



香川高専

卒業研究論文

論文題目

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

提出年月日	令和7年2月20日
学 科	電気情報工学科
氏 名	小川 遼 印
指導教員（主査）	北村 大地 准教授 印
副 査	村上 幸一 准教授 印
学 科 長	漆原 史朗 教授 印

香川高等専門学校

Nonnegative Matrix Factorization with Dirichlet-Distribution-Based Regularization and Its Application to Percussive Spectral Representations

Haru Ogawa

Department of Electrical and Computer Engineering
National Institute of Technology, Kagawa College

Abstract

Nonnegative matrix factorization (NMF) is widely used as an unsupervised method to extract latent structures from nonnegative data, such as the time-frequency representations of audio signals. NMF approximates an observed nonnegative matrix as the multiplication of two nonnegative matrices, yielding a low-rank approximation from which frequently appearing patterns can be analyzed. These matrices can be utilized for many tasks including source separation and timbre conversion. However, conventional NMF does not always estimate optimal bases and coefficients. Moreover, their optimal results depend on the downstream task. To address this problem, various regularized NMF methods have been developed to promote desirable properties such as sparsity or smoothness. These regularizations incorporate prior knowledge that many audio signals naturally exhibit sparse and smooth structures in their time-frequency representations. Yet, sparsity and smoothness regularizations were independently developed, and a unified framework is lacking. In this thesis, I propose a novel regularized NMF that unifies both sparsity and smoothness by modeling the basis and coefficient matrices with the Dirichlet distribution. By controlling the parameters of this distribution, the proposed method can enforce either sparse or smooth characteristics. An auxiliary-function-based optimization algorithm with theoretical convergence guarantees is derived. Experiments on the time-frequency representations of percussive signals demonstrate that the proposed method significantly enhances initialization robustness and consistently yields the desired ordering of bases compared to simple NMF.

Keywords: nonnegative matrix factorization, regularization, Dirichlet distribution

(和訳)

音響信号の時間周波数表現のように、非負行列として表せる観測データから、そこに含まれる潜在的な構造を教師無し学習する手法として、非負値行列因子分解 (nonnegative matrix factorization: NMF) が広く用いられている。NMF は、観測非負行列を別の 2 つの非負行列の行列積に分解し、低ランク近似を行う数値アルゴリズムである。低ランク近似で得られる基底や係数から、観測データに潜む頻出パターンを解析できる。そのため、音響信号処理の歴史においては、音源分離や音色変換等、多様な問題に NMF が応用されてきた。一方で、NMF で得られる基底や係数が、その応用に必ずしも最適な状態で得られるとは限らない。また、基底や係数の最適な状態は NMF の応用先にも強く依存する。そのため、より良い基底や係数が得られるように変数を誘導する正則化付き NMF が広く研究されている。例えば、基底や係数がスパースとなるように誘導する正則化や、スムーズとなるように誘導する正則化等が提案されている。このようなスパース性やスムーズ性等の正則化は、観測データ中の潜在的な構造がスパース性やスムーズ性を持っているという事前知識を、NMF による低ランク近似に導入していると解釈できる。特に、前述のスパース性・スムーズ性は、多くの音響信号の時間周波数表現に潜在的な構造として現れるものであり、NMF においてはとりわけ重要な正則化である。しかしながら、スパース性及びスムーズ性を誘導する正則化は独立に提案されており、これらを統一的に扱うことができる正則化理論は未だ提案されていない。そこで本研究では、スパース性とスムーズ性の両方を統合的に扱う新しい正則化付き NMF を提案する。この手法では、NMF で推定される基底や係数がディリクレ分布に従うというモデルを導入する。このディリクレ分布の母数を制御することで、スパース性・スムーズ性のいずれにも正則化が可能となる。また、提案手法の最適化問題に対して補助関数法を適応し、収束性が理論的に保証された最適化アルゴリズムを導出する。実験では、正則化無しの NMF と提案手法を用いて、スパース性・スムーズ性の両構造を有する打楽器の時間周波数表現を低ランク近似し、その結果について考察した。提案手法はディリクレ分布の母数を適切な値にすることで、初期値に対する頑健性が向上し一貫した結果が得られることを示した。

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	2
1.3	本論文の構成	3
第 2 章	NMF と正則化付き NMF	4
2.1	はじめに	4
2.2	NMF	4
2.2.1	NMF の概要	4
2.2.2	NMF の定式化	6
2.3	正則化	10
2.3.1	正則化付き NMF	10
2.3.2	スパース NMF	11
2.3.3	スムーズ NMF	12
2.4	本章のまとめ	14
第 3 章	提案手法	15
3.1	はじめに	15
3.2	動機	15
3.3	ディリクレ分布	16
3.4	ディリクレ NMF の定式化	17
3.5	補助関数法に基づく反復更新式の導出	20
3.6	まとめ	23
第 4 章	非負行列に対するディリクレ NMF の適用及び検証	24
4.1	はじめに	24
4.2	実験の目的	24
4.3	実験条件	25
4.4	実験結果	27
4.4.1	単調非増加性の確認	27
4.4.2	正則化の効果の確認	27

4.5	まとめ	29
第 5 章	ディリクレ NMF に基づく打楽器スペクトル表現	31
5.1	はじめに	31
5.2	実験の目的	31
5.3	実験条件	32
5.4	実験結果	33
5.5	まとめ	34
第 6 章	結言	37
	謝辞	38
	参考文献	38
付録 A	補助関数法で利用される不等式	42
A.1	イェンゼンの不等式	42

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) [1] は, 観測した非負行列 \mathbf{X} を別の 2 つの非負行列 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} (これらをまとめて変数行列と呼ぶ) の行列積で低ランク近似するアルゴリズムである. 非負行列とは, すべての要素が 0 以上という制約を持つ行列である. 世の中で取り扱われている 2 次元データは非負行列として表現されることが多い. 例として Fig. 1.1 (a) に示すように, 5 人の顧客が 3 種類の商品の内, 各顧客が各商品をいくつ購入したかを表す購買データが挙げられる. 購買回数は負の値をとり得ないため, Fig. 1.1 (a) に示すように, 3×5 の非負行列で表される. また, Fig. 1.1 (b) に示すように, 8 ビット白黒画像も 0 から 255 の輝度を持つ非負行列として表現される. 音響信号分野においても, Fig. 1.1 (c) に示すように, 短時間フーリエ変換 (short-time Fourier transform: STFT) を用いて 1 次元データの時間信号を 2 次元データの時間周波数信号に変換することで複素行列が得られる. この複素行列の各要素の振幅値を取った振幅行列を定義すれば, Fig. 1.1 (c) に示すように, 非負行列として表現される. このように, 実世界において非負行列として表現されるものは多く, このようなデータの解析に NMF は有効である. 音響信号の分野では, Fig. 1.2 に示すように, NMF は頻出スペクトルパターンやそのアクティビティの推定に利用される. この手法を用いて推定された行列は, 推定した行列をもとに楽譜形式に変換する自動採譜 [2, 3], ある楽器や声などの音響信号を別の楽器や声に変換する音色変換 [4, 5], 複数の音が混ざった音響信号から個々の音源を分離する音源分離 [6, 7] など様々な用途に活用されている.

しかしながら, 非負観測行列を NMF で近似分解して得られる変数行列が, 必ずしも各応用に最適な状態や構造で得られるとは限らない. 例えば, 一般的な調波音のスペクトルパターンは周波数に関して強いエネルギーを持つ成分が疎 (スパース) という特徴を有しており, 逆に打撃音のスペクトルパターンはほとんどの周波数で強いエネルギーを持つため, 連続的 (スムーズ) という特徴を有する. NMF で音響信号の時間周波数構造を低ランク近似した場合, このような構造をもつスペクトルパターンが自動的に推定されることが期待されるが, 実際にはノイズや近似誤差等の影響でスパースやスムーズなスペクトルパターンが得られないことも

2 第1章 緒言



Fig. 1.1 Nonnegative matrices appearing in real situations: (a) customer purchase data, (b) monochrome image data, and (c) time-frequency amplitude of audio signals.

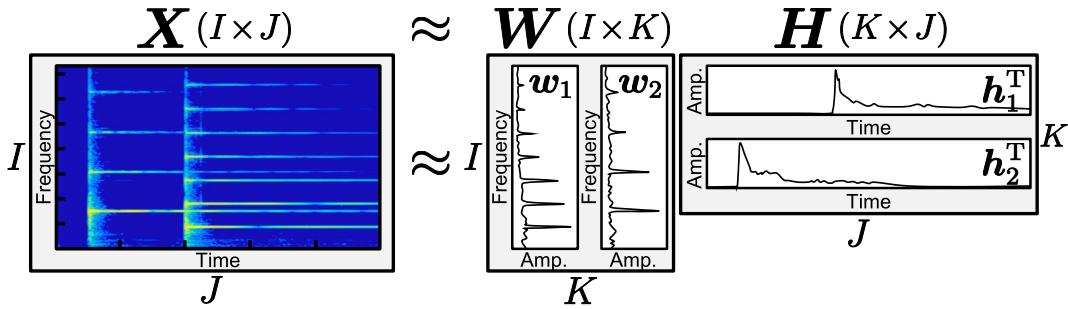


Fig. 1.2 Decomposition model of NMF.

多い。この例の他にも、そもそもどのような構造を持つ変数行列を推定したいかは、NMFの分解結果をどのような問題に応用するかという点にも強く依存する。

このような問題点に対して、より望ましい構造を持つ変数行列が得られるように、最適化の過程で推定結果を誘導する NMF が広く研究されている。このような手法は正則化付き NMF と呼ばれ、NMF の最適化問題中の目的関数に何らかの事前仮定を表した正則化項を付与するように定式化される。代表的な手法として、変数行列の要素をスパースに誘導するスパース NMF [8, 9, 10, 11, 12, 13] や、変数行列の要素をスムーズに誘導するスムーズ NMF [12, 14, 15], 変数行列の解の一意性を保証し変数行列の生成する空間（複数の基底ベクトルから成る凸包）の体積を最小化する minimum-volume NMF [16, 17, 18] などが提案されている。

1.2 本論文の目的

前節で述べた正則化付き NMF は、「観測データ中の潜在的なパターンがスパース性やスムーズ性等の構造を持っている」という事前知識を、NMF による低ランク近似及び変数行列の推定に導入していると解釈できる。特にスパース性・スムーズ性は、調波音や打撃音のように多くの音響信号の時間周波数信号に潜在的な構造として現れるものであり、NMF に基づく音響信号処理においてはとりわけ重要な正則化である。しかしながら、スパース性とスムーズ性の正則化法はそれぞれ独立に提案された歴史があり、これらを統一的に扱える正則化理論は未だ提案されていない。その結果、スパース性とスムーズ性の両方を一定のバランスで持つスペクトルパターンの表現等では、両方の正則化を組み合わせる等、煩雑な最適化が求められる問題がある。

そこで本論文では、NMF に基づく音響信号処理で重要な役割を果たすスパース性とスムーズ性の両正則化を、1つの正則化項として統一的に表現できる新しい手法を提案する。具体的には、「NMF で推定される変数行列の各成分はディリクレ分布に従う」というモデルを導入する。このような変数の生成を表現する分布は事前分布と呼ばれ、事前分布を仮定した最適化問題の解法として、最大事後確率 (maximum a posteriori: MAP) 推定が適用できる。従って、提案手法は、ディリクレ分布を事前分布として仮定し、MAP 推定を NMF の枠組みで適用する手法である。ディリクレ分布の母数を制御することで、スパース性とスムーズ性のいずれにも正則化が可能となる。また、提案手法の最適化問題に対して補助関数法 [19, 20] を適用し、収束性が理論的に保証された最適化アルゴリズムを導出する。さらに、実際にドラム音源の時間周波数信号の低ランク近似として、正則化の無い単純な NMF と提案手法の両方を適用し、推定されるスペクトルパターンや最適化変数の初期値に対する頑健性について比較することで、提案手法の妥当性を確認する。

1.3 本論文の構成

2章では、NMF の基本理論について説明し、その定式化を行う。また、最適化の過程で推定結果を誘導する正則化付き NMF の理論の説明と、その具体例を挙げる。3章では、本論文で提案する正則化付き NMF の事前分布として用いるディリクレ分布について説明する。また、ディリクレ分布を事前分布に持つ正則化付き NMF の定式化を行う。また、その反復更新式の定式化についても説明する。4章では、乱数を用いて作成した観測行列に提案手法と従来手法を適用し、提案手法と従来手法の推定結果を比較し、提案手法の効果を確認する。5章では、実際の音響信号に提案手法を適用し、従来手法との比較を行う。音響信号に提案手法を適用し、実際の音響信号においてスパース及びスムーズ性の両正則化を統一的に扱える利点を確認する。6章で本論文についてまとめる。

第 2 章

NMF と正則化付き NMF

2.1 はじめに

本章では、2.2 節で NMF の基礎理論について説明し、定式化を行う。2.3 節では NMF における正則化について説明し、具体的な例としてスパース NMF 及びスムーズ NMF について述べる。最後に、2.4 節で本章についてまとめる。

2.2 NMF

2.2.1 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。このとき、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、非負観測行列の低ランク性を仮定した近似分解が可能になる。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頻出パターンを抽出することが可能な教師無し学習と解釈される。

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。NMF は、そのような非負値のデータから非負の潜在頻出パターンを推定するために利用される。主成分分析やベクトル量子化等と比較して、NMF で推定される非負のパターンは非負性に起因して解釈が容易であるため、教師無しのパターン認識において広く活用されている。

NMF による非負低ランク近似分解は次の式で表される。

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{W}\mathbf{H} \quad (2.1)$$

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ある。特に、 \mathbf{W} は基底行列、 \mathbf{H} は係数行列と呼ばれる。また、 \mathbf{W} の列ベクトルである \mathbf{w}_k 及び \mathbf{H} の行ベクトル \mathbf{h}_k はそれぞれ基底ベクトル及び係数ベクトル（あるいは単に基底及び係数）と呼ばれ、 K は

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

Fig. 2.1 Example of NMF decomposition.

