

特別研究論文

(査読済み)

研究題目

補助関数法に基づくスパース正則化付き非負値行列因子分解と行列補完への応用

提出年月日	2026年	1月	28日
氏名	和気 佑弥		
主査	北村 大地 准教授		
副査	柿元 健 准教授		
副査	重田 和弘 教授		

香川高等専門学校
専攻科
創造工学専攻



Auxiliary-function-based sparse regularized nonnegative matrix factorization and its application to matrix completion

Yuya Wake

Advanced Course in Industrial and Systems Engineering
National Institute of Technology, Kagawa College

Abstract

Nonnegative matrix factorization (NMF) is a technique that enables interpretable feature extraction through low-rank approximation under nonnegativity constraints. It is extensively utilized in a wide range of fields, including audio signal processing and image analysis. In particular, sparse NMF, which induces sparse structures in the decomposition through regularization, has gained significant attention as an effective extension for simplifying basis representations and improving robustness against noise. However, a fatal issue arises: the inherent scale ambiguity of NMF can essentially neutralize the ability of the regularization term to induce sparsity. While numerous approaches have been proposed to address this scale ambiguity, many conventional methods rely on heuristic operations, such as post-update normalization, that fail to theoretically guarantee the monotonic non-increase of the objective function, which is fundamental to algorithmic reliability. In this thesis, I re-examine these conventional challenges and derive new update rules for sparse NMF that simultaneously resolve the scale ambiguity and guarantee strict monotonic non-increase. This is achieved through a rigorous optimization framework grounded in the majorization-minimization (MM) algorithm. Furthermore, I explore the application of this framework to the matrix completion problem and investigate the impact of sparse regularization and the guarantee of monotonic non-increase on completion performance. Through numerical experiments using synthetic matrices with missing entries and audio spectrograms, I demonstrate that the proposed sparse NMF-based matrix completion methods significantly outperform non-regularized NMF. In particular, the proposed approach achieves up to a 50-fold reduction in completion error relative to the non-regularized baseline. Furthermore, the results show that enforcing theoretically consistent update rules with guaranteed monotonic non-increasing behavior further reduces the completion error by up to approximately one-third compared with update rules lacking such guarantees. By providing a rigorous organization of sparse NMF optimization theory and demonstrating its utility in practical matrix completion tasks, this research contributes to both the theoretical and practical advancement of the field.

Key Words: Low-rank, monotonic non-increase, L_1 norm constraint, missing values

(和訳)

非負値行列因子分解 (NMF) は、非負制約下での低ランク近似により、解釈性の高い特徴抽出を可能とする手法であり、音響信号処理や画像解析をはじめとする幅広い分野で活用されている。特に、正則化によって分解結果に疎な構造を誘導するスパース NMF は、基底表現の簡略化や雑音に対する頑健性の向上を目的とした有効な拡張として注目されている。しかし、NMF が本質的に有するスケール任意性により、正則化項がスパース性を誘導する効果が実質的に失われてしまうという、致命的な課題が存在する。このスケール任意性問題に対処するため、これまでも数多くの手法が提案されてきたが、更新後の正規化処理などのヒューリスティックな操作に依存する従来手法の多くは、アルゴリズムの信頼性の根幹をなす目的関数の単調非増加性を理論的に保証できないという課題を抱えている。本論文では、これら従来手法の課題を改めて整理・検証し、補助関数法に厳密に基づく最適化手法の下で、スケール任意性問題の解消と目的関数の厳密な単調非増加性を同時に保証する新たなスパース NMF の更新則を導出する。さらに、本論文では、この最適化手法を行列補完問題へ応用し、スパース正則化及び単調非増加性の保証が補完性能に与える影響について検討する。人工欠損行列および音響スペクトログラムを用いた数値実験の結果、提案するスパース NMF に基づく行列補完手法は、正則化を施さない従来の NMF と比較して補完精度を大幅に向上させることを確認した。スパース正則化により、正則化の無い従来手法と比較して補完誤差を最大で 50 分の 1 に低減し、さらに、単調非増加性が保証された理論的に一貫性のある更新則を適用することで、そのような保証のない更新則と比較して、補完誤差を最大 3 分の 1 程度削減できることを示した。本研究は、スパース NMF の最適化理論を体系的に整理するとともに、実用的な行列補完タスクにおける有効性を実証することで、当該分野における理論的及び実践的な発展の双方に貢献するものである。

目次

第 1 章	緒言	1
1.1	本論文の背景	1
1.2	本論文の目的	4
1.3	本論文の構成	5
第 2 章	スパース正則化と NMF への導入	6
2.1	はじめに	6
2.2	スパース性	6
2.2.1	最適化問題と正則化	7
2.2.2	L_1 ノルムとスパース性	7
2.2.3	スパース性の最適化における役割	9
2.3	NMF	11
2.3.1	NMF の概要	11
2.3.2	NMF の定式化	12
2.3.3	NMF の反復更新式の導出	13
2.4	スパース NMF	17
2.4.1	スパース NMF の定式化	17
2.4.2	スパース NMF の反復更新式の導出	18
2.5	本章のまとめ	19
第 3 章	補助関数法に基づくスパース NMF	21
3.1	はじめに	21
3.2	動機	21
3.2.1	スパース NMF におけるスケール任意性問題	21
3.2.2	スケール任意性を回避する既存手法	22
3.2.3	本論文の立ち位置と課題設定	24
3.3	ノルム制約に基づくスパース NMF の定式化	25
3.4	補助関数法に基づくスパース NMF の反復更新式の導出	26
3.5	本章のまとめ	27
第 4 章	スパース NMF の収束特性評価実験	29

4.1	はじめに	29
4.2	短時間フーリエ変換	29
4.3	実験方法	31
4.4	実験結果	32
4.5	本章のまとめ	34
第 5 章	スパース NMF に基づく行列補完	36
5.1	はじめに	36
5.2	動機	36
5.2.1	バイナリマスク行列を用いた NMF に基づく行列補完	36
5.2.2	NMF に基づく行列補完の課題とスパース NMF の導入動機	38
5.2.3	本論文の立ち位置と目的	38
5.3	Simple sparse NMF に基づく行列補完	39
5.4	Normalized sparse NMF に基づく行列補完	40
5.5	Model-sparse NMF に基づく行列補完	41
5.6	補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF の最適化における解析 解の困難性	41
5.7	本章のまとめ	42
第 6 章	スパース NMF に基づく行列補完の評価実験	43
6.1	はじめに	43
6.2	人工欠損行列の補完実験	44
6.2.1	実験方法	44
6.2.2	実験結果	46
6.3	スペクトログラムの補完実験	46
6.3.1	時間周波数マスク	47
6.3.2	実験方法	48
6.3.3	実験結果	50
6.4	本章のまとめ	52
第 7 章	結言	55
	謝辞	57
	参考文献	58
付録 A	補助関数法で利用される不等式	64
A.1	Jensen の不等式	64
A.2	接線不等式	64

付録 B	各ダイバージェンスにおける NMF の更新式	65
B.1	二乗ユークリッド距離に基づく NMF の更新式	65
B.2	板倉斎藤ダイバージェンスに基づく NMF の更新式	65

第 1 章

緒言

1.1 本論文の背景

非負値行列因子分解 (nonnegative matrix factorization: NMF) は, すべての要素が非負値である観測行列を, 非負の基底行列と係数行列の積へと分解近似する手法である [1, 2]. NMF の概略図を Fig. 1.1 に示す. NMF の近似分解において, 基底行列の列数及び係数行列の行数にあたる基底数を観測行列の次元よりも小さく設定することで, Fig. 1.2 のように, 元の観測行列を少数の基底ベクトルの線形結合として低ランク近似することが可能になる. このように, NMF は非負値制約下での低ランク近似を通じて, データから解釈性の高い基底表現を抽出できることから, その提案以来広く研究されてきた.

NMF がデータから解釈性の高い基底表現を抽出する実例として, 画像認識における表現学習 (representation learning in image recognition) が挙げられる [1]. これは, Fig. 1.3 に示すように, 複数の顔画像をベクトル化して並べた行列から「目」や「鼻」といった顔の構成要素に対応する基底を自動的に抽出するものである. 各顔画像はこれらのパーツ基底の加算的な組み合わせとして再構成されるため, 従来の主成分分析 (principal component analysis: PCA) などの手法と比較して, 直感的かつ解析の容易な特徴抽出が可能となる. このほかにも, NMF は, 画像・音響・テキストなど, 非負値データを対象とする多様な分野で用いられており, その拡張や最適化手法に関する研究も数多く報告されている [3].

NMF の拡張の一つとして, スパース性を導入したスパース NMF がある. スパース性とは, 推定結果の多くの要素が零, あるいは零に近い値をとる性質を指し, 「少数の本質的な成分のみが情報を担う」という仮定を反映した構造である. スパース NMF は, 基底行列や係数行列にスパースな構造を誘導することで, 解の解釈性向上や雑音に対する頑健性をもたらすことが知られている [4, 5]. 例えば, 文献 [5] では, 上述した顔画像データに対してスパース NMF を適用し, Fig. 1.4 に示すように, 制約を課す対象やその強度を調整することで, 得られる特徴表現が変化することを報告している. 具体的には, 基底行列に対して強いスパース制約を課すことで, 目や鼻といった局所的な特徴がより明瞭に抽出される一方で, 制約の与え方によっては顔全体の構造を保持したような大域的な特徴の抽出も可能となる. このように, スパース

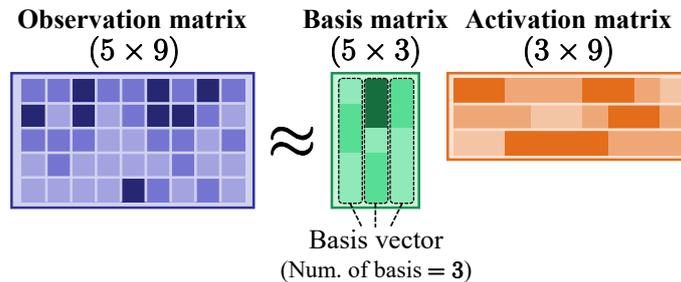


Fig. 1.1. Conceptual illustration of NMF. An observation matrix is decomposed into a basis and activation matrices.

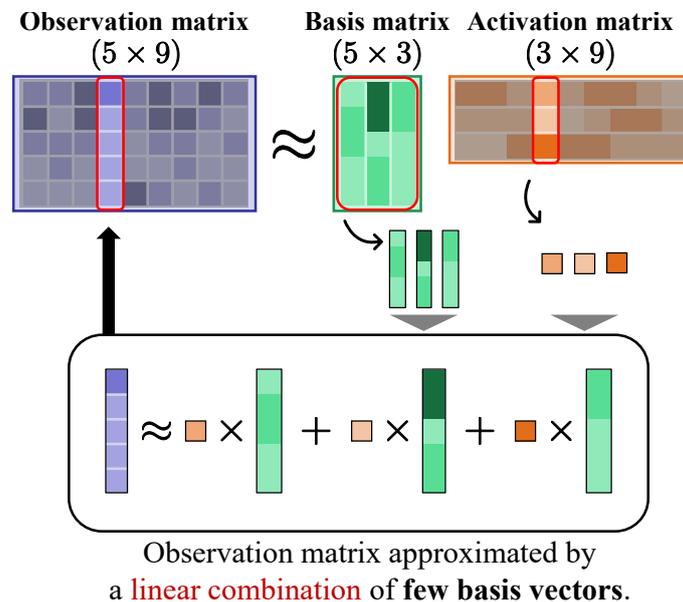


Fig. 1.2. Low-rank approximation via a linear combination of basis vectors. Each column of the observation matrix is reconstructed by combining essential basis vectors.

NMF は適切な正則化制御を通じて、解析目的に応じた柔軟な基底表現を獲得できるという利点を有している。

本論文では、上述してきた基底行列や係数行列に対して正則化や制約を課すことで、解にスパース性を誘導する NMF を、「スパース NMF」と総称する。スパース NMF は実データ解析において有効な手法として注目され、さまざまな正則化形式や制約条件が提案されてきた [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]。

一方で、スパース NMF の最適化的性質に着目すると、反復更新過程における目的関数の単調非増加性が理論的に保証された手法は必ずしも多くない。NMF は本質的に非凸最適化問題であり、反復更新アルゴリズムの安定性や収束挙動は、実用上の性能に大きく影響する。特に、補助関数法に基づく更新式では、目的関数の単調非増加性が重要な性質となるが、スパース NMF においては、ヒューリスティックな正規化操作や経験的に導出される更新式が用いられている場合も少なくない。このため、スパース正則化を導入した NMF 手法の間で、最適化

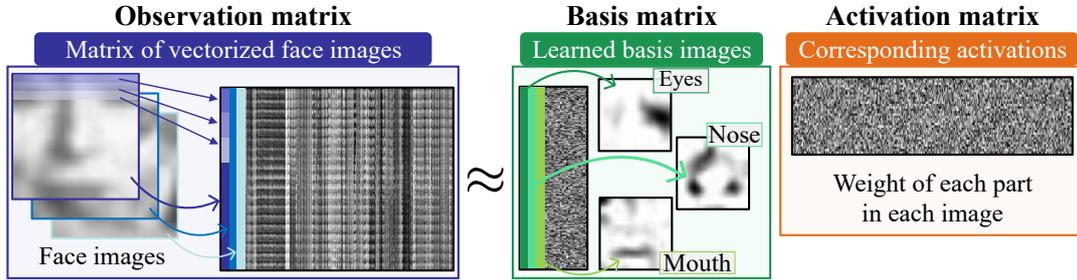


Fig. 1.3. Example of parts-based representation in face image decomposition. The observation matrix, constructed from vectorized face images, is approximated by localized basis images and their corresponding weights.

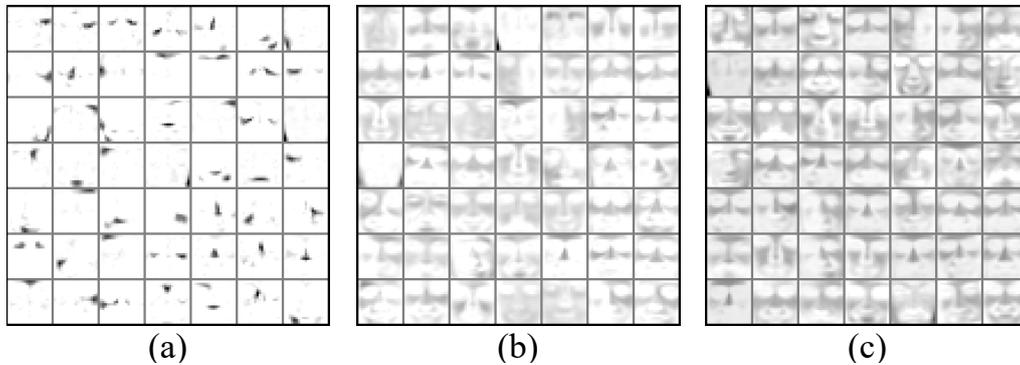


Fig. 1.4. Features learned from face image database using sparse NMF [5, Fig. 3]. (a) Basis constrained to 0.8 (regularization weight), (b) activations constrained to 0.8 (regularization weight), and (c) basis constrained to 0.2 (regularization weight). This illustrates the ability to learn localized or global representations.

理論に基づく整理が十分になされているとは言い難い。

NMF の応用タスクに立ち返ると、その強力な低ランク近似能力に着目し、欠損値を含む行列の要素を推定する行列補完 (matrix completion) においても活用されている [11, 12]. 現実の観測データにおいて、観測やその後の処理におけるデータの欠損は不可避な課題であり、Fig. 1.5 に示すように、音響信号の録音過程におけるクリッピング現象や、画像撮影時の露出不足・過多による白飛びや黒潰れ、さらにはアンケート調査における一部項目の未回答など、さまざまな形態で情報の欠落が発生する。このような不完全な観測データから元の情報を復元する行列補完は、信号処理や機械学習における最重要課題の一つであり、多くのアプローチが提案されてきた [12, 13, 14, 15]. NMF もその有力な手法の一つとして期待され、一定の効果を示している。こうした行列補完の枠組みにおいても、データの背後にあるスパース性を仮定することは、補完精度の向上やより本質的な特徴抽出に寄与すると期待される。従って、スパース NMF を行列補完へと拡張することには大きな合理性があると考えられるが、その有効性や特性については、現時点では十分な検討がなされているとは言い難い。

以上のように、スパース NMF は高い解釈性と応用力を持つ有用な手法である一方、その最

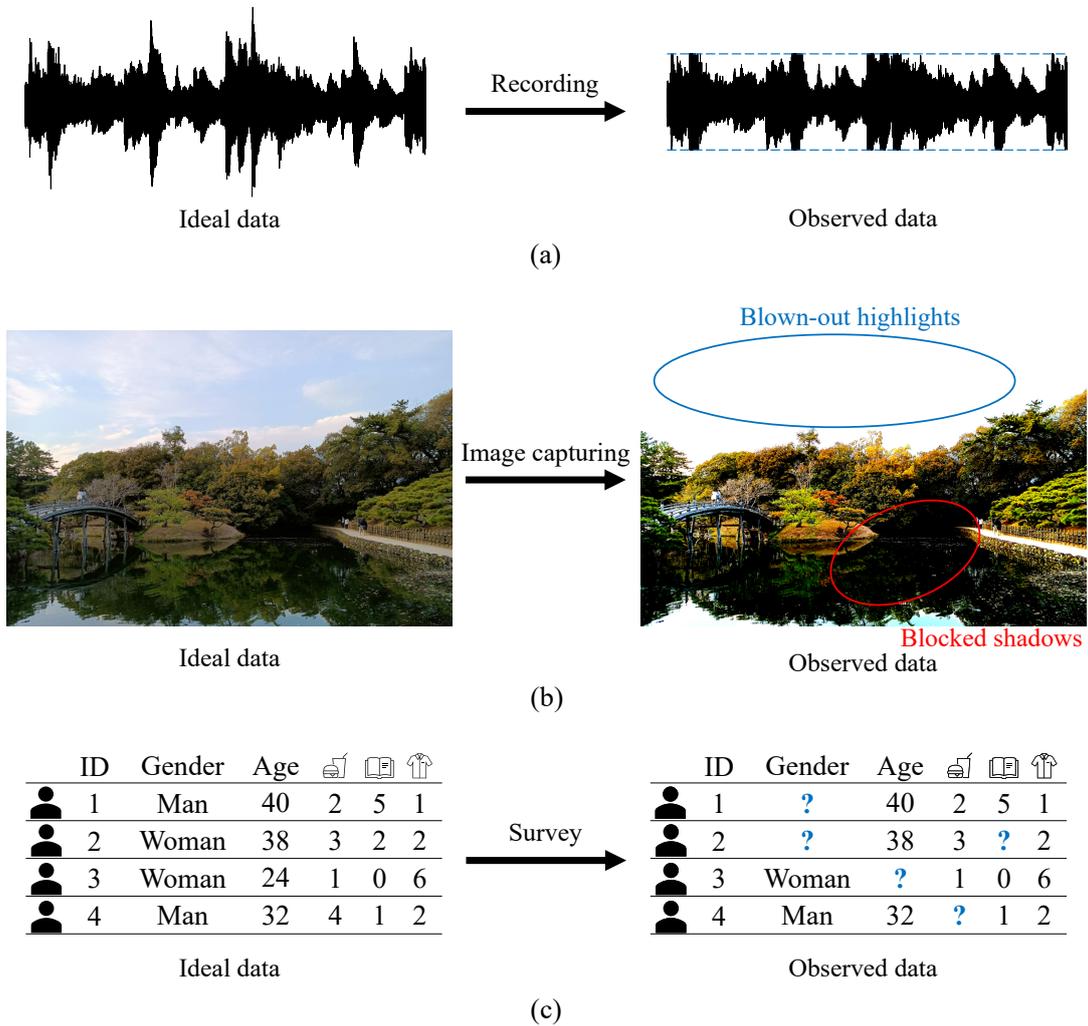


Fig. 1.5. Examples of missing or corrupted data in real-world observations. (a) Signal clipping in audio recordings, (b) blown-out highlights and blocked shadows in digital imaging, and (c) missing entries in survey datasets.

