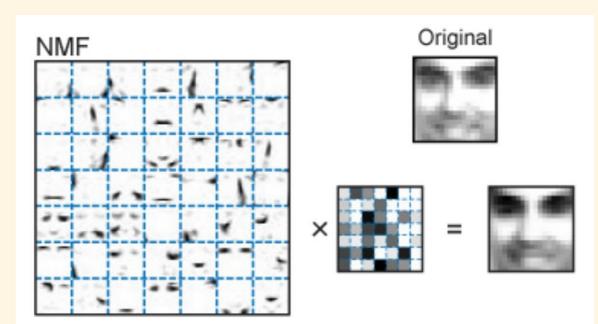
# 

Non Negative Matrix Factorization 非負値行列因子分解

#### NMFの背景

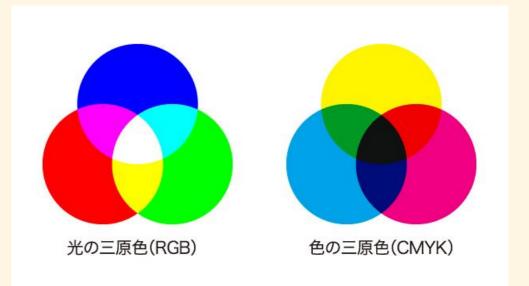
- 画像処理や音声処理分野で活用
- →画素値、スペクトル、頻度(単語の頻度)、個数(語彙数)etc
- →実世界データは非負値であることが多い



#### 観測データの性質

- 観測データの非負性→RGB、単語頻度、音の周波数は全て非負
- ・基本となる特徴の非負性→波長が負の値である光は観測不可
- ・重ね合わせにおける非負性→観測データは特徴の重ね合わせで表現

eg)人間が知覚可能な色は光の三原色の重ね合わせによって表現される



### NMFの仮定

仮定:観測情報yは基底hの重みu付き和で表現可能(加法性)

→NMFの目的は基底Hと重みUを求めること

仮定: 基底Hおよび重みUは非負

eg) 任意の色=赤\*A+青\*B+緑\*C(A,B,Cは重み)

※画素や周波数等は近似的に加法性が成立としてNMFを適用している

N個の観測ベクトル

 $oldsymbol{y}_1,oldsymbol{y}_2,\cdots,oldsymbol{y}_N$ 

基底がM個あると仮定し、基底ベクトル $h_m$ 、結合係数 $u_{m,n}$ で表すと、

$$oldsymbol{y}_n \simeq \sum_{m=1}^M oldsymbol{h}_m u_{m,n} (n=1,\cdots,N)$$

#### NMFの行列表現

観測ベクトルを並べたデータ行列を

$$oldsymbol{Y} = [oldsymbol{y}_1, oldsymbol{y}_2, \cdots, oldsymbol{y}_N] = (y_{k,n})_{K imes N}$$

基底ベクトルを並べて基底行列を

$$oldsymbol{H} = [oldsymbol{h}_1, oldsymbol{h}_2, \cdots, oldsymbol{h}_M] = (h_{k,m})_{K imes M}$$

結合係数を並べて係数行列を

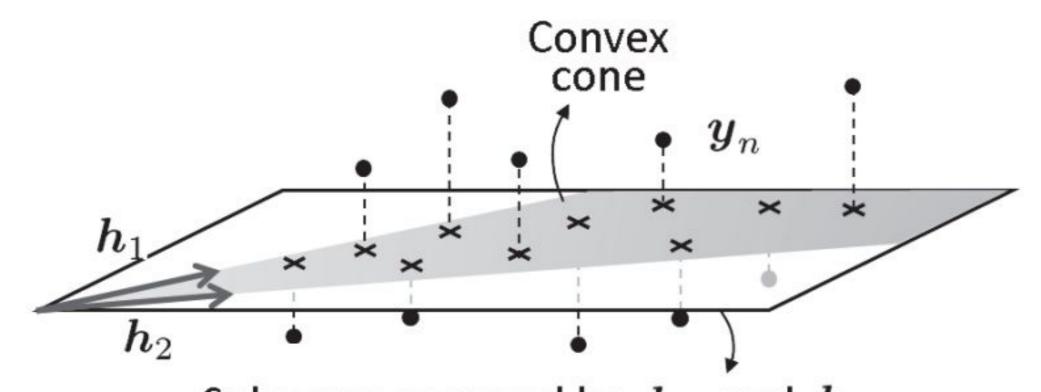
$$oldsymbol{U} = (u_{m,n})_{M imes N}$$

→観測データ行列は基底行列と結合係数行列の積で表現可能

#### $m{Y} \simeq m{H}m{U}$

$$(2 \times 3$$
行列 $) \times (3 \times 1$ 行列 $) = (2 \times 1$ 行列 $)$  一般に  $\begin{pmatrix} a1 & a2 & a3 \\ b1 & b2 & b3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a1 \cdot c & a2 \cdot d & a3 \cdot e \\ b1 \cdot c & b2 \cdot d & b3 \cdot e \end{pmatrix}$   $\begin{pmatrix} (A \times B)$ 行列 $\times (B \times C)$ 行列 $= (A \times C)$ 行列

