

非負行列分解による画像の構成部品抽出

筑波大学大学院 システム情報工学研究科

小川直哉 高野祐一 山本芳嗣 Antoni Wibowo

概要

本研究では、非負行列分解を利用した画像の構成部品抽出を行う。効率的に非負行列分解を行うため、交互に行列を求める問題を線形計画問題に帰着し、加えて、画像の構成部品をうまく抽出するためのいくつかの制約式を導入する。計算実験では、その工夫が画像の構成部品抽出に役立つことを示す。また、Earth Mover's Distance を画像の非類似度とした非負行列分解を提案する。

1 はじめに

大量のデータから有意義な知見を得たり、データの潜在的な構造を理解することは、非常に重要なことである。特に、分析対象のデータが画像である場合、画像の構成部品を抽出することが、データの解釈に役立つ可能性がある。Lee and Seung [6] は、非負の行列を、非負の行列の積に分解する手法を利用し、顔画像データベースを使った実験で、眉や口などの顔を構成する部品を抽出している。一枚の画像は、非負の要素で構成され、画像はいくつかの部品の足し合わせでできていると考え、非負の要素で構成された部品の非負結合によって各画像が再現されることが望ましい。

2 非負行列分解

非負行列分解とは、非負の要素で構成されるデータ行列 $F \in \mathbb{R}^{m \times n}$ を、非負の行列 $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ と $W \in \mathbb{R}^{r \times n}$ の積 UW に分解する手法である。このとき、行列 U の列数であり行列 W の行数である r は、 $r < \min\{m, n\}$ となるように決め、前もって与えるものとする。

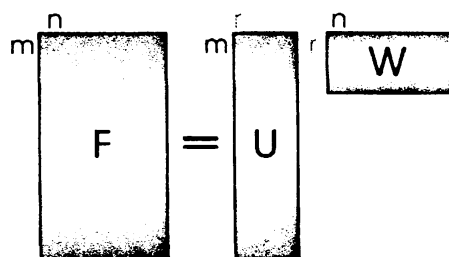


図 1: データ F を行列の積 UW に分解する。

非負行列分解の応用範囲は広く、画像の構成部品抽出以外にもテキストマイニングや要因分析、テキストのクラスタリングに利用されている [1]。本研究では、Donoho and Stodden [3] が使用した Swimmer Data と呼ばれる画像データを用いる。その一部を、図 2 に示す。

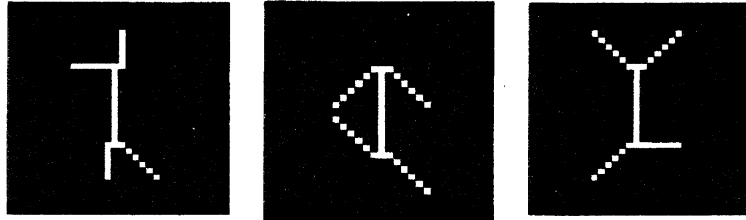


図 2: Swimmer Data の一部

Swimmer Data は、人が泳いでいる様子を模した複数の画像から成っている。一枚の画像は、0,1 の値を持つ 32×32 ピクセルからできている。各画像は、1 の値を持つ胴体・右手・左手・右足・左足と 0 の値を持つ背景から構成され、左右の手足は、それぞれ 4 種類の異なる位置を持つ。よって、画像枚数は 256 枚である。

本研究の目的は、この Swimmer Data から、画像の構成部品を抽出することである。4 つの部位が 4 か所の位置を持つことから、左右の手足として、16 個の部品が抽出できる。これにどの画像にも現れる胴体を加え、合計で 17 個の部品を抽出することを目的とする。

一枚の画像を 0,1 の要素を持つ行列とみなし、各行を順に並べることでベクトルを構成する。こうしてできたベクトルをデータ行列 F の一列とする。Swimmer Data は 256 枚の画像で構成されるため、データ行列 F のサイズは 1024×256 となる。 $F = UW$ と分解できたと仮定すると、一枚の画像に対応する F の各列は U の各列の非負結合によって構成される。よって、 U の各列は画像を構成する部品と解釈でき、 W の一列は、一枚の画像を再現するための各部品の重みとみなすことができる。このことから、今後、 U を部品行列、 W を重み行列と呼ぶ。

3 非負行列分解のアルゴリズム

情報の縮約が目的であれば、部品の個数である r はなるべく少なくしたいと考えられる。しかしながら、部品の個数 r が少ないと、厳密に F を UW に分解することができない。そのため、非負行列分解の既存の研究では、 $F - UW$ のフロベニウスノルムの最小化を考えている。