適化理論に基づく体系的な整理や、行列補完における実用的な有効性の検証には依然として検討の余地が残されている。従って、単調非増加性が保証された安定したアルゴリズムを構築することや、行列補完性能に与える影響を明らかにすることは、実データ解析におけるスパース NMF の信頼性と有用性を高める上で極めて重要な課題である。

1.2 本論文の目的

本論文の目的は、スパース NMF における反復更新アルゴリズムの最適化的性質、特に目的関数の単調非増加性に着目し、その理論的整理と応用可能性を明らかにすることである。具体的には、第一の目的として、スパース正則化付き NMF に対して、補助関数法に基づく更新式を導出し、ノルム制約を厳密に考慮した場合の単調非増加性を理論的に示す。これにより、既

存のヒューリスティックなスパース NMF 手法と比較し、最適化理論の観点からその位置づけを明確にする。

第二の目的として、スパース NMF を行列補完問題へ応用し、スパース正則化及び単調非増加性の保証が、補完性能に与える影響を数値実験によって検証する。特に、提案手法を含む複数のスパース NMF 手法を比較することで、単調非増加性を保証する更新則が、行列補完という実用的タスクにおいてどのような利点をもたらすかを明らかにする。

本論文は、スパース NMF の最適化的理解を深めるとともに、その応用可能性について体系的に検討することを目的とする。理論的な最適化特性の整理と、数値実験を通じた実用的有効性の検証を通して、スパース NMF の理論と実践を結び付ける枠組みを提示する。

1.3 本論文の構成

本論文の構成は次の通りである。第 2 章では、NMF 及びスパース NMF に関する基礎的事項を整理し、本論文で用いる記法や問題設定を明確にする。第 3 章では、スパース NMF における単調非増加性に着目し、既存手法の問題点を整理するとともに、補助関数法に基づくノルム制約付きスパース NMF を導出する。第 4 章では、音響信号のスペクトログラムを用いた近似実験により、各スパース NMF 手法の収束特性を比較・評価する。第 5 章では、スパース NMF に基づく行列補完問題を定式化し、本論文における行列補完手法の枠組みを示す。第 6 章では、人工欠損行列及びスペクトログラムを用いた補完実験を通じて、スパース正則化及び単調非増加性の有効性を検証する。最後に、第 7 章では、本論文の結論をまとめ、今後の課題と展望について述べる。

第 2 章

スパース正則化と NMF への導入

2.1 はじめに

本章では、本論文で扱うスパース正則化付き非負値行列因子分解（スパース NMF）を理解するために必要となる基礎的概念及び数理的背景について整理する。まず、2.2 節では、スパース性の概念について述べる。特に、 L_1 ノルムとスパース性との関係をベクトル及び行列の観点から説明し、さらに、スパース性が持つ構造的特徴や、最適化問題における役割について概説する。次に、2.3 節では、NMF の基本的な枠組みを導入する。NMF の概要と定式化を示した後、本論文で主に扱う一般化 KL ダイバージェンスに基づく NMF について、補助関数法を用いた反復更新式の導出を行う。そして、2.4 節では、NMF にスパース性を導入したスパース NMF を取り上げる。係数行列に L_1 ノルム正則化を課したスパース NMF の定式化を示し、一般化 KL ダイバージェンスに基づく反復更新式を導出することで、本論文の主要な対象手法の基礎を確立する。最後に、2.5 節において本章を総括し、3 章以降の議論に必要な基礎知識をまとめる。

2.2 スパース性

本節では、本論文の核となる概念であるスパース性について説明する。2.2.1 項では、一般的な推定問題の最適化定式化と、正則化によって解の構造を制御する枠組みについて述べる。2.2.2 項では、ベクトル及び行列におけるスパース性の定義と、 L_1 ノルムに基づく数学的性質を示す。2.2.3 項では、スパース性が最適化問題において果たす役割と、データ解析における意義について述べる。

2.2.1 最適化問題と正則化

一般に、観測データ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^L$ が与えられたとき、それに対応する推定量 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^L$ を求める問題は、次のような最適化問題として定式化される。

$$\underset{\mathbf{y}}{\text{Minimize}} \mathcal{F}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

ここで $\mathcal{F}(\cdot) : \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}$ はデータ適合項（損失関数）を表し、観測データと推定結果との整合性を評価する役割を担う。

しかしながら、式 (2.1) のような単純な最小化問題では、観測雑音の影響や未知パラメータの過剰な自由度により、不安定あるいは解釈困難な解が得られる場合がある。この問題に対処するため、推定結果を所望の性質へと誘導する手法として正則化（regularization）が導入される。

正則化を含む最適化問題は、一般に次の形で表される。

$$\underset{\mathbf{y}}{\text{Minimize}} \mathcal{F}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) + \nu \mathcal{R}(\mathbf{y}) \quad (2.2)$$

ここで $\mathcal{R}(\cdot) : \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}$ は正則化項を表し、 $\nu \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ はデータ適合性と正則化効果のトレードオフを制御する正則化パラメータである。

正則化パラメータ ν が推定結果に与える影響を Fig. 2.1 に示す。Fig. 2.1(a) は、データ適合項（Loss）と正則化項（Regularization）、及びそれらの和である目的関数（Sum）の関係を示したものである。正則化項が加わることで、全体の最小点（Min point）はデータ適合項のみの最小点から原点方向へと引き寄せられていることがわかる。Fig. 2.1(b) は、正則化パラメータ ν を変化させた際の目的関数の挙動を示している。 ν の値を大きくするにつれて、目的関数の最小点はより原点に近い位置へとシフトしていく。このように、正則化パラメータを適切に調整することで、観測データへの適合度と、推定解に課す制約条件とのバランスを制御することが可能となる。

正則化項 $\mathcal{R}(\mathbf{y})$ の選択によって、推定される解の構造は大きく変化する。例えば、解の滑らかさ、低ランク性、あるいは特定の成分の抑制など、問題設定に応じた様々な構造を付与することが可能である。その中でも、本論文で着目するのがスパース性を誘導する正則化である。

2.2.2 L_1 ノルムとスパース性

スパース性（sparsity）とは、ベクトルや行列において、その要素の大部分が零、あるいは零に近い値をとる性質を指す。スパースな構造は、多くの情報処理分野において重要な役割を果たしており、信号処理、画像処理、機械学習、統計的推定など幅広い分野で活用されている [16, 17, 18, 19, 20].

数理的には、ある L 次元ベクトル $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^L$ に対して、次式で定義される非零要素数 $\|\mathbf{y}\|_0$ が

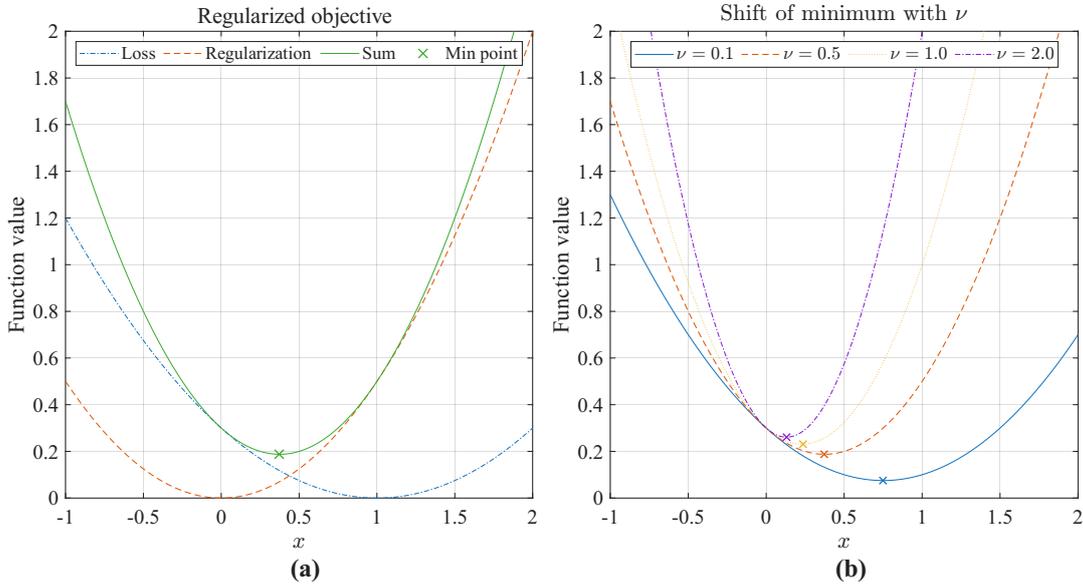


Fig. 2.1. Behavior of the objective function with regularization: (a) decomposition of the regularized objective function and (b) trajectory of the minimum point with respect to the regularization parameter ν . In (a), the addition of the regularization term shifts the global minimum from the original loss function's minimum toward the origin. In (b), as ν increases, the estimated solution is more strongly biased toward the origin, demonstrating the trade-off between data fidelity and the regularization constraint.

小さい時, そのベクトルはスパースであるという.

$$\|\mathbf{y}\|_0 = |\{l \in \mathbb{N} | y_l \neq 0\}| \quad (2.3)$$

ここで, y_l は \mathbf{y} の要素であり, $l = 1, 2, \dots, L$ はインデクスである. また, $\|\cdot\|_0$ は厳密にはノルムではなく, 非零要素の個数を表す指標であり, L_0 擬ノルム (L_0 pseudo-norm) と呼ばれる [21]. L_0 擬ノルムは式 (2.3) のように表すことができ, この指標はスパース性の理想的な尺度であるが, L_0 擬ノルムの最小化は組合せ最適化問題に帰着するため, NP 困難であることが知られている [22]. そのため, 計算量の観点から直接的に最適化へ用いることは現実的ではない.

この問題に対する実用的な代替として, 次式で表される L_1 ノルムが広く用いられている.

$$\|\mathbf{y}\|_1 = \sum_l |y_l| \quad (2.4)$$

L_1 ノルムは L_0 擬ノルムの最良の凸緩和 (convex relaxation) となっており, 多くの要素が厳密に零となる解を誘導する性質を持つ [23, 24, 25].

このようなスパース性はベクトルに限らず, 行列に対しても拡張される. 行数が L , 列数が N の行列 $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ において, 非零要素が全要素に対して十分に少ない場合, その行列はスパースであるとみなされる. スパースな行列の例を Fig. 2.2 に示す. 左図は各要素が密に分

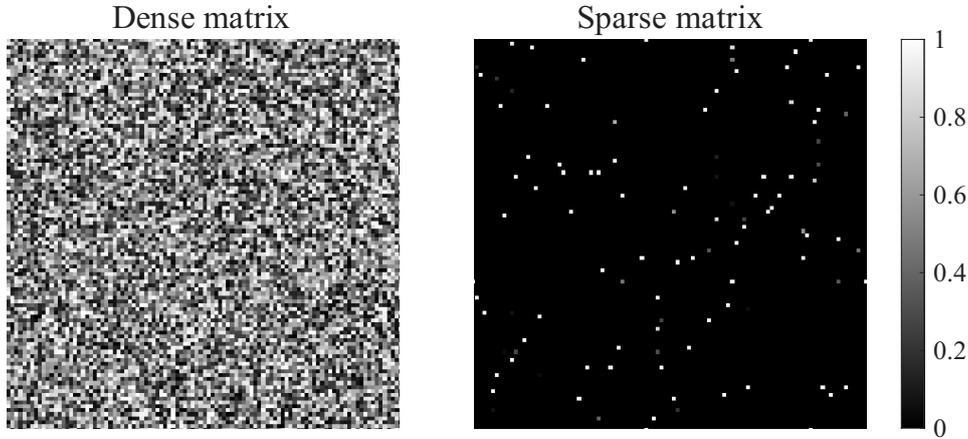


Fig. 2.2. Examples of a dense matrix (left) and a sparse matrix (right). In the sparse matrix, only a small fraction of elements take nonzero values.

布したデンスな行列であり，右図は非零要素が全体の一部に限られたスパースな行列の例である．このように，スパースな行列では，行列の次元が大きくても，実際に値を持つ要素は限られていることが分かる．

行列におけるスパース性には，上述した L_0 擬ノルムや L_1 ノルムを次式のように要素毎に適用したものが用いられる．

$$\|\mathbf{Y}\|_0 = \sum_{l,n} \mathbb{I}(y_{ln} \neq 0) \quad (2.5)$$

$$\|\mathbf{Y}\|_1 = \sum_{l,n} |y_{ln}| \quad (2.6)$$

ここで， $n = 1, 2, \dots, N$ は \mathbf{Y} の列のインデクスであり， y_{ln} は \mathbf{Y} の要素を示す．また， $\mathbb{I}(\cdot)$ は括弧内の条件が満たされた場合に 1，そうでない場合に 0 を返す指示関数である．行列に対する L_1 ノルム最小化も同様に，行列要素の多くを 0 にする効果を持つ．

2.2.3 スパース性の最適化における役割

スパース性は，単なる数値的な特徴ではなく，最適化問題において推定結果の構造を制御するための重要な役割を果たす．特に，高次元データや自由度の大きいモデルを扱う場合，スパース性を導入することで，解の安定性や解釈性を大きく向上させることができる．

スパース性のもたらす効果について，多項式フィッティングの例を Fig. 2.3 に示す． $t_n \in \mathbb{R}$ を独立変数， $x_n \in \mathbb{R}$ を観測データとし，有限個の離散データ $\{(t_n, x_n)\}_{n=1}^N$ が与えられているとする．観測データ x_n は雑音を含み，必ずしも明確な関係式が視覚的に読み取れるとは限らないものとする．

この観測データに対し， $1, t, t^2, \dots, t^N$ を基底とする高次多項式モデルを用いて x_n の推定値 y_n を求めると，自由度の高さにより観測データを過剰に追従した推定結果が得られる．一

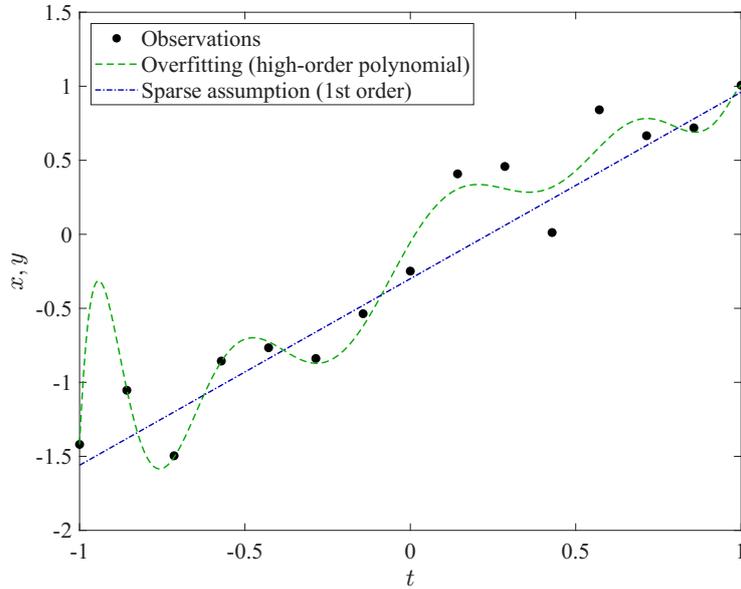


Fig. 2.3. Example illustrating the effect of sparsity in polynomial fitting. A high-order polynomial model excessively follows the observed data, whereas a sparse assumption yields a low-order structured estimate.

方で、推定結果が少数の基底成分のみから構成される、即ちスパースであるという仮定を導入すると、高次成分が抑制され、観測データがばらついている場合であっても低次の構造を持つ推定結果が得られる。

Fig. 2.3 は、高次多項式による過剰なフィッティングと、スパース性を仮定した推定結果を比較した例である。この例は、スパース性の仮定がモデルの複雑さを制御し、本質的な構造を抽出する働きを持つことを視覚的に示している。

多くの実データは、見かけ上は高次元であっても、少数の本質的な成分によって記述可能である場合が多い。このような状況において、スパース性を仮定した推定は、不要あるいは冗長な成分を自動的に抑制し、データ生成過程を反映した簡潔な表現を与える。

最適化問題の観点から見ると、スパース性は主に正則化項として導入される。特に、 L_1 ノルムに基づく正則化は、解の多くの要素を厳密に零とする効果を持ち、スパース解を効率的に誘導することが知られている。この性質により、スパース正則化はモデル選択や特徴選択の役割も同時に果たす。

代表的なスパース正則化付き最適化問題は、次のように表される [26, 27].

$$\underset{\mathbf{y}}{\text{Minimize}} \mathcal{F}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) + \nu \|\mathbf{y}\|_1 \quad (2.7)$$

ここで、 $\mathcal{F}(\cdot)$ はデータ適合項を、 $\|\mathbf{y}\|_1$ はスパース性を誘導する正則化項を表す。重み係数 ν の値を調整することで、データへの適合性とスパース性とのバランスを制御することが可能である。

このような枠組みは、統計学においては Lasso (least absolute shrinkage and selection

operator) [25], 信号処理においては基底追跡 (basis pursuit) [24] として知られ, 多くの分野で基盤的手法として用いられてきた. 本論文で扱う NMF においても, 基底行列あるいは係数行列にスパース正則化を導入することで, 分解結果の構造制御及び解釈性の向上が期待される.

2.3 NMF

2.3.1 NMF の概要

NMF とは非負の観測行列を 2 つの非負行列の行列積で近似的に分解する数値アルゴリズムである. 2 つの非負行列の行列積による近似行列を低ランクに制約することで, 観測行列の低ランク性を仮定した分解が可能になる. NMF は, この非負制約及び低ランク近似の両性質により, 観測行列に頻出する少数の潜在的なパターンを抽出することが可能な教師なし学習手法として位置付けられる.

実世界では, 音の振幅時間周波数行列 (振幅スペクトログラム) や画像等の非負行列で表されるデータが多く存在する. このようなデータに NMF を適用することで, 得られる基底行列と係数行列もまた非負であるため, 加法的な構成要素 (パーツ) としての解釈が容易である. このため, 商品の購買データパターン抽出 [28] や音源分離 [11] 等のパターン認識を活用する分野で広く用いられている.

NMF による行列の近似分解は次の式で表される.

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{W}\mathbf{H} \quad (2.8)$$

ここで, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times J}$ は全要素が非負の観測行列であり, $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \ \mathbf{w}_2 \ \cdots \ \mathbf{w}_K] \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times K}$ 及び $\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1 \ \mathbf{h}_2 \ \cdots \ \mathbf{h}_K]^T \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{K \times J}$ は NMF で推定すべき非負変数行列で, \mathbf{W} は基底行列, \mathbf{H} は係数行列と呼ばれる. I 及び J はそれぞれ観測行列の行数と列数である. また, \mathbf{W} の列ベクトルである \mathbf{w}_k は基底ベクトルと呼ばれ, K は基底ベクトルの個数を示す. $k = 1, 2, \dots, K$ は基底ベクトルのインデックス, \cdot^T は転置である. NMF は基底ベクトルの数 K を $K \ll \min(I, J)$ となるように設定することで, 観測行列 \mathbf{X} を式 (2.8) のように低ランク近似する. Fig. 2.4 は, NMF による行列の分解近似の例である. このように, 観測行列を非負値の基底行列と係数行列で表現することで, ランクを基底ベクトルの数 K に抑えた近似行列 $\widehat{\mathbf{X}}$ を式 (2.8) のように得ることができる.

NMF の解には, 原理的に次の 2 つの任意性が存在することに注意が必要である.

- 順序の任意性 (permutation ambiguity)

\mathbf{W} に含まれる K 本の基底ベクトル $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_K$ の順序を入れ替えても, \mathbf{H} に含まれる係数ベクトル $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_K$ を同様の順序に入れ替えれば, $\mathbf{W}\mathbf{H}$ は一致する.

$$\text{例: } [\mathbf{w}_1 \ \mathbf{w}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{h}_1^T \\ \mathbf{h}_2^T \end{bmatrix} = [\mathbf{w}_2 \ \mathbf{w}_1] \begin{bmatrix} \mathbf{h}_2^T \\ \mathbf{h}_1^T \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{Nonnegative} & & \text{Basis} & & \text{Activation} & & \text{Estimated} \\
 \text{observed} & & \text{matrix} & & \text{matrix} & & \text{matrix} \\
 \text{matrix} & & & & & & \\
 \mathbf{X}^{(I \times J)} & \approx & \mathbf{W}^{(I \times K)} & \mathbf{H}^{(K \times J)} & = & \widehat{\mathbf{X}}^{(I \times J)} \\
 \begin{array}{c} I \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 5 & 3 \end{pmatrix} \\ J \end{array} & \approx & \begin{array}{c} \text{Basis} \\ I \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \\ K \end{array} & \begin{array}{c} K \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \\ J \text{ Activation} \end{array} & = & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 6 & 3 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Fig. 2.4. Decomposition of observed matrix using NMF.

- 大きさの任意性 (scale ambiguity)

\mathbf{W} に含まれる K 本の基底ベクトル $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_K$ のそれぞれに対して c_1, c_2, \dots, c_K というスカラーを乗じて、 \mathbf{H} に含まれる係数ベクトル $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_K$ のそれぞれに対して $c_1^{-1}, c_2^{-1}, \dots, c_K^{-1}$ を乗じれば、 \mathbf{WH} は一致する。

$$\text{例: } \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{h}_1^T \\ \mathbf{h}_2^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \mathbf{w}_1 & c_2 \mathbf{w}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{-1} \mathbf{h}_1^T \\ c_2^{-1} \mathbf{h}_2^T \end{bmatrix}$$

また、 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の推定は非凸最適化問題となるため、大域的最適解が得られる保証はなく、初期値依存性を持つ。

2.3.2 NMF の定式化

NMF では、観測行列 \mathbf{X} と近似行列 \mathbf{WH} の間の乖離度 (ダイバージェンス) $\mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{WH})$ を最小化する問題を解く。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) \quad \text{s.t. } w_{ik} \geq 0, h_{kj} \geq 0 \tag{2.9}$$

ここで、 x_{ij} , w_{ik} , 及び h_{kj} はそれぞれ \mathbf{X} , \mathbf{W} , 及び \mathbf{H} の要素であり、 $i = 1, 2, \dots, I$ 及び $j = 1, 2, \dots, J$ はそれぞれ観測行列の行インデックス及び列インデックスを示す。

コスト関数となるダイバージェンスには、データの統計的性質に応じて主に以下の3つが用いられる。

- 二乗ユークリッド距離 (squared Euclidean distance)

非負の観測データ \mathbf{x} がガウス分布に従うことを仮定した場合の母数の最尤推定に相当する。

$$\mathcal{D}_{\text{Eu}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) = \sum_{i,j} d_{\text{Eu}} \left(x_{ij} \mid \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \tag{2.10}$$

$$= \sum_{i,j} \left(x_{ij} - \sum_k w_{ik} h_{kj} \right)^2 \tag{2.11}$$

- 一般化 Kullback–Leibler (KL) ダイバージェンス (generalized KL divergence)
非負の観測データ \mathbf{x} がポアソン分布に従うことを仮定した場合の母数の最尤推定に相当する.

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) = \sum_{i,j} d_{\text{KL}} \left(x_{ij} \mid \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \quad (2.12)$$

$$= \sum_{i,j} \left(x_{ij} \log \frac{x_{ij}}{\sum_k w_{ik} h_{kj}} - x_{ij} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \quad (2.13)$$

- 板倉斎藤ダイバージェンス (Itakura–Saito divergence)
非負の観測データ \mathbf{x} が指数分布に従うことを仮定した場合の母数の最尤推定に相当し、スケール不変性を持つ.

$$\mathcal{D}_{\text{IS}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) = \sum_{i,j} d_{\text{IS}} \left(x_{ij} \mid \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \quad (2.14)$$

$$= \sum_{i,j} \left(\frac{x_{ij}}{\sum_k w_{ik} h_{kj}} - \log \frac{x_{ij}}{\sum_k w_{ik} h_{kj}} - 1 \right) \quad (2.15)$$

これらは一般に β ダイバージェンス [29] として統一的に記述可能であり、 $\beta = 2$ が二乗ユークリッド距離の定数倍、 $\beta = 1$ が一般化 KL ダイバージェンス、 $\beta = 0$ が IS ダイバージェンスに相当する. 本論文では、主に式 (2.13) で示される一般化 KL ダイバージェンスに基づく NMF (以下, KLNMF) を取り扱う. 以降、特に断りのない限り、本論文において「NMF」と記した場合には、KLNMF を指すものとする.

2.3.3 NMF の反復更新式の導出

NMF における最適化問題 (2.9) は、 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の双方に関して同時には凸ではなく、一般に非凸最適化問題となる. そのため、大域的最適解が得られる保証はなく、反復的な最適化アルゴリズムによって局所的な最小値を探索することが一般的である. このような非凸最適化問題に対しては、勾配法やその変種を用いた反復更新も考えられるが、これらの手法ではステップサイズを選択が収束挙動に影響を与え、反復ごとに目的関数が単調に減少するとは限らない. 特に、初期値依存性を持つ NMF においては、反復更新の安定性や再現性の観点から、目的関数の単調非増加性を保証する更新則が望ましい [10].