### NMFの原理図



Subspace spanned by  $m{h}_1$  and  $m{h}_2$ 

図2 非負値基底の非負結合

任意の観測データが基底ベクトルh1、h2から構成される凸錐上に射影 →次元を落とした近似として解釈可能

$$y_n \simeq u_1 \boldsymbol{h}_1 + u_2 \boldsymbol{h}_2$$

### 閑話:凸錐

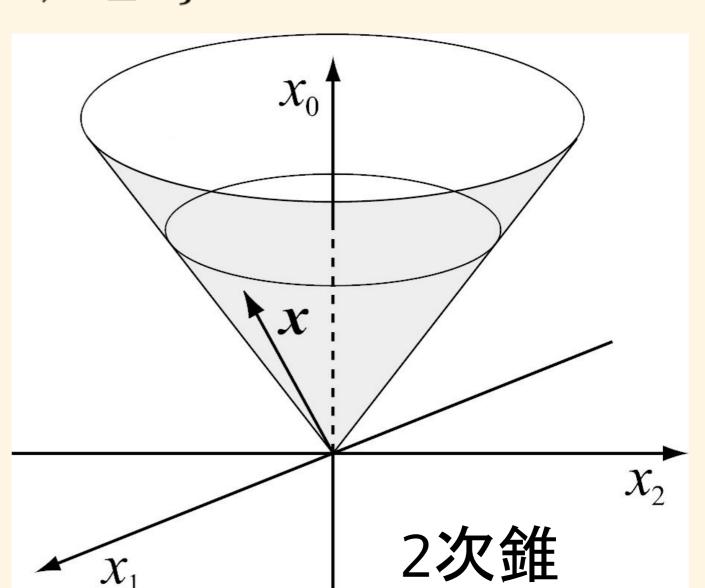
錐 (cone) とは次のような集合を指す

$$oldsymbol{x} \in C, \quad lpha \in [0,\infty) 
ightarrow lpha oldsymbol{x} \in C$$

錐が凸集合であるならば、それは凸錐である。

$$(eg)C = \{oldsymbol{x} \in oldsymbol{R}^n | oldsymbol{x} = \sum_{i=1}^m lpha_i oldsymbol{lpha}^i, lpha \geq 0\}$$

直交ベクトルによって形成される錐状 の領域の例



### NMFの性質

#### 性質

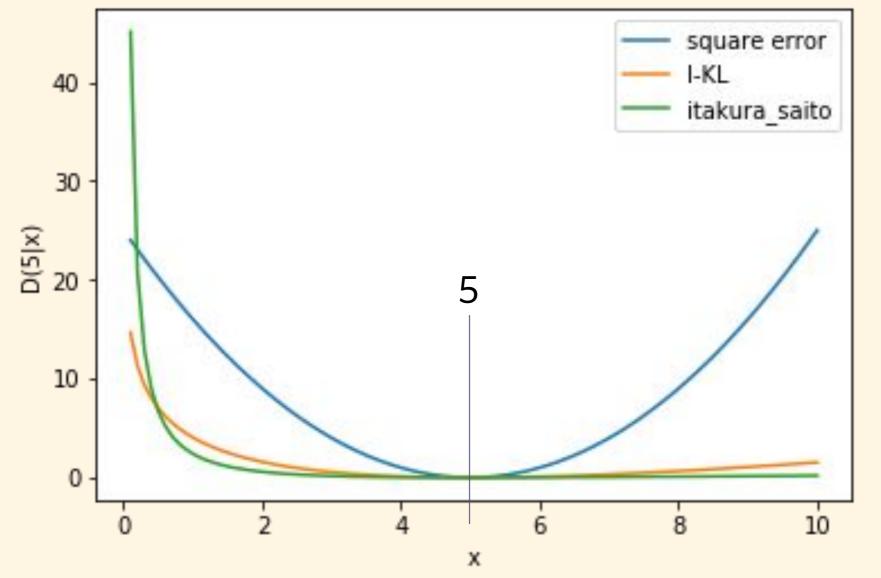
- 低次元近似
- →基底ベクトルの次元Mは観測ベクトルの次元Kやデータ数Nに対して
  - 一般に小さく設定(M=Kの時H=E単位行列、M=Nの時U=E)

