推荐系统系列(八): AFM理论与实践

原创 默存 SOTA Lab 2019-11-27

前言

到目前为止,介绍的模型大多将优化重心放在了特征交叉部分,今天要介绍的AFM(Attentional Factorization Machine)[1]同样如此。该模型于2017年,由浙大与新加坡国立大学合作推出。有意思的是,NFM的作者同样参与了AFM研究,所以在AFM中可以很明显的看到NFM [2]的痕迹。

AFM的贡献在于,将attention机制引入到特征交叉模块。不同于NFM在Bi-Interaction Layer中的处理,AFM在对二阶交叉特征进行sum pooling时,使用attention network计算得到的attention score对交叉特征进行加权求和。因为从直觉上来说,不同的交叉特征有着不同的重要性,所以通过模型显式的学习出每种交叉特征的权重,是有益于模型的性能提升的,并且对于模型的可解释性也有帮助。下面将对AFM进行详细介绍。

分析

1. AFM定义

首先抛出AFM的公式化定义,即公式(1)所示:

$$\hat{y}_{AFM}(X) = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + p^T \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} (v_i \odot v_j) x_i x_j$$
 (1)

接下来,让我们逐步的对公式(1)进行分析。与NFM类似,不妨假设:

$$f(X)=p^T\sum_{i=1}^n\sum_{j=i+1}^n a_{i,j}(v_i\odot v_j)x_ix_j \qquad (2)$$

那么,公式(1)可表示为:

$$\hat{y}_{AFM}(X) = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + f(X)$$
 (3)

绝大多数推荐模型都可以用公式(3)来表示,其中求和的三项分别为:全局偏置项、一阶项、 高阶项。对于前两项,我们已经很熟悉了,所以我们的重点在于第三项。 前言中提到,AFM的优化重心是在交叉特征部分,即公式中的第三项 f(X) 。论文作者给出了 f(X) 的结构示意图,如下所示:

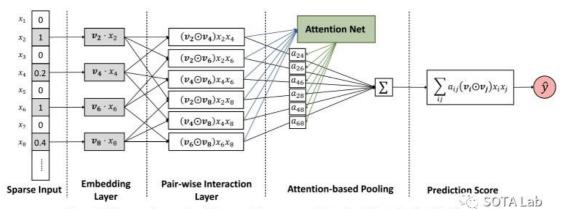


Figure 1: The neural network architecture of our proposed Attentional Factorization Machine model.

从图中可看出,f(X) 共分为5个部分,依次进行拆解。

1.1 Sparse Input

这个部分主要是为了说明输入数据特点。在对输入特征进行二值化、离散化等处理之后,输入数据往往会变成高维稀疏数据。

1.2 Embedding Layer

高维稀疏数据不利于模型的学习。与之前介绍的模型类似,AFM同样使用了Embedding Layer 来对高维稀疏特征进行降维,将其表示为低维稠密特征。每个特征对应一个隐向量,将特征值与隐向量进行乘积,得到特征向量作为实际特征表示。

1.3 Pair-wise Interaction Layer

这个部分的主要工作是将特征进行二阶交叉,n 个特征向量进行两两交叉,得到 n(n-1)/2 个二阶交叉特征向量。将Pair-wise Interaction Layer表示为 $f_{PI}(\xi)$,有:

$$f_{PI}(\xi) = \{(v_i \odot v_i) x_i x_j\}_{(i,j) \in R_x}$$
 (4)

其中, ξ 表示Embedding Layer的输出, R_x 表示所有可能的二阶交叉组合, x_i 表示特征值, v_i 表示维度为 k 的隐向量,运算符 \odot 表示向量对应元素相乘。假设 m=n(n-1)/2 ,那么 $f_{PI}(\xi) \in \mathbb{R}^{k \times m}$ 。

细心的同学可能看出来了,Pair-wise Interaction Layer与NFM中的Bi-Interaction Layer在交叉过程完全一样,只是Bi-Interaction Layer在交叉完了之后再进行向量<u>等权求和</u>处理。

