

評価値行列からの潜在因子推定における制限ボルツマン マシンの挙動解析

柴田 祐樹^a

高間 康史^b

首都大学東京大学院システムデザイン研究科

a) *Shibata-hiroki@ed.tmu.ac.jp* b) *ytakama@tmu.ac.jp*

概要 本稿では、評価値行列からの潜在因子推定に適用した際の RBM(Restricted Boltzman Machine) の挙動を解析した結果について報告する. RBM を情報推薦に適用し、潜在因子ベクトルを推定することで予測評価値を求める手法が提案されている. しかしながら、それらは SVD (Singular Value Decomposition) などの従来手法よりも複雑かつ、計算コストの高いモデルを使用しているにもかかわらず、十分な精度向上が得られないことも指摘されている. 精度向上に向けた改良を検討するためには潜在因子推定における RBM の挙動を理解する必要があると考えるが、先行研究において RBM の挙動に関する考察は十分なされていない. 本稿では先行研究とは異なる構造で RBM を協調フィルタリングに用いる手法を提案し、その挙動を解析する. 人工データを用いた実験を行った結果、条件によっては評価値行列の生成に用いた元の潜在因子ベクトルを完全に復元可能であることを示す.

キーワード 制限ボルツマンマシン, 情報推薦, 評価値行列, 行列分解

1 はじめに

本稿では、評価値行列からの潜在因子推定に適用した際の RBM(Restricted Boltzman Machine) の挙動を解析した結果について報告する. 情報推薦の分野において評価値行列への行列分解法の適用が研究されている[6]. 行列分解法で用いられている主な数学的手法は評価値を潜在因子ベクトルの内積としてモデル化し、ある制約を満たすように潜在因子ベクトルを求めるものである. 例えば、特異値分解(SVD)法では 2 乗誤差を最小化し、確率的行列分解法(PMF)[6]では事後確率を最大化する.

制限ボルツマンマシン(RBM)[1]は一般化された統計モデルであり、PMF, SVD と同じグラフ構造を持っている. Salakhutdinov らは RBM を評価値行列に適用することを試み、ソフトマックスユニットを可視化層に持つ RBM を各ユーザに割り当て、それらをつなぐ辺の重み係数は同じアイテムに対してすべてのユーザで共有するモデルを提案した. 分布の近似精度は SVD に匹敵するものであったが、高計算容量を必要とするにも関わらず、大きな精度向上が得られなかったことが報告されている. また、その原因に対する数学的側面からの詳細な議論はなされていない.

本稿では RBM を用いた協調フィルタリングの新たな実装を提案する. 提案手法は単一の RBM を持ち、評価値行列を可視層の期待値としてあらわす. 隠れ層の状態はアイテム潜在因子ベクトルを示し、ほかのニュー

ラルネットワークとの複合システムの構築を容易にする. 本稿では隠れ層、可視層のユニットの状態を可視化し、その挙動を解析した結果を報告する. 人工データセットを用いた実験において、条件によっては元の潜在因子ベクトルを完全に復元可能であることを示す.

2 関連研究

2.1 協調フィルタリング

評価値行列はユーザのアイテムへの評価値から構成され、通常、行は各ユーザ、列は各アイテムに対応し、一般には大変疎な行列である. 推薦システムは未評価項目の評価値を予測し、より高い値のアイテムをユーザに示す. 評価値行列を用いて推薦を行う手法は一般的に協調フィルタリング(CF)と呼ばれる.[3]. 初めに提案された CF は k-最近傍法であり、行列分解法もまた CF に分類される[4].

本稿では U はユーザの集合を表し、 U_j はアイテム j を評価したユーザを意味する. P はアイテムの集合を意味し、 P_i はユーザ i によって評価されたアイテムの集合を意味する. $H = \{h_{jk} \mid j = 1, 2, \dots, |P|, k = 1, 2, \dots, K\}$ はアイテムの潜在因子ベクトルの集合であり、 $W = \{w_{ik} \mid i = 1, 2, \dots, |U|, k = 1, 2, \dots, K\}$ はユーザの潜在因子ベクトルの集合である. R は評価値行列で $|U| \times |P|$ の次元を持ち、各要素は r_{ij} で表される.

協調フィルタリングに共通の目的は、評価値行列から未評価アイテムの予測評価値を算出することであり、k-最近傍法ではユーザ i と推薦対象ユーザ t とのピアソン相関係数を式(1)により計算する.