基底ベクトルの個数を示す。さらに、 I 及び J はそれぞれ観測行列の行数及び列数である。ここで登場した I , J , 及び K のインデックスとしてそれぞれ $i = 1, 2, \dots, I$, $j = 1, 2, \dots, J$, 及び $k = 1, 2, \dots, K$ を導入する。NMF は基底ベクトルの個数 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 \mathbf{WH} というランク K の行列で低ランク近似する。ここで、 $\min(\cdot, \cdot)$ は 2 つの引数の内最小値を返す関数である。Fig. 2.1 は、NMF による行列の分解近似の例である。このように、非負観測行列 \mathbf{X} を (非負の) 基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} 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 $\widehat{\mathbf{X}} = \mathbf{WH}$ が式 (2.1) のように得られる。

NMF を適用するにあたって注意すべき点として、NMF で得られる \mathbf{W} 及び \mathbf{H} には原理的に次の 2 つの任意性が存在する。

- 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{WH} は一致する。

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

- 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も、 \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。

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

また、 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の推定問題は解析的に解けるわけではなく、次項で説明する最適化問題を解く必要がある。さらに、局所解の存在により常に同じ結果を得られるとは限らず、 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} に与える初期値や用いる最適化アルゴリズムによって異なる推定結果となる。

2.2.2 NMF の定式化

NMF では、次の最適化問題を解くことで変数行列 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} を推定する.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) \text{ s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \forall i, j, k \quad (2.2)$$

ここで、 $x_{i,j}$, $w_{i,k}$, 及び $h_{k,j}$ はそれぞれ \mathbf{X} , \mathbf{W} , 及び \mathbf{H} の要素である. また、 $\mathcal{D}(\cdot|\cdot)$ は2つの入力行列間の乖離度を測る関数である. 本論文では、次式で表される一般化カルバックライブラ (Kullback–Leibler: KL) ダイバージェンス [22] $\mathcal{D}_{\text{KL}}(\cdot|\cdot)$ を用いる.

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{A}|\mathbf{B}) = \sum_{i,j} \left[a_{i,j} \log \frac{a_{i,j}}{b_{i,j}} - a_{i,j} + b_{i,j} \right] \quad (2.3)$$

ここで、 $a_{i,j}$ 及び $b_{i,j}$ はそれぞれ $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ 及び $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ の (i, j) 要素を表す. NMF では二乗 Euclid 距離等の乖離度を用いることも可能だが、音響信号処理の分野では (2.3) の一般化 KL ダイバージェンスに基づく NMF を用いる場合が多い. この理由として、音源分離等の多くのタスクで一般化 KL ダイバージェンス (generalized-KL-divergence-based NMF: KL-NMF) が比較的良好な性能をもたらす [22, 23] ことが挙げられる.

KL-NMF の反復最適化更新式を求める. 本論文では NMF の反復更新式の導出に補助関数法 [19, 20] と呼ばれる^{*1}最適化アルゴリズムを用いる. この利点として、1回の反復 (変数の更新) に対して目的関数の値の単調非増加性が保証されていることが挙げられる. 結果として、適当な乱数で基底行列及び係数行列を初期化したうえで反復更新式を十分な回数計算するだけで最適化が可能であり、最急降下法のステップサイズのように適切に調整しなければならないパラメータは、補助関数法に基づく反復更新式には存在しない. この性質から、NMF の枠組みで新しい手法やモデルを考える場合、補助関数法に基づく反復更新式を導出できるかどうかを実応用において重要視されている.

まず、KL-NMF の最適化問題は式 (2.3) を用いて、次式のようになる.

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \text{ s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \forall i, j, k \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &= \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{WH}) \\ &= \sum_{i,j} \left[x_{i,j} \log \frac{x_{i,j}}{\sum_k w_{i,k} h_{k,j}} - \left(x_{i,j} - \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.5)$$

最適化問題 (2.4) は、変数行列 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の非負制約条件の下で、非負観測行列 \mathbf{X} と低ランク近似行列 \mathbf{WH} 間の一般化 KL ダイバージェンスで測った乖離度が最小化されるような \mathbf{W}

^{*1} 国外の文献では補助関数法は上界最小化アルゴリズム (majorization minimization algorithm) と呼ばれることが多い.

及び \mathbf{H} を推定する問題を意味している。ただし、この最適化問題の目的関数 $\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ は非凸な関数である点に注意する。目的関数 $\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ を変形すると、次式となる。

$$\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i,j} \left(x_{i,j} \log x_{i,j} - x_{i,j} \log \sum_k w_{i,k} h_{k,j} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right) \quad (2.6)$$

式 (2.4) は非負制約条件付き最小化問題であるため、その局所解を見つけるには \mathcal{J} の偏微分の一次最適性条件が重要となる。しかしながら、目的関数 \mathcal{J} の $w_{i,k}$ 及び $h_{k,j}$ に関する偏微分を計算する場合、第 2 項の k に関する総和を含む対数関数の偏微分が原因で \mathbf{W} 及び \mathbf{H} の停留点を解析的に求めることができない。具体的には、 $\log \sum_k w_{i,k} h_{k,j}$ を $w_{i,k}$ で偏微分し 0 とおいた方程式を i 及び k のすべてについて求め $I \times K$ 元連立方程式を得ても、これらの方程式は線形独立とならないため、 $w_{i,k}$ の解析解は求まらない。そこで、負対数関数は凸関数であることから、付録 A の (A.1) 節に示すイェンゼンの不等式を適用することで、式 (2.6) を上から抑える補助関数を設計できる。式 (2.6) の第 2 項に対してイェンゼンの不等式を適用すると、次式を得る。

$$\begin{aligned} -\log \sum_k w_{i,k} h_{k,j} &= -\log \sum_k \delta_{i,j,k} \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} \\ &\leq -\sum_k \delta_{i,j,k} \log \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

ここで、 $\delta_{i,j,k} \geq 0$ は補助変数であり $\sum_k \delta_{i,j,k} = 1$ を満たす。式 (2.7) は、イェンゼンの不等式 (A.1) 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 (2.6) の第 2 項に適用することで、目的関数 \mathcal{J} の上界となる補助関数 \mathcal{J}^+ を次式のように定義できる。

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &\leq \mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta) \\ &= \sum_i \sum_j \left(x_{i,j} \log x_{i,j} - x_{i,j} \sum_k \delta_{i,j,k} \log \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right) \end{aligned} \quad (2.8)$$

ここで、 $\Delta \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{I \times J \times K}$ は補助変数 $\delta_{i,j,k}$ で構成される 3 階のテンソルである。

次に、補助関数 $\mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta)$ に対する補助変数 Δ 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 $\sum_k \delta_{i,j,k} = 1$ 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。

$$\underset{\Delta}{\text{Minimize}} \mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta) \quad \text{s.t.} \quad \sum_k \delta_{i,j,k} = 1 \quad \forall i, j \quad (2.9)$$

最適化問題 (2.9) の Lagrange 関数は次式で与えられる。

$$\mathcal{L}(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta, \lambda) = \mathcal{J}^+ - \lambda \left(\sum_k \delta_{i,j,k} - 1 \right) \quad (2.10)$$

従って, $\partial\mathcal{L}/\partial\delta_{i,j,k} = 0$ 及び $\partial\mathcal{L}/\partial\lambda = 0$ より次式が得られる.

$$-x_{i,j} \left(\log \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} - 1 \right) - \lambda = 0 \quad (2.11)$$

$$-\sum_k \delta_{i,j,k} + 1 = 0 \quad (2.12)$$

式 (2.12) は等式制約条件 $\sum_k \delta_{i,j,k} = 1$ そのものである. また, 式 (2.11), 非負条件 $\delta_{i,j,k} \geq 0$, 及び $w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0$ より, 式 (2.11) の両辺を指数関数で変換し次式を得る.

$$\delta_{i,j,k} = w_{i,k} h_{k,j} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{i,j}} - 1 \right) \quad (2.13)$$

式 (2.13) の両辺に対して k について総和をとると次式を得る.

$$\sum_k \delta_{i,j,k} = \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{i,j}} - 1 \right) \quad (2.14)$$

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

$$\sum_k w_{i,k} h_{k,j} \exp \left(\frac{\lambda}{x_{i,j}} - 1 \right) = 1 \quad (2.15)$$

未定乗数 λ 及び $x_{i,j}$ は k に依らない定数であるため, 結局, 次式となる.

$$\exp \left(\frac{\lambda}{x_{i,j}} - 1 \right) = \frac{1}{\sum_k w_{i,k} h_{k,j}} \quad (2.16)$$

$$\exp \left(1 - \frac{\lambda}{x_{i,j}} \right) = \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \quad (2.17)$$

これを式 (2.13) に代入することで, 補助変数の最小解が次式を得る.

$$\delta_{i,j,k} = \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} \quad \forall i, j, k \quad (2.18)$$

従って, 式 (2.18) が補助関数 (2.9) 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 t 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.

$$\delta_{i,j,k}^{(t+1)} = \frac{w_{i,k}^{(t)} h_{k,j}^{(t)}}{\sum_{k'} w_{i,k'}^{(t)} h_{k',j}^{(t)}} \quad \forall i, j, k \quad (2.19)$$

続いて, 設計した補助関数 $\mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta})$ を本来の変数 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} について最小化する. まず, \mathcal{J}^+ の \mathbf{W} での偏微分を考える. $\partial\mathcal{J}^+/\partial w_{i,k} = 0$ より次式を得る.

$$\sum_j \left(-x_{i,j} \delta_{i,j,k} \frac{\delta_{i,j,k}}{w_{i,k} h_{k,j}} \frac{h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} + h_{k,j} \right) = 0 \quad (2.20)$$

式 (2.20) を整理すると次式のようになる.

$$\begin{aligned}
 -\sum_j x_{i,j} \frac{\delta_{i,j,k}}{w_{i,k}} + \sum_j h_{k,j} &= 0 \\
 w_{i,k} \sum_j h_{k,j} &= \sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} \\
 w_{i,k} &= \frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k}}{\sum_j h_{k,j}}
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

式 (2.21) が補助関数 (2.8) を最小化する $w_{i,k}$ となる. 反復回数 t を記述し, 次式を得る.

$$w_{i,k}^{(t+1)} = \frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k}^{(t+1)}}{\sum_j h_{k,j}^{(t)}} \tag{2.22}$$

同様に, $\partial \mathcal{J}^+ / \partial h_{k,j} = 0$ より, $h_{k,j}$ の最小解も次のように得られる.

$$\begin{aligned}
 \sum_i \left(-x_{i,j} \delta_{i,j,k} \frac{\delta_{i,j,k}}{w_{i,k} h_{k,j}} \frac{w_{i,k}}{\delta_{i,j,k}} + w_{i,k} \right) &= 0 \\
 -\sum_i x_{i,j} \frac{\delta_{i,j,k}}{h_{k,j}} + \sum_i w_{i,k} &= 0 \\
 h_{k,j} \sum_i w_{i,k} &= \sum_{i=1} x_{i,j} \delta_{i,j,k} \\
 h_{k,j} &= \frac{\sum_i x_{i,j} \delta_{i,j,k}}{\sum_i w_{i,k}}
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

反復回数 t を考慮して記述すると, 次のようになる.

$$h_{k,j}^{(t+1)} = \frac{\sum_i x_{i,j} \delta_{i,j,k}^{(t+1)}}{\sum_i w_{i,k}^{(t+1)}} \tag{2.24}$$

従って, 式 (2.7) で補助変数を更新し, 式 (2.22) 及び (2.24) 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 (2.6) の値を最小化する \mathbf{W} 及び \mathbf{H} を得ることができる.

なお, 補助変数の反復更新式 (2.19) を式 (2.22) 及び (2.24) にそれぞれ代入することで, 次

式のような統合された反復更新式に書き換えられる.

$$\begin{aligned} w_{i,k}^{(t+1)} &= \frac{\sum_j x_{i,j} \frac{w_{i,k}^{(t)} h_{k,j}^{(t)}}{\sum_{k'} w_{i,k'}^{(t)} h_{k',j}^{(t)}}}{\sum_j h_{k,j}^{(t)}} \\ &= w_{i,k}^{(t)} \frac{\sum_j \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'}^{(t)} h_{k',j}^{(t)}} h_{k,j}^{(t)}}{\sum_j h_{k,j}^{(t)}} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} h_{k,j}^{(t+1)} &= \frac{\sum_i x_{i,j} \frac{w_{i,k}^{(t+1)} h_{k,j}^{(t)}}{\sum_{k'} w_{i,k'}^{(t+1)} h_{k',j}^{(t)}}}{\sum_i w_{i,k}^{(t+1)}} \\ &= h_{k,j}^{(t)} \frac{\sum_i \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'}^{(t+1)} h_{k',j}^{(t)}} w_{i,k}^{(t+1)}}{\sum_i w_{i,k}^{(t+1)}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

式 (2.25) 及び (2.26) は、次のように行列形式で表現できる.

$$\mathbf{W} \leftarrow \mathbf{W} \odot \frac{\mathbf{X} \mathbf{H}^T}{\mathbf{1}_{(I \times J)} \mathbf{H}^T} \quad (2.27)$$

$$\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{H} \odot \frac{\mathbf{W}^T \mathbf{X}}{\mathbf{W}^T \mathbf{1}_{(I \times J)}} \quad (2.28)$$

ここで、見やすさのために反復回数 t 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、 $\mathbf{1}_{(I \times J)}$ すべての要素が 1 の $I \times J$ の行列であり、演算子 \odot は要素毎の積 (Hadamard product), 行列間の分数は要素毎の商を表す. 以上より, KL-NMF の反復更新式が導出された.

