

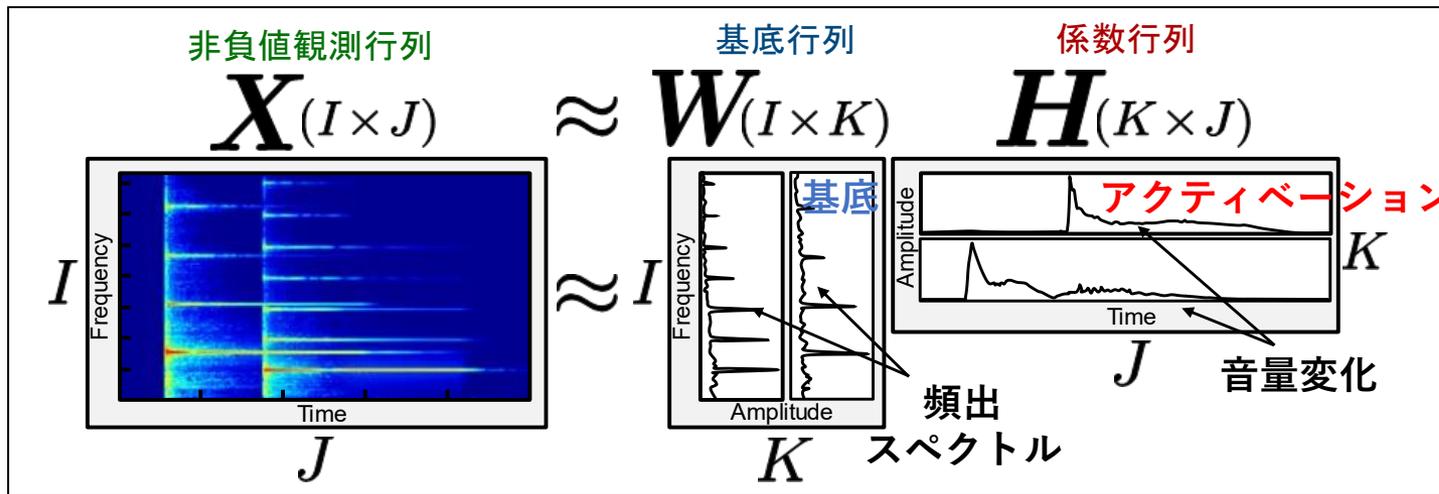
# ディリクレ分布に基づく正則化付き 非負値行列因子分解と 打楽器スペクトル表現への適用

---

7番 小川遼(北村研究室)

# 研究背景 (1/2)

- 非負値行列因子分解 (nonnegative matrix factorization: NMF)
  - 観測した非負行列  $X$  を非負行列  $W, H$  で低ランク近似
  - 音響信号の適用例



- 顧客の購買データの適用例

	$X$						$W$			$H$				
	顧客A	顧客B	顧客C	顧客D	顧客E		商品の 特徴パターン			特徴に応じた 購買パターン				
商品X	1	2	0	0	1	$\approx$	0.5	0		2	5	0	0	2
商品Y	1	3	1	2	2	$\approx$	0.6	0.3		0	0	4	7	4
商品Z	0	0	3	5	3		0	0.7						



# 非負値行列因子分解 (1/2)

- 非負値行列因子分解 (nonnegative matrix factorization: NMF)
  - 非負行列を非負低ランク行列で近似する手法
  - 次元を削減し特徴を抽出することが可能

非負値観測行列		基底行列		係数行列		近似行列
$\mathbf{X}^{(I \times J)}$	$\approx$	$\mathbf{W}^{(I \times K)}$	$\mathbf{H}^{(K \times J)}$	$=$	$\widehat{\mathbf{X}}^{(I \times J)}$	
$I \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 5 & 3 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ J \end{matrix}$	$\approx$	$I \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ K \end{matrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ K \\ J \end{matrix}$	$=$	$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 6 & 3 \end{bmatrix}$	
		<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="border: 1px solid blue; border-radius: 50%; padding: 2px;">1</div> <div style="border: 1px solid blue; border-radius: 50%; padding: 2px;">0</div> <span style="margin-left: 5px;">基底</span> </div>	<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="border: 1px solid red; border-radius: 50%; padding: 2px;">1</div> <div style="border: 1px solid red; border-radius: 50%; padding: 2px;">2</div> <div style="border: 1px solid red; border-radius: 50%; padding: 2px;">0</div> <div style="border: 1px solid red; border-radius: 50%; padding: 2px;">0</div> <div style="border: 1px solid red; border-radius: 50%; padding: 2px;">1</div> <span style="margin-left: 5px;">アクティベーション</span> </div>			

- 実際は  $\mathbf{X}$  と  $\widehat{\mathbf{X}}$  の誤差を最小化する最適化問題である

$\left\  \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 5 & 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \right\ $	$=$	$\left\  \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 & 9 \\ 16 & 4 & 25 & 1 & 9 \\ 16 & 4 & 9 & 25 & 1 \end{bmatrix} \right\ ^2$
<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> <p style="color: purple;">更新</p> </div> </div>		
乱数による初期化		コスト関数値

# 非負値行列因子分解 (2/2)

- 一般化Kullback-Leibler (KL) 擬距離に基づくNMF
  - $X$ と $WH$ の距離をコストとし変数について最小化

Minimize  $\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH})$  s.t.  $w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k$   
 $\mathbf{W}, \mathbf{H}$

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) = \sum_{i,j} \left[ x_{i,j} \log \frac{x_{i,j}}{\sum_k w_{i,k} h_{k,j}} - \left( x_{i,j} - \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right) \right]$$

- 反復更新による最適化アルゴリズム
  - 補助関数法に基づく乗算型更新式

$$w_{i,k} \leftarrow w_{i,k} \frac{\sum_j \frac{x_{i,j} h_{k,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}}}{\sum_j h_{k,j}}, \quad h_{k,j} \leftarrow h_{k,j} \frac{\sum_i \frac{w_{i,k} x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}}}{\sum_i w_{i,k}}$$