このような背景から、NMF の最適化においては補助関数法 (上界最小化 (majorization-minimization: MM) アルゴリズムとも呼ばれる) [30, 31] が広く用いられてきた. 補助関数法を説明するため、次の最適化問題を考える.

$$\underset{\boldsymbol{\theta}}{\text{Minimize}} \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) \quad (2.16)$$

ここで、 $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})$ は目的関数、 $\boldsymbol{\theta}$ は全ての最適化変数をまとめたベクトルである. 補助関数法では、目的関数 $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})$ を直接最小化する代わりに、 $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) \leq \mathcal{J}^+(\boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}})$ かつ $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{J}^+(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta})$ を

満たす補助関数 \mathcal{J}^+ を設計し、これを逐次最小化することで目的関数の単調非増加を保証する。この性質により、補助関数法は非凸最適化であるNMFに対しても安定かつ扱いやすい最適化手法を提供する。なお、 $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ は変数 $\boldsymbol{\theta}$ に対する補助変数である。

本論文ではKLNMFを主対象とするため、その反復最適化更新式の導出について詳述する。式(2.13)より、KLNMFの目的関数は次のように展開できる。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{J}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (2.17)$$

$$\mathcal{J}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_i \sum_j \left[x_{ij} \log \frac{x_{ij}}{\sum_k w_{ik} h_{kj}} - \left(x_{ij} - \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \right] \quad (2.18)$$

定数項を整理すると、目的関数は次式のように書き換えられる。

$$\mathcal{J}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_i \sum_j \left(x_{ij} \log x_{ij} - x_{ij} \log \sum_k w_{ik} h_{kj} - x_{ij} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \quad (2.19)$$

式(2.19)の第2項には k に関する総和を含む対数関数が現れるため、 w_{ik} 及び h_{kj} に関する停留点を直接求めることは困難である。そこで、負の対数関数が凸関数であることに着目し、付録(A.1)に示す Jensen の不等式(A.1)を用いて、目的関数を上から抑える補助関数を構成する。式(2.19)の第2項に対して、次の不等式を考える。

$$\begin{aligned} -\log \sum_k w_{ik} h_{kj} &= -\log \sum_k \delta_{ijk} \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} \\ &\leq -\sum_k \delta_{ijk} \log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} \end{aligned} \quad (2.20)$$

ここで、 $\delta_{ijk} \geq 0$ は補助変数であり $\sum_k \delta_{ijk} = 1$ を満たす。式(2.20)は、Jensenの不等式において、凸関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ を $f(\cdot) = -\log(\cdot)$ として適用した不等式である。この不等式を式(2.19)の第2項に適用することで、補助関数を次式のように定義できる。

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &\leq \mathcal{J}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Delta}) \\ &= \sum_i \sum_j \left(x_{ij} \log x_{ij} - x_{ij} \sum_k \delta_{ijk} \log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} - x_{ij} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

ここで、 $\boldsymbol{\Delta} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times J \times K}$ は補助変数 δ_{ijk} を要素とする3階のテンソルである。

次に、補助関数 $\mathcal{J}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Delta})$ に対する補助変数 $\boldsymbol{\Delta}$ の最小化について考える。いま、補助変数には等式制約条件 $\sum_k \delta_{ijk} = 1$ が課せられているため、次の等式制約条件付き最適化問題を考える。

$$\underset{\boldsymbol{\Delta}}{\text{Minimize}} \mathcal{J}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Delta}) \text{ s.t. } \sum_k \delta_{ijk} = 1 \quad \forall i, j \quad (2.22)$$

最適化問題(2.22)のLagrange関数は次式で与えられる。

$$\mathcal{L}(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Delta}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{J}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Delta}) - \boldsymbol{\lambda} \left(\sum_k \delta_{ijk} - 1 \right) \quad (2.23)$$

従って, δ_{ijk} 及び λ に関する Lagrange 関数の偏微分をそれぞれ 0 とおくことで, 次式を得る.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \delta_{ijk}} = -x_{ij} \left(\log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} - 1 \right) - \lambda = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = - \sum_k \delta_{ijk} + 1 = 0 \quad (2.25)$$

式 (2.25) は等式制約条件 $\sum_{k=1}^K \delta_{ijk} = 1$ そのものである. また, 式 (2.24), $\delta_{ijk} > 0$, 及び $w_{ik}, h_{kj} \geq 0$ より次式となる.

$$\delta_{ijk} = w_{ik} h_{kj} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{ij}} - 1 \right) \quad (2.26)$$

式 (2.26) の両辺に対して k について総和をとると次式を得る.

$$\sum_k \delta_{ijk} = \sum_k w_{ik} h_{kj} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{ij}} - 1 \right) \quad (2.27)$$

よって, 等式制約条件 $\sum_k \delta_{ijk} = 1$ より次式を得る,

$$\sum_k w_{ik} h_{kj} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{ij}} - 1 \right) = 1 \quad (2.28)$$

未定乗数 λ は k に依らない定数であるため, 結局, 次式となる.

$$\exp \left(1 - \frac{\lambda}{x_{ij}} \right) = \sum_k w_{ik} h_{kj} \quad (2.29)$$

これを式 (2.26) に代入することで, 補助変数の最小解が次式を得る.

$$\delta_{ijk} = \frac{w_{ik} h_{kj}}{\sum_{k'} w_{ik'} h_{k'j}} \quad \forall i, j, k \quad (2.30)$$

従って, 式 (2.30) が補助関数 (2.22) の補助変数に関する最小解を与える. 今, 変数の更新の反復回数を u とし, 各変数の上付き文字として表示すると, 次のようになる.

$$\delta_{ijk}^{(u+1)} = \frac{w_{ik}^{(u)} h_{kj}^{(u)}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(u)} h_{k'j}^{(u)}} \quad \forall i, j, k \quad (2.31)$$

続いて, 設計した補助関数 $\mathcal{J}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta})$ を本来の変数 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} について最小化する. 初めに, 補助関数 (2.21) を w_{ik} で偏微分して 0 とおき, 次式を得る.

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{\text{KL}}^+}{\partial w_{ik}} = \sum_j \left(-x_{ij} \delta_{ijk} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik} h_{kj}} \frac{h_{kj}}{\delta_{ijk}} + h_{kj} \right) = 0 \quad (2.32)$$

式 (2.32) を整理すると次式のようになる.

$$\begin{aligned}
 -\sum_j x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik}} + \sum_j h_{kj} &= 0 \\
 w_{ik} \sum_j h_{kj} &= \sum_j x_{ij} \delta_{ijk} \\
 w_{ik} &= \frac{\sum_j x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_j h_{kj}}
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

式 (2.33) が補助関数 (2.21) を最小化する w_{ik} となる. 反復回数 u を記述し, 次式を得る.

$$w_{ik}^{(u+1)} = \frac{\sum_j x_{ij} \delta_{ijk}^{(u+1)}}{\sum_j h_{kj}^{(u)}} \tag{2.34}$$

同様に, 補助関数 (2.21) を h_{kj} で偏微分して 0 とおくと, h_{kj} の最小解も次のように得られる.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{KL}}^+}{\partial h_{kj}} &= \sum_i \left(-x_{ij} \delta_{ijk} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik} h_{kj}} \frac{w_{ik}}{\delta_{ijk}} + w_{ik} \right) = 0 \\
 -\sum_i x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{h_{kj}} + \sum_i w_{ik} &= 0 \\
 h_{kj} \sum_i w_{ik} &= \sum_{i=1} x_{ij} \delta_{ijk} \\
 h_{kj} &= \frac{\sum_i x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_i w_{ik}}
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

反復回数 u を考慮して記述すると, 次のようになる.

$$h_{kj}^{(u+1)} = \frac{\sum_i x_{ij} \delta_{ijk}^{(u+1)}}{\sum_i w_{ik}^{(u+1)}} \tag{2.36}$$

従って, 式 (2.20) で補助変数を更新し, 式 (2.34) 及び式 (2.36) で本来の変数を更新する. この2つの手順を繰り返すことで, 目的関数 (2.19) の値を最小化する \mathbf{W} 及び \mathbf{H} を求めることができる.

ここで, 補助変数の反復更新式 (2.31) を式 (2.34) 及び式 (2.36) に代入することで, 次式の

ような統合された反復更新式が得られる。

$$\begin{aligned} w_{ik}^{(u+1)} &= \frac{\sum_j x_{ij} \frac{w_{ik}^{(u)} h_{kj}^{(u)}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(u)} h_{k'j}^{(u)}}}{\sum_j h_{kj}^{(u)}} \\ &= w_{ik}^{(u)} \frac{\sum_j \frac{x_{ij}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(u)} h_{k'j}^{(u)}} h_{kj}^{(u)}}{\sum_j h_{kj}^{(u)}} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} h_{kj}^{(u+1)} &= \frac{\sum_i x_{ij} \frac{w_{ik}^{(u+1)} h_{kj}^{(u)}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(u+1)} h_{k'j}^{(u)}}}{\sum_i w_{ik}^{(u+1)}} \\ &= h_{kj}^{(u)} \frac{\sum_i \frac{x_{ij}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(u+1)} h_{k'j}^{(u)}} w_{ik}^{(u+1)}}{\sum_i w_{ik}^{(u+1)}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

式 (2.37) 及び式 (2.38) は、次のように行列形式で表現することができる。

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\mathbf{X} \mathbf{H}^T}{\mathbf{1}^{(I \times J)} \mathbf{H}^T} \quad (2.39)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T \mathbf{X}}{\mathbf{W}^T \mathbf{1}^{(I \times J)}} \quad (2.40)$$

ここで、見やすさのために反復回数 u の表記は省略し、変数更新を表す演算子 \leftarrow を用いている。また、 $\mathbf{1}^{(I \times J)}$ は全ての要素が 1 の $I \times J$ の行列であり、演算子 \odot は要素毎の積 (Hadamard product)、行列の分数は要素毎の商を表す。以上より、補助関数法に基づく KLNMF の反復更新式が導出された。二乗ユークリッド距離及び板倉斎藤ダイバージェンスに基づく NMF も同様に補助関数法に基づく反復更新式を導くことができる。各手法の導出過程は付録 B.1 及び付録 B.2 にそれぞれまとめる。

2.4 スパース NMF

2.4.1 スパース NMF の定式化

前節で述べた標準的な NMF は、観測データを非負の基底と係数の積で近似する強力な手法であるが、解の一意性が保証されず、またデータのノイズに対して過学習を起こす場合がある。これらの問題に対処し、さらに目的に応じた望ましい性質を持つ解を誘導するために、目的関数に正則化項を付加した正則化付き NMF が広く研究されている。

特に、2.2 節で述べたスパース性を NMF に導入したスパース NMF は、データをより少数の基底の組み合わせで表現することを強制する。これにより、得られる基底や係数行列がより明確な物理的意味を持つようになり (部分ベース表現の促進)、解釈性の向上や特徴抽出精度の改善が期待できる。実例として、人の顔画像を NMF で分析する場合、スパース制約を課すことで、目や鼻、口といった局所的な特徴 (parts-based representation) が基底として抽出

されやすくなることが知られている [5]. これは、各データ（顔全体）を構成するために必要な部品（基底）はごく少数であるという仮定と整合する. 一般にスパース NMF は、係数行列 \mathbf{H} （あるいは基底行列 \mathbf{W} 、もしくはその両方）の要素が 0 に近づくような制約を課すことで実現される.

NMF の文脈では、観測行列の特徴や潜在的な構造をより強く反映した基底行列（あるいは係数行列）を頑健に推定することを目的として、スパース NMF が数多く提案されてきた [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. 独自のスパース性基準を定義して正則化に用いる手法 [5] や \mathbf{W} と \mathbf{H} の行列積 \mathbf{WH} に対してスパース性を誘導する手法 [10] などバリエーションに富む一方で、そのほとんどは 2.2 節で述べた L_1 ノルムを与える手法に終始する. ここでは、古典的で最も一般的な係数行列 \mathbf{H} に L_1 ノルム正則化を課すスパース NMF [6] について定式化する.

この例では、2.2 節の式 (2.6) で示した行列に対する L_1 ノルムを係数行列 \mathbf{H} に課すことで、次の最適化問題として定式化される.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{S}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (2.41)$$

$$\mathcal{S}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) + \mu \|\mathbf{H}\|_1 \quad (2.42)$$

ここで、 μ はスパース正則化項の重みを決める重み係数である.

2.4.2 スパース NMF の反復更新式の導出

ここでは、最適化問題 (2.42) に対して、一般化 KL ダイバージェンスを用いた場合の反復更新式を導出する. 目的関数を一般化 KL ダイバージェンスに基づいて展開すると、次式を得る.

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &= \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) + \mu \|\mathbf{H}\|_1 \\ &= \sum_i \sum_j \left(x_{ij} \log x_{ij} - x_{ij} \log \sum_k w_{ik} h_{kj} - x_{ij} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \sum_{k,j} h_{kj} \\ &\stackrel{c}{=} \sum_i \sum_j \left(-x_{ij} \log \sum_k w_{ik} h_{kj} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \sum_{k,j} h_{kj} \end{aligned} \quad (2.43)$$

ここで、変数 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} のいずれにも関与しない項は後段の偏微分によって消失するため、以降の議論では定数項として予め除外している. 演算子 $\stackrel{c}{=}$ は定数項を除いて等しいことを表す. 式 (2.43) の第一項には、KLNMF の場合と同様に、 k に関する総和を含む対数関数が現れる. このため、 w_{ik} 及び h_{kj} に関する停留点を直接求めることは困難である. そこで、KLNMF の反復更新式導出と同様に、Jensen の不等式を用いた補助関数を構成する. その結果、目的関数 \mathcal{S}_{KL} 全体を上から抑える補助関数 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+ \geq \mathcal{S}_{\text{KL}}$ は、次式のように与えられる.

$$\mathcal{S}_{\text{KL}}^+ \stackrel{c}{=} \sum_{i,j} \left(-x_{ij} \sum_k \delta_{ijk} \log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \mu \sum_{k,j} h_{kj} \quad (2.44)$$

補助関数 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+$ に対して、補助変数 Δ に関する最小化を考えると、2.3.3 項と同様の議論により、 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+ = \mathcal{S}_{\text{KL}}$ を満たす補助変数として次式を得る。

$$\delta_{ijk} = \frac{w_{ik}h_{kj}}{\sum_{k'} w_{ik'}h_{k'j}} \quad (2.45)$$

これは、式 (2.30) と一致する。

以上で補助関数が構成されたため、次に、 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} に関する最小化を行う。まず、補助関数 (2.44) を w_{ik} で偏微分して 0 とおくと、正則化項 $\|\mathbf{H}\|_1$ は \mathbf{W} に依存しないため、KLNMF の場合と同一の条件式が得られる。また、補助変数の更新も一致することから、 \mathbf{W} の反復更新式は 2.3.3 項における KLNMF の場合と同様に導出でき、次式を得る。

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\mathbf{X} \mathbf{H}^T}{\mathbf{1}^{(I \times J)} \mathbf{H}^T} \quad (2.46)$$

次に、補助関数 (2.44) を h_{kj} で偏微分し、これを 0 とおくことで、 h_{kj} に関する最小解を求める。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_{\text{KL}}^+}{\partial h_{kj}} &= \sum_i \left(-x_{ij} \delta_{ijk} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik}h_{kj}} \frac{w_{ik}}{\delta_{ijk}} + w_{ik} \right) + \mu = 0 \\ &= - \sum_i x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{h_{kj}} + \sum_i w_{ik} + \mu = 0 \\ &= h_{kj} \sum_i w_{ik} + \mu = \sum_{i=1} x_{ij} \delta_{ijk} \\ &= \frac{\sum_i x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_i w_{ik} + \mu} \end{aligned} \quad (2.47)$$

よって、行列形式で次式のように表現することができる。

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T \mathbf{X}}{\mathbf{W}^T \mathbf{1}^{(I \times J)} + \mu} \quad (2.48)$$

以上より、一般化 KL ダイバージェンスに基づくスパース NMF の反復更新式が導出された。本反復更新式では、重み係数 μ を調整することで、係数行列 \mathbf{H} のスパース性を制御することが可能である。

2.5 本章のまとめ

本章では、スパース NMF を扱うための基礎事項について整理した。2.2 節では、スパース性の概念を導入し、 L_1 ノルムによるスパース性の誘導方法や、行列におけるスパース性の定義、及びスパース性が持つ構造的特徴と最適化問題における役割について述べた。次に、2.3 節で NMF について、その基本的な考え方と数理的定式化を示し、KLNMF に対して、補助関数法を用いた反復更新式の導出を行った。さらに、NMF にスパース正則化を導入したスパース NMF を定式化し、係数行列に L_1 ノルム正則化を課した場合の一般化 KL ダイバージェン

スに基づく反復更新式を導出した。これにより、重み係数を通じてアクティベーション行列のスパース性を制御できることを示した。なお、本章ではスパース正則化を係数行列 \mathbf{H} に課す場合を代表例として扱ったが、これは一例に過ぎない。スパース性は基底行列 \mathbf{W} に対して課すことも可能であり、その場合も同様に L_1 ノルム正則化を導入することで定式化できる。いずれの場合においても、補助関数法に基づく反復更新式の導出は同様の枠組みで行うことができ、本章で示した議論は一般性を失わない。従って、本章で述べたスパース NMF の定式化及び最適化手法は、正則化を課す対象行列の選択に依らず適用可能な、スパース NMF の基本的枠組みを与えるものである。

次章では、スパース NMF に内在するスケール任意性問題及び補助関数法に基づく反復更新における単調非増加性について議論する。さらに、これらの問題を解決する新たなスパース NMF の定式化を提案する。

第3章

補助関数法に基づくスパース NMF

3.1 はじめに

本章では、スパース NMF に焦点を当て、その定式化と最適化における本質的な課題について整理する。前章では、スパース NMF が持つ基底表現の解釈性向上や特徴抽出性能の改善といった利点について述べた。一方で、スパース NMF は、前章では触れなかった NMF 特有のスケール任意性に起因する理論的及び実装上の問題を内包している。

従って、本章では、まず 3.2 節においてスパース NMF が抱える課題と、従来手法が取ってきたアプローチについて体系的に概観する。次に、3.3 節では、これらの課題を解決するためのアプローチとして、ノルム制約に基づくスパース正則化付き NMF を定式化する。また、3.4 節では、補助関数法を用いた反復更新式の導出を通して、スケール任意性の回避と目的関数の単調非増加性を同時に満たす最適化手法を明確にする。最後に、3.5 節では、本章をまとめ、従来のスパース NMF が抱える課題と、提案手法の理論的な最適化特性の保証について総括する。

3.2 動機

3.2.1 スパース NMF におけるスケール任意性問題

前章では、係数行列あるいは基底行列に L_1 ノルム正則化を付加することでスパース性を誘導するスパース NMF を導入した。このような定式化は、スパース性の効果を直感的に理解しやすく、スパース NMF の初期の研究において広く用いられてきた [4, 6, 7]。

本章では議論を明確にするため、前章で示した「一方の行列に L_1 ノルム正則化を単純に付加したスパース NMF」を simple sparse NMF と呼ぶことにする。改めて、simple sparse NMF は係数行列 \mathbf{H} に対してスパース正則化を課した次の最適化問題として表される。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} S(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (3.1)$$

$$S(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W}\mathbf{H}) + \mu \|\mathbf{H}\|_1 \quad (3.2)$$

この定式化は、NMF にスパース性を導入する最も基本的な枠組みを与える一方で、NMF の持つスケール任意性に起因する本質的な問題を内包している。

NMF では、任意の正の定数 $\alpha > 0$ に対して $\mathbf{WH} = (\alpha\mathbf{W})(\alpha^{-1}\mathbf{H})$ が成り立つため、基底行列と係数行列のスケールは一意に定まらない。この性質は、標準的な NMF においては問題とならないが、simple sparse NMF では深刻な影響を及ぼす。

例えば、係数行列 \mathbf{H} に L_1 ノルム正則化を課した場合の目的関数 $\mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) + \mu\|\mathbf{H}\|_1$ を考える。このとき、 \mathbf{W} を α 倍、 \mathbf{H} を $1/\alpha$ 倍すると、スケール任意性により損失関数 \mathcal{D} は変化しないまま、正則化項のみが $(\mu\|\mathbf{H}\|_1)/\alpha$ と、 $1/\alpha$ 倍されることとなる。その結果、 $\alpha \rightarrow \infty$ とすることで、スパース性を誘導するという本来の目的とは独立に、正則化項の値のみを任意に小さくすることが可能となる。このため、正則化項がスパース性を制御する役割を十分に果たさなくなるという問題が生じる [7, 33]。

このように、simple sparse NMF はスパース性と NMF のスケール任意性との不整合を本質的に抱えており、これを回避するための工夫が必要となる。次節では、これらの問題に対し、従来の手法がどのようにアプローチしてきたかを概観する。

3.2.2 スケール任意性を回避する既存手法

上述の問題を解決するため、スパース NMF に関する多様な拡張手法が提案されてきた。Table 3.1 に、本論文で述べるスパース NMF の既存手法とその課題をまとめる。但し、Table 3.1 中の最適化問題において、NMF 本来の \mathbf{W} 及び \mathbf{H} に対する非負制約は省略している。

初期のスパース NMF では、スケール任意性問題を回避するため、変数に $\|\mathbf{w}_k\| = 1 \forall k$ なるノルム制約を課す方法 [4] が提案された。これは、次のように定義され、本論文では norm-constrained sparse NMF と呼ぶ。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{S}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \forall i, j, k, \|\mathbf{w}_k\|_1 = 1 \forall k \quad (3.3)$$

同時期には、次のように表されるスケール非依存なスパース尺度関数 $\text{sparseness}(\mathbf{h}_k)$ を用いた制約の付与による手法 [5] も提案された。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}_{\text{Eu}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \forall i, j, k, \text{sparseness}(\mathbf{h}_k) = 1 \forall k$$

$$\text{sparseness}(\mathbf{h}_k) = \frac{\sqrt{J} - \left(\sum_j |h_{kj}|\right) / \|\mathbf{h}_k\|_2}{\sqrt{J} - 1} \quad (3.4)$$

これらの手法は、いずれも補助関数法による最適化が困難であり、斜影勾配法 (projected gradient descent: PGD) が用いられた。そのため、反復更新によって目的関数が単調に減少する保証はなく、収束挙動や最終解はステップサイズの設定に強く依存する。このような性質は、非凸最適化である NMF においては局所解への不安定な遷移を招きやすく、理論的にも実装上也好ましくない。

また, simple sparse NMF に対して補助関数法に基づく乗算更新式を導出し, スケール任意性を解消するために変数更新毎に \mathbf{w}_k を正規化し, $\mathbf{w}_k \mathbf{h}_k^T$ が不変となるように正規化係数の逆数を \mathbf{h}_k に乗じるアルゴリズム [6] も提案された. しかし, 反復毎の正規化処理は正則化項の値を変化させるため, この手法も単調非増加性は保証されていない.

