

# 计算广告CTR预估系列(一)--DeepFM理论

原创 李宁宁 机器学习荐货情报局 2018-05-04

## 计算广告CTR预估系列(一)--DeepFM理论

认真阅读完本文，抓住DeepFM的理论核心不成问题！

配合《计算广告CTR预估系列(二)--DeepFM实践》食用更佳！敬请期待。。。

## DeepFM

### 1. CTR预估

CTR预估**数据特点**：

1. 输入中包含类别型和连续型数据。类别型数据需要one-hot,连续型数据可以先离散化再one-hot，也可以直接保留原值
2. 维度非常高
3. 数据非常稀疏
4. 特征按照Field分组

CTR预估**重点**在于**学习组合特征**。注意，组合特征包括二阶、三阶甚至更高阶的，阶数越高越复杂，越不容易学习。Google的论文研究得出结论：高阶和低阶的组合特征都非常重要，同时学习到这两种组合特征的性能要比只考虑其中一种的性能要好。

那么关键问题转化成：**如何高效的提取这些组合特征**。一种办法就是引入领域知识人工进行特征工程。这样做的弊端是高阶组合特征非常难提取，会耗费极大的人力。而且，有些组合特征是隐藏在数据中的，即使是专家也不一定能提取出来，比如著名的“尿布与啤酒”问题。

在DeepFM提出之前，已有LR，FM，FFM，FNN，PNN（以及三种变体：IPNN,OPNN,PNN\*），Wide&Deep模型，这些模型在CTR或者是推荐系统中被广泛

使用。

## 2. 模型演进历史

### 2.1 线性模型

最开始CTR或者是推荐系统领域，一些线性模型取得了不错的效果。比如：LR，FTRL。**线性模型**有个致命的缺点：**无法提取高阶的组合特征**。所以常用的做法是人为的加入**pairwise feature interactions**。即使是这样：对于那些出现很少或者没有出现的组合特征以及高阶组合特征依旧无法提取。

LR最大的缺点就是无法组合特征，依赖于人工的特征组合，这也直接使得它表达能力受限，基本上只能处理线性可分或近似线性可分的问题。

### 2.2 FM模型

线性模型差强人意，直接导致了FM模型应运而生（在Kaggle上打比赛提出来的，取得了第一名的成绩）。FM通过隐向量**latent vector**做内积来表示组合特征，从理论上解决了低阶和高阶组合特征提取的问题。但是实际应用中受限于计算复杂度，一般也就只考虑到2阶交叉特征。

后面又进行了改进，提出了FFM，增加了Field的概念。

### 2.3 遇上深度学习

随着DNN在图像、语音、NLP等领域取得突破，人们渐渐意识到DNN在特征表示上的天然优势。相继提出了使用CNN或RNN来做CTR预估的模型。但是，**CNN模型的缺点是：偏向于学习相邻特征的组合特征。RNN模型的缺点是：比较适用于有序列(时序)关系的数据。**

FNN的提出，应该算是一次非常不错的尝试：先使用预先训练好的FM，得到隐向量，然后作为DNN的输入来训练模型。缺点在于：受限于FM预训练的效果。

随后提出了PNN，PNN为了捕获高阶组合特征，在 embedding layer 和 first hidden layer 之间增加了一个 product layer。根据product layer使用内积、外积、混合分别衍生出 IPNN，OPNN，PNN\* 三种类型。

无论是FNN还是PNN，他们都有一个绕不过去的缺点：**对于低阶的组合特征，学习到的比较少**。而前面我们说过，低阶特征对于CTR也是非常重要的。

Google意识到了这个问题，为了同时学习低阶和高阶组合特征，提出了**Wide&Deep模型**。它混合了一个**线性模型 (Wide part)** 和**Deep模型(Deep part)**。这两部分模型需要不同的输入，而**Wide part**部分的输入，依旧**依赖人工特征工程**。

**但是**，这些模型普遍都存在两个问题：

1. 偏向于提取低阶或者高阶的组合特征。不能同时提取这两种类型的特征。
2. 需要专业的领域知识来做特征工程。

DeepFM在Wide&Deep的基础上进行改进，成功解决了这两个问题，并做了一些改进，其**优势/优点**如下：

1. 不需要预训练FM得到隐向量
2. 不需要人工特征工程
3. 能同时学习低阶和高阶的组合特征
4. FM模块和Deep模块共享Feature Embedding部分，可以更快的训练，以及更精确的训练学习