# データの構造 (1/2)

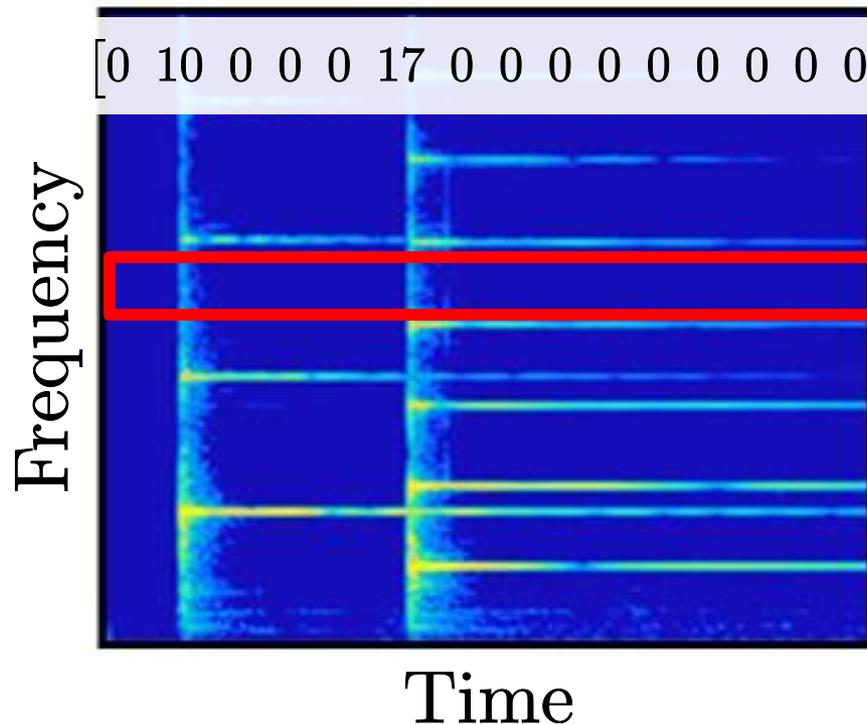
## • スパース性

- 多くの要素がゼロ値である状態
- 下記図は様々な方向にスパースな構造を持っている

0	0	7	0
1	0	0	0
0	9	0	3
0	0	0	0

スパース

例: 音の時間周波数構造



時間方向に沿ってスパース

# データの構造 (1/2)

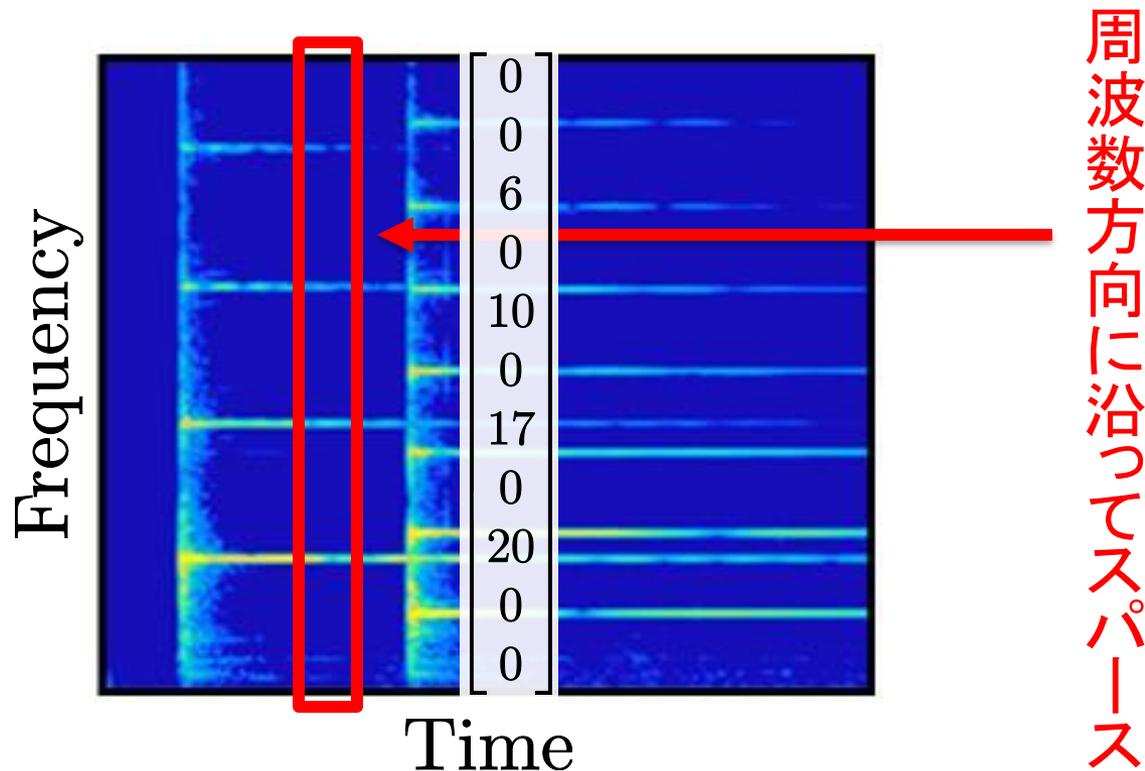
- **スパース性**

- 多くの要素がゼロ値である状態
- 下記図は様々な方向にスパースな構造を持っている

0	0	7	0
1	0	0	0
0	9	0	3
0	0	0	0

スパース

例: 音の時間周波数構造



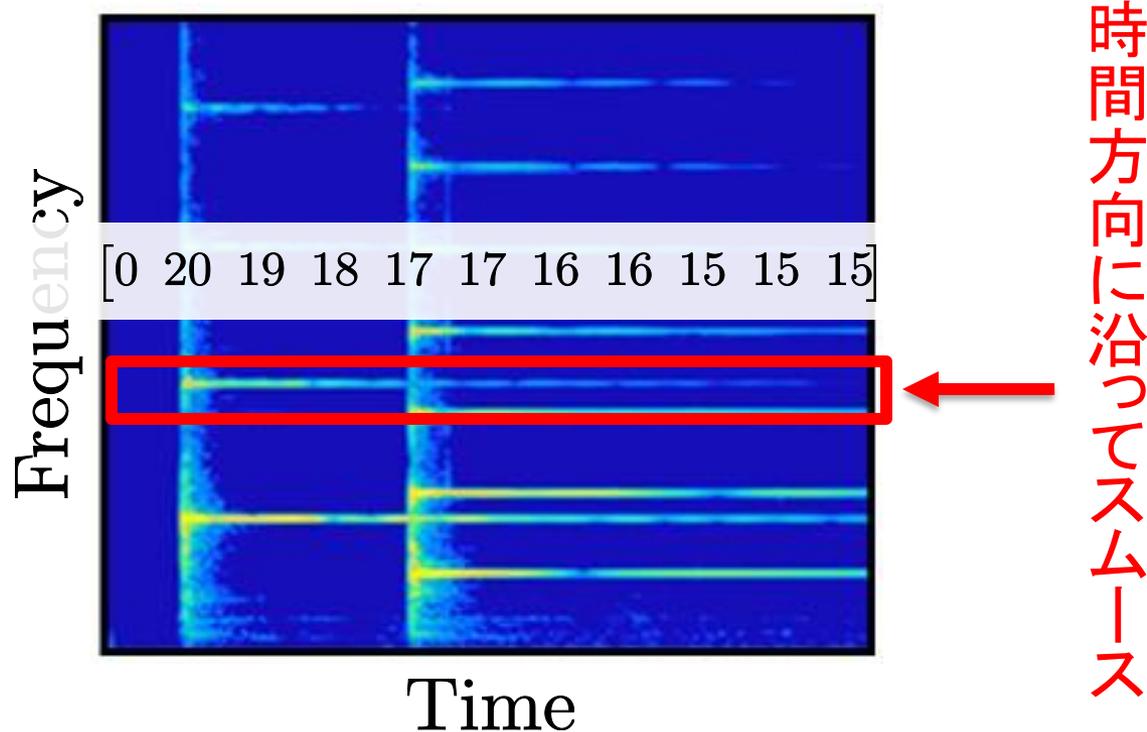
# データの構造 (2/2)

