Машинное обучение

Лекция 12.2. Матричные разложения

Applied Data Science Center

Матричные разложения

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

Матричные разложения

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

Матричные разложения

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$\left\| X - U \cdot V^T \right\| \to min$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} {a_{ij}}^2}$$

Матричные разложения

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$\|X - U \cdot V^T\| \to min$$

$$\sum_{i,j} \left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2 \to min$$

Матричные разложения

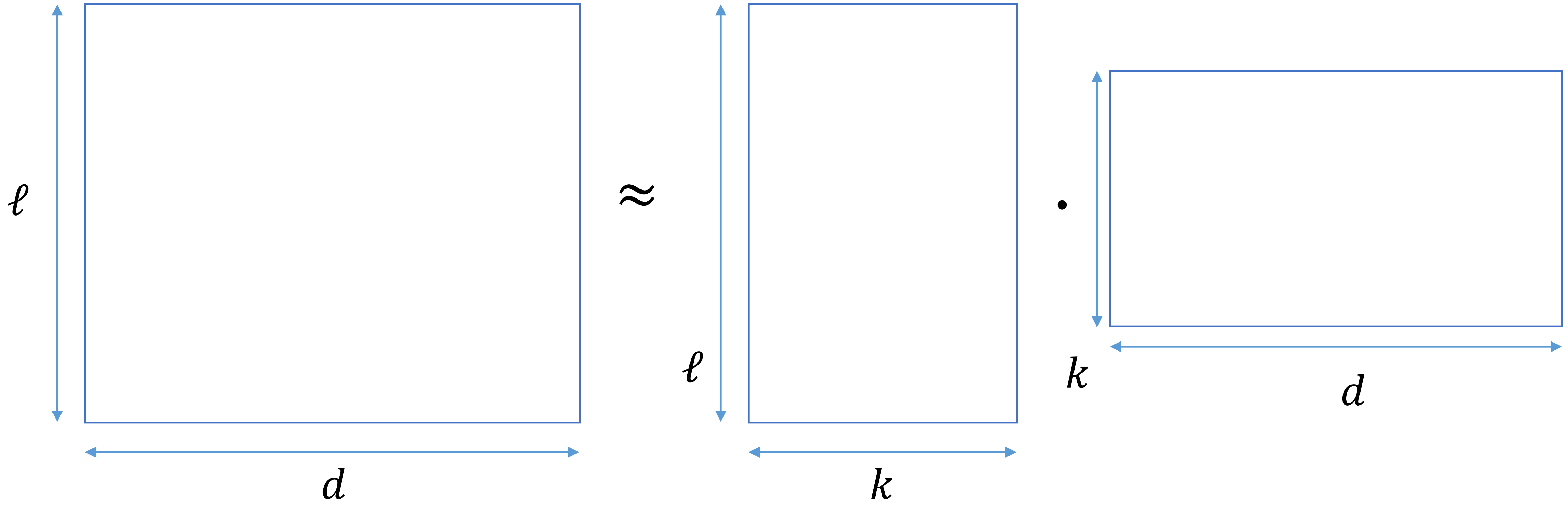
$$\underset{l\times n}{X} \approx \underset{l\times k}{U} \cdot \underset{k\times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

$$\sum_{i,j} \left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2 \to min$$

