非負値行列因子分解のアフィン代数多様体としての次元について

On the Dimension of Affine Algebraic Variety of Non-negative Matrix Factorization

松田　健*
Takeshi MATSUDA

Abstract: The purpose of this paper is to investigate the solution space of non-negative matrix factorization. In this paper, we will deal with simple case of non-negative matrix factorization and survey the property of an ideal in non-negative matrix factorization.

1．はじめに

非負値行列因子分解とは，与えられた非負値の要素をもつ行列Tを．以下のように非負値の要素をもつ２つの行列A,Bの積に分解することをいう．

$$T = AB \qquad (1)$$

ここで，T,A,Bはそれぞれ以下のような$n\times m$行列，$n\times p$行列，$p\times m$行列であるとする．

$$T=\left(t_{i_1,j_1}\right)_{1\le i_1\le n,1\le j_1\le m},\quad t_{i_1,j_1}\ge 0$$

$$A=\left(a_{i_2,j_2}\right)_{1\le i_2\le n,1\le j_2\le p},\quad a_{i_2,j_2}\ge 0$$

$$B=\left(b_{i_3,j_3}\right)_{1\le i_3\le p,1\le j_3\le m},\quad b_{i_3,j_3}\ge 0$$

非負値行列因子分解は，以下の例が示す通り一意的でない．

$$\begin{pmatrix}1&0\\2&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&3\\1&0\end{pmatrix}$$

しかしながら，このような分解の一意性が成り立たないにも関わらず，非負値行列因子分解は非負値で表現されるデータを扱う，例えば，音響信号処理[1]や画像解析[2]といった分野で応用されており，その有用性が知られている．非負値因子行列分解を実現するアルゴリズムはLee[3]らによって与えられており，このアルゴリズムを改良する多くの研究が行われている．

本研究では，非負値行列因子分解をパラメータ付きの連立多項式の解を求める問題と捉え，それから得られるアフィン代数多様体とその定義イデアルがもつ性質について調べる．本稿の構成は以下の通りである．２章では非負値行列因子分解を実現する際にあるアフィン代数多様体を考えていることを示し，非負値行列因子分解を実現するLee[3]らのアルゴリズムを紹介する．３章では単純な場合の非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体の不変量がもつ性質について調べ，４章でまとめを行う．

2．非負値行列因子分解のアルゴリズム

（1）式は，以下の連立多項式を表現するものである．

$$f_{ij}\left(a_{i1},a_{i2},\cdots,a_{ip},b_{1j},b_{2j},\cdots,b_{pj}\right)=t_{ij} \qquad (2)$$

ただし，$1\le i\le n,1\le j\le m$であり，

$$f_{ij}\left(a_{i1},a_{i2},\cdots,a_{ip},b_{1j},b_{2j},\cdots,b_{pj}\right)=\sum_{k=1}^{p}a_{ik}b_{kj}$$

とおいた．$t_{ij}\left(1\le i\le n,1\le j\le m\right)$は与えられるデータであるため，非負値因子行列の目標は（2）式を満足する$a_{i1},a_{i2},\cdots,a_{ip},b_{1j},b_{2j},\cdots,b_{pj}\left(1\le i\le n,1\le j\le m\right)$を求めることになる．したがって，非負値行列因子分解を求めることは座標の値がすべて非負であるという制約をもつ実アフィン代数多様体

$$V\left(f_{ij}\right)=\left\{\left(a_{i_2j_2},b_{i_3j_3}\right)\middle|f_{ij}=t_{ij},a_{i_2,j_2}\ge 0,b_{i_3,j_3}\ge 0\right\} \qquad (3)$$

について考えていることに他ならない．本稿ではこれを，非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体と呼ぶことにする．非負値行列因子分解を実現するアルゴリズムは，Lee[3]らや他の研究者によって与えられているが，それらは（3）式で与えられるアフィン代数多様体$V\left(f_{ij}\right)$を考えるのではなく，以下のようにして定義される関数を制約条件

2014年2月28日受理
*　総合情報学部　コンピュータシステム学科

$$a_{i_2,j_2} \geq 0, b_{l_3,j_3} \geq 0$$

のもとで最小にする行列 A, B を求めている．したがって，後者の方法で求めた非負値行列因子分解では，厳密には（1）式は成立しない．

$$d_1 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \left(f_{ij} - t_{ij}\right)^2 \quad (4)$$

$$d_2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \left(t_{ij} - \log \frac{t_{ij}}{f_{ij}} - t_{ij} + f_{ij}\right) \quad (5)$$

$$d_3 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \left(\frac{t_{ij}}{f_{ij}} - \log \frac{t_{ij}}{f_{ij}} - 1\right) \quad (6)$$

以下，Lee[3] らによる（4）式の最適化に対応する Multiplicative update rules と呼ばれるアルゴリズムを紹介する．

[Multiplicative update rules]