## • スムース性

- 要素が滑らかで急激な変化が少ない状態
- 下記図は様々な方向にスムーズな構造を持っている

例: 音の時間周波数構造

2	10	7	4	スムーズ
1	11	6	4	
2	11	7	3	
2	10	7	4	



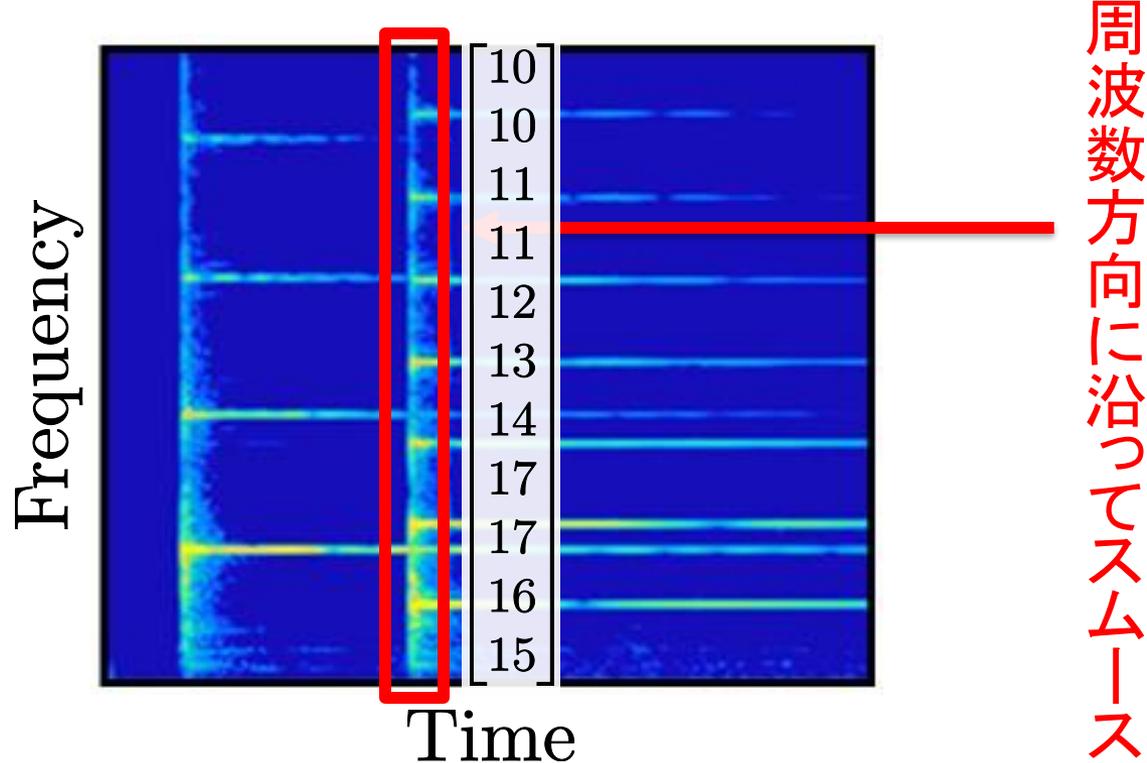
# データの構造 (2/2)

- スムース性

- 要素が滑らかで急激な変化が少ない状態
- 下記図は様々な方向にスムーズな構造を持っている

2	10	7	4	スムーズ
1	11	6	4	
2	11	7	3	
2	10	7	4	
2	10	7	4	

例: 音の時間周波数構造



# 正則化付きNMF

- 既存の正則化付きNMF

- スパース正則化

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}} \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W} \mathbf{H}) + \mu \sum_{i,k} w_{i,k} \quad \text{s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k$$

正則化項

- スムース正則化

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}} \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W} \mathbf{H}) + \mu \sum_{i,k} |w_{i,k} - w_{i+1,k}|^2 \quad \text{s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k$$

正則化項

- 正則化付きNMF

- 正則化項に事前分布を仮定することで事前情報を反映

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}} \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W} \mathbf{H}) + \mathcal{R}(\mathbf{W}) \quad \text{s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k$$

