Paolo Speziali

Tesina di
Signal Processing and Optimization for Big Data
del Prof. Paolo Banelli

Low-Rank Matrix Completion con implementazione e verifica sperimentale

Perugia, Anno Accademico 2022/2023
Università degli Studi di Perugia
Corso di laurea magistrale in Ingegneria Informatica e Robotica
Curriculum Data Science
Dipartimento di Ingegneria

A.D. 1308
unipg
DIPARTIMENTO
DI INGEGNERIA

0. Indice

1. Introduzione

Lo scopo di questa tesina è l'implementazione in ambiente MATLAB di alcuni algoritmi atti a risolvere il problema dello stimare i valori mancanti di una matrice di cui abbiamo a disoposizione solo un sottoinsieme limtato di entry.

2. Concetti teorici

2.1 Formulazione del problema

Sia $M \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$ con rango r, e sia data la sua scomposizione ai valori singolari (SVD):

$$M = U\Sigma V^T \quad \text{con} \quad U \in \mathbb{R}^{n_1 \times r},\ \Sigma \in \mathbb{R}^{r \times r},\ V \in \mathbb{R}^{n_2 \times r}$$

dove U e V sono composte da colonne ortonormali, e Σ è una matrice diagonale con i valori singolari ordinati in modo non crescente ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$).

I **gradi di libertà** di M sono $(n_1+n_2-r)r$, che è il numero totale di parametri necessari per specificare univocamente la matrice M.

Supponiamo di avere delle osservazioni parziali di M su un insieme di indici

$$\Omega \subset \{1, 2, \ldots, n_1\} \times \{1, 2, \ldots, n_2\}$$

e definiamo l'**operatore di osservazione** $\mathcal{P}_\Omega : \mathbb{R}^{n_1 \times n_2} \to \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$ come segue:

$$[\mathcal{P}_\Omega(M)]_{ij} = \begin{cases} M_{ij}, & \text{se } (i,j) \in X \\ 0, & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Il nostro obiettivo è recuperare M da $\mathcal{P}_\Omega(M)$ quando il numero di osservazioni $m = |\Omega| \ll n_1 n_2$, ovvero quando è molto più piccolo del numero di elementi in M, e sotto l'assunzione che M sia a basso rango, ovvero $r \ll \min(n_1, n_2)$. Per semplicità notazionale, poniamo $n = \max(n_1, n_2)$.

2.2 Soluzione del problema

Quali tipi di matrici a basso rango possiamo completare? Consideriamo le matrici M_1 e M_2 di rango 1 e di dimensione 4×4:

$$M_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

La matrice M_1 è più difficile da completare poiché la maggior parte delle sue voci sono nulle e quindi abbiamo bisogno di raccogliere più misure per assicurarsi che abbastanza "massa" venga dalle sue voci non nulle. Al contrario, la massa di M_2 è distribuita più uniformemente su tutte le voci, rendendolo più facile da propagare da una voce all'altra.

In altre parole, una matrice a basso rango è più facile da completare se la sua energia si distribuisce uniformemente su diverse coordinate. Questa proprietà è catturata dalla **coerenza**, che misura l'allineamento tra lo spazio delle colonne/righe della matrice a basso rango con i vettori della base standard.

Per una matrice $U \in \mathbb{R}^{n_1 \times r}$ con colonne ortonormali, P_U rappresenta la proiezione ortogonale sullo spazio delle colonne di U. La **coerenza** di U è definita come segue:

$$\mu(U) = \frac{n_1}{r} \max_{1 \leq i \leq n_1} \left\| P_U \, \underline{e}_i \right\|_2^2 = \frac{n_1}{r} \max_{1 \leq i \leq n_1} \left\| U^T \, \underline{e}_i \right\|_2^2$$

dove $\underline{e}_i$ è l'i-esimo vettore della base canonica.

Per una matrice a basso rango M il cui SVD è data da $M = U\Sigma V^T$, la coerenza di M è definita come:

$$\mu = max\{\mu(U), \mu(V)\}$$

Si noti che la coerenza μ è determinata dai vettori singolari di M ed è indipendente dai suoi valori singolari.

