Frobeniusノルム規準の非負値行列因子分解における乗法更新式に関する一考察

亀岡弘和, ルルージョナトン (NTTコミュニケーション科学基礎研究所)

NTT

1. 序論

◆非負値行列因子分解とは

- N 個の非負値の観測データ $\mathbf{y}_1, \cdots, \mathbf{y}_N \in \mathbb{R}^{\geq 0, M}$ が与えられたとき,

$$\mathbf{y}_n \simeq \sum_{k=1}^{K} u_{k,n} \mathbf{h}_k \quad (n = 1, \cdots, N)$$

となる非負値の基底ベクトル $\mathbf{h}_1, \cdots, \mathbf{h}_K \in \mathbb{R}^{\geq 0, M}$ と非負値の係数 $(u_{k,n})_{K \times N} \in \mathbb{R}^{\geq 0, K \times N}$ を決定することをいう

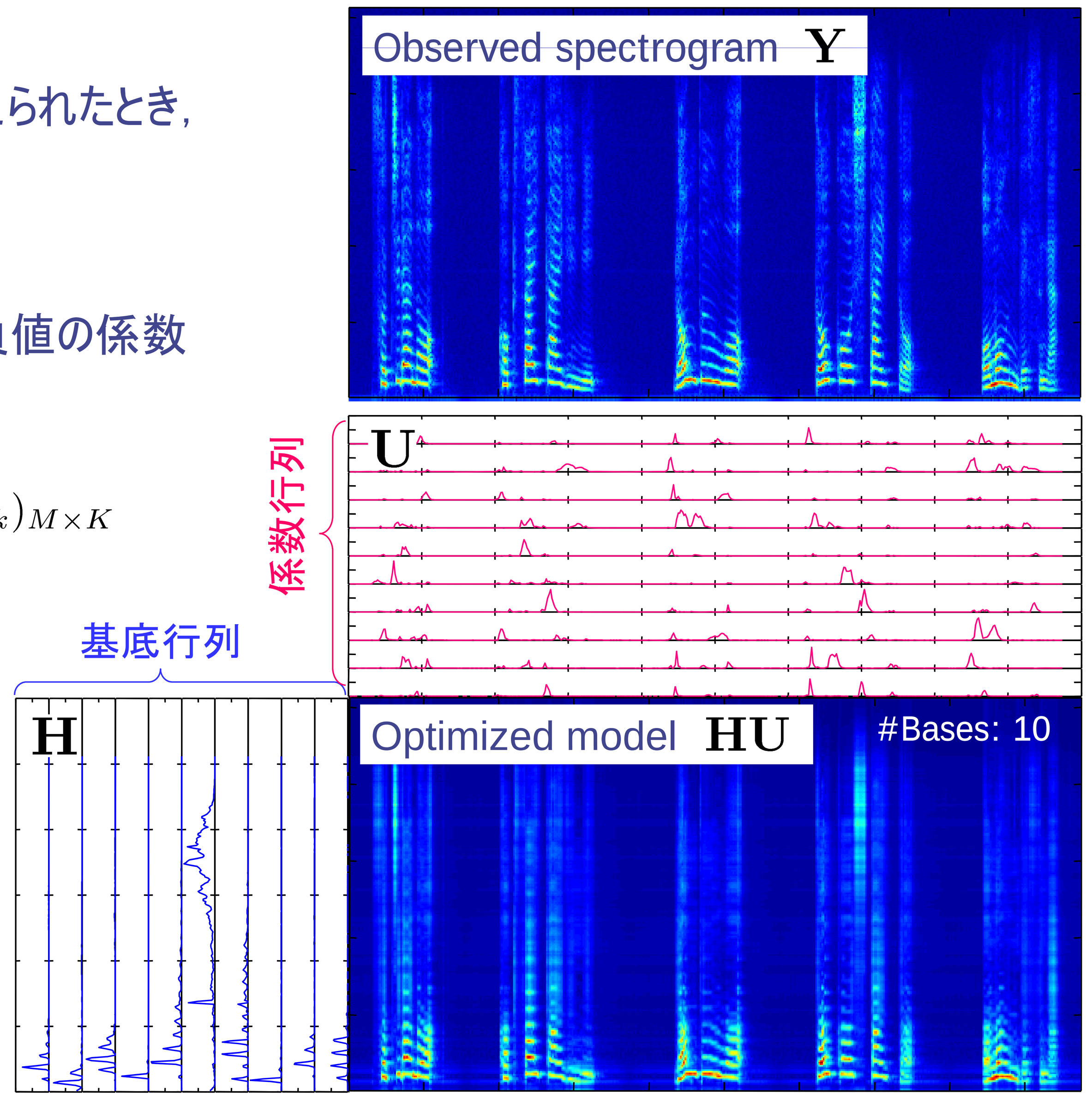
$$\Rightarrow \mathbf{Y} \simeq \mathbf{HU} \quad \begin{cases} \mathbf{Y} := (\mathbf{y}_1, \cdots, \mathbf{y}_N) \\ \mathbf{H} := (\mathbf{h}_1, \cdots, \mathbf{h}_K) = (h_{m,k})_{M \times K} \\ \mathbf{U} := (u_{k,n})_{K \times N} \end{cases}$$