まず 0 でない初期値 $a_{ik}^{(0)}, b_{kj}^{(0)}$ を用意し，以下の式を用いて

a_{ik}, b_{kj} の値を更新する．

$$a_{ik}^{(t+1)} = a_{ik}^{(t)} \frac{\sum_{j=1}^{m} t_{ij} b_{kj}^{(t)}}{\sum_{j=1}^{m} \sum_{l=1}^{p} \left(a_{il}^{(t)} b_{lj}^{(t)}\right) b_{kj}^{(t)}} \quad (7)$$

$$b_{kj}^{(t+1)} = b_{kj}^{(t)} \frac{\sum_{i=1}^{n} t_{ij} a_{ik}^{(t+1)}}{\sum_{i=1}^{n} \sum_{l=1}^{p} \left(a_{il}^{(t)} b_{lj}^{(t)}\right) a_{ik}^{(t+1)}} \quad (8)$$

以下，Multiplicative update rules の計算例を与える．Multiplicative update rules はすべて 50 回繰り返すことにする．

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

とおいて，$T = AB$ を満たす行列 A, B を求める．

（1）　初期値を

$$a_{11}^{(0)} = a_{12}^{(0)} = a_{21}^{(0)} = a_{22}^{(0)} = 1$$

$$b_{11}^{(0)} = b_{12}^{(0)} = b_{21}^{(0)} = b_{22}^{(0)} = 1$$

とする．このときの結果は以下の通りである．

$$T \approx \begin{pmatrix} 0.00 & 0.56 \\ 1.56 & 0.75 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.42 & 1.85 \\ 1.79 & 0.14 \end{pmatrix}$$

（2）　初期値を

$$a_{11}^{(0)} = a_{12}^{(0)} = a_{21}^{(0)} = a_{22}^{(0)} = 0.5$$

$$b_{11}^{(0)} = b_{12}^{(0)} = b_{21}^{(0)} = b_{22}^{(0)} = 0.5$$

とする．このときの結果は以下の通りである．

$$T \approx \begin{pmatrix} 0.00 & 0.93 \\ 2.90 & 0.68 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.44 & 1.02 \\ 1.07 & 0.04 \end{pmatrix}$$

（3）　初期値を

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.01 \\ 0.001 & 0.0001 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_{11}^{(0)} & b_{12}^{(0)} \\ b_{21}^{(0)} & b_{22}^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 100 \\ 1000 & 10000 \end{pmatrix}$$

とする．ことのきの結果は以下の通りである．

$$T \approx \begin{pmatrix} 0.0040 & 0.0000 \\ 0.0030 & 0.0002 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 245.82 & 10.03 \\ 4699.24 & 11119.31 \end{pmatrix}$$

上述の計算例のように非負値行列因子分解は，その初期値の置き方によってまったく傾向のことなる計算結果が得られることが分かる．これはこの章の冒頭部分で与えた非負値行列因子分解を実現するための連立多項式の解空間に自由度が存在することに起因する．そこで本研究では，単純な場合の非負値行列因子分解を実現するアフィン代

数多様体$V\left(f_{ij}\right)$のイデアルのグレブナー基底[4]を調べ，非負値行列因子分解を実現する連立多項式のもつ性質を明らかにする．

3．非負値行列因子分解のグレブナー基底

3.1 問題設定

非負値行列因子分解の計算は一般的に実数体上で行われるが，実際の計算はコンピュータ上で行うため，以下，非負有理数を係数とする多項式環

$$S = Q_{\geq 0}\left[a_{11},\cdots,a_{1m},b_{11},b_{21},\cdots,b_{m1},b_{m2}\right]$$

について考えることとする．

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \\ \vdots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} \end{pmatrix}$$

とし，非負値行列因子分解$T = AB$を考える．このとき，非負値行列因子分解は以下の連立多項式によって得られる．

$$f_1 = \sum_{k=1}^{m} a_{1k}b_{k1} - t_{11}$$

$$f_2 = \sum_{k=1}^{m} a_{1k}b_{k2} - t_{12}$$

ただし，行列A, Bの成分は非負有理数である．非負値因子行列を実現するアフィン代数多様体$V\left(f_1, f_2\right)$に対応する定義イデアル

$$I\left(V\left(f_1, f_2\right)\right) = \left\{f \in S \middle| f(P) = 0, P \in V\left(f_1, f_2\right)\right\}$$

については，$\left\langle f_1, f_2\right\rangle \neq I\left(V\left(f_1, f_2\right)\right)$となることから，一般の定義イデアルがもつ性質と同様に以下の結論が得られる．

［命題 1］ 非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体において$\left\langle f_{11},\cdots,f_{nm}\right\rangle = I\left(V\left(f_{11},\cdots,f_{nm}\right)\right)$は一般的に成り立たない．■

これから，非負値行列因子分解を実現する際に必要となる連立多項式の解空間について調べるために，アフィン代数多様体$V\left(f_1, f_2\right)$に対応する定義イデアル$I\left(V\left(f_1, f_2\right)\right)$について計算する．そのために，イデアル$\left\langle f_1, f_2\right\rangle$のグレブナー基底を考える．

