ALS 算法在 Spark 上的实现

零、基础知识

从广义上讲，推荐系统基于两种不同的策略：基于内容的方法和基于协同过滤的方法。Spark 中使用协同过滤的方式。协同过滤分析用户以及用户相关的产品的相关性，用以识别新的用户- 产品相关性。协同过滤系统需要的唯一信息是用户过去的行为信息，比如对产品的评价信息。协同过滤是领域无关的，所以它可以方便解决基于内容方法难以解决的许多问题。

推荐系统依赖不同类型的输入数据，最方便的是高质量的显式反馈数据，它们包含用户对感兴趣商品明确的评价。例如，Netflix 收集的用户对电影评价的星星等级数据。但是显式反馈数据不一定总是找得到，因此推荐系统可以从更丰富的隐式反馈信息中推测用户的偏好。 隐式反馈类型包括购买历史、浏览历史、搜索模式甚至鼠标动作。例如，购买同一个作者许多书的用户可能喜欢这个作者。

了解隐式反馈的特点非常重要，因为这些特质使我们避免了直接调用基于显式反馈的算法。最主要的特点有如下几种：

（1） 没有负反馈。通过观察用户行为，我们可以推测那个商品他可能喜欢，然后购买，但是我们很难推测哪个商品用户不喜欢。这在显式反馈算法中并不存在，因为用户明确告诉了我们哪些他喜欢哪些他不喜欢。

（2） 隐式反馈是内在的噪音。虽然我们拼命的追踪用户行为，但是我们仅仅只是猜测他们的偏好和真实动机。例如，我们可能知道一个人的购买行为，但是这并不能完全说明偏好和动机，因为这个商品可能作为礼物被购买而用户并不喜欢它。

（3） 显示反馈的数值值表示偏好（preference），隐式回馈的数值值表示信任

（confidence）。基于显示反馈的系统用星星等级让用户表达他们的喜好程度，例如一颗星表示很不喜欢，五颗星表示非常喜欢。基于隐式反馈的数值值描述的是动作的频率，例如用户购买特定商品的次数。一个较大的值并不能表明更多的偏爱。但是这个值是有用的，它描述了在一个特定观察中的信任度。 一个发生一次的事件可能对用户偏爱没有用，但是一个周期性事件更可能反映一个用户的选择。

（4） 评价隐式反馈推荐系统需要合适的手段。

针对不同的反馈模型，提出了两种不同的计算模型，

（1）显示反馈模型

（2）隐式反馈模型

一、ALS 算法实现的评测指标： Root-mean-square error

均方根值 (RMS) + 均方根误差 (RMSE) +标准差 (Standard Deviation)

/、**均方根值（RMS）也称作为效值**，计算方法是先平方、再平均、然后开方。

$$X_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} X_i^2}{N}} = \sqrt{\frac{X_1^2 + X_2^2 + \cdots + X_N^2}{N}}$$

0、均方根误差，**它是观测值与真值偏差的平方和观测次数 n 比值的平方根，**在实际测量中，观测次数 n 总是有限的，真值只能用最可信赖（最佳）值来代替.方根误差对一组测量中的特大或特小误差反映非常敏感，所以，**均方根误差能够很好地反映出测量的精密度。**均方根误差，当对某一量进行甚多次的测量时，取这一测量列真误差的均方根差(真误差平方的算术平均值再开方)，

称为标准偏差，以σ表示。σ反映了测量数据偏离真实值的程度，σ越小，表示测量精度越高，因此可用σ作为评定这一测量过程精度的标准。

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_{obs,i} - X_{model,i})^2}{n}}$$

1、**标准差（Standard Deviation）**，标准差是方差的算术平方根，也称均方差（mean square error），是各数据偏离平均数的距离的平均数，它是离均差平方和平均后的方根，用σ表示，标准差**能反映一个数据集的离散程度**。

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(X_i - \bar{X})^2}{n}}$$

二、ALS 算法在 spark 上的实现的基础概念

2.1、求解最小化损失函数

考虑到损失函数包含 m*n 个元素，m 是用户的数量，n 是商品的数量。一般情况下，m*n 可以到达几百亿。这么多的元素应该避免使用随机梯度下降法来求解，因此，spark 选择使用交替最优化方式求解。

具体的：

固定公式中的用户-特征向量或者商品-特征向量，公式就会变成二次方程，可以求出全局的极小值。交替最小二乘的计算过程是：交替的重新计算用户-特征向量和商品-特征向量，每一步都保证降低损失函数的值，直到找到极小值。

2.1、在 spark 实现 ALS 算法中，具有如下的参数：

1、numBlocks　是并行化的块数

2、rank　模型中的隐藏因子（矩阵的秩）

3、iterations 算法迭代次数，通常情况下 ALS 在 20 次或者更少的迭代就可以收敛

4、lambda　是正则化参数，为了防止过拟合，引入正则化参数，通过实验确定

5、implicitPrefs 是一个 boolean 值，确定的是是否使用隐式方式进行分解

6、alpha 是应用于 ALS 的隐式反馈变，用于控制观察值的基准置信度

2.2　Explicit 和 implicit 反馈

基于协同过滤的标准矩阵分解的方法把用户-产品矩阵的数据当成显示偏好矩阵，这是由用户显示给出。

在实际情况下，通常只有对那些隐式反馈的访问。Spark 的 MLLib 通过观察并处理用户行为的一些特征的权重，而不是直接得到评价矩阵。这些权重作为推到出用户偏好的置信度参考值，而不是隐式的对商品的评价值。这个模型试图发现

2.3　正则化参数的比例

引入正则化比例是为了防止过拟合的问题，这个思路是来自于“Large-Scale Parallel Collaborative Filtering for the Netflix Prize”，他的特点是 lambda 的值不是太

依赖于数据集的大小，所以在选取的小数据集上的得到的模型，在大的数据集上也具有相似度性能和结果。（在文章中确定 lambda 的方法是不断的进行实验，得到他的最佳值）。具体的做法是固定 N_f，那么得到 lambda 是 RMSE 的函数，通过不同的实验，确定他的最佳值。

三、ALS 算法在 Spark 上的实现代码分析

代码从官方给出的例子出发，进行确定：

3.1 输入数据的格式是

```
    1::93::1::1424380312
```

数据格式的解释说明：(1) 第一个是用户 ID

(2) 第二个是电影 ID

(3) 第三个是用户对电影的评价值

(4) 第四个是时间戳（评价时间）

3.2 例子程序是

```
import org,apache,spark,ml,evaluation,RegressionEvaluator

import org,apache,spark,ml,recommendation,ALS

-- $ example off$

import org,apache,spark,sql,SparkSession

/**

 * An example demonstrating ALS.
```

```
 * Run with
 * {{{
 * bin/run-example mllib.ALSExample
 * }}}
 */
object ALSExample {
  // $example on$
  case class Rating(userId: Int, movieId: Int, rating: Float, timestamp: Long)
  def parseRating(str: String): Rating = {
    val fields = str.split("::")
    assert(fields.size == 4)
    Rating(fields(0).toInt, fields(1).toInt, fields(2).toFloat, fields(3).toLong)
  }
  // $example off$
  def main(args: Array[String]) {
    val spark = SparkSession
      .builder
      .appName("ALSExample")
      .master("local")
      .getOrCreate()
    import spark.implicits._
    // $example on$
    val ratings = spark.read.textFile("data/mllib/als/sample_movielens_ratings.txt")
```

```
    ,map&parseRating'
    ,toDF&
val Array&training' test' : ratings,randomSplit&Array&. ,6' . ,0''
-- Build the recommendation model using ALS on the training data
val als = new ALS( )
    .setMaxIter(5)
    .setRegParam(0.01)
    .setUserCol(‘userId‘)
    .setItemCol(‘movieId‘)
    .setRatingCol(‘rating‘)
val model = als.fit(training)
-- Evaluate the model by computing the RMSE on the test data
val predictions : model,transform&test'
val evaluator : new RegressionEvaluator&
    ,setMetricName&"rmse"'
    ,setLabelCol&"rating"'
    ,setPredictionCol&"prediction"'


val rmse : evaluator,evaluate&predictions'
println&s"Root- mean- square error : %rmse"'
-- $ example off$
spark,stop&
```

```
  }
}
```