与NFM一样,AFM同样可以将FM纳入到模型框架中。如果对 $f_{PI}(\xi)$ 进行如下计算: $\hat{y} = z^T \sum f_{PI}(\xi) + b$,其中 \sum 表示向量对应元素求和, \sum 输出为一个向量, z 为参数向量, b

为偏置。假设将z固定为全1向量,b等于0,此时 \hat{y} 与FM的二阶项等价。如果再将全局偏置与一阶项考虑进来,此时模型与FM完全等价。

1.4 Attention-based Pooling

在NFM中,特征向量进行两两交叉之后,直接进行sum pooling,将二阶交叉向量进行<u>等权求和处理</u>。但是直觉上来说,不同的交叉特征应该有着不同的重要性。不重要的交叉特征应该降低其权重,而重要性高的交叉特征应该提高其权重。Attention概念与该思想不谋而合,AFM作者顺势将其引入到模型之中,为每个交叉特征引入重要性权重,最终在对特征向量进行sum pooling时,<u>利用重要性权重对二阶交叉特征进行加权求和</u>。

为了计算特征重要性权重,作者构建了一个Attention Network,其本质是<u>含有一个隐藏层的多层感知机</u>(MLP)。表达式如下:

$$egin{align} a_{i,j}' &= h^T Relu(W(v_i \odot v_j) x_i x_j + b) \ a_{i,j} &= rac{exp(a_{i,j}')}{\sum_{(i,j) \in R_x} exp(a_{i,j}')} \end{align}$$

其中, $W \in \mathbb{R}^{t \times k}$, $b \in \mathbb{R}^t$, $h \in \mathbb{R}^t$ 是模型参数。参数 t 是Attention Network隐藏层节点数,在原文中被称之为 attention factor。 计算得到的 $a_{i,j}$ 即表示对应的二阶交叉特征 $(v_i \odot v_j)x_ix_j$ 的重要性权重。

当得到权重之后,便可以对二阶交叉特征进行加权 sum pooling。可以表示为 $\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} (v_i \odot v_j) x_i x_j$,其结果仍然是一个向量,作为下一模型结构的输入。

1.5 Prediction Score

Attention-based Pooling得到二阶交叉信息,在这个部分负责将其表示为一个标量。具体定义为, $\hat{y} = p^T f_{att}(X)$,其中 $f_{att}(X)$ 表示Attention-based Pooling的输出,p 为参数向量。

至此,我们完成了对AFM核心模块 f(X) 的分析。最终AFM的公式定义如下:

$$\hat{y}_{AFM}(X) = w_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + f(X)$$

$$= w_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + p^T \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} (v_i \odot v_j) x_i x_j$$
(6)

模型参数集合为 $\{w_0, w_i, v_i, p, h, W, b\}$ 。

2. 过拟合风险

很明显AFM是对于NFM的改进,但在改进同时引入了更多的参数,增加了模型过拟合风险。作者使用了dropout与L2正则的方式来避免过拟合问题。

对于Pair-wise Interaction Layer部分,作者使用了dropout技术(根据作者开源代码 [3] 分析,实际位置为交叉特征根据重要性权重加权求和之后),而在Attention Network部分使用L2进行正则化。因为在论文中作者使用均方误差作为Loss函数,所以最终的Loss函数表示为:

$$L = \sum_{X \in \tau} (\hat{y}_{AFM}(X) - y(X))^2 + \lambda ||W||^2$$
 (7)

其中, τ代表全体训练样本。

3. 性能分析

与NFM类似,在对模型进行消融分析时,作者从三个问题出发,设计实验证明模型的优越性。 实验数据集为 *Frappe* 与 *MovieLens* 。对比模型分别有: LibFM、HOFM、Wide&Deep、DeepCross。对于所有实验Embedding Size都为256,如未提及, *attention factor* 均为256。

在实验过程中,作者发现对于AFM、Wide&Deep、DeepCross模型,相对于随机初始化参数,使用预训练的FM参数进行初始化可以提高模型性能。

For Wide&Deep, DeepCross and AFM, we find that pre-training their feature embeddings with FM leads to a lower RMSE than a random initialization. As such, we report their performance with pre-training.