【Frobeniusノルム規準の最適化問題】

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad f(\mathbf{H}, \mathbf{U}) := \|\mathbf{Y} - \mathbf{HU}\|_F^2 \\ &\text{subject to} \quad \mathbf{H} \in \mathbb{R}^{\geq 0, M \times K}, \ \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{\geq 0, K \times N} \end{aligned}$$

【Lee-Seungアルゴリズム(乗法更新法)】[1]

$$h_{m,k} \leftarrow h_{m,k} \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}]_{m,k}}{[\mathbf{H}\mathbf{U}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}]_{m,k}} \qquad u_{k,n} \leftarrow u_{k,n} \frac{[\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y}]_{k,n}}{[\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\mathbf{U}]_{k,n}}$$



◆本研究の目的

1. Lee-Seung (LS) アルゴリズムがなぜ効果的であるかについて, アルゴリズムの一般化を通して一考察を与える
2. より効率的なアルゴリズムについての可能性について議論する
3. 複素NMF[2]アルゴリズムの効率化に向けての可能性について言及する

補助関数法の原理

【補助関数の定義】

目的関数 $G(z)$ に対し,

$$G(z) = \min_{\bar{z}} G^+(z, \bar{z})$$

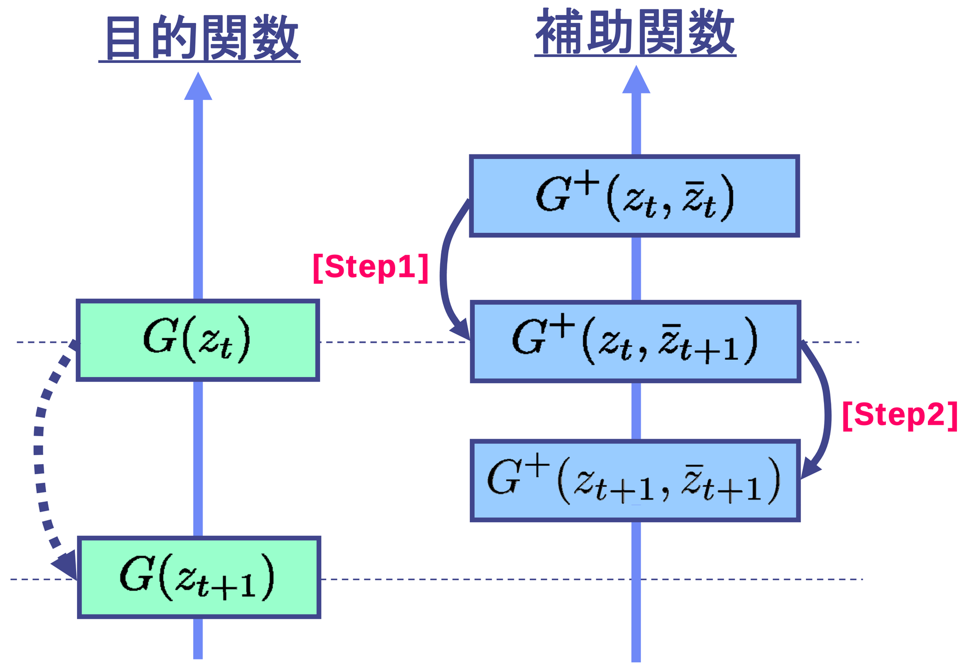
が成り立つとき, $G^+(z, \bar{z})$ を $G(z)$ の**補助関数**, $\bar{z}$ を**補助変数**と定義する