その後, \mathbf{W} の各列ベクトルを正規化した行列 $\widetilde{\mathbf{W}} = [\mathbf{w}_1/\|\mathbf{w}_1\|_1 \cdots \mathbf{w}_K/\|\mathbf{w}_K\|_1]$ を損失関数に用いることでスケール任意性問題を回避する手法 [7, 8] が提案された. これは, 次の最適化問題として定義され, 本論文では normalized sparse NMF と呼ぶ.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{S}(\widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (3.5)$$

$$\mathcal{S}(\widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}(\mathbf{X}|\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{H}) + \mu\|\mathbf{H}\|_1 \quad (3.6)$$

この手法は, 導出過程で目的関数 \mathcal{S} に対する補助関数 \mathcal{S}^+ の勾配を正值項と負値項に分割し乗算更新式を構成する heuristic update rule [34] を用いる. 具体的には, 補助関数 \mathcal{S}^+ の勾配を次式のように正の部分と負の部分に分解し, 反復更新式を構成する.

$$\nabla_{\mathbf{W}} \mathcal{S}^+ = [\nabla_{\mathbf{W}} \mathcal{S}^+]_+ - [\nabla_{\mathbf{W}} \mathcal{S}^+]_- \quad (3.7)$$

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{[\nabla_{\mathbf{W}} \mathcal{S}^+]_-}{[\nabla_{\mathbf{W}} \mathcal{S}^+]_+} \quad (3.8)$$

ここで, $[\cdot]_+$ は角括弧内の正の部分, $[\cdot]_-$ は角括弧内の負の部分の絶対値をそれぞれ表す. これにより, 式全体として正の項のみから構成される乗法型の更新式を得ることができる. また, 最適化問題の定義に依存して, \mathbf{W} の列ベクトルが常に正規化されるため, スケールを固定することができる. 結果としてスケール任意性問題を回避できる. しかし, このような heuristic update rule に基づく更新式は, 経験的には良好な反復最適化性能を示す場合があるものの, 単調非増加性に対する理論的な裏付けがないことが指摘されている [10].

近年では, norm-constrained sparse NMF に対し, ラグランジュの未定乗数法に基づいて乗算更新式を導く手法 [9] が提案された. この手法は単調非増加性を保証しつつスケール任意性問題も回避できるため, 前述の問題をすべて解決できるエレガントなフレームワークである. また, 損失関数や制約条件等についても一般化されており, その適用範囲は広い. しかしながら, 各反復においてラグランジュ乗数が有理関数の根を求める問題となり解析的に導出できず, 毎回の変数の反復更新で数値解を求める内部反復処理を必要とする計算コストの問題が残る.

さらに, norm-constrained sparse NMF と次の最適化問題が本質的に等価であることを示し, 補助関数法に基づく乗算更新式を導出する手法 [10] も提案されており, 本論文では model-sparse NMF と呼ぶ.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{R}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (3.9)$$

$$\mathcal{R}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) + \mu\|\mathbf{W}\mathbf{H}\|_1 \quad (3.10)$$

この手法は, 正則化項が \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の両変数にまたがることでスケール任意性問題を回避しつつ, $\|\mathbf{W}\mathbf{H}\|_1 = \sum_k \|\mathbf{w}_k \mathbf{h}_k^T\|_1$ より, \mathbf{X} の低ランク近似を構成する K 個のランク 1 行列

$\mathbf{w}_k \mathbf{h}_k^T$ のそれぞれに対してスパース性を誘導することで，行列積 $\mathbf{W}\mathbf{H}$ がスパースとなる．一般化 KL ダイバージェンスにおける目的関数 \mathcal{R}_{KL} に対する補助関数 $\mathcal{R}_{\text{KL}}^+$ を考えると，次式が得られ，Jensen の不等式に由来する補助変数 δ_{ijk} の等号成立条件は KLNMF における導出と一致する．

$$\mathcal{R}_{\text{KL}}^+ \stackrel{c}{=} \sum_{i,j} \left(-x_{ij} \sum_k \delta_{ijk} \log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \mu \sum_{i,j,k} w_{ik} h_{kj} \quad (3.11)$$

上記補助関数を w_{ik} 及び h_{kj} のそれぞれについて偏微分して 0 とおくことで，次式を得る．

$$\frac{\partial \mathcal{R}_{\text{KL}}^+}{\partial w_{ik}} = \sum_j \left(-x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik}} + h_{kj} \right) + \mu \sum_j h_{kj} = 0 \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \mathcal{R}_{\text{KL}}^+}{\partial h_{kj}} = \sum_i \left(-x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{h_{kj}} + w_{ik} \right) + \mu \sum_i w_{ik} = 0 \quad (3.13)$$

これより，反復更新式として次式を得る．

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T}{\mathbf{1}^{(I \times J)} \mathbf{H}^T + \mu \mathbf{W}^T \mathbf{1}^{(I \times J)}} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T \frac{\mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}}}{\mathbf{W}^T \mathbf{1}^{(I \times J)} + \mu \mathbf{1}^{(I \times J)} \mathbf{H}^T} \quad (3.15)$$

このように，簡潔な更新式を得ることができ，補助関数法に従う導出により各反復における目的関数の単調非増加性が厳密に保証されている．しかし，スパース NMF を適用する目的が \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の一方の変数にスパース性を与えることである場合，最適化問題 (3.9) はその目的に適合しない．

3.2.3 本論文の立ち位置と課題設定

Table 3.1 に示すように，スパース NMF においては，スケール任意性の回避と最適化における単調非増加性の保証を同時に満たす定式化が重要である．本論文では，ノルム制約に基づくスパース NMF を採用し，補助関数法に基づいて反復更新式を導出することで，これらの要請を同時に満たす枠組みを構築する．特に，Leplat ら [9] の手法で課題となっていた反復毎の数値解計算を回避し，一般化 KL ダイバージェンスと L_1 ノルム制約の組み合わせにおいて，解析的な反復更新式が導出可能であることを明らかにする．

Table 3.1. Comparison of related sparse NMF algorithms. All optimization problems listed below include nonnegativity constraints for the elements of \mathbf{W} and \mathbf{H}

References	Optimization problem	Optimization method	Theoretical guarantee of monotonic non-increase
Hoyer [4]	Minimize $S_{\text{Eu}}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H} s.t. $\ \mathbf{w}_i\ _1 = 1 \forall i$	PGD	
Hoyer [5]	Minimize $\mathcal{D}_{\text{Eu}}(\mathbf{X} \mathbf{W}\mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H} s.t. $\text{sparseness}(\mathbf{h}_k) = 1 \forall k$	PGD	
Liu et al. [6]	Minimize $S_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H} s.t. $\ \mathbf{w}_i\ _1 = 1 \forall i$	MM algorithm with iterative normalization	
Eggert and Körner [7] Le Roux et al. [8]	Minimize $S_\beta(\widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H}	Heuristic update rule	
Leplat et al. [9]	Minimize $S_\beta(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H} s.t. $\ \mathbf{w}_i\ _1 = 1 \forall i$	Combination of Lagrangian and Newton-Raphson	✓
Marmin et al. [10]	Minimize $\mathcal{R}_\beta(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H}	MM algorithm	✓
Proposed method	Minimize $S_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ \mathbf{W}, \mathbf{H} s.t. $\ \mathbf{w}_i\ _1 = 1 \forall i$	MM algorithm	✓

3.3 ノルム制約に基づくスパース NMF の定式化

本論文では、norm-constrained sparse NMF に対して MM アルゴリズムを適用し、単調非増加性を保証した乗算更新式を導出する。対象とする最適化問題は次式で定義される。

$$\begin{aligned} \text{Minimize } S_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \forall i, j, k, \sum_i w_{ik} = 1 \forall k \\ S_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) + \mu \sum_{k,j} h_{kj} \end{aligned} \quad (3.16)$$

各基底ベクトル \mathbf{w}_k に L_1 ノルム制約 $\sum_i w_{ik} = 1$ を課すことで、 \mathbf{W} と \mathbf{H} 間のスケール任意性を回避する。

3.4 補助関数法に基づくスパース NMF の反復更新式の導出

本節では、最適化問題 (3.3) に対し、補助関数法を適用することで単調非増加性を保証した反復更新式を導出する。ここで、制約条件を持つ目的関数 \mathcal{S}_{KL} に対して設計した補助関数 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+$ の最適化問題に制約条件を引き継ぐことで、意図した制約条件を作用させたまま変数を最小化する手法 [35] を用いる。制約条件を引き継いだ補助関数の最適化は、ラグランジュの未定乗数法及びカルーシュ・クーン・タッカー (Karush–Kuhn–Tucker: KKT) 条件により、一定の条件下で乗法型の更新式を導出する。

まず、一般化 KL ダイバージェンス項に対して、Jensen の不等式を適用することで補助関数を構成する。目的関数 \mathcal{S}_{KL} に対する補助関数 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+$ は 2.4.2 節と同様に設計でき、次式を得る。

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &\leq \mathcal{S}_{\text{KL}}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta) \\ &\stackrel{c}{=} \sum_{i,j} \left(-x_{ij} \sum_k \delta_{ijk} \log \frac{w_{ik} h_{kj}}{\delta_{ijk}} + \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \mu \sum_{k,j} h_{kj} \end{aligned} \quad (3.17)$$

ここで、 δ_{ijk} は Jensen の不等式に由来する補助変数であり、 $\delta_{ijk} \geq 0$ 及び $\sum_k \delta_{ijk} = 1$ を満たす。また、等号成立条件は次式で与えられる。

$$\delta_{ijk} = \frac{w_{ik} h_{kj}}{\sum_{k'} w_{ik'} h_{k'j}} \quad (3.18)$$

次に、補助関数 $\mathcal{S}_{\text{KL}}^+$ に対して、次の等式・不等式制約条件付き最小化問題を考える。

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta} \mathcal{S}_{\text{KL}}^+ \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k, \quad \sum_i w_{ik} = 1 \quad \forall k \quad (3.19)$$

このとき、 \mathbf{W} に関してはノルム制約 $\sum_i w_{ik} = 1$ が課せられているため、次のラグランジュ関数 \mathcal{L} を導入する。

$$\mathcal{L} = \mathcal{S}_{\text{KL}}^+ + \sum_k \lambda_k \left(\sum_i w_{ik} - 1 \right) \quad (3.20)$$

ここで、 $\lambda_k \geq 0$ は k 番目の基底ベクトルのノルム制約に対応するラグランジュ乗数である。非負制約条件付き KKT 条件より、次式を得る。

$$w_{ik} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{ik}} = 0 \quad \forall i, k \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{ik}} \geq 0 \quad \forall i, k \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_k} = 0 \quad \forall k \quad (3.23)$$

式 (3.21) より, \mathcal{L} の最小解は $w_{ik} = 0$ または $\partial\mathcal{L}/\partial w_{ik} = 0$ のいずれかを満たす. また, $\partial\mathcal{L}/\partial w_{ik} = 0$ を解くと, 以下の関係式が得られる.

$$\sum_j \left(-x_{ij} \frac{\delta_{ijk}}{w_{ik}} + h_{kj} \right) + \lambda_k = 0$$

$$w_{ik} = \frac{\sum_j x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_j h_{kj} + \lambda_k} \quad (3.24)$$

加えて, 式 (3.23) より $\sum_i w_{ik} - 1 = 0$ を得るが, これはノルム制約 $\sum_i w_{ik} = 1 \forall k$ と等価である. このノルム制約に式 (3.24) を代入して整理することで, ラグランジュ乗数を解析的に解くことができる.

$$\lambda_k = \sum_j h_{kj} + \sum_{i,j} x_{ij} \delta_{ijk} \quad (3.25)$$

式 (3.25) を式 (3.24) の分母に代入してラグランジュ乗数 λ_k を消去すると, 次式となる.

$$w_{ik} = \frac{\sum_j x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_{i,j} x_{ij} \delta_{ijk}} \quad (3.26)$$

以上より, 補助関数 S_{KL}^+ の制約条件付き最小解は式 (3.26) である. なお, 補助変数の等式条件 (3.18) を式 (3.26) に代入すると, w_{ik} は次式となる.

$$w_{ik} = w_{ik} \frac{\sum_j \frac{x_{ij} h_{kj}}{\sum_{k'} w_{ik'} h_{k'j}}}{\sum_i w_{ik} \sum_j \frac{x_{ij} h_{kj}}{\sum_{k'} w_{ik'} h_{k'j}}} \quad (3.27)$$

結局, $w_{ik} \geq 0$ において, 式 (3.27) は全てのインデックスで $\partial\mathcal{L}/\partial w_{ik} = 0$ を満たす上, 非負制約及びノルム制約を必ず満たす更新式となる.

一方, \mathbf{H} については制約がないため, $\partial S_{\text{KL}}^+ / \partial h_{kj} = 0$ より単純に次式が得られる.

$$h_{kj} = \frac{\sum_i x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_i w_{ik} + \mu} = h_{kj} \frac{\sum_i x_{ij} \frac{w_{ik}}{\sum_{k'} w_{ik'} h_{k'j}}}{\sum_i w_{ik} + \mu} \quad (3.28)$$

これより, 式 (3.28) も $h_{kj} \geq 0$ で非負制約を必ず満たす.

式 (3.25) としてラグランジュ乗数の解析解が得られたが, このような手続きはスパース NMF の最適化問題が一般化 KL 擬距離以外や L_1 ノルム制約以外を用いた場合は困難である. 例えば, 二乗 Euclid 距離や Itakura–Saito 擬距離の損失関数を用いる場合, 式 (3.24) の分母に x_{ij} を含む項が現れる. その結果, λ_k の解は文献 [9] の通り有理関数の根を求める問題となってしまう, 数値解の計算が必要となる.

3.5 本章のまとめ

本章では, スパース正則化付き NMF に関する既存研究を整理し, その定式化及び最適化における本質的な課題を明らかにした. 特に, 一方の行列にスパース正則化を課すスパース

NMF では、NMF に内在するスケール任意性により、正則化項が実質的に無意味となる問題が生じることを示した。この問題に対処するため、ノルム制約や正規化操作、行列積に対する正則化など、様々な手法が提案されてきたが、単調非増加性の理論保証や計算効率の観点において、依然として課題が残されていた。本章では、ノルム制約を導入したスパース正則化付き NMF を定式化し、補助関数法に基づいて目的関数の単調非増加性が保証された反復更新式を導出した。これにより、従来用いられてきたヒューリスティックな正規化操作に依ることなく、スケール任意性問題を回避しつつ、理論的に整合性の取れた最適化アルゴリズムを構築できることを示した。また、本手法は、ここで述べた基底行列の列ベクトルに対するノルム制約と係数行列に対するスパース正則化に限らず、基底行列と係数行列の役割を入れ替えた場合においても、一般性を失うことなく同様に議論可能である。次章では、本章で導出した補助関数法に基づくノルム制約付きスパース NMF が、目的関数の単調非増加性を実際に保証することを、数値実験を通じて確認する。

第 4 章

スパース NMF の収束特性評価実験

4.1 はじめに

前章では、スパース NMF におけるスケール任意性問題と単調非増加性を解決するため、補助関数法に基づきノルム制約を厳密に考慮した更新式 (norm-constrained sparse NMF) を導出した。本章では、音響信号のスペクトログラムを用いた近似実験を行い、3 章で議論した simple sparse NMF, normalized sparse NMF, 及び norm-constrained sparse NMF の 3 つの手法について、収束特性を比較・評価する。本実験の主な目的は、提案する補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF の最適化更新式が理論通り目的関数値を単調に非増加させることを確認し、最適化手法としての妥当性を検証することにある。4.2 節では、本実験の前処理において用いる短時間フーリエ変換について説明する。4.3 節では、本実験の方法について説明し、4.4 節にて実験結果を解説する。そして、4.5 節で本章をまとめ、実験結果より norm-constrained sparse NMF の持つ反復最適化性能について総括する。

4.2 短時間フーリエ変換

観測された音響信号を非負行列として表現する手法として、短時間フーリエ変換 (short-time Fourier transform: STFT) がある。STFT とは Fig. 4.1 に示すように、一次元の時間信号を二次元の時間周波数信号に変換する処理である。STFT の分析窓関数の長さ及びシフト長をそれぞれ Q 及び τ としたとき、時間領域の信号 $z(p)$ ($p = 1, 2, \dots, P$ は離散時間サンプルのインデックスを表す) の j 番目の短時間区間 (時間フレーム) の信号は次式で表される。

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{(j)} &= [z((j-1)\tau+1), z((j-1)\tau+2), \dots, z((j-1)\tau+Q)]^T \\ &= [z^{(j)}(1), z^{(j)}(2), \dots, z^{(j)}(q), \dots, z^{(j)}(Q)]^T \in \mathbb{R}^Q \end{aligned} \quad (4.1)$$

ここで、 $j = 1, 2, \dots, J$ 及び $q = 1, 2, \dots, Q$ は、それぞれ時間フレーム及び時間フレーム内のサンプルのインデックスを示す。また、時間フレーム数 J は次式によって与えられる。

$$J = \frac{P}{\tau} \quad (4.2)$$

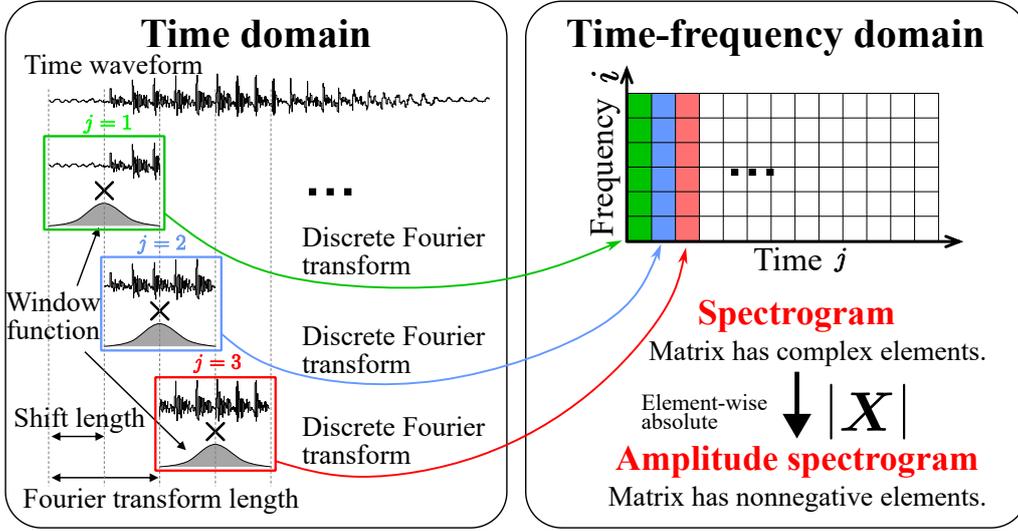


Fig. 4.1. Process of STFT.

但し、信号長 L はセグメント数 J が整数となるように各時間フレームの信号の両端にゼロを挿入する処理（ゼロパディング）が施されている。式 (4.1) で定義される時間フレームの信号を全ての j についてまとめた全時間フレームの信号を $\mathbf{z} = [z^{(1)} z^{(2)} \dots z^{(J)}] \in \mathbb{R}^{Q \times J}$ と表記すると、STFT の処理は次式のように表される。

$$\mathbf{Z} = \text{STFT}_{\omega}(\mathbf{z}) \in \mathbb{C}^{I \times J} \quad (4.3)$$

ここで、 $\omega = [\omega(1), \omega(2), \dots, \omega(Q)]^T \in \mathbb{R}^Q$ は STFT で用いる窓関数である。スペクトログラム \mathbf{Z} の (i, j) 番目の要素は次式で表される。

$$z_{ij} = \sum_q \omega(q) z^{(j)}(q) \exp \left\{ \frac{-i2\pi(q-1)(i-1)}{F} \right\} \quad (4.4)$$

ここで F は $\lfloor F/2 \rfloor + 1 = I$ を満たす整数 ($\lfloor \cdot \rfloor$ は床関数)、 $i = 1, 2, \dots, I$ は周波数ビンのインデックス、 i は虚数単位を示している。このように、時間領域の信号に対して一定幅の短時間ごとに分析窓関数を乗じて離散フーリエ変換を行うことで、横軸が時間、縦軸が周波数のスペクトログラムと呼ばれる複素行列 \mathbf{Z} で表すことができる。

音響信号に NMF を適用する場合、時間信号に STFT を適用して得られるスペクトログラム（複素行列）の振幅値（振幅スペクトログラム）やパワー値（パワースペクトログラム）を非負値観測行列 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times J}$ として扱うことが一般的である。振幅スペクトログラム \mathbf{X} を NMF で分解した様子が Fig. 4.2 である。振幅スペクトログラム \mathbf{X} は NMF を用いることで基底行列 \mathbf{W} と係数行列 \mathbf{H} の行列積で近似されている。Fig. 4.2 において、基底行列 \mathbf{W} は 2 つの基底ベクトルから成る ($K = 2$ に設定されている)。即ち、観測行列 \mathbf{X} のスペクトログラムを 2 本のスペクトルパターン（基底ベクトル）で近似的に表現している。同様に、係数行列 \mathbf{H} は、 \mathbf{W} 中の 2 本の基底ベクトルがどの時間にどの程度の強さで生起するかを表す時間的強度変化を行ベクトルとして含んでいる。

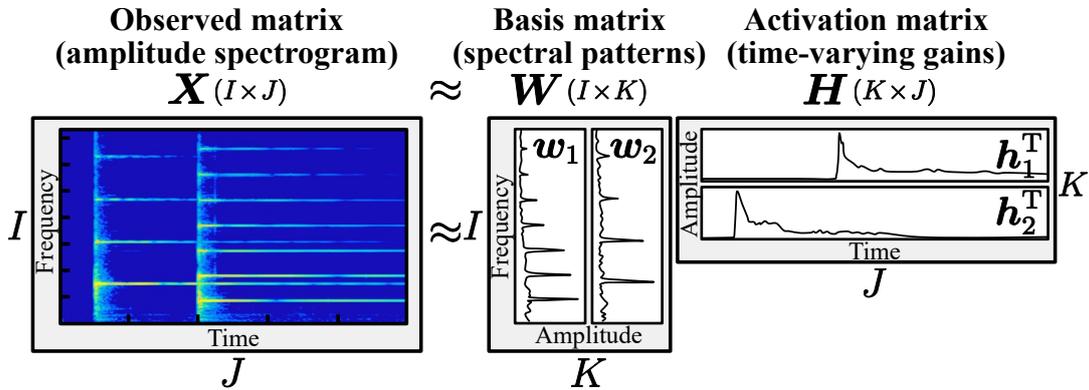


Fig. 4.2. NMF for amplitude spectrogram of an audio signal, where $K = 2$.