在这个方法中，1、读入评价矩阵，

2、把数据放入到 DataFrame 中，

3、把数据随机的分成训练集和测试集（在官方给出的例子中，给出的训练集占到 80%，测试集占到 20%）

4、生成一个新的 ALS 的实例，在实例中设置以下的参数：

（1）最大迭代次数

（2）设置初始的正则系数 lambda

（3）设置矩阵描述的元数据，在这个例子中是 用户 ID 电影 ID 和评分

5、调用 als.fit()函数，传入训练数据集，返回训练的模型

6、在模型上调用 model.transform(test),得到 predictions

7、在测试集上进行评价，使用的 RegressionEvaluator 这个评价实例

在这个实例中设置，评价参数（这里使用的 RMSE）。返回 evaluator.

8、调用 evalutor.evaluate(predictions)，得到 rmse 的结果。

3.3 ALS 类分析

类名： org.apache.spark.ml.recommendation.ALS.scala

Trait ALSModelParams：

1、userCol 描述的是 用户 ID 的列名

2、itemCol 描述的是 商品 ID 的列名

Trait　ALSParams：

1、rank　矩阵分解的秩，分解后的矩阵的秩　默认值是 10

2、numblocks　用户数据块的数量　默认值是 10

3、numItemBlocks　商品数据块的数量　默认值是 10

4、implicitPrefs　是否使用隐式偏好　默认值是 false

5、alpha　在隐式偏好方程中的系数，默认值是 1.0

6、ratingCol　评价矩阵的评价指标的列名　默认值是“rating”

Class ALSModel：

```
override def transform&dataset{ Dataset[_]'{ DataFrame :  {
 transformSchema&dataset,schema'
 -- Register a UDF for DataFrame} and then
 -- create a new column named map&predictionCol'  by running the predict UDF,
 val predict :  udi{ {&userFeatures{ Seq[Float]} itemFeatures{ Seq[Float]'  : ;
   if &userFeatures !:  null && itemFeatures !:  null' {
      blas,sdot&rank} userFeatures,toArray} / } itemFeatures,toArray} / '
   } else {
      Float,NaN
   }
 }
 dataset
   .join(userFactors*
      checkedCast&dataset&$ &userCol'',cast&DoubleType'' : : :  userFactors&id'"} "left"
```

```
    .join(itemFactors*
      checkedCast(dataset($(itemCol), cast(DoubleType) : : :  itemFactors(id"") "left"
    .select(dataset("*
      predict(userFactors(features"") itemFactors(features"") as($(predictionCol)
}
```

Object ALSModel：

Class ALS：

1、在这个类中有一些列的参数的设置

2、其核心是 fit 函数：

```
@Since("0,. ,. "
override def fit(dataset: Dataset[_]): ALSModel = {
  transformSchema(dataset,schema)
  import dataset,sparkSession,implicits,_
  val r :  if ($(ratingCol) !:  "" col($(ratingCol),cast(FloatType) else lit(/ ,. f)
  val ratings :  dataset
    ,select(checkedCast(col($(userCol),cast(DoubleType)*
      checkedCast(col($(itemCol),cast(DoubleType) r)
    ,rdd
    ,map { row : ;
      Rating(row,getInt( ) row,getInt( ) row,getFloat(0)
    }
```

```
  /*返回的是用户子矩阵和产品子矩阵*/
  val (userFactors, itemFactors) = ALS.train(ratings, rank = %(rank),
    numUserBlocks = %(numUserBlocks), numItemBlocks = %(numItemBlocks),
    maxIter = %(maxIter), regParam = %(regParam), implicitPrefs = %(implicitPrefs),
    alpha = %(alpha), nonnegative = %(nonnegative),
    intermediateRDDStorageLevel =
StorageLevel.fromString(%(intermediateStorageLevel)),
    finalRDDStorageLevel = StorageLevel.fromString(%(finalStorageLevel)),
    checkpointInterval = %(checkpointInterval), seed = %(seed))
  val userDF : userFactors,toDF&"id" "features"
  val itemDF : itemFactors,toDF&"id" "features"
  val model : new ALSModel&uid $ &rank' userDF itemDF' ,setParent&this'
  instrLog,logSuccess&model'
  copyValues&model'
}
```