Poiché $1 \leq \mu(U) \leq \frac{n_1}{r}$ e $1 \leq \mu(V) \leq \frac{n_2}{r}$, abbiamo $1 \leq \mu \leq \frac{n}{r}$. Nell'esempio precedente, la coerenza di M_1 coincide con il limite superiore $\frac{n}{r}$, mentre quella di M_2 coincide con il limite inferiore 1. Più μ è piccolo, più è facile completare la matrice.

Possiamo incontrare alcune matrici la cui ricostruzione non è possibile, un esempio sarebbe una matrice con tutti i valori eccetto quelli di una colonna completamente mancante, essa non potrà essere recuperata in quanto potrebbe giacere ovunque nello spazio delle colonne della matrice. Ci servono quindi almeno r osservazioni per colonna/riga.

Per evitare di incorrere in questi casi sfavorevoli, supponiamo di star utilizzando un pattern di osservazione causale che segua un modello di distribuzione di probabilità noto come **Bernoulli**, per cui ogni valore viene osservato indipendentemente e con probabilità uguale a $p := \frac{m}{n_1 \cdot n_2}$.

Non è possibile recuperare una matrice a basso rango con un numero di osservazioni ad uno dell'ordine di $O(\mu n r \log n)$ utilizzando un qualsiasi algoritmo, questo è noto come l'**information-theoretic lower bound**. Rispetto ai gradi di libertà, che sono dell'ordine di nr, paghiamo un prezzo in complessità di campionamento di un fattore $\mu \log n$, mettendo ancora una volta in evidenza il ruolo della coerenza nel completamento di matrici a basso rango.

2.2.1 Completamento di matrici tramite ottimizzazione convessa

Cercando di sfruttare la struttura a basso rango della soluzione, un'euristica naturale è trovare la matrice con rango minore che permette tali osservazioni:

$$\min_{\Phi \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}} \quad rank(\Phi)$$

$$s.t. \;\; \mathcal{P}_\Omega(\Phi) = \mathcal{P}_\Omega(M)$$

Tuttavia, essendo la minimizzazione del rango un problema NP-arduo, tale formulazione non è intrattabile, possiamo tuttavia pensare a un possibile rilassamento di questa euristica.

Notando che il rango di Φ è uguale al numero dei suoi valori singolari non nulli, sostituiamo $rank(\Phi)$ con la somma dei suoi valori singolari, indicata come **nuclear norm**:

$$\|\Phi\|_* \triangleq \sum_{i=1}^{n} \sigma_i(\Phi)$$

Quindi, invece di risolvere direttamente il problema visto precedentemente, risolviamo la minimizzazione della nuclear norm, che cerca una matrice con la nuclear norm minima che soddisfa tutte le misurazioni:

$$\min_{\Phi \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}} \quad \|\Phi\|_*$$

$$s.t. \;\; \mathcal{P}_\Omega(\Phi) = \mathcal{P}_\Omega(M)$$

Si ottiene così un programma convesso che può essere risolto in modo efficiente in tempo polinomiale. Inoltre, non richiede la conoscenza del rango a priori.

La minimizzazione della nuclear norm può recuperare esattamente una matrice di basso rango non appena il numero di misurazioni è leggermente più grande dell'information-theoretic lower bound di un fattore logaritmico. Supponiamo che ogni valore della matrice M venga osservato indipendentemente con una probabilità $p \in (0, 1)$. Se:

$$p \leq C \, \frac{\mu r \log^2 n}{n}$$

per una qualche $C > 0$ abbastanza grande, allora con grande probabilità l'algoritmo recupera esattamente la matrice M come soluzione ottima.

2.2.2 Completamento di matrici tramite ottimizzazione non convessa

L'algoritmo appena visto può essere particolarmente costoso in termini di tempo e memoria per problemi su larga scala a causa del dover ottimizzare e memorizzare la variabile Φ. Pertanto, è necessario considerare approcci alternativi che scalino in modo più favorevole con n. Ciò porta al secondo algoritmo basato su gradient descent utilizzando un'inizializzazione adeguata.

