ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2021, том 61, № 5, с. 744–758

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.61

ИНДУКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ МАТРИЦ С ОТБОРОМ ПРИЗНАКОВ[1)]

© 2021 г. М. Буркина[3], И. Назаров[1,*], М. Панов[1,], Г. Федонин[2,3,4], Б. Широких[1,2,3]**

[1] 121205 Москва, Большой бульвар, 30, стр. 1, Сколтех, Россия

[2] 127051 Москва, Б. Каретный пер., 19, стр. 1, ИППИ РАН, Россия

[3] 141700 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, МФТИ, Россия

[4] 111123 Москва, Новогиреевская ул., 3а, Центральный НИИ эпидемиологии, Россия

*e-mail: ivan.nazarov@skolkovotech.ru

**e-mail: m.panov@skoltech.ru

Поступила в редакцию 19.03.2020 г.
Переработанный вариант 29.12.2020 г.
Принята к публикации 14.01.2021 г.

Рассматривается задача индуктивного восстановления матриц – восстановления матрицы с использованием побочных признаков для строк и столбцов. Однако во многих прикладных задачах подобная вспомогательная информация содержит избыточные или малоинформативные признаки, что делает необходимым шаг их отбора. В работе предлагается подход, основанный на факторизации матрицы с групповой LASSO регуляризацией на коэффициенты побочных признаков, который совмещает отбор признаков с восстановлением матрицы. При этом теоретически доказывается, что асимптотика ошибки восстановления предложенного подхода ниже, чем в методах, не производящих прореживание. Предлагается вычислительно эффективная итеративная процедура для одновременного восстановления матрицы и отбора признаков. Эксперименты на искусственных данных и данных из прикладных задач демонстрируют, что предложенный подход улучшает показатели качества благодаря отбору признаков. Библ. 38. Фиг. 2. Табл. 3.

Ключевые слова: индуктивное восстановление матриц, групповое прореживание, асимптотика ошибки восстановления.

DOI: 10.31857/S0044466921050070

1. ВВЕДЕНИЕ

Методы пополнения или восстановления матриц, matrix completion, находят широкое применение в рекомендательных системах [1], [2], задачах кластеризации [3], классификации с многими метками [4], [5], обработки сигналов [6], компьютерного зрения [7] и подобных. В традиционной постановке частично наблюдаемая низкоранговая матрица восстанавливается напрямую через скалярное произведение выученных строчных и колоночных факторов, или неявно с использованием ядерных методов (kernel trick). При этом каждый фактор является численным отражением признаков некоей сущности, связанной с той или иной строкой или столбцом. Теоретические основания, определяющие возможность восстановления низкоранговых матриц, рассмотрены в работах [8] и [9]. Например, в условиях независимого случайного наблюдения достаточно иметь доступ к $O(N \log^2 N)$ элементам матрицы низкого ранга $n_1 \times n_2$ для полного точного ее восстановления ($N = \max\{n_1, n_2\}$). Оценка, не зависящая от распределения, приведенная в [10], позволяет достичь полного восстановления матриц, имея $O(N^{3/2})$ наблюдения.

Зачастую в дополнение к элементам самой частично наблюдаемой матрицы доступны вспомогательные экзогенные характеристики сущностей, стоящих за ее строками и столбцами. Например, в [11] показано, что побочные признаки строк и столбцов в виде профилей пользователей или описания жанров кино, side-channel information, полезны в задаче рекомендательной системы. Подобная вспомогательная информация играет особо важную роль при решении

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 18-37-00489).

проблемы “холодного старта” рекомендательной системы, так как в ситуации, когда необходимо предсказать “взаимодействие” наблюдавшихся ранее сущностей с новой доселе ненаблюдавшейся сущностью, единственной возможностью остается только делать выводы на основе побочных характеристик.

Подходы, тем или иными способом учитывающие побочные признаки при пополнении матрицы, носят название индуктивного восстановления матриц, inductive matrix completion (IMC), см. в том числе [12]–[18]. Ключевой теоретический результат, полученный на момент написания настоящей работы, заключается в том, что достаточный объем наблюдений для восстановления снижается до $O(\log N)$ при условии, что побочные признаки имеют “хорошую” предсказательную силу. При этом вполне естественна ситуация, когда не все признаки релевантны или имеют хорошую предсказательную силу. Таким образом, становится очевидной необходимость разработки алгоритмов IMC, работающих в условиях избыточности побочных признаков и при этом сохраняющих гарантии по асимптотике достаточного объема наблюдений для восстановления. Немногие исследования обращаются к теме развития методов индуктивного восстановления матриц с отбором побочных признаков (прореживания), [16], [19] при том, что потенциал модификаций и улучшений существующих алгоритмов восстановления матриц в этом направлений велик.

Систематическое исследование проблемы индуктивного восстановления матриц началось с работы [12], в которой показано, что для полного восстановления достаточно наблюдать $O(\log N)$ случайных элементов при условии использования нормы $\|M\|_* = \sum_i \sigma_i(M)$ сингулярных чисел $\sigma_i(M)$ матрицы M в качестве регуляризатора, также известной как ядерная норма. В [20] рассмотрено представление матрицы в виде низкорангового произведения факторов и побочных признаков и изучена итеративная покоординатная процедура, возникающая в данной параметризации задачи. Предложенная параметризация нивелирует необходимость сингулярного разложения матрицы на каждой итерации, заменяя ее попеременным решением квадратичной задачи для каждого фактора. В [18] рассмотрены невыпуклый регуляризатор на факторы и 3-х фазная итеративная процедура восстановления, завершающаяся фазой проективного градиентного спуска, которая гарантирует, что вычисленные факторы находятся в окрестности оптимального решения задачи с высокой вероятностью по наблюдаемым выборкам.

В [14] рассматривается ситуация с несовершенными побочными признаками, которые не имеют достаточной предсказательной силы для полного восстановления матрицы, и, совместив индуктивный и классический подходы к восстановлению матриц, добиваются состоятельного восстановления матриц также и в случае “совершенных” побочных признаков. В [16] рассматривается аналогичная ситуация, где используется разреживающий регуляризатор на основе нормы сингулярных чисел целевой матрицы, приводя также оценки достаточного числа наблюдаемых элементов для восстановления. Однако в работе не исследуется эффект отбора признаков на получаемое решение, и предложенная процедура имеет высокую сложность по памяти и арифметическую сложность. В [19] рассматривается комбинаторная постановка задачи индуктивного восстановления матриц с отбором признаков, и приводится оценка ускоренной асимптотики достаточного объема наблюдений при наличии шума. В аналогичной постановке индуктивного восстановления ребер в графах в [21] получены минимакс оптимальные оценки достаточного объема наблюдений в режимах низкоранговой матрицы связности и избыточности побочных признаков, а также исследован баланс между вероятностью точного восстановления и вычислительной сложностью.

В настоящей работе мы предлагаем новый алгоритм индуктивного пополнения матриц, эффективно борющийся с избыточностью побочных признаков. Алгоритм отбирает релевантные характеристики при помощи включения регуляризатора в оптимизационную задачу факторизации матрицы, наводящего групповое прореживание на оцениваемые строчные и колоночные факторы. Мы приводим теоретические гарантии на оптимальность решения предложенной задачи IMC, которое, в свою очередь, ведет к улучшенной асимптотике достаточного объема наблюдений для индуктивного восстановления матрицы в ситуации, когда большая доля побочных признаков не имеют предсказательной силы. В частности, достаточный объем наблюдений асимптотически ниже, чем в случае, когда отбор признаков не производится.

Мы также предлагаем итеративную процедуру для численного решения предложенной невыпуклой оптимизационной задачи разреженного IMC, основанную на алгоритме ADMM [22], [23]. Приводимые нами экспериментальные свидетельства, демонстрируют, что предложенная процедура восстанавливает матрицу одновременно с отбором малоинформативных побочных

признаков как на синтетических примерах, так и в наборах данных из практических приложений, при этом достигая показателей качества, сравнимых с алгоритмическими аналогами без прореживания. Реализация процедуры (https://github.com/premolab/SGIMC) позволяет индуктивно восстанавливать частично наблюдаемые матрицы больших размеров.

