推荐系统编程作业1：PMF

作者：邓梓烽

时间：2021/04/11

本次作业主要参考的文章是Ruslan Salakhutdinov, Andriy Mnih在2007的NIPS上发表的“Probabilistic Matrix Factorization (PMF)”[1]。

一、PMF的基本原理

（一）问题描述

假设有N个用户，M部电影，则对应的评分系统就可以用一个$N \times M$的矩阵R来表示。

推荐系统所面对的问题是：R中只有部分entries是已知的（每个用户都只给部分电影打了分），而且R往往非常稀疏，我们需要求出R中某些缺失entries的值。

（二）基本思路

1. 任务目标

文章采用了**low-dimension factor model**，也即**low rank model**来对问题进行建模。其核心思想就是：用户和电影之间的关系（或称用户的“兴趣”）由少数几个显著因素所决定（具体运算为线性组合）。

> 类似于PCA的思想，只不过PCA求出来的几个主成分是原来所有成分的线性组合，是virtual的。

举个例子：假设一个用户是否喜欢一部电影取决于三个因素——电影分类（文艺片 via 娱乐片）、电影的语言（外语 via 华语）以及演员的咖位（小众 via 明星）。我们可以用一个三维向量来描述一个用户的这种偏好，例如$\boldsymbol{x} = [0.6, 1.0, -0.2]^T$就表示该用户 比较喜欢 娱乐片，而且 只看 华语片，对演员的咖位没有很强的倾向性，但小众一点会更好。同样地，我们也可以用一个三维向量来表征一部电影，例如$\boldsymbol{y} = [0.9, -1.0, 0.8]^T$就表示这是一部众星云集的外语娱乐巨制。使用向量表示法的优点就是，我们可以直接使用 点积 （也可以归一化，即计算 协方差 ）来估计一个用户对于一部电影的喜好程度。例如，对于上面提到的用户和电影，该用户对该电影的喜好就是$r = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y} = -2.06$，可以看出该用户其实并不喜欢这部电影。

如果要用矩阵语言来描述，就是评分矩阵R可以分解为两个低秩矩阵U, V的乘积，即$R=U^TV$，其中$D\times N$矩阵U描述了N个用户的喜好；而$D\times M$矩阵则描述了M部电影的特征。由矩阵秩的性质我们可以推得：

$$\operatorname{rank}(R) \leq \min\{\operatorname{rank}(U), \operatorname{rank}(V)\}$$

但是，由于评分矩阵中非常稀疏，以及噪声的存在，实际情况下不可能直接得到这种完美的分解，因此我们做如下的处理：

- 我们不对原评分矩阵 R 进行分解，而是对一个 近似矩阵 $\hat{R}$ 进行分解，即作 $\hat{R}=U^TV$ 。
- 我们要求 $\hat{R}$ 在已有的观测值（ratings）上与真实的评分矩阵 R 尽可能地 相似 。
- 为了 防止过拟合 ，我们还需要对 U 和 V 做出适当的约束。

从贝叶斯观点来看待这个问题的话，R是我们观测到的值，而U，V则是对系统内部特征的描述。

2. 朴素PMF模型

（1）基本假设

1. 观测噪声 （ R 与 $\hat{R}$ 之间的差值）服从 高斯分布 ；
2. 用户属性 U 和 电影属性 V 均服从 高斯分布 ，且假定它们 相互独立 。

> 假设2存疑，详见自己在Web Page上做的笔记。

利用假设1，我们可以得到真实评分矩阵上的概率密度函数，其中的参数σ是噪声的方差，是我们人为指定的。

$$p\left(R \mid U, V, \sigma^2\right)=\prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^M\left[\mathcal{N}\left(R_{ij} \mid U_i^T V_j, \sigma^2\right)\right]^{I_{ij}}$$

> - $\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)$ 是具有均值 μ 以及方差 σ^2 的高斯分布；
> - $I_{ij}=\begin{cases}1 & \text{if user i has rated movie j,} \\ 0 & \text{if user i has not rated movie j.}\end{cases}$

利用第二个假设，我们也可以写出用户偏好、电影特征的概率密度函数，其中σ_U和σ_V是先验噪声的方差，人为指定。

$$p\left(U \mid \sigma_U^2\right)=\prod_{i=1}^N \mathcal{N}\left(U_i \mid 0, \sigma_U^2 \mathbf{I}\right)$$
$$p\left(V \mid \sigma_V^2\right)=\prod_{j=1}^M \mathcal{N}\left(V_j \mid 0, \sigma_V^2 \mathbf{I}\right)$$