下面，就让我们走进DeepFM的世界，一起去看看它到底是怎么解决这些问题的！

### 3. DeepFM

DeepFM闪亮登场！

主要做法如下：

1. **FM Component + Deep Component**。FM提取低阶组合特征，Deep提取高阶组合特征。但是和Wide&Deep不同的是，DeepFM是端到端的训练，不需要人工特征工程。
2. **共享feature embedding**。FM和Deep共享输入和 feature embedding 不但使得训练更快，而且使得训练更加准确。相比之下，Wide&Deep中，input vector非常大，里面包含了大量的人工设计的pairwise组合特征，增加了他的计算复杂度。

## DeepFM架构图:

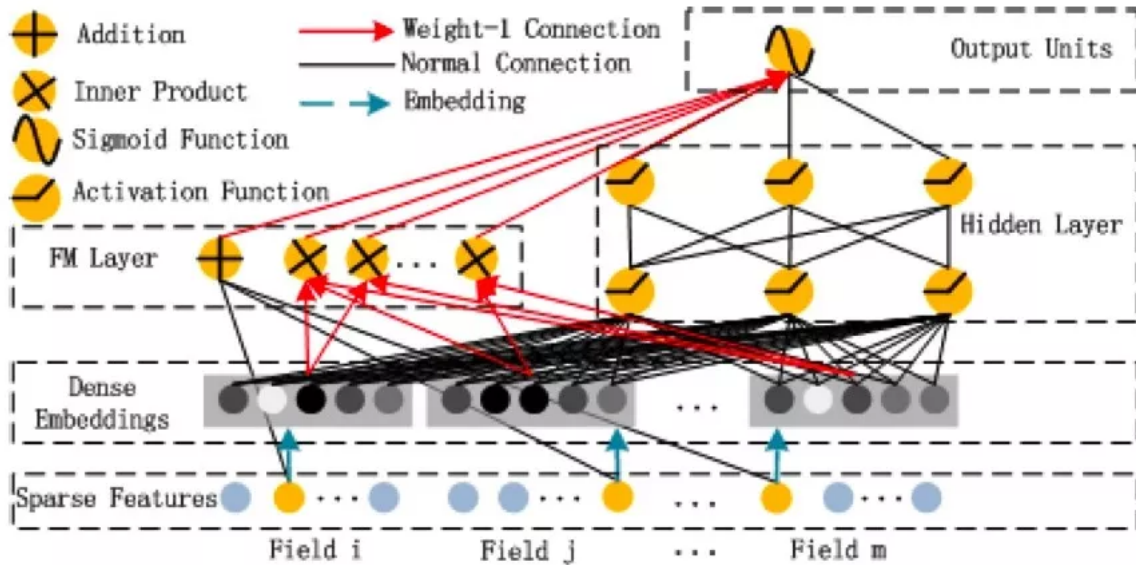


Figure 1: Wide & deep architecture of DeepFM. The wide and deep component share the same input raw feature vector, which enables DeepFM to learn low- and high-order feature interactions simultaneously from the input raw features.

机器学习荐货情报局

### 3.1 FM Component

FM部分的输出由两部分组成：一个**Addition Unit**，多个**内积单元**。

$$y_{FM} = \langle w, x \rangle + \sum_{j_1=1}^d \sum_{j_2=j_1+1}^d \langle V_{i_1}, V_{i_2} \rangle x_{j_1} \cdot x_{j_2},$$

机器学习荐货情报局

这里的d是输入one-hot之后的维度，我们一般称之为 `feature_size`。对应的是one-hot之前的特征维度，我们称之为 `field_size`。

FM架构图：

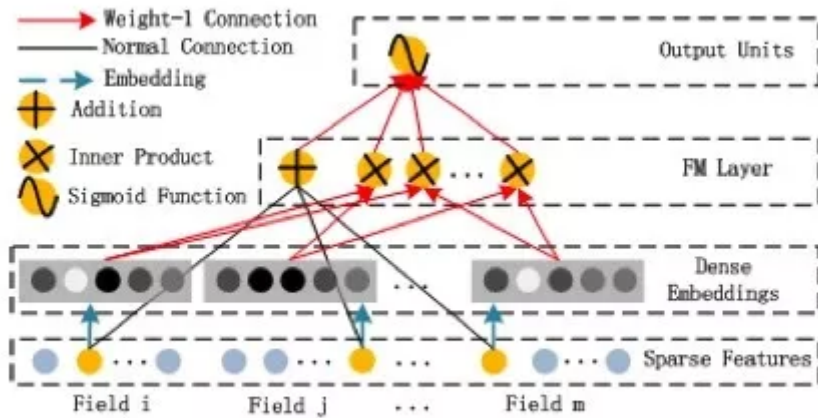


Figure 2: The architecture of FM. 机器学习干货情报局

**Addition Unit** 反映的是1阶的特征。**内积单元**反映的是2阶的组合特征对于预测结果的影响。

### 注意：

虽然公式上 $Y_{fm}$ 是所有部分都求和，是一个标量。但是从FM模块的架构图上我们可以看到，输入到输出单元的部分并不是一个标量，应该是一个向量。实际实现中采用的是FM化简之后的内积公式，最终的维度是： $field\_size + embedding\_size$