- ・観測データの共起成分をグルーピングする傾向(ここ謎)
- →共起する成分をひとまとめにして基底と捉えるっぽい
- 係数行列のスパース性
- →あるベクトルの近似に有効でない基底の影響を除外したい
- →有効でない基底の係数はO

#### - 分解の一意性

- →一般的にH、Uは一意に定まらない(HSS^(-1)Uも解になりえる)
- →最適化の際、次のような対策を取る
- •スパースネス(行列の全要素に対する零要素の割合)の条件を付ける
- 初期値をランダムに設定し、複数回アルゴリズム回す

- 基底行列Hと係数行列Uを求める際の方針
- →データ行列Yと行列積HUの乖離度を最小化する最適化問題
- →乖離度:二乗誤差、一般化KLダイバージェンス、板倉斎藤距離



二乗誤差

$$D(y|x) = (y-x)^2$$

一般化KLダイバージェンス

$$D(y|x) = y \ln(rac{y}{x}) - (y-x)$$

板倉 - 斎藤距離

$$D(y|x) = \frac{y}{x} - \ln(\frac{y}{x}) - 1$$

- 基底行列Hと係数行列Uを求める際の方針
- →データ行列Yと行列積HUの乖離度を最小化する最適化問題
- →乖離度:二乗誤差、一般化KLダイバージェンス、板倉斎藤距離
- →行列の要素計算:フロベニウスノルム

$$||A||_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{i,j}^2}$$

→フロベニウスノルムを使い、データ行列と行列積の差分を乖離度と仮定

$$egin{align} D(oldsymbol{Y}|oldsymbol{H}oldsymbol{U}) &= \left| \left| Y - oldsymbol{H}oldsymbol{U} 
ight|_F^2 \ &= \sum_{k,n} \left| \left| y_{k,n} - \sum_m h_{k,m} u_{m,n} 
ight|^2 \ &= \sum_{k,n} \left( \left| y_{k,n} 
ight|^2 - 2 y_{k,n} \sum_m h_{k,m} u_{m,n} - \left| \sum_m h_{k,m} u_{m,n} 
ight|^2 
ight). \end{split}$$

# 閑話:イエンセンの不等式

$$egin{align} D(oldsymbol{Y}|oldsymbol{H}oldsymbol{U}) &= \left| \left| Y - oldsymbol{H}oldsymbol{U} 
ight|_F^2 \ &= \sum_{k,n} \left| \left| y_{k,n} - \sum_m h_{k,m} u_{m,n} 
ight|^2 \ &= \sum_{k,n} \left( \left| y_{k,n} 
ight|^2 - 2 y_{k,n} \sum_m h_{k,m} u_{m,n} - \left| \sum_m h_{k,m} u_{m,n} 
ight|^2 
ight). \end{split}$$

和の絶対値を取り扱うことは難しい→イェンセンの不等式

$$f(\cdot)$$
が凸関数の時、 $\left\{egin{array}{ll} \sum_{i=1}^n \lambda_i f(x_i) \geq f(\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i) 
ight. & \left\{ \lambda_i \geq 0 
ight. 
ight. 
ight. 
ight. 
ight.$ 

#### 凸関数の性質

性質1:任意の $x1, x2, \lambda(0 \le \lambda \le 1)$ に対して、 $\lambda f(x1) + (1 - \lambda)f(x2) \ge f(\lambda x1(1 - \lambda)x2)$ を満たす。

性質2:任意のx1,x2に対して、2点(x1,f(x1)),(x2,f(x2))を結ぶ線分が関数の上側にある。

性質 $\mathbf{3}$ : 二階微分f''(x)が存在して $\mathbf{0}$ 以上である

$$igg|\sum_m h_{k,m} u_{m,n}igg|^2 \leq \sum_i rac{h_{k,m}^2 u_{m,n}^2}{\lambda_{k,m,n}}$$

$$egin{aligned} D(m{Y}|m{H}m{U}) &= ||m{Y}-m{H}m{U}||_F^2 \ &= \sum_{k,n} \left||y_{k,n} - \sum_m h_{k,m} u_{m,n}||^2 \ &= \sum_{k,n} \left(||y_{k,n}||^2 - 2y_{k,n} \sum_m h_{k,m} u_{m,n} + ||\sum_m h_{k,m} u_{m,n}||^2
ight) \ &\leq \sum_{k,n} \left(||y_{k,n}||^2 - 2y_{k,n} \sum_m h_{k,m} u_{m,n} + \sum_m rac{h_{k,m}^2 u_{m,n}^2}{\lambda_{k,m,n}}
ight) \end{aligned}$$