综合以上两个概率密度函数，我们可以得到对应的后验概率

$$p(U, V \mid R, \sigma^2, \sigma_V^2, \sigma_U^2)=p(U, V, R) / p(R) \propto p(U, V, R)=p(R \mid U, V) p(U) p(V)$$

（2）求解方法

要通过已有的评分矩阵R估计出系统参数U，V，我们可以采用最大化上述概率函数的方法。

为了计算上的方便，我们对后验概率取对数

$$\ln p(U, V \mid R, \sigma^2, \sigma_V^2, \sigma_U^2)=\ln p(R \mid U, V)+\ln p(U)+\ln p(V)$$

> 这里为了清晰起见，忽略掉了原文中该公式后面的“常数项”——剩余的项与我们人为事先指定的各个方差有关，而与训练得到的参数无关。

> **【高斯分布及其对数形式】**
>
> $$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2 \pi} \sigma} \exp \left(-\frac{(x-\mu)^2}{2 \sigma^2}\right)$$
> $$\ln p(x)=-\ln (\sqrt{2 \pi} \sigma)-\frac{(x-\mu)^2}{2 \sigma^2}$$
>
> 可以看到，取对数以后，后验概率中的每一项都是对数高斯分布；而且方差都是与预设常数，因此只有 第二项 与待优化的U, V有关。

最大化上述对数后验概率，等价于 最小化 下面的能量函数：

$$\mathrm{E}(U, V)=\frac{||R-U^T V||_2}{2 \sigma^2}+\frac{(U^T U)}{2 \sigma_U^2}+\frac{(V^T V)}{2 \sigma_V^2}$$

通过参数替换约掉一个变量：

$$E(U,V)=\frac{1}{2}||R-U^TV||_2+\frac{\lambda_U^2}{2}(U^TU)+\frac{\lambda_V^2}{2}(V^TV)$$

如果系统先验方差σ_U和σ_V无穷大，也即无法对系统参数做人为约束，则优化目标就只剩下第一项，此时问题退化为一个SVD分解问题。

而矩阵的概率密度应该等于其entries的概率密度的乘积。取对数以后，即等于其元素的概率密度之和：

$$\mathrm{E}(U,V)=\frac{1}{2}\sum_{ij}I_{ij}\left(R_{ij}-U_i^TV_j\right)^2+\frac{\lambda_U^2}{2}\sum_i(U_i^TU_i)+\frac{\lambda_V^2}{2}\sum_j(V_j^TV_j)$$

上式中，R_{ij}是标量，U_i和V_j是维度为D的向量。最后两项相当于约束了内部特征矩阵U，V的范数。而标记I_{ij}是用户i是否对电影j进行评分的示性变量。上式就是从向量的这一“维度”表述我们的目标函数。

> 如果我们将和项写得清晰一点儿，上面的表达式应该是这样的：
>
> $$\mathrm{E}(U,V)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}I_{ij}\left(R_{ij}-U_i^TV_j\right)^2+\frac{\lambda_U}{2}\sum_{i=1}^{N}\|U_i\|_{Fro}^2+\frac{\lambda_V}{2}\sum_{j=1}^{M}\|V_j\|_{Fro}^2$$

最后，为了限制评分的范围，我们对高斯函数的均值施加一个logistic函数$g(x)=\frac{1}{1+\exp(-x)}$，其值域为$(0,1)$。所以，最终的目标函数（能量函数）就是：

$$E(U,V)=\frac{1}{2}\sum_{ij}I_{ij}\left(R_{ij}-g\left(U_i^TV_j\right)\right)^2+\frac{\lambda_U}{2}\sum_iU_i^TU_i+\frac{\lambda_V}{2}\sum_jV_j^TV_j$$

至此，我们可以使用梯度下降法，通过求$\partial E/\partial U_{ik},\partial E/\partial V_{jk}$，求取$U_i$，$V_j$中的每一个entry：

$$U_i=U_i+\alpha\frac{\partial E}{\partial U_i}$$
$$V_j=V_j+\alpha\frac{\partial E}{\partial V_j}$$

我们需要估计的参数数量为$M\times D+N\times D$。

（3）控制模型复杂度

最简单的控制复杂度的方法就是调整特征的维度，即D。但是D越大，模型越精确的同时，也越容易造成过拟合；并且，D应当与用户评过分的电影的数量大致相等。但现实中的问题是：数据往往是不均衡的——不同用户评过分的电影差异较大。例如，一个电影爱好者可能动辄评过数十上百部电影的分数；而一个普通的用户可能只给寥寥几部电影评过分。