这里分别展开解释下维度的两部分是怎么来的，对于理解模型还是很重要的：

第一、 $field\_size$  对应的是  $\langle W, X \rangle$ 。

这里的X是one-hot之后的，one-hot之后，我们认为X的每一列都是一个单独的维度的特征。这里我们表达的是X的1阶特征，说白了就是单独考虑X的每个特征，他们对最终预测的影响是多少。是多少那？是W！W对应的就是这些维度特征的权重。假设one-hot之后特征数量是 $feature\_size$ ，那么W的维度就是 $(feature\_size, 1)$ 。

这里 $\langle W, X \rangle$ 是把X和W每一个位置对应相乘相加。由于X是one-hot之后的，所以**相当于**进行了一次**Embedding**！X在W上进行一次嵌入，或者说是一次选择，选择的是W的行，按什么选择那，按照X中不为0的那些特征对应的index，选择W中 $row=index$ 的行。

**这里解释下Embedding**：W是一个矩阵，每一行对应X的一个维度的特征（这里是one-hot之后的维度，一定要注意）。W的列数为1，表示嵌入之后的维度是1。W的每一行对应一个特征，相当于是我们拿输入 $X_i$ 作为一个index， $X_i$ 的任意一个Field i中只有1个为1，其余的都是0。哪个位置的特征值为1，那么就选中W中对应的行，作为嵌入后这个Field i对应的新的特征表示。对于每一个Field都执行这样的操作，就选出来了 $X_i$  Embedding之后的表示。注意到，每个Field都**肯定会选出且仅选出W中的某一行**(想想为什么？)，因为W的列数是固定的，每一个Field都选出W.cols作为对应



的新特征。把每个Field选出来的这些W的行，拼接起来就得到了X Embedding后的新的表示：维度是  $\text{num}(\text{Field}) * \text{num}(W.\text{cols})$ 。虽然每个Field的长度可能不同，但是都是在W中选择一行，所以选出来的长度是相同的。这也是Embedding的一个特性：虽然输入的Field长度不同，但是Embedding之后的长度是相同的。

什么？Embedding这么复杂，怎么实现的？**非常简单！直接把X和W做内积即可。**是的，你没看错，就是这么简单（tensorflow中封装了下，改成了 `tf.nn.embedding_lookup(embeddings, index)`，原理就是不做乘法，直接选出对应的行）。自己写个例子试试：`X.shape=(1, feature_size)`，`W.shape = (feature_size, embedding_size)`就知道为什么选出1对应W的行和做内积结果是一样的是怎么回事了。

所以：**FM模块图中，黑线部分是一个全连接！W就是里面的权重。**把输入X和W相乘就得到了输出。至于Addition Unit，我们就不纠结了，这里并没有做什么加法，就把他当成是反应1阶特征对输出的影响就行了。

第二、`embedding_size` 对应的是

$$\sum_{j_1=1}^d \sum_{j_2=j_1+1}^d \langle V_{j_1}, V_{j_2} \rangle x_{j_1} \cdot x_{j_2}$$

机器学习干货情报局

FM论文中给出了化简后的公式：

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i \rangle x_i x_i \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{f=1}^k v_{i,f} v_{j,f} x_i x_j - \sum_{i=1}^n \sum_{f=1}^k v_{i,f} v_{i,f} x_i x_i \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{f=1}^k \left( \left( \sum_{i=1}^n v_{i,f} x_i \right) \left( \sum_{j=1}^n v_{j,f} x_j \right) - \sum_{i=1}^n v_{i,f}^2 x_i^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{f=1}^k \left( \left( \sum_{i=1}^n v_{i,f} x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n v_{i,f}^2 x_i^2 \right) \end{aligned}$$