2.3 正則化

2.3.1 正則化付き NMF

NMF で推定される変数行列 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} は, 1.1 節で述べたように必ずしも応用先にとって望ましい形で得られるとは限らない. 例えば, Fig. 1.2 のように調波音のスペクトルパターンを基底ベクトル \mathbf{w}_k として推定する場合, \mathbf{w}_k はスパースな構造をとることが望まれるが, 非負観測行列 \mathbf{X} に含まれるノイズの影響等でスパースな \mathbf{w}_k が推定されない可能性もある.

そこで, 変数行列 \mathbf{W} 及び \mathbf{H} のいずれか, または両方に対して, 何らかの事前情報を反映し, 最適化をより望ましい結果へと誘導する手法が多数提案されている. その多くは正則化付き最適化問題として定式化されており, これを正則化付き NMF と呼ぶ. 正則化付き NMF の代表的な手法として, 次項で詳しく述べるスパース性やスムーズ性の誘導などがある.

これらの手法は, 変数行列に特定の事前情報を仮定し, その情報を反映した形で最適解を求める手法として解釈される. 事前情報は, 変数行列に対して特定の事前分布として定式化されることが一般的である. 事前分布とは, 最適化変数がどのような値を持つかという傾向に関する

る仮定を、確率分布の形で表したものである。この「最適化変数が特定の事前分布から生成されたものである」という仮定は、その変数に事前知識や構造に関する仮定を与えることに相当する。このように、正則化付き NMF では、変数行列に事前分布生成モデルを仮定することで、スパース性やスムーズ性などの特定の性質や構造を持たせることが可能になる。

正則化付き NMF の定式化について述べる。例として基底行列 \mathbf{W} が事前分布 $p(\mathbf{W})$ に従うと仮定すると、NMF の最適化問題はよく知られた MAP 推定と等価になり、次式で定義される。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) + \mathcal{R}(\mathbf{W}) \text{ s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \forall i, j, k \quad (2.29)$$

ここで、式 (2.2) と式 (2.29) を比較すると、第 2 項の $\mathcal{R}(\mathbf{W})$ が新たに目的関数に付与されていることが分かる。この $\mathcal{R}(\mathbf{W})$ は正則化項と呼ばれ、事前分布 $p(\mathbf{W})$ に由来する項であり、次式で定義される。

$$\mathcal{R}(\mathbf{W}) = -\log p(\mathbf{W}) \quad (2.30)$$

従って、正則化付き NMF は乖離度 $\mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H})$ に対して正則化項が加算された形の目的関数を非負制約条件下で最小化する問題として定式化される。

2.3.2 スパース NMF

変数行列 \mathbf{W} や \mathbf{H} (いずれか一方、または両方) に対してスパース性を誘導する正則化付き NMF はスパース NMF と呼ばれ、これまで様々な手法が提案されてきた [8, 9, 10, 11, 12, 13]。ここでスパース性とは、データや行列の中で多くの要素がゼロ値である状態を指す。例として行列を挙げると、Fig. 2.2 (a) に示す密な行列に対し、Fig. 2.2 (b) は多くの要素がゼロ値で構成されており、スパース性を持つ行列といえる。他にも、Fig. 2.3 に示すように、多くのピクセルが黒 (ゼロ値) で、一部のピクセルだけが非ゼロの値を持つ画像もスパース性を持つといえる。このような画像は、撮像系に混入するごま塩ノイズとしてしばしば現れる。また Fig. 2.4 に示すように、打撃音や調波音の時間周波数信号にもスパースな性質が現れる。Fig. 2.4 (a) のように、打撃音は強いエネルギーの成分が短い時間かつ全ての周波数で現れる。これは、打撃音が時間方向にスパースな構造を持っているといえる。一方、Fig. 2.4 (b) のように、調波音は強いエネルギーの成分が長い時間かつ特定の局所的な周波数にのみ現れる。従って、調波音は周波数方向にスパースな構造を持っている。また、時間と周波数からなる 2 次元データ全体で音響信号を俯瞰した場合も、強いエネルギーを持つ成分は少なく局所的であるため、スパースな時間周波数構造を有するといえる [24, 25]。スパース NMF は非負観測行列中に含まれるスパースな潜在パターン (前述の打撃音や調波音等) を推定する場合に有効である。

スパース NMF の定式化として代表的なものは次式で定義される [13]。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) + \mu \|\mathbf{W}\|_1 \text{ s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \forall i, j, k, \|\mathbf{w}_k\|_1 = 1 \forall k \quad (2.31)$$

$$\begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 0 & 7 & 8 \\ 7 & 8 & 9 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \text{(a)} & \text{(b)} \end{array}$$

Fig. 2.2 Examples of (a) dense and (b) sparse matrices.

但し、上式は基底行列 \mathbf{W} をスパースにする例である。また、 $\mu > 0$ は正則化の強さを制御する重み係数、 $\|\cdot\|_1$ は L_1 ノルムを表す。 L_1 ノルムとは、次式で与えられる L_p ノルムにおいて $p = 1$ を代入したものである。

$$\|\mathbf{W}\|_p = \left(\sum_{i,k} |w_{i,k}|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.32)$$

一般に、最適化問題 (2.31) 中の目的関数のように、変数の L_1 ノルムを正則化項に用いることで、その変数のスパース性を誘導する最適化が可能となる。また、制約条件の $\|\mathbf{w}_k\|_1 = 1$ は \mathbf{W} の列ベクトル（基底ベクトル） \mathbf{w}_k の L_1 ノルムがいずれも 1 であることを制約している。これは、2.2.1 節で述べた NMF におけるスケールの任意性に起因して正則化項 $\mu\|\mathbf{W}\|_1$ が作用しない現象を回避するためである。このように、推定される変数行列は本来スパースであるべき、と仮定されるデータに対しスパース NMF を適用することで、正則化の無い単純な NMF では Fig. 2.2 (a) のような密な行列が推定される場合でも、Fig. 2.2 (b) のようなスパースな行列を推定することが可能となる。

2.3.3 スムース NMF

スパース性とは異なる性質として、スムーズ性も NMF の正則化に利用されてきた [12, 14, 15]。スムーズ性とは、データや波形等の要素が滑らかで、急激な変化が少ない状態を指す。一例として、Fig. 2.5 (a) の一般行列に対して Fig. 2.5 (b) の各列は要素の値の変化が少なくスムーズ性を持つことが分かる。このようなスムーズ性は、スパース性と同様に音響信号の時間周波数構造にも現れる。Fig. 2.4 において、打撃音及び調波音がそれぞれ時間方向及び周波数方向にスパースであることを 2.3.2 項で述べたが、方向を変えれば打撃音及び調波音はそれぞれ周波数方向及び時間方向にスムーズである、と捉えることもできる。スムーズ NMF はこのようなスムーズ性を持つ潜在パターンの推定に有効な手法である。

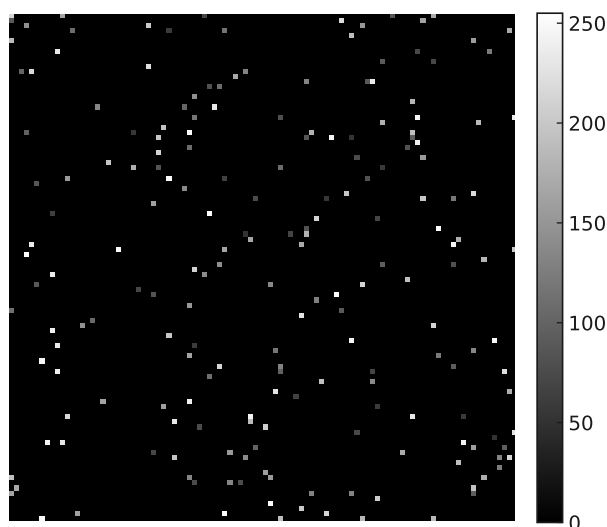


Fig. 2.3 Example of sparse gray-scale image.

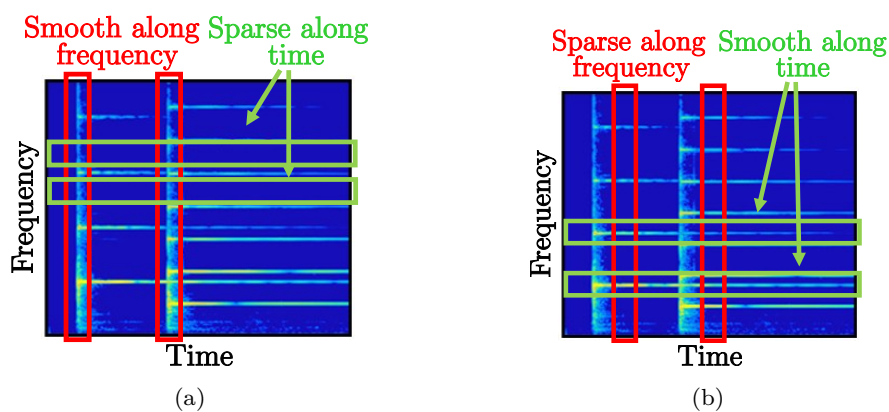


Fig. 2.4 Example of audio spectrogram: (a) percussive components smooth and sparse structures along the frequency and time axes, respectively, while (b) harmonic components have sparse and smooth structures along the frequency and time axes, respectively.

スムーズ NMF の定式化として代表的なものは次式で定義される [15].

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{D}(\mathbf{X} | \mathbf{W}\mathbf{H}) + \mu \sum_{i,k} |w_{i,k} - w_{i-1,k}|^2 \text{ s.t. } w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \forall i, j, k, \|\mathbf{w}_k\| = 1 \forall k \quad (2.33)$$

但し, 上式は基底行列 \mathbf{W} の列ベクトルをスムーズにする例である. 正則化項 $\sum_{i,k} |w_{i,k} - w_{i-1,k}|^2$ が付与されることにより, 基底ベクトル \mathbf{w}_k の隣接要素の二乗誤差の最小化が最適化に影響するため, \mathbf{w}_k のスムーズ性の強調が誘導される.

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 3 & 4 & 7 \\ 1 & 8 & 0 & 7 & 8 \\ 6 & 2 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 5 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 3 & 7 & 1 & 5 & 2 \\ 4 & 6 & 1 & 6 & 1 \\ 4 & 6 & 1 & 5 & 1 \\ 3 & 5 & 2 & 5 & 0 \\ 2 & 6 & 1 & 4 & 0 \end{bmatrix}$$

(a) (b)

Fig. 2.5 Examples of (a) non-smooth and (b) column-smooth matrices.

2.4 本章のまとめ

本章では、NMF の基礎理論の説明と定式化を行った。また、推定結果に対し事前分布と仮定し、結果を誘導する正則化付き NMF について説明し、その具体例としてスパース NMF 及びスムーズ NMF について説明した。これらは本論文で新たに提案する正則化付き NMF の基礎となる部分である。次章ではスパース NMF とスムーズ NMF を統一的に扱う正則化付き NMF の提案とその定式化を行う。

第 3 章

提案手法

3.1 はじめに

前章では、正則化付き NMF の動機と概要について述べ、スパース NMF 及びスムーズ NMF の具体例を挙げた。本章では、新しいスパース性とスムーズ性の両方を統一的に表現できる新しい正則化付き NMF として、ディリクレ分布に基づく正則化付き NMF を提案する。この提案手法を以後ディリクレ NMF と呼ぶ。3.2 節では、ディリクレ分布に基づく正則化の動機について説明する。3.3 節でディリクレ分布及びその性質がスパース性やスムーズ性とどのように関連しているかについて述べる。3.4 節では、ディリクレ分布を事前分布として NMF の枠組みで MAP 推定を考えた場合の最適化問題を導き、ディリクレ NMF を定式化する。3.5 節では、3.4 節で定式化された最適化問題に対して補助関数法を適用し、ディリクレ NMF における変数行列の反復更新式を導出する。最後に、3.6 節で本章についてまとめる。

3.2 動機

前章で述べた通り、スパース性及びスムーズ性は、音響信号の時間周波数構造として一般的に現れる性質である。それゆえ音響信号処理分野では、あらゆる問題を解くうえでスパース性及びスムーズ性の仮定がとりわけ重要であり、NMF の文脈においても広く活用されるモデルである。NMF の歴史では、スパース性とスムーズ性の正則化法はそれぞれ独立に提案されており、前章で述べた最適化問題 (2.31) 及び (2.33) に何らかの関連性があるわけではなかった。しかしながら、Fig. 2.4 を用いて説明した通り、スパース性とスムーズ性が表裏一体となる（スパース性やスムーズ性を評価する方向を変えれば、性質が反転する）ような場合も存在し、これらの性質を統一的に扱えることができれば、より柔軟な正則化が可能となることが期待される。例えば、スパース性とスムーズ性の両方を一定のバランスで持つ潜在パターンの表現等が実現できるようになる。

そこで本論文では、ディリクレ分布がパラメータを変化させることでスパースな確率変数ベクトル及びスムーズな確率変数ベクトルの、両方の確率密度を制御できることに着目する。こ