3.2 グレブナー基底の定義と主結果

多項式環Sにおける単項式を，多重指数を用いて

$$a^{\alpha} = a_{11}^{\alpha_1}a_{12}^{\alpha_2}\cdots b_{m2}^{\alpha_{3m}}$$

と表す．多重指数$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_{3m} \end{pmatrix}$は非負整数であるから，単項式全体の集合は$Z_{\geq 0}^{3m}$と同一視することができる．ただし，$Z_{\geq 0}$は非負整数全体の集合である．いま，$\alpha, \beta \in Z_{\geq 0}^{3m}$に対して，ある$i\left(1 \leq i \leq 3m\right)$が存在して，$\alpha_1 = \beta_1,\cdots,\alpha_{i-1} = \beta_{i-1}$かつである$\alpha_i = \beta_i$となるときに限り$\alpha > \beta$と定義することにする．このようにして定義される順序のことを多項式順序といい，以下の性質をもつことが知られている．

- $Z_{\geq 0}^{3m}$の任意の部分集合に最小元が存在する
- $\alpha, \beta \in Z_{\geq 0}^{3m}$に対して，$\alpha > \beta, \alpha = \beta, \alpha < \beta$のいずれかが成り立つ
- 任意の$\gamma \in Z_{\geq 0}^{3m}$に対して$\alpha > \beta$なら，$\alpha + \gamma > \beta + \gamma$が成り立つ

ここで，$\alpha = \left(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{3m}\right), \gamma = \left(\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_{3m}\right)$とすると，$\alpha + \gamma = \left(\alpha_1 + \gamma_1, \alpha_2 + \gamma_2, \cdots, \alpha_{3m} + \gamma_{3m}\right)$と定義

する．また，$\alpha=(0,0,\cdots,0)$のときは$a^{\alpha}=1$とする．本稿では以下のように順序を定義することとする．

$$a_{11}>a_{12}>\cdots>a_{1m}>b_{11}>b_{12}>\cdots>b_{m1}>b_{m2}$$

多項式$f=\sum_{\alpha}c_{\alpha}a^{\alpha}$において辞書式順序で最大となる単項式を先頭項といい，$LT(f)$で表すことにする．また，SのイデアルIに対して，$LT(I)=\{LT(g)|g\in I\}$と定義する．このとき，グレブナー基底は以下のように定義される．

[定義 1]

SのイデアルIの生成元の集合$\{h_1,h_2,\cdots,h_k\}$に対して

$$LT(I)=\langle LT(h_1),LT(h_2),\cdots,LT(h_k)\rangle$$

が成り立つとき，$\{h_1,h_2,\cdots,h_k\}$をIのグレブナー基底という．

一般的に，イデアルIの生成元の集合$H=\{h_1,h_2,\cdots,h_k\}$がグレブナー基底になるとは限らない．しかし，$LT(h_i)$と$LT(h_j)$の最小公倍元を$LCM(h_i,h_j)$としたとき，

$$S(h_i,h_j)=\frac{LCM(h_i,h_j)}{LT(h_i)}h_i-\frac{LCM(h_i,h_j)}{LT(h_j)}h_j$$

を計算し，$S(h_i,h_j)$をHで割った余りをh_kとし，これを集合Hに加え，$i<j$に対して上記の作業を繰り返すことでグレブナー基底が得られることが知られている．

本研究では，3.1 で与えた非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体$V(f_1,f_2)$の性質が，行列Aの列の個数（または行列Bの行の個数）mの値から受ける影響を，アフィン代数多様体の不変量である次元を用いて調べた．アフィン代数多様体の次元を，定義イデアルのアフィンヒルベルト多項式の次数として定義するとき，以下の定理が得られる．

[定理 1]

T,A,Bをそれぞれ1×2型，$1\times m$型，$m\times2$型の非負値行列とする．このとき，非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体の次元は$2m-2$である．■

定理 1 の略証を以下に与える．$f_3=S(f_1,f_2)$とおくと，$S(f_1,f_3)\in\langle f_2,f_3\rangle,S(f_2,f_3)\in\langle f_1,f_2\rangle$となり，多項式の集合$\{f_1,f_2,f_3\}$はイデアル$I$のグレブナー基底であることが分かる．また，$\langle f_1,f_2,f_3\rangle=I(V(f_1,f_2))$となるから，$V(f_1,f_2)$の次元が$2m-2$であることを導くことができる．

4. まとめ

本研究では，非負値行列因子分解を実現するアフィン代数多様体の次元の性質を調べた．これを一般の場合に拡張することや，応用との関連について調べることが今後の課題である．

参考文献

1） 亀岡弘和, “非負値行列因子分解とその音響信号処理応用”, 電子情報通信学会技術研究報告 : 信学技報 112, 347, (2012), pp. 53-58

2） D. D. Lee and H. S. Seung, “Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization”, Nature, Vol. 401, No. 6755, (1999), pp. 788–791

3） D. D. Lee and H. S. Seung, “Algorithms for Non-negative Matrix Factorization”, In NIPS, Vol. 13, (2000), pp. 556-562

4） D. Cox, J. Little, and D. O'Shea, “Ideals, Varieties, and Algorithms”, An Introduction to Computational Algebraic Geometry and Commutative Algebra. Springer (1997)