机器学习干货情报局

这里最后的结果中是在 $[1, K]$ 上的一个求和。**K就是W的列数，就是Embedding后的维度，也就是embedding\_size。**也就是说，在DeepFM的FM模块中，最后没有对结果从 $[1, K]$ 进行求和。而是把这K个数拼接起来形成了一个K维度的向量。

## FM Component总结:

1. FM模块实现了对于1阶和2阶组合特征的建模。
2. 没有使用预训练
3. 没有人工特征工程
4. embedding矩阵的大小是：特征数量 \* 嵌入维度。 然后用一个index表示选择了哪个特征。

## 需要训练的两部分:

1. input\_vector和Addition Unit相连的全连接层，也就是1阶的Embedding矩阵。
2. Sparse Feature到Dense Embedding的Embedding矩阵，中间也是全连接的，要训练的是1

## 3.2 Deep Component

Deep Component架构图:

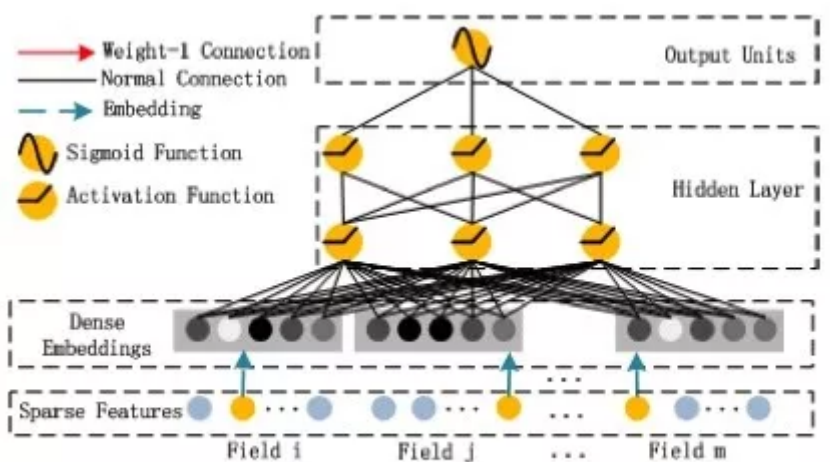


Figure 3: The architecture of DNN. 机器学习干货情报局

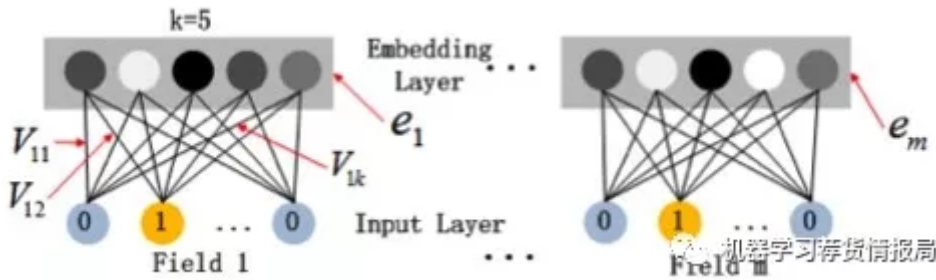
Deep Component是用来学习**高阶组合特征**的。网络里面黑色的线是全连接层，参数需要神经网络去学习。

由于CTR或推荐系统的数据one-hot之后特别稀疏，如果直接放入到DNN中，参数非常多，我们没有这么多的数据去训练这样一个网络。所以**增加了一个Embedding层，用于降低维度。**

**这里继续补充下Embedding层，两个特点:**

1. 尽管输入的长度不同，但是映射后长度都是相同的. embedding\_size 或 k
2. embedding层的参数其实是全连接的Weights，是通过神经网络自己学习到的。