のディリクレ分布を NMF の変数行列の事前分布と仮定することで、スパース性とスムーズ性の両正則化を 1 つの正則化項として統一的に表現できる新しい手法を提案する。提案手法は NMF の文脈で MAP 推定を適用する形で定式化できる。また、提案手法の最適化問題に対して補助関数法を適用し、従来の NMF とほぼ同様の反復更新式を導出する。補助関数法に基づく最適化アルゴリズムであることから、目的関数の単調非増加性が理論的に保証されているという利点がある。

3.3 ディリクレ分布

本論文の提案手法では、正則化付き NMF の事前分布として、スパース性又はスムーズ性を誘導するためにディリクレ分布を仮定する。ディリクレ分布は、0 から 1 の要素を持ち総和が 1 の確率変数ベクトルを生成する多変量分布である。これは、標準単体上の確率密度関数と解釈できる。標準単体とは、次式で定義されるような、非負性とノルム制約を満たすベクトルの集合である。

$$\mathcal{S}_{I-1} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^I \mid x_i \geq 0 \ \forall i, \sum_i x_i = 1 \right\} \quad (3.1)$$

ここで、 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_I]^T$ であり、 \mathcal{S}_{I-1} は $I-1$ 次元の標準単体であることを表している。例として、可視化が可能な 2 次元標準単体 ($I=3$) の場合について説明する。2 次元標準単体は次の条件を満たす集合として定義される。

$$\mathcal{S}_2 = \left\{ [x_1, x_2, x_3]^T \in \mathbb{R}^3 \mid x_1, x_2, x_3 \geq 0, x_1 + x_2 + x_3 = 1 \right\} \quad (3.2)$$

この標準単体 \mathcal{S}_2 の元であるベクトル \mathbf{x} が取りうる範囲を図示すると、Fig. 3.1 に示すような、 $[1, 0, 0]^T$ 、 $[0, 1, 0]^T$ 、及び $[0, 0, 1]^T$ の 3 点を頂点に持つ 3 次元空間中の正三角形になる。ディリクレ分布は、このような標準単体上の確率変数ベクトル \mathbf{x} の確率密度、つまり標準単体上の確率密度関数である。

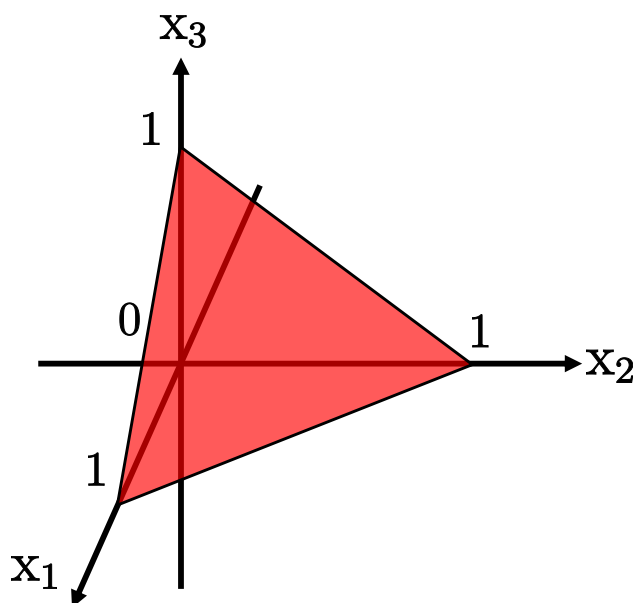
ディリクレ分布の確率密度関数は次式で表される。

$$\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x}; \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{B(\boldsymbol{\alpha})} \prod_i x_i^{\alpha_i - 1} \quad (3.3)$$

ここで、 $B(\boldsymbol{\alpha})$ は次式で表される多変量ベータ関数である。

$$B(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\prod_i \Gamma(\alpha_i)}{\Gamma(\sum_i \alpha_i)} \quad (3.4)$$

ただし、 $\Gamma(\cdot)$ はガンマ関数である。式 (3.3) 中の $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_I]^T \in \mathbb{R}_{>0}^I$ はディリクレ分布の持つパラメータベクトルである。ディリクレ分布のパラメータ $\boldsymbol{\alpha}$ は、各要素が確率密度の（標準単体の）各頂点への集中度に対応する。Fig. 3.1 に示す確率変数 \mathbf{x} が 3 次元の場合（2 次元標準単体 \mathcal{S}_2 の場合）のディリクレ分布の確率密度関数を Fig. 3.2 に示す。ここで、Fig. 3.2 中の正三角形の台は Fig. 3.1 の標準単体 \mathcal{S}_2 を示している。ディリクレ分布のパ

Fig. 3.1 Two-dimensional standard simplex S_2 .

ラメータを $\alpha_i < 1 \forall i$ とすると, Fig. 3.2 (a) 及び (b) のように確率密度はそれぞれの頂点に偏る. このとき, 確率変数ベクトル \mathbf{x} は $[1, 0, 0]^T$, $[0, 1, 0]^T$, 及び $[0, 0, 1]^T$ のように 1 個の成分のみが値を持つ one-hot ベクトルに近いものが生成されやすくなる. これは即ち, スパースなベクトルを生成しやすい分布となることを意味する. 逆に, ディリクレ分布のパラメータを $\alpha_i > 1 \forall i$ とすると, Fig. 3.2 (c) 及び (d) のように確率密度は中心付近に集中し, 全要素が近い値を持つベクトルが \mathbf{x} として生成されやすくなる. これは即ち, スムースなベクトルを生成しやすい分布となることを意味する. このようにディリクレ分布のパラメータ α は, それぞれの要素の値が大きくなるほど確率密度の中心付近への集中度が高くなる. α は要素毎に異なる値をとることもできる. 例えば $\alpha = [3, 0.9, 2]^T$ とした場合は, Fig. 3.2 (e) のように各頂点へのそれぞれの集中度が混合された確率密度関数となる. また, Fig. 3.2 (f) に示すように $\alpha_i = 1 \forall i$ とすると, 確率密度は標準単体上で一様な確率密度となる. このようにディリクレ分布では, パラメータ α によって生成される確率変数ベクトル \mathbf{x} を, スパース及びスムースのいずれにも誘導することが可能である. 前述の説明では $I = 3$ (2次元標準単体上) の確率変数ベクトルで示したが, 同様の議論は I 次元の確率変数ベクトルに対しても一般性を失うことなく成立する. 本論文では, 以上の性質を用いた正則化付き NMF を新たに提案する.

3.4 ディリクレ NMF の定式化

提案手法では, NMF の変数行列である基底行列 \mathbf{W} の各列ベクトル $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_K$ がディリクレ分布から生成されているという事前分布モデルを仮定する. 但し, この事前分布の仮定は本論文の 5 章の実験で活用可能な一例であり, 基底行列 \mathbf{W} の行ベクトルや係数行列 \mathbf{H} の列・行ベクトルに対しても同様に仮定することが可能である. その場合の, 本節と次節でそ

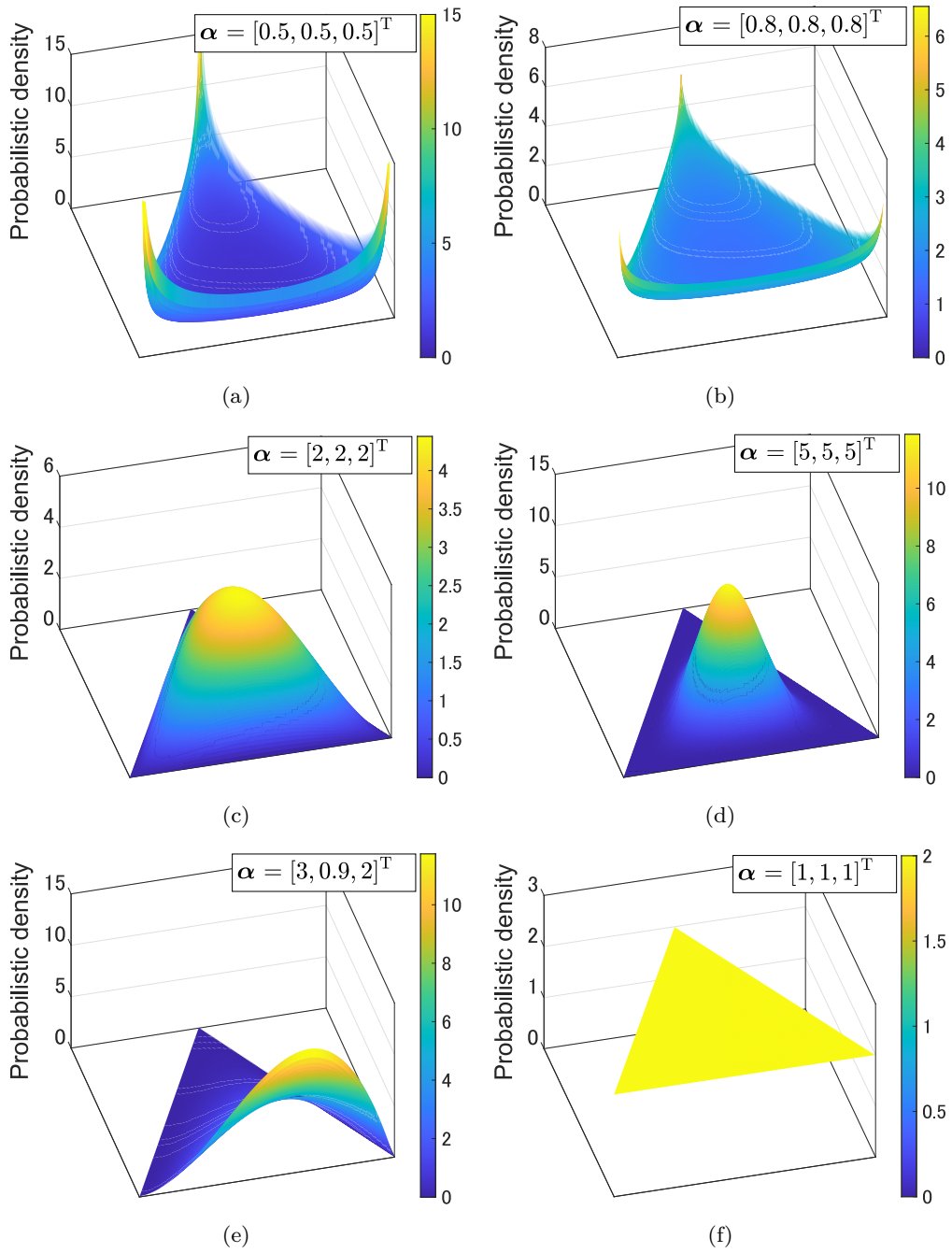


Fig. 3.2 Probabilistic density functions of Dirichlet distribution when $I = 3$: (a) $\alpha = [0.5, 0.5, 0.5]^T$, (b) $\alpha = [0.8, 0.8, 0.8]^T$, (c) $\alpha = [2, 2, 2]^T$, (d) $\alpha = [5, 5, 5]^T$, (e) $\alpha = [3, 0.9, 2]^T$, and (f) $\alpha = [1, 1, 1]^T$.

それぞれ述べる定式化及び反復更新式の導出は、一般性を失わず同様に議論可能である。今、基底ベクトル $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_K$ が次式のように I 次元ディリクレ分布に独立に従うと仮定する。

$$\mathbf{w}_k \sim p(\mathbf{w}; \mathbf{a}_k) \quad \forall k \text{ (independently distributed)} \quad (3.5)$$

ここで、 $\boldsymbol{\alpha}_k = [\alpha_{1,k}, \alpha_{2,k}, \dots, \alpha_{I,k}]^T \in \mathbb{R}_{>0}^I$ は \mathbf{w}_k を生成するディリクレ分布のパラメータベクトルである。ディリクレ分布の確率密度関数は次式となる。

$$p(\mathbf{w}_k; \boldsymbol{\alpha}_k) = \frac{1}{B(\boldsymbol{\alpha}_k)} \prod_i w_{i,k}^{\alpha_{i,k}-1} \quad (3.6)$$

但し、確率変数 \mathbf{w}_k はディリクレ分布に従うことから、次に示す非負性及びノルム制約を満たす。

$$w_{i,k} \geq 0 \quad \forall i, k \quad (3.7)$$

$$\|\mathbf{w}_k\|_1 = 1 \quad (3.8)$$

また、式 (3.5) の仮定より、基底行列全体の事前分布を次のように定義できる。

$$\begin{aligned} p(\mathbf{W}) &= p(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_K) \\ &= \prod_k p(\mathbf{w}_k) \end{aligned} \quad (3.9)$$

ここで、独立な確率変数の同時確率密度関数はそれぞれの確率変数の確率密度関数の積と等しいことを用いている。

続いて、式 (3.9) の事前分布を仮定した NMF の MAP 推定問題を定式化する。正則化項付きの目的関数を導出するため、式 (3.9) の負対数事前分布を $\mathcal{L}(\mathbf{W})$ と定義して求めると、次式となる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{W}) &= -\log p(\mathbf{W}) \\ &= -\log \prod_k p(\mathbf{w}_k) \\ &= -\sum_k \log p(\mathbf{w}_k) \\ &= -\sum_k \left[-\log B(\boldsymbol{\alpha}_k) + \sum_i (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k} \right] \\ &\stackrel{c}{=} \sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k}^{-1} \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\equiv \mathcal{R}(\mathbf{W}) \quad (3.11)$$

ここで、 $\stackrel{c}{=}$ は定数項の違いを除いて等しいことを意味する。式 (3.10) では、多変量ベータ関数由来の定数項が最適化問題の解に影響を与えないことを理由として、より簡便な定式化とするために定数項を無視した正則化項を $\mathcal{R}(\mathbf{W})$ として定義している。