Изложение результатов начинается с постановки оптимизационной задачи для восстановления матриц с прореживающим регуляризатором в разд. 2. В разд. 3 приводятся оценки обобщающей способности предложенного метода и достаточного объема наблюдений для восстановления, а в разд. 4 приведена предложенная нами итеративная процедура. Затем в разд. 5 приводятся и обсуждаются полученные экспериментальные свидетельства. Изложение завершается разд. 6.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ МАТРИЦ С ПРОРЕЖИВАНИЕМ

Рассмотрим целевую матрицу $M \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$, в которой наблюдаемы только значения M_{ij} и некоторого множества $(i, j) \in \Omega \subset \{1, \ldots, n_1\} \times \{1, \ldots, n_2\}$. Предположим, что побочные признаки полностью наблюдаемы и представлены в виде матриц $X \in \mathbb{R}^{n_1 \times d_1}$ и $Y \in \mathbb{R}^{n_2 \times d_2}$ для строк и столбцов M соответственно. Также допустим, что побочная информация имеет предсказательную силу применительно к значениям в M через билинейную модель

$$M_{ij} \sim x_i^{\mathrm{T}} W y_j$$

для некоторой матрицы весов $W \in \mathbb{R}^{d_1 \times d_2}$. Целью задачи индуктивного восстановления матрицы является оценка ненаблюдаемых элементов M на основе наблюдаемых M_Ω и побочной строчных X и столбцовых Y характеристик.

Главенствующим допущением в подходах к решению задачи IMC является предположение о том, что матрица W имеет низкий ранг $k < \min(d_1, d_2)$, см. [12], [14]. При этом существуют два подхода к учету данного ограничения в итоговой оптимизационной задаче.

Подход 1. Использование ℓ_1 нормы сингулярных чисел матрицы W, *ядерная норма* $\|W\|_*$, в качестве разреживающего регуляризатора, приводящего к низкоранговым решениям $\|W\|_*$, см. [12], [14], [16].

Подход 2. Явная параметризация W в виде низкорангового произведения UV^{T}, где $U \in \mathbb{R}^{d_1 \times k}$ и $V \in \mathbb{R}^{d_2 \times k}$, см. [18], [20].

Мы сосредотачиваемся на втором подходе, поскольку он позволяет работать с матрицей весов W неявно через ее факторы, что упрощает отбор признаков в задачах с большими объемами данных $(d_1, d_2 \gg 1)$.

Предположим, что $\mathscr{L} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ является гладкой выпуклой функцией потерь в задаче машинного обучения, и рассмотрим следующую регуляризованную задачу минимизации:

$$\min_{U,V} \sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, (XUV^{\mathrm{T}}Y^{\mathrm{T}})_{ij}) + \lambda_U R(U) + \lambda_V R(V), \tag{1}$$

где $R(\cdot)$ – регуляризатор, и $\lambda_U, \lambda_V \geq 0$. Обычно в задачах восстановления матриц роль R играет квадрат нормы Фробениуса [14], которая имеет вид

$$\|Z\|_F^2 = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{k} z_{ij}^2$$

для некоторой матрицы $Z \in \mathbb{R}^{d \times k}$. В задаче линейной регрессии данная R эквивалентна регуляризации Тихонова. В настоящей работе мы предлагаем использовать прореживающий регуляризатор $R(Z)$ вида

$$\|Z\|_{2,1} = \sum_{i=1}^{d} \left\| e_i^{\mathrm{T}} Z \right\|_2,$$

где через e_i обозначается i-й единичный базисный вектор, чья размерность однозначна определяется контекстом выражения, в котором он участвует. Матричная функция $R(Z)$ вычисляет ℓ_1

норму вектора ℓ_2 норм строк Z. Подобный составной регуляризатор позволяет построчно прореживать матрицы U и V, т.е. наводит так называемую *групповую разреженность*, что в общем итоге создает эффект отбора побочных признаков в X и Y соответственно. Таким образом, задача индуктивного восстановления матриц с отбором признаков через групповую регуляризацию, Sparse-Group penalty Inductive Matrix Completion (SGIMC), имеет вид

$$\min_{U,V} \sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, (XUV^{\mathrm{T}}Y^{\mathrm{T}})_{ij}) + \lambda_U \|U\|_{2,1} + \lambda_V \|V\|_{2,1}. \tag{2}$$

Заметим, что численная процедура, приведенная в разд. 6, позволяет работать с комбинацией регуляризаторов. В частности, мы рассматриваем квадрат нормы Фробениуса $R(Z) = \|Z\|_{\mathrm{F}}^2$, а также поэлементную матричную L_1-норму $R(Z) = \|Z\|_{1,1} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{d}|z_{ij}|$ для большего контроля над разреженностью итогового решения.

3. АНАЛИЗ АСИМПТОТИКИ ОШИБКИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ

В данном разделе приводится анализ влияния отбора признаков на точность восстановления матриц.

Задачу индуктивного восстановления матрицы можно рассмотреть через призму машинного обучения с учителем. Действительно, наблюдаемые значения в разреженной матрице M_Ω можно рассматривать как случайную выборку значений неизвестной ненаблюдаемой матрицы W^*, полученной с использованием линейных измерений, построенных на побочных признаках X и Y. Таким образом, набор данных (X, Y, M_Ω) представляется в виде выборки $S = (x_t, y_t, b_t)_{t=1}^m$ размера $m = |\Omega|$ при фиксированном обходе индексов из Ω. Каждое значение b_t в S является результатом применения измерительного оператора A_t к W^*, который задан одноранговой матрицей $A_t = x_t y_t^{\mathrm{T}}$ размера $d_1 \times d_2$: $b_t = \langle A_t, W^*\rangle = x_t^{\mathrm{T}} W^* y_t$. С этого ракурса задача (2) эквивалентна оценке истинной W^* матрицей ранга k, заданной произведением U и V, поскольку

$$x^{\mathrm{T}}UV^{\mathrm{T}}y = \mathrm{tr}(yx^{\mathrm{T}}UV^{\mathrm{T}}) = \left\langle xy^{\mathrm{T}}, UV^{\mathrm{T}}\right\rangle = \langle A, W^*\rangle.$$

Для понимания того, возможно ли в постановке (2) оценить истинную матрицу W^* и тем самым восстановить целевую матрицу M, рассмотрим задачу (2) с дополнительными ограничениями:

$$\begin{gathered}\min_{U,V} \frac{1}{\Omega}\sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, x_i^{\mathrm{T}} W y_j) = \frac{1}{m}\sum_{t=1}^{m} \mathscr{L}(b_t, \langle A_t, W\rangle), \\ \text{при условии } \ W = UV^{\mathrm{T}}, \quad \|U\|_{2,1} \le C_U, \quad \|V\|_{2,1} \le C_V,\end{gathered} \tag{3}$$

для некоторых неотрицательных C_U и C_V. Решение (3) в данной задаче эквивалентно отысканию функции, минимизирующей функционал

$$J : \mathscr{F} \to \mathbb{R} : f \mapsto \frac{1}{m}\sum_{t=1}^{m} \mathscr{L}(b_t, f(A_t)),$$

определенный на параметрическом классе функций $\mathscr{F}$, заданным

$$\mathscr{F} = \left\{ f : \mathbb{R}^{d_1\times d_2} \to \mathbb{R} : A \mapsto \left\langle A, UV^{\mathrm{T}}\right\rangle, (U,V) \in \Theta\right\}, \tag{4}$$

где Θ означает допустимое множество параметров, заданное прямым произведением замкнутых шаров по норме $\|\cdot\|_{2,1}$ с радиусами C_U и C_V соответственно для U и V:

$$\Theta = \left\{U \in \mathbb{R}^{d_1\times k} : \|U\|_{2,1} \le C_U\right\} \times \left\{V \in \mathbb{R}^{d_2\times k} : \|V\|_{2,1} \le C_V\right\}.$$

Для того, чтобы определить, может ли класс $\mathscr{F}$ обобщить конечный набор наблюдаемых значений M на всю матрицу, необходимо оценить асимптотику ошибки восстановления этим классом. Для этого рассмотрим распределение $\mathscr{D}$ на $\mathscr{X}\times\mathscr{T}$, где $\mathscr{X} \subset \mathbb{R}^{d_1\times d_2}$ – множество матриц $d_1 \times d_2$,

а $\mathcal{T}$ является множеством допустимых значений в матрице M. Поскольку в задаче индуктивного восстановления множество $\mathcal{Z}$ задано набором ограниченных по норме матриц ранга 1 вида $A = xy^{\mathrm{T}}$, рассмотрим такие распределения $\mathcal{D}$ над $\mathcal{X} \times \mathcal{Y} \times \mathcal{T}$, для которых справедливо, что пространства побочных признаков $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{d_1}$ и $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^{d_2}$ являются ограниченными множествами. Отображение $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ в $\mathcal{Z}$ имеет вид $(x, y) \mapsto xy^{\mathrm{T}}$.