函数分析：1、在函数中进行数据的检查

2、调用伴生对象 ALS 中的 train 方法，返回 userFactors, itemFactors

3、通过使用 userFactors, itemFactors 的方法得到用户矩阵和商品矩阵

4、得到两个矩阵，生成 ALSmodel。

Object ALS：在这个类中具体实现 ALS 算法。

```
/**
```

```
 * :: DeveloperApi ::
 * Implementation of the ALS algorithm.
 */
@DeveloperApi
def train[ID( ClassTag]( -- scalastyle(ignore
    ratings( RDD[Rating[ID]]*
    rank( Int : /. *
    numUserBlocks( Int : /. *
    numItemBlocks( Int : /. *
    maxIter( Int : /. *
    regParam( Double : /,. *
    implicitPrefs( Boolean : false*
    alpha( Double : /,. *
    nonnegative( Boolean : false*
    intermediateRDDStorageLevel( StorageLevel : StorageLevel,MEMORY_AND_DISK*
    finalRDDStorageLevel( StorageLevel : StorageLevel,MEMORY_AND_DISK*
    checkpointInterval( Int : /. *
    seed( Long : . L'&
    implicit ord( Ordering[ID]'( ((RDD[(ID, Array[Float]')] RDD[(ID, Array[Float]')] : {
  require(intermediateRDDStorageLevel !: StorageLevel,NONE*
    "ALS is not designed to run without persisting intermediate RDDs,"
  val sc : ratings,sparkContext
```

```
/*按照 0—9 的方式进行分片*/
  val userPart :  new ALSPartitioner&numUserBlocks'
  val itemPart :  new ALSPartitioner&numItemBlocks'
-(
numberOfLeadingZeros 这个方法返回二进制从左开始连续不为 . 的位数，这里传入 7，返回
06，就是前 06 位都为 .，06 和 1/ 取最小 numLocalIndexBits 是 06
(-
  val userLocalIndexEncoder :  new LocalIndexEncoder&userPart,numPartitions'
  val itemLocalIndexEncoder :  new LocalIndexEncoder&itemPart,numPartitions'
  val solver = if (nonnegative) new NNLSSolver else new CholeskySolver
  val blockRatings :  partitionRatings&ratings userPart itemPart'
    ,persist&intermediateRDDStorageLevel'
  val (userInBlocks, userOutBlocks) =
    makeBlocks('user', blockRatings, userPart, itemPart, intermediateRDDStorageLevel)
  // materialize blockRatings and user blocks
  userOutBlocks.count()
  val swappedBlockRatings :  blockRatings,map {
    case &userBlockId itemBlockId' RatingBlock&userIds itemIds localRatings'' :;
      &itemBlockId userBlockId' RatingBlock&itemIds userIds localRatings''
  }
  val &itemInBlocks itemOutBlocks' :
    makeBlocks&"item" swappedBlockRatings itemPart userPart
```

```
intermediateRDDStorageLevel'

  -- materialize item blocks

  itemOutBlocks,count&

  val seedGen :  new XORShiftRandom&seed'

  var userFactors :  initialize&userInBlocks, rank, seedGen,nextLong&'

  var itemFactors :  initialize&itemInBlocks, rank, seedGen,nextLong&'

  var previousCheckpointFile{ Option[String] :  None

  val shouldCheckpoint{ Int : ; Boolean :  &iter' : ;

    sc,checkpointDir,isDefined && checkpointInterval !:  -  /  && &iter $
checkpointInterval : :  . '

  val deletePreviousCheckpointFile{ & : ; Unit :  & : ;

    previousCheckpointFile,foreach { file : ;

      try {

        val checkpointFile :  new Path&file'

        checkpointFile,getFileSystem&sc,hadoopConfiguration' ,delete&checkpointFile,
true'

      } catch {

        case e{ IOException : ;

          logWarning&s"Cannot delete checkpoint file %file8", e'

      }

    }

  if &implicitPrefs' {
```

```
    for &iter <-   /  to maxIter' {
      userFactors,setName&s"userFactors-   % iter" ,persist&intermediateRDDStorageLevel'
        val previousItemFactors :  itemFactors
        itemFactors :  computeFactors&userFactors' userOutBlocks' itemInBlocks' rank'
regParam*
           userLocalIndexEncoder' implicitPrefs' alpha' solver'
        previousItemFactors,unpersist&

itemFactors,setName&s"itemFactors-   % iter" ,persist&intermediateRDDStorageLevel'
        -- TODO{ Generalize PeriodicGraphCheckpointer and use it here,
        val deps :  itemFactors,dependencies
        if &shouldCheckpoint&iter'' {
           itemFactors,checkpoint& -- itemFactors gets materialized in computeFactors
        }
        val previousUserFactors :  userFactors
        userFactors :  computeFactors&itemFactors' itemOutBlocks' userInBlocks' rank'
regParam*
           itemLocalIndexEncoder' implicitPrefs' alpha' solver'
        if &shouldCheckpoint&iter'' {
           ALS,cleanShuffleDependencies&sc' deps'
           deletePreviousCheckpointFile&
           previousCheckpointFile :  itemFactors,getCheckpointFile
```

```
        }
        previousUserFactors,unpersist&
      }
    } else {
      for &iter <-   .  until maxIter' {
        itemFactors :  computeFactors&userFactors, userOutBlocks, itemInBlocks, rank,
regParam*
          userLocalIndexEncoder, solver :  solver'
        if &shouldCheckpoint&iter'' {
          val deps :  itemFactors,dependencies
          itemFactors,checkpoint&
          itemFactors,count& -- checkpoint item factors and cut lineage
          ALS,cleanShuffleDependencies&sc, deps'
          deletePreviousCheckpointFile&
          previousCheckpointFile :  itemFactors,getCheckpointFile
        }
        userFactors :  computeFactors&itemFactors, itemOutBlocks, userInBlocks, rank,
regParam*
          itemLocalIndexEncoder, solver :  solver'
      }
    }
    val userIdAndFactors :  userInBlocks
```

```
    ,mapValues&_,srcIds'
    ,join&userFactors'
    ,mapPartitions&{ items : ;
      items,flatMap { case &_,ids, factors'' : ;
        ids,view,zip&factors'
      }
  -- Preserve the partitioning because IDs are consistent with the partitioners in
userInBlocks
    -- and userFactors,
    },preservesPartitioning :  true'
    ,setName&"userFactors"'
    ,persist&finalRDDStorageLevel'
  val itemIdAndFactors :  itemInBlocks
    ,mapValues&_,srcIds'
    ,join&itemFactors'
    ,mapPartitions&{ items : ;
      items,flatMap { case &_,ids, factors'' : ;
        ids,view,zip&factors'
      }
    },preservesPartitioning :  true'
    ,setName&"itemFactors"'
    ,persist&finalRDDStorageLevel'
```

```
  if (finalRDDStorageLevel != StorageLevel.NONE) {
    userIdAndFactors.count()
    itemFactors.unpersist()
    itemIdAndFactors.count()
    userInBlocks.unpersist()
    userOutBlocks.unpersist()
    itemInBlocks.unpersist()
    itemOutBlocks.unpersist()
    blockRatings.unpersist()
  }
  (userIdAndFactors, itemIdAndFactors)
}
```

1、方法参数：

ratings: RDD[Rating[ID]],
rank: Int = 10,
numUserBlocks: Int = 10,
numItemBlocks: Int = 10,
maxIter: Int = 10,
regParam: Double = 1.0,
implicitPrefs: Boolean = false,
alpha: Double = 1.0,
nonnegative: Boolean = false,
intermediateRDDStorageLevel:StorageLevel=StorageLevel.MEMORY_AND_DISK,
finalRDDStorageLevel: StorageLevel = StorageLevel.MEMORY_AND_DISK,
checkpointInterval: Int = 10,
seed: Long = 0L

2、代码解释说明

ALSPartitioner: 使用的是 HashPartitionser，就是按照 Hash 方法把输入的数据进行分片。

矩阵分解的方法:

使用两种矩阵分级方法，

```
/** Trait for least squares solvers applied to the normal equation. */
private[recommendation] trait LeastSquaresNESolver extends Serializable {
  /** Solves a least squares problem with regularization (possibly with other constraints).
*/
  def solve(ne: NormalEquation, lambda: Double): Array[Float]
}
```

Class NNLSSolver

Class CholeskySolver 说明:

```
/** Cholesky solver for least square problems. */
private[recommendation] class CholeskySolver extends LeastSquaresNESolver {
  /**
   * Solves a least squares problem with L2 regularization:
   *
   *   min norm(A x - b)^2^ + lambda * norm(x)^2^
   *
   * @param ne a [[NormalEquation]] instance that contains AtA, Atb, and n (number of
instances)
   * @param lambda regularization constant
   * @return the solution x
   */
```

```
  override def solve&ne{ NormalEquation* lambda{ Double'{ Array[Float] :  {

    val k :  ne,k

    -- Add scaled lambda to the diagonals of AtA,

    var i :  .

    var j :  0

    while &i < ne,trik' {

      ne,ata&i' ) :  lambda

      i ) :  j

      j ) :  /

    }

    CholeskyDecomposition,solve&ne,ata* ne,atb'

    val x :  new Array[Float]&k'

    i :  .

    while &i < k' {

      x&i' :  ne,atb&i',toFloat

      i ) :  /

    }

    ne,reset&

    x

  }

}
```