以上より、式 (3.5) の事前分布仮定に基づく NMF の最適化問題は次のように定式化される。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) \quad \text{s.t.} \quad w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k, \quad \|\mathbf{w}_k\|_1 = 1 \quad \forall k \quad (3.12)$$

$$\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X} | \mathbf{W}\mathbf{H}) + \underbrace{\sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k}^{-1}}_{\mathcal{R}(\mathbf{W})} \quad (3.13)$$

注意点として、通常の NMF と比較して \mathbf{w}_k のノルム制約が新たに課せられている。そのため、この制約を満たす範囲で最小解を求める必要がある。

3.5 補助関数法に基づく反復更新式の導出

本節では、前節で定式化したディリクレ NMF の最適化問題に対して補助関数法を適用し、変数行列の反復更新式を導出する。ディリクレ NMF の目的関数は次式となる。

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) &= \sum_{i,j} \left[x_{i,j} \log \frac{x_{i,j}}{\sum_k w_{i,k} h_{k,j}} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right] + \sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k} \\ &= \sum_{i,j} \left[x_{i,j} \log x_{i,j} - x_{i,j} \log \sum_k w_{i,k} h_{k,j} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right] \\ &\quad + \sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k} \end{aligned} \quad (3.14)$$

2.2.2 項における KL-NMF の反復更新式の導出と同様に、式 (3.14) の第 2 項にイエンゼンの不等式を適用して補助関数 $\mathcal{J}^+ \geq \mathcal{J}$ を設計すると次式になる。

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta}) &= \sum_{i,j} \left[x_{i,j} \log x_{i,j} - x_{i,j} \sum_k \delta_{i,j,k} \log \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} - x_{i,j} + \sum_k w_{i,k} h_{k,j} \right] \\ &\quad + \sum_{i,k} (\alpha_{i,k} - 1) \log w_{i,k} \end{aligned} \quad (3.15)$$

KL-NMF の場合と同様に、補助変数 $\delta_{i,j,k}$ を導入している。 $\mathcal{J}^+ = \mathcal{J}$ の統合成立条件は次式となる。

$$\delta_{i,j,k} = \frac{w_{i,k} h_{k,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} \quad (3.16)$$

2.2.2 項で述べた KL-NMF に対する補助関数法の適用であれば、式 (3.15) を $w_{i,k}$ 及び $h_{k,j}$ でそれぞれ偏微分しゼロとおく停留点条件から反復更新式を得るが、この方法ではディリクレ分布のパラメータである $\alpha_{i,k} > 0$ を 1 未満とした際に、 $w_{i,k}$ 及び $h_{k,j}$ の非負制約を保証できない反復更新式しか得られない。また、その反復更新式は基底ベクトル \mathbf{w}_k に対するノルム制約も保証されなくなってしまう。このような反復更新式では、明らかにディリクレ NMF の最適化問題 (3.14) の解を得られない。この問題に対処するため、提案手法では、最適化問題 (3.14) で、本来の目的関数 $\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H})$ に課せられているノルム制約条件及び非負制約条件を、補助関数 $\mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta})$ の最小化問題における制約条件として考える。即ち、補助関数 $\mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta})$ に対して次式の等式・不等式制約条件付き最小化問題を考え、ラグランジュの未定乗数法とカルーシュークーンタッカー (Karush–Kuhn–Tucker: KKT) 条件を用いて解く。

$$\underset{\mathbf{W}, \mathbf{H}}{\text{Minimize}} \quad \mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \mathbf{\Delta}) \quad \text{s.t.} \quad \|\mathbf{w}_{i,k}\|_1 = 1 \quad \forall k, \quad w_{i,k}, h_{k,j} \geq 0 \quad \forall i, j, k \quad (3.17)$$

まず、基底ベクトルのノルム制約 $\|\mathbf{w}_k\|_1 = 1$ を考慮したラグランジュ関数は次式となる。

$$L = \mathcal{J}^+(\mathbf{W}, \mathbf{H}, \Delta) + \sum_k \mu_k \left(\sum_i w_{i,k} - 1 \right) \quad (3.18)$$

ここで、 $\mu_k \geq 0$ は制約条件に対応するラグランジュ乗数を表す。次に、非負値制約条件付き最適化問題の KKT 条件より、次式を得る。

$$w_{i,k} \frac{\partial L}{\partial w_{i,k}} = 0 \quad \forall i, k \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_{i,k}} \geq 0 \quad \forall i, k \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mu_k} = 0 \quad \forall k \quad (3.21)$$

式 (3.19) より L の最小解は $w_{i,k} = 0$ 又は $\partial L / \partial w_{i,k} = 0$ のいずれかを満たす。今、 $\partial L / \partial w_{i,k} = 0$ を満たす $w_{i,k}$ を $\hat{w}_{i,k}$ とおくと、 $w_{i,k} \geq 0$ 及び式 (3.20) の 2 条件より、 $\hat{w}_{i,k} \geq 0$ ならば $\hat{w}_{i,k}$ を最小解とし、 $\hat{w}_{i,k} < 0$ ならば $w_{i,k} = 0$ を最小解とすれば、最適化問題 (3.17) の $w_{i,k}$ に関する最小化ができる。即ち、 $h_{k,j}$ 及び $\delta_{i,j,k}$ を固定した際の $w_{i,k}$ の制約条件付き最小解は次式となる。

$$w_{i,k} = \begin{cases} \hat{w}_{i,k} & (\text{if } \hat{w}_{i,k} \geq 0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.22)$$

以後、 $\hat{w}_{i,k}$ を求める。 $\partial L / \partial w_{i,k} = 0$ より次式を得る。

$$\begin{aligned} \sum_j \left[-x_{i,j} \delta_{i,j,k} \frac{\delta_{i,j,k}}{\hat{w}_{i,k} h_{k,j}} \cdot \frac{h_{k,j}}{\delta_{i,j,k}} + h_{k,j} \right] - (a_k - 1) \frac{1}{\hat{w}_{i,k}} + \mu_k &= 0 \\ - \sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + \hat{w}_{i,k} \sum_j h_{k,j} - (\alpha_k - 1) + \hat{w}_{i,k} \mu &= 0 \\ \hat{w}_{i,k} \left(\sum_j h_{k,j} + \mu_k \right) &= \sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + \alpha_k - 1 \\ \hat{w}_{i,k} &= \frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + \alpha_{i,k} - 1}{\sum_j h_{k,j} + \mu_k} \end{aligned} \quad (3.23)$$

また、(3.21) より、次式を得る。

$$\begin{aligned} \sum_i \hat{w}_{i,k} - 1 &= 0 \\ \sum_i \hat{w}_{i,k} &= 1 \end{aligned} \quad (3.24)$$

これはノルム制約 $\|\mathbf{w}_k\|_1 = 1 \quad \forall k$ と等価である。このノルム制約 (3.24) に式 (3.22) を代入し、次式を得る。

$$\sum_i \max(\hat{w}_{i,k}, 0) = 1 \quad (3.25)$$

ここで、 $\max(\cdot, \cdot)$ は、入力値を比較し値の大きい方を返す演算である。式 (3.25) に式 (3.23) を代入し次式を得る。

$$\sum_i \max \left(\frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1}{\sum_j h_{k,j} + \mu_k}, 0 \right) = 1 \quad (3.26)$$

式 (3.26) の分母の符号を考えると、 $\sum_j h_{k,j} + \mu_k \geq 0$ より非負であるので、式 (3.26) 中の $\max(\cdot, \cdot)$ を分子のみに適用するように変形でき、次式となる。

$$\frac{\sum_i \max \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1, 0 \right)}{\sum_j h_{k,j} + \mu_k} = 1$$

$$\sum_i \max \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1, 0 \right) = \sum_j h_{k,j} + \mu_k \quad (3.27)$$

式 (3.27) を式 (3.23) の分母に代入して未定乗数 μ_k を消去すると、次式となる。

$$\hat{w}_{i,k} = \frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1}{\sum_i \max \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1, 0 \right)} \quad (3.28)$$

以上より、 $\hat{w}_{i,k}$ の制約付き最小解は次式となる。

$$\hat{w}_{i,k} = \begin{cases} \frac{\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1}{\sum_i \max \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1, 0 \right)} & \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 \geq 0 \right) \\ 0 & \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 < 0 \right) \end{cases} \quad (3.29)$$

式 (3.29) は補助関数 (3.15) の等式・不等式制約条件を考慮した最小解である。一方、係数行列 \mathbf{H} の更新式については、ディリクレ NMF の最適化問題 (3.12) の正則化項やノルム制約条件がいずれも \mathbf{H} には影響しないことから、単純な正則化無しの KL-NMF の反復更新式 (2.26) と同じ式となる。以上より本来の目的関数 (3.14) の最小化は $\mathcal{J} = \mathcal{J}^+$ の等号成立条件を用いて次のアルゴリズムとなる。

1. \mathbf{W} 及び \mathbf{H} を非負乱数で初期化
2. 補助変数 Δ を統合成立条件の式 (3.16) で更新
3. \mathbf{W} を補助関数の制約付き最小解の式 (3.29) で更新
4. \mathbf{H} を通常の KL-NMF の反復更新式 (2.26) で更新
5. 1.~4. を十分反復

なお、上記アルゴリズム中の 2 と 3 は、等号成立条件の式 (3.16) を \mathbf{W} の更新式 (3.29) に代入することで得られる次式として、1つのステップにまとめることができる。

$$\hat{w}_{i,k} = \begin{cases} \frac{w_{i,k} \sum_j \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} h_{k,j} + a_k - 1}{\sum_i \max \left(w_{i,k} \sum_j \frac{x_{i,j}}{\sum_{k'} w_{i,k'} h_{k',j}} h_{k,j} + a_k - 1, 0 \right)} & \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 \geq 0 \right) \\ 0 & \left(\sum_j x_{i,j} \delta_{i,j,k} + a_k - 1 < 0 \right) \end{cases} \quad (3.30)$$

また、式 (3.30) は、次のように行列形式で表現できる。

$$\mathbf{W} \leftarrow \frac{\mathbf{W} \odot \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T + \mathbf{A} - \mathbf{1}^{(I \times J)} \right)}{\left(\mathbf{1}^{(I \times J)} \right)^T \cdot \sum_j \max \left(\mathbf{W} \odot \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{W}\mathbf{H}} \mathbf{H}^T + \mathbf{A} - \mathbf{1}^{(I \times J)} \right), 0 \right)} \quad (3.31)$$

$$\mathbf{W} \leftarrow \max(\mathbf{W}, 0) \quad (3.32)$$

ここで、行列に対する $\max(\cdot, \cdot)$ は、要素毎に値を比較し、その最大値を要素を持つ同サイズの行列を返す演算である。以上より、本論文の提案手法であるディリクレ NMF の反復更新式が導出された。

3.6 まとめ

本章では、ディリクレ分布について説明し、ディリクレ分布を事前分布として持つ新たな正則化付き NMF の提案とその定式化について説明した。ディリクレ NMF は、スパース性とスムーズ性の両方を統一的に扱える手法である。本手法の有効性を確かめるため、次章ではディリクレ NMF と従来の NMF を非負行列に適用し、スパース性及びスムーズ性の正則化の効果を比較する実験を行う。

第 4 章

非負行列に対するディリクレ NMF の適用及び検証

4.1 はじめに

本章では、3章で導出したディリクレ NMF を非負行列に適用し、その結果よりディリクレ NMF の導出の正当性及び正則化の効果の確認を行う。4.2 節で本章で行う実験の目的について説明する。4.3 節では具体的な実験条件について説明する。4.4 節では実験の結果から、ディリクレ NMF が目的関数値の単調非増加性を保ちながら収束すること、また正則化パラメータを適切に設定することでスパース性及びスムーズ性を誘導できることの確認を行う。最後に、4.5 節で本章についてまとめる。

4.2 実験の目的

本章では、まず3章で導出したディリクレ NMF の反復更新式が、目的関数値の単調非増加性を保ちつつ収束するかを確認する。これを確認することで、補助関数法に基づく反復更新式が正しく導出されていることを裏付ける目的がある。また、ディリクレ NMF の正則化項のパラメータによってスパース性及びスムーズ性のいずれにも誘導ができることを実験で確認する。具体的には、Fig. 4.1 に示すように、スパース及びスムーズな成分を持つように作成した観測行列 \mathbf{X} に対し、正則化の無い単純な NMF 及びディリクレ NMF をそれぞれ適用し、得られる基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} を確認する。このとき、実際にスパース及びスムーズな特徴を持つパターンから構成される観測行列を作成しているため、ディリクレ NMF を適用する対象として理想的な観測行列を用意していることになる。この観測行列に対して、理想的なパラメータを設定したディリクレ NMF の推定結果は、スパース性やスムーズ性が期待通り再現されることを実験的に確認する。この実験によって、3章に示したディリクレ NMF のモデルとしての妥当性及び導出された反復更新式の正当性を示すことを目的とする。

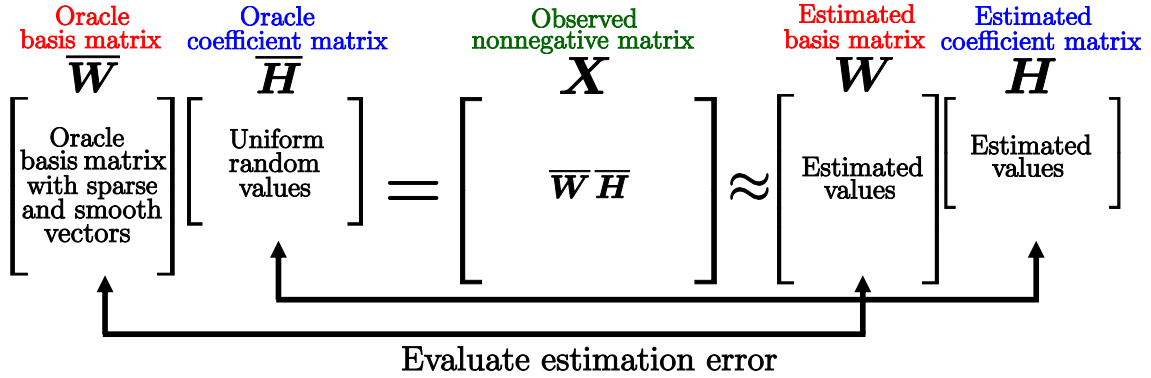


Fig. 4.1 Preparation of observed nonnegative matrix and evaluation criterion for comparing performances between simple and Dirichlet NMFs.