Оценка асимптотики ошибки восстановления также требует ограниченности функции потерь $\ell : \mathbb{R} \times \mathcal{T} \to \mathbb{R}$, относительно которой определяются понятия теоретического (ожидаемого) и эмпирического риска. В задаче восстановления бинарной матрицы M множество $\mathcal{T}$ равно $\{-1, +1\}$ и используется бинарная функция потерь (0–1 loss): $\ell(p, b) = 1_{p \neq b}$. Однако для анализа асимптотики ошибки в задаче восстановления вещественной матрицы $\mathcal{T} = [-B, +B]$ для некоторого $B > 0$ и функция потерь $\ell(p, b)$ равна $|p - b|^d$ при $d \geq 1$.

Определение 1 (Риск). Рассмотрим гипотезу, решающее правило или регрессионную функцию $f : \mathcal{Z} \to \mathbb{R}$. При заданном распределении $\mathcal{D}$, *теоретический* риск f задан выражением

$$R(f) = \mathop{\mathbb{E}}_{(z,b)\sim\mathcal{D}} \ell(f(z), b).$$

Для заданной выборки $S = (z_i, b_i)_{i=1}^m \sim \mathcal{D}$, *эмпирический* риск f вычисляется в виде

$$\hat{R}(f) = \mathop{\hat{\mathbb{E}}}_{(z,b)\sim S} \ell(f(z), b) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m \ell\left(f(z_i), b_i\right),$$

где $\hat{\mathbb{E}}_{(z,b)\sim S}$ означает (условное) математическое ожидание над эмпирическим распределением, порожденным выборкой S.

Для того чтобы получить оценку асимптотики верхней границы теоретического риска $R(\hat{f})$ минимизирующей гипотезы $\hat{f} = \arg\min_{f\in\mathcal{F}} \hat{R}(f)$, также известной как *оценка обобщающей способности* класса $\mathcal{F}$, в задаче (3), которая является эквивалентным представлением задачи SGIMC, рассмотрим более простой класс линейных гипотез на некотором $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^q$:

$$\mathcal{H} = \left\{h : \mathcal{K} \to \mathbb{R} : v \mapsto \langle v, \beta\rangle,\ \beta \in \mathbb{R}^q,\ \|\beta\|_1 \leq C\right\}, \tag{5}$$

и оценим асимптотику теоретического риска для (5).

Заметим, что в силу того, что пространства $\mathbb{R}^{d_1\times d_2}$ и $\mathbb{R}^q$ изоморфны для $q = d_1 d_2$, класс гипотез $\mathcal{H}$ тождественен классу $\mathcal{F}_1$, более удобному для анализа в задаче оценки значений матриц:

$$\mathcal{F}_1 = \left\{f : \mathbb{R}^{d_1\times d_2} \to \mathbb{R} : A \mapsto \langle A, W\rangle,\ \|W\|_{1,1} \leq C,\ W \in \mathbb{R}^{d_1\times d_2}\right\},$$

где $\|\cdot\|_{1,1}$ означает поэлементную L_1-норму матрицы W. Таким образом, поскольку для $C = C_U C_V$ справедливо, что $\mathcal{F} \subset \mathcal{F}_1$, из оценки асимптотики верхней границы теоретического риска для класса $\mathcal{H}$ в (5) следует оценка асимптотики ошибки восстановления для класса $\mathcal{F}$ в (4). Вложение классов следует из следующего наблюдения: если W параметризована произведением $W = UV^{\mathrm{T}}$ ранга k, тогда норму $\|W\|_{1,1}$ можно ограничить сверху произведением норм $\|U\|_{2,1}$ и $\|V\|_{2,1}$. Действительно,

$$\|W\|_{1,1} = \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2}\left|\sum_{p=1}^{k} e_i^{\mathrm{T}} U e_p e_p^{\mathrm{T}} V^{\mathrm{T}} e_j\right| \leq \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2}\sum_{p=1}^{k}\left|e_i^{\mathrm{T}} U e_p\right|\left|e_j^{\mathrm{T}} V e_p\right| \leq$$
$$\leq \sum_{i=1}^{d_1}\left\|e_i^{\mathrm{T}} U\right\|_2 \sum_{j=1}^{d_2}\left\|e_j^{\mathrm{T}} V\right\|_2 = \|U\|_{2,1}\|V\|_{2,1}.$$

Основной результат работы [24] дает равномерную оценку верхней границы теоретического риска с использованием понятия радемахеровской сложности (Rademacher complexity) класса

гипотез [25]. Радемахеровская сложность класса $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^{\mathcal{X}}$ в условиях распределения $\mathcal{D}_{\mathcal{X}}$ на множестве $\mathcal{X}$ задается в виде

$$\mathcal{R}_m(\mathcal{H}) = \mathop{\mathbb{E}}_{S\sim\mathcal{D}_{\mathcal{X}}^m} \hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H}), \tag{6}$$

где математическое ожидание берется по всем выборкам S размера m независимых одинаково распределенных случайных величин из $\mathcal{D}_{\mathcal{X}}$. При этом эмпирическая радемахеровская сложность класса $\mathcal{H}$ при условии заданной выборки $S = (z_i)_{i=1}^m \subset \mathcal{X}$ определяется в виде

$$\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H}) = \mathop{\mathbb{E}}_{\varepsilon\sim\{\pm1\}^m} \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m \varepsilon_i h(z_i), \tag{7}$$

где математическое ожидание обусловлено по выборке S и берется по случайным векторам $\varepsilon = (\varepsilon_i)_{i=1}^m$ независимых равномерных случайных величин из $\{-1, +1\}$. В настоящем анализе мы рассматриваем классы измеримых функций, для которых супремум в (7) измерим, что выполняется для линейных гипотез над конечномерными пространствами $\mathbb{R}^m$. Заметим, что используемое в настоящей работе определение радемахеровской сложности совпадает с определением в [26], которое отличается от определения из [24] и [25] отсутствием множителя 2.

Основная теорема об оценке обобщающей способности класса функций через радемахеровскую сложность из работ [25] и [26, теорема 3.1, стр. 35] предлагает оценку верхней границы теоретического риска, равномерную по гипотезам из $\mathcal{H}$.

Теорема 1 (переформулировка). *Рассмотрим ρ-липшицеву функцию потерь $\ell : \mathbb{R}\times\mathcal{T} \to [0,1]$, или бинарную функцию потерь ℓ с $\rho = 1/2$. Пусть $\mathcal{H}$ является классом функций из $\mathcal{X}$ в $\mathbb{R}$ и пусть $S = (z_i, b_i)_{i=1}^m$ задает выборку независимых одинаково распределенных случайных величин из $\mathcal{D}$ в пространстве $\mathcal{X}\times\mathcal{T}$. Тогда для любой $\delta \in (0,1)$ с вероятностью не ниже $1-\delta$ по выборкам $S \sim \mathcal{D}^m$ следующие неравенства выполняются одновременно (равномерно) для всех $h \in \mathcal{H}$*

$$R(h) \le \hat{R}(h) + 2\rho\mathcal{R}_m(\mathcal{H}) + \sqrt{\frac{\log\frac{2}{\delta}}{2m}},$$

$$R(h) \le \hat{R}(h) + 2\rho\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H}) + 3\sqrt{\frac{\log\frac{2}{\delta}}{2m}}.$$

Таким образом, для того чтобы ограничить сверху теоретический риск, достаточно найти верхнюю границу эмпирической радемахеровской сложности $\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H})$. Для этого мы воспользуемся теоремой 2 из [24], которая приводит оценку сложности для класса линейных гипотез H, ограниченных шаром L_1-нормы (LASSO hypothesis).