Copyright is held by the author(s).

The article has been published without reviewing.

$$s_{it} = \frac{\sum_{p \in P_{it}} (r_{ip} - \bar{r}_i')(r_{tp} - \bar{r}_t')}{\beta + \sqrt{\sum_{p \in P_{it}} (r_{ip} - \bar{r}_i')^2} \sqrt{\sum_{p \in P_{it}} (r_{tp} - \bar{r}_t')^2}} \quad (1)$$

$$\bar{r}_i' = \frac{1}{|P_{it}|} \sum_{p \in P_{it}} r_{ip} \quad (2)$$

ここで、 $P_{it} = P_i \cap P_t$ であり、 β は分母が 0 になる場合を避けるための、正の微小値である。

高い s_{it} の値を持ち、アイテム j を評価しているユーザの集合 X_{tj} が与えられたとき、ユーザ t のアイテム j に対する予測評価値は式(3)で与えられる。

$$\hat{r}_{tj} = \bar{r}_t + \frac{\sum_{i \in X_{tj}} s_{it} (r_{ij} - \bar{r}_i)}{\sum_{i \in X_{tj}} s_{it}} \quad (3)$$

$$\bar{r}_i = \frac{1}{|P_i|} \sum_{p \in P_i} r_{ip} \quad (4)$$

行列分解法である SVD は評価値行列を式(5)で与えられる f を最小化することで近似する。

$$f = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left[I_{ij} (\hat{r}_{ij} - r_{ij})^2 + \lambda \sum_k \{h_{jk}^2 + w_{ik}^2\} \right] \quad (5)$$

$$\hat{r}_{ij} = \sum_k w_{ik} h_{jk} \quad (6)$$

ここで、 λ は正則化係数であり、 I_{ij} はユーザ i のアイテム j に対する評価が存在する場合1を取り、そうでなければ0を取る。また、 \hat{r}_{ij} を予測評価値として用いる。

2.2 制限ボルツマンマシン

制限ボルツマンマシン[1]は相関の強い高次元の分布を近似するために用いられる。この性質を用いて協調フィルタリングを実装する。

ボルツマンマシン(BM)の状態変数 \mathbf{z} の分布 $p(\mathbf{z}; \theta)$ は式(7)で与えられる。

$$p(\mathbf{z}; \theta) = \frac{\exp(-E(\mathbf{z}; \theta))}{Z(\theta)} \quad (7)$$

$$Z(\theta) = \sum_{\mathbf{z}} \exp(-E(\mathbf{z}; \theta)) \quad (8)$$

ここで、 θ はパラメータの集合であり、 $Z(\theta)$ は分配関数と呼ばれる。 $\sum_{\mathbf{z}} = \sum_{z_1 \in \{0,1\}} \sum_{z_2 \in \{0,1\}} \cdots \sum_{z_{|z|} \in \{0,1\}}$ は

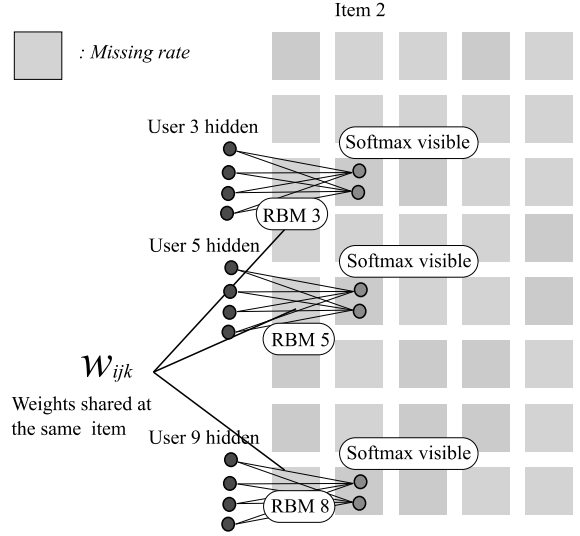


図 1 [1]における RBM の構造と評価行列

状態変数 \mathbf{z} の取りうる全組み合わせにおける総和を意味する。 $E(\mathbf{z}; \theta)$ はエネルギー関数であり、式(9)で定義される。

$$E(\mathbf{z}; \theta) = - \sum_k c_k z_k - \sum_{i,j} w_{ij} z_i z_j \quad (9)$$