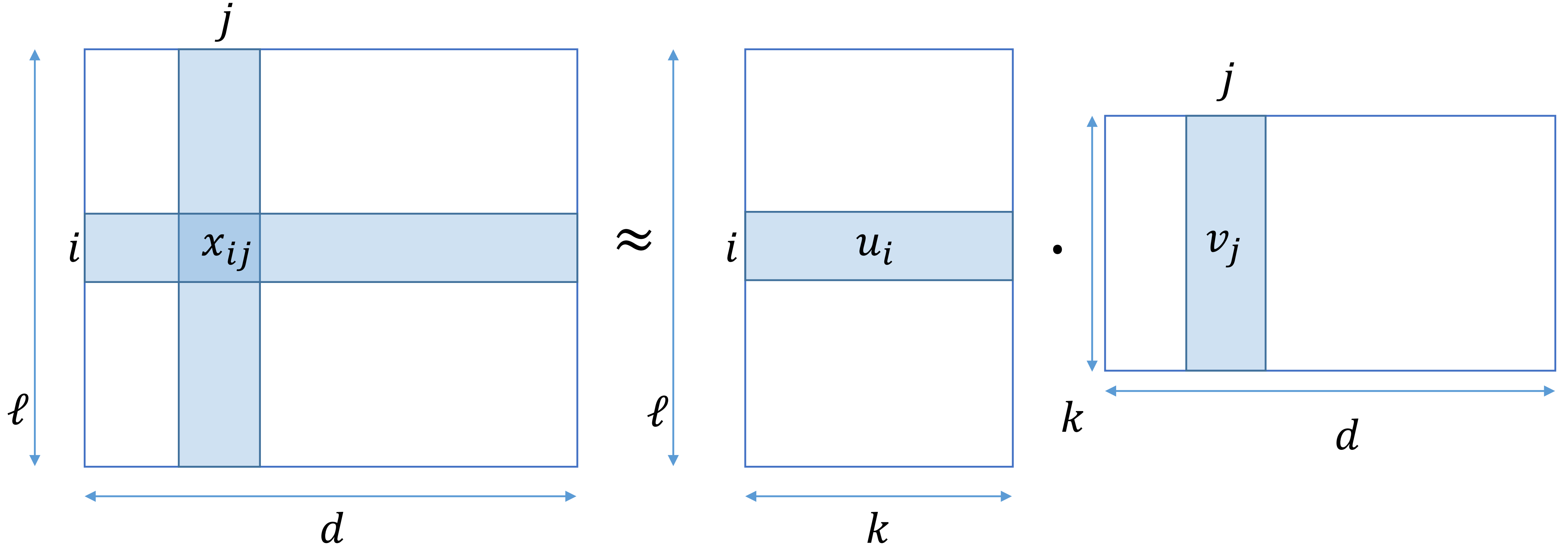
$$\boxed{x_{ij} \approx < u_i, v_j >}$$

Разбираемся с обозначениями



$$X \approx U \cdot V^T$$

Разбираемся с обозначениями



$$x_{ij} \approx \langle u_i, v_j \rangle$$

SVD в линейной алгебре

$$X = U\Sigma V^T$$

U - *ортогональная*

Σ - *диагональная*

V - ортогональная

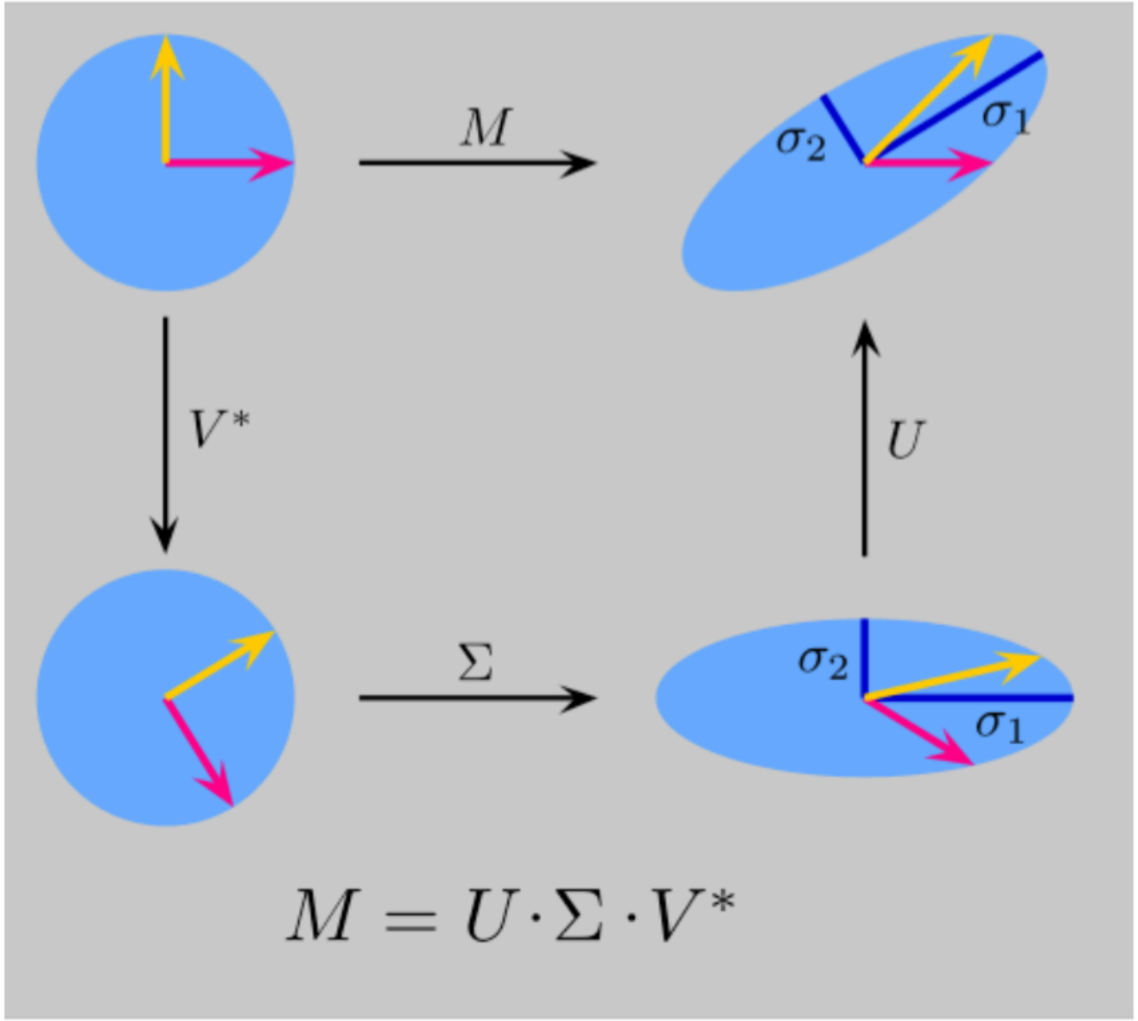
SVD в линейной алгебре

$X = U\Sigma V^T$

U - ортогональная

Σ - диагональная

V - ортогональная



Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

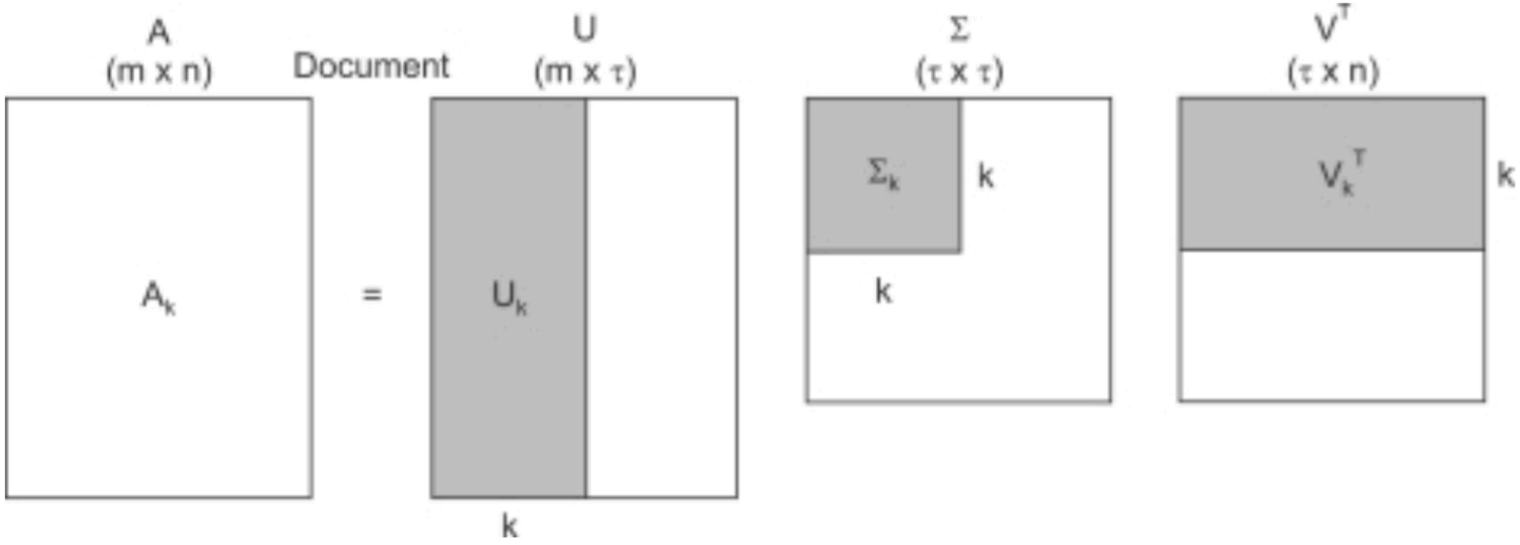
$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

$$X = \widetilde{U} \Sigma \widetilde{V}^T$$

Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$X = \tilde{U}\Sigma\tilde{V}^T$$



Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

$$X = \tilde{U} \Sigma \tilde{V}^T$$

$\tilde{U}_k, \Sigma_k, \tilde{V}_k$-усеченные матрицы из SVD

$$U = \tilde{U}_k \Sigma_k, \quad V = \tilde{V}_k$$

Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

$$X = \widetilde{U}\Sigma\widetilde{V}^T$$

$\widetilde{U}_k, \Sigma_k, \widetilde{V}_k$-усеченные матрицы из SVD

$$U = \widetilde{U}_k, \quad V = \widetilde{V}_k\Sigma_k$$

Приближение матрицы с помощью SVD

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$||X - U \cdot V^T|| \to min$$

$$X = \widetilde{U}\Sigma\tilde{V}^T$$

$\widetilde{U}_k, \Sigma_k, \tilde{V}_k$-усеченные матрицы из SVD

$$U = \widetilde{U}_k\sqrt{\Sigma_k}, \quad V = \tilde{V}_k\sqrt{\Sigma_k}$$

"SVD" в машинном обучении

$$\underset{l \times n}{X} \approx \underset{l \times k}{U} \cdot \underset{k \times n}{V^T}$$

$$\sum_{i,j} \left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2 \to min$$

u_i - «профили» объектов
v_j - «профили» исходных признаков

Матрица рейтингов и SVD

	Пила	Улица Вязов	Ванильное небо	1+1
Маша	5	4	1	2
Юля	5	5	2	
Вова			3	5
Коля	3		4	5
Петя				4
Ваня		5	3	3

Матрица рейтингов и SVD

j

		Пила	Улица Вязов	Ванильное небо	1+1
	Маша	5	4	1	2
	Юля	5	5	2	
	Вова			3	5
i	Коля	3		4	5
	Петя				4
	Ваня		5	3	3

Матрица рейтингов и SVD

j

	Пила	Улица Вязов	Ванильное небо	1+1
Маша	5	4	1	2
Юля	5	5	2	
Вова			3	5
Коля	3		4	5
Петя				4
Ваня		5	3	3

i

$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

u_i - «интересы пользователей»
v_j - «параметры фильмов»

Матрица частот слов и SVD

	database	SQL	index	regression	likelihood	linear
d1	24	21	9	0	0	3
d2	32	10	5	0	3	0
d3	12	16	5	0	0	0
d4	6	7	2	0	0	0
d5	43	31	20	0	3	0
d6	2	0	0	18	7	16
d7	0	0	1	32	12	0
d8	3	0	0	22	4	2
d9	1	0	0	34	27	25
d10	6	0	0	17	4	23

Матрица частот слов и SVD

j

i

	database	SQL	index	regression	likelihood	linear
d1	24	21	9	0	0	3
d2	32	10	5	0	3	0
d3	12	16	5	0	0	0
d4	6	7	2	0	0	0
d5	43	31	20	0	3	0
d6	2	0	0	18	7	16
d7	0	0	1	32	12	0
d8	3	0	0	22	4	2
d9	1	0	0	34	27	25
d10	6	0	0	17	4	23

Матрица частот слов и SVD

j

i

	database	SQL	index	regression	likelihood	linear
d1	24	21	9	0	0	3
d2	32	10	5	0	3	0
d3	12	16	5	0	0	0
d4	6	7	2	0	0	0
d5	43	31	20	0	3	0
d6	2	0	0	18	7	16
d7	0	0	1	32	12	0
d8	3	0	0	22	4	2
d9	1	0	0	34	27	25
d10	6	0	0	17	4	23

$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

u_i - «темы» документов

v_j - «темы» слов

Постановка задачи

$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to \min_{u_i, v_j}$$

Градиентный спуск (GD)

$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to \min_{u_i, v_j}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial u_i} = \sum_{\tilde{\imath},j} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\langle u_{\tilde{\imath}}, v_j \rangle - x_{\tilde{\imath}j} \right)^2 = \sum_j 2\left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right) \frac{\partial \langle u_i, v_j \rangle}{\partial u_i} =$$

$$= \sum_j 2\left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right) v_j$$

$\varepsilon_{ij} = \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)$ - ошибка на x_{ij}

$$\boxed{{u_i}^{(t+1)} = {u_i}^{(t)} - \gamma_t \sum_j \varepsilon_{ij} v_j}$$

Стохастический градиентный спуск (SGD)

GD:

$$u_i^{(t+1)} = u_i^{(t)} - \gamma_t \cancel{\sum_j} \varepsilon_{ij} v_j$$

$$v_j^{(t+1)} = v_j^{(t)} - \eta_t \cancel{\sum_i} \varepsilon_{ij} u_i$$

SGD:

$$u_i^{(t+1)} = u_i^{(t)} - \gamma_t \varepsilon_{ij} v_j$$

$$v_j^{(t+1)} = v_j^{(t)} - \eta_t \varepsilon_{ij} u_i$$

Для случайных i, j

Плюсы и минусы SGD

+Простота реализации

+Сходимость

- Медленно сходится

- Сложность выбора шага градиентного спуска (γ_t и η_t)

- При константном шаге сходится очень медленно

Идея ALS

$$Q \to \min_{u_i, v_j}$$

Повторяем до сходимости:

$$\frac{\partial Q}{\partial u_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_i \qquad\qquad \frac{\partial Q}{\partial v_j} = 0 \quad \Rightarrow \quad v_j$$

Выписываем шаг в ALS

$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to \min_{u_i, v_j}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial u_i} = \sum_j 2\left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right) v_j = 0$$

$$\sum_j v_j \langle v_j, u_i \rangle = \sum_j x_{ij} v_j$$

$$\sum_j v_j {v_j}^T u_i = \sum_j x_{ij} v_j$$

$$\underbrace{\left(\sum_j v_j {v_j}^T \right)}_{A} u_i = \underbrace{\sum_j x_{ij} v_j}_{b}$$

ALS: итоговый алгоритм

Повторяем по случайным i, j до сходимости:

$$\left(\sum_j v_j {v_j}^T\right) u_i = \sum_j x_{ij} v_j \Rightarrow u_i$$ (решение системы линейных уравнений)

$$\left(\sum_i u_i {u_i}^T\right) v_j = \sum_i x_{ij} u_i \Rightarrow v_j$$

Регуляризация

$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 + \alpha \sum_i \|u_i\|^2 + \beta \sum_j \|v_j\|^2 \to \min_{u_i, v_j}$$