Теорема 2 (LASSO). *Пусть задана фиксированная выборка $S = (z_i)_{i=1}^m$ из $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^q$ размера m. Тогда справедлива следующая оценка сверху для $\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H})$ из* (7)*:*

$$\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{H}) \le \frac{C}{m}\left(2 + \sqrt{\log q}\right)\sqrt{2\sum_{i=1}^m \|z_i\|_\infty^2}. \tag{8}$$

Таким образом, для любой выборки $S = (x_t, y_t, b_t)_{t=1}^m$ размера $m = |\Omega|$ независимых одинаково распределенных элементов $\mathcal{X}\times\mathcal{Y}\times\mathcal{T}$ согласно распределению $\mathcal{D}$ с ограниченным носителем, из анализа выше и оценки (8) следует, что эмпирическая радемахеровская сложность класса гипотез $\mathcal{F}$ задачи SGIMC ограничена сверху выражением

$$\hat{\mathcal{R}}_{S_\Psi}(\mathcal{F}) \le \frac{C_U C_V}{m}\left(2 + \sqrt{\log d_1 d_2}\right)\sqrt{2\sum_{t=1}^m \|A_t\|_{\max}^2}, \tag{9}$$

где $\|A_t\|_{\max}$ равна L_∞ норме элементов матрицы A_t, а $S_{\mathscr{Z}} = (A_t)_{t=1}^m$ является проекцией выборки S на компоненту $\mathscr{Z}$, в которой $A_t = x_t y_t^{\mathrm{T}}$ преобразует точки в $\mathscr{X} \times \mathscr{Y}$ в выборку матриц из $\mathscr{Z}$. Для любого t значение нормы $\|A_t\|_{\max}$ матрицы ранга 1 ограниченно сверху произведением $\|x_t\|_\infty \|y_t\|_\infty$.

Для оценки асимптотики ошибки восстановления в задаче SGIMC воспользуемся оценкой (9) и теоремой 1 и, сделав некоторое допущение относительно гипотезы f^*, минимизирующей теоретический риск $R(f)$ по всем $f : A \mapsto \langle A, W \rangle$ и для всевозможных матриц $W \in \mathbb{R}^{d_1 \times d_2}$ ранга k. Допущение заключается в следующем: рассмотрим задачу минимизации теоретического риска с требованием низкорангового решения для распределения $\mathscr{D}$ с ограничением на носитель $\|x\|_\infty \le 1$ и $\|y\|_\infty \le 1$, но без ограничений на нормы факторов U и V:

$$\min_{U,V} \mathop{\mathbb{E}}_{(x,y,b)\sim\mathscr{D}} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, UV^{\mathrm{T}} \right\rangle\right), \tag{10}$$

с $U \in \mathbb{R}^{d_1 \times k}$, $V \in \mathbb{R}^{d_2 \times k}$, где k равен рангу матрицы M, – и обозначим парой U_*, V_* решение задачи (10). Если задача восстановления матрицы реализуема, т.е. минимизирующая пара (U_*, V_*) задачи (10) достигает *нулевого* теоретического риска (с бинарной функцией потерь, или L_d), тогда для любой выборки независимых одинаково распределенных случайных величин из $\mathscr{D}$ пара $(\hat{U}, \hat{V})$, минимизирующая эмпирический риск, также его обнуляет. Действительно, если пара $(\hat{U}, \hat{V})$, зависящая от S, является решением задачи (3) с эмпирическим риском вместо теоретического, тогда имеем

$$\mathop{\hat{\mathbb{E}}}_{(x,y,b)\sim S} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, U_* V_*^{\mathrm{T}} \right\rangle\right) \ge \mathop{\hat{\mathbb{E}}}_{(x,y,b)\sim S} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, \hat{U}\hat{V}^{\mathrm{T}} \right\rangle\right).$$

Однако, поскольку ℓ является ограниченной сверху неотрицательной функцией потерь, то для любой пары (U, V) можно получить

$$\mathop{\mathbb{E}}_{(x,y,b)\sim\mathscr{D}} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, UV^{\mathrm{T}} \right\rangle\right) = \mathop{\mathbb{E}}_{(x,y,b)\sim\mathscr{D}} \mathop{\hat{\mathbb{E}}}_{(x,y,b)\sim S} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, UV^{\mathrm{T}} \right\rangle\right) \ge 0,$$

откуда следует, что в реализуемом случае оптимальный эмпирический риск также обнуляется.

Если рассматривается бинарная функция потерь ℓ, или липшицева функция потерь с показателем ρ, тогда в реализуемом случае задачи индуктивного восстановления матриц с отбором признаков через групповую регуляризацию оценка верхней границы теоретического риска

$$R_{\mathscr{D}}(U, V) = R_{\mathscr{D}}\left(\left\langle \cdot, UV^{\mathrm{T}} \right\rangle\right) = \mathop{\mathbb{E}}_{(x,y,b)\sim\mathscr{D}} \ell\left(b, \left\langle xy^{\mathrm{T}}, UV^{\mathrm{T}} \right\rangle\right)$$

является результатом следующей теоремы, являющейся основным результатом данного раздела.

Теорема 3 (Основной результат). *Рассмотрим задачу* (3), *в которой коэффициенты* $C_U = \|U_*\|_{2,1}$ *и* $C_V = \|V_*\|_{2,1}$ *определяются решением* $(U_*, V_*) \in \mathbb{R}^{d_2 \times k} \times \mathbb{R}^{d_2 \times k}$ *задачи* (10). *Тогда для любого* $\delta > 0$ *с вероятностью не ниже* $1 - \delta$ *справедлива следующая оценка верхней границы теоретического риска для пары* $(\hat{U}, \hat{V})$, *минимизирующей эмпирический риск*:

$$R_{\mathscr{D}}(\hat{U}, \hat{V}) \le C_U C_V \frac{2^{3/2}\rho}{\sqrt{|\Omega|}}\left(2 + \sqrt{\log d_1 d_2}\right) + 3\sqrt{\frac{\log 2/\delta}{2|\Omega|}},$$

где $|\Omega|$ *равно количеству наблюдаемых значений в целевой матрице* M.

Если предположить, что теоретический риск минимизируется разреженным решением, т.е. некоторые строки матриц U_* и V_* полностью нулевые строки, тогда их $L_{2,1}$ нормы можно ограничить

$$\|U_*\|_{2,1} \le s_1 \sqrt{k} u_\infty, \quad \|V_*\|_{2,1} \le s_2 \sqrt{k} v_\infty,$$

причем s_1 и s_2 определяются верхней оценкой количества ненулевых строк, а u_∞ и v_∞ равны максимальным по модулю значениям в U_* и, соответственно, в V_*. В условиях данного предположения выполняется следующее следствие теоремы 3.

Следствие 1. Если в дополнение к предпосылкам теоремы 3 предположить, что теоретический риск минимизируется разреженным решением (U_* и V_* имеют не более чем s_1 и s_2 ненулевых строки), тогда с вероятностью не ниже $1 - \delta$ справедлива следующая оценка верхней границы:

$$R_{\mathscr{D}}(\hat{U},\hat{V}) \le s_1 s_2 k u_\infty v_\infty \frac{2^{3/2}\rho}{\sqrt{|\Omega|}}\left(2 + \sqrt{\log(d_1 d_2)}\right) + 3\sqrt{\frac{\log 2/\delta}{2|\Omega|}},$$

u_∞ и v_∞ равны максимальным по модулю значениями в матрицах U_* и, соответственно, в V_*. Более того, если распределение $\mathscr{D}$ таково, что сами побочные признаки x и y почти наверное разрежены, тогда с вероятностью не ниже $1 - \delta$:

$$R_{\mathscr{D}}(\hat{U},\hat{V}) \le s_1 s_2 k u_\infty v_\infty \frac{2^{3/2}\rho}{\sqrt{|\Omega|}}\left(2 + \sqrt{\log(r_1 r_2)}\right) + \frac{2\rho}{\sqrt{|\Omega|}} + 3\sqrt{\frac{\log 2/\delta}{2|\Omega|}},$$

где r_1 и r_2 ограничивают сверху число ненулевых значений для каждого x и y.