Case class Rating: 包括用户 ID ， 商品 ID，还有评分 rating。

方法 makeBlocks：

```
/**
 * Creates in/ blocks and out/ blocks from rating blocks.
 *
 * @param prefix prefix for in/out/ block names
 * @param ratingBlocks rating blocks
 * @param srcPart partitioner for src IDs
 * @param dstPart partitioner for dst IDs
 * @return (in/ blocks, out/ blocks)
 */
private def makeBlocks[ID( ClassTag](
    prefix( String*
    ratingBlocks( RDD[(Int, Int, RatingBlock[ID])]*
    srcPart( Partitioner*
    dstPart( Partitioner*
    storageLevel( StorageLevel) (
    implicit srcOrd( Ordering[ID]) ( (RDD[(Int, InBlock[ID])], RDD[(Int, OutBlock)]) = {
  val inBlocks = ratingBlocks.map {
    case (srcBlockId, dstBlockId), RatingBlock(srcIds, dstIds, ratings)) =>
      -- The implementation is a faster version of
      -- val dstIdToLocalIndex = dstIds.toSet.toSeq.sorted.zipWithIndex.toMap
```

```
        val start :  System,nanoTime&

        val dstIdSet :  new OpenHashSet[ID]&/  << 0. '

        dstIds,foreach&dstIdSet,add'

        val sortedDstIds :  new Array[ID]&dstIdSet,size'

        var i :  .

        var pos :  dstIdSet,nextPos&. '

        while &pos !:  -  / ' {

          sortedDstIds&i' :  dstIdSet,getValue&pos'

          pos :  dstIdSet,nextPos&pos )  / '

          i ) :  /

        }

        assert&i : :  dstIdSet,size'

        Sorting,quickSort&sortedDstIds'

        val dstIdToLocalIndex :  new OpenHashMap[ID' Int]&sortedDstIds,length'

        i :  .

        while &i < sortedDstIds,length'  {

          dstIdToLocalIndex,update&sortedDstIds&i' ' i'

          i ) :  /

        }

        logDebug&

          "Converting to local indices took " )  &System,nanoTime& -   start'  - / e7 )  "
seconds,"'
```

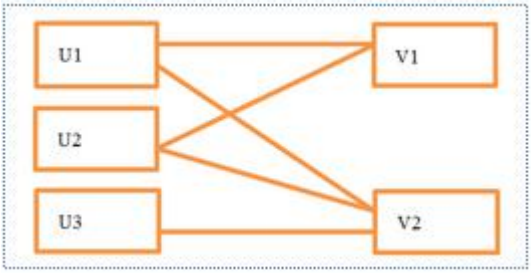
```
        val dstLocalIndices :  dstIds,map&dstIdToLocalIndex,apply'
        &srcBlockId' &dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings''
    },groupByKey&new ALSPartitioner&srcPart,numPartitions''
      ,mapValues { iter : ;
        val builder :
          new UncompressedInBlockBuilder[ID]&new
LocalIndexEncoder&dstPart,numPartitions''
        iter,foreach { case &dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings'  : ;
          builder,add&dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings'
        }
        builder,build&,compress&
      },setName&prefix )  "InBlocks"'
      ,persist&storageLevel'
    val outBlocks :  inBlocks,mapValues { case InBlock&srcIds' dstPtrs' dstEncodedIndices' _'
: ;
      val encoder :  new LocalIndexEncoder&dstPart,numPartitions'
      val activeIds :  Array,fill&dstPart,numPartitions' &mutable,ArrayBuilder,make[Int]'
      var i :  .
      val seen :  new Array[Boolean]&dstPart,numPartitions'
      while &i < srcIds,length'  {
        var j :  dstPtrs&i'
        ju,Arrays,fill&seen' false'
```

```
      while &j < dstPtrs&i ) /'' {
        val dstBlockId : encoder,blockId&dstEncodedIndices&j''
        if &seen&dstBlockId'' {
          activeIds&dstBlockId' ): i -- add the local index in this out- block
          seen&dstBlockId' : true
        }
        j ): /
      }
      i ): /
    }
    activeIds,map { x : ;
      x,result&
    }
  },setName&prefix ) "OutBlocks"'
    ,persist&storageLevel'
  &inBlocks outBlocks'
}
```

inBlocks 和 outBlocks 的解释和理解：

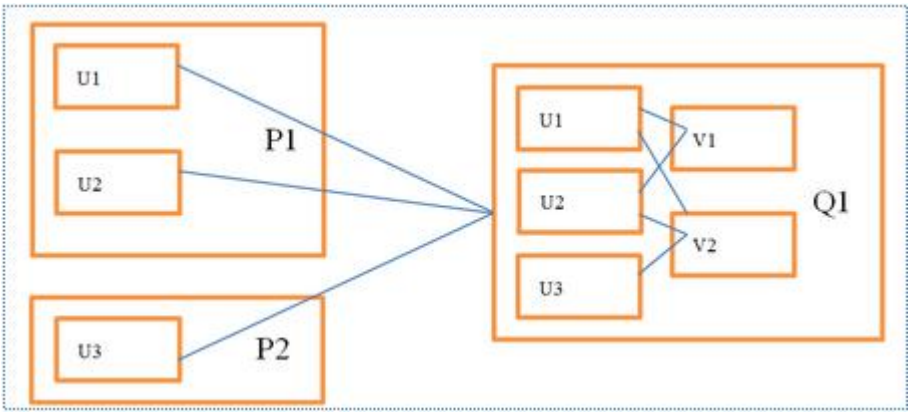
获取 inblocks 和 outblocks 数据是数据处理的重点。我们知道，通信复杂度是分布式实现一个算法时要重点考虑的问题，不同的实现可能会对性能产生很大的影响。我们假设最坏的情况：即求解商品需要的所有用户特征都需要从其它节

点获得。 如下图 3.1 所示，求解 v1 需要获得 u1,u2，求解 v2 需要获得 u1,u2,u3 等，在这种假设下，每步迭代所需的交换数据量是 O(m*rank)，其中 m 表示所有观察到的打分集大小，rank 表示特征数量。



从上图中，我们知道，如果计算 v1 和 v2 是在同一个分区上进行的，那么我们只需要把 u1 和 u2 一次发给这个分区就好了，而不需要将 u2 分别发给 v1,v2，这样就省掉了不必要的数据传输。

下图描述了如何在分区的情况下通过 U 来求解 V，注意节点之间的数据交换量减少了。使用这种分区结构，我们需要在原始打分数据的基础上额外保存一些信息。



在 Q1 中，我们需要知道和 v1 相关联的用户向量及其对应的打分，从而构建最小二乘问题并求解。这部分数据不仅包含原始打分数据，还包含从每个用户分区收到的向量排序信息，在代码里称作 InBlock。在 P1 中，我们要知道把 u1,u2