Se il rango della matrice M è noto, è naturale incorporare questa conoscenza e considerare un problema least-square vincolato al rango:

$$\min_{\Phi \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}} \quad \|\mathcal{P}_\Omega(\Phi - M)\|_F^2$$

$$s.t. \;\; rank(\Phi) \leq r$$

dove $\|\cdot\|_F$ è la **Frobenius norm** di una matrice. Utilizzando la fattorizzazione a basso rango $\Phi = XY^T$ dove $X \in \mathbb{R}^{n_1 \times r}$ e $Y \in \mathbb{R}^{n_2 \times r}$, riscriviamo il problema qui sopra come un problema d'ottimizzazione non vincolato e non convesso:

$$\min_{X,Y} \; f(X,Y) := \left\|\mathcal{P}_\Omega(XY^T - M)\right\|_F^2$$

Le complessità a livello di memoria di X e Y sono lineari in n. Introduciamo una loss function modificata per sistemare alcuni problemi di scalabilità e avere norme bilanciate:

$$F(X,Y) = \frac{1}{4p} f(X,Y) + \frac{1}{16}\left\|X^TX - Y^TY\right\|_F^2$$

$$= \frac{1}{4p}\left\|\mathcal{P}_\Omega(XY^T - M)\right\|_F^2 + \frac{1}{16}\left\|X^TX - Y^TY\right\|_F^2$$

I cui gradienti rispetto a X e a Y sono:

$$\frac{\partial F(X,Y)}{\partial X} = \frac{1}{4p}((\mathcal{P}_\Omega(XY^T - M))Y) + \frac{1}{8}X(X^TX - Y^TY)$$

$$\frac{\partial F(X,Y)}{\partial Y} = \frac{1}{4p}(X^T(\mathcal{P}_\Omega(XY^T - M)))^T + \frac{1}{8}Y(X^TX - Y^TY)$$

La probabilità p delle osservazioni può essere stimata com $p = \frac{|\Omega|}{n_1 \cdot n_2}$.
Ma come facciamo a ottimizzare la loss non convessa $F(X, Y)$?

1. Troviamo un'inizializzazione "spettrale" che sia vicina alla verità di base. Consideriamo la matrice parzialmente osservata $\frac{1}{p}\mathcal{P}_\Omega(M)$, che è una stima non polarizzata di M con valore atteso pari a $E[\frac{1}{p}\mathcal{P}_\Omega(M)] = M$. Perciò, un'approssimazione best rank-r produce una stima iniziale adeguata.

   Sia tale approssimazione $U_0\Sigma_0 V_0^T$, inizializzeremo con:

   $$X_0 = U_0\Sigma_0^{1/2} \quad \text{e} \quad Y_0 = V_0\Sigma_0^{1/2}$$

2. Raffiniamo la stima iniziale con semplici metodi iterativi secondo la seguente regola d'aggiornamento:

   $$\begin{bmatrix} X_{t+1} \\ Y_{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_t \\ Y_t \end{bmatrix} - \eta_t \begin{bmatrix} \nabla_X F(X_t, Y_t) \\ \nabla_Y F(X_t, Y_t) \end{bmatrix}$$

   dove η_t è la step-size.

Data la costante $\kappa = \sigma_1/\sigma_r$, se la step-size $0 < \eta_t \equiv \eta \leq 2/(25 \cdot \kappa \cdot \sigma_1)$ e se il numero di osservazioni è dell'ordine di $\mu^3 r^3 n \log^3 n$, perciò se:

$$p \leq C \, \frac{\mu^3 r^3 n \log^3}{n}$$

per una qualche $C > 0$ abbastanza grande, il gradient descent converge ad una velocità geometrica. Il numero di iterazioni è indipendente dalla grandezza del problema e quindi il costo computazionale è molto più basso (unendolo al basso costo di un'iterazione).

Ricapitolando il tutto con una tabella che mette a confronto i tre algoritmi:

Algoritmo	**Complessità campionaria**	**Complessità computazionale**
Information-theoretic lower bound	$\mu nr \log n$	NP-hard
Nuclear norm minimization	$\mu nr \log^2 n$	Tempo polinomiale
Gradient descent con inizializzazione spettrale	$\mu^3 nr^3 \log^3 n$	Tempo lineare

3. Implementazione degli algoritmi

Concentriamoci sugli ultimi due algoritmi in quanto non ci interessa implementare un algoritmo NP-hard.