フロベニウスノルムの定義

$$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2}$$

フロベニウスノルムを用いた非負行列分解の問題

$$\min_{U \geq 0, W \geq 0} \|F - UW\|_F^2$$

また、非負行列分解の多くのアルゴリズムは、部品行列 U と重み行列 W を交互に求めている [4] [6]。つまり、重み行列 W が与えられている下で、次の問題を解いて目的関数を最小化

する部品行列 U を求め

$$\min_{U \geq 0} \|F - UW\|_F^2,$$

次に、こうして得られた部品行列 U の下で、次の問題を解いて目的関数を最小化する重み行列 W を求める。

$$\min_{W \geq 0} \|F - UW\|_F^2$$

以上の操作を繰り返し、 $\|F - UW\|_F^2$ になるべく小さくなる U と W を求めていく。

4 1-ノルム, ∞ -ノルムを利用した非負行列分解

部品行列 U と重み行列 W を交互に求める問題でも、フロベニウスノルムを用いた定式化では、2 次の最適化問題を解く必要がある。一方で、1-ノルムと ∞ -ノルムを利用した定式化を行うことにより、片方の行列を固定したときの問題は、線形計画問題に帰着でき、効率的に求解が可能である。

次に、 $\mathcal{M} := \{1, \dots, m\}$, $\mathcal{N} := \{1, \dots, n\}$, $\mathcal{R} := \{1, \dots, r\}$ とし、1-ノルムと ∞ -ノルムを利用した定式化を示す。

4.1 1-ノルムによる非負行列分解

データ行列 F と重み行列 W を与え、1-ノルムを用いて部品行列 U を求める問題の定式化を $P_1(F, W)$ に示す。

$$P_1(F, W) \left\| \begin{array}{ll} \min_{u_{sk}} & \sum_{s \in \mathcal{M}} \sum_{t \in \mathcal{N}} \left| f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt} \right| \\ \text{s.t.} & u_{sk} \geq 0, \end{array} \right. \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall k \in \mathcal{R}$$

$P_1(F, W)$ は、変数 $\phi_{st} (s \in \mathcal{M}, t \in \mathcal{N})$ を導入し、線形計画問題 $LP_1(F, W)$ に帰着できる。

$$LP_1(F, W) \left\| \begin{array}{ll} \min_{u_{sk}, \phi_{st}} & \sum_{s \in \mathcal{M}} \sum_{t \in \mathcal{N}} \phi_{st} \\ \text{s.t.} & -\phi_{st} \leq f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt} \leq \phi_{st}, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall t \in \mathcal{N} \\ & u_{sk} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall k \in \mathcal{R} \end{array} \right.$$

4.2 ∞ -ノルムによる非負行列分解

∞ -ノルムを用いた場合には、問題は次の $P_\infty(F, W)$ となる。

$$P_\infty(F, W) \left\| \begin{array}{ll} \min_{u_{sk}} & \max_{s \in \mathcal{M}, t \in \mathcal{N}} \left| f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt} \right| \\ \text{s.t.} & u_{sk} \geq 0, \end{array} \right. \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall k \in \mathcal{R}$$

$P_\infty(F, W)$ は、変数 ψ を導入し、線形計画問題に帰着すると $LP_\infty(F, W)$ となる。

$$LP_\infty(F, W) \left\| \begin{array}{ll} \min_{u_{sk}, \psi} & \psi \\ \text{s.t.} & -\psi \leq f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt} \leq \psi, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall t \in \mathcal{N} \\ & u_{sk} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall k \in \mathcal{R} \end{array} \right.$$

データ行列 F と部品行列 U を与え、重み行列 W を求める問題も、同様に定式化ができるので割愛する。

5 Earth Mover's Distance による画像の非類似度の計算

上記のフロベニウスノルム、1-ノルム、 ∞ -ノルムを利用した定式化では、画像間で同一座標の要素の値の差から2枚の画像の非類似度を計算しており、その座標の位置については考慮していない。しかし、図2に示したような画像データでは、あるピクセルが一枚の画像のどの位置にあるかという情報に意味があり、その座標を考慮しながら非負行列分解を行う必要性が考えられる。この座標の情報を考慮しながら画像の非類似度を計算する方法として、Rubner et al.[8] によって Earth Mover's Distance (以下、EMD) が提案されている。