α и β - небольшие положительные числа (0.001, 0.01, 0.05

Отличия от рекомендаций

	Пила	Улица Вязов	Ванильное небо	1+1
Маша	5	4	1	2
Юля	5	5	2	
Вова			3	5
Коля	3	?	4	5
Петя				4
Ваня		5	3	3

Модель прогнозирования

j

i

	Пила	Улица Вязов	Ванильное небо	1+1
Маша	5	4	1	2
Юля	5	5	2	
Вова			3	5
Коля	3	?	4	5
Петя				4
Ваня		5	3	3

$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

u_i - «интересы пользователей»

v_j - «параметры фильмов»

Оптимизируемый функционал

$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

$$\sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to min$$

Сдвиг

$$x_{ij} \approx \boxed{\mu} + < u_i, v_j >$$

$$\sum_{i,j} \left(\boxed{\mu} + \langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to min$$

Базовые предикторы

$$x_{ij} \approx \mu + \boxed{b_i^u} + \boxed{b_j^v} + < u_i, v_j >$$

$$\sum_{i,j} \left(\mu + \boxed{b_i^u} + \boxed{b_j^v} + \langle u_i, v_j \rangle - x_{ij}\right)^2 \to min$$

Регуляризация

$$\sum_{i,j}\left(\mu + b_i^u + b_j^v + \langle u_i, v_j\rangle - x_{ij}\right)^2 + \alpha\sum_i \|u_i\|^2 + \beta\sum_j \left\|v_j\right\|^2 +$$

$$\boxed{+\gamma\sum_i {b_i^u}^2 + \delta\sum_j {b_j^v}^2} \to min$$

И снова рекомендации: implicit разложения

j

i

	Вечернее платье	Поднос для писем	iPhone 6s	Шуба D&G
Маша	1		1	
Юля	1	1		1
Вова		1	1	
Коля	1	?	1	
Петя		1	1	
Ваня			1	1

Почему нужно что-то менять

j

	Вечернее платье	Поднос для писем	iPhone 6s	Шуба D&G
Маша	1		1	
Юля	1	1		1
Вова		1	1	
Коля	1	?	1	
Петя		1	1	
Ваня			1	1

i

$$x_{ij} = 1 \approx < u_i, v_j >$$

$$\sum_{i,j:x_{ij} \neq 0} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij}\right)^2 \rightarrow min$$

$$\Rightarrow$$

$$u_i = \frac{1}{\sqrt{d}}(1 \quad \cdots \quad 1)$$

$$v_j = \frac{1}{\sqrt{d}}(1 \quad \cdots \quad 1)$$

Explicit и implicit

- **Explicit feedback:** есть положительные и отрицательные пример (например, низкие и высокие оценки фильмов, лайки и дислайки и т.д.)
- **Implicit feedback:** есть только положительные (покупки, просмотры, лайки) или только отрицательные примеры (дислайки)

Implicit matrix factorization

$$\sum_{i,j} w_{ij}\left(\langle u_i, v_j\rangle - x_{ij}\right)^2 \rightarrow min$$

Сумма по всем индексам (не только по известным элементам матрицы)

w_{ij} принимает большие значения для $x_{ij} \neq 0$
и значительно меньшие для $x_{ij} = 0$

Implicit ALS

$$\sum_{i,j} w_{ij}\left(\langle u_i, v_j\rangle - x_{ij}\right)^2 \to min$$

$$w_{ij} = 1 + \alpha\left|x_{ij}\right| \qquad \alpha = 10, 100, 1000$$

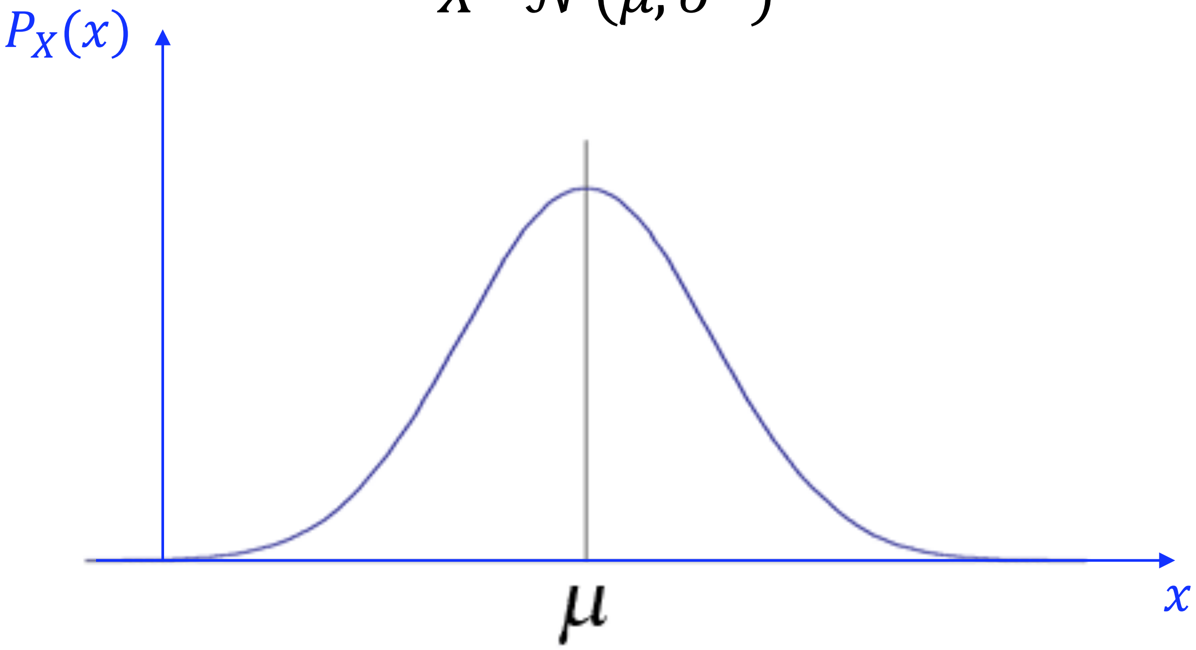
u_i, v_j оцениваем с помощью ALS

Постановка задачи в ”SVD”