このように、音響信号であっても、STFTによってスペクトログラムを得ることでNMFを適用することができる。NMFで抽出される非負構成要素は解釈が容易であり、音響信号中のスペクトルパターンを教師なし学習できるため、音楽信号解析 [36] や音源分離 [29, 32, 33] 等に頻繁に適用される。本実験では、単に欠損のある音響信号をNMFに基づく行列補完の観測行列として適用するため、STFTによって振幅スペクトログラムに変換する。

4.3 実験方法

本実験では、STFTにより時間周波数領域に変換した音響信号に対し、スパースNMFにより近似行列を求め、その収束曲線を観察することで、各手法の収束挙動を評価する。音源にはSiSEC2011 [37] データセットからギター音源であるdev1_wdrums_src_1.wavを用いた。サンプリング周波数16 kHzの音源に対し、窓長1024点のハン窓をハーフシフトで変換し、Fig. 4.3のような $(I, J) = (513, 313)$ の観測行列 \mathbf{X} を構成した。

本実験では、3章で導出した提案手法の有効性を検証するため、スケール任意性の扱い方と更新則の性質が異なる以下の3つのスパースNMF手法を比較する。すべての手法において、最小化すべき共通の目的関数は、一般化KLダイバージェンスと L_1 正則化項の和(式(2.42))である。従って、この目的関数の挙動をそのまま比較することができる。

1. **Simple sparse NMF**: 2.4節で述べた標準的なスパースNMF。更新後に \mathbf{W} の各列を強制的に正規化するが、この操作は目的関数の最小化を数学的に保証しておらず、スケール任意性問題の影響を受ける。
2. **Normalized sparse NMF**: 3.2.2項で述べた、目的関数の変数に正規化を組み込んだ手法。Heuristic update ruleに基づいて導出された更新式を用いる。
3. **Norm-constrained sparse NMF**: 3.3節で導出した、補助関数法に基づきノルム制約を厳密に考慮した本論文の提案手法。

実験で用いた各手パラメータの設定値をTable 4.1に示す。基底数 K は、観測行列のサイ

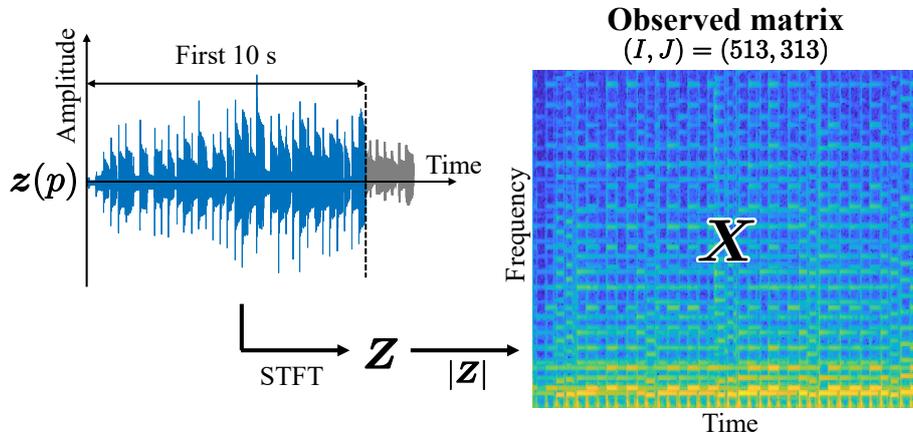


Fig. 4.3. Generation process of the observation matrix. The first 10 seconds of each audio source are extracted and converted into an amplitude spectrogram via STFT to form the observation matrix.

ズを考慮し、低ランク近似の範囲内として 10 から 100 まで等間隔に 10 通り、正則化項の重み係数 μ については、経験的に良好な動作が期待される範囲を網羅するため、 10^{-6} から 1 までは対数スケールで 20 通り設定した。

\mathbf{W} 及び \mathbf{H} の初期化は区間 $(0, 1)$ の一様分布から生成した。このとき、初期値依存性を排除するため、各 K , μ のすべての条件について 50 個の異なる乱数シードを用いて試行を行い、その平均的な挙動を算出した。また、目的関数の収束挙動を詳細に観察するため、収束判定による途中の打ち切りは行わず、一律で 10000 回の反復更新を実施した。反復毎に正規化を必要とする simple sparse NMF については、各反復において変数更新直後と正規化処理後の目的関数値を併せて記録した。

Table 4.1. Experimental parameters for convergence analysis

Parameter	Value
Number of basis K	10, 20, ..., 100 (10 values)
Regularization coefficient μ	$[10^{-6}, 1]$ (log-spaced, 20 values)
Number of iterations	10000
Number of random seeds	50

4.4 実験結果

Figs. 4.4 及び 4.5 は、スパース正則化の強さ μ が小さい場合と大きい場合における、各手法の収束挙動の違いを可視化したものである。基底数 $K = 100$, 重み係数 $\mu = 10^{-6}$ における各手法の収束カーブを Fig. 4.4 に、また、 $\mu = 1$ の場合を Fig. 4.5 に示す。いずれの図も、縦軸は目的関数を表し、この値が小さいほど、観測行列をより正確に近似できていると言える。

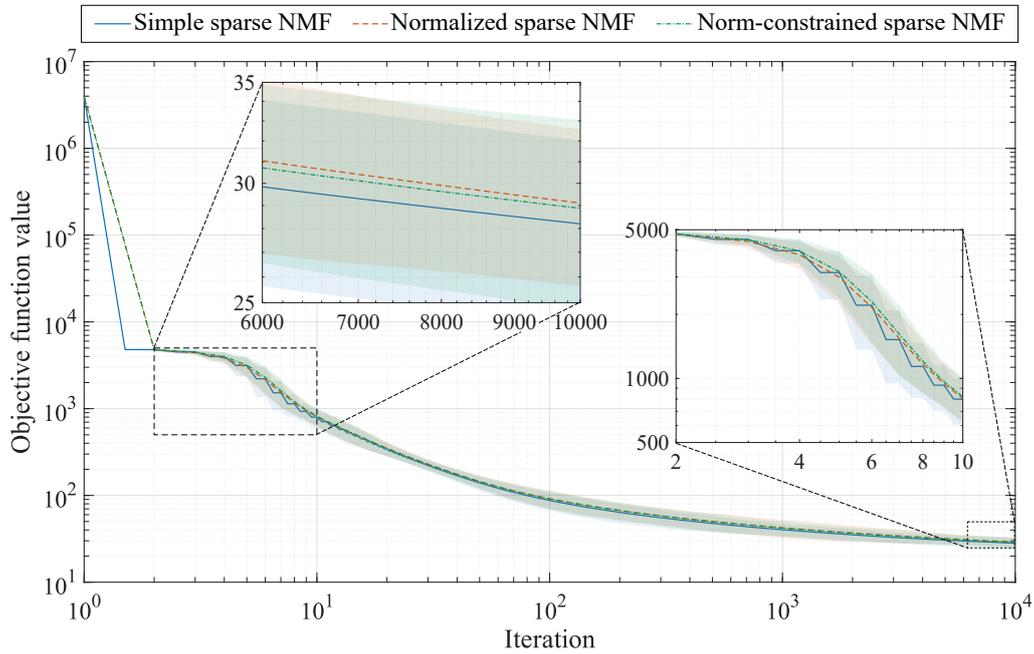


Fig. 4.4. Convergence behaviors when $K = 100$ and $\mu = 10^{-6}$. Lines and colored areas respectively show mean values and ranges of standard deviations.

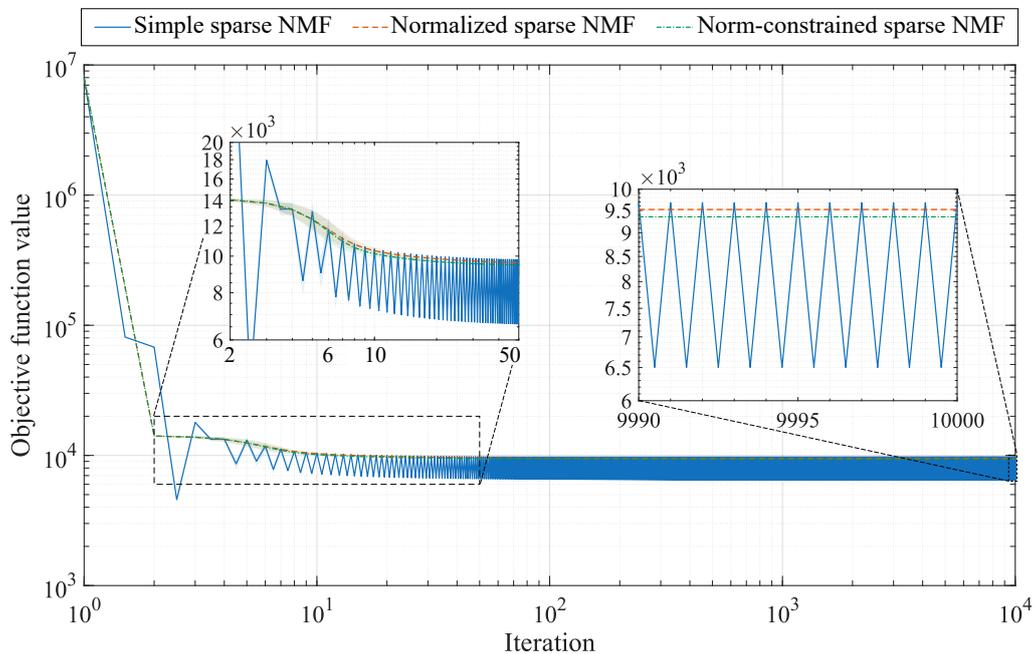


Fig. 4.5. Convergence behaviors when $K = 100$ and $\mu = 1$. Lines and colored areas respectively show mean values and ranges of standard deviations.

ここで、乱数シードに対する目的関数値の平均を実線で、標準偏差を透過帯で表現している。なお、simple sparse NMF については、 $n + 1$ 回目の更新における正規化処理前の値を、便宜上 $n + 0.5$ 回目の更新の値としてプロットしている。

実験結果より、各手法について評価する。まず、単調非増加性については、提案手法である norm-constrained sparse NMF は、すべての反復において目的関数値が単調非増加であることが確認できる。これは、3章における補助関数法及び理論的導出が正当であることを示している。また、normalized sparse NMF についても同様に、すべての反復において目的関数値が単調非増加であることが確認できる。これは、文献 [10] でも述べられている通り、heuristic update rule に理論的保証はないものの、多くの条件においては影響がなく、今回の条件においても単調非増加が保たれたためと考えられる。一方で、simple sparse NMF においては、スパース性の重み μ が大きい場合において、反復中に目的関数値が増加したり、収束が不安定になったりする挙動が観測できる。これは、更新後の強制的な正規化操作が、目的関数の値を押し上げる方向に作用しており、最適化の理論的整合性が保たれていないことを意味する。

また、収束速度の観点からは、提案手法である norm-constrained sparse NMF は、normalized sparse NMF と比較しても遜色ない収束速度を示し、最終的に到達する目的関数値も同等であることが分かった。スケール任意性問題が顕著に表れた simple sparse NMF では、 \mathbf{W} と \mathbf{H} の間のスケール任意性を適切に扱えないため、正則化項 $\|\mathbf{H}\|_1$ の影響が基底行列の列ノルムの大きさに依存してしまう。対照的に、提案手法及び normalized sparse NMF では、基底行列のノルムが一定 ($\sum_i w_{ik} = 1$) に保たれるため、ハイパーパラメータ μ によるスパース性の制御が理論通り安定して行えると考えられる。

以上より、本実験で確認された単調非増加性に関する各手法の特徴について、Table 4.2 のようにまとめられる。すなわち、simple sparse NMF はスケール任意性問題を内包することで、実験的にも単調非増加性を欠くことが確認され、normalized sparse NMF は実験的には単調非増加性を保持することが示された。また、提案手法である norm-constrained sparse NMF は理論的保証とともに、実験的にも単調非増加性が保証されることを実証した。

4.5 本章のまとめ

本章では、音響信号のスペクトログラムを用いた近似実験を通じて、3章で提案した補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF の収束性能を評価した。実験の結果、提案手法は従来のヒューリスティックな手法が抱えていた収束の不安定性を克服し、理論通り単調に目的関数を減少させることを実証した。また、既存の normalized sparse NMF と比較しても同等の収束性能を示した。

本章の実験により、補助関数法に基づくスパース NMF は、スケール任意性を適切に制御しつつ、目的関数の単調非増加性を保証できる最適化手法であることが確認された。これらの性質は、単なる行列分解にとどまらず、欠損値を含む行列を扱う行列補完問題においても、推定の安定性や再現性に直接的な影響を与えられとされる。そこで次章では、本章で検証した各スパース NMF の枠組みを行列補完問題へと拡張し、理論的厳密さが実用タスクにおいてどのような役割を果たすかを検証する。

Table 4.2. Comparison of theoretical guarantees and experimental results regarding the monotonic non-increase of the objective function

Optimization method	Theoretical guarantee of monotonic non-increase	Experimentally observed monotonic non-increase
Simple sparse NMF		
Normalized sparse NMF		✓
Norm-constrained sparse NMF	✓	✓

第 5 章

スパース NMF に基づく行列補完

5.1 はじめに

本章では、3 章で詳細に議論し、4 章において収束特性を検証したスパース NMF の枠組みを、欠損値を含む行列の補完問題へと応用する。これまで述べてきた通り、スパース NMF は基底表現の可解釈性向上や雑音に対する頑健性といった多くの利点を有し、多様な実データ解析に応用されている。そこで、本論文では、実際の応用タスクにおいてスパース正則化の導入及び単調非増加性の保証が性能にどのような影響を与えるかを調査する。具体例として、NMF の主要な応用先であり、スパース性の導入による性能改善が期待されながらも、これまで十分な検討がなされてこなかった NMF に基づく行列補完を取り上げる。また、複数のスパース NMF アルゴリズムを比較・評価することで、単調非増加性の保証が応用技術の精度や安定性に与える影響についても明らかにする。

このような目的のもと、本章では次の内容について述べる。まず、5.2 節では、欠損値に対応するバイナリマスク行列を用いた NMF に基づく行列補完の概要とその課題、そしてスパース NMF を導入する動機について述べる。続いて、5.3 節から 5.5 節に渡って、スパース NMF に基づく行列補完の定式化と、その反復更新式の導出について説明する。また、5.6 節では、3 章で提案した補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF が行列補完に適用できないことについて、原理とともに示す。5.7 節で本章についてまとめる。

5.2 動機

5.2.1 バイナリマスク行列を用いた NMF に基づく行列補完

実データを対象とする多くのデータ解析技術において、その対象とする行列データにはしばしば欠損値が発生する。このような欠損値を含む行列に対し、それを補完するための技術を行列補完といい、ここでは特に NMF に基づく行列補完について述べる。

NMF に基づく行列補完には、ナイーブな手法として欠損要素のインデックスを行列とした、バイナリマスク行列を用いる方法がある [11]。この手法の概要を Fig. 5.1 に示す。NMF に基

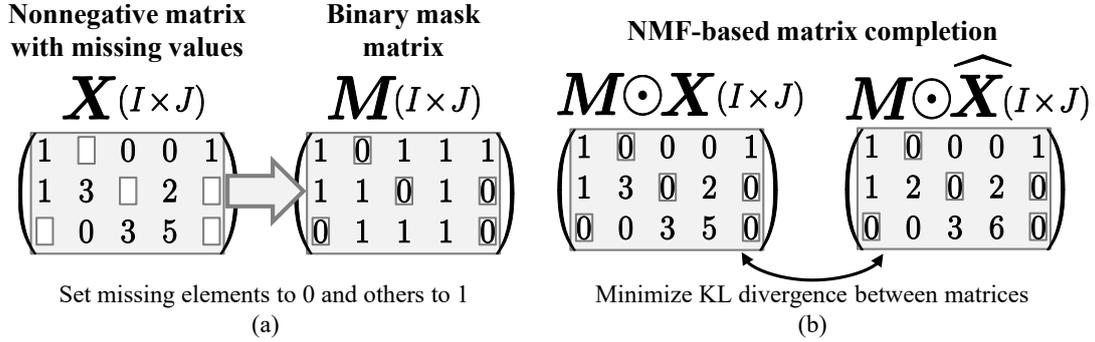


Fig. 5.1. NMF-based matrix completion using binary masks. Missing values are ignored in calculation of KL divergence during estimation of approximated matrix \hat{X} .

づく行列補完では、初めに、観測行列の欠損要素を 0、その他を 1 とするバイナリマスク行列 $M \in \{0, 1\}^{I \times J}$ を生成する。生成されたバイナリマスク行列を観測行列及び近似行列のそれぞれに要素積することで、欠損要素を無視した行列補完が可能となる。即ち、観測可能な要素についてのみ、観測行列と近似行列の目的関数値を最小化することで、観測不能な要素についても行列全体の構造に基づいて何らかの非負値を補完する手法である。

NMF に基づく行列補完は、次式の最適化問題で表される。

$$\text{Minimize } \mathcal{I}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (5.1)$$

$$\mathcal{I}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i,j} m_{ij} d_{\text{KL}}(x_{ij} | \mathbf{w}_i \mathbf{h}_j^T) \quad (5.2)$$

ここで、 m_{ij} はバイナリマスク行列 M の要素である。バイナリマスク行列は定数行列であるため、2.3.3 項と同様の手順で次式の更新式を導出できる。

$$w_{ik}^{(t+1)} = w_{ik}^{(t)} \frac{\sum_j \frac{m_{ij} x_{ij}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(t)} h_{k'j}^{(t)}} h_{kj}^{(t)}}{\sum_j m_{ij} h_{kj}^{(t)}} \quad (5.3)$$

$$h_{kj}^{(t+1)} = h_{kj}^{(t)} \frac{\sum_i \frac{m_{ij} x_{ij}}{\sum_{k'} w_{ik'}^{(t+1)} h_{k'j}^{(t)}} w_{ik}^{(t+1)}}{\sum_i m_{ij} w_{ik}^{(t+1)}} \quad (5.4)$$

式 (5.3) 及び式 (5.4) は行列形式で表現すると次式となる。

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{(\mathbf{M} \odot \mathbf{X}) \mathbf{H}^T}{\mathbf{W} \mathbf{H} \mathbf{M}^T} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T (\mathbf{M} \odot \mathbf{X})}{\mathbf{W}^T \mathbf{M}} \quad (5.6)$$

以上で、バイナリマスク行列を用いた NMF に基づく行列補完の更新式が導出された。

5.2.2 NMF に基づく行列補完の課題とスパース NMF の導入動機

NMF に基づく行列補完の適用例を Fig. 5.2 に示す. Fig. 5.2 は, ランク 5 の 25 行 25 列の正解行列の内, 50% の要素を欠損させた観測行列に対し, 本手法を適用したときの近似行列である. このように, NMF に基づく行列補完は, 理想的な条件下においては目視で差異が判別できないほど高精度な補完が可能である. 理想的な条件下とは即ち, 欠損前の観測行列 (正解行列) のランクが既知 ($K = 5$) であり, 観測行列にノイズも付与されていないケースである.

しかしながら, 実際の観測データにおいてこの理想的条件が満たされることは稀である. 現実の観測行列はノイズの混入によってフルランク化しており, NMF の仮定する低ランク性が厳密には成立しない. また, 欠損が生じた後の行列から正解行列のランクを正確に推定することは困難であり, 基底数 K の相違によるモデル誤差は補完精度を著しく低下させる要因となる. 従って, NMF に基づく行列補完の実用化には, 観測ノイズやランクの推定誤差に対して頑健な手法が求められる.

本論文では, この課題に対し, スパース NMF の導入によって対処する. スパース正則化は, 係数行列をスパースに誘導することで, 各基底ベクトルがデータの核となる構造のみを表現するように促す性質を持つ. これにより, 低ランク性に寄与しないノイズ成分を無視する効果が期待でき, 補完精度及びランク推定誤差に対する頑健性の向上が見込める.

5.2.3 本論文の立ち位置と目的

改めて, 本章の目的について述べる. 上述の通り, スパース NMF の導入は行列補完の頑健性向上に有望である. しかし, 既存の研究において, スパース正則化を厳密に組み込んだ行列補完の検討は十分ではない. 特に, 3 章で議論したスケール任意性問題の回避と単調非増加性の保証という理論的要請を同時に満たす枠組みで行列補完の有効性を検証した例は現時点において確認できない.

そこで本章では, 3 章で導出した各スパース NMF の手法を, バイナリマスクを用いた行列補完へと拡張する. 具体的には, 行列補完へ適用可能な 3 つのスパース NMF の定式化と, それらの反復更新式について述べる. また, 3 章で示した補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF の行列補完への適用における問題について述べる.

本論文の目的は, スパース NMF の導入が行列補完の頑健性に与える影響を明らかにすることにある. 同時に, 3 章で示した各手法 (simple sparse NMF, normalized sparse NMF, 及び Model-sparse NMF) における最適化手法としての理論的厳密さが, 行列補完という実用タスクにおいてどのような価値を持つかを定量的・定性的に確認することにある.