发给 Q1。我们可以查看和 u1 相关联的所有产品来确定需要把 u1 发给谁，但每次迭代都扫一遍数据很不划算，所以在 spark 的实现中只计算一次这个信息，然后把结果通过 RDD 缓存起来重复使用。这部分数据我们在代码里称作 OutBlock。所以从 U 求解 V，我们需要通过用户的 OutBlock 信息把用户向量发给商品分区，然后通过商品的 InBlock 信息构建最小二乘问题并求解。从 V 求解 U，我们需要商品的 OutBlock 信息和用户的 InBlock 信息。所有的 InBlock 和 OutBlock 信息在迭代过程中都通过 RDD 缓存。打分数据在用户的 InBlock 和商品的 InBlock 各存了一份，但分区方式不同。这么做可以避免在迭代过程中原始数据的交换。

makeBlocks:

```
/**
 * Creates in/ blocks and out/ blocks from rating blocks.
 *
 * @param prefix prefix for in/out/ block names
 * @param ratingBlocks rating blocks
 * @param srcPart partitioner for src IDs
 * @param dstPart partitioner for dst IDs
 * @return (in/ blocks, out/ blocks)
 */
private def makeBlocks[ID{ ClassTag]&
    prefix{ String*
    ratingBlocks{ RDD[&Int' Int' RatingBlock[ID]']*
```

```
    srcPart{ Partitioner*
    dstPart{ Partitioner*
    storageLevel{ StorageLevel' &
    implicit srcOrd{ Ordering[ID]'{ &RDD[&Int' InBlock[ID]']' RDD[&Int' OutBlock']' : {
  val inBlocks :  ratingBlocks,map {
    case &&srcBlockId' dstBlockId'' RatingBlock&srcIds' dstIds' ratings'' : ;
      -- The implementation is a faster version of
      -- val dstIdToLocalIndex :  dstIds,toSet,toSeq,sorted,zipWithIndex,toMap
      val start :  System,nanoTime&
      val dstIdSet :  new OpenHashSet[ID]&/  << 0. '
      dstIds,foreach&dstIdSet,add'
      val sortedDstIds :  new Array[ID]&dstIdSet,size'
      var i :  .
      var pos :  dstIdSet,nextPos&. '
      while &pos !:  -  / ' {
        sortedDstIds&i' :  dstIdSet,getValue&pos'
        pos :  dstIdSet,nextPos&pos )  / '
        i ) :  /
      }
      assert&i : :  dstIdSet,size'
      Sorting,quickSort&sortedDstIds'
      val dstIdToLocalIndex :  new OpenHashMap[ID' Int]&sortedDstIds,length'
```

```
        i : .
        while &i < sortedDstIds,length' {
          dstIdToLocalIndex,update&sortedDstIds&i'' i'
          i ) : /
        }
        val dstLocalIndices : dstIds,map&dstIdToLocalIndex,apply'
        &srcBlockId' &dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings''
    },groupByKey&new ALSPartitioner&srcPart,numPartitions''
      ,mapValues { iter : ;
        val builder :
          new UncompressedInBlockBuilder[ID]&new
LocalIndexEncoder&dstPart,numPartitions''
        iter,foreach { case &dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings' : ;
          builder,add&dstBlockId' srcIds' dstLocalIndices' ratings'
        }
        builder,build&,compress&
      },setName&prefix ) "InBlocks"
      ,persist&storageLevel'
  }
```

这段代码首先对 ratingBlocks 数据集作 map 操作，将 ratingBlocks 转换成（商品分区 id，（用户分区 id，商品集合，用户 id 在分区中相对应的位置，打

分）这样的集合形式。然后对这个数据集作 groupByKey 操作，以商品分区 id 为 key 值，处理 key 对应的值，将数据集转换成（商品分区 id，InBlocks）的形式。 这里值得我们去分析的是输入块（InBlock）的结构。

```
 val outBlocks = inBlocks.mapValues { case InBlock(srcIds, dstPtrs,
dstEncodedIndices, _) =>
      val encoder = new LocalIndexEncoder(dstPart.numPartitions)
      val activeIds =
Array.fill(dstPart.numPartitions)(mutable.ArrayBuilder.make[Int])
      var i = 0
      val seen = new Array[Boolean](dstPart.numPartitions)
      while (i < srcIds.length) {
        var j = dstPtrs(i)
        ju.Arrays.fill(seen, false)
        while (j < dstPtrs(i + 1)) {
          val dstBlockId = encoder.blockId(dstEncodedIndices(j))
          if (!seen(dstBlockId)) {
            activeIds(dstBlockId) += i // add the local index in this out-block
            seen(dstBlockId) = true
          }
          j += 1
        }
        i += 1
```

```
    }
    activeIds.map { x =>
      x.result()
    }
  }.setName(prefix + "OutBlocks")
    .persist(storageLevel)
```

这段代码中，inBlocks 表示用户的输入分区块，格式为（用户分区 id，（不重复的用户 id 集，用户位置偏移集，商品 id 集对应的编码集，打分集））。 activeIds 表示商品分区中涉及的用户 id 集，也即上文所说的需要发送给确定的商品分区的用户信息。activeIds 是一个二维数组，第一维表示分区，第二维表示用户 id 集。用户 OutBlocks 的最终格式是（用户分区 id，OutBlocks）。

通过用户的 OutBlock 把用户信息发给商品分区，然后结合商品的 InBlock 信息构建最小二乘问题，我们就可以借此解得商品的极小解。反之，通过商品 OutBlock 把商品信息发送给用户分区，然后结合用户的 InBlock 信息构建最小二乘问题，我们就可以解得用户解。 第（6）步会详细介绍如何构建最小二乘。

接着初始化用户特征矩阵和商品特征矩阵来进行交替计算。交换最小二乘算法是分别固定用户特征矩阵和商品特征矩阵来交替计算下一次迭代的商品特征矩阵和用户特征矩阵。通过下面的代码初始化第一次迭代的特征矩阵。

```
var userFactors = initialize(userInBlocks, rank, seedGen.nextLong())
var itemFactors = initialize(itemInBlocks, rank, seedGen.nextLong())
```

初始化后的 userFactors 的格式是（用户分区 id，用户特征矩阵 factors），其中 factors 是一个二维数组，第一维的长度是用户数，第二维的长度是 rank 数。初始化的值是异或随机数的 F 范式。itemFactors 的初始化与此类似。

```
for &iter <-  .  until maxIter' {
  itemFactors :  computeFactors&userFactors userOutBlocks itemInBlocks rank
regParam*
    userLocalIndexEncoder solver :  solver'
  if &shouldCheckpoint&iter'' {
    val deps :  itemFactors,dependencies
    itemFactors,checkpoint&
    itemFactors,count& -- checkpoint item factors and cut lineage
    ALS,cleanShuffleDependencies&sc deps'
    deletePreviousCheckpointFile&
    previousCheckpointFile :  itemFactors,getCheckpointFile
  }
  userFactors :  computeFactors&itemFactors itemOutBlocks userInBlocks rank
regParam*
    itemLocalIndexEncoder solver :  solver'
}
```

构建最小二乘的方法是在 computeFactors 方法中实现的。我们以商品 inblock 信息结合用户 outblock 信息构建最小二乘为例来说明这个过程。代码首先用用户 outblock 与 userFactor 进行 join 操作，然后以商品分区 id 为 key 进

行分组。每一个商品分区包含一组所需的用户分区及其对应的用户 factor 信息，格式即（用户分区 id 集，用户分区对应的 factor 集）。紧接着，用商品 inblock 信息与 merged 进行 join 操作，得到商品分区所需要的所有信息，即（商品 inblock，（用户分区 id 集，用户分区对应的 factor 集））。 有了这些信息，构建最小二乘的数据就齐全了。详细代码如下：

```
/**
 * Compute dst factors by constructing and solving least square problems.
 *
 * @param srcFactorBlocks src factors
 * @param srcOutBlocks src out/ blocks
 * @param dstInBlocks dst in/ blocks
 * @param rank rank
 * @param regParam regularization constant
 * @param srcEncoder encoder for src local indices
 * @param implicitPrefs whether to use implicit preference
 * @param alpha the alpha constant in the implicit preference formulation
 * @param solver solver for least squares problems
 * @return dst factors
```

```
val srcOut : srcOutBlocks,join&srcFactorBlocks',flatMap {
  case &srcBlockId' &srcOutBlock' srcFactors'' : ;
```

```
    srcOutBlock,view,zipWithIndex,map { case &activeIndices' dstBlockId' : ;
      &dstBlockId' &srcBlockId' activeIndices,map&idx : ; srcFactors&idx''''
    }
}
val merged :  srcOut,groupByKey&new ALSPartitioner&dstInBlocks,partitions,length''
dstInBlocks,join&merged'
```