$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to \min_{u_i, v_j}$$

Нормальное распределение

$$X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$$



$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Связь "SVD" и нормального распределения

$$x_{ij} = \langle u_i, v_j \rangle + \varepsilon \qquad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

$$x_{ij} \sim \mathcal{N}\left(\langle u_i, v_j \rangle, \sigma^2\right)$$

$$\prod_{i,j} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{\left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2}{2\sigma^2}} \to max$$

$$\sum_{i,j} \frac{\left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2} \ln 2\pi\sigma^2 \to min$$

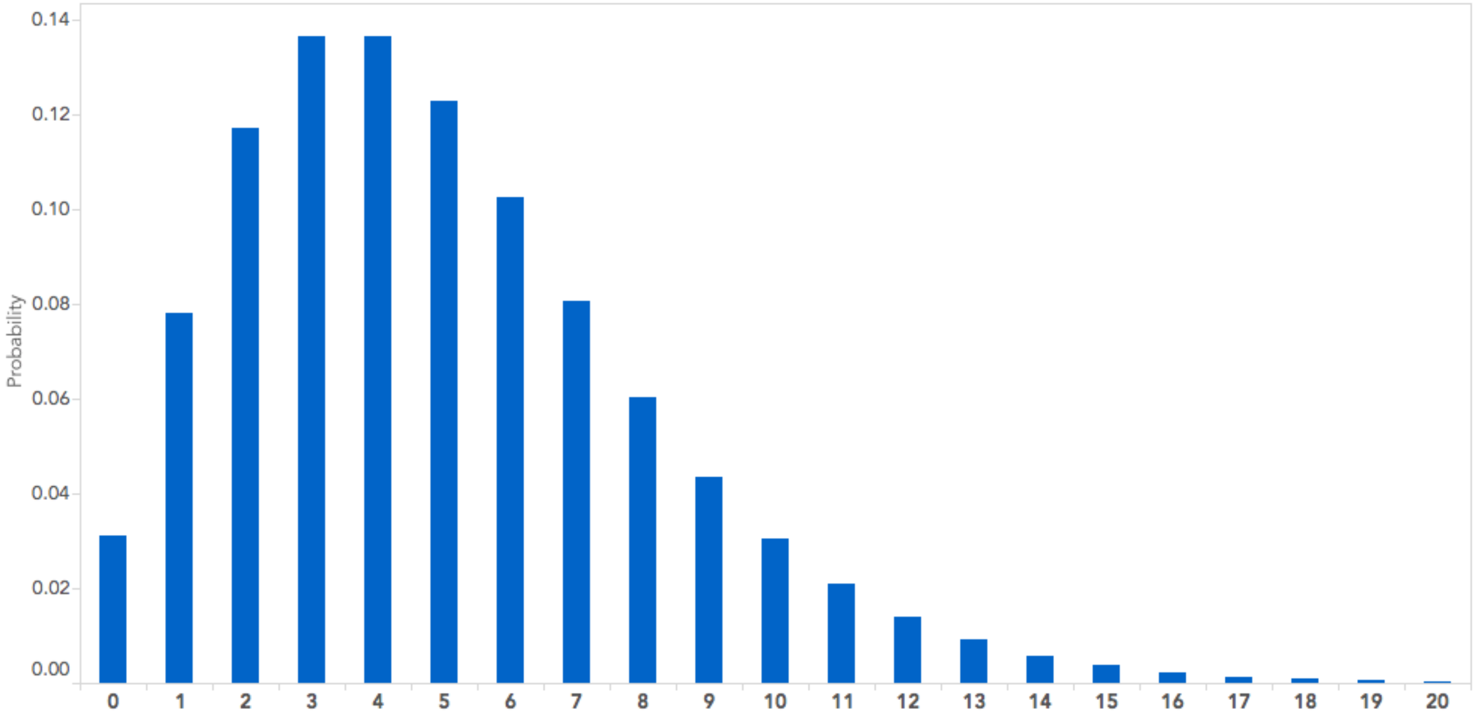
$$\sum_{i,j} \left(x_{ij} - \langle u_i, v_j \rangle\right)^2 \to min$$

Какое распределение подходит больше

	database	SQL	index	regression	likelihood	linear
d1	24	21	9	0	0	3
d2	32	10	5	0	3	0
d3	12	16	5	0	0	0
d4	6	7	2	0	0	0
d5	43	31	20	0	3	0
d6	2	0	0	18	7	16
d7	0	0	1	32	12	0
d8	3	0	0	22	4	2
d9	1	0	0	34	27	25
d10	6	0	0	17	4	23

Распределение Пуассона

$$X \sim Poiss(\lambda)$$



$$P(X = k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \qquad \mathbb{E}X = \lambda$$

Распределение Пуассона и матричные разложения

$$x_{ij} \sim Poiss(\langle u_i, v_j \rangle) \qquad P(x_{ij}) = \frac{\langle u_i, v_j \rangle^{x_{ij}}}{x_{ij}!} e^{-\langle u_i, v_j \rangle}$$

$$\prod_{i,j} \frac{\langle u_i, v_j \rangle^{x_{ij}}}{x_{ij}!} e^{-\langle u_i, v_j \rangle} \to max$$

$$\sum_{i,j} \langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \ln \langle u_i, v_j \rangle + \ln x_{ij}! \to min$$

$$\sum_{i,j} \langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \ln \langle u_i, v_j \rangle \to min$$

SGD для NMF (Non-negative matrix factorization)

$$Q = \sum_{i,j} \langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \ln\langle u_i, v_j \rangle \to min$$

$$\frac{\partial Q}{\partial u_i} = \sum_j v_j - \frac{x_{ij}}{\langle u_i, v_j \rangle} v_j = \sum_j \underbrace{\frac{\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij}}{\langle u_i, v_j \rangle}}_{\tilde{\varepsilon}_{ij}} v_j \to min$$