【補助関数法】

[Step1] $\bar{z} \leftarrow \underset{\bar{z}}{\operatorname{argmin}}\, G^+(z, \bar{z})$

[Step2] $z \leftarrow \underset{z}{\operatorname{argmin}}\, G^+(z, \bar{z})$

を繰り返すと, $G(z)$ は単調収束する



4. LSアルゴリズムの正当性

[Step3] $\beta_m^{(k)} \leftarrow \dfrac{h_{m,k} u_k}{[\mathbf{Hu}]_m}$ とすることの合理性について考察する

一般化LSアルゴリズムのStep2において目的関数 $g(\mathbf{u})$ の降下量が最大となる β は?

$\mathcal{G}^+(\mathbf{u}, \alpha)$ の $\mathbf{u}$ に関する最小値は $\beta_m^{(k)}$ の関数:

$$\mathcal{F}(\beta) := \sum_k \left\{ \sum_m \frac{{\alpha_m^{(k)}}^2 {y_m}^2}{\beta_m^{(k)}} - \left(\sum_m \frac{\alpha_m^{(k)} y_m h_{m,k}}{\beta_m^{(k)}} \right)^2 \Bigg/ \left(\sum_m \frac{{h_{m,k}}^2}{\beta_m^{(k)}} \right) \right\}$$

よって最適な $\beta_m^{(k)}$ を決定する問題は以下に帰着:

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad \mathcal{F}(\beta) \\ &\text{subject to} \quad \sum_k \beta_m^{(k)} = 1 \quad \text{for all } m \end{aligned}$$

⇒ 解析的に解けない (>_<)

$\beta_m^{(k)} = \dfrac{h_{m,k} u_k}{[\mathbf{Hu}]_m}$ は, $\mathcal{F}_0(\beta) := \displaystyle\sum_k \left\{ \sum_m \frac{{\alpha_m^{(k)}}^2 {y_m}^2}{\beta_m^{(k)}} \right\}$ を最小化する解となっている!

Proof

ラグランジュ関数を

$$\mathcal{L}(\beta, \lambda) := \sum_k \sum_m \frac{{\alpha_m^{(k)}}^2 {y_m}^2}{\beta_m^{(k)}} + \sum_m \lambda_m \left(\sum_k \beta_m^{(k)} - 1 \right)$$

と定義して(偏微分)=0を解くことにより確認できる

⇓ LSアルゴリズムの効率性に対する正当性を与える

2. LSアルゴリズム[1]

反復座標降下法: $\mathbf{H} \leftarrow \underset{\mathbf{H}}{\operatorname{argmin}}\, f(\mathbf{H}, \mathbf{U}) \rightleftarrows \mathbf{U} \leftarrow \underset{\mathbf{U}}{\operatorname{argmin}}\, f(\mathbf{H}, \mathbf{U})$