我们知道求解商品值时，我们需要通过所有和商品关联的用户向量信息来构建最小二乘问题。这里有两个选择，第一是扫一遍 InBlock 信息，同时对所有的产品构建对应的最小二乘问题； 第二是对于每一个产品，扫描 InBlock 信息，构建并求解其对应的最小二乘问题。第一种方式复杂度较高，具体的复杂度计算在此不作推导。spark 选取第二种方法求解最小二乘问题，同时也做了一些优化。做优化的原因是二种方法针对每个商品，都会扫描一遍 InBlock 信息，这会浪费较多时间，为此，将 InBlock 按照商品 id 进行排序（前文已经提到过），我们通过一次扫描就可以创建所有的最小二乘问题并求解。 构建代码如下所示：

```
while (j < dstIds.length) {
  ls.reset()
  var i = srcPtrs(j)
  var numExplicits = 0
  while (i < srcPtrs(j + 1)) {
    val encoded = srcEncodedIndices(i)
    val blockId = srcEncoder.blockId(encoded)
    val localIndex = srcEncoder.localIndex(encoded)
```

```
      val srcFactor = sortedSrcFactors(blockId)(localIndex)
      val rating = ratings(i)
      ls.add(srcFactor, rating)
      numExplicits += 1
      i += 1
    }
     dstFactors(j) = solver.solve(ls, numExplicits * regParam)
    j += 1
}
```

如何进行矩阵分解呢？

因为相应的评价都是非负数，所以在进行矩阵分解的时候，使用的非负最小二乘法进行分解。

1 最小二乘法

1.1 最小二乘问题

在某些最优化问题中，目标函数由若干个函数的平方和构成，它的一般形式如下所示：

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x), \qquad (1.1)$$

其中 x=（x1,x2,…,xn），一般假设 m>=n。把极小化这类函数的问题称为最小二乘问题。

$$\min \ F(x) = \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x), \qquad (1.2)$$

当$f_{i}(x)$为 x 的线性函数时，称（1.2）为线性最小二乘问题，当$f_{i}(x)$为 x 的非线性函数时，称（1.2）为非线性最小二乘问题。

1.2 线性最小二乘问题

在公式（1.1）中，假设

$$f_i(x) = p_i^T x - b_i \quad , \qquad i = 1, \dots, i \qquad (1.3)$$

其中，p 是 n 维列向量，bi 是实数，这样我们可以用矩阵的形式表示（1.1）式。令:

$$A = \begin{bmatrix} p_1^T \\ \vdots \\ p_m^T \end{bmatrix} \quad , \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

A 是 m * n 矩阵，b 是 m 维列向量。则:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_m(x) \end{bmatrix} = (Ax - b)^T (Ax - b)$$
$$= x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b \qquad (1.4)$$

因为 F(x)是凸的，所以对（1.4）求导可以得到全局极小值，令其导数为 0，我们可以得到这个极小值。

$$\nabla F(x) = 2A^T A x - 2A^T b = 0$$
$$\Longrightarrow \quad A^T A x = A^T b \qquad (1.5)$$

假设 A 为满秩，$A^{T}A$为 n 阶对称正定矩阵，我们可以求得 x 的值为以下的形式：

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b \qquad (1.6)$$

1.3 非线性最小二乘问题

假设在(1.1)中，$f_{i}(x)$为非线性函数，且 F(x)有连续偏导数。由于$f_{i}(x)$为非线性函数，所以（ 1.2 ）中的非线性最小二乘无法套用（ 1.6 ）中的公式求得。解这类问题的基本思想是，通过解一系列线性最小二乘问题求非线性最小二乘问题的解。设$x^{(k)}$是解的第 k 次近似。在$x^{(k)}$时，将函数$f_{i}(x)$线性化，从而将非线性最小二乘转换为线性最小二乘问题， 用（ 1.6 ）中的公式求解极小点$x^{(k+1)}$ ，把它作为非线性最小二乘问题解的第 k+1 次近似。然后再从$x^{(k+1)}$出发，继续迭代。下面将来推导迭代公式。令

$$\varphi_i(\mathrm{x}) = f_i\left(x^{(k)}\right) + \nabla f_i(x^{(k)})^T(x - x^{(k)})$$

$$= \nabla f_i(x^{(k)})^T x - \left[\nabla f_i\left(x^{(k)}\right)^T x^{(k)} - f_i\left(x^{(k)}\right)\right] \ , i = 1,2,\dots,m \qquad (1.7)$$

上式右端是$f_{i}(x)$在$x^{(k)}$处展开的一阶泰勒级数多项式。令

$$\emptyset(\mathrm{x}) = \sum_{i=1}^{m} \varphi_i^2(x) \qquad (1.8)$$

用∅(x)近似 F(x)，从而用∅(x)的极小点作为目标函数 F(x)的极小点的估计。现在求解线性最小二乘问题:

$$\min \quad \emptyset(\mathrm{x}) \qquad (1.9)$$

把（ 1.9 ）写成

$$\emptyset(\mathrm{x}) = (A_k\mathrm{x} - \mathrm{b})^T(A_k x - b) \qquad (1.10)$$

在公式（1.10）中，

$$A_k = \begin{bmatrix} \nabla f_1(x^{(k)})^T \\ \vdots \\ \nabla f_m(x^{(k)})^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x^{(k)})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1(x^{(k)})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(x^{(k)})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m(x^{(k)})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{b} = \begin{bmatrix} \nabla f_1(x^{(k)})^T x^{(k)} - f_1\left(x^{(k)}\right) \\ \vdots \\ \nabla f_m(x^{(k)})^T x^{(k)} - f_m\left(x^{(k)}\right) \end{bmatrix} = A_k x^{(k)} - f^{(k)}$$

将A_{k}和 b 带入公式（1.5）中，可以得到，

$$A_k^T A_k\left(\mathrm{x} - x^{(k)}\right) = -A_k^T f^{(k)} \qquad (1.11)$$

如果A_{k}为列满秩，且$A_{k}^{T}A_{k}$是对称正定矩阵，那么由（1.11）可以得到 x 的极小值。

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (A_k^T A_k)^{-1} A_k^T f^{(k)} \qquad (1.12)$$

可以推导出$2A_{k}^{T}f_{k}$是目标函数 F(x)在$x^{(k)}$处的梯度，$2A_{k}^{T}A_{k}$是函数∅(x)的海森矩阵。所以（1.12）又可以写为如下形式。

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - {H_k}^{-1}\nabla \mathrm{F}(\mathrm{x}^{(k)}) \qquad (1.13)$$

公式（1.13）称为 Gauss-Newton 公式。向量

$$d^{(k)} = -(A_k^T A_k)^{-1} A_k^T f^{(k)} \qquad (1.14)$$

为点$x^{(k)}$处的 Gauss-Newton 方向。为保证每次迭代能使目标函数值下降（至少不能上升），在求出$d^{(k)}$后，不直接使用$x^{(k)}+d^{(k)}$作为 k+1 次近似，而是从$x^{(k)}$出发，沿$d^{(k)}$方向进行一维搜索。

$$\min_{\lambda} \; F\left(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}\right) \qquad (1.15)$$