一个比较好的方法是选择一个中等尺度的D，然后令$\lambda_U = \frac{\sigma^2}{\sigma_U^2}$，$\lambda_V = \frac{\sigma^2}{\sigma_V^2}$。

二、悬而未决的问题

1. **【logistic function】** 限制评分范围的logistic函数在很多实现中都没有进行还原（不添加这个函数确实使得求偏导得到的表达式更加简单清晰了……），其实我现在还没有进行很仔细的数学推导，去考虑为什么要通过这个函数限制评分范围？
2. **【低秩分解模型的先验分布】** U和V的先验分布为零均值的高斯分布，这样设置有什么依据吗？

> 文中有给出对应的link [2] [3]，可进行延伸阅读。

三、代码实现

这部分详见本次作业上传的PMF.py及代码中的注释说明。下面仅给出参数设置以及说明所使用的数据集。

（一）所使用的数据集

参见第四大点对应小节的说明。

（二）参数设置

参数名称	值
D (number of latent factors)	10
学习率	0.005
U的正则化系数：λu	0.01
V的正则化系数：λv	0.001
训练最大迭代次数	50

四、结果分析

（一）原文的实验方法以及结果分析

1. 数据集

所采用的数据集的规模如下表所示：

数据集	评分数据	用户数量	电影数量
Netflix Train	100,480K	480K	17K
Netflix Valid	1,408K	/	/
Netflix Test	2,817K	/	/

2. 训练方法

为了提高训练速度，使用了**mini-batch**方法：每100K个评分数据就更新一次待求得的参数。

learning rate设置为0.005；momentum设置为0.9 [4] 。

> Momentum的引入可以避免GD过程中得到的轨迹曲线过于曲折（不光滑）。

3. 结果分析

- 文中D设置为10与30。
- 参与对比的模型有SVD model、两个固定先验的PMF model（正则化项不同，后面表格会提到）、两个具有自适应先验的PMF model。

  > 其中SVD model的训练目标是“minimize the sum-squared distance only to the observed entries of the target matrix”。并且其中的特征向量没有进行正则化。

- 关于训练过程中RMSE这一度量上的比较，参照下面的图表：

  > 由于没有复现adaptive-prior PMF，所以它们没有列在下面的表格中。

模型	U上的正则化项系数	V上的正则化项系数	RMSE
SVD	/	/	overfits
PMF1	0.01	0.001	slightly greater than 0.94
PMF2	0.001	0.0001	slightly smaller than 0.93

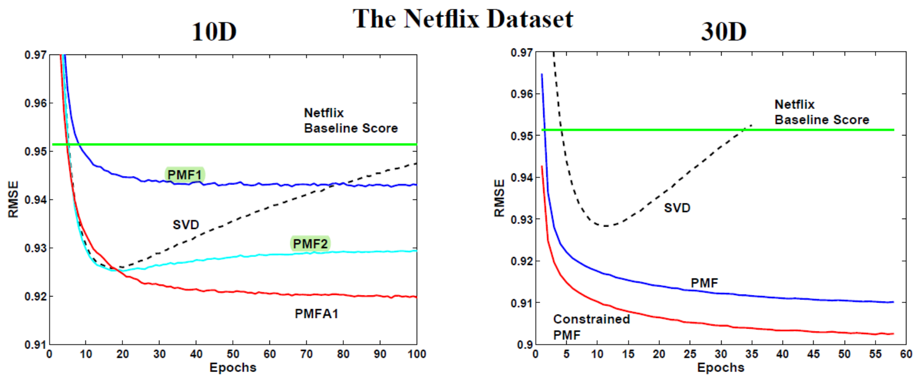


Figure 2: Left panel: Performance of SVD, PMF and PMF with adaptive priors, using 10D feature vectors, on the full Netflix validation data. Right panel: Performance of SVD, Probabilistic Matrix Factorization (PMF) and constrained PMF, using 30D feature vectors, on the validation data. The y-axis displays RMSE (root mean squared error), and the x-axis shows the number of epochs, or passes, through the entire training dataset.