正則化項

提案手法

事前分布としてディリクレ分布を仮定する

# ディリクレ分布(1/2)

## 確率変数ベクトル

3次元ベクトルの場合

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix}$$

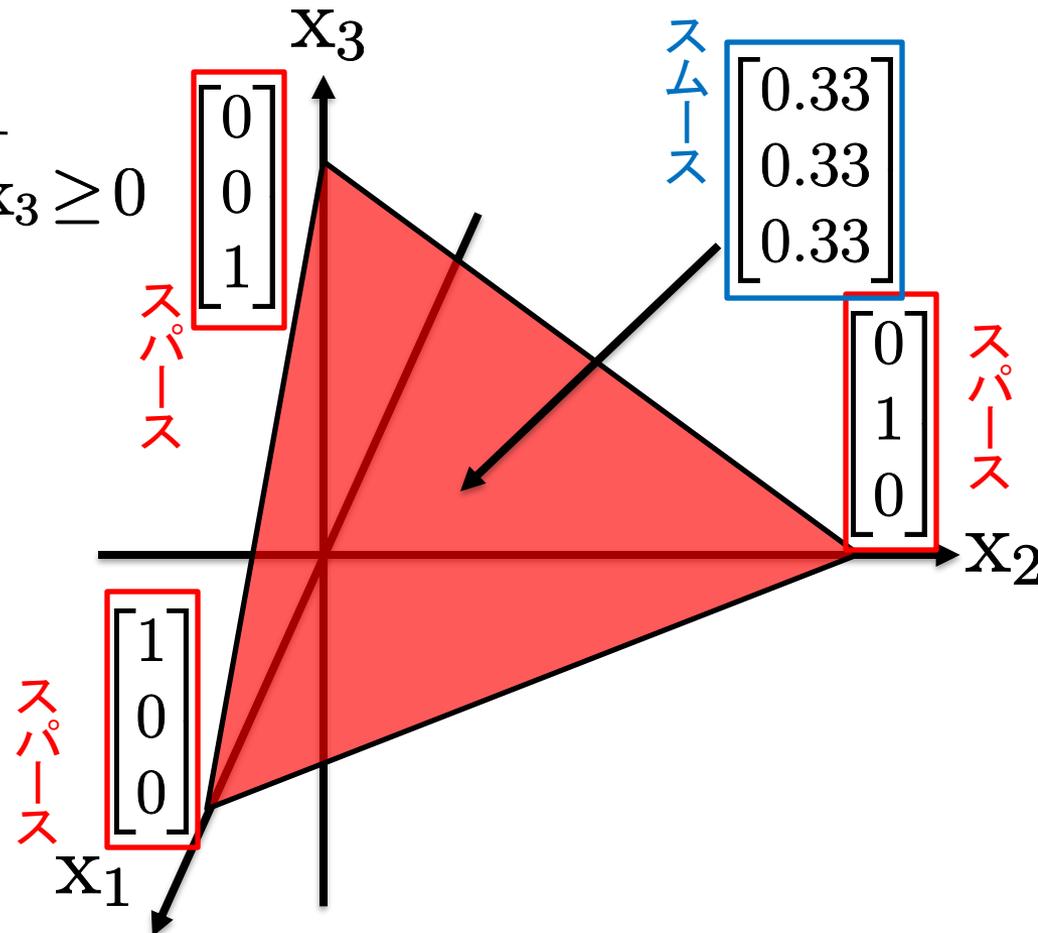
$$X_1 + X_2 + X_3 = 1$$

$$X_1 \geq 0, X_2 \geq 0, X_3 \geq 0$$

## 標準単体

- 2次元標準単体は  
スパースなベクトル  
3点を頂点に持つ  
3次元空間中の正三角形
- 三角形の中心付近は  
スムーズなベクトル

2次元標準単体の場合



- 確率  
3次元

$$\begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0 \\ 0.3 \end{bmatrix}$$

(1/2)

2次元標準単体の場合

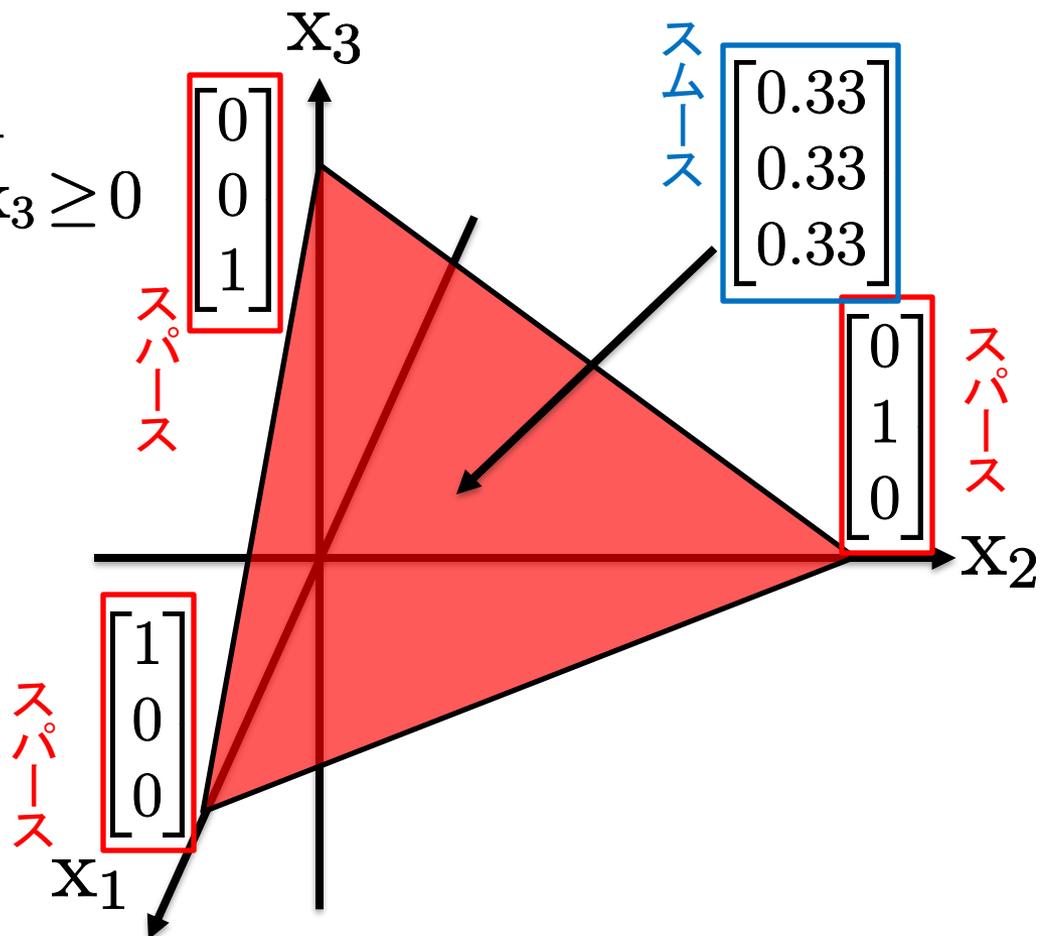
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0$$

- 標準単体

- 2次元標準単体は  
スパースなベクトル  
3点を頂点に持つ  
3次元空間中の正三角形
- 三角形の中心付近は  
スムーズなベクトル



# ディリクレ分布 (2/2)

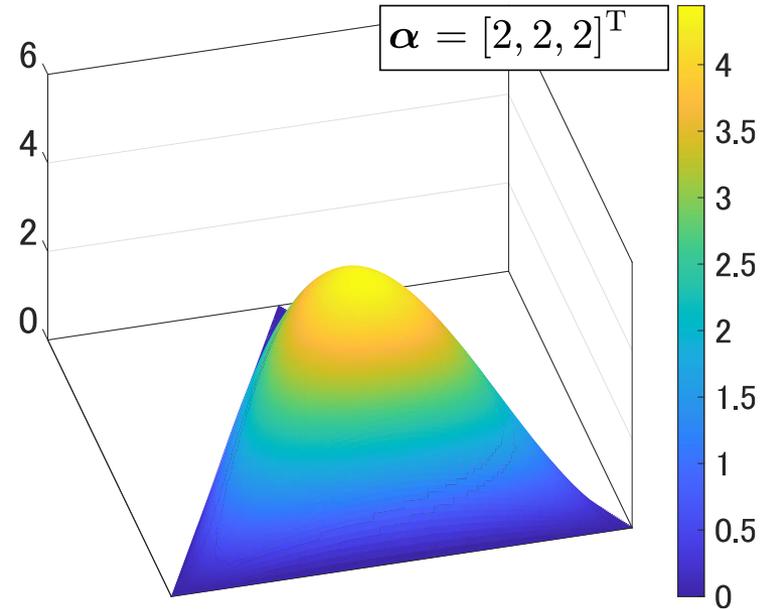
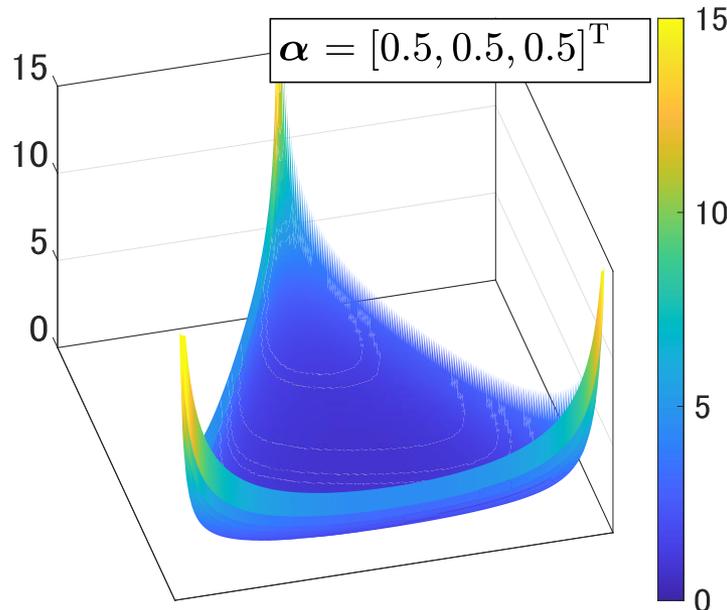
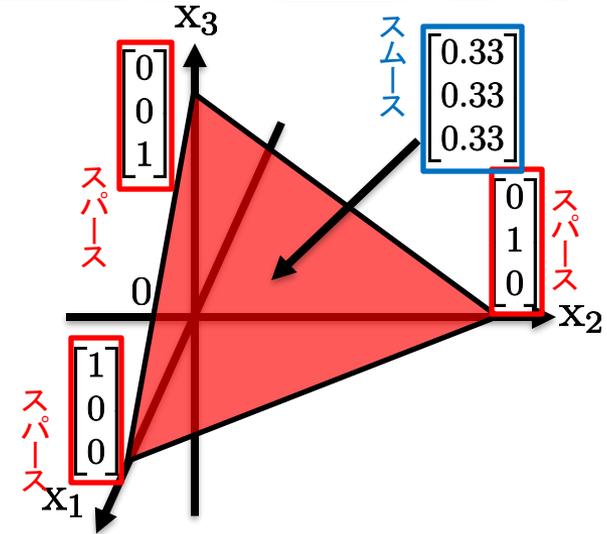
## ディリクレ分布