求出步长$\lambda ^{(k)}$后，令

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \lambda d^{(k)} \qquad (1.16)$$

最小二乘的计算步骤如下:

（1） 给定初始点$x^{(1)}$，允许误差ε>0，k=1

（2） 计算函数值$f_{i}(x)$，得到向量$f^{(k)}$，再计算一阶偏导，得到 m*n 矩阵$A_{(k)}$

（3） 解方程组（1.14）求得 Gauss-Newton 方向$d^{(k)}$

（4）从$x^{(k)}$出发，沿着$d^{(k)}$作一维搜索，求出步长$\lambda ^{(k)}$ ，并令$x^{(k+1)}=x^{(k)}-\lambda d^{(k)}$

（5）若$||x^{(k+1)}-x^{(k)}||<=\epsilon$停止迭代，求出 x，否则，k=k+1，返回步骤（2）

在某些情况下，矩阵$A^{T}A$是奇异的，这种情况下，我们无法求出它的逆矩阵，因此我们需要对其进行修改。用到的基本技巧是将一个正定对角矩阵添加到$A^{T}A$上，改变原来矩阵的特征值结构，使其变成条件较好的对称正定矩阵。 典型的算法是 Marquardt。

$$d^{(k)} = -(A_k^T A_k + \alpha_k I)^{-1} A_k^T f^{(k)} \qquad (1.17)$$

其中，I 是 n 阶单位矩阵，alpha 是一个正实数。当 alpha 为 0 时，$d^{(k)}$就是 Gauss-Newton 方向，当 alpha 充分大时，这时$d^{(k)}$接近 F(x)在$x^{(k)}$处的最速下降方向。

2 共轭梯度法

2.1 共轭方向

定义 2.1 设 A 是 n*n 对称正定矩阵，若两个方向$d^{(1)}$ 和$d^{(2)}$满足

$$d^{(1)T}Ad^{(2)} = 0 \qquad (2.1)$$

则称这两个方向关于 A 共轭。若$d^{(1)},d^{(2)},...,d^{(k)}$是 k 个方向，它们两两关于 A 共轭，则称这组方向是关于 A 共轭的。即

$$d^{(i)T}Ad^{(j)} = 0, i \neq j; i, j = 1, \ldots, k \qquad (2.2)$$

在上述定义中，如果 A 是单位矩阵，那么两个方向关于 A 共轭等价于两个方向正交。如果 A 是一般的对称正定矩阵，$d^{(i)}$与$d^{(j)}$共轭，就是$d^{(i)}$与$Ad^{(j)}$正交。共轭方向有一些重要的性质。

定理 2.1 设 A 是 n 阶对称正定矩阵，$d^{(1)},d^{(2)},...,d^{(k)}$是 k 个 A 的共轭的非零向量，则这个向量组线性无关。

定理 2.2 (扩张子空间定理） 设有函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + c$$

其中，A 是 n 阶对称正定矩阵，$d^{(1)},d^{(2)},...,d^{(k)}$是 k 个 A 的共轭的非零向量，以任意的$x^{(1)}$为初始点， 沿$d^{(1)},d^{(2)},...,d^{(k)}$进行一维搜

索，得到$x^{(2)},x^{(3)},...,x^{(k+1)}$，则$d^{(k+1)}$是线性流型$x^{(1)}+H_{k}$上的唯一极小点，特别的，当 k=n 时，$x^{(n+1)}$是函数 f(x)的唯一极小点。其中，

$$H_k = \left\{ x \middle| x = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i d^{(i)}, \lambda_i \in (-\infty, +\infty) \right\}$$

是$d^{(1)},d^{(2)},...,d^{(k)}$生成的子空间。

考虑问题

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c \qquad (2.3)$$

其中 A 是对称正定矩阵，c 是常数。

具体求解方式如下：

首先给定任何一个初始点$x^{(1)}$，计算目标函数 f(x)在这点的梯度$g_{(1)}$，若$||g_{(1)}||=0$，则停止计算；否则令:

$$d^{(1)} = -\nabla f\left(x^{(1)}\right) = -g_1 \qquad (2.4)$$

沿方向$d^{(1)}$搜索，得到点$x^{(2)}$。计算$x^{(2)}$处的梯度，若$||g_{(2)}||!=0$，则利用$g_{(2)}$和$d^{(1)}$构造第二个搜索方向$d^{(2)}$，再沿$d^{(2)}$搜索。

一般的，若已知$x^{(k)}$和搜索方向$d^{(k)}$，则从$x^{(k))}$出发，沿方向$d^{(k)}$搜索，得到

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)} \qquad (2.5)$$

其中步长 lambda 满足

$$f\left(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}\right)=\min f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})$$

此时可以求得 lambda 的显式表达。令

$$\varphi(\lambda)=f\left(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}\right)$$

通过求导可以求上面公式的极小值，即

$$\varphi'(\lambda)=\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)}=0 \qquad (2.6)$$

根据二次函数梯度表达式，（2.6）式可以推出如下方程

$$(Ax^{(k+1)}+b)^T d^{(k)}=0 \Rightarrow (A(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)})+b)^T d^{(k)}=0$$
$$\Rightarrow (g_k+\lambda_k A d^{(k)})^T d^{(k)}=0 \qquad (2.7)$$

由（2.7）式可以得到

$$\lambda_k=-\frac{g_k^T d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \qquad (2.8)$$

计算 f(x)在$x^{(k+1)}$处的梯度，若$||g_{k+1}||=0$ ，则停止计算， 否则用$g_{(k+1)}$和$d^{(k)}$构造下一个搜索方向$d^{(k+1)}$ ，并使$d^{(k)}$与$d^{(k+1)}$共轭。按照这种设想，令

$$d^{(k+1)}=-g_{k+1}+\beta_k d^{(k)} \qquad (2.9)$$

在公式（2.9）两端同时乘以$d^{(k)T}A$，并令

$$d^{(k)T} A d^{(k+1)}=-d^{(k)T} A g_{k+1}+\beta_k d^{(k)T} A d^{(k)}=0 \qquad (2.10)$$

可以求得

$$\beta_k=\frac{d^{(k)T} A g_{k+1}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \qquad (2.11)$$

再从$x^{(k+1)}$出发，沿$d^{(k+1)}$方向搜索。综上分析 ，在第 1 个搜索方向取负梯度的前提下，重复使用公式（2.5）、（2.8）、（2.9）、（2.11），我们就能够构造一组搜索方向。当然，前提是这组方向是关于 A 共轭的。 定理 2.3 说明了这组方向是共轭的。

定理 2.3 对于正定二次函数(2.3),具有精确一维搜索的的共轭梯度法在 m<=n 次一维搜索后终止，并且对于所有 i(1<=i<=m)，下列关系成立：

$$
\begin{aligned}
&(1)\quad d^{(i)T}Ad^{(j)} = 0\,,(j = 1,2,..,i-1)\\
&(2)\quad g_i^T g_j = 0\,,(j = 1,2,..,i-1)\\
&(3)\quad g_i^T d^{(i)} = -g_i^T g_i\ \ ,(d^{(i)} \neq 0)
\end{aligned}
$$