ここで、 $c_i \in \mathbf{c}$ はバイアスであり、 w_{ij} は z_i と z_j を結ぶ辺の重み係数である。RBM の場合、式(9)は $\mathbf{u}, \mathbf{h} \in \mathbf{z}$ を用いて式(10)のように表される。

$$E(\mathbf{u}, \mathbf{h}; \theta) = - \sum_i a_i u_i - \sum_j b_j h_j - \sum_i \sum_j w_{ij} u_i h_j \quad (10)$$

ここで、 $a_i \in \mathbf{a}, b_j \in \mathbf{b}$ はそれぞれ u_i, h_j に対するバイアスである。

RBM を最尤推定法で学習するためには、周辺分布を計算して、隠れ層をデータの分布から除外する必要がある。周辺分布の訓練データに対する対数尤度関数を式(11)に示す。

$$l(\theta) = \sum_n \ln \sum_{\mathbf{h}} \exp(-E(\mathbf{u}_n, \mathbf{h}; \theta)) - N \ln \sum_{\mathbf{z}} \exp(-E(\mathbf{z}; \theta)) \quad (11)$$

ここで、 N は訓練データの数であり、 \mathbf{u}_n は各訓練データである。 w_{ij} を勾配上昇法により更新するための対数尤度関数の勾配は、式(11)を w_{ij} で微分することにより、式(12)で与えられる。

$$\frac{\partial l(\theta)}{\partial w_{ij}} = \sum_n \sum_{\mathbf{h}} u_{ni} h_j p(\mathbf{h} | \mathbf{u}_n) - N \sum_{\mathbf{z}} u_i h_j p(\mathbf{z}) \quad (12)$$

\mathbf{h} や \mathbf{z} に関する総和の項を近似計算するためには持続的 Contrastive Divergence (PCD)法[2]が用いられる. 直接これらの項を計算するためには $O(2^{|\mathbf{z}|})$ の計算時間を費やさなければならないが, PCD は $O(1)$ の計算時間で済む. CD 法では状態変数 \mathbf{z} をモンテカルロ法によりサンプルするため, 式(13)で与えられる条件付確率が必要となる.

$$p(z_k = 1 | \mathbf{z}_{-k}; \theta) = f_{\sigma}(c_k + \sum_m w_{mk} z_m) \quad (13)$$

ここで, $f_{\sigma}(x) = 1/(1 + e^{-x})$ はロジスティック関数であり, \mathbf{z}_{-k} は z_k を \mathbf{z} から除外することを意味する.

RBM を評価値行列に適用するためにはいくつかの工夫が必要となる. Salakhutdinov ら[1]はユーザ毎に個別の RBM を割り当て, 重みをそれぞれのアイテムに対応させ, ユーザの評価をモデル化する表現層としてソフトマックスユニットを採用した. この形式では隠れユニットはユーザの潜在因子ベクトル, 重み係数がアイテムの潜在因子ベクトルに対応し, 同じアイテムの評価に用いる重み係数は各ユーザの RBM 間で共有する. 図 1 に Salakhutdinov らの手法を示す. 上で述べたように, 一つの RBM が各行に割り当てられ, 各ユーザに対応している. また, RBM を学習するとき, 未評価値は参照しない.

3 提案手法

提案手法では隠れ層をアイテムに割り当てる. 図 2 にそのグラフ構造を示す. 文献[1]のように複数の RBM を用意する代わりに, 本手法は評価値を与えるアイテムを識別するために, 識別ユニット(Identifying units)を導入している. 識別ユニットと隠れ層の重み係数がアイテムの潜在因子ベクトルに対応する. 本構造の長所の一つとして, ほかのニューラルネットワークとの複合モデルを構築可能なことがあげられる. 図 3 は複合モデルの概念図を示す. 図 1 の構造ではアイテムの表現を重み係数に対応させており, 隠れ層に割り当てていないため, グラフ構造を維持したままコンテンツ情報を追加することが難しいと考える. 図 3 のように隠れユニット自体にアイテムの潜在因子が現れる構造であれば, 一般的なニューラルネットワークの出力を同様のグラフィカルモデルで結合することが容易となる. また図 1 の構造では重み係数の共有という通常のニューラルネットワーク