### 標準単体上の確率密度関数

$$\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x}; \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{B(\boldsymbol{\alpha})} \prod_i x_i^{\alpha_i - 1}$$

$B(\boldsymbol{\alpha})$ : 多変量ベータ関数

### パラメータ $\boldsymbol{\alpha}$ により確率密度の各頂点への集中度を調整することが可能



# ディリクレNMF

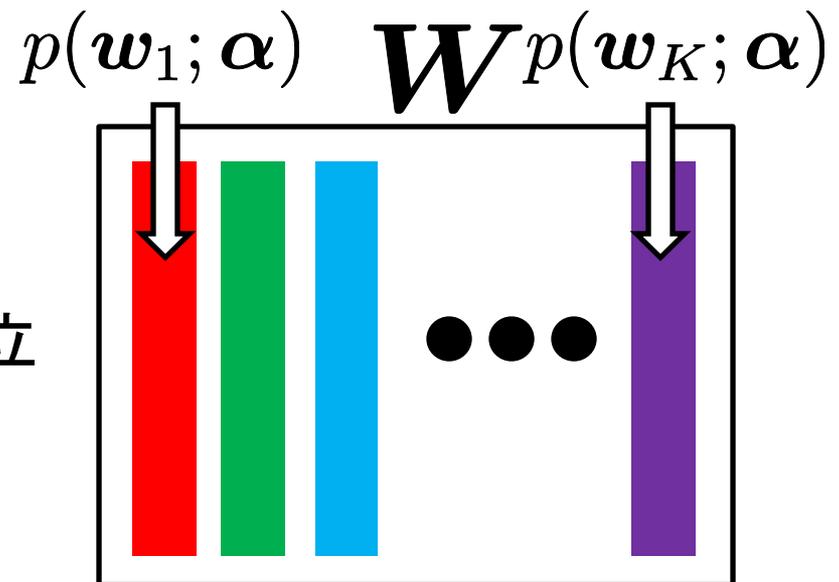
- ディリクレNMF

- ディリクレ分布を事前分布に仮定

$$\text{Minimize}_{\mathbf{W}, \mathbf{H}} \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W} \mathbf{H}) + \sum_{i,k} (a_{i,k} - 1) \log w_{i,k}^{-1}$$

$$\text{s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0, \sum_i w_{i,k} = 1 \quad \forall i, j, k$$

- ディリクレ分布の母数 $\alpha$ によりスパース正則化及びスムーズ正則化を統一かつ連続的に扱える
  - 上式は基底ベクトル $w_{i,k}$ が独立にディリクレ分布従うと仮定



# ディリクレNMFの反復更新式

- 補助関数法に基づく更新式の導出
  - 目的関数の形では最小化の式が解けないため補助関数法を適用し, ラグランジュの未定乗数法を用いて解く
  - 目的関数の単調減少が保証された最適化手法

$$\mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta) = \sum_{i,j} \left[ x_{i,j} \log x_{i,j} - x_{i,j} \sum_k \delta_{i,j,k} \log \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right] + \sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k}$$

- ディリクレNMFの反復更新式
  - $\hat{w}_{i,k}$ は求めるべき更新後の $w_{i,k}$ を表す

$$\hat{w}_{i,k} = \begin{cases} \frac{w_{i,k} \sum_j \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} h_{k,j} + a_k - 1}{\sum_i \max \left( w_{i,k} \sum_j \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} h_{k,j} + a_k - 1, 0 \right)} & \left( \sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 \geq 0 \right) \\ 0 & \left( \sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 < 0 \right) \end{cases}$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件

スパース・スムーズな基底を持つ基底行列 $\overline{W}$ を作成

正解の基底行列 擬似乱数行列

非負値観測行列

基底行列

係数行列

$$\begin{array}{c} \text{スパース} \end{array}
 \begin{array}{c} \overline{W} \\ \left[ \begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{array} \right] \end{array}
 \begin{array}{c} \overline{H} \\ \left[ \begin{array}{c} \text{擬似乱数} \\ \text{スムーズ} \end{array} \right] \end{array}
 =
 \begin{array}{c} X \\ \left[ \begin{array}{c} \overline{W} \overline{H} \text{の行列積} \end{array} \right] \end{array}
 \approx
 \begin{array}{c} W \\ \left[ \begin{array}{c} \text{基底行列} \end{array} \right] \end{array}
 \begin{array}{c} H \\ \left[ \begin{array}{c} \text{係数行列} \\ ? \end{array} \right] \end{array}$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件