4.3 実験条件

実験では、Fig. 4.2 に示す 5 行 3 列の真の基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ 及び 3 行 10 列の真の係数行列 $\overline{\mathbf{H}}$ を作成した。このとき、基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ の 2 列は one-hot ベクトル（スパースなベクトルの一種）とし、残りの 1 列はすべての要素が同じ値のスムーズなベクトルとしている。また、係数行列 $\overline{\mathbf{H}}$ の各要素は区間 $(0, 1)$ の一様分布から生成した擬似乱数を用いた。作成した基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ 及び係数行列 $\overline{\mathbf{H}}$ の行列積を計算し、Fig. 4.3 に示す非負観測行列 \mathbf{X} を $\mathbf{X} = \overline{\mathbf{W}}\overline{\mathbf{H}}$ として作成した。実験では正則化の無い単純な NMF 及びディリクレ NMF で、観測行列 \mathbf{X} を基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} に近似的に分解し、真の基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ 及び係数行列 $\overline{\mathbf{H}}$ をどの程度の精度で予測できるのか、という点について、両手法で比較した。これらの NMF の基底数 K は非負観測行列 \mathbf{X} のランクと同じく $K = 3$ に設定し、反復更新式の反復回数を 100 回とした。基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} の初期値は区間 $(0, 1)$ の一様分布から生成した。このとき、基底行列 \mathbf{W} については初期値がディリクレ分布の $\sum_i w_{i,k} = 1 \forall i$ という制約を満たすように、次式のように各列ベクトルの正規化を行った。

$$\mathbf{w}_k \leftarrow \frac{\mathbf{w}_k}{|\mathbf{w}_k|_1} \forall k \quad (4.1)$$

同条件で比較を行うため、正則化の無い単純な NMF を適用する場合も、基底行列 \mathbf{W} の列方向の総和を 1 にする正規化を行った。また、正則化の無い単純な NMF においても、ディリクレ NMF と同様の実験条件となるように、反復更新ごとに基底行列 \mathbf{W} の列方向の総和が 1 になるように正則化を行い、係数行列 \mathbf{H} に正則化を行った係数の逆数を乗じ、 \mathbf{WH} の値が不変となるような処理を行った。これらの処理は次式で表される。

$$\gamma_k = |\mathbf{w}_k|_1 \quad (4.2)$$

$$\mathbf{w}_k \leftarrow \frac{\mathbf{w}_k}{|\mathbf{w}_k|_1} \forall k \quad (4.3)$$

$$\mathbf{h}_k \leftarrow \gamma_k \mathbf{h}_k \forall k \quad (4.4)$$

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

(a)

0.417	0.3023	0.1863	0.5388	0.2045	0.6705	0.1404	0.9683	0.8764	0.03905
0.7203	0.1468	0.3456	0.4192	0.8781	0.4173	0.1981	0.3134	0.8946	0.1698
0.0001144	0.09234	0.3968	0.6852	0.02739	0.5587	0.8007	0.6923	0.08504	0.8781

(b)

Fig. 4.2 Oracle nonnegative basis and activation matrices used in the experiment: (a) basis matrix $\overline{\mathbf{W}}$ including sparse and smooth column vectors and (b) coefficient matrix $\overline{\mathbf{H}}$ that consists of uniform random values.

実験では、ディリクレ NMF のパラメータを $\alpha_1 = \alpha_2 = [0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5]^T$ 及び $\alpha_3 = [1.5, 1.5, 1.5, 1.5, 1.5]^T$ に設定した。これらのパラメータは、ディリクレ分布のパラメータの性質 ($\alpha_{i,k} < 1$ のときはスパース性に誘導, $\alpha_{i,k} > 1$ のときはスムーズ性に誘導) より、 \mathbf{W} の 1 列目及び 2 列目 (\mathbf{w}_1 及び \mathbf{w}_2) はスパースなベクトル, 3 列目 (\mathbf{w}_3) はスムーズなベクトルとなるように誘導される。

0.7203	0.1652	0.4249	0.5562	0.8836	0.529	0.3583	0.4519	0.9116	0.3455
2.287e-05	0.01847	0.07935	0.137	0.005478	0.1117	0.1601	0.1385	0.01701	0.1756
0.417	0.3208	0.2656	0.6759	0.2099	0.7822	0.3005	1.107	0.8934	0.2147
2.287e-05	0.01847	0.07935	0.137	0.005478	0.1117	0.1601	0.1385	0.01701	0.1756
2.287e-05	0.01847	0.07935	0.137	0.005478	0.1117	0.1601	0.1385	0.01701	0.1756

Fig. 4.3 Observed nonnegative matrix \mathbf{X} obtained by multiplying $\overline{\mathbf{W}}$ and $\overline{\mathbf{H}}$.

4.4 実験結果

4.4.1 単調非増加性の確認

ディリクレ NMF の目的関数の反復毎の値 ($\mathcal{J}(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{X}|\mathbf{W}\mathbf{H}) + \mathcal{R}(\mathbf{W})$) を Fig. 4.4 に示す. この目的関数の反復毎の値から, ディリクレ NMF が単調非増加, すなわち各反復で目的関数値が増加しない性質を持つことを確認する. Fig. 4.4 より, 目的関数の値は反復毎に同じ値か減少した値になっており, ディリクレ NMF の単調非増加性を確認できる. この単調非増加性は反復更新式が補助関数法に基づいて導出されていることに起因する性質であり, 実用の上で最適化が容易になる利点がある. すなわち, 基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} を適当な乱数で初期化して目的関数の値が収束するまで反復更新式を計算すればよく, ステップサイズ等の最適化に関するパラメータに注意を払う必要がない. また, Fig. 4.4 を見ると, 本実験で用いた条件においては, およそ 20 回程度の反復で目的関数の変化はなくなり, ほとんど収束している様子が伺える. これは正則化の無い単純な NMF でも同様であり, ディリクレ NMF の反復更新式による最適化が特別遅いといった欠点は観察されなかった.

4.4.2 正則化の効果の確認

正則化の無い単純な NMF 及びディリクレ NMF を, 4.2 節で作成した非負観測行列 \mathbf{X} にそれぞれ適用し, 推定された基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} を Figs. 4.5 及び 4.6 に示す. 本実験では, これらの推定結果が Fig. 4.2 の真の基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ 及び係数行列 $\overline{\mathbf{H}}$ とどの程度近いかを評価する. 正則化の無い単純な NMF で推定された基底行列 \mathbf{W} (Fig. 4.5 (a)) と真の基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ (Fig. 4.2 (a)) を比較すると, \mathbf{W} の 1 列目及び 2 列目のベクトルはややスパースに

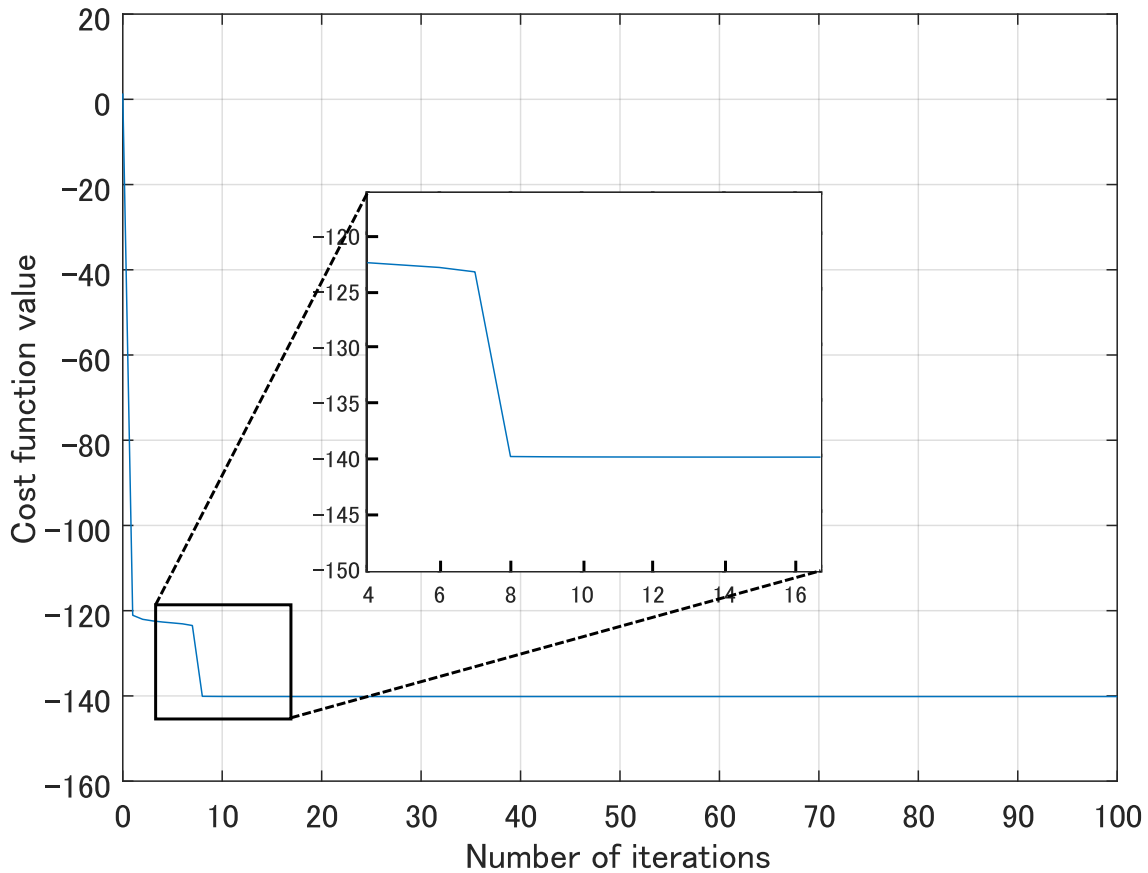


Fig. 4.4 Convergence behavior of Dirichlet NMF.

なっているが、 $\overline{\mathbf{W}}$ ではゼロ値であった要素にも非ゼロの値を持っていることがわかる。また、3列目のベクトルはスムーズではなく、1列目や2列目のベクトルで大きな値を持つ行の要素が真の基底行列の対応する要素と大きく異なる。一方で、ディリクレ NMF で推定された基底行列 \mathbf{W} (Fig. 4.6 (a)) 及び作成した真の基底行列 $\overline{\mathbf{W}}$ (Fig. 4.2 (a)) を比較すると、すべての列ベクトルが完全に推定できていることが分かる。この結果は、ディリクレ NMF においてパラメータが各列に対して適切に設定されていたためと推測できる。これにより、ディリクレ NMF の正則化項のパラメータによって、スパース性やスムーズ性のいずれの方向にも適切に誘導ができることが確認された。また、係数行列 \mathbf{H} の推定結果にも注目すると、正則化の無い単純な NMF で推定された \mathbf{H} (Fig. 4.5 (b)) は $\overline{\mathbf{H}}$ と比較してある程度の誤差を含んでいるのに対し、ディリクレ NMF で推定された \mathbf{H} (Fig. 4.6 (b)) は $\overline{\mathbf{H}}$ とほぼ一致していることが分かる。これは、基底行列 \mathbf{W} の推定精度が向上したことにより、間接的に係数行列 \mathbf{H} の推定精度も向上したものと考えられる。このようにディリクレ NMF で推定された基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} の推定結果は、正則化の無い単純な NMF の推定結果よりも正確に推定できていることが確認できた。

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

(a)

0.1908	0.3024	0.1971	0.6257	2.22e-16	0.7339	0.3024	1.117	0.6972	0.2141
0.935	0.1694	0.3375	0.3636	1.073	0.3982	0.01888	0.2418	1.134	0.0002197
2.22e-16	0.06597	0.4161	0.6848	0.03104	0.5316	0.8722	0.6323	1.885e-07	0.9334

(b)

Fig. 4.5 Estimated basis and activation matrices obtained by simple NMF without regularization: (a) basis matrix \mathbf{W} and (b) coefficient matrix \mathbf{H} .

4.5 まとめ

本章では、ディリクレ NMF を用いた実験を行い、正則化の効果の確認と目的関数の反復毎の値の単調非増加性を確認した。ディリクレ NMF の正則化項のパラメータによって、スパース性やスムーズ性のいずれの方向にも行列の構造を誘導ができることが確認できた。これにより、正則化によるスパース性・スムーズ性の誘導が想定通り可能であることを確認できた。次章では、ディリクレ NMF を打楽器の音響信号の時間周波数構造のモデル化に適用し、正則化の効果について検証する。

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

(a)

0.417	0.3023	0.1863	0.5388	0.2045	0.6705	0.1404	0.9683	0.8764	0.03904
0.7203	0.1468	0.3456	0.4192	0.8781	0.4173	0.1981	0.3134	0.8946	0.1698
0.0001144	0.09234	0.3968	0.6852	0.02739	0.5587	0.8008	0.6923	0.08504	0.8782

(b)

Fig. 4.6 Estimated basis and activation matrices obtained by Dirichlet NMF: (a) basis matrix \mathbf{W} and (b) coefficient matrix \mathbf{H} .