（二）复现代码的结果分析

1. 数据集

>

数据集使用movielens的1m数据集[5]。取其中的ratings.dat文件作为训练数据，关于该数据集的描述如下表所示：

数据文件	数据规模	用户数量	电影数量	数据在文件中的格式
ratings.dat	1,000,209	6,040	3,952	UserID::MovieID::Rating::Timestamp

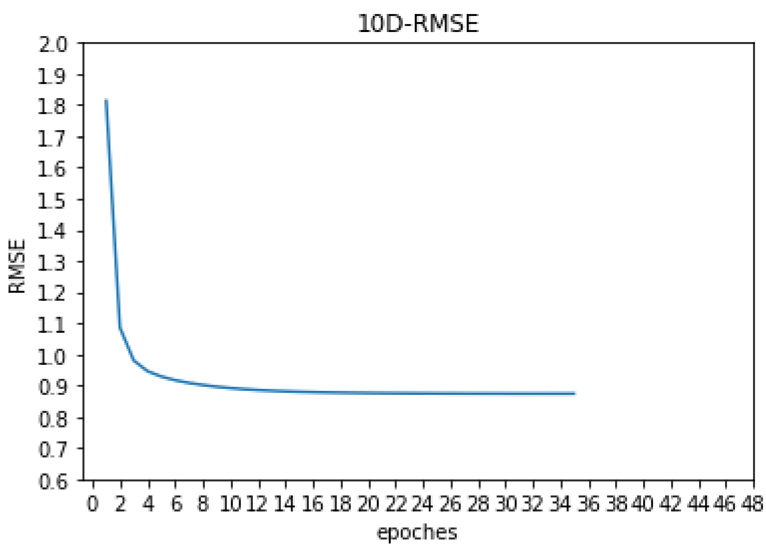
- 评分是5-star scale。
- 每个用户至少都对20部电影作出了评价。
- 训练过程中用到的只有UserID，MovieID以及Rating。

2. 结果展示

（1）运行截图

```
iteration:16 loss:290851.834 rmse:0.87698
iteration:17 loss:288361.369 rmse:0.87623
iteration:18 loss:286101.719 rmse:0.87562
iteration:19 loss:284046.681 rmse:0.87512
iteration:20 loss:282173.138 rmse:0.87470
iteration:21 loss:280460.755 rmse:0.87436
iteration:22 loss:278891.707 rmse:0.87407
iteration:23 loss:277450.408 rmse:0.87383
iteration:24 loss:276123.243 rmse:0.87363
iteration:25 loss:274898.325 rmse:0.87346
iteration:26 loss:273765.252 rmse:0.87332
iteration:27 loss:272714.910 rmse:0.87322
iteration:28 loss:271739.286 rmse:0.87313
iteration:29 loss:270831.316 rmse:0.87307
iteration:30 loss:269984.753 rmse:0.87303
iteration:31 loss:269194.055 rmse:0.87302
iteration:32 loss:268454.296 rmse:0.87301
iteration:33 loss:267761.084 rmse:0.87303
iteration:34 loss:267110.491 rmse:0.87306
iteration:35 loss:266499.002 rmse:0.87311
```

图示训练到第35次迭代就根据收敛test提前终止了，可见最终的RMSE大致收敛到0.873附近。



这是RMSE随着训练轮数的变化曲线图。

（2）结果分析

对于RMSE低于原文PMF1的结果有以下几种猜想：

1. 原文的数据规模更大（较movielens 1m高出2个量级），有可能是数据不平衡问题更加突出，又或者是本身PMF的RMSE是关于数据规模（大到一定程度）的正相关函数？
2. 原文所使用的mini-batch训练方法会不会是一种精度-效率的trade-off方法？其背后的数学原理是什么？

> 受限于当前的知识贫瘠程度，还未能寻得其中原因，但值得在后续学习过程中进行探究。

五、总结与收获

1. 快速复现论文工作的能力是研究生阶段需要培养的重要能力！
2. 对movielens数据集有了一定的了解（通过可视化、阅读相关描述文档等）。
3. 更加深入地思考关于机器学习的收敛定理以及GD相关理论等。

参考资料

1. Probabilistic Matrix Factorization, Ruslan Salakhutdinov, Andriy Mnih, 2007: http://www.utstat.toronto.edu/~rsalakhu/papers/nips_draft2.pdf ↩

2. Delbert Dueck and Brendan Frey. Probabilistic sparse matrix factorization. Technical Report PSI TR 2004-023, Dept. of Computer Science, University of Toronto, 2004. ↩

3. Michael E. Tipping and Christopher M. Bishop. Probabilistic principal component analysis. Technical Report NCRG/97/010, Neural Computing Research Group, Aston University, September 1997. ↩

4. Momentum and Learning Rate Adaptation: http://www.willamette.edu/~gorr/classes/cs449/momrate.html ↩

5. MovieLens 1m: http://files.grouplens.org/datasets/movielens/ml-1m-README.txt ↩