非負の乱数から非負乱数行列 $\overline{H}$ を作成

正解の基底行列  $\overline{W}$  擬似乱数行列  $\overline{H}$

非負値観測行列  $X$

基底行列  $W$  係数行列  $H$

$$\begin{array}{c} \text{スパース} \end{array}
 \begin{array}{c} \overline{W} \\ \left[ \begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{array} \right] \end{array}
 \begin{array}{c} \overline{H} \\ \left[ \begin{array}{c} \text{擬似乱数} \\ \text{スムース} \end{array} \right] \end{array}
 =
 \begin{array}{c} X \\ \left[ \begin{array}{c} \overline{W} \overline{H} \text{の行列積} \end{array} \right] \end{array}
 \approx
 \begin{array}{c} W \\ \left[ \begin{array}{c} \text{基底行列} \end{array} \right] \end{array}
 \begin{array}{c} H \\ \left[ \begin{array}{c} \text{係数行列} \\ ? \end{array} \right] \end{array}$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件

$\overline{W}$ と $\overline{H}$ の行列積より非負観測行列 $X$ を作成

正解の基底行列  $\overline{W}$     擬似乱数行列  $\overline{H}$     非負値観測行列  $X$     基底行列  $W$     係数行列  $H$

$$\begin{array}{c} \text{スパース} \end{array}
 \begin{bmatrix} \overline{W} & \overline{H} \\ \left[ \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{array} \right] & \left[ \begin{array}{c} \text{擬似乱数} \\ \text{スムース} \end{array} \right] & = & \left[ \begin{array}{c} \overline{W} \overline{H} \text{の行列積} \\ \text{非負値観測行列 } X \end{array} \right] & \approx & \left[ \begin{array}{c} W \\ \text{基底行列 } W \end{array} \right] & \left[ \begin{array}{c} H \\ \text{係数行列 } H \\ ? \end{array} \right]
 \end{bmatrix}$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件

NMFを適用し基底行列と係数行列を得る

正解の基底行列  $\overline{W}$    擬似乱数行列  $\overline{H}$    非負値観測行列  $X$    基底行列  $W$    係数行列  $H$

$$\begin{array}{c} \text{スパース} \end{array}
 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} \text{擬似乱数} \\ \text{スムース} \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix} \overline{W} \overline{H} \text{の行列積} \end{bmatrix}
 \approx
 \begin{bmatrix} \text{基底行列} \\ \text{係数行列} \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} ? \end{bmatrix}$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件

スパース・スムース度に応じてパラメータを設定

正解の基底行列 擬似乱数行列

非負値観測行列

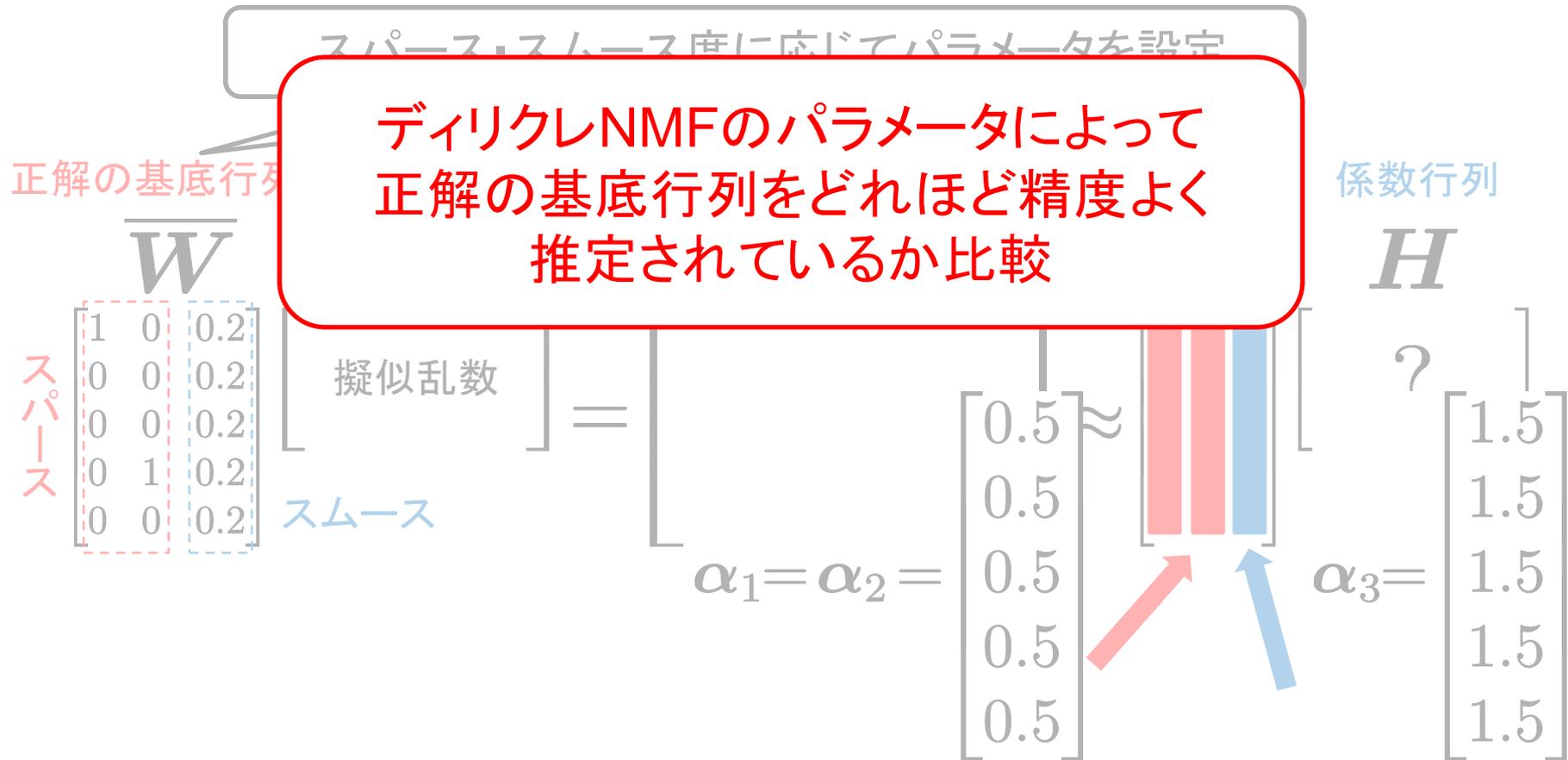
基底行列

係数行列

$$\begin{array}{c} \text{スパース} \end{array} \begin{array}{c} \overline{W} \\ \left[ \begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \\ 0 & 1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.2 \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \overline{H} \\ \left[ \begin{array}{c} \text{擬似乱数} \\ \text{スムース} \end{array} \right] \end{array} = \begin{array}{c} X \\ \left[ \begin{array}{c} \alpha_1 = \alpha_2 = \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{array} \right] \end{array} \approx \begin{array}{c} W \\ \left[ \begin{array}{c} \text{基底行列} \\ \text{係数行列} \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} H \\ \left[ \begin{array}{c} ? \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \end{array} \right] \end{array} \alpha_3 =$$