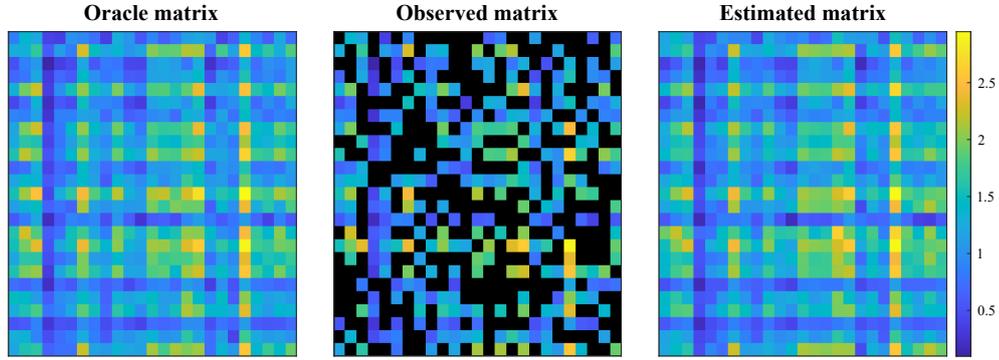


Fig. 5.2. Example of performing NMF-based matrix completion using binary mask. This method can estimate highly accurate completion results when number of basis is set to ideal value.

5.3 Simple sparse NMF に基づく行列補完

2.4 節及び 3 章で述べた simple sparse NMF に基づく行列補完を考える．Simple sparse NMF に基づく行列補完は次の最適化問題として表すことができる．

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}} \mathcal{T}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (5.7)$$

$$\mathcal{T}_{\text{KL}}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i,j} m_{ij} d_{\text{KL}} \left(x_{ij} \mid \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \mu \|\mathbf{H}\|_1 \quad (5.8)$$

このように、スパース NMF において行列補完を考える場合、最小化問題 (5.8) に示した通り、一般化 KL ダイバージェンスの項にのみバイナリマスク \mathbf{M} を適用する．この目的関数の最小化は、バイナリマスク行列が定数行列であることから、2.4.2 節と同様に導出でき、最終的な更新式は次式となる．

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{(\mathbf{M} \odot \mathbf{X}) \mathbf{H}^T}{\mathbf{W} \mathbf{H}} \frac{\mathbf{M} \mathbf{H}^T}{\mathbf{M} \mathbf{H}^T} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T (\mathbf{M} \odot \mathbf{X})}{\mathbf{W}^T \mathbf{M}} \frac{\mathbf{W} \mathbf{H}}{\mathbf{W}^T \mathbf{M} + \mu} \quad (5.10)$$

本手法は、第 3 章で議論した通り、スケール任意性問題により μ によるスパース性の制御が困難であるという課題を抱えている．

5.4 Normalized sparse NMF に基づく行列補完

3章で述べた normalized sparse NMF [7, 8] に基づく行列補完は次の最適化問題として表すことができる。

$$\text{Minimize } \mathcal{T}_{\text{KL}}(\widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (5.11)$$

$$\mathcal{T}_{\text{KL}}(\widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{H}) = \sum_{i,j} m_{ij} d_{\text{KL}} \left(x_{ij} \mid \sum_k \tilde{w}_{ik} h_{kj} \right) + \mu \|\mathbf{H}\|_1 \quad (5.12)$$

ここで, 3.2.2 項の通り, $\widetilde{\mathbf{W}}$ は \mathbf{W} の各列ベクトルを L_1 ノルムで正規化した行列 $\widetilde{\mathbf{W}} = [\mathbf{w}_1/\|\mathbf{w}_1\|_1 \cdots \mathbf{w}_K/\|\mathbf{w}_K\|_1]$ である. 係数行列 \mathbf{H} の更新式は, simple sparse NMF と同様に導出され, 次式となる.

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}} (\mathbf{M} \odot \mathbf{X})}{\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}} \mathbf{M} + \mu} \quad (5.13)$$

続いて, 最小化問題 (5.12) を基底行列 \mathbf{W} について最小化する. 目的関数 \mathcal{T}_{KL} に対し, 正規化された基底行列 $\widetilde{\mathbf{W}}$ の要素 $\tilde{w}_{ik} = w_{ik}/\sum_{i'} w_{i'k}$ に関する偏微分を計算すると次式が得られる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial \tilde{w}_{ik}} &= \sum_j m_{ij} \left(1 - \frac{x_{ij}}{\sum_k \tilde{w}_{ik} h_{kj}} \right) h_{kj} \\ &= \sum_j m_{ij} h_{kj} - \sum_j m_{ij} \frac{x_{ij}}{\sum_k \tilde{w}_{ik} h_{kj}} h_{kj} \end{aligned} \quad (5.14)$$

ここで, 文献 [8] より, あるベクトル \mathbf{w} を $\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{w}/\|\mathbf{w}\|_1$ と正規化して関数 $\mathcal{T}_{\text{KL}}(\tilde{\mathbf{w}})$ に代入した場合, 元の変数 w_{ik} に関する勾配は次のように表される.

$$\frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial w_{ik}} = \frac{1}{\|\mathbf{w}_k\|_1} \left(\frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial \tilde{w}_{ik}} - \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial \tilde{w}_{i'k}} \right) \quad (5.15)$$

上式に \tilde{w}_{ik} に関する偏微分を代入し, 正負の項に分離する. 式 (5.14) における正の項を ζ_{ik} , 負の項を ξ_{ik} とおくと, それぞれ以下のように表すことができる.

$$\frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial \tilde{w}_{ik}} = \zeta_{ik} - \xi_{ik} \quad (5.16)$$

$$\zeta_{ik} = \sum_j m_{ij} h_{kj} = [\mathbf{M}\mathbf{H}^{\text{T}}]_{ik} \quad (5.17)$$

$$\xi_{ik} = \sum_j m_{ij} \frac{x_{ij}}{\sum_k \tilde{w}_{ik} h_{kj}} h_{kj} = \left[\left(\frac{\mathbf{M} \odot \mathbf{X}}{\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{H}} \right) \mathbf{H}^{\text{T}} \right]_{ik} \quad (5.18)$$

これを用いると, w_{ik} に関する勾配は次のように整理できる.

$$\frac{\partial \mathcal{T}_{\text{KL}}}{\partial w_{ik}} = \frac{1}{\|\mathbf{w}_k\|_1} \left[(\zeta_{ik} - \xi_{ik}) - \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} (\zeta_{i'k} - \xi_{i'k}) \right] \quad (5.19)$$

Heuristic update rule に従い, 式 (5.19) を正の項 $\zeta_{ik} + \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \xi_{i'k}$ と負の項 $\xi_{ik} + \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \zeta_{i'k}$ に分離することで, 最終的な \mathbf{W} の更新式は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} w_{ik} &= w_{ik} \frac{\xi_{ik} + \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \zeta_{i'k}}{\zeta_{ik} + \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \xi_{i'k}} \\ &= w_{ik} \frac{\sum_j m_{ij} \frac{x_{ij}}{\sum_k \tilde{w}_{i'k} h_{kj}} h_{kj} + \sum_{i'} \left(\tilde{w}_{i'k} \sum_j m_{i'j} h_{kj} \right)}{\sum_j m_{ij} h_{kj} + \sum_{i'} \tilde{w}_{i'k} \sum_j \left(m_{i'j} \frac{x_{i'j}}{\sum_k \tilde{w}_{i'k} h_{kj}} h_{kj} \right)} \end{aligned} \quad (5.20)$$

行列形式で記述すると, 以下のようになる.

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\frac{\mathbf{M} \odot \mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T + \widetilde{\mathbf{W}} \odot (\mathbf{1}^{(I \times J)} (\mathbf{1}^{(I \times J)})^T (\widetilde{\mathbf{W}} \odot \mathbf{M}\mathbf{H}^T))}{\mathbf{M}\mathbf{H}^T + \widetilde{\mathbf{W}} \odot (\mathbf{1}^{(I \times J)} (\mathbf{1}^{(I \times J)})^T (\widetilde{\mathbf{W}} \odot \frac{\mathbf{M} \odot \mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T))} \quad (5.21)$$

本手法は, 目的関数そのものに正規化を組み込んでいるため, スケール任意性問題を回避する.

5.5 Model-sparse NMF に基づく行列補完

3章で述べた model-sparse NMF に基づく行列補完は次の最適化問題として表すことができる.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{V}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{ik}, h_{kj} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (5.22)$$

$$\mathcal{V}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i,j} m_{ij} d_{\text{KL}} \left(x_{ij} \mid \sum_k w_{ik} h_{kj} \right) + \mu \|\mathbf{W}\mathbf{H}\|_1 \quad (5.23)$$

更新式は, 3.2.2 項と同様の補助関数法をバイナリマスク適用下で行うことで, 次のように得られる.

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\frac{\mathbf{M} \odot \mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T}{\mathbf{M}\mathbf{H}^T + \mu \mathbf{W}^T \mathbf{1}^{(I \times J)}} \quad (5.24)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T \frac{\mathbf{M} \odot \mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}}}{\mathbf{W}^T \mathbf{M} + \mu \mathbf{1}^{(I \times J)} \mathbf{H}^T} \quad (5.25)$$

5.6 補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF の最適化における解析解の困難性

3章において, ノルム制約 $\sum_i w_{ik} = 1$ を課した norm-constrained sparse NMF の補助関数法に基づく最適化は, 一般化 KL ダイバージェンスを損失関数に用いることで, ラグランジュ乗数 λ_k を解析的に導出できることを示した. しかし, 行列補完のようにバイナリマスク \mathbf{M} を導入した場合, この解析的な性質が失われる. 具体的には, マスク \mathbf{M} を考慮した補助関数 $\mathcal{T}_{\text{KL}}^+$ に対し, w_{ik} に関する偏微分を 0 とおくと, 次式が得られる.

$$w_{ik} = \frac{\sum_j m_{ij} x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_j m_{ij} h_{kj} + \lambda_k} \quad (5.26)$$

3章の手順に従い、ノルム制約 $\sum_i w_{ik} = 1$ を適用すると、 λ_k に関する次の方程式を得る。

$$\sum_i \frac{\sum_j m_{ij} x_{ij} \delta_{ijk}}{\sum_j m_{ij} h_{kj} + \lambda_k} = 1 \quad (5.27)$$

3章の定式化 ($m_{ij} = 1 \forall i, j$ の場合) では、分母の第1項が i に依存しない定数 ($\sum_j h_{kj}$) であったため、 λ_k を総和記号の外に括り出し解析的に解くことが可能であった。しかし、行列補完においては $\sum_j m_{ij} h_{kj}$ が行インデクス i に依存するため、式 (5.27) は λ_k に関する非線形方程式となり、解析的な解を得ることができない。従って、行列補完においてノルム制約を厳密に扱うには、各反復において式 (5.27) をニュートン法などの数値計算により解く必要があり、計算コストが著しく増大するという問題が生じる。

5.7 本章のまとめ

本章では、3章で構築したスパース NMF の理論体系を、欠損値補完という実用的なタスクへと拡張した。まず、バイナリマスク行列を用いた NMF に基づく行列補完の定式化を示し、その実用上の課題として観測ノイズやランクのモデル誤差に対する脆弱性を指摘した。これに対し、スパース正則化の導入が、低ランク構造の抽出を強化し、ノイズに対する頑健性を向上させる有力な解決策であることを述べた。次に、行列補完へと拡張した3つのスパース NMF 手法の反復更新式を導出した。一方で、3章において提案した補助関数法に基づく norm-constrained sparse NMF が、バイナリマスクを導入した行列においては解析解を失うことを明らかにした。次章では、本章で導出した各手法を用い、4章で確認した収束特性の違いが、ノイズやモデル誤差を含む行列補完タスクにおいてどのような性能差として現れるかを実験的に評価する。

第6章

スパース NMF に基づく行列補完の評価実験

6.1 はじめに

本章では、5章で定式化したスパース NMF に基づく行列補完手法の有効性を、数値実験を通じて評価する。特に、本論文では以下の二点に着目する。

第一に、スパース正則化を導入した NMF が、欠損値補完というタスクにおいて、従来の正則化無し NMF と比較してどのような利点をもたらすかを明らかにする。5章で述べた通り、行列補完では観測ノイズや基底数のモデル誤差が避けられず、これらに対する頑健性が重要となる。本章では、人工的に欠損を付与した行列を用いた実験により、各スパース NMF 手法の基本的な挙動と性能傾向を整理する。

第二に、スパース NMF における反復更新時の目的関数の単調非増加性が、行列補完性能に与える影響を検証する。3章では、simple sparse NMF が単調非増加性を保証しない一方で、model-sparse NMF は理論的に単調非増加性を保証することを示した。また、4章において、normalized sparse NMF は実験的には単調非増加性を示すことを確認した。一方、5章で述べた通り、norm-constrained sparse NMF は行列補完問題に直接適用できないという制約がある。そこで本章では、単調非増加性を示す二つの手法（normalized sparse NMF 及び model-sparse NMF）と、単調非増加性を持たない simple sparse NMF を比較することで、単調非増加性の有無が行列補完という実用タスクにおいてどのような効果をもたらすかということについて実験的に明らかにする。

本章では、まず6.2節において、人工的に欠損を付与した乱数行列を用いた補完実験を行い、各手法の性能傾向と頑健性を評価する。次に、6.3節では、実データの一例としてスペクトログラム上の欠損値補完を行い、実応用における有効性を検証する。最後に、6.4節で本章をまとめ、実験結果より行列補完におけるスパース正則化の効果について、その性能を総括する。

6.2 人工欠損行列の補完実験

本実験では、5章で示したスパース NMF に基づく行列補完の性能について、人工的に作成した欠損乱数データを用いて検証する。本実験の目的は、スパース NMF に基づく行列補完手法の基本的な特性を把握し、特にスパース正則化及び反復更新の単調非増加性の有無が補完性能に与える影響を明らかにすることである。従って5章で定式化した3種類のスパース NMF に基づく行列補完に加え、正則化無し KLNMF に基づく行列補完も合わせた、4手法を対象として補完実験を行う。以降、各行列補完手法を基となる NMF に応じて、次のように呼称する。

1. **Non-regularized NMF**: 5.2.1 項で述べた正則化無し NMF に基づく行列補完手法。
2. **Simple sparse NMF**: 5.3 節で述べた simple sparse NMF に基づく行列補完手法。
3. **Normalized sparse NMF**: 5.4 節で導出した、normalized sparse NMF に基づく行列補完手法。
4. **Model-sparse NMF**: 5.5 節で導出した、model-sparse NMF に基づく行列補完手法。

6.2.1 実験方法

本実験では、一様乱数から生成した低ランクの正解行列 \mathbf{T} に対し、ノイズを加算した後欠損を加えた観測行列 \mathbf{X} を用意し、調査対象とする NMF によって行列補完を行い、その補完性能を調査する。観測行列の生成過程を Fig. 6.1 に示す。

初めに、乱数行列 $\mathbf{T}_1 \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{100 \times 10}$ 及び $\mathbf{T}_2 \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{10 \times 200}$ の行列積によって、 $\mathbf{T} = \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2$ としてランク $K = 10$ の正解行列 $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{100 \times 200}$ を生成した。次に、正解行列 \mathbf{T} に付加するノイズ行列 $\mathbf{N} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times J}$ を作成した。行列の生成には区間 $(0, 1)$ の一様分布乱数を用い、ノイズ行列は信号対雑音比 (signal-to-noise ratio: SNR) が正解行列に対して 20 dB となるように調節した、さらに、正解行列にノイズを付加した後、行列全体に対する欠損要素の割合として定義した欠損率 α に基づいて、各要素が独立にランダムに欠損した観測行列を生成した。

以上の手順により、正解行列の構造を損なわない程度のノイズを含みつつ、特定の構造的欠損要因に依存しない一般的な観測環境を想定した観測行列を構成した。このような標準的な欠損データに対する補完性能を評価することで、スパース正則化及び反復更新則の違いが行列補完性能に与える影響を比較した。

実験で用いた各種パラメータの設定値を Table 6.1 に示す。欠損率 α は、NMF が仮定する低ランク構造を読み取ることが可能な範囲として 0 から 0.7 まで等間隔に 40 点設定した。また、スパース正則化の重み係数 μ は 10^{-3} から 10^{-1} まで対数スケールで 20 点推移させた。各手法の反復回数は 500 回とし、実験条件ごとに 10 種類の異なる乱数シードを用いて各行列を生成し、これに対する平均的な振る舞いを評価した。

実験における評価方法の概要を Fig. 6.2 に示す。各手法の評価には、500 回の反復更新に

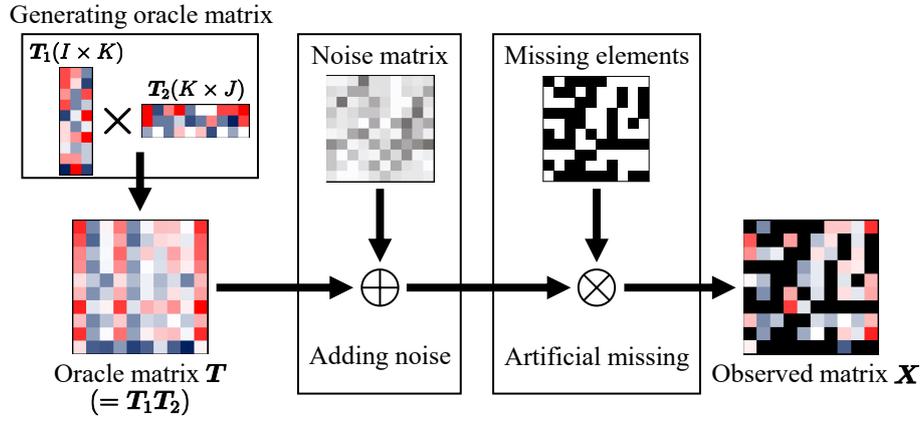
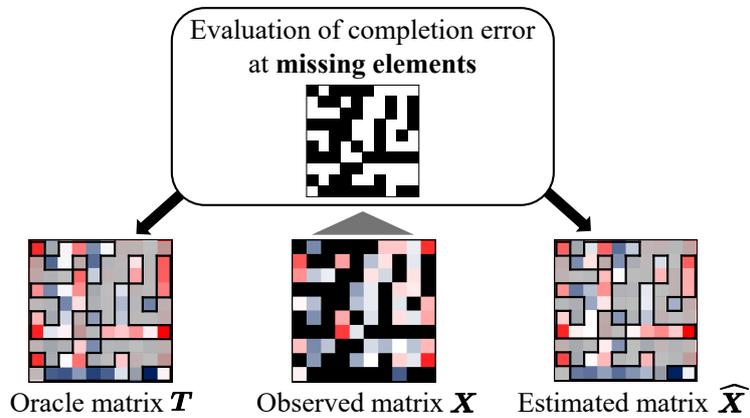


Fig. 6.1. Process flow of producing noisy random matrix with missing values.

Table 6.1. Experimental parameters for random missing matrix completion

Parameter	Value
Missing rate α	0, 0.025, ..., 0.7 (40 values)
Regularization coefficient μ	$[10^{-3}, 10^{-1}]$ (log-spaced, 20 values)
Number of iterations	500
Number of random seeds	10

Fig. 6.2. Overview of the evaluation method for matrix completion. The completion error is calculated as the KL divergence between the oracle matrix \mathbf{T} and the estimated matrix $\widehat{\mathbf{X}}$ for the elements corresponding to the missing elements in the observed matrix \mathbf{X} .

よって得られた近似行列と正解行列との補完誤差を用いた。本評価では、観測行列における欠損要素に対応するインデックスについて、正解行列と近似行列の間の一般化 KL ダイバージェンスを算出した。この全欠損要素における総和を最終的な補完誤差として評価に用いた。

6.2.2 実験結果

実験結果を Fig. 6.3 に示す. Fig. 6.3 において, 縦軸は行列補完した要素 (欠損要素) の真値と補完値との一般化 KL ダイバージェンスの値を示しており, この値が低いほど誤差が小さく補完精度が高いことを示している. また, Fig. 6.3(a) は横軸に重み係数 μ を取り, 欠損率 α を 0.3 に固定したときにおける各手法の重み係数に対する振る舞いを, Fig. 6.3(b) は横軸に欠損率 α を取り, 各手法において最良の μ に固定したときにおける重み係数に対する振る舞いを, それぞれ示している. Fig. 6.3(b) において, simple sparse NMF の重み係数は $\mu = 0.0108$, normalized sparse NMF は $\mu = 0.0073$, model-sparse NMF は $\mu = 0.0108$ であった.

Fig. 6.3(a) より, 最適な重み係数 μ において, 多くの欠損率の条件で正則化無し NMF よりもスパース NMF を用いた行列補完が高い補完精度を示している. この結果から, スパース正則化の導入が行列補完精度の向上に寄与することが示唆される. また, 多くの条件において, 反復更新の単調非増加性を保証した model-sparse NMF が最も良好な補完精度を示し, 次いで normalized sparse NMF の補完精度が高いことが確認された. このことから, 単調非増加性を保証したスパース NMF に基づく行列補完は, 補完精度の向上に加え, 特にノイズに対する頑健性を有する可能性が示唆される.

Fig. 6.3(b) は, 欠損率 $\alpha = 0.3$ に固定し, 横軸を重み係数, 縦軸を補完誤差としたプロットである. Fig. 6.3(b) より, 単調非増加性を保証した model-sparse NMF は μ の変化に対しても安定して高い補完精度を維持しており, 正則化パラメータに対する依存性が低いことが確認できる.

以上の結果から, 単調非増加性を保証したスパース NMF は, 単に補完精度を向上させるだけでなく, ハイパーパラメータの変動に対しても極めて安定した補完性能を発揮することが明らかとなった. これは, 厳密な最適化理論に基づく更新則の導出が, 実用的な行列補完タスクにおいても強力な利点となることを示している. 次節では, 音響信号のスペクトログラムを用いた行列補完実験を行い, より実用に近いタスクにおける有効性を評価する.

6.3 スペクトログラムの補完実験

本実験では, 音源分離等の処理を通して音声信号に発生しうる欠損値の補完について, スパース NMF の補完精度の評価を行う. この実験は, 音声のスペクトログラムに欠損が発生する実際の応用例として, 時間周波数マスクによる音源分離 [38, 39, 40] を扱う. より実用に近い本実験を通して, これまでの実験で示されてきたスパース正則化と単調非増加性の保証による行列補完精度の向上が, 実用上も有効であることを確認する.