変形手順 
$$\left(\sum_i x_i\right)^2 = \left(\sum_i \lambda_i \frac{x_i}{\lambda_i}\right)^2 \leq \sum_i \lambda_i \left(\frac{x_i}{\lambda_i}\right)^2 = \sum_i \frac{x_i^2}{\lambda_i}$$

## 閑話:補助関数法

- 目的関数の上界を定める関数Gが求まった
- →上界を定める関数Gを反復的に降下させることで解を求める
- → 反復降下の補助を行う関数(補助関数)として上界を定める関数Gを使う
- →補助関数の反復降下による目的関数の降下方法を補助関数法

HとUの行列要素 hk,1,...,hk,M, u1,n,...,uM,n を含んだ非線形関数項であることに気付く.この項に対し、行列要素 hk,m, um,n ごとの関数の和に分離した形をした上限関数を設けたい. 2 次関数は凸関数であるため,

$$D(oldsymbol{Y}|oldsymbol{H}oldsymbol{U}) \leq \sum_{k,n} \left( \left|\left|y_{k,n}
ight|
ight|^2 - 2y_{k,n} \sum_m h_{k,m} u_{m,n} + \sum_m rac{h_{k,m}^2 u_{m,n}^2}{\lambda_{k,m,n}} 
ight)$$

- $\rightarrow$ 補助変数  $\lambda_{k,m,n}$ イェンセンの不等式における係数)
- →係数の条件より

$$\lambda_{k,m,n} = rac{h_{k,m} u_{m,n}}{\sum_{l} h_{k,l} u_{l,n}}$$

→補助関数CをH、Uに関して偏微分を行い停留点を探す

$$egin{split} rac{\partial G}{\partial h_{k,m}} &= -2y_{k,n} \sum_m u_{m,n} + \sum_m 2rac{h_{km}u_{m,n}^2}{\lambda_{k,m,n}} = 0 \ rac{\partial G}{\partial u_{m,n}} &= -2y_{k,n} \sum_m h_{k.m} + \sum_m 2rac{h_{k,m}^2 u_{m,n}}{\lambda_{k.m.n}} = 0 \end{split}$$

$$egin{split} rac{\partial G}{\partial h_{k,m}} &= -2y_{k,n} \sum_m u_{m,n} + \sum_m 2rac{h_{km}u_{m,n}^2}{\lambda_{k,m,n}} = 0 \ rac{\partial G}{\partial u_{m,n}} &= -2y_{k,n} \sum_m h_{k.m} + \sum_m 2rac{h_{k,m}^2 u_{m,n}}{\lambda_{k.m.n}} = 0 \end{split}$$

# 整理途中

#### 参考文献

- ・非負値行列因子分解/亀岡弘和/計測と制御第 51巻第9号 2012年9月号
- ・チュートリアル: 非負値行列因子分解/亀岡弘和
- 非負値行列因子分解/亀岡弘和/ http://www.kecl.ntt.co.jp/people/kameoka.hirokazu/publications/Kameoka2012SIC E09published.pdf
- •NMFアルゴリズムの導出/https://r9y9.github.io/blog/2013/07/27/nmf-euclid/
- NMFでMovieLensレコメンド/https://ohke.hateblo.jp/entry/2017/12/26/230000
- 非負値行列因子分解を改めてやり直してみた/ https://qiita.com/sumita\_v09/items/d22850f41257d07c45ea

#### **SANOGRAPHIX.NET**

OLLOW:





About Blog 既刊一覧 Tumblrテーマ お知らせ 写真 Contact

【NEW】C89新刊、委託販売中です

#### **ABOUT SANOGRAPHIX.NET**

-

SANOGRAPHIX.NETは、佐野章核の制作物をただ並べただけの個人サイトです。

#### PROFILE (->EN)

\_

#### 佐野章核 Showkaku Sano

グラフィックデザイナー。

2007年頃、他人の同人誌の装丁を請け負う活動を開始。その後、同人サークル「jadda」および「konel」を立ち上げ、情報誌を不定期に発行しています。また、2012年あたりからTumblrテーマ制作を趣味としており、イラストポートフォリオ用の

「Illustfolio」、日記書きたい人用の「ZEN」「Apollo」などのTumblrテーマを今までに制作しました。休日は寺社仏閣巡りをしています。写真このへんで見れます。

http://www.sanographix.net/