Из асимптотики верхних оценок ошибок восстановления, выведенных выше, можно получить процедуру для решения задачи SGIMC с ограничениями (3), если сформулировать ее как задачу регуляризованной минимизации эмпирического риска для некоторых заданных радиусов C_U и C_V. Действительно, если предположить, что пара $(\hat{U},\hat{V})$ решает

$$\min_{U,V} \sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, (XUV^{\mathrm{T}}Y^{\mathrm{T}})_{ij}) + \lambda_U \|U\|_{2,1} + \lambda_V \|V\|_{2,1},$$

где $\mathscr{L}$ является либо L_q функцией потерь, либо выпуклой мажорантой бинарной функции потерь в задаче классификации. Регуляризаторы вида $\|\cdot\|_{2,1}$ обеспечивают малость C_U и C_V в оценке верхней границы (0.3), что, в свою очередь, с высокой вероятностью приводит к низкому теоретическому риску оцененных матриц U и V ранга k.

Заметим, что в случае разреженных матриц истинных факторов U и V регуляризация с помощью нормы Фробениуса приводит к асимптотике ошибки восстановления вида

$$O(s_1 s_2 k^2 d_1 d_2 \log(d_1 d_2)/\varepsilon^2),$$

в то время когда предложенная выше оценка с высокой вероятностью дает асимптотику

$$O(s_1^2 s_2^2 k^2 \log(d_1 d_2)/\varepsilon^2),$$

что приводит к меньшему числу достаточных наблюдений в M_Ω в режиме высокого d и низкого s. Вдобавок, если побочные признаки сами по себе разрежены, то регуляризация нормой Фробениуса дает оценку

$$O(s_1 s_2 k^2 r_1 r_2 \log(r_1 r_2)/\varepsilon^2)$$

в то время как анализ, приведенный в данном разделе, дает асимптотику

$$O(s_1^2 s_2^2 k^2 \log(r_1 r_2)/\varepsilon^2).$$

В сравнении это означает, что различия в оценке количества достаточного числа наблюдаемых значений в M определяются соотношениями значений s_1, s_2, r_1 и r_2.

4. ПРОЦЕДУРА ВОССТАНОВЛЕНИЯ С ПРОРЕЖИВАНИЕМ

В данном разделе приводится описание итеративной вычислительной процедуры, решающей предложенную задачу индуктивного восстановления матриц с отбором побочных признаков (SGIMC).

Задача индуктивного восстановления матриц с отбором признаков через групповую регуляризацию (SGIMC) для набора данных (M_Ω, X, Y) может быть сформулирована в виде следующей

оптимизационной задачи: для заданного ранга $k \geq 1$ найти такие $U \in \mathbb{R}^{d_1 \times k}$ и $V \in \mathbb{R}^{d_2 \times k}$, которые доставляют минимум

$$J(U,V) = \sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, e_i^{\mathrm{T}} XUV^{\mathrm{T}} Y^{\mathrm{T}} e_j) + \lambda_U \|U\|_{2,1} + \lambda_V \|V\|_{2,1}, \tag{11}$$

где $\mathscr{L}(y,p)$ является гладкой выпуклой функцией потерь. Для восстановления вещественной матрицы M функция потерь $\mathscr{L}(y,p)$ равна $\frac{1}{2}(y-p)^2$, а для восстановления бинарной матрицы со значениями ± 1 функция имеет вид $\mathscr{L}(y,p) = \log(1+e^{-yp})$.

Норма $\|U\|_{2,1}$ является групповым регуляризатором матрицы U, "мягко" отсекая строки U с низкой L_2, тем самым производя отбор побочных признаков, поскольку восстановление матрицы M происходит при помощи $XU = \sum_{p=1}^{d_1} (Xe_p)(U^{\mathrm{T}} e_p)^{\mathrm{T}}$ в (11). Заметим, что приводимая ниже итеративная процедура также позволяет регуляризовать матрицы факторов с помощью нормы Фробениуса и поэлементной L_1 нормы для поэлементного разрежения.

Задача (11) является би-выпуклой задачей, т.е. функция $J(U,V)$ выпукла по каждому аргументу в отдельности, но не в совокупности. Естественным методом в данном случае является покоординатный спуск [20] – попеременная циклическая минимизация сначала по U при фиксированной V, затем наоборот:

$$\begin{aligned} U_{t+1} &= \arg\min_{U\in\mathbb{R}^{d_1\times k}} J(U,V_t), \\ V_{t+1} &= \arg\min_{V\in\mathbb{R}^{d_2\times k}} J(U_{t+1},V), \end{aligned} \tag{12}$$

покуда относительное изменение $U_t V_t^{\mathrm{T}}$ между последовательными шагами итерации не станет ниже заранее установленного порога. В силу того, что по каждому аргументу по отдельности целевая функция строго выпуклая из-за регуляризации, решение каждой подзадачи (12) единственно, что означает сходимость итераций процедуры к стационарной точке [22].

Структура функции потерь и регуляризации (11) означает, что целевая функция J для набора данных (M_Ω, X, Y) совпадает с целевой функцией J^{T} для $(M_\Omega^{\mathrm{T}}, Y, X)$, в которой роли аргументов U и V поменяны местами (*транспонированная* задача). Таким образом, частная целевая функция $V \mapsto J(U,V)$ при фиксированном U тождественна $U \mapsto J^{\mathrm{T}}(V,U)$ для транспонированной задачи, что приводит к тому, что достаточно разработать итеративную процедуру для решения $\min_U J(U,V)$ для данных (M_Ω, X, Y) и фиксированного V, чтобы получить полную процедуру для покоординатного спуска (12).

Частная задача (11) по U при фиксированном V имеет вид

$$\min_{U\in\mathbb{R}^{d_1\times k}} \sum_{(i,j)\in\Omega} \mathscr{L}(M_{ij}, p_{ij}) + \lambda_U R(U), \tag{13}$$

где $p_{ij} = e_i^{\mathrm{T}}(XUQ^{\mathrm{T}})e_j$, а $Q = YV$ является матрицей $n_2 \times k$. Мы предлагаем численно решать задачу (13) с помощью Метода переменных множителей (Alternating Direction Method of Multipliers, ADMM), предложенного в [27] и [28], с гарантиями сходимости, исследованными в [29] и [30]. Применительно к (13) итерации метода принимают вид

$$U_{t+1} = \arg\min_U \sum_{\omega\in\Omega} \mathscr{L}(M_\omega, p_\omega) + \frac{\lambda_R}{2}\|U\|_F^2 + \frac{1}{2\eta}\|U - (Z_t - \Phi_t)\|_F^2, \tag{14}$$

$$Z_{t+1} = \arg\min_Z \lambda_U \|Z\|_{2,1} + \frac{1}{2\eta}\|Z - (U_{t+1} + \Phi_t)\|_F^2, \tag{15}$$

$$\Phi_{t+1} = \Phi_t + (U_{t+1} - Z_{t+1}),$$

где $\eta > 0$, двойственная переменная Φ является матрицей $d_1 \times k$ и $\frac{\lambda_R}{2}\|U\|_F^2$ является вспомогательным регуляризатором, обеспечивающим сильную выпуклость целевой функции на каждой итерации.

4.1. Вычисление шага для U

Шаг для U, (14), является задачей минимизации гладкой выпуклой функции с квадратичным регуляризатором. Для L_2 функции потерь решение этой подзадачи имеет явный вид, выводимый из решения метода наименьших квадратов, а для гладких выпуклых функций потерь более общего вида $\mathcal{L}$, или в условиях нецелесообразности обращения матриц, U-шаг решается численно. Аналогичная проблема без специфичного для ADMM квадратичного регуляризатора решается в работе [31] методом сопряженных градиентов с доверительной областью (TRON), предложенного в [32] для решения линейных моделей высокой размерности. Градиент и произведение гессиан-вектор для шага (14) из некоторой точки U, которые необходимы для метода сопряженных градиентов, приводятся соответственно в (16) и (17) (см. также [31]):

$$\operatorname{grad}_U = X^{\mathrm{T}}GQ + \left(\lambda_R + \frac{1}{\eta}\right)U - \frac{1}{\eta}(Z_t - \Phi_t), \tag{16}$$

$$\operatorname{Hess} V_U(D) = X^{\mathrm{T}}(H \odot (XDQ^{\mathrm{T}}))Q + \left(\lambda_R + \frac{1}{\eta}\right)D. \tag{17}$$

Здесь матрицы X и Q имеют тот же смысл, что в (13), $D \in \mathbb{R}^{d_1 \times k}$ является "вектором" для произведения гессиан-вектор, $\odot$ обозначает поэлементное умножение согласованных по размерности матриц (произведение Адамара). При этом $n_1 \times n_2$ матрицы G в (16) и H в (17) имеют паттерн разреженности, идентичный матрице M_Ω, и вычисляются соответственно через $\mathcal{L}'(M_{ij}, p_{ij})$ и $\mathcal{L}''(M_{ij}, p_{ij})$ для $(i, j) \in \Omega$.