3.1 Nuclear norm minimization

Si tratta di un problema di ottimizzazione convessa, ci risulta quindi comodo utilizzare il solver CVX.

```
cvx_begin
  variable Phi(n1,n2)
  minimize ( norm_nuc(Phi) )
  subject to
    Phi(~observed) == P_M_mat(~observed)
cvx_end
```

Dove `observed` è una matrice booleana che ci consente di selezionare gli stessi campioni sia su Φ che su M e corrisponde a ciò che fa matematicamente l'operatore $\mathcal{P}_\Omega(\cdot)$. `P_M_mat` corrisponde a $\mathcal{P}_\Omega(M)$ e lo utilizziamo nel vincolo in quanto non abbiamo accesso ad M nella minimizzazione.

3.2 Gradient descent con inizializzazione spettrale

Questo algoritmo deve minimizzare una funzione non convessa perciò non possiamo utilizzare il solver CVX. Utilizziamo quindi il gradient descent per trovare un minimo locale. Partiamo inizializzando X e Y come due matrici i cui valori sono gaussiani a media nulla e varianza unitaria, indipendenti e identicamente distribuiti.
La loss function F è dipendente dalle matrici x, y e una matrice m che altro non è che $X \times Y'$ dove solo i valori di `observed` possono essere non nulli.

```
X = normrnd(0,1,[n1,r]);
Y = normrnd(0,1,[n2,r]);

sigma_1 = max(diag(S));
sigma_r = min(diag(S));
k = sigma_1/sigma_r;
eta = 2/(25*k*sigma_1);

max_iter = 10000;
tolerance = 1e-5;
iter = 0;
converged = false;
f_vals = zeros(max_iter,1);
error = zeros(max_iter,1);

% Definisco la cost function e i suoi gradienti
F = @(x,y,m) 1/(4*p) * norm(m - P_M_mat, 'fro')^2 +
   (1/16) * norm(x'*x - y'*y, 'fro')^2;
dF_dx = @(x,y,m) 1/(2*p) * ((m - P_M_mat) * y)   +
   (1/8) * x * (x'*x - y'*y);
dF_dy = @(x,y,m) 1/(2*p) * (x' * (m - P_M_mat))' +
   (1/8) * y * (x'*x - y'*y);
```

Il ciclo dovrà fermarsi o al raggiungimento del numero di iterazioni `max_iter` o al verificarsi della condizione di convergenza:

$$|F_i - F_{i-1}| < 10^{-5} \cdot F_{i-1}$$

```
% Gradient Descent con Inizializzazione Spettrale
xy = X*Y';
m = zeros(n1,n2);
m(P_Omega) = xy(P_Omega);

while ~converged && iter < max_iter
    X = X - eta * dF_dx(X,Y,m);
    Y = Y - eta * dF_dy(X,Y,m);

    xy = X*Y';
    m = zeros(n1,n2);
    m(P_Omega) = xy(P_Omega);

    f_vals(iter+1) = F(X,Y,m);
    error(iter+1) = norm(xy - M, 'fro') / norm(M, 'fro');

    if iter > 0
        converged = abs(f_vals(iter+1)-f_vals(iter)) <
           tolerance*f_vals(iter);
    end
    iter = iter + 1;
end

% Matrice ricostruita
M_rec = X*Y';
M_rec(~observed) = M(~observed);
```

In questo caso viene utilizzata la M completa ma unicamente per calcolare la metrica di errore:

$$\frac{\left\|X_t Y_t^T - M\right\|_F}{\|M\|_F}$$

questa non serve per il gradient descent ma per valutare le prestazioni dell'algoritmo.

4. Verifica sperimentale

4.1 Confronto degli algoritmi

Per confrontare le prestazioni degli algoritmi è stata generata una matrice M di rango 5 e dimensione 750×750 costituita da valori interi $\in [-10, 10]$ e i.i.d., di questa matrice ne è stato osservato casualmente il 5% delle entry.