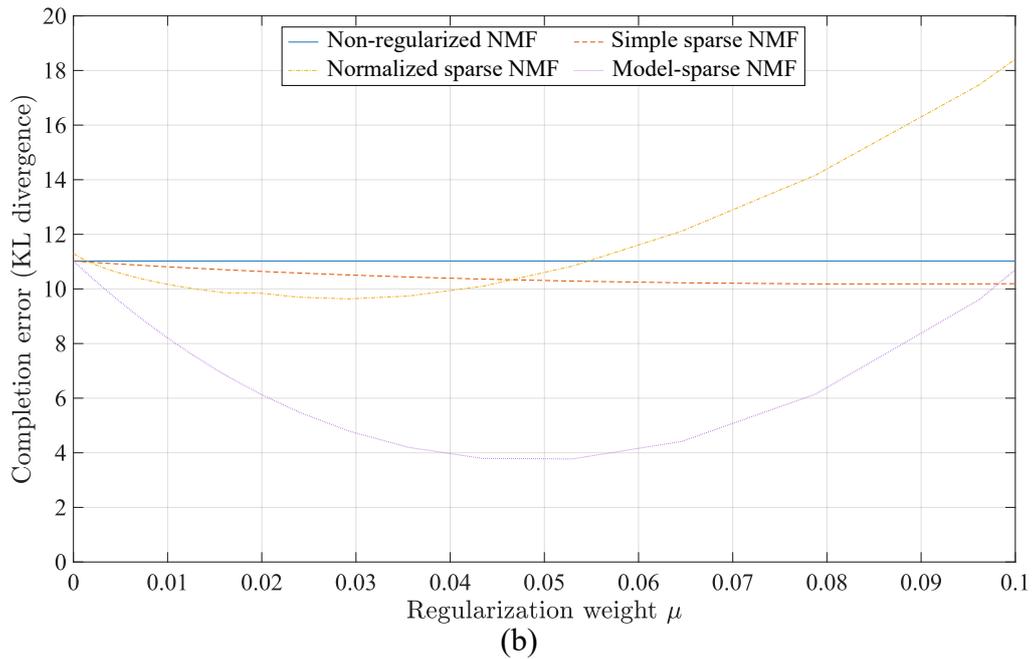
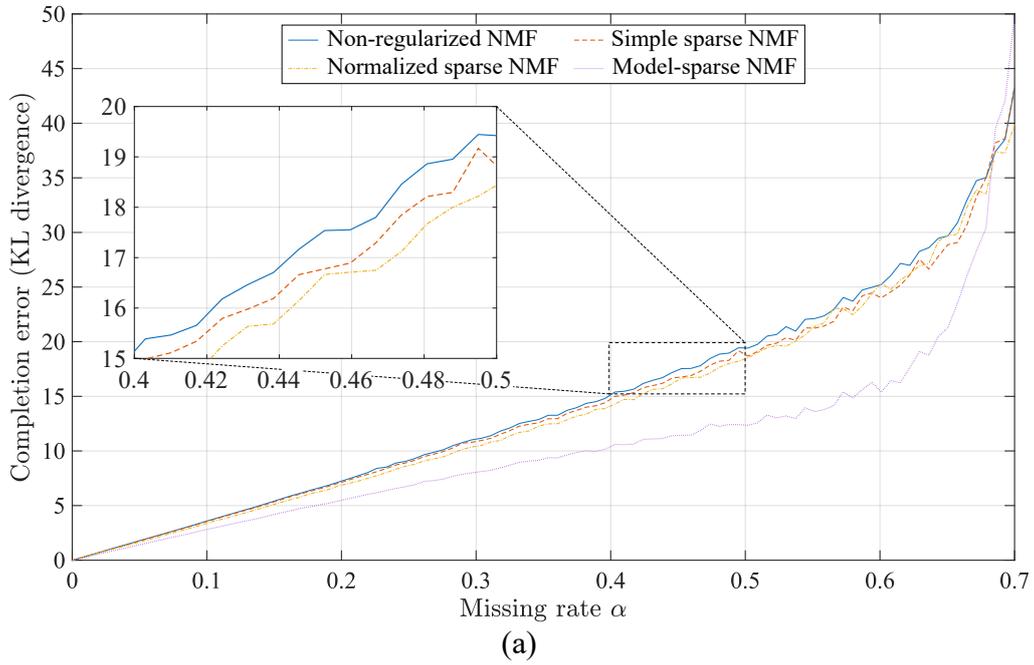


Fig. 6.3. Results of matrix completion experiments with artificial missing data: (a) completion error vs. missing rate α with the optimal μ and (b) completion error vs. regularization weight μ at $\alpha = 0.3$.

6.3.1 時間周波数マスク

本節では、この実験で取り扱う時間周波数マスクについて説明する。時間周波数マスクとは、観測信号のスペクトログラムのある時間周波数要素に対して、目的の分離信号の成分が存

在しているかどうかを表す二次元行列である。ソフトマスクであれば、時間周波数マスクは 0 から 1 までの値で構成され、バイナリマスク行列であれば、0 又は 1 の値で構成される。この概要を Fig. 6.4 に示す。図のような赤、緑、青の音源から成る混合信号から赤の音源成分のみを取り出したい状況を仮定する。この時、赤の音源の部分を 1 それ以外を 0 とするようなバイナリの時間周波数マスクを構成し、混合信号のスペクトログラムと時間周波数マスクを要素毎に乗算することで、赤の音源とその他の音源を分離することが可能である。

このような時間周波数マスクはそのまま音源分離に適用され、いかに目的音源のみを通すマスクを作成できるかが検討されている（例えば、[38, 39, 40] 等）。適切な時間周波数マスクを生成できれば、簡単に音源分離可能な一方で、特にバイナリ時間周波数マスクによって分離された音源は、スペクトログラムの中に 0 を含むことになる。即ち、元の目的音源に対し欠損した状態であり、これは、人間の聴覚には歪みとして現れる。

本実験では、バイナリ時間周波数マスクを適用して音源分離された音響信号に対し、歪みを軽減することを目的として提案手法で欠損補完を施すことを想定する。バイナリ時間周波数マスクは欠損のある音源を作成するための、完全に分離された（混合前の）音源信号の振幅スペクトログラムから生成する。これは即ち、前段のバイナリ時間周波数マスクに基づく音源分離アルゴリズムが理想的な性能を達成した場合において、提案手法による欠損補完が分離音の品質をどの程度改善させることができるか、ということと比較・検証することに相当する。

6.3.2 実験方法

本実験では、音源に対しバイナリ時間周波数マスクをかけることで欠損を疑似的に生成し、これに対する行列補完実験を行う。実験手順の概要を Figs. 6.5 及び 6.6 にそれぞれ示す。音源には JVS corpus [41] の parallel 音源より、以下の 2 つを用いた。

- 音源 1 : jvs001/parallel100/wav24kHz16bit/VOICEACTRESS100_018.wav
- 音源 2 : jvs002/parallel100/wav24kHz16bit/VOICEACTRESS100_018.wav

この 2 つの音源を用い、Fig. 6.5(a) に従い、音源をそれぞれ時間周波数領域の振幅スペクトログラムに変換し、正解行列を生成した。また、Fig. 6.5(b) に従い、これら 2 つの正解行列を要素ごとに比較し、各時間、周波数ビンにおいて、より振幅の大きい音源を 1、小さい方を 0 としてバイナリマスクを生成した。その後、Fig. 6.6(a) に示す、2 音源を混合した信号を STFT で変換した振幅スペクトログラムに対し、Fig. 6.6(b) のように作成したそれぞれのバイナリマスクを要素積することで、欠損値を含む観測行列を生成した。本実験では、サンプリング周波数 24 kHz の信号に対し、窓長 4096 点のブラックマン窓をハーフシフトで適用し、 $(I, J) = (2049, 89)$ のスペクトログラムを解析対象とした。

実験で用いた各種パラメータの設定値を Table 6.2 に示す。基底数 K は 20 から 89 までの 69 種、スパース正則化の重み係数 μ は 10^{-3} から 10^{-1} まで対数スケールで 20 点推移させた。各手法の反復回数は 500 回とし、実験条件ごとに 10 種類の異なる乱数シードを用いて各行列

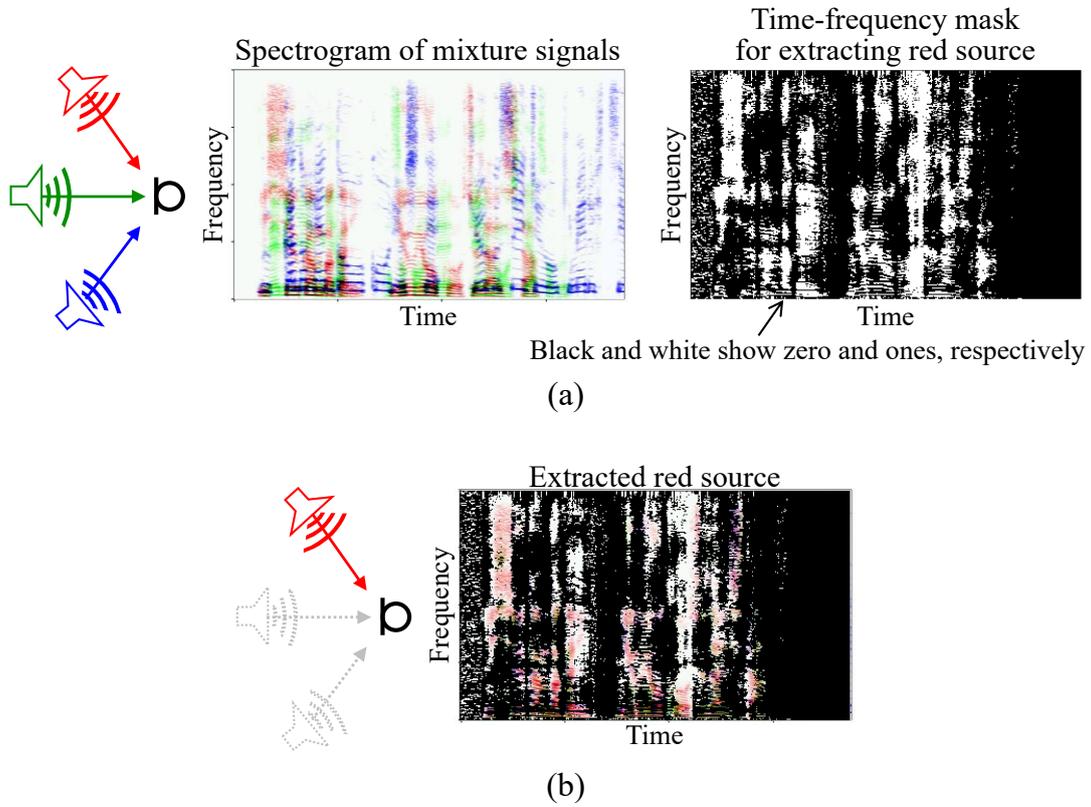


Fig. 6.4. Overview of time-frequency mask: (a) mixture signal and time-frequency binary mask for red source and (b) extracted red source by time-frequency binary masking.

Table 6.2. Experimental parameters for missing spectrogram completion

Parameter	Value
Number of basis K	20, 21, ..., 89 (69 values)
Regularization coefficient μ	$[10^{-3}, 10^{-1}]$ (log-spaced, 20 values)
Number of iterations	500
Number of random seeds	10

を生成し、それらの平均値を評価値とした。

各手法の評価は、500回反復後の推定行列と正解行列との補完誤差に基づき行った。Fig. 6.7に評価方法の概要を示す。観測行列における欠損要素（マスクの値が0である要素）に対応するインデックスについて、正解行列と推定行列の間の一般化KLダイバージェンスを算出し、全欠損要素におけるその総和を最終的な補完誤差として評価に用いた。

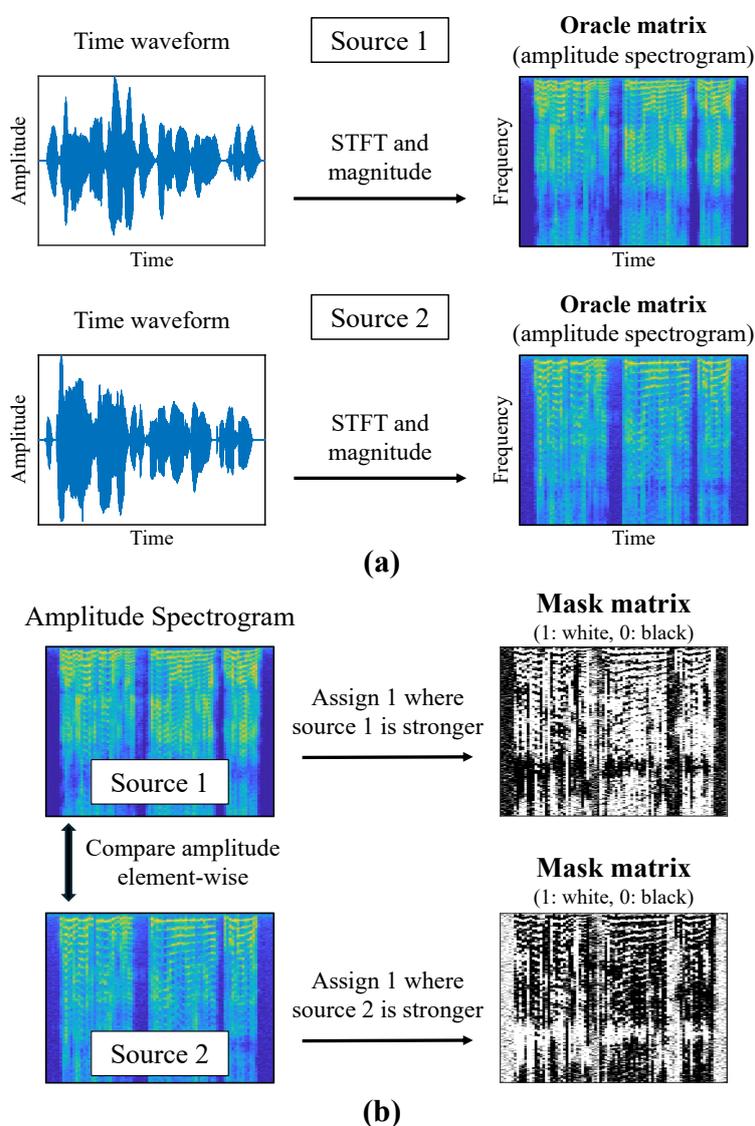


Fig. 6.5. Procedures for generating oracle matrices and binary masks. (a) Each audio source is converted into an amplitude spectrogram (oracle matrix) via STFT and magnitude calculation. (b) The two oracle matrices are compared element-wise to create binary masks. For each element, a value of 1 (white) is assigned to the mask where the corresponding source amplitude is stronger, and 0 (black) otherwise.

6.3.3 実験結果

実験結果を Fig. 6.8 に示す。Fig. 6.8 は基底数 K の変化に対する補完誤差の推移を示しており、Fig. 6.8(a) は音源 1、Fig. 6.8(b) は音源 2 における結果である。各手法の重み係数 μ は、全基底数において平均的に最も補完誤差が小さくなる値に固定しており、具体的に

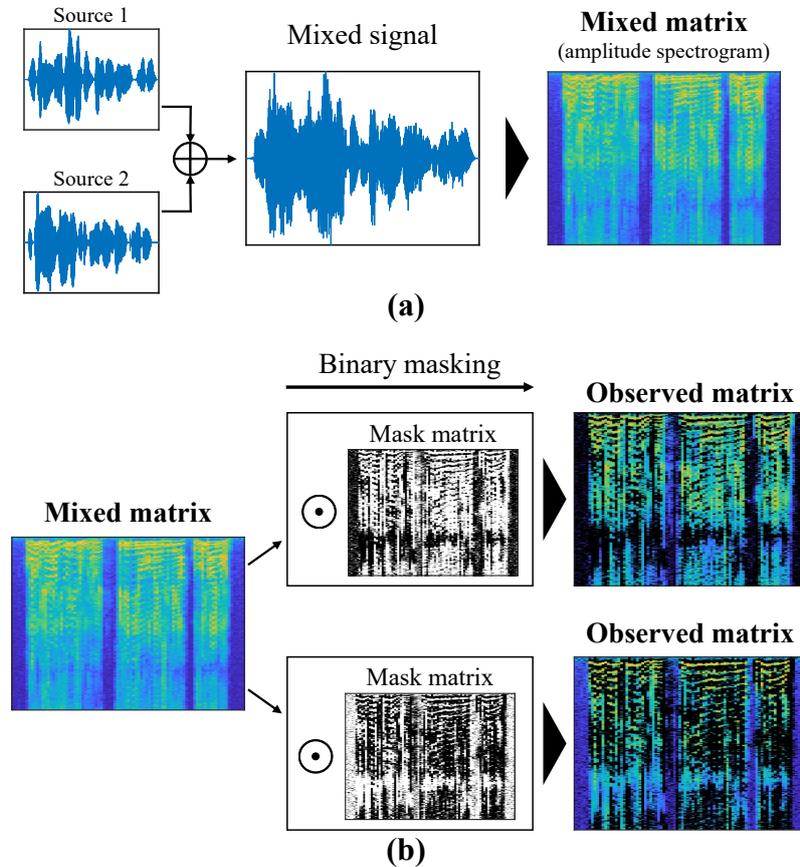


Fig. 6.6. Construction of the observed matrices with missing elements. The observed matrices are generated by applying the binary masks to the mixed matrix. This process simulates data loss, such as signal clipping or occlusion, specifically for each target source.

は simple sparse NMF では $\mu = 0.3162$, normalized sparse NMF 及び model-sparse NMF では $\mu = 0.0268$ の結果を示している。また、実験結果の具体的な数値を Table 6.3 及び Table 6.4 にそれぞれ示す。Table 6.3 及び Table 6.4 において、太字で示した値は、各基底数において補完誤差が最小となる最良の結果を表している。

実験結果より、いずれのスパース NMF 手法も、正則化を施さない従来の NMF と比較して一貫して高い補完精度を達成しており、スパース正則化の導入が行列補完性能の向上に有効であることが確認できる。特に基底数 K が小さい領域では、いずれの音源においても model-sparse NMF が最も優れた補完精度を示し、次いで normalized sparse NMF が良好な性能を示している。例えば、音源 1 の $K = 20$ において、model-sparse NMF の補完誤差は 33.45 であり、同条件における simple sparse NMF の 42.30 及び non-regularized NMF の 1100.24 と比較して、著しく小さい値を示している。この傾向は音源 2 においても同様に観測された。

一方で、基底数 K が大きくなるにつれて、model-sparse NMF と normalized sparse NMF

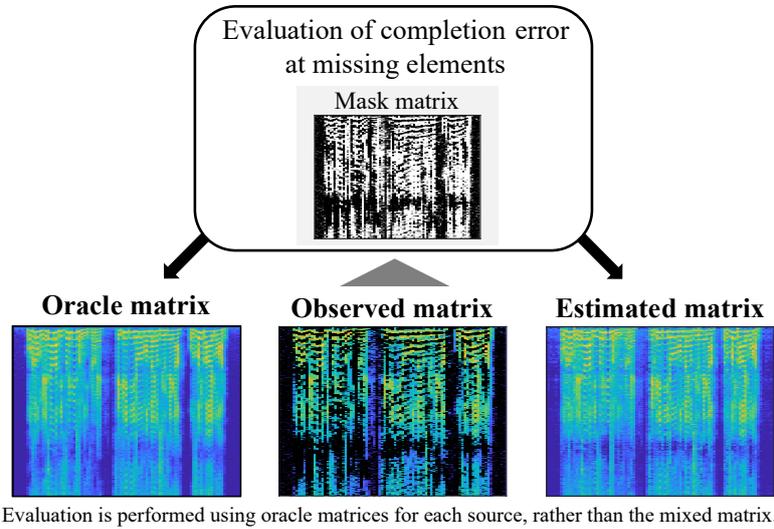


Fig. 6.7. Overview of the evaluation method for matrix completion. The completion error is evaluated by calculating the KL divergence between the oracle matrix and the estimated matrix, focusing exclusively on the indices corresponding to the missing elements defined by the mask matrix.

Table 6.3. Comparison of completion errors for Source 1 across selected number of basis K . Bold values indicate the minimum error for each K .

Method	$K = 20$	$K = 35$	$K = 50$	$K = 65$	$K = 80$	$K = 89$
Non-regularized NMF	1100.24	731.98	611.43	392.47	162.13	184.98
Simple sparse NMF	42.30	42.77	54.08	56.88	57.40	56.20
Normalized sparse NMF	36.03	34.98	37.12	30.31	24.51	24.42
Model-sparse NMF	33.45	31.27	26.86	26.14	29.37	28.67

の補完精度は僅かに逆転する傾向が見られるものの、両手法はいずれの条件においても simple sparse NMF を上回る精度を維持している。simple sparse NMF が K の増加に伴い誤差の上昇あるいは高止まりを示すのに対し、model-sparse NMF 及び normalized sparse NMF は基底数が過大な条件下においても比較的安定した補完精度を示している。この結果は、目的関数の単調非増加性を理論的に保証した更新則を用いることで、解探索過程における過学習的な挙動が抑制され、より頑健な基底獲得が可能となっていることを示唆している。

6.4 本章のまとめ

本章では、スパース NMF に基づく行列補完手法の有効性について、人工欠損行列及びスペクトログラムを用いた数値実験を通じて評価を行った。人工欠損行列を用いた実験では、スパース正則化を導入した NMF が、正則化無し NMF と比較して多くの条件で高い補完精度を

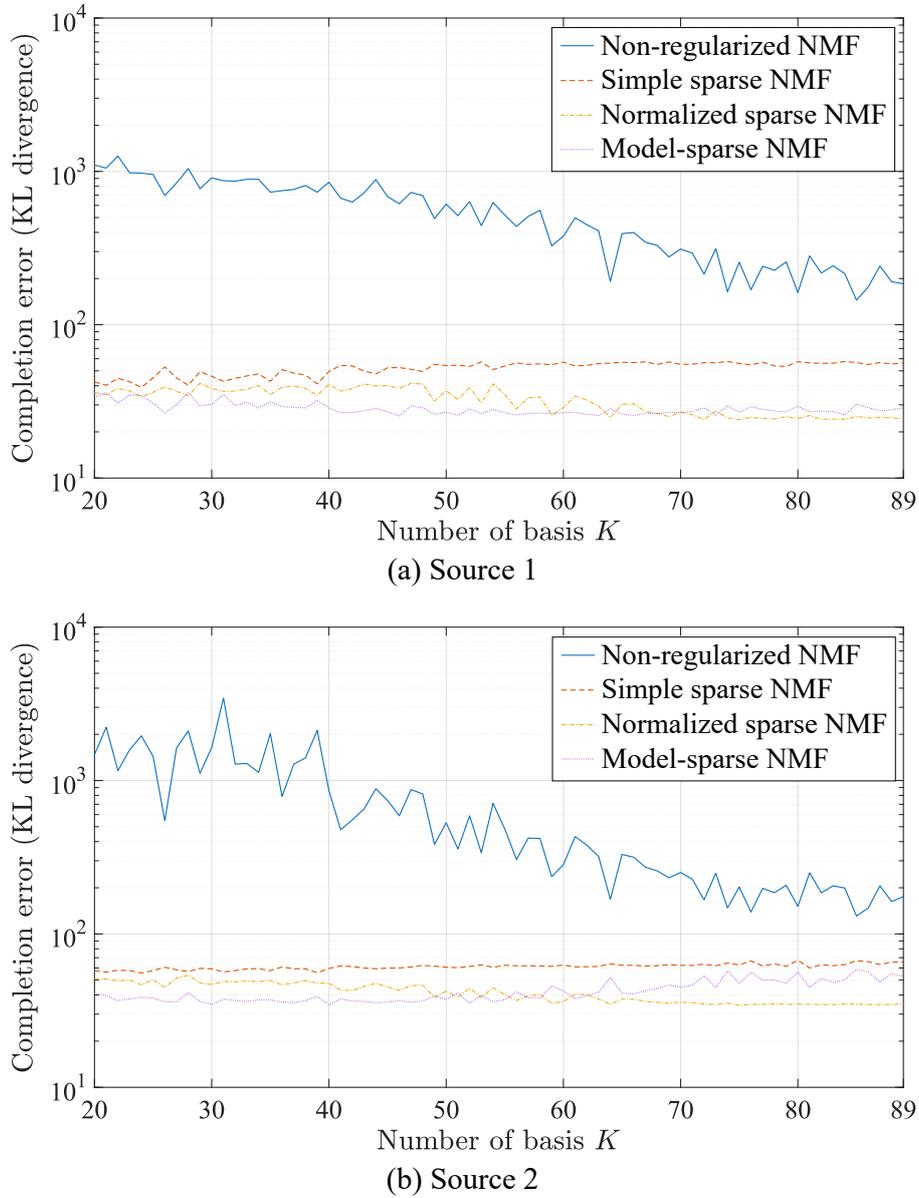


Fig. 6.8. Transitions of completion errors for each method against the number of basis K : (a) Source 1 and (b) Source 2. The regularization parameter μ is set common to both sources for each method, fixed at the value that yields the best average completion error: $\mu = 0.3162$ for simple sparse NMF, and $\mu = 0.0268$ for both normalized sparse NMF and model-sparse NMF.