В работе [31] предложены ускоренные процедуры для ключевых матричных операций, необходимых для вычисления (16) и (17). Операция $S \mapsto X^{\mathrm{T}}SQ$, происходящая в обоих выражениях, отображает $n_1 \times n_2$ разреженную матрицу S с индексами Ω в плотную матрицу $d_1 \times k$, в то время как операция $D \mapsto XDQ^{\mathrm{T}}$ переводит плотную $d_1 \times k$ матрицу D в разреженную матрицу размера $n_1 \times n_2$ с индексами Ω, т.е. имеющую разреженность, идентичную целевой матрице M. Для плотной матрицы Q обе опреации имеют арифметическую сложность порядка $O(k|\Omega| + k \cdot \operatorname{nnz}(X))$, где $\operatorname{nnz}(X)$ равно $n_1 d_1$ при условии плотной матрицы X, и количеству ненулевых значений, если X разрежена.

4.2. Решение шага для Z

Целевая функция на шаге Z (15) раскладывается на d_1 независимых подзадач, по одной на каждую строку матрицы Z:

$$z_j = \arg\min_z \frac{1}{2}\|z - a_j\|_2^2 + \eta\lambda_U \|z\|_2, \quad j = 1, \ldots, d_1,$$

где $a_j = e_j^{\mathrm{T}}(U_{t+1} + \Phi_t)$. Каждая задача j имеет явное решение, вычислимое через оператор группового сжатия $z_j = \max\left\{1 - \frac{\eta\lambda_U}{\|a_j\|_2}, 0\right\} a_j$ (group shrinkage operator) [33].

5. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В данном разделе приводится экспериментальное сравнение предложенного метода индуктивного восстановления матриц с групповым регуляризатором (SGIMC) с методом IMC, предложенным в [31], а также со стандартным методом восстановления матриц (MF), основанного на факторном разложения матриц, при помощи стохастического градиентного спуска. Раздел начинается с численного эксперимента на искусственных данных, нацеленного на изучение эффектов гиперпараметров задачи и ее размерности на качество восстановления матриц. Затем алгоритмы индуктивного восстановления матриц сравниваются в задаче кластеризации и восстановления матриц на реальных наборах данных. Мы не сравниваемся с процедурой IMC из работы [16], по причине того, что существующая реализация этого алгоритма не была работоспособной даже на задачах самой низкой размерности из рассматриваемых.

5.1. Искусственные данные

В экспериментах с искусственными данными мы рассматриваем задачу индуктивного восстановления разреженной $n_1 \times n_2$ матрицу M, наблюдаемые значения которой находятся по индексам Ω. Качество восстановления метода определяется по наименьшему значению целевой метрики, рассчитанному по значениям элементов матрицы M, отсутствующих в M_Ω. Сама целевая метрика равна наименьшей относительной ошибке восстановления $\left\|\hat{M} - M\right\|_F \big/ \left\|M\right\|_F$ с $\hat{M} = X\hat{U}\hat{V}^{\mathrm{T}}Y^{\mathrm{T}}$ по всем значениям коэффициентов регуляризации $\lambda = \lambda_U = \lambda_V$ в задаче (1) из некоторого множества. Задачей данного эксперимента является получение ответа на вопрос, помогает ли встроенный в SGIMC отбор побочных признаков при восстановлении матрицы, а также на вопрос, сравнима ли предложенная процедура с аналогами по качеству в ситуации отсутствия избыточности в побочных признаках. Детали проведенных экспериментов заключаются в следующем: побочные признаки X и Y задаются независимыми случайными гауссовскими матрицами размерности $n_1 \times d$ и $n_2 \times d$ с распределением $\mathcal{N}(0, 0.05)$, и значениями $n_1 = 800$, $n_2 = 1600$ при разных d. Истинные значения факторов U^* и V^* задаются первыми $k = 25$ колонками единичной матрицы размера $d \times d$, создавая тем самым ситуацию, когда истинное число информативных побочных признаков d^* совпадает с k. Сама целевая матрица равна $M = XU^*(YV^*)^{\mathrm{T}} + \varepsilon$, где $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, 0.005)$.

Коэффициенты регуляризации λ_U и λ_V приравниваются и выбираются из множества $\{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}\}$. При этом в каждом эксперименте варьируются также следующие параметры:

- предполагаемый ранг $\hat{k}$ матрицы M либо недооценивает (20) истинный ранг $k = 25$, либо переоценивает его (30);
- число избыточных неинформативных побочных признаков равно $d - d^* \geq 0$;
- показатель разреженности матрицы M_Ω, т.е. доля наблюдаемых значений в ней, выбираются из $\rho = \dfrac{|\Omega|}{n_1 n_2}$.

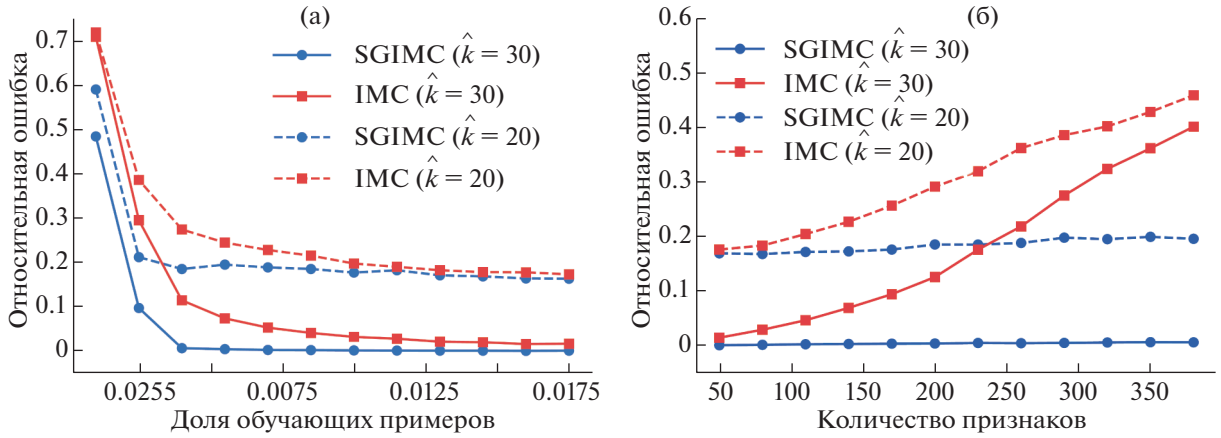
5.1.1. Показатель разреженности ρ. В данном эксперименте число признаков фиксировано $d = 100$ и предполагаемый ранг матрицы совпадает с истинным рангом $\hat{k} = k$. Показатель разреженности матрицы ρ пробегает значения от 0.0005 до 0.02 с шагом 0.0015. В данной постановке методы IMC и SGMIC достигают почти точного восстановления, когда матрица M достаточно плотная (показатель $\rho > 0.1$). Приведенные на фиг. 1а результаты работы методов в режиме $\rho < 0.01$ показывают, что SGIMC требует меньшего объема наблюдаемых значений в матрице M по сравнению с IMC для достижения сопоставимых ошибок восстановления. В то же самое время переоценка ранга также позволяет получить почти точное восстановление M.

5.1.2. Избыточные признаки. В этом эксперименте показатель ρ зафиксирован на уровне 0.2 и число побочных признаков d варьируется от 50 до 400 с шагом 50. Добавленные избыточные признаки сверх первых d^* являются случайным шумом, значения целевой матрицы от которого не зависят. Это позволяет проверить качество отбора признаков в присутствии полностью неинформативных побочных признаков. Фиг. 1б демонстрирует, что процедура SGIMC отличает информативные признаки от малоинформативных, и показывает систематически хороший результат как в режиме переоценки, так и недооценки ранга.

5.2. Данные из прикладных задач

В этом разделе мы применяем процедуры IMC, SGIMC и MF на реальных наборах данных для того, чтобы сравнить их качества восстановления.