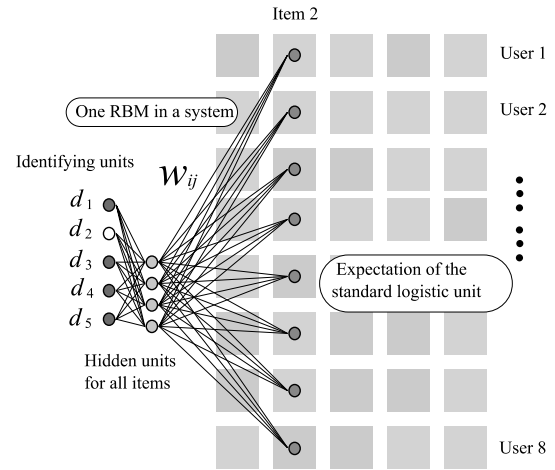


図 2. 提案する RBM と評価行列の対応.

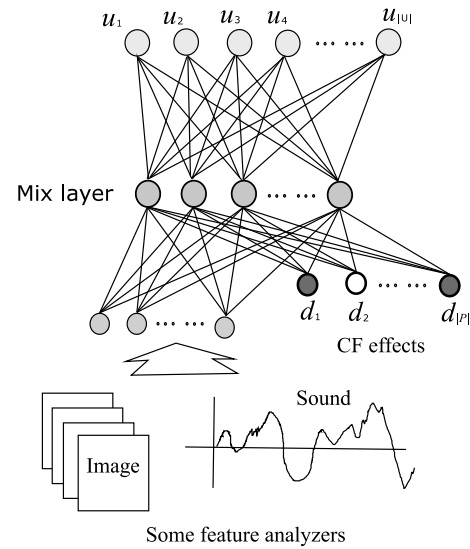


図 3. 複合システム

にはない機能を実装しなければならないが, 図 3 にはその機能を識別ユニットに持たせることで見通しの良い構造を実現している.

3.1 連続値

本稿では評価値のモデル化に状態変数の期待値を用い, 連続値を表現可能な実装を提案する. 表現層ユニットの期待値として連続値を表現するために, 式(12)を式(14)のように修正する. この実装のためにバッチサンプル数 N は 1 とする.

$$\frac{\partial L(\theta)}{\partial w_{ij}} = \sum_{\mathbf{z}} u_i h_j p(\mathbf{u}) p(\mathbf{h} | \mathbf{u}) - \sum_{\mathbf{z}} u_i h_j p(\mathbf{z}) \quad (14)$$

ここで, $p(\mathbf{u})$ は式(15)で定義される Bernoulli 分布であり, \mathbf{u} の期待値がサンプルデータである評価値行列の列ベクトルに等しくなる.

$$p(\mathbf{u}) = \prod_i r_{ic}^{u_i} (1 - r_{ic})^{1-u_i} \quad (15)$$

ここで、 c は評価値行列の列に対するインデックスであり、どのアイテムの評価が与えられているかを識別する。学習の方程式は式(16)で与えられる。

$$w_{ij}^{n+1} = w_{ij}^n + \epsilon \left[\frac{\partial L(\theta)}{\partial w_{ij}} + f_s \right] + \mu(w_{ij}^n - w_{ij}^{n-1}) \quad (16)$$

$$f_s = \beta_h \{ \rho_h (1 - \mathbb{E}[h_j]) - (1 - \rho_h) \mathbb{E}[h_j] \} \mathbb{E}[u_i] \quad (17)$$

ここで、 ϵ は学習係数、 f_s はスパース正則化項、 μ は慣性項係数、 β_h はスパース正則化係数[5]、 ρ_h は目標活性化率、 $\mathbb{E}[\cdot]$ は全訓練サンプルにおける期待値であり、実際の活性化率に等しい。本手法ではこの期待値をパルス密度変調(PDM)[9]により近似し、その微分方程式は式(18)で与えられる。

$$\tau \frac{dI_k}{dt} = -I_k + z_k \quad (18)$$

$$\mathbb{E}[z_k] \sim I_k \quad (19)$$

ここで、 τ は時定数である。離散式は、式(20)で与えられる。

$$\tau \frac{I_k^{n+1} - I_k^n}{\epsilon} = -I_k^n + z_k \quad (20)$$

ここで、 ϵ は時刻 n における学習係数である。

3.2 識別ユニット

識別ユニットはそれぞれ $d_1, d_2, \dots, d_{|P|}$ で表され、評価値を与えるアイテムを示すユニットだけが1を取り、関係のないものは0を取る。3節冒頭で述べた通り、識別ユニットは疑似的なコンテンツ情報を隠れ層に与え、別の層から入力される実際のコンテンツ情報と統合することができる。すなわち、提案手法では内容ベース、協調フィルタリング手法の混合システムへ拡張可能である。