第 5 章

ディリクレ NMF に基づく打楽器スペクトル表現

5.1 はじめに

4 章では、ディリクレ NMF のモデル及び反復更新式の正当性を実験的に確認した。本章では、ディリクレ NMF を実際の音響信号の時間周波数構造のモデル化に適用し、その効果を確認する。特に、Fig. 2.5 (a) に示すような打楽器音のスペクトルを一例として用いる。5.2 節でディリクレ NMF を音響信号の時間周波数構造のモデル化に適用する実験の目的を説明する。5.3 節では本実験の条件について具体的に述べる。5.4 節で、実験結果から得られるディリクレ NMF の特徴と恩恵について考察を加える。最後に、5.5 節で本章についてまとめる。

5.2 実験の目的

通常の NMF は推定される変数行列の基底の順番は定まっておらず、これを事前に予測することは難しい。これは、NMF の反復更新を行う際の基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} の初期値を乱数に設定することに起因している。乱数ではなく定数を初期値とすれば、それに応じた同一の推定結果が常に得られることになるが、NMF の最適化問題が非凸であることを考慮すると、様々な初期値で多様な結果を得ることは重要である。あらかじめ推定される基底の順序が予測できない場合、推定結果を見て何らかの方法で基底を認識又はソートする必要があるが、これは容易ではない。例えば、NMF で音響信号の時間周波数構造をモデル化し、音高毎の基底と係数を推定して自動採譜を行う場合、どの基底がどの楽器及び音高のスペクトルに対応するかを、事前に予測するか推定結果を分析して認識（ラベル付け）しなければならない。従って、自動採譜の実現には、この問題を解決する処理が NMF の後段で必要となり、実用性や効率性などが低下する原因となる。NMF の推定結果において、初期値の乱数を変動させたとしても、常に決まった順序で基底が推定される（あるいは事前に順序を予測できる）ならばこの問題は解決されるため、正則化によって基底の推定される順序を制御し初期値に対する頑健性

を向上できれば、自動採譜のみならず多くの応用において有用である。

そこで本章では、ディリクレ NMF で導入している正則化の性質（基底のスパース性及びスムーズ性の誘導）を活用し、音のスペクトルの周波数に対するスパース性・スムーズ性の違いを用いて、正則化のパラメータで事前に指定しておくことで、基底の順序を制御できるかを実験で確認する。事前に指定したディリクレ分布のパラメータに基づいて基底の順序を制御できれば、前述の基底の順序が変動する問題を NMF の段階で解決することが可能となる。

5.3 実験条件

実験では、ディリクレ NMF を打楽器の音響信号の時間周波数構造のモデル化に適用する。本実験で用いる打楽器の音響信号は、一般的なドラムセットのバスドラム (bass drum: BD), スネアドラム (snare drum: SN), 及びハイハット (hihat: HH) の3種類の楽器音から成る。これらの楽器音信号はシンセサイザーを用いて人工的に合成した。この音響信号に STFT を適用し、Fig. 5.1 の振幅スペクトログラムを用意した。この振幅スペクトログラムを観測行列 \mathbf{X} として、Fig. 5.2 のように基底数が $K = 3$ の条件で正則化の無い単純な NMF 及びディリクレ NMF を適用する。ここで、ディリクレ NMF においてはパラメータ α_1 , α_2 , 及び α_3 を事前に設定しておくことで、乱数初期値に依らず常に \mathbf{w}_1 が BD, \mathbf{w}_2 が SN, \mathbf{w}_3 が HH のスペクトルをそれぞれ表すように誘導する。パラメータの設定値は Fig. 5.3 に示す BD, SN, 及び HH のスペクトルを参考として、そのスパース度及びスムーズ度より $\alpha_1 = [1, 1, \dots, 1]^T$, $\alpha_2 = [18, 18, \dots, 18]^T$, 及び $\alpha_3 = [65, 65, \dots, 65]^T$ と設定した。ただし、設定の簡便化のために全周波数に対して同じ値のパラメータベクトルとしている。これらの設定は、BD, SN, HH の順番で徐々にスムーズ性が高くなる、という仮定に対応している。基底行列 \mathbf{W} 及び係数行列 \mathbf{H} の初期値は区間 $(0, 1)$ の一様乱数から生成された乱数とし、この乱数を 1000 通り用意して正則化の無い単純な NMF 及びディリクレ NMF を適用した。推定される基底の順番は Fig. 5.3 に示す 6 通りであるため、もし NMF の基底の順序がランダムに推定されるならば、推定結果があらかじめ意図した順序 (\mathbf{w}_1 が BD, \mathbf{w}_2 が SN, \mathbf{w}_3 が HH) となる確率はおよそ 17% である。従って、ディリクレ NMF を適用した結果、意図した通りの基底の順序となる確率が 17% を大幅に上回っている場合、正則化によって基底の順序が制御ができると確認できる。なお、基底の順番の判定については、得られた個々のランク 1 成分 $\mathbf{w}_k^T \mathbf{h}_k$ に、観測信号の位相スペクトルを付与して逆 STFT を適用することでそれぞれ時間波形に戻し、これらの信号と観測信号中の各楽器音のリファレンス信号間で音源分離性能値 [26] を算出することで基底の順番を判定した。実応用においては各楽器音のリファレンス信号が使えないため、このような認識手法を使うことはできない点に注意する。

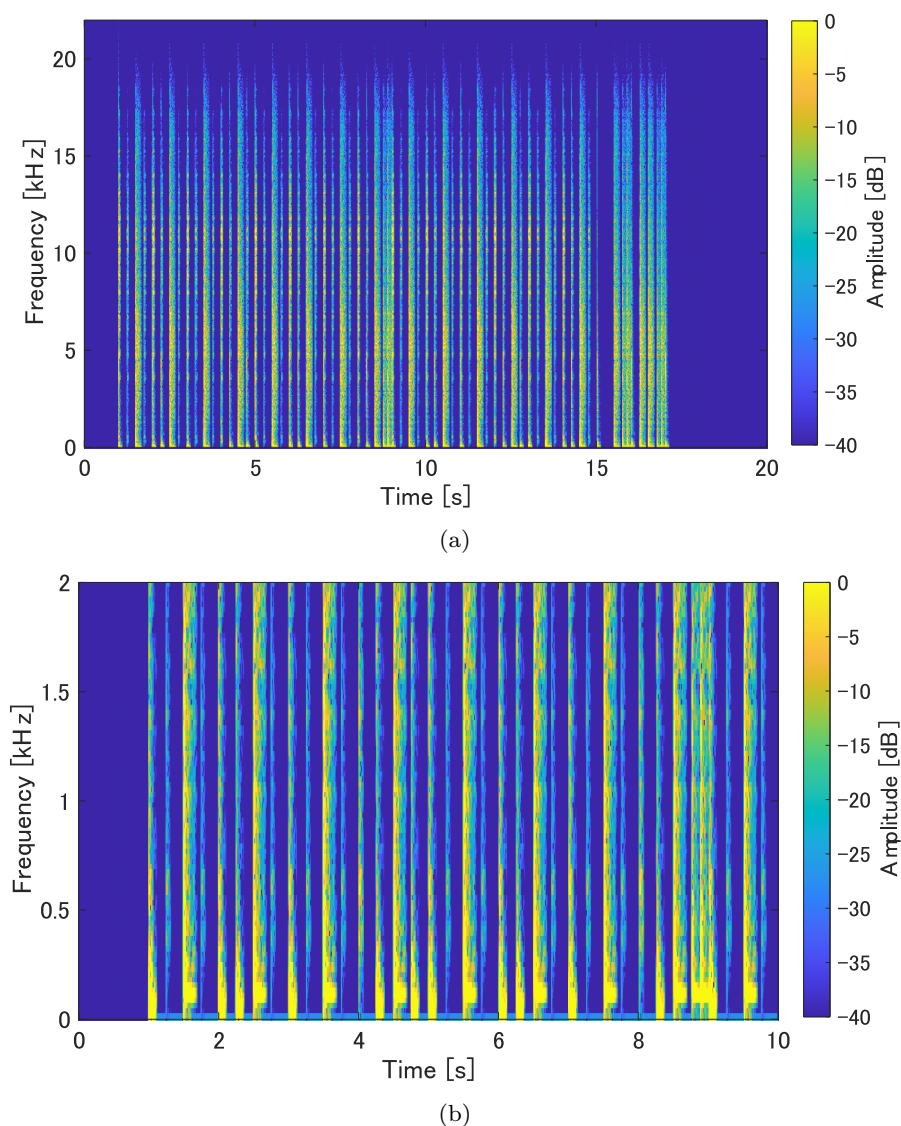
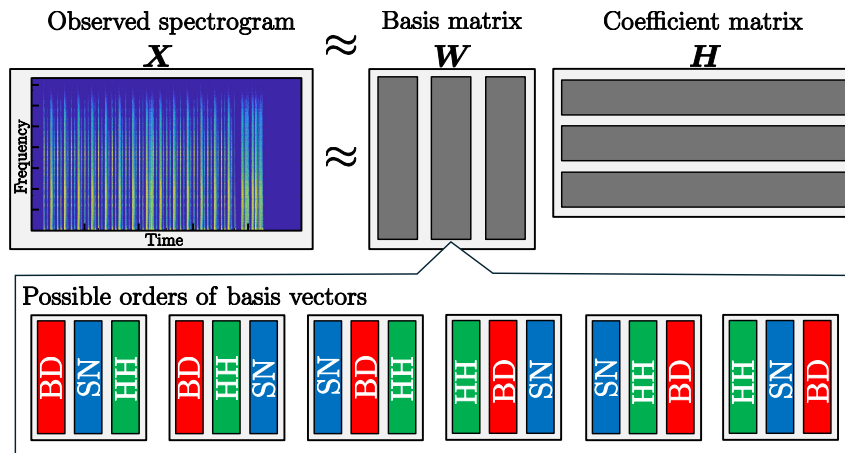


Fig. 5.1 Amplitude spectrograms of artificial drums signal: (a) entire signal and (b) enlarged view of 0–2 kHz and 0–10 s.

5.4 実験結果

正則化の無い単純な NMF で推定された基底が意図した順番通りとなったのは 1000 種類の乱数初期値のうち 176 種類であり、おおよそ 18 % であった。一方で、ディリクレ NMF の場合は 1000 種類の乱数初期値のうち 934 種類で意図した順番の基底が得られ、おおよそ 93 % の確率で基底の誘導に成功した。この結果より、ディリクレ NMF は正則化を用いて乱数初期値に対する推定結果の（基底の順序に関する）頑健性を向上させることができることが明らかとなった。本実験ではパラメータの設定を全ての周波数で同じ値としたが、例えば I 次元の要

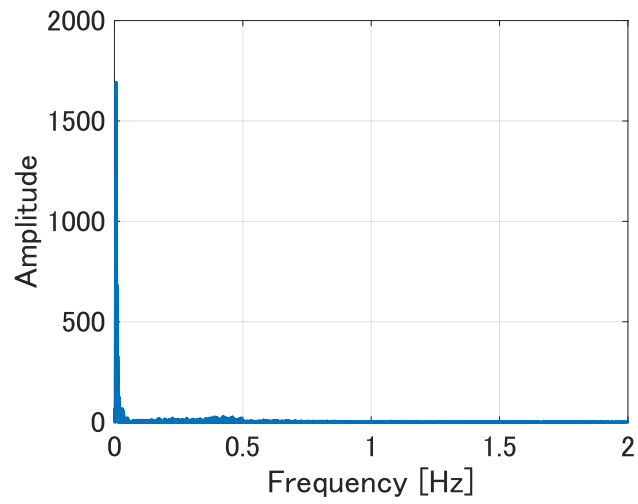
Fig. 5.2 Possible orders of estimated basis vectors when $K = 3$.