# 評価実験(1/2)

- 実験の目的
  - ディリクレNMFによる正則化の効果の確認
- 実験の条件



# 評価実験(2/2)

## 正則化の効果の確認

- ディリクレNMFと通常のNMFを適用し、正解の基底行列と推定されたそれぞれの基底行列を比較
- 適切なパラメータ設定により完全に推定された

0	1	0.2
0	0	0.2
1	0	0.2
0	0	0.2
0	0	0.2

スパース (Red dashed box)      スムース (Blue dashed box)

正解の基底行列の $\bar{W}$

0.02527	0.7875	0.3726
0.02097	1.424e-14	0.1805
0.9351	0.2203	0.01564
0.02097	1.16e-15	0.1805
0.02097	7.385e-15	0.1805

通常のNMFの $W$

0	1	0.2
0	0	0.2
1	0	0.2
0	0	0.2
0	0	0.2

スパース (Red dashed box)      スムース (Blue dashed box)

ディリクレNMFの $W$

- 実験の目的
  - NMFの持つ初期値依存性の問題の解決
- 実験の条件
  - **バスドラム**(BD), **スネアドラム**(SN), **ハイハット**(HH)から成る音響信号にディリクレNMF及び通常のNMFを適用

観測行列

$X$

$\approx$

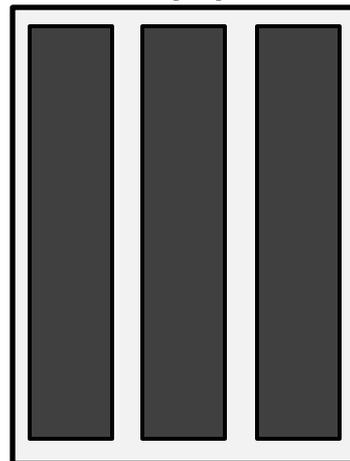
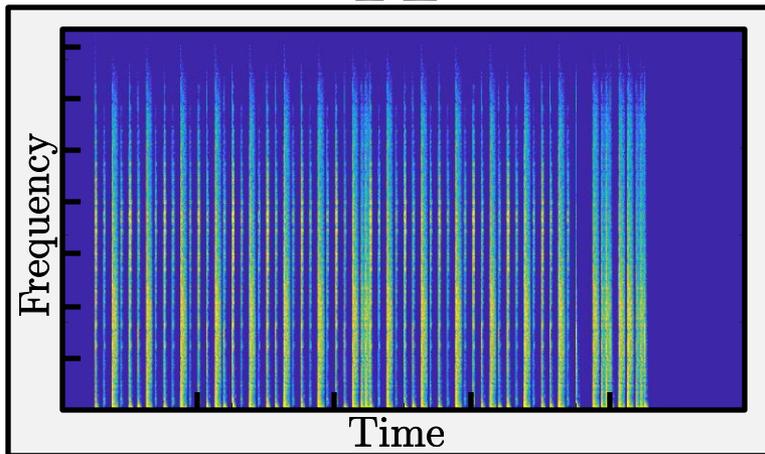
基底行列

