые фильмы не будут иметь оценок, пока их не посмотрят много пользователей – рекомендации по этому фильму будут плохими, а сам фильм почти не будем рекомендовать Уже по малому числу оценок сможем выделять свойства фильма и рекомендовать его нужным пользователям
- 3. Популярные фильмы будем рекомендовать <del>чаще (по сути противоположность предыдущему пункту)</del> качественнее
- 4. Нет рекомендаций для новых пользователей
- 5. Выглядит <del>хиленько, никаких связей фильмов друг с другом и пользователей друг с другой не учитываем</del> уже гораздо интереснее

### Какие интересные вопросы остались?

- 1. Есть ли разница какие точки выкидывать для обучения? Более старые для пользователя? Более новые?
- 2. Как мерить офлайн качество? Т.е. как с какой-то уверенностью, прежде чем катить модель в эксперимент, проверить (убедить менеджера), что она действительно хорошо работает? Что такое хорошо?
- 3. Как мерить дефект рейт в офлайне? Т.е. как с какой-то уверенностью, прежде чем катить модель в эксперимент, проверить (убедить менеджера), что у модели не слишком много стьюпидов? Как определить стьюпидность? Стьюпид в общем смысле не просто нерелевантный фильм, а фильм, при рекомендации которого в голове возникает «что за чушь мне рекомендуют». Это скорее про репутационные риски сервиса, чем про качество модели.
- 4. 2 и 3 вопросы относительно наивной реализации решается толокой? Но все еще вопрос что такое хорошо, а что такое стьюпид?

#### Приглашаю работать в Кинопоиск





#### Список источников

- Материалы курса "Основы матричных вычислений", <u>http://wiki.cs.hse.ru/</u>
   <u>Основы матричных вычислений 2020/2021</u>
- Golub, G.; Kahan, W.: Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix (1965), <a href="https://www3.math.tu-berlin.de/Vorlesungen/SS14/MatricesGraphsPDEs/paper for students/GolubKahanSVD.pdf">https://www3.math.tu-berlin.de/Vorlesungen/SS14/MatricesGraphsPDEs/paper for students/GolubKahanSVD.pdf</a>
- Nicolas Gillis: The Why and How of Nonnegative Matrix Factorization, <a href="https://arxiv.org/pdf/1401.5226.pdf">https://arxiv.org/pdf/1401.5226.pdf</a>

#### Список источников

- https://builtin.com/data-science/step-step-explanation-principalcomponent-analysis
- <a href="https://medium.com/analytics-vidhya/topic-modeling-with-non-negative-matrix-factorization-nmf-3caf3a6bb6da">https://medium.com/analytics-vidhya/topic-modeling-with-non-negative-matrix-factorization-nmf-3caf3a6bb6da</a>
- https://pub.towardsai.net/machine-learning-dimensionalityreduction-via-principal-component-analysis-1bdc77462831
- <a href="https://medium.com/nanonets/topic-modeling-with-lsa-psla-lda-and-lda2vec-555ff65b0b05">https://medium.com/nanonets/topic-modeling-with-lsa-psla-lda-and-lda2vec-555ff65b0b05</a>

#### Список источников

• <a href="https://www.youtube.com/watch?v=ZspR5PZemcs">https://www.youtube.com/watch?v=ZspR5PZemcs</a>