5.2.1. Кластеризация с примерами. Рассмотрим задачу кластеризации через обучение на примерах, или, иными словами, задачу выявления классов эквивалентности между объектами. Имеется матрица X признаков размера $n \times d$ для n сущностей и задача состоит в том, чтобы построить бинарный классификатор, определяющий, принадлежат ли сущности i и j одному и тому же классу или разным классам. Таким образом, исходный набор данных состоит из матрицы M с $M_{ij} = 1$, если i и j принадлежат одному и тому классу, и -1 в противном случае.



Фиг. 1. Относительная ошибка восстановления в эксперименте с искусственными данными: а – изменение ρ разреженности матрицы M_Ω, б – добавление малоинформативных признаков $d > d^*$.

Были выбраны три набора данных из [34] для кластеризации с примерами с помощью индуктивного восстановления матрицы: “Mushrooms”, “Segment” и “Covtype” в табл. 1. Заметим, что по причине сильной несбалансированности набор “Covtype” был предобработан для балансировки классов с помошью случайного сэмплирования из доминирующего класса и полного сохранения класса, находящегося в меньшинстве.

Ввиду того, что матрица попарной принадлежности M доступна полностью, каждый набор данных случайно разбивается на обучающую и тестовую выборки, причем доля обучающих примеров варьируется от 0.0005 до 0.02 из общего числа наблюдений. Качество восстановления матрицы измеряется точностью классификации на тестовой подвыборке.

Эксперименты показывают, что матрицы попарной принадлежности каждого набора данных имеют низкий ранг, и что качество кластеризации существенно зависит от $\hat{k} = 2, \ldots, 20$. Стратегия выбора оптимального значения коэффициентов регуляризации и усреднения по независимым повторениям эксперимента аналогична п. 13.

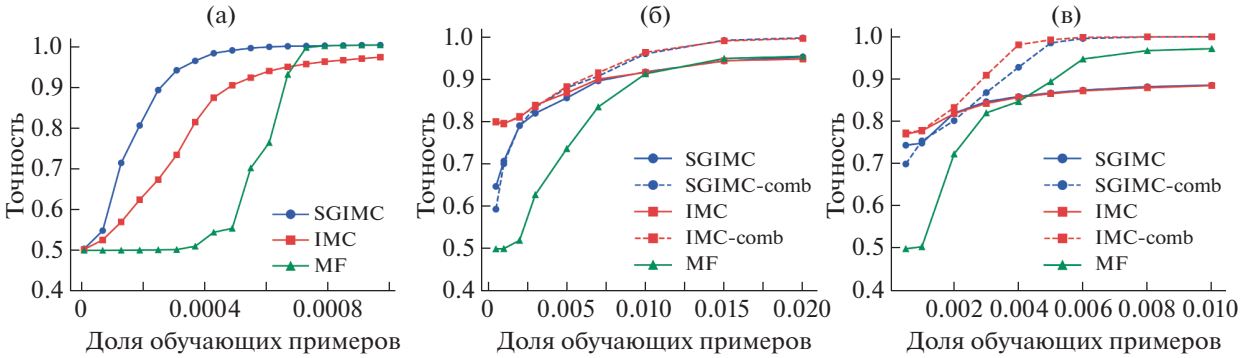
Предварительный анализ показывает, что для набора данных “Covtype” исходных побочных признаков недостаточно, чтобы IMC или SGIMC достигли точности выше 0.9, даже если ранг матрицы переоценен (фиг. 2в). Для того чтобы результаты IMC и SGIMC были сравнимы с результатами MF, к побочным признакам X были добавлены колонки диагональной единичной матрицы, что эквивалентно введению в модель фиктивных переменных (dummy variable), отражающих каждый отдельный объект. Это обогащение побочных признаков переводит методы индуктивного восстановления матриц в область методов трансдуктивного восстановления [14]. На фиг. 2б и 2в результаты обогащения побочных признаков обозначены через *SGIMC-comb* и *IMC-comb*.

В табл. 2 приведены результаты эксперимента на полуискусственных данных, полученных добавлением *умышленно* малоинформативных данных к побочным признакам набора “Segment”. Точность на тестовой подвыборке явно показывает необходимость отбора и исключения шумных и неинформативных признаков: точность восстановления процедуры IMC [31], которая не производит отбор признаков, ниже чем восстановление с групповым регуляризатором SGIMC.

5.2.2. Резистентность и восприимчивость бактерии *M. tuberculosis*. Данный набор является объединением наборов из работ [35]–[38]. Он состоит из реакций 4734 штаммов возбудителей ту-

Таблица 1. Общие характеристики наборов данных для кластеризации с примерами

Количество	“Mushrooms”	“Segment”	“Covtype”
наблюдений n	8124	2319	7370
признаков d	112	18	54
классов K	2	7	7



Фиг. 2. Точность восстановления в задаче кластеризации с примерами на разных наборах данных: а – “Mushrooms”, б – “Segment”, в – “Covtype”.

беркулеза *Mycobacterium tuberculosis* на 13 существующих антитуберкулезных препаратов. Задача состоит в том, чтобы предсказать реакцию штамма на каждый препарат (резистентность против восприимчивости). Для каждого штамма имеется сопутствующий ему вектор бинарных признаков длины 355709, отвечающих за наличие или отсутствие определенной мутации в геноме бактерии. При этом к каждому препарату также прилагается набор из 28 бинарных признаков, определяющих наличие специфических химических свойств у препарата. Для задач данного рода крайне важно, чтобы модель была интерпретируемой, что означает необходимость отбора нерелевантных свойств.

Поскольку число восприимчивых штаммов значительно превышает число штаммов, имеющих резистентность, качество восстановления измеряется с помощью метрики F_1, рассчитываемой на тестовой части набора. Значения метрики для каждого антибиотика по отдельности и всех в совокупности, представленные в табл. 3, были получены усреднением по десяти случайным разбиениям данных на обучающую и тестовую подвыборки в соотношении 1 : 1.

Результаты проведенного эксперимента позволяют заключить, что SGIMC может классифицировать реакцию штаммов на большинство препаратов лучше по F_1, чем IMC. При этом IMC

Таблица 2. Точность классификации для набора “Segment”

Дополнительные признаки	SGIMC	IMC
0	0.901 ± 0.003	0.895 ± 0.007
50	0.885 ± 0.003	0.839 ± 0.011
100	0.880 ± 0.006	0.822 ± 0.006
200	0.869 ± 0.007	0.795 ± 0.005
300	0.871 ± 0.019	0.769 ± 0.006
400	0.851 ± 0.014	0.754 ± 0.007

Таблица 3. Метрика F_1 на наборе данных *M. tuberculosis*

Препарат	SGIMC	IMC	Препарат	SGIMC	IMC
Все препараты	**0.59**	0.57	Capreomycin	**0.34**	0.28
Isoniazid	**0.89**	0.86	Amikacin	**0.47**	0.42
Ethambutol	**0.62**	0.61	Moxifloxacin	**0.45**	0.38
Rifampicin	**0.89**	0.88	Kanamycin	0.40	0.40
Pyrazinamide	0.53	0.53	Prothionamide	0.52	0.52
Streptomycin	0.84	**0.85**	Ciprofloxacin	0.52	**0.67**
Ofloxacin	**0.48**	0.42	Ethionamide	**0.50**	0.47

использует каждый из 355709 побочных признаков штаммов, что не позволяет получить осмысленную интерпретацию резистентности *M. tuberculosis* к препаратам, в то время как SGIMC отбирает всего ≈6000 из них и достигает сопоставимых показателей качества.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предлагается новый подход к индуктивному восстановлению матриц, который использует прореживающие регуляризаторы для отбора побочных признаков SGIMC. Эксперименты демонстрируют, что с помощью нового метода можно достичь высокого качества восстановления матриц как на искусственных наборах данных, так и на данных из прикладных задач. Более того, в условиях наличия большого числа малоинформативных побочных признаков метод и предложенная вычислительная процедура работают лучше, чем аналоги. Теоретический анализ показывает, что регуляризатор $L_{1,2}$, наводящий групповое прореживание, позволяет улучшить асимптотическую верхнюю оценку ошибки восстановления матрицы.