$\mathbf{y}_n := (y_{1,n}, \cdots, y_{M,n})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{\geq 0, M}$ と $\mathbf{H}$ が与えられたとき,
$g(\mathbf{u}_n) := \|\mathbf{y}_n - \mathbf{H}\mathbf{u}_n\|_2^2$ を最小化する部分最適化問題

◆非負値制約がなければ

$\mathbf{u}_n = (\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_n$ ($M \geq K$の場合)が解析解

各ベクトル要素が非負性を満たすかは定かではない

◆ベクトル要素ごとに非負性をチェックしやすいように**要素間の依存関係のない補助関数**を設計することが基本アイディア

$$g^+(\mathbf{u}_n, \mathbf{u}'_n) := g(\mathbf{u}'_n) + (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}'_n)^{\mathrm{T}} \nabla g(\mathbf{u}'_n) + \frac{1}{2} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}'_n)^{\mathrm{T}} \mathbf{W} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}'_n)$$

要素ごとの二次関数の和

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{W} &= \operatorname{diag}(w_1, \cdots, w_K) \\ w_k &= 2[\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\boldsymbol{u}'_n]_k / u'_{k,n} \end{aligned} \right\}$$ のとき $g(\mathbf{u}_n) \leq g^+(\mathbf{u}_n, \mathbf{u}'_n)$ (等号成立は $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}'_n$)

$g^+(\mathbf{u}_n, \mathbf{u}'_n)$ は要素ごとの二次関数の和になっているため非負値制約のもとでの最適な更新則は容易に導かれる

[Step1] $\mathbf{u}'_n \leftarrow \mathbf{u}_n$

[Step2] $\mathbf{u}_n \leftarrow \max\{\mathbf{u}'_n - \mathbf{W}^{-1}\nabla g(\mathbf{u}'_n), 0\}$

$$\Rightarrow u_{k,n} \leftarrow u_{k,n} \frac{[\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_n]_k}{[\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\mathbf{u}_n]_k}$$

3. 一般化LSアルゴリズム

実はこのような補助関数は無数に作ることができる(以降 n は省略):

$\displaystyle\sum_k \alpha_m^{(k)} = 1, \ \sum_k \beta_m^{(k)} = 1, \ \beta_m^{(k)} > 0$ のとき,

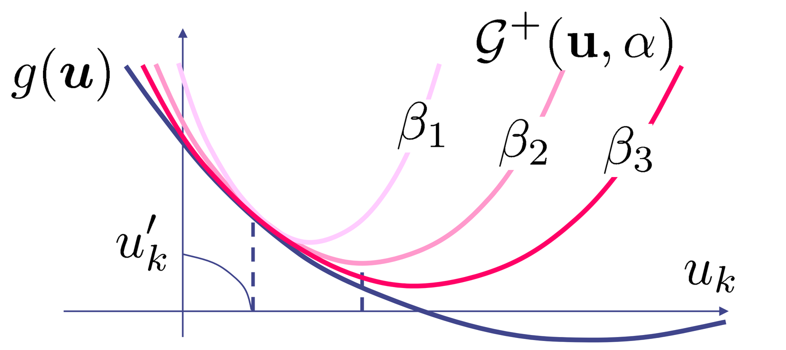
$$g(\mathbf{u}) \leq \sum_{m,k} \frac{1}{\beta_m^{(k)}} \left(\alpha_m^{(k)} y_m - h_{m,k} u_k \right)^2$$ が成り立つ

等号成立は $\alpha_m^{(k)} = \dfrac{1}{y_m} \left[h_{m,k} u_k + \beta_m^{(k)} (y_m - [\mathbf{Hu}]_m) \right]$

$$\Rightarrow \mathcal{G}^+(\mathbf{u}, \alpha) := \sum_{m,k} \frac{1}{\beta_m^{(k)}} \left(\alpha_m^{(k)} y_m - h_{m,k} u_k \right)^2$$