3.1 问题一

Q: AFM的关键超参数(如, dropout与L2正则化)对于性能的影响如何?

对比三种模型(LibFM、FM、AFM)在不同dropout比例下的表现,其中的FM是将AFM的 Attention Network去除得到的等价模型。实验效果如下:

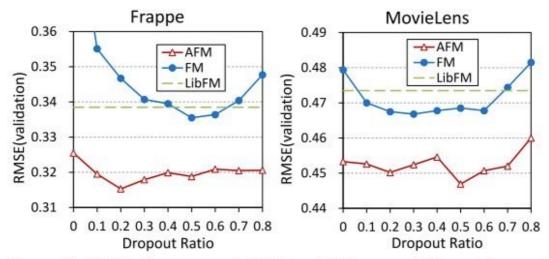


Figure 2: Validation error of AFM and FM w.r.t. different dropout ratios on the pair-wise interaction layer

该实验表明了一些结论,

- 1) 在Pair-wise Interaction Layer使用dropout,可以提高模型的表现。
- 2)对比LibFM与FM,发现FM的效果优于LibFM,可能的原因在于优化器的不同,LibFM使用普通的SGD算法,而FM使用Adagrad进行优化。还有一个原因在于,LibFM使用L2正则来防止过拟合,而该FM模型使用dropout。
- 3)即使在AFM不使用dropout时,其效果仍大幅优于FM与LibFM,说明Attention Network的有效性。

将AFM设置为最佳的dropout比例,然后我们来看在不同的 λ (L2正则强度)下,AFM的表现如何。对比效果如下:

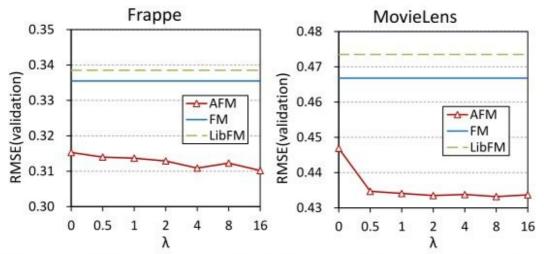


Figure 3: Validation error of AFM w.r.t. different regularization strengths on the attention network

可以看出,随着正则化强度的提高,AFM的性能得到进一步提高。这说明仅对Pair-wise Interaction Layer使用dropout是不够的,加上Attention Network的L2正则才能达到最佳效果。

3.2 问题二

Q: Attention Network能够有效地学习交叉特征的重要性吗?

在回答这个问题之前,我们应该选择一个合适的 attention factor 。下图展示了在不同的 attention factor 下模型的表现,每次试验都将 dropout 与 λ 设置到最佳。

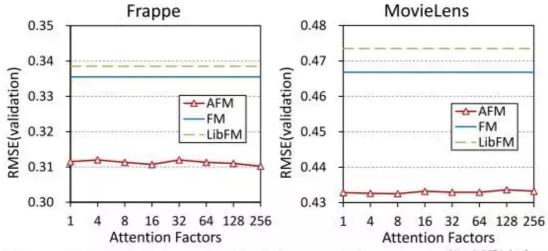
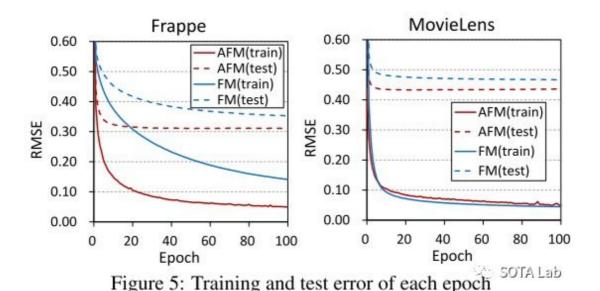


Figure 4: Validation error of AFM w.r.t. different attention factors

从图上可以看出,随着 attention factor 的改变,AFM的表现相当稳定。上文中提到,Attention Network是一个含有一层隐藏层的感知机。所以当 attention factor 等于1时,Attention Network的隐藏层只有一个节点。尽管条件设定很严格,AFM仍然能有突出的表现,这说明了Attention Network的合理性,不同的交叉特征根据重要性权重进行加权求和,能够有效提高模型表现。