Дальнейшее развитие метода индуктивного восстановления матриц с отбором признаков через групповую регуляризацию SGIMC предлагается совершать в направлении поиска иных патернов разреженности, нежели чем построчно или по столбцам, которые естественно ожидать, например, в задачах классификации с многими метками. Дальнейшее теоретическое развитие метода может продолжаться в двух потенциальных направлениях. Первое касается разработки процедуры, имеющей глобальные гарантии сходимости, подобные [18], но работающие в условиях функции потерь более общего вида, нежели чем квадратичная, и с негладкими выпуклыми регуляризаторами, которые наводят разреженность и отбирают признаки. Второе направление затрагивает вопрос обобщения результата работы [21] в сторону постановки задачи индуктивного восстановления матриц общего плана для того, чтобы получить общую минимакс оценку границ ошибки восстановления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rennie J.D.M., Srebro N.* Fast maximum margin matrix factorization for collaborative prediction // Proc. of the 22nd Internat. Conference on Machine Learning. 2005. P. 713–719.
2. *Koren Y., Bell R., Volinsky C.* Matrix factorization techniques for recommender systems // Computer. 2009. V. 42. № 8. P. 30–37.
3. *Yi J., Yang T., Jin R., Jain A.K., Mahdavi M.* Robust ensemble clustering by matrix completion // 2012 IEEE 12th Internat. Conference on Data Mining (ICDM). 2012. P. 1176–1181.
4. *Argyriou A., Evgeniou T., Pontil M.* Convex multi-task feature learning // Machine Learning. 2008. V. 73. № 3. P. 243–272.
5. *Cabral R.S., Torre F., Costeira J.P., Bernardino A.* Matrix completion for multi-label image classification // Advances in Neural Information Proc. Systems. 2011. P. 190–198.
6. *Weng Z., Wang X.* Low-rank matrix completion for array signal processing // 2012 IEEE Intern. Conference on Acoustics, Speech and Signal Proc. (ICASSP). 2012. P. 2697–2700.
7. *Chen P., Suter D.* Recovering the missing components in a large noisy low-rank matrix: Application to SFM // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2004. V. 26. № 8. P. 1051–1063.
8. *Candès E.J., Recht B.* Exact matrix completion via convex optimization // Foundations of Comput. Math. 2009. V. 9. № 6. P. 717–772.
9. *Candès E.J., Tao T.* The power of convex relaxation: Near–optimal matrix completion // IEEE Transactions on Information Theory. 2010. V. 56. № 5. P. 2053–2080.
10. *Shamir O., Shalev-Shwartz S.* Matrix completion with the trace norm: learning, bounding, and transducing // J. of Machine Learning Research. 2014. V. 15. № 1. P. 3401–3423.
11. *Hannon J., Bennett M., Smyth B.* Recommending twitter users to follow using content and collaborative filtering approaches // Proc. of the Fourth ACM Conference on Recommender Systems. 2010. P. 199–206.
12. *Xu M., Jin R., Zhou Z.-H.* Speedup matrix completion with side information: Application to multi-label learning // Advances in Neural Information Proc. Systems. 2013. P. 2301–2309.
13. *Natarajan N., Dhillon I.S.* Inductive matrix completion for predicting gene-disease associations // Bioinformatics. 2014. V. 30. № 12. P. i60–i68.
14. *Chiang K.-Y., Hsieh C.-J., Dhillon I.S.* Matrix completion with Noisy side information // Proc. of the 28th Internat. Conference on Neural Information Proc. Systems – Vol. 2. 2015. P. 3447–3455.
15. *Si S., Chiang K.-Y., Hsieh C.-J., Rao N., Dhillon I.S.* Goal-directed inductive matrix completion // Proc. of the 22nd ACM SIGKDD Intern. Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2016. P. 1165–1174.

16. *Lu J., Liang G., Sun J., Bi J.* A sparse interactive model for matrix completion with side information // Advances in Neural Information Proc. Systems. 2016. P. 4071–4079.

17. *Guo Y.* Convex Co-Embedding for Matrix Completion with Predictive Side Information // AAAI. 2017. P. 1955–1961.

18. *Zhang X., Du S., Gu Q.* Fast and sample efficient inductive matrix completion via multi-phase procrustes flow // Proc. of the 35th International Conference on Machine Learning. 2018. P. 5756–5765.

19. *Soni A., Chevalier T., Jain S.* Noisy inductive matrix completion under sparse factor models // 2017 IEEE Intern. Symposium on Information Theory (ISIT). 2017. P. 2990–2994.

20. *Jain P., Netrapalli P., Sanghavi S.* Low-rank matrix completion using alternating minimization // Proc. of the Forty-fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing. 2013. P. 665–674.

21. *Berthet Q., Baldin N.* Statistical and computational rates in graph logistic regression // Intern. Conference on Artificial Intelligence and Statistics. 2020. P. 2719–2730.

22. *Bertsekas D.P., Tsitsiklis J.N.* Parallel and distributed computation: numerical methods. US: Prentice hall Englewood Cliffs, 1989.

23. *Boyd S., Parikh N., Chu E., Peleato B., Eckstein J.* Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers // Foundations and Trends in Machine Learning. 2011. V. 3. № 1. P. 1–122.

24. *Maurer A., Pontil M.* Structured sparsity and generalization // J. of Machine Learning Research. 2012. V. 13. P. 671–690.

25. *Bartlett P.L., Mendelson S.* Rademacher and Gaussian complexities: Risk bounds and structural results // J. of Machine Learning Research. 2002. V. 3. P. 463–482.

26. *Mohri M., Rostamizadeh A., Talwalkar A.* Foundations of Machine Learning. US: The MIT Press, 2012.

27. *Glowinski R., Marroco A.* Sur l'approximation, par éléments finis d'ordre un, et la résolution, par pénalisation–dualité d'une classe de problémes de Dirichlet non linкires // ESAIM: Math. Model. and Numerical Analysis. 1975. V. 9. P. 41–76.

28. *Gabay D., Mercier B.* A dual algorithm for the solution of nonlinear variational problems via finite element approximation // Computers & Math. with Applications. 1976. V. 2. № 1. P. 17–40.

29. *Gabay D.* Chapter IX Applications of the Method of Multipliers to Variational Inequalities // Augmented Lagrangian Methods: Applications to the Numerical Solution of Boundary–Value Problems. 1983. P. 299–331.

30. *Eckstein J., Bertsekas D.P.* On the Douglas–Rachford splitting method and the proximal point algorithm for maximal monotone operators // Math. Progr. 1992. V. 55. № 1. P. 293–318.

31. *Yu H.-F., Jain P., Kar P., Dhillon I.S.* Large-scale multi-label learning with missing labels // Proc. of the 31st Intern. Conference on Machine Learning. 2014. P. 593–601.

32. *Lin C.-J., Weng R.C., Keerthi S.S.* Trust region newton method for logistic regression // J. Mach. Learn. Res. 2008. V. 9. P. 627–650.

33. *Simon N., Friedman J., Hastie T., Tibshirani R.* A sparse-group Lasso // J. of Computational and Graphical Statistics. 2013. V. 22. № 2. P. 231–245.

34. *Chang C.-C., Lin C.-J.* LIBSVM: a library for support vector machines // ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology (TIST). 2011. V. 2. № 3. P. 1–27.

35. *Farhat M.R., Shapiro B.J., Kieser K.J., et al.* Genomic analysis identifies targets of convergent positive selection in drug-resistant Mycobacterium tuberculosis // Nature Genetics. 2013. V. 45. P. 1183–1189.

36. *Walker T.M., Kohl T.A., Omar S.V., et al.* Whole-genome sequencing for prediction of Mycobacterium tuberculosis drug susceptibility and resistance: a retrospective cohort study // The Lancet Infectious Diseases. Appl. 2015. V. 15. № 10. P. 1193–1202.

37. *Pankhurst L.J., Elias C. del O., Votintseva A.A., et al.* Rapid, comprehensive, and affordable mycobacterial diagnosis with whole–genome sequencing: a prospective study // The Lancet Respiratory Medicine. 2016. V. 4. № 1. P. 49–58.

38. *Coll F., Phelan J., Hill-Cawthorne G.A., et al.* Genome-wide analysis of multi- and extensively drug-resistant Mycobacterium tuberculosis // Nature Genetics. 2018. V. 50. № 2. P. 307–316.