素を持つパラメータベクトル α を Fig. 5.3 の振幅スペクトル値（又はその定数倍）にすれば、Fig. 5.3 のスペクトルとほぼ同じ基底に誘導でき、乱数初期値に対する頑健性をさらに向上できると思われる。

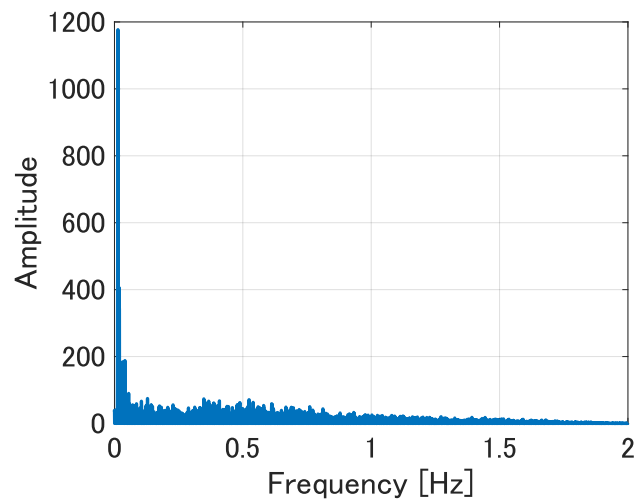
最後に、ディリクレ NMF で得られた基底 w_1 , w_2 , 及び w_3 の一例を Fig. 5.4 に示す。これらを Fig. 5.3 の各スペクトルと比較すると、BD 及び SN においてはスペクトル概形がおおむね一致しており、ある程度正確にモデル化できていることが分かる。一方で、HH については、本来のスペクトルとは大きく異なる基底が推定されており、これはパラメータ α_3 の設定値を大きくしすぎたことから、過度にスムーズ性が強調された結果と考えられる。より良いパラメータを見つけることができれば、基底の順序とモデル化の精度を両方向上させることができると思われるが、最適なパラメータの決定方法については今後の課題となる。以上の実験結果より、ディリクレ NMF は乱数初期値に依存する基底の順序の不定性を大幅に低減することができ、事前に意図した基底の順番に高い確率で誘導できることが明らかとなった。

5.5 まとめ

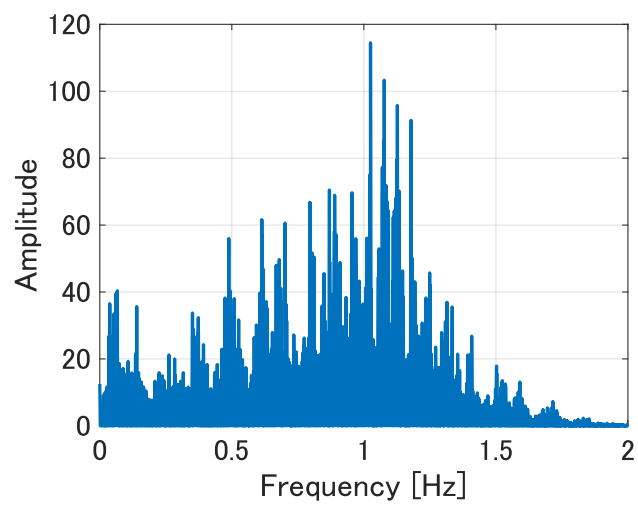
本章では、打楽器の音響信号にディリクレ NMF を適用し、パラメータを適切に設定することで推定される基底の順序を制御できることを確認した。この結果は、NMF における初期値依存性の問題を正則化によって解決することができるという事実を示しており、NMF を用いる多くの応用において基底の順序の不定性に起因する問題を解決する糸口になると期待される。次章では、本論文についてまとめ、今後について説明する。



(a)

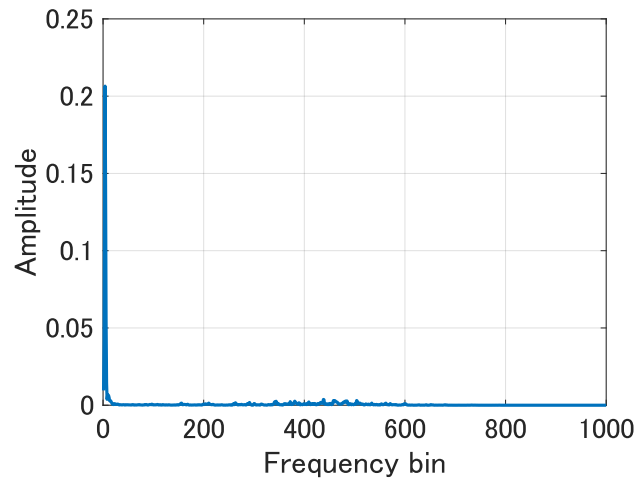


(b)

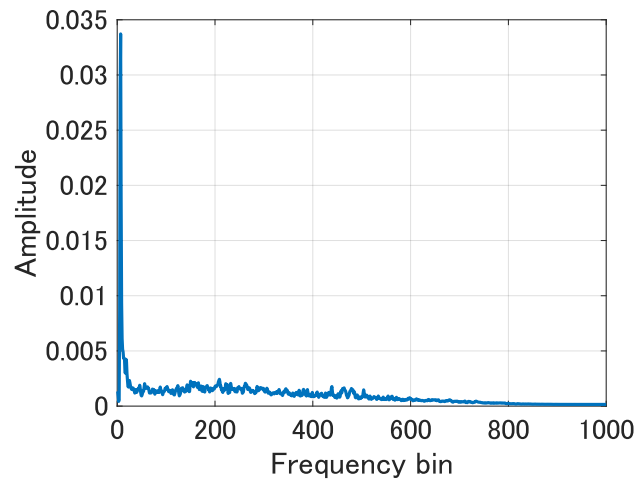


(c)

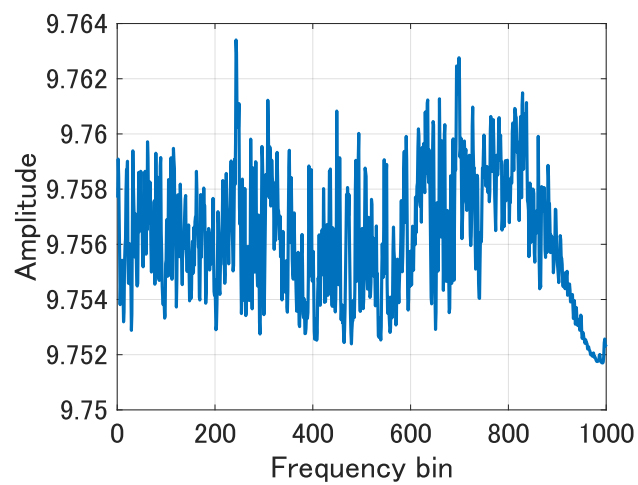
Fig. 5.3 Amplitude spectra of synthesized (a) BD, (b) SN, and (c) HH sounds.



(a)



(b)



(c)

Fig. 5.4 Estimated bases of (a) BD, (b) SN, and (c) HH sounds obtained by Dirichlet NMF.

第6章

結言

本論文では、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を提案した。1章で NMF の活用方法や正則化付き NMF について紹介し、本論文の目的について述べた。2章では、NMF の基礎理論の説明及び NMF の定式化を行った。また、正則化付き NMF の説明について説明しその活用例についても説明した。3章では、ディリクレ分布について説明し、本論文の提案手法であるディリクレ分布を事前仮定にもつ正則化付き NMF の導出を行った。また、ディリクレ NMF の反復更新式の導出を行った。4章では、ディリクレ NMF の誘導の効果の確認と補助関数法の単調非増加性の確認を行った。この実験によりディリクレ NMF の正則化の効果と導出の正当性の確認を行った。5章では、打楽器の音響信号にディリクレ NMF を適用し、パラメータを適切に設定することで推定される基底の順序を制御できることを確認した。これにより、NMF における初期値依存性の問題を正則化によって解決することができる事を確認した。

最後に今後の課題を述べる。今回の実験では打楽器の音響信号に対してディリクレ NMF を適用し、ディリクレ NMF のパラメータを繰り返し検証することで高い推定精度を得られるパラメータを探索した。しかし、この方法ではかなりの試行回数を必要としており現実的ではない。そこで、あらかじめ正解となるスペクトルの値などをパラメータとして与えることで学習を行う教師あり NMF への応用が考えられる。また、本研究では打楽器に焦点を当てたが、ディリクレ NMF の特性を活かすことで、スパース性及びスムーズ性が現れる他の音響信号にも適用可能である。今後はそのような音響信号に対しても本手法を適用し、より広い範囲での有効性及び汎用性の検討を行いたい。

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に基づくものです。

まず、本研究を進めるにあたり、ご多忙のところ熱心にご指導くださいまし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。北村大地准教授には、論文執筆や研究に関する議論など、細部にわたるまで丁寧にご指導いただきました。

本論の副査である村上幸一教授には、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。

北村研究室の先輩である専攻科生の綾野翔馬氏、蓮池郁也氏、加藤大輝氏、鈴木慶氏、和気佑弥氏には、論文執筆に関するアドバイス等をはじめ、数々のご支援をいただきました。特に加藤大輝氏には、論文執筆のメンターとして多くの時間を割いて校正や内容改善の助言を頂き、大きな支えとなりました。ここに改めて深く感謝申し上げます。また、北村研究室同期の谷野宮蒼士氏、夏山翠温氏には、ゼミや日頃のディスカッションのほか、1年に亘る研究室生活を様々な面で支えていただきました。ここに感謝申し上げます。

最後になりますが、現在に至るまで私の学生生活を金銭的に支え、暖かく見守って下さった両親には感謝の念に堪えません。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, “Algorithms for non-negative matrix factorization,” in *Proc. Adv. Neural Info. Process. Syst.*, vol. 13, pp. 556–562, 2000.
- [2] N. Bertin, R. Badeau, E. Vincent, “Enforcing harmonicity and smoothness in Bayesian non-negative matrix factorization applied to polyphonic music transcription,” *IEEE Trans. Audio, Speech, Lang. Process.*, vol. 18, no. 3, pp. 538–549, 2010.
- [3] E. Benetos, S. Dixon, Z. Duan, and S. Ewert, “Automatic music transcription: An overview,” *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 36, no. 1, pp. 20–30, 2019.
- [4] J. Driedger, T. Prätzlich, and M. Müller, “Let it bee — towards NMF-inspired audio mosaicing,” in *Proc. Int. Society for Music Info. Ret. Conf.*, pp. 350–356, 2015.
- [5] 北村大地, 香西海斗, “基底共有型非負値行列因子分解を用いた楽器音の音色変換,” *音楽情報科学研究会 第 131 回音楽情報科学研究会*, vol. 2021-MUS-131, no. 10, pp. 1–6, 2021.
- [6] C. Févotte, E. Vincent, and A. Ozerov, “Single-channel audio source separation with NMF: Divergences, constraints and algorithms,” in *Audio Source Separation*, S. Makino, Ed., pp. 1–24. Springer, Cham, 2018.
- [7] Y. Iwase and D. Kitamura, “Supervised audio source separation based on nonnegative matrix factorization with cosine similarity penalty,” *IEICE Trans. Fundamentals*, vol. E105-A, no. 6, pp. 906–913, 2022.
- [8] P. O. Hoyer, “Non-negative matrix factorization with sparseness constraints,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 5, pp. 1457–1469, 2004.
- [9] J. Eggert and E. Körner, “Sparse coding and NMF,” in *Proc. IEEE Int. Joint Conf. Neural Netw.*, vol. 4, pp. 2529–2533, 2004.
- [10] M. N. Schmidt and R. K. Olsson, “Single-channel speech separation using sparse non-negative matrix factorization,” in *Proc. INTERSPEECH*, pp. 2734–2737, 2006.
- [11] J. Le Roux, F. Weninger, and J. R. Hershey, “Sparse NMF – half-baked or well done?,” Mitsubishi Electric Research Laboratories, Technical Report TR2015-023, 2015.
- [12] R. Fabregat, N. Pustelnik, P. Gonçalves, and P. Borgnat, “Solving NMF with smoothness and sparsity constraints using PALM,” *arXiv preprint arXiv:1910.14576*, 2019.
- [13] A. Marmin, J. H. d. M. Goulart, and C. Févotte, “Majorization-minimization for

- sparse nonnegative matrix factorization with the β -Divergence,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 71, pp. 1435–1447, 2023.
- [14] C. Févotte, N. Bertin and J. L. Durrieu, “Nonnegative matrix factorization with the Itakura-Saito divergence: With application to music analysis,” in *Neural Comput.*, vol. 21, pp. 793–830, 2009.
- [15] T. Virtanen, “Monaural sound source separation by nonnegative matrix factorization with temporal continuity and sparseness criteria,” *IEEE Trans. Audio, Speech, Lang. Process.*, vol. 15, no. 3, pp. 1066–1074, 2007.
- [16] X. Fu, W. Cao, and N. D. Sidiropoulos, “Minimum-volume-constrained nonnegative matrix factorization,” *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 20, no. 1, pp. 1–4, Jan. 2013.
- [17] X. Fu, K. Huang, and N. D. Sidiropoulos, “Minimum-volume rank-deficient nonnegative matrix factorization,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 67, no. 15, pp. 3953–3966, Aug. 2019.
- [18] V. Leplat, N. Gillis, and A. M. S. Ang, “Blind audio source separation with minimum-volume beta-divergence NMF,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 68, pp. 3400–3410, 2020.
- [19] K. Lange, “MM optimization algorithms,” Philadelphia, SIAM, 2016.
- [20] D. R. Hunter and K. Lange, “Quantile regression via an MM algorithm,” *J. Comput. Graph. Stat.*, vol. 9, no. 1, pp. 60–77, 2000.
- [21] 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 Trans. Audio, Speech, Lang. Process.*, vol. 23, no. 4, pp. 654–669, 2015.
- [22] D. FitzGerald, M. Cranitch, and E. Coyle, “On the use of the beta divergence for musical source separation,” in *Proc. Irish Signals Syst. Conf.*, 2009.
- [23] 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 Trans. Fundamentals*, vol. E97-A, no. 5, pp. 1113–1118, 2014.
- [24] T. J. Gardner and M. O. Magnasco, “Sparse time-frequency representations,” in *Proc. the National Academy of Sciences*, vol. 103, no. 16, pp. 6094–6099, 2006.
- [25] 矢田部浩平, “第六回：時間周波数領域のスパース表現,” *日本音響学会誌*, vol. 77, no. 9, pp. 609–616, 2021.
- [26] E. Vincent, R. Gribonval, and C. Févotte, “Performance measurement in blind audio source separation,” *IEEE Trans. Audio, Speech, Lang. Process.*, vol. 14, no. 4, pp. 1462–1469, 2006.

発表文献一覧

国内学会

1. 小川遼, 北村大地, 綾野翔馬, “スムーズ正則化付き NMF と打楽器スペクトル表現への適用,” 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. 10, 2024.
2. 小川遼, 北村大地, 綾野翔馬, “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,” 日本音響学会 2025 年春季研究発表会講演論文集, 2025 (in press).

付録 A

補助関数法で利用される不等式

A.1 イェンゼンの不等式

補題 A.1. (イェンゼンの不等式) $\alpha_i > 0$ 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.