Di seguito si riportano il tempo impiegato da ogni algoritmo e l'RMSE (Root Mean Square Error) delle matrici ricostruite confrontate con la matrice M originale:

Algoritmo	**Iterazioni**	**Tempo impiegato (s)**	**RMSE**
Nuclear norm minimization	15	761.60	$9.19 \cdot 10^{-6}$
Gradient descent con inizializzazione spettrale	986	5.27	0.0691

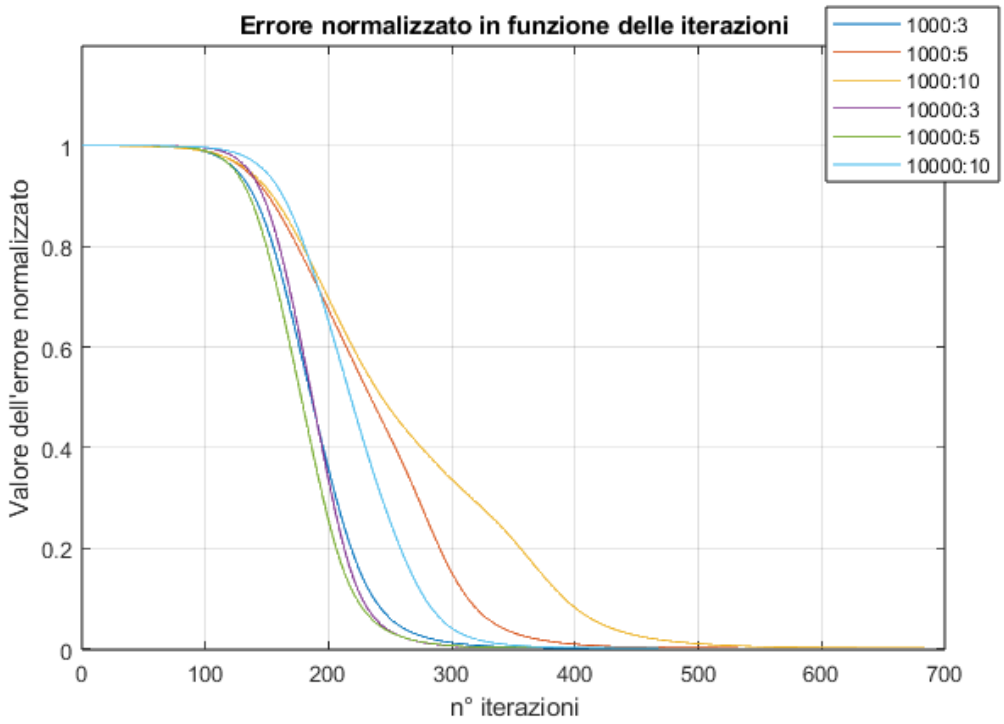
Possiamo vedere come la minimizzazione della norma nucleare sia molto più lenta del gradient descent ma produca risultati decisamente più fedeli alla matrice originale. D'altro canto anche il gradient descent ci fornisce un errore abbastanza basso.

4.2 Verifica del gradient descent

Generando, con la stessa tecnica vista nella sezione precedente, matrici da diverse dimensioni e rango e campionando sempre il 5% dei valori, raccogliamo i risultati di esecuzioni multiple dell'algoritmo di gradient descent:

$n_1 \times n_2,\ r$	Comp. campionaria	Tempo (s)	Iter.	Tempo iter. (s)	RMSE
$10^3 \times 10^3,\ 3$	208.27	13.49	690	0.02	0.033
$10^3 \times 10^3,\ 5$	526.60	14.82	741	0.02	0.050
$10^3 \times 10^3,\ 10$	2313.31	32.13	1579	0.02	0.099
$10^4 \times 10^4,\ 3$	47.41	826.02	368	2.24	0.034
$10^4 \times 10^4,\ 5$	181.52	702.45	374	1.88	0.046
$10^4 \times 10^4,\ 10$	737.69	834.35	429	1.94	0.063

Vediamo, nella figura che segue, un grafico che ci mostra l'andamento dell'errore normalizzato ad ogni iterazione per ognuna di queste matrici:



Si può rapidamente osservare come, al diminuire della complessità campionaria della matrice, l'algoritmo impiega meno iterazioni a far convergere l'errore e la funzione tenda ad assumere una velocità di convergenza geometrica.