$\tilde{\varepsilon}_{ij}$ - «относительная ошибка» прогноза

SGD:

$$u_i^{(t+1)} = u_i^{(t)} - \gamma_t \tilde{\varepsilon}_{ij} v_j$$

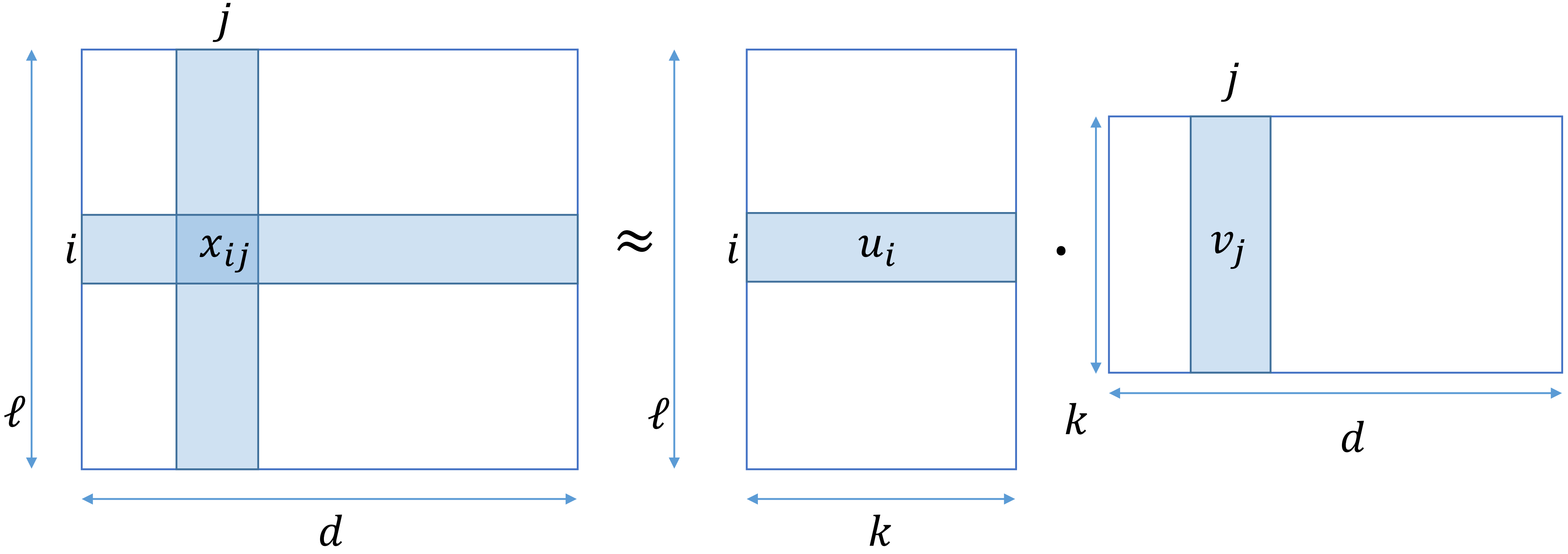
$$v_j^{(t+1)} = v_j^{(t)} - \eta_t \tilde{\varepsilon}_{ij} u_i$$

Другие неотрицательные матричные разложения

Можно использовать норму Фробениуса, но добавить ограничения неотрицательности для U и V:

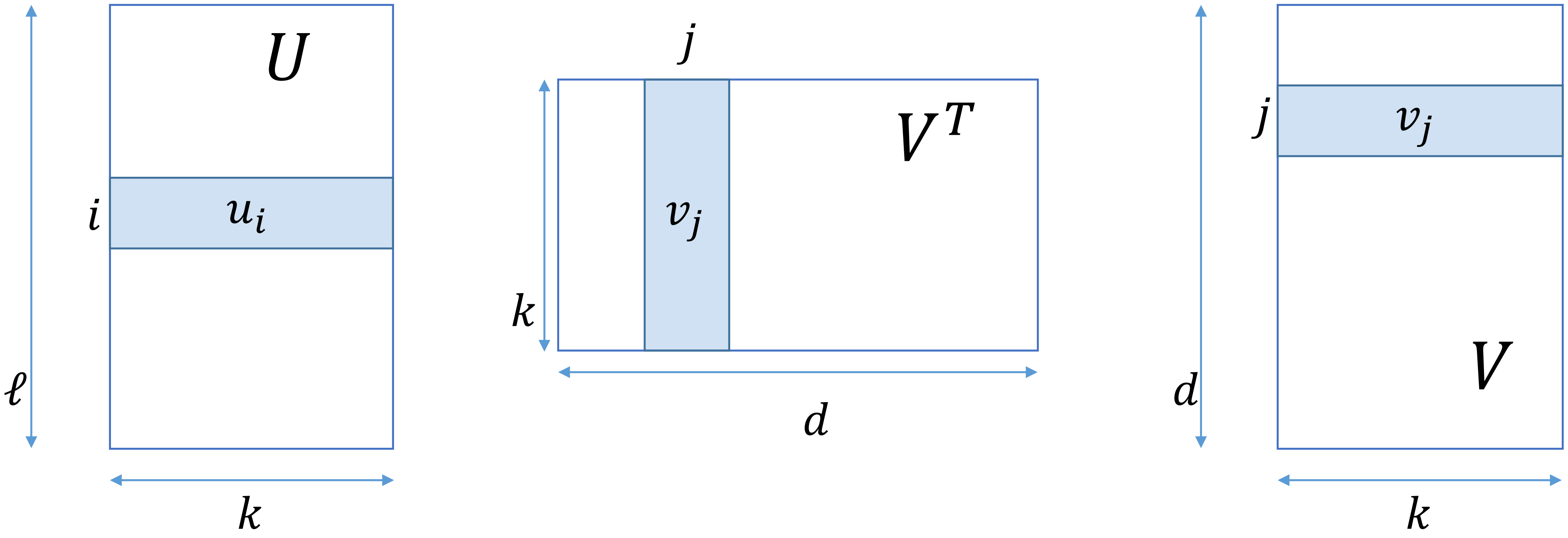
$$Q = \sum_{i,j} \left(\langle u_i, v_j \rangle - x_{ij} \right)^2 \to \min_{\substack{u_i, v_j: \\ u_{ik} \geq 0 \\ v_{jk} \geq 0}}$$

