

非負値行列分解による変分推論とランク推定

中央大学大学院理工学研究科 杉生 友輝
中央大学理工学部 酒折 文武

推薦システムや画像認識など幅広い分野で非負値行列分解 (Lee and Seung (1999)) が活用されている。非負値行列分解は、観測行列に非負性を仮定し、さらに非負性を仮定した2つの低ランクな行列に分解する手法であり、解釈のしやすさや分解した成分がスパースとなるという利点がある。非負値行列分解は、ベイズモデリングにより観測データの分布とそのパラメータの事前分布からなる階層的生成モデルとして見ることができ、より柔軟なモデリングや欠損値が含まれる観測行列の予測が可能となる。

いま、 $n \times m$ の非負値データ行列 \mathbf{X} が観測されたとする。またデータ行列を分解した2つの低ランクな非負値行列を \mathbf{U}, \mathbf{H} とし、それぞれ $n \times d$ 行列, $d \times m$ 行列とする。 $d < \min\{n, m\}$ である。尤度関数を $p(\mathbf{X}|\mathbf{U}, \mathbf{H})$ とし、 \mathbf{U}, \mathbf{H} の事前分布をそれぞれ $p(\mathbf{U}|\lambda_U), p(\mathbf{H}|\lambda_H)$ とする。ただし、 λ_U, λ_H はハイパーパラメータである。このとき、変分ベイズ法による最適化問題は

$$\text{maximize } \mathcal{L}[q(\mathbf{U}, \mathbf{H})], \quad \text{subject to } q(\mathbf{U}, \mathbf{H}) = q_1(\mathbf{U})q_2(\mathbf{H}) \quad (1)$$

で与えられる。ここで \mathcal{L} は ELBO (evidence lower bound) や変分下限と呼ばれ、

$$\mathcal{L}[q(\mathbf{U}, \mathbf{H})] = \int \int q(\mathbf{U}, \mathbf{H}) \log \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{U}, \mathbf{H})}{q(\mathbf{U}, \mathbf{H})} d\mathbf{U} d\mathbf{H}$$

で定義される。 \mathbf{U}, \mathbf{H} のハイパーパラメータ λ_U, λ_H を定める方法としては様々なものが提案されているが、周辺尤度最大化に基づく経験変分ベイズ (中島, 杉山 (2013)) を用いることも可能である。さらに、観測行列 \mathbf{X} に補助的な情報をもつ行列 \mathbf{Y}, \mathbf{Z} を取り入れた非負値複合行列分解 (Takeuchi, Ishiguro, Kumura, Sawada (2013))

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} & \mathbf{Y} \\ \mathbf{Z} & \mathbf{O} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{A} \end{pmatrix}$$

も提案されている。この場合、変分ベイズ法による最適化問題は

$$\text{maximize } \mathcal{L}[q(\mathbf{U}, \mathbf{H}, \mathbf{A}, \mathbf{B})], \quad \text{subject to } q(\mathbf{U}, \mathbf{H}, \mathbf{A}, \mathbf{B}) = q_1(\mathbf{U})q_2(\mathbf{H})q_3(\mathbf{A})q_4(\mathbf{B}) \quad (2)$$

で与えられる。

非負値行列分解の重要な課題として、分解した行列のランク推定がある (亀岡 (2015))。本研究では、通常の非負値行列分解および非負値複合行列分解において、ハイパーパラメータに加えてランク推定も経験変分ベイズ法で行う方法を提案し、数値実験によりその良さを検証する。

参考文献

- [1] 亀岡弘和 (2015). 非負値行列因子分解とその音響信号処理への応用, 日本統計学会誌, 44, No.2, pp. 383-407.
- [2] Lee, D., Seung, H. (2001). Algorithms for non-negative matrix factorization, *Advances in Neural Information Processing Systems*, 13, pp. 556-562.
- [3] 中島伸一, 杉山 将 (2013). 変分ベイズ学習理論の最新動向, 日本応用数理学会論文誌. vol23, No.3, pp. 453-483.
- [4] Takeuchi, K., Ishiguro, K., Kimura, A., and Sawada, H. (2013). Non-negative multiple matrix factorization, In Proc. 23rd International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-2013), 1713-1720.