$W$

係数行列

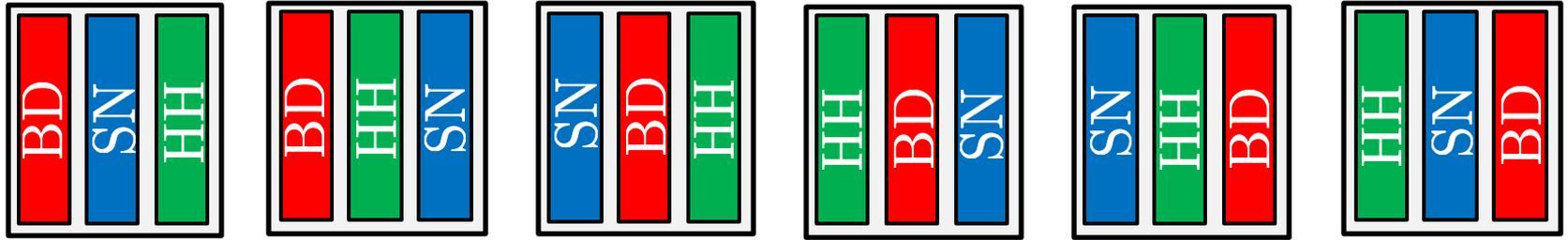
$H$

$\approx$



# 打楽器スペクトル表現への適用(1/2)

基底行列が取りうるパターン



観測行列

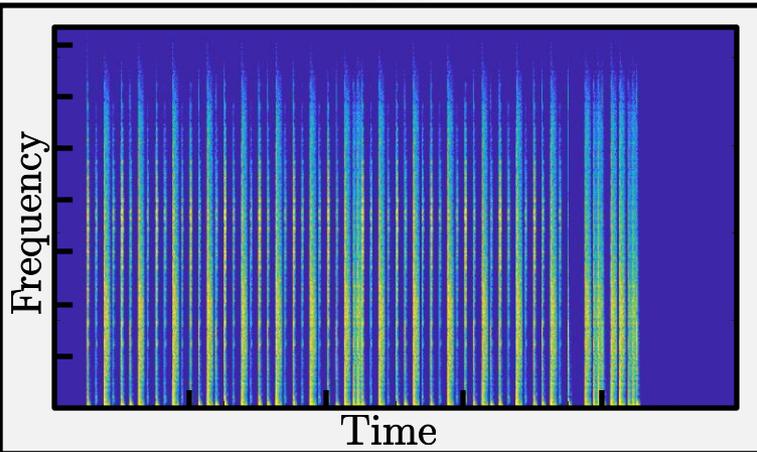
$X$

基底行列

$W$

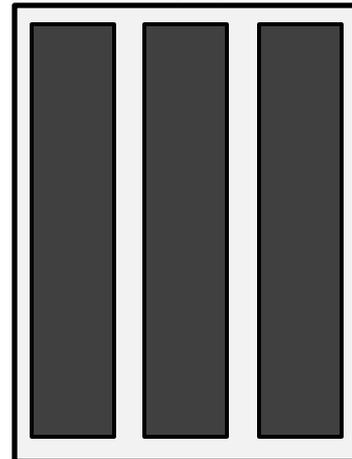
係数行列

$H$



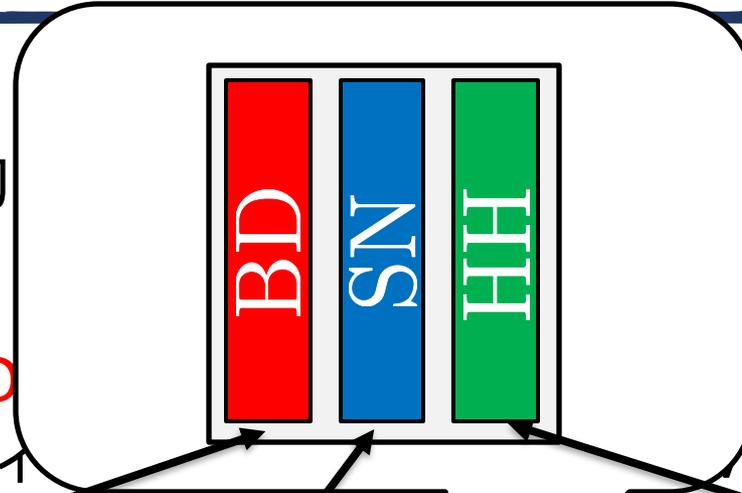
$\approx$

$\approx$



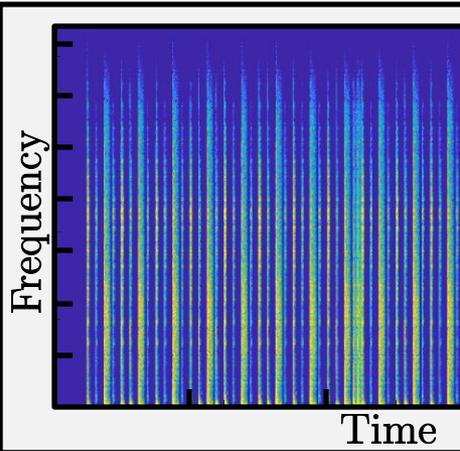
# 打楽器スペクトル表現への適用(1/2)

- 実験の目的
  - NMFの持つ初
- 実験の条件
  - バスドラム(BD)音響信号にデータ



ハット(HH)から成る  
NMFを適用

観測行  
 $X$



$\alpha_1 =$

1  
1  
1  
1  
.  
.  
.  
1  
1

$\alpha_2 =$

18  
18  
18  
18  
.  
.  
.  
18  
18

$\alpha_3 =$

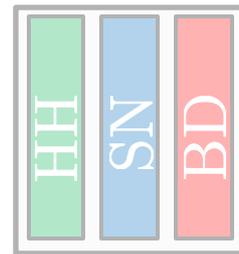
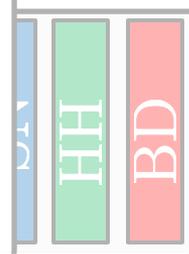
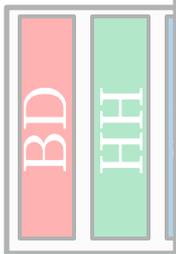
65  
65  
65  
.  
.  
.  
65  
65

係数行列  
 $H$

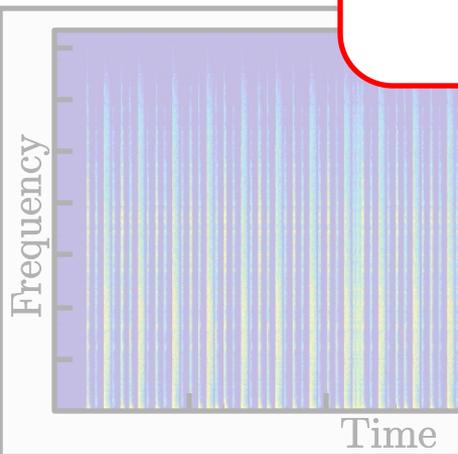


# 打楽器スペクトル表現への適用(1/2)

基底行列が取りうる



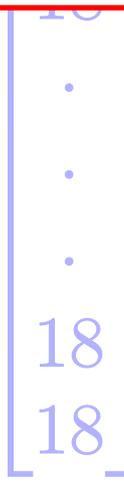
パラメータによって狙った基底の順番に  
推定を行えることを確認



$\alpha_1 =$



$\alpha_2 =$

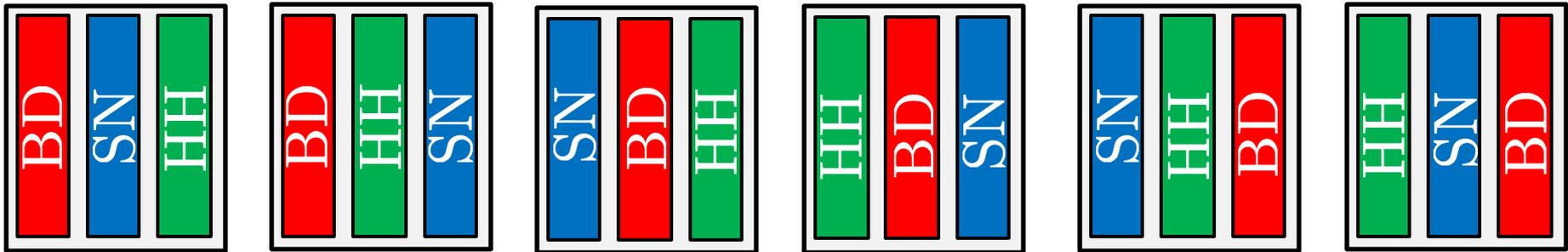


$\alpha_3 =$

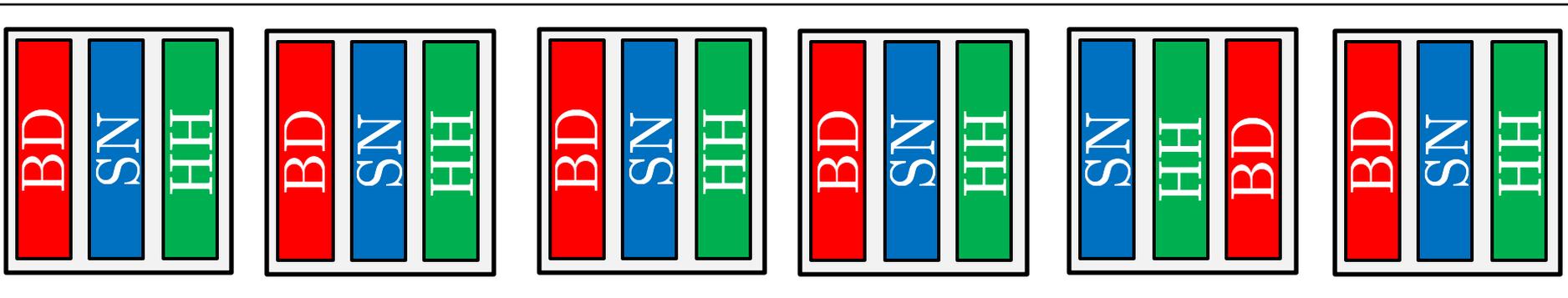


## 実験結果

- 通常のNMFの場合, 基底が意図した順番となったのは1000種類の乱数初期値のうち176種類→約18%



- ディリクレNMFの場合, 基底が意図した順番となったのは1000種類の乱数初期値のうち934種類→約93%



# まとめ

- 目的
  - スパース性・スムーズ性と統一的に扱える正則化手法の提案
- 提案手法
  - ディリクレ分布を事前分布に仮定する正則化手法
  - ディリクレ分布のパラメータによりスパース性及びスムーズ性を統一的に扱うことが可能
  - 実験によって、提案手法の正則化の効果及び乱数初期値に対する頑強性が確認できた
- 今後の課題
  - スパース・スムーズな時間周波数構造を持つ音響信号の表現とその応用
  - パラメータを活用した教師ありNMFへの援用