此外,对比AFM与FM在训练过程中的收敛速度,结果如下。在两个数据集上,AFM都有着不错的表现。



为了能够更深入的分析Attention Network的优势,作者设计实验。首先将Attention Network参数固定,将所有的 $a_{i,j}$ 设置为 $1/|R_x|$,模拟FM训练Embedding向量,直到模型收敛。然后再将Embedding Layer进行固定,放开Attention Network进行训练,直到模型再次收敛。结果显示,第二次收敛模型性能提高了3%。这充分说明了Attention Network的有效性。

在实验过程中抽取三条样本进行观察,在FM阶段与放开Attention Network之后的阶段,Item-Tag的交叉特征都是最重要的,但是在FM阶段模型是将所有交叉特征等权求和的(权重均为 0.33)。而在加入Attention Network之后,模型给Item-Tag分配了更高的权重,三条样本分别分配了0.38、0.42、0.37权重。这说明模型确实能够自适应的调整不同交叉特征的权重,提高模型表现。

Table 1: The attention_score*interaction_score of each feature interaction of three test examples on MovieLens.

| # | Model | User-Item | User-Tag | Item-Tag | \hat{y} |
|---|-------|------------|------------|-----------|-----------|
| 1 | FM | 0.33*-1.81 | 0.33*-2.65 | 0.33*4.55 | 0.03 |
| 1 | FM+A | 0.34*-1.81 | 0.27*-2.65 | 0.38*4.55 | 0.39 |
| 2 | FM | 0.33*-1.62 | 0.33*-1.00 | 0.33*3.32 | 0.24 |
| 2 | FM+A | 0.38*-1.62 | 0.20*-1.00 | 0.42*3.32 | 0.56 |
| 3 | FM | 0.33*-1.40 | 0.33*-1.26 | 0.33*4.68 | 0.67 |
| 3 | FM+A | 0.33*-1.40 | 0.29*-1.26 | 0.37*4.68 | 50:189La |

3.3 问题三

Q: 在稀疏数据集上,AFM与最好的模型比较是否有提高呢?

对比几种模型,结果如下。AFM参数少,但是表现最佳。

Table 2: Test error and number of parameters of different methods on embedding size 256. M denotes "million".

| | Frappe | | MovieLens | |
|-----------|--------|--------|-----------|--------|
| Method | Param# | RMSE | Param# | RMSE |
| LibFM | 1.38M | 0.3385 | 23.24M | 0.4735 |
| HOFM | 2.76M | 0.3331 | 46.40M | 0.4636 |
| Wide&Deep | 4.66M | 0.3246 | 24.69M | 0.4512 |
| DeepCross | 8.93M | 0.3548 | 25.42M | 0.5130 |
| AFM | 1.45M | 0.3102 | 23.26M | 0.4325 |

实践

仍然使用 MovieLens100K 作为数据集,核心代码如下。

参数含义:

vec_dim : 代表embedding vector维度。

field_lens: list结构,其中每个元素代表对应Field有多少取值。例如gender有两个取值,那么其对应的元素为2。

```
attention factor: 与论文中含义一致。
lr:学习率。
lamda : L2正则化强度。
 class AFM(object):
     def __init__(self, vec_dim=None, field_lens=None, attention_factor=None, lr=None, dropout_rate=
         self.vec_dim = vec_dim
         self.field_lens = field_lens
         self.field_num = len(field_lens)
         self.attention_factor = attention_factor
         self.lr = lr
         self.dropout rate = dropout rate
         self.lamda = float(lamda)
         self.12 reg = tf.contrib.layers.12 regularizer(self.lamda)
         self._build_graph()
     def _build_graph(self):
         self.add_input()
         self.inference()
     def add input(self):
         self.x = [tf.placeholder(tf.float32, name='input_x_%d'%i) for i in range(self.field_num)]
         self.y = tf.placeholder(tf.float32, shape=[None], name='input_y')
         self.is_train = tf.placeholder(tf.bool)
     def inference(self):
         with tf.variable scope('linear part'):
             w0 = tf.get_variable(name='bias', shape=[1], dtype=tf.float32)
             linear_w = [tf.get_variable(name='linear_w_%d'%i, shape=[self.field_lens[i]], dtype=tf.
             linear part = w0 + tf.reduce sum(
                 tf.concat([tf.reduce_sum(tf.multiply(self.x[i], linear_w[i]), axis=1, keep_dims=Tru
                 axis=1, keep_dims=True) # (batch, 1)
         with tf.variable scope('emb part'):
             emb = [tf.get_variable(name='emb_%d'%i, shape=[self.field_lens[i], self.vec_dim], dtype
             emb_layer = tf.stack([tf.matmul(self.x[i], emb[i]) for i in range(self.field_num)], axi
         with tf.variable_scope('pair_wise_interaction_part'):
             pi_embedding = []
             for i in range(self.field_num):
```

```
for j in range(i+1, self.field_num):
            pi_embedding.append(tf.multiply(emb_layer[:,i,:], emb_layer[:,j,:])) # [(batch,
    pi_embedding = tf.stack(pi_embedding, axis=1) # (batch, F*(F-1)/2, K)
    cross_num = self.field_num * (self.field_num - 1) / 2
with tf.variable_scope('attention_network'):
    \#(K, t)
    att_w = tf.get_variable(name='attention_w', shape=[self.vec_dim, self.attention_factor]
    att_b = tf.get_variable(name='attention_b', shape=[self.attention_factor], dtype=tf.flc
    att_h = tf.get_variable(name='attention_h', shape=[self.attention_factor, 1], dtype=tf.
    # wx+b
    attention = tf.matmul(tf.reshape(pi_embedding, shape=(-1, self.vec_dim)), att_w)+att_b
    # relu(wx+b)
    attention = tf.nn.relu(attention)
    # h^T(relu(wx+b))
    attention = tf.reshape(tf.matmul(attention, att_h), shape=(-1, cross_num)) \ \# \ (batch, \ F^*)
    # softmax
    attention_score = tf.nn.softmax(attention) # (batch, F^*(F-1)/2)
    attention_score = tf.reshape(attention_score, shape=(-1, cross_num, 1)) # (batch, F*(F-
with tf.variable_scope('prediction_score'):
    weight_sum = tf.multiply(pi_embedding, attention_score) # (batch, F*(F-1)/2, K)
    weight_sum = tf.reduce_sum(weight_sum, axis=1) # (batch, K)
    weight_sum = tf.layers.dropout(weight_sum, rate=self.dropout_rate, training=self.is_tra
    p = tf.get_variable(name='p', shape=[self.vec_dim, 1], dtype=tf.float32)
    pred_score = tf.matmul(weight_sum, p) # (batch, 1)
self.y_logits = linear_part + pred_score
self.y_hat = tf.nn.sigmoid(self.y_logits)
self.pred_label = tf.cast(self.y_hat > 0.5, tf.int32)
self.loss = -tf.reduce_mean(self.y*tf.log(self.y_hat+1e-8) + (1-self.y)*tf.log(1-self.y_hat
reg_variables = tf.get_collection(tf.GraphKeys.REGULARIZATION_LOSSES)
if len(reg variables) > 0:
    self.loss += tf.add_n(reg_variables)
self.train op = tf.train.AdamOptimizer(self.lr).minimize(self.loss)
```

reference

- [1] Xiao, Jun, et al. "Attentional factorization machines: Learning the weight of feature interactions via attention networks." *arXiv preprint arXiv:1708.04617* (2017).
- [2] He, Xiangnan, and Tat-Seng Chua. "Neural factorization machines for sparse predictive analytics." *Proceedings of the 40th International ACM SIGIR conference on Research and Development in Information Retrieval*. ACM, 2017.
- [3] https://github.com/hexiangnan/attentional_factorization_machine

专注知识分享,欢迎关注 SOTA Lab~



如果这篇文章对你有帮助,可以点击下方"在看",推荐给更多小伙伴从

阅读原文