还可以证明，对于正定二次函数，运用共轭梯度法时，不做矩阵运算也可以计算变量 beta_k。

定理 2.4 对于正定二次函数，共轭梯度法中因子 beta_k 具有下列表达式

$$\beta_k = \frac{\| g_{k+1} \|^2}{\| g_k \|^2}, k \geq 1\,; g_k \neq 0 \qquad (2.12)$$

对于二次凸函数，共轭梯度法的计算步骤如下：

（1） 给定初始点$x^{(1)}$，设 k=1；

（2） 计算$g_k = \nabla f(x^{(k)})$，若$\| g_k \| = 0$，则停止计算，得出极小值点。否则进行下一步；

（3） 构造搜索方向，令

$$d^{(k)} = -g_k + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$$

当 k=1 时，β_{k-1}=0，当 k>0 时，$\beta_{k-1} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}$；

（4） 令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$，按照$\lambda_k = -\frac{g_k^T d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}$计算步长$\lambda_k$；

（5） 若 k=n，则停止计算，得出极小值点。否则 k=k+2，返回步骤（2）。

2.2 共轭梯度法

3 最小二乘法在 spark 中的具体实现

Spark ml 中解决最小二乘可以选择两种方式，一种是非负正则化最小二乘，一种是乔里斯基分解（Cholesky）。

乔里斯基分解分解是把一个对称正定的矩阵表示成一个上三角矩阵 U 的转置和其本身的乘积的分解。在 ml 代码中，直接调用 netlib-java 封装的 dppsv 方法实现。

```
lapack.dppsv(“u”, k, 1, ne.ata, ne.atb, k, info)
```

可以深入 dppsv 代码（Fortran 代码）了解更深的细节。我们分析的重点是非负正则化最小二乘的实现，因为在某些情况下，方程组的解为负数是没有意义的。虽然方程组可以得到精确解，但却不能取负值解。在这种情况下，其非负最小二乘解比方程的精确解更有意义。非负最小二乘问题要求解的问题如下公式

$$\min_x \ \frac{1}{2} x^T \text{ata} x^T + x^T \text{atb} \ , \ \ x \geq 0 \qquad (3.1)$$

其中 ata 是半正定矩阵。

在 ml 代码中，org.apache.spark.mllib.optimization.NNLS 对象实现了非负最小二乘算法。该算法结合了投影梯度算法和共轭梯度算法来求解。

```
class Workspace&val n{ Int' {
  val scratch : new Array[Double]&n'
  val grad : new Array[Double]&n'          --梯度投影
  val x : new Array[Double]&n'
  val dir : new Array[Double]&n'          --搜索方向
  val lastDir : new Array[Double]&n'
  val res : new Array[Double]&n'          --梯度

  def wipe&{ Unit : {
    ju,Arrays,fill&scratch . ,. '
    ju,Arrays,fill&grad . ,. '
    ju,Arrays,fill&x . ,. '
    ju,Arrays,fill&dir . ,. '
    ju,Arrays,fill&lastDir . ,. '
    ju,Arrays,fill&res . ,. '
  }
```

在 Workspace 中，res 表示梯度，grad 表示梯度的投影，dir 表示迭代过程中的搜索方向（共轭梯度中的搜索方向$d^{(k)}$），scratch 代表公式（2.8）中的 $d^{(k)T}A$。

NNLS 对象中，sort 方法用来解最小二乘，它通过迭代求解极小值。我们将分步骤剖析该方法。

具体的方法在：solve 中

```
/**
 * Solve a least squares problem, possibly with nonnegativity constraints, by a modified
 * projected gradient method.  That is, find x minimising ||Ax - b||_2 given A^T A
and A^T b.
 *
 * We solve the problem
 *     min_x         1/2 x^T ata x^T -  x^T atb
 *     subject to x >= 0
 *
 * The method used is similar to one described by Polyak (B. T. Polyak, The conjugate
gradient
 * method in extremal problems, Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. 9(4)(1969), pp. 94- 112)
for bound-
 * constrained nonlinear programming.  Polyak unconditionally uses a conjugate
gradient
 * direction, however, while this method only uses a conjugate gradient direction if the
last
 * iteration did not cause a previously- inactive constraint to become active.
 */
```

```
def solve&ata{ Array[Double]} atb{ Array[Double]} ws{ Workspace'{ Array[Double] :  {
  ws,wipe&
  val n :  atb,length
  val scratch :  ws,scratch
  -- find the optimal unconstrained step
  def steplen&dir{ Array[Double]} res{ Array[Double]'{ Double :  {
    val top :  blas,ddot&n dir / res / '
    blas,dgemv&"N" n n / ,. ata n dir / . ,. scratch / '
    -- Push the denominator upward very slightly to avoid infinities and silliness
    top - &blas,ddot&n scratch / dir / ' )  / e-  0. '
  }


  -- stopping condition
  def stop&step{ Double ndir{ Double nx{ Double'{ Boolean :  {
       &&step,isNaN'  -- NaN
    || &step < / e-  5'  -- too small or negative
    || &step ; / e2. '  -- too small{ almost certainly numerical problems
    || &ndir < / e-  / 0 (  nx'  -- gradient relatively too small
    || &ndir < / e-  10'  -- gradient absolutely too small{ numerical issues may lurk
    '

  }
```

```
val grad :  ws,grad

val x :  ws,x

val dir :  ws,dir

val lastDir :  ws,lastDir

val res :  ws,res

val iterMax :  math,max&2. . ' 0.  (  n'

var lastNorm :  . ,.

var iterno :  .

var lastWall :  .  -- Last iteration when we hit a bound constraint,

var i :  .

while &iterno < iterMax' {

   -- find the residual

   blas,dgemv&"N"' n' n' / ,. ' ata' n' x' / ' . ,. ' res' / '

   blas,daxpy&n' -  / ,. ' atb' / ' res' / '

   blas,dcopy&n' res' / ' grad' / '

   -- project the gradient

   i :  .

   while &i < n' {

      if &grad&i' ; . ,.  && x&i' : :  . ,. ' {

         grad&i' :  . ,.

      }

      i :  i )  /
```

```
}

val ngrad :  blas,ddot&n grad / grad / '

blas,dcopy&n grad / dir / '

-- use a CG direction under certain conditions

var step :  steplen&grad res'

var ndir :  . ,.

val nx :  blas,ddot&n x / x / '

if &iterno ; lastWall )  / '  {

   val alpha :  ngrad - lastNorm

   blas,daxpy&n alpha lastDir / dir / '

   val dstep :  steplen&dir res'

   ndir :  blas,ddot&n dir / dir / '

   if &stop&dstep ndir nx''  {

      -- reject the CG step if it could lead to premature termination

      blas,dcopy&n grad / dir / '

      ndir :  blas,ddot&n dir / dir / '

   } else {

      step :  dstep

   }

} else {

   ndir :  blas,ddot&n dir / dir / '

}
```

```
-- terminate<
if &stop&step' ndir' nx'' {
   return x,clone
}

-- don't run through the walls
i :  .
while &i < n' {
   if &step (  dir&i' ; x&i'' {
      step :  x&i'  - dir&i'
   }
   i :  i )  /
}
-- take the step
i :  .
while &i < n' {
   if &step (  dir&i' ; x&i' (  &/  -    / e-   / 2'' {
      x&i' :  .
      lastWall :  iterno
   } else {
      x&i' -  :  step (  dir&i'
```

```
      }

      i :  i ) /

    }



    iterno :  iterno ) /

    blas,dcopy&n' dir' / ' lastDir' / '

    lastNorm :  ngrad

  }

  x,clone

}
```