3.3 RBM の学習

図2において、各列は一つの訓練データに対応する。RBMを学習するとき、未評価値に対応する表現ユニットは0の値にする。これは未評価値を無視することと同じであり、構造は違うが図1で示した複数RBMによる実装はこれと同じ効果を持つ。また、識別ユニットと隠れユニットの結合は単方向性である。本手法は一つの訓練データを何回も学習に用いる。予備実験において、反復適用は学習をより安定にし、CDのサンプル回数を上げるよりも効果があることを確認したためこのアプローチを採用する。

4 評価実験

4.1 データセット

本稿ではロジスティック関数 f_σ を用いて評価値の値を式(21)のように $(0, 1)$ に制限する。

$$r_{ij} = f_\sigma \left(\sum_k w_{ik} h_{jk} \right) \quad (21)$$

実験では異なる潜在因子ベクトルから生成された2種類の人工データセットを用いる。どちらの場合でも、 w_{ik} については $[-1, 1]$ に分布する一様乱数で与える。

4.1.1 基底ベクトル

アイテムの潜在因子ベクトルを式(22)に従い与える。

$$h_{jk} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \delta_{kx_{jm}} \quad (22)$$

$$p(\mathbf{X}_{jm} = k) = \frac{1}{K} \quad (23)$$

ここで、 M は基底ベクトルの数である。 \mathbf{X}_{jm} は式(23)の分布に従う確率変数である。式(22)において、基底ベクトルはクロネッカーのデルタ δ_{st} により与えられている。例えば、 $k \in \{1, \dots, 5\}$ の時、 δ_{k3} に対応する基底ベクトルは式(24)のようになる。

$$\delta_{k3} = (0, 0, 1, 0, 0)^T \quad (24)$$

4.1.2 ランダムベクトル

h_{jk} を $[0, 1]$ に分布する一様乱数で与える。なお、これは無限の基底ベクトルを用いた場合に対応する。

4.2 SVD の学習

RBMの隠れ層、表現層の条件付確率はロジスティック関数で与えられており、値域は $(0, 1)$ である。これと比較するためSVDの予測評価値、アイテムの潜在因子もそれぞれロジスティック関数で表されるものにする。具体的には、2.1節で説明したSVDの目的関数、式(5)の代わりに、式(25)を用いる。

$$f = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left[(f_\sigma(r_{ij}^*) - r_{ij})^2 + \lambda \sum_k \{ p_{jk}^2 + w_{ik}^2 \} \right] \quad (25)$$

ここで、 λ は正則化係数である。予測評価値 r_{ij}^* は

式(26)で与えられ, SVD とRBM を比較するため, h_{tk} の値域を式(27)により(0, 1)に制限する.

$$r_{ij}^* = \sum_k w_{ik} h_{jk} \quad (26)$$

$$h_{jk} = f_{\sigma}(p_{jk}) \quad (27)$$

式(25)を微分し, アイテム t , ユーザ s における目的関数の勾配は, 式(28), 式(29)で与えられ, これを用いて勾配降下法により学習する.

$$\frac{\partial f}{\partial p_{tm}} = (f_{\sigma}(r_{st}^*) - r_{st}) \cdot f'_{\sigma}(r_{st}^*) f'_{\sigma}(p_{tm}) w_{sm} + \lambda p_{tm} \quad (28)$$

$$\frac{\partial f}{\partial w_{sm}} = (f_{\sigma}(r_{st}^*) - r_{st}) \cdot f'_{\sigma}(r_{st}^*) f_{\sigma}(p_{tm}) + \lambda w_{sm} \quad (29)$$

4.3 実験結果

RBM の手法と SVD による学習結果を, Root Mean Squared Error(RMSE)により示す. また各状態変数の可視化結果も示す.