要素ごとの二次関数の和

は $g(\mathbf{u})$ の補助関数としての定義を満たす
(補助変数は $\alpha := \{\alpha_m^{(k)}\}$)



βの選び方によって目的関数の降下量が決まる

[Step1] $\alpha_m^{(k)} \leftarrow \dfrac{1}{y_m} \left[h_{m,k} u_k + \beta_m^{(k)} (y_m - [\mathbf{Hu}]_m) \right]$

[Step2] $u_k \leftarrow \dfrac{\sum_m \alpha_m^{(k)} y_m h_{m,k} / \beta_m^{(k)}}{\sum_m h_{m,k}^2 / \beta_m^{(k)}}$

LSアルゴリズムは, 一般化LSアルゴリズムにおいてβ を

[Step3] $\beta_m^{(k)} \leftarrow \dfrac{h_{m,k} u_k}{[\mathbf{Hu}]_m}$

と更新した場合の特殊形であることが示される

5. 改良LSアルゴリズムの可能性

[Step2]+[Step3]: $\mathcal{G}^+(\mathbf{u}, \alpha)$ を $\mathbf{u}$ と β について反復的に降下する反復計算に置き換え

(初期設定)

$$\beta_m^{(k)} \leftarrow \frac{h_{m,k} u_k}{[\mathbf{Hu}]_m} \Rightarrow u_{k,n} \leftarrow \frac{\sum_m \alpha_m^{(k)} y_m h_{m,k} / \beta_m^{(k)}}{\sum_m h_{m,k}^2 / \beta_m^{(k)}} \rightleftarrows \beta_{m,n}^{(k)} \leftarrow \frac{|\alpha_{m,n}^{(k)} y_{m,n} - h_{m,k} u_{k,n}|}{\sum_k |\alpha_{m,n}^{(k)} y_{m,n} - h_{m,k} u_{k,n}|}$$

6. 複素NMFアルゴリズム[2]の効率化

◆複素NMFとは, 観測信号の時間周波数成分 $Y := (Y_{\omega,t})_{\Omega \times T} \in \mathbb{C}^{\Omega \times T}$ に対し,

$$F_{\omega,t} = \sum_k H_\omega^{(k)} U_t^{(k)} e^{\mathrm{j}\phi_{\omega,t}^{(k)}}$$

の形で与えられる音響信号モデルを U がスパースになるように最適フィッティングするものである

【目的関数】

$$f(H, U, \phi) := \sum_{\omega,t} \left| Y_{\omega,t} - F_{\omega,t} \right|^2 + 2\lambda \sum_{k,t} |U_t^{(k)}|^p$$

【補助関数】

$$f^+(H, U, \phi, \alpha, V) := \sum_{\omega,t} \sum_k \frac{1}{\beta_{\omega,t}^{(k)}} \left| \alpha_{\omega,t}^{(k)} Y_{\omega,t} - H_\omega^{(k)} U_t^{(k)} e^{\mathrm{j}\phi_{\omega,t}^{(k)}} \right|^2 + \lambda \sum_{k,t} \left\{ p|V_t^{(k)}|^{p-2} {U_t^{(k)}}^2 + (2-p)|V_t^{(k)}|^p \right\}$$

4.の考え方に従えば, 複素NMFにおける「最適」な β の更新則は:

$$\beta_{\omega,t}^{(k)} \leftarrow \frac{|\alpha_{\omega,t}^{(k)}|}{\sum_k |\alpha_{\omega,t}^{(k)}|}$$

参考文献

[1] D.D. Lee and H.S. Seung, ``Algorithms for non-negative matrix factorization,'' in Advances in Neural Information Processing Systems 13 (Proc. NIPS*2000), pp. 556-562, 2000.

[2] H. Kameoka, N. Ono, K. Kashino, S. Sagayama, "Complex NMF: A New Sparse Representation for Acoustic Signals," In Proc. 2009 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP2009), pp. 3437-3440, 2009.