Еще немного про обозначения



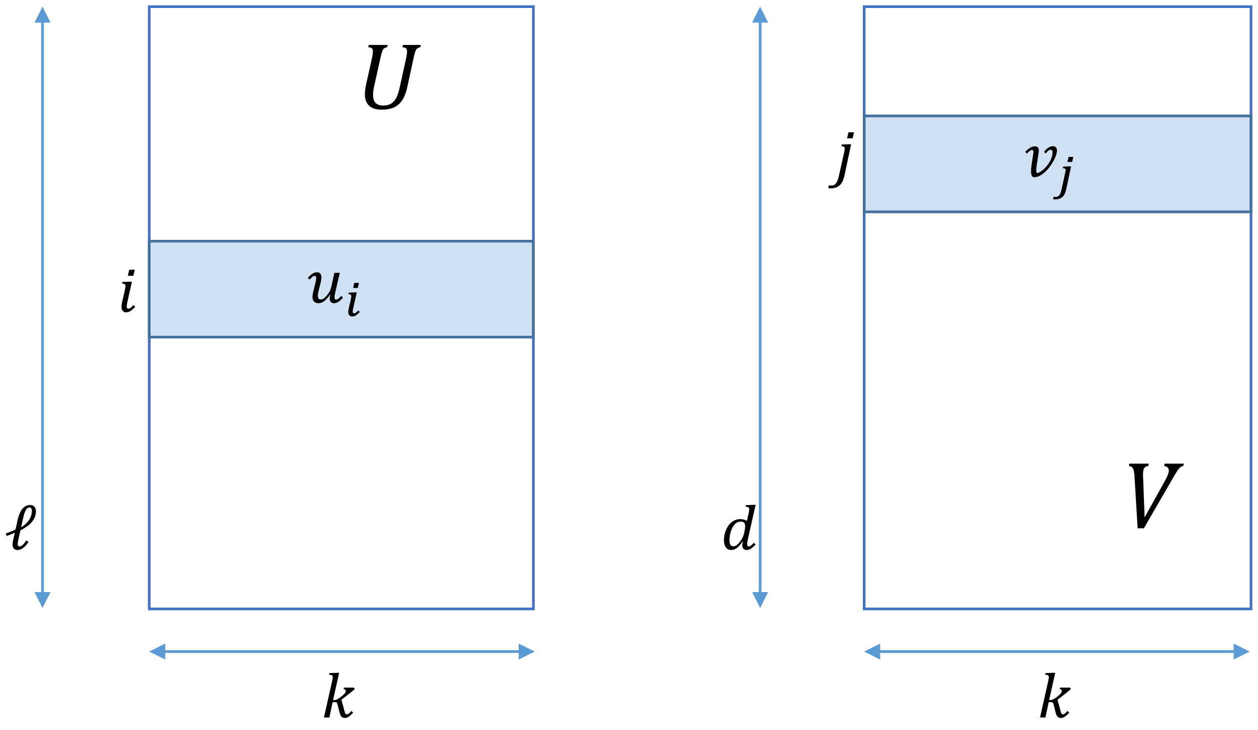
$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

Еще немного про обозначения



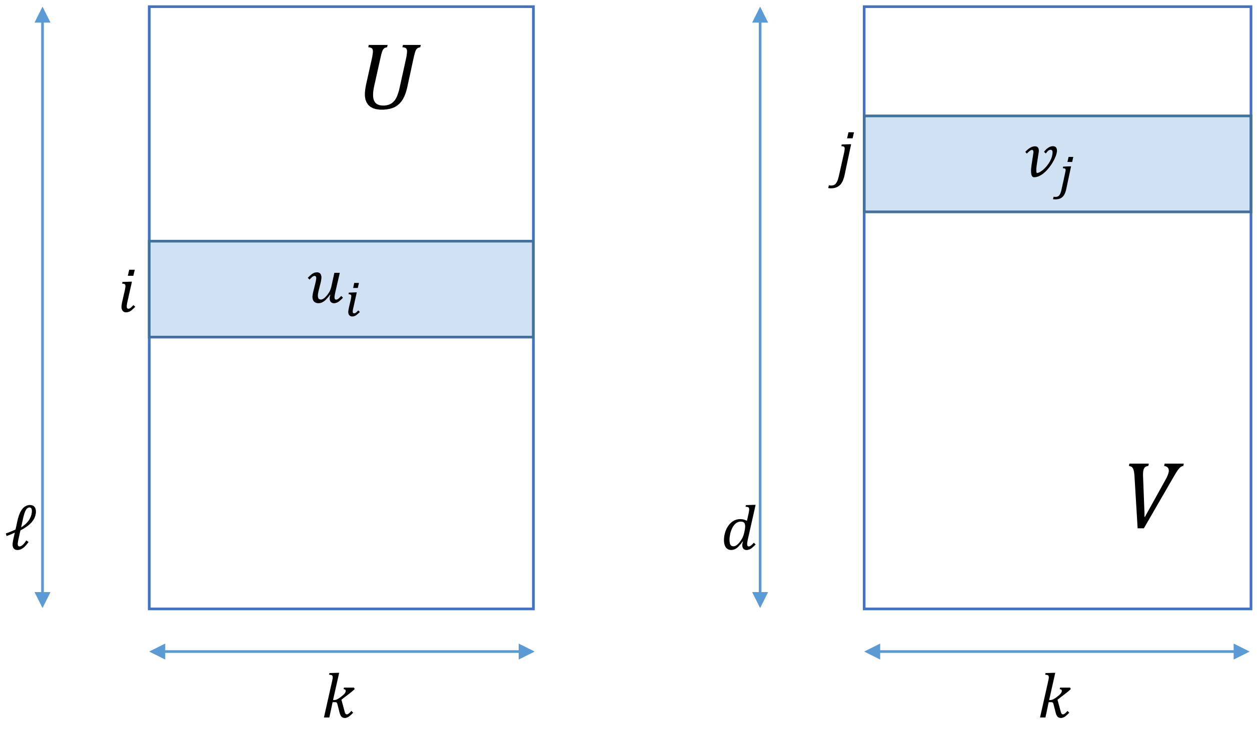
$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