全ての結果に共通の条件をここで示す. 学習係数は式(30)の式で与えられる焼きなまし法により決定する.

$$\frac{d\epsilon}{dt} = -\ln(A) \epsilon \quad (30)$$

ここで, $t = 0$ は計算の開始を, 1 は終わりを意味する. 学習係数は最終的に初期値の $1/A$ になる. 学習係数の初期値は 0.001 とし, $A = 10$ とした. スパース正則

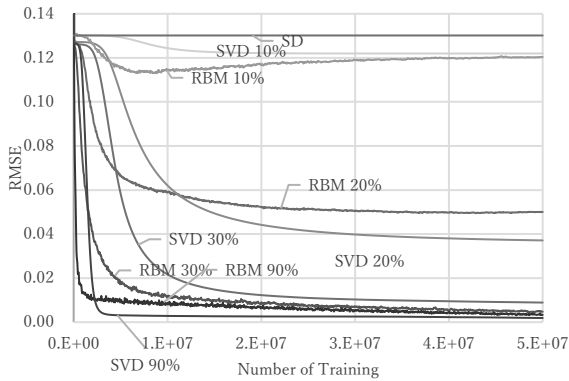


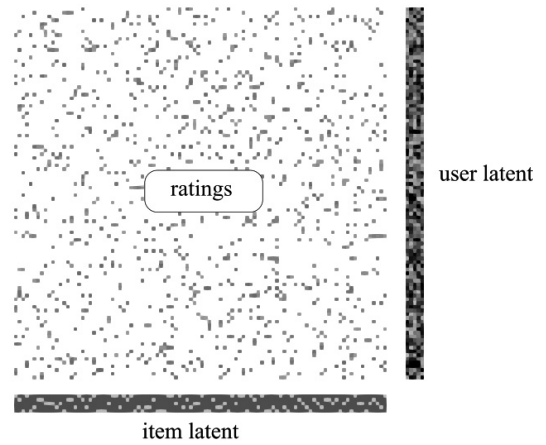
図 4 基底ベクトルにおける SVD とRBM の RMSE グラフ. 評価率 10%, 20%, 30%, 90%と標準偏差(SD)

化の各係数は $\tau = 0.1, \beta_h = 0.01, \rho_h = 0.2$ とし, 慣性項係数は $\mu = 0.9$, PCD のサンプル回数は 1, 予測評価値の算出には平均場近似[1]を用いた. データセットを生成する潜在因子ベクトルの次元は 5, $|U| = 100, |P| = 100$ である. 各学習サンプルに対し, 30 回の反復適用を行い, 総計 5×10^7 回の学習を行った.

4.3.1 基底ベクトル

ここでは基底ベクトルの学習結果を示す. 本稿では $M = 1$ の場合だけを扱う. また, 隠れ層は 10 である.

図 4 は SVD が RBM に比べ, RMSE において有効評価率が 20%, 90%の場合に低く, 30%, 10%の場合に高くなっていることを示している. 図 5 を見れば, RBM



(a)



(b)

図 5 潜在因子ベクトルの可視化. (a) 有効評価率 10%の評価値行列, (b) 基底ベクトル, RBM, SVD のアイテム潜在因子ベクトル



図 6 基底ベクトル, RBM, SVD, 直交化した SVD(SVD+O)のアイテム潜在因子ベクトルの可視化. 有効評価率 90%.

¹ 有効評価率 ρ は, $\rho = \sum |P_i| / (|U||P|)$ で与えられる.

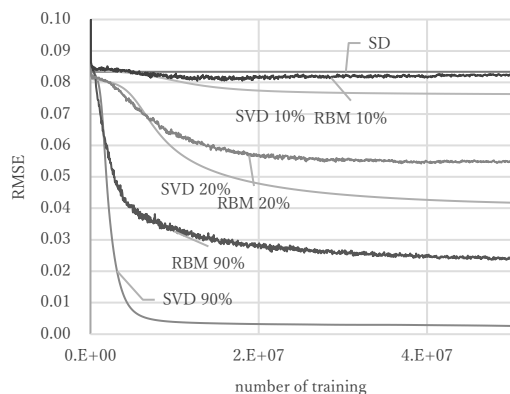


図 7 ランダムなベクトルにおける SVD と RBM の RMSE グラフ. 評価率 10%, 20%, 30%, 90% と標準偏差(SD)