示すことを確認した。特に、反復更新において目的関数の単調非増加性を実験的または理論的に保証した normalized sparse NMF 及び model-sparse NMF は、補完精度及び正則化パラメータに対する安定性の観点から、優れた性能を示すことが明らかとなった。さらに、スペクトログラム補完実験においても、スパース NMF に基づく行列補完が実応用において有効であることを確認した。とりわけ、基底数が小さい条件において、単調非増加性を理論的に保証し

Table 6.4. Comparison of completion errors for Source 2 across selected number of basis K . Bold values indicate the minimum error for each K .

Method	$K = 20$	$K = 35$	$K = 50$	$K = 65$	$K = 80$	$K = 89$
Non-regularized NMF	1471.15	2024.18	530.42	330.29	151.58	175.07
Simple sparse NMF	57.62	57.68	60.69	62.46	67.30	65.67
Normalized sparse NMF	50.82	49.73	42.36	37.63	34.86	35.04
Model-sparse NMF	41.11	37.26	37.44	41.09	56.16	52.88

た model-sparse NMF が一貫して高い補完精度を示しており、この性質が実用的な行列補完タスクにおいても有益である可能性が示唆された。以上の結果から、行列補完においてスパース正則化は有効な手段であるとともに、反復更新過程における単調非増加性の保証が、補完性能及び安定性の向上に寄与する重要な要素であることが示された。

第7章

結言

本論文では、スパース NMF において、NMF が本質的に抱えるスケール任意性問題がスパース性の誘導を阻害するという致命的な課題に着目し、理論的整合性の高い最適化アルゴリズムの構築とその応用可能性について検討した。1 章では NMF、スパース NMF、及び行列補完技術について概観し、本論文の背景と目的を述べた。2 章では、本論文の議論で用いるスパース性、NMF、及びスパース NMF の基礎について整理した。

3 章では、従来のスパース NMF における反復毎の逐次的な正規化操作が目的関数の単調非増加性を損なうことを理論的に指摘した。これに対し、補助関数法に基づき、基底行列へのノルム制約を厳密に考慮した新たな更新則を導出した。本手法は、ラグランジュ未定乗数法を用いて制約条件を解析的に解くことで、スケール任意性問題を回避しつつ、目的関数の厳密な単調非増加性を理論的に保証したものである。さらに、4 章では音響信号のスペクトログラムを用いた近似実験を通じて提案手法の反復更新における収束特性を評価した。実験の結果、従来のヒューリスティックな手法では目的関数値が増加する不安定な挙動が観測されたのに対し、提案手法は全ての条件下で単調に収束することを確認した。これにより、単調非増加性の理論的保証が数値実験においても裏付けられ、アルゴリズムの安定性に直結することを実証した。

5 章及び 6 章では、導出したスパース NMF を行列補完問題へと拡張し、その有効性を検証した。人工欠損行列及び実際の音響信号を用いた補完実験を通じて、単調非増加性を保証する厳密な最適化が、高い欠損率の下でも安定した補完性能を発揮することを示した。また、 L_1 正則化によるスパース性の導入は、観測ノイズや不規則な欠損の影響を抑制し、基底行列の推定精度を向上させることを確認した。さらに、単調非増加性を保証する手法は、重み係数や基底数といったハイパーパラメータの変化に対しても高い頑健性を示し、実用的なタスクにおいて極めて有利であることを明らかにした。

今後の課題として、まず、本論文では L_1 正則化に基づくスパース性に焦点を当てたが、他のスパース制約を導入した場合における最適化特性や収束挙動についての検討が挙げられる。また、正則化項の重み係数は推定結果に大きな影響を与える重要なハイパーパラメータであり、その理論的な振る舞いや自動調整手法の導入についても、今後の重要な検討課題である。さらに、本論文では、行列補完において主に音響信号のスペクトログラムを対象としたが、セ

ンサデータや画像データなど，より広範な欠損値データに対する行列補完性能の検証を行うことで，スパース正則化の汎用性や単調非増加性の理論的保証の重要性を一層明確にできると考えられる。

以上の通り，本論文はスパース NMF の最適化理論を体系的に整理し，スケール任意性問題を解決する新たなアルゴリズムを示すとともに，それが行列補完において高い性能と頑健性をもたらすことを明らかにした。本論文で得られた知見は，スパース性を利用した非負値データ解析の信頼性向上に寄与するものであり，NMF の反復最適化において単調非増加性を厳密に保証することが，実用上の性能向上に直結するという重要な指針を提示するものである。

謝辞

本論文は、香川高等専門学校電気情報工学科 北村研究室にて行われた研究成果をまとめたものです。

まずは、本科5年次の卒業研究から3年間にわたる研究遂行にあたり、十全な研究環境を提供していただき、私の研究素養の基礎を築いてくださった指導教員の北村大地准教授に、心より感謝申し上げます。北村准教授には、信号処理の基礎理論から文献調査、研究に関する議論、そして本論文の執筆に至るまで、多岐にわたる熱心なご指導と多大なるご支援をいただきました。また、研究室の様々な活動を通じて得られた貴重な経験や、趣味の一眼レフカメラを始めるきっかけをいただいたことなど、公私にわたり私の価値観を広げる機会を与えて下さったことに深く感謝の意を表します。

次に、本論文の副査を担当頂いた重田和弘教授並びに柿元健准教授には、論文の構成や記述に関して大変有益な助言を頂き、大変お世話になりました。ここに厚く御礼申し上げます。

学生生活においては、連携プログラム生として香川大学創造工学部に温かく迎え入れてくださった香川大学創造工学部の丹治教授に、深く感謝申し上げます。情報通信コースにおける受け入れ前例がない中、教務関係の諸手続きやその調整、講義の手配など、香川大学での生活に不慣れな私を手厚くご支援いただき、誠にありがとうございました。

本研究の推進にあたっては、北村研究室 OB であり現在は東京科学大学大学院に在籍されている綾野翔馬氏より多大なるご支援を頂きました。基礎となるアイデアの提供をはじめ、提案手法に関する議論における有益な助言は本論文の完成に不可欠なものでした。ここに厚く御礼申し上げます。

日々の研究生生活を支えてくれた研究室の後輩である、小川氏、谷野宮氏、大喜多氏、片山氏、森末氏には深く感謝しています。輪講や日常的なディスカッションに加え、研究室旅行などの行事を通じて多くの刺激を得ることができ、また、研究に励む真摯な姿は、私自身のモチベーションを維持する大きな支えとなりました。

そして、専攻科での2年間、苦楽を共にした同期の加藤氏と鈴木氏の存在は無くしてはならないものでした。過密な授業や課題、大学院入試への対策を共に乗り越え、プライベートでも親交を深める中で、互いに助け合い高め合うことのできる濃密な時間を過ごすことができました。両氏に対し、深い感謝と敬意の念を表します。

最後になりましたが、専攻科への進学と生活環境の変化を快く受け入れ、現在に至るまで私の学生生活を精神的・経済的に支え続けてくれた両親には、感謝の念に堪えません。温かい見

守りと支援があったからこそ、私は数多くの課題に挑戦し、本研究を完遂することができました。これまで本当にありがとうございました。

参考文献

- [1] D. D. Lee and H. S. Seung, “Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization,” *Nature*, vol. 401, no. 6755, pp. 788–791, 1999.
- [2] D. D. Lee and H. S. Seung, “Algorithms for non-negative matrix factorization,” in *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 556–562, 2000.
- [3] X. Fu, K. Huang, N. D. Sidiropoulos, and W.-K. Ma, “Nonnegative matrix factorization for signal and data analytics: Identifiability, algorithms, and applications,” *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 36, no. 2, pp. 59–80, 2019.
- [4] P. O. Hoyer, “Non-negative sparse coding,” in *Proc. IEEE Workshop on Neural Networks for Signal Processing*, pp. 557–565, 2002.
- [5] P. O. Hoyer, “Non-negative matrix factorization with sparseness constraints,” *J. Machine Learning Research*, vol. 5, pp. 1457–1469, 2004.
- [6] W. Liu, N. Zheng, and X. Lu, “Non-negative matrix factorization for visual coding,” in *Proc. IEEE International Conf. Acoustics, Speech, and Signal Processing*, pp. 293–296, 2003.
- [7] J. Eggert and E. Körner, “Sparse coding and NMF,” in *Proc. International Joint Conf. Neural Networks*, pp. 2529–2533, 2004.
- [8] J. L. Roux, F. J. Weninger, and J. R. Hershey, “Sparse NMF – half-baked or well done?,” *Mitsubishi Electric Research Laboratories, Technical Report TR2015-023*, 2015.
- [9] V. Leplat, N. Gillis, and J. Idier, “Multiplicative updates for NMF with β -divergences under disjoint equality constraints,” *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, vol. 42, no. 2, pp. 730–752, 2021.
- [10] A. Marmin, J. H. d. M. Goulart, and C. Févotte, “Majorization-minimization for sparse nonnegative matrix factorization with the β -divergence,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 71, pp. 1435–1447, 2023.
- [11] D. Kitamura, H. Saruwatari, H. Kameoka, Y. Takahashi, K. Kondo, and S. Nakamura, “Multichannel signal separation combining directional clustering and nonnegative matrix factorization with spectrogram restoration,” *IEEE/ACM Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, vol. 23, no. 4, pp. 654–669, 2015.

- [12] M. Udell, C. Horn, R. Zadeh, and S. Boyd, “Generalized low rank models,” *Foundations and Trends in Machine Learning*, vol. 9, no. 1, pp. 1–118, 2016.
- [13] E. J. Candes and B. Recht, “Exact matrix completion via convex optimization,” *Communications of the ACM*, vol. 55, no. 6, pp. 111–119, 2012.
- [14] A. Mnih and R. R. Salakhutdinov, “Probabilistic matrix factorization,” in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 1257–1264, 2007.
- [15] L. Ren, T. Wang, A. S. Seklouli, H. Zhang, and A. Bouras, “A review on missing values for main challenges and methods,” *Information Systems*, vol. 119, p. 102186, 2023.
- [16] D. L. Donoho, “Denoising by soft-thresholding,” *IEEE Transactions on Information Theory*, vol. 41, no. 3, pp. 613–627, 1995.
- [17] R. A. DeVore, “Nonlinear approximation,” *Acta Numerica*, vol. 7, pp. 51–150, 1998.
- [18] I. F. Gorodnitsky and B. D. Rao, “Sparse signal reconstruction from limited data using FOCUSS: A re-weighted minimum norm algorithm,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 45, no. 3, pp. 600–616, 1997.
- [19] B. A. Olshausen and D. J. Field, “Emergence of simple-cell receptive field properties by learning a sparse representation,” *Nature*, vol. 381, pp. 607–609, 1996.
- [20] A. Beck and Y. C. Eldar, “Sparsity constrained nonlinear optimization: Optimality conditions and algorithms,” *SIAM J. Optimization*, vol. 23, no. 3, pp. 1480–1509, 2013.
- [21] J.-P. Chancelier and M. D. Lara, “Hidden convexity in the l_0 pseudonorm,” *J. Convex Analysis*, vol. 28, no. 1, pp. 203–236, 2021.
- [22] B. K. Natarajan, “Sparse approximate solutions to linear systems,” *SIAM J. Computing*, vol. 24, no. 2, pp. 227–234, 1995.
- [23] S. S. Chen, D. L. Donoho, and M. A. Saunders, “Atomic decomposition by basis pursuit,” *SIAM Review*, vol. 43, no. 1, pp. 129–159, 2001.
- [24] S. Chen and D. Donoho, “Basis pursuit,” in *Proc. Asilomar Conf. Signals, Systems and Computers*, vol. 1, pp. 41–44, 1994.
- [25] R. Tibshirani, “Regression shrinkage and selection via the lasso,” *J. Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, vol. 58, no. 1, pp. 267–288, 1996.
- [26] L. C. Potter, E. Ertin, J. T. Parker, and M. Cetin, “Sparsity and compressed sensing in radar imaging,” *Proc. IEEE*, vol. 98, no. 6, pp. 1006–1020, 2010.
- [27] F. Marvasti, A. Amini, F. Haddadi, M. Soltanolkotabi, B. H. Khalaj, A. Aldroubi, S. Sanei, and J. Chambers, “A unified approach to sparse signal processing,” *EURASIP J. Advances in Signal Processing*, vol. 2012, no. 1, p. 44, 2012.
- [28] T. Kujiraoka, S. Fumiaki, and I. Syohei, “Extraction of customer satisfaction topics regarding product delivery using non-negative matrix factorization,” in *Proc. IEEE*

- International Conf. Industrial Engineering and Engineering Management*, pp. 225–229, 2017.
- [29] D. FitzGerald, M. Cranitch, and E. Coyle, “On the use of the beta divergence for musical source separation,” in *Proc. Irish Signals and Systems Conf.*, 2009.
- [30] D. R. Hunter and K. Lange, “Quantile regression via an MM algorithm,” *J. Computational and Graphical Statistics*, vol. 9, no. 1, pp. 60–77, 2000.
- [31] Y. Sun, P. Babu, and D. P. Palomar, “Majorization-minimization algorithms in signal processing, communications, and machine learning,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 65, no. 3, pp. 794–816, 2017.
- [32] D. Kitamura, H. Saruwatari, K. Yagi, K. Shikano, Y. Takahashi, and K. Kondo, “Music signal separation based on supervised nonnegative matrix factorization with orthogonality and maximum-divergence penalties,” *IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences*, vol. E97-A, no. 5, pp. 1113–1118, 2014.
- [33] Y. Iwase and D. Kitamura, “Supervised audio source separation based on nonnegative matrix factorization with cosine similarity penalty,” *IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences*, vol. E105-A, no. 6, pp. 906–913, 2022.
- [34] C. Févotte and J. Idier, “Algorithms for nonnegative matrix factorization with the β -divergence,” *Neural Computation*, vol. 23, no. 9, pp. 2421–2456, 2011.
- [35] L. Filstroff, O. Gouvert, C. Févotte, and O. Cappé, “A comparative study of Gamma Markov chains for temporal non-negative matrix factorization,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 69, pp. 1614–1626, 2021.
- [36] C. Févotte, n. Bertin, and J.-L. Durrieu, “Nonnegative matrix factorization with the Itakura-Saito divergence. With application to music analysis,” *Neural Computation*, vol. 21, no. 3, pp. 793–830, 2009.
- [37] S. Araki, F. Nesta, E. Vincent, Z. Koldovský, G. Nolte, A. Ziehe, and A. Benichoux, “The 2011 signal separation evaluation campaign (SiSEC2011) – audio source separation –,” in *Proc. Latent Variable Analysis and Signal Separation*, pp. 414–422, 2012.
- [38] H. Sawada, S. Araki, and S. Makino, “Underdetermined convolutive blind source separation via frequency bin-wise clustering and permutation alignment,” *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, vol. 19, no. 3, pp. 516–527, 2011.
- [39] Y. Luo and N. Mesgarani, “Conv-TasNet: Surpassing ideal time–frequency magnitude masking for speech separation,” *IEEE/ACM Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, vol. 27, no. 8, pp. 1256–1266, 2019.
- [40] S. Oyabu, D. Kitamura, and K. Yatabe, “Linear multichannel blind source separation

based on time-frequency mask obtained by harmonic/percussive sound separation,” in *Proc. IEEE International Conf. Acoustics, Speech, and Signal Processing*, pp. 201–205, 2021.

- [41] S. Takamichi, K. Mitsui, Y. Saito, T. Koriyama, N. Tanji, and H. Saruwatari, “JVS corpus: Free Japanese multi-speaker voice corpus,” *arXiv preprint, arXiv:1908.06248*, 2019.

発表文献一覧

国内学会

1. **和気佑弥**, 北村大地, “上界最小化アルゴリズムに基づくスパース NMF を用いた欠損値補完と音源分離への応用,” 第 27 回日本音響学会 関西支部 若手研究者交流研究発表会, p. 8, 大阪, 2024 年 12 月 (査読無) .
2. **和気佑弥**, 北村大地, 綾野翔馬, “ノルム制約・スパース正則化付き KL 基準 NMF の補助関数法に基づく最適化,” 日本音響学会 2025 年秋季研究発表会講演論文集, 1-R-8, pp. 259–262, 宮城, 2025 年 9 月 (査読無) .

受賞

1. 日本音響学会 第 31 回学生優秀発表賞

付録 A

補助関数法で利用される不等式

A.1 Jensen の不等式

補題 A.1. (Jensen の不等式)

$\alpha_i > 0$ を, $\sum_i \alpha_i = 1$ を満たす補助変数とする. 関数 $f(x)$ が凸関数であるとき, x_i ($i = 1, \dots, I$) に対して以下の不等式が成立する.

$$f\left(\sum_{i=1}^I \alpha_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^I \alpha_i f(x_i) \quad (\text{A.1})$$

$f(x)$ が狭義凸関数であるとき, 不等式中の等号が成立するための条件は $x_1 = \dots = x_i = \dots = x_I$ である.

A.2 接線不等式

補題 A.2. (接線不等式)

$f(x)$ が凹関数であるとき, 以下の不等式が成立する.

$$f(x) \leq f'(\bar{x})(x - \bar{x}) + f(\bar{x}) \quad (\text{A.2})$$

不等式中の等号が成立するための条件は $x = \bar{x}$ である.

付録 B

各ダイバージェンスにおける NMF の更新式

B.1 二乗ユークリッド距離に基づく NMF の更新式

二乗ユークリッド距離 \mathcal{D}_{Eu} を目的関数とする NMF を EuNMF と呼ぶ. EuNMF の目的関数 $\mathcal{D}_{\text{Eu}}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H})$ は $\sum_{i,j}(x_{ij}^2 - 2x_{ij}\sum_k w_{ik}h_{kj} + (\sum_k w_{ik}h_{kj})^2)$ と展開できる. 第 3 項の 2 次関数部分はそのままで停留点を求められないが, 凸関数であることに着目することで Jensen の不等式 (A.1) により以下の補助関数が得られる.

$$\left(\sum_k w_{ik}h_{kj}\right)^2 \leq \sum_k \frac{w_{ik}h_{kj}}{\delta_{ijk}}(w_{ik}h_{kj})^2, \quad \text{where } \delta_{ijk} = \frac{w_{ik}^{(t)}h_{kj}^{(t)}}{\sum_l w_{il}^{(t)}h_{lj}^{(t)}} \quad (\text{B.1})$$

この補助関数を w_{ik} 及び h_{kj} のそれぞれについて偏微分して 0 とおくことで, 以下の乗法更新式が得られる.

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\mathbf{X}\mathbf{H}^T}{\mathbf{W}\mathbf{H}\mathbf{H}^T} \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T\mathbf{X}}{\mathbf{W}^T\mathbf{W}\mathbf{H}} \quad (\text{B.3})$$

以上より, EuNMF の補助関数法に基づく反復更新式として式 (B.2) 及び式 (B.3) を得る.

B.2 板倉斎藤ダイバージェンスに基づく NMF の更新式

板倉斎藤 (Itakura-Saito: IS) ダイバージェンス \mathcal{D}_{IS} を目的関数とする NMF を ISNMF と呼ぶ. ISNMF の目的関数は定数項を除いて次式のように展開できる.

$$\mathcal{D}_{\text{IS}}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) \stackrel{c}{=} \sum_{i,j} \left(\frac{x_{ij}}{\sum_k w_{ik}h_{kj}} + \log \sum_k w_{ik}h_{kj} \right) \quad (\text{B.4})$$

第 1 項 (凸関数) に対しては Jensen の不等式 (A.1) を, 第 2 項 (凹関数) に対しては付録 (A.2) に示す接線不等式 (A.2) を適用することで補助関数を構成する. これを最小化すること

で，以下の更新式が得られる．

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \left[\frac{\frac{\mathbf{X}}{(\mathbf{W}\mathbf{H})^{.2}} \mathbf{H}^T}{\frac{\mathbf{1}^{(I \times J)}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.5})$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \left[\frac{\mathbf{W}^T \frac{\mathbf{X}}{(\mathbf{W}\mathbf{H})^{.2}}}{\mathbf{W}^T \frac{\mathbf{1}^{(I \times J)}}{\mathbf{W}\mathbf{H}}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.6})$$

ここで，行列のドット付き指数乗は要素毎の指数乗を表す．以上より，ISNMF の補助関数法に基づく反復更新式として式 (B.5) 及び式 (B.6) を得る．