Embedding层的架构图：



值得注意的是：**FM模块和Deep模块是共享feature embedding的（也就是V）。**

好处：

1. 模型可以从最原始的特征中，同时学习低阶和高阶组合特征
2. 不再需要人工特征工程。Wide&Deep中低阶组合特征就是同过特征工程得到的。

### 3.3 对比其他模型

模型图：

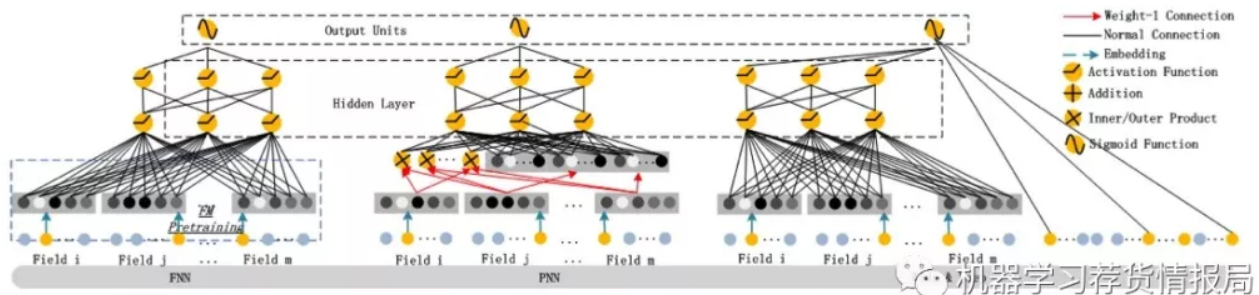


Figure 5: The architectures of existing deep models for CTR prediction: FNN, PNN, Wide & Deep Model

### FNN

FNN is a FM-initialized feedforward neural network.

FNN使用预训练的FM来初始化DNN，然后只有Deep部分，不能学习低阶组合特征。

**FNN缺点：**

1. Embedding的参数受FM的影响，不一定准确



2. 预训练阶段增加了计算复杂度，训练效率低
3. FNN只能学习到高阶的组合特征。模型中没有对低阶特征建模。

## PNN

PNN：为了捕获高阶特征。PNN在第一个隐藏层和embedding层之间，增加了一个product layer。

根据product的不同，衍生出三种PNN：IPNN，OPNN，PNN\* 分别对应内积、外积、两者混合。

作者为了加快计算，采用近似计算的方法来计算内积和外积。内积：忽略一些神经元。外积：把 $m \times k$ 维的vector转换成 $k$ 维度的vector。由于外积丢失了较多信息，所以一般没有内积稳定。

但是内积的计算复杂度依旧非常高，原因是：product layer的输出是要和第一个隐藏层进行全连接的。

### PNN缺点：

1. 内积外积计算复杂度高。采用近似计算的方法外积没有内积稳定。
2. product layer的输出需要与第一个隐藏层全连接，导致计算复杂度居高不下
3. 和FNN一样，只能学习到高阶的特征组合。没有对于1阶和2阶特征进行建模。

## Wide&Deep

Wide & Deep设计的初衷是想同时学习低阶和高阶组合特征，但是wide部分需要领域知识进行特征工程。

Wide部分可以用LR来替换，这样的话就和DeepFM差不多了。

但是DeepFM共享feature embedding 这个特性使得在反向传播的时候，模型学习feature embedding，而后又会在前向传播的时候影响低阶和高阶特征的学习，这使得学习更加的准确。

### Wide&Deep缺点：

1. 需要特征工程提取低阶组合特征

DeepFM

优点：

- 1. 没有用FM去预训练隐向量V，并用V去初始化神经网络。（相比之下FNN就需要预训练FM来初始化DNN）
- 2. FM 模块不是独立的，是跟整个模型一起训练学习得到的。（相比之下Wide&Deep中的Wide和Deep部分是没有共享的）
- 3. 不需要特征工程。（相比之下Wide&Deep中的Wide部分需要特征工程）
- 4. 训练效率高。（相比PNN没有那么多参数）

什么？太多了乱七八糟记不住？ OK，那就记住**最核心的**：

- 1. 没有预训练（no pre-training）
- 2. 共享Feature Embedding，没有特征工程（no feature engineering）
- 3. 同时学习低阶和高阶组合特征（capture both low-high-order interaction features）

3.4 超参数建议

论文中还给出了一些参数的实验结果，直接给出结论，大家实现的时候可以参考下。

超参数	建议	备注
激活函数	1. IPNN使用tanh 2. 其余使用ReLU	
学习方法	Adam	
Dropout	0.6~0.9	
隐藏层数量	3~5	根据实际数据大小调整
神经元数量	200~600	根据实际数据大小调整
网络形状	constant	一共有四种：固定、增长、下降、菱形。

PS: constant效果最好，就是隐藏层每一层的神经元的数量**相同**。

最后，模型对比图镇：

Table 1: Comparison of deep models for CTR prediction

	No Pre-training	High-order Features	Low-order Features	No Feature Engineering
FNN	×	✓	×	✓
PNN	✓	✓	×	✓
Wide & Deep	✓	✓	✓	×
DeepFM	✓	✓	✓	✓

机器学习荐货情报局

Reference

- 1. DeepFM: A Factorization-Machine based Neural Network for CTR Prediction

获取更多机器学习干货、荐货、原创文章，欢迎关注**机器学习荐货情报局**，加入荐货大家庭！



机器学习荐货情报局