は 10% の場合にほぼ元のベクトルを復元していること、図 6 からは 90% の場合において完全に元のベクトルを復元していることがわかる。

図 6 には SVD から得られた潜在因子ベクトルにグラムシュミットの直交化法を適用し、値域を $[0, 1]$ に拡張した結果も示している。この結果より、SVD では直交化を行っても元のベクトルが復元できていないことがわかる。

4.3.2 ランダムベクトル

本項ではランダムな基底ベクトルを学習した結果を示す。隠れ層の数は 20 とした。

図 7 は SVD が RBM に対してすべての場合で優れていることを示している。また、図 8 に示すように、RBM はランダムなベクトルを表現するために基底ベクトルの場合に比べより多くの隠れ層を必要としていることがわかる。ランダムなベクトルを 2 値ユニットで表現するためには多くの基底が必要になることが原因であると思われる。ランダムなベクトルに対する対処法の一つとして、Rectified Linear Unit (ReLU)[8]の導入が考えられるが、実際のユーザは何かの潜在的要因に基づき評価を行っていることが想定されるため、対応する必要性は低いと考える。

5 結論

本稿では RBM による新たな協調フィルタリング手法を提案した。人工データセットを用いた評価実験の結果、提案手法では少ない基底ベクトルから生成されたデータセットに対して低い RMSE を達成可能であり、有効評価率によっては SVD よりも良い性能が得られることを示した。また、元のベクトルを完全に復元することも示したが、このことは、評価値行列に RBM を適用した場合の挙動理解に貢献すると考える。本手法の特徴は、期待値による連続値の表現、識別ユニット、システムに単一の RBM による構成であり、また、複合システムへ拡張可能な点も重要な特徴の一つである。今後は実際のデ

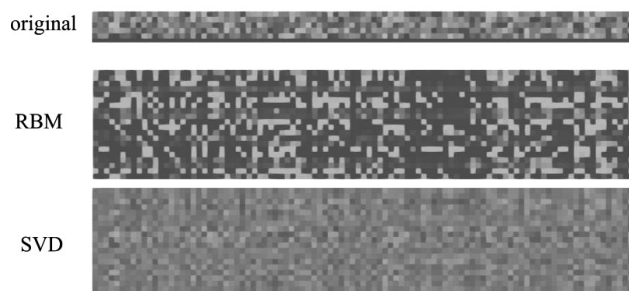


図 8 ランダムなベクトルの場合における潜在因子ベクトルの可視化. 有効評価率 90%.

ータセットに適応し、有効性および特性の検証を行う予定である。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 16K12535, 15H02780, および首都大学東京傾斜的研究費(全学分)学長裁量枠戦略的研究プロジェクト戦略的研究支援枠「ソーシャルビッグデータの分析・応用のための学術基盤の研究」の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Salakhutdinov, R. Mnih, A. and Hinton, G. "Restricted Boltzmann Machines for Collaborative Filtering," University of Toronto, Canada, Toronto, ICML, pp. 791-798, 2007.
- [2] Tieleman, T. "Training Restricted Boltzmann Machines using Approximations to the Likelihood Gradient," University of Toronto, ICML, pp. 1064-1071, 2008.
- [3] Goldberg, D. and Nichols, D. "Using Collaborative Filtering to Weave an Information Tapestry," Communications of the ACM 35. 12, pp. 61-70, 1992.
- [4] Koren, Y. Bell, R. and Volinsky, C. "Matrix Factorization Techniques For Recommender Systems," Computer 42. 8, 2009.
- [5] Hinton, G. "A Practical Guide to Training Restricted Boltzmann Machines," Momentum 9. 1, 926, 2010.
- [6] Wang, C. and Blei, D. M. "Collaborative Topic Modeling for Recommending Scientific Articles," Proceedings of the 17th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pp. 448-456, ACM, 2011.
- [7] Salakhutdinov, R. and Mnih, A. "Probabilistic Matrix Factorization," University of Toronto, Canada, NIPS, Vol. 1. No. 1, 2008.
- [8] Nair, V. Hinton, G. E. "Rectified Linear Units Improve Restricted Boltzmann Machines," University of Toronto, ICML, pp. 807-814, 2010.
- [9] Park, S. "Principles of Sigma-Delta Modulation for Analog-to-Digital Converters," MOTOROLA, 1999.