Еще немного про обозначения

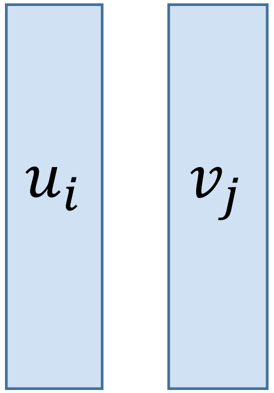


$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$

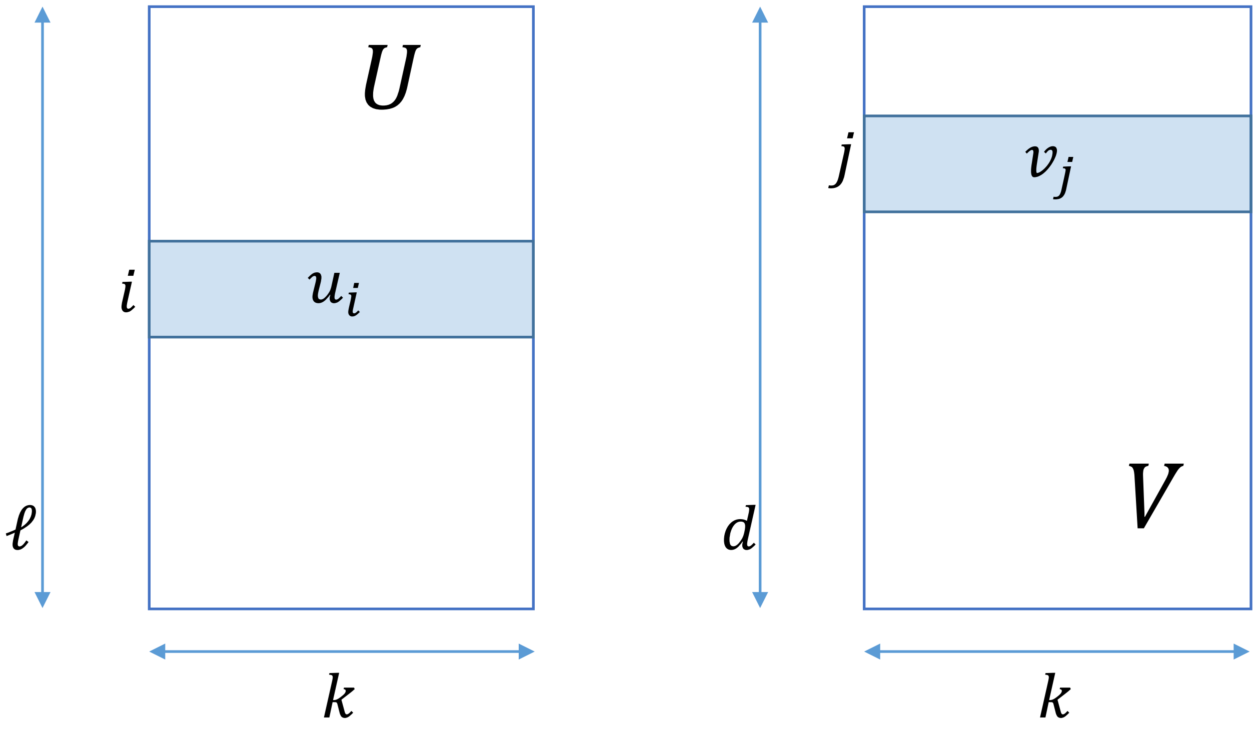
Еще немного про обозначения



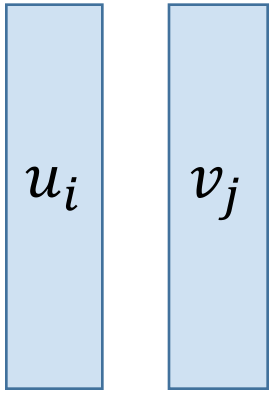
$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$



Еще немного про обозначения

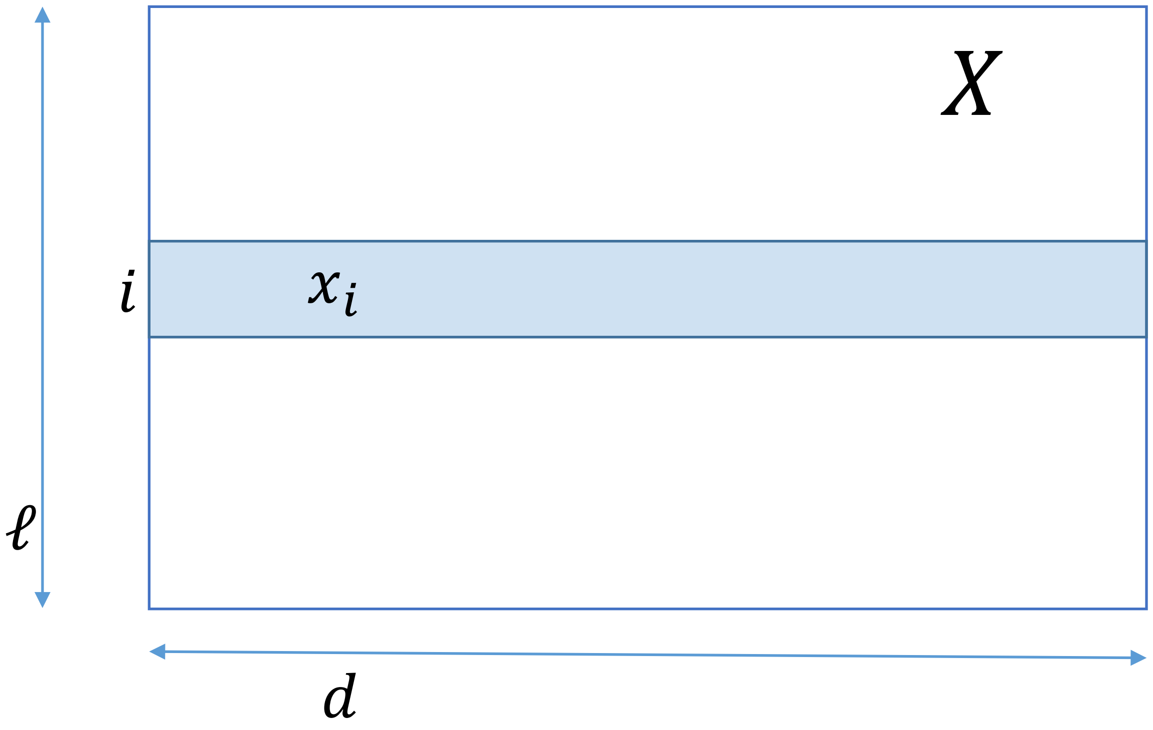


$$x_{ij} \approx < u_i, v_j >$$



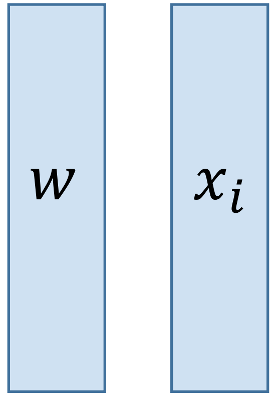
$$x_{ij} \approx u_i^T v_j$$

Аналогия с матрицей признаков



В линейных моделях:

$$< w, x_i > = w^T x_i$$



Какие обозначения встречаются

$$X \approx UV^T$$

$$X \approx PQ^T$$

$$X \approx WH$$

$$X \approx \Phi\Theta$$

info@applieddatascience.ru

https://t.me/joinchat/B1OlThC96v0BQCvs_joNew

https://github.com/vkantor/ml2018jan_feb