今、ある画像の座標の集合を $\mathcal{E} := \{(i, j) | 1 \leq i \leq m_1, 1 \leq j \leq m_2\}$ とし、比べる画像を $P = (p_{(i,j)})$, $Q = (q_{(i,j)})$ とする。また、 $d_{(i,j)(k,l)}$ は、座標 (i, j) と (k, l) 間の距離とし、EMD の定式化を以下に示す。

Earth Mover's Distance の定式化

$$EMD(P, Q) \left\| \begin{array}{ll} \min_{x_{(i,j)(k,l)}} & \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \sum_{(k,l) \in \mathcal{E}} d_{(i,j)(k,l)} x_{(i,j)(k,l)} \\ \text{s.t.} & \sum_{(k,l) \in \mathcal{E}} x_{(i,j)(k,l)} = p_{(i,j)}, \quad \forall (i, j) \in \mathcal{E} \\ & \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} x_{(i,j)(k,l)} = q_{(k,l)}, \quad \forall (k, l) \in \mathcal{E} \\ & x_{(i,j)(k,l)} \geq 0, \quad \forall (i, j), \forall (k, l) \in \mathcal{E} \end{array} \right.$$

この問題は、ヒッチコック型の輸送問題とよばれ、EMD は、この最小化問題の最適値を画像 P と Q の非類似度と定義する。

本研究では、非負行列分解にこの EMD を導入し、座標の情報を考慮した非負行列分解を提案する。しかしながら、EMD の定式化は、座標の個数 $m_1 \times m_2$ の2乗個、つまり、 $m_1^2 \times m_2^2$ 個の変数を含んでいる。本研究の画像データでは、 $m_1 = m_2 = 32$ であるので、変数は約100万となり、計算の負担が大きい。そこで、Ling and Okada [7] によって提案された、変数と制約を削減した EMD_{L1} を用いて非負行列分解を行う。Ling and Okada [7] による次の定式化では、EMD の座標 $(i, j)(k, l)$ 間の距離を $L1$ -距離で定義した時、変数を $4 \times m_1 \times m_2$ に減らすことが可能である。 $\mathcal{E}_1(i, j) := \{(k, l) \in \mathcal{E} | |i - k| + |j - l| = 1\}$ とすると、 EMD_{L1} は、次のように定式化される。

EMD_{L1} の定式化

$$\text{EMD}_{L1}(P, Q) \left\| \begin{array}{ll} \min_{g(i,j)(k,l)} & \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \sum_{(k,l) \in \mathcal{E}_1(i,j)} g(i,j)(k,l) \\ \text{s.t.} & \sum_{(k,l) \in \mathcal{E}_1(i,j)} (g(i,j)(k,l) - g(k,l)(i,j)) = p_{(i,j)} - q_{(i,j)}, \\ & \forall (i,j) \in \mathcal{E} \\ & g(i,j)(k,l) \geq 0, \quad \forall (i,j) \in \mathcal{E}, \forall (k,l) \in \mathcal{E}_1(i,j) \end{array} \right.$$

EMD_{L1} の変数は, Swimmer Data で約 4000 に減少する. 加えて, Takano and Yamamoto [9] は, 座標 $(i,j)(k,l)$ 間の距離として $L1$ -距離以外を用いた場合にも変数と制約を削減できることを示している.

6 提案手法

今, $\mathcal{E} := \{(i,j) | 1 \leq i \leq m_1, 1 \leq j \leq m_2\}$ の要素を

$$(1,1), (1,2), \dots, (1,m_2), (2,1), \dots, (2,m_2), \dots, (m_1,1), (m_1,2), \dots, (m_1,m_2)$$

と並べて $\mathcal{M} := \{1, \dots, m\}$ に対応させる. ここで, $m = m_1 \times m_2$ である. また, $\mathcal{E}_1(i,j) := \{(k,l) | |i-k| + |j-l| = 1\}$ に対応して, $\mathcal{M}_1(s) := \{t \in \mathcal{M} | d_{st} = 1\}$ とする. ここで, d_{st} は座標 $(i,j), (k,l)$ に対応する $s, t \in \mathcal{M}$ 間の距離である. このとき, EMD_{L1} を利用した非負行列分解の定式化は, 次に示す PLEMD_{L1}(F, U), PLEMD_{L1}(F, W) となる.

6.1 EMD_{L1} を利用した非負行列分解

U を固定し W を求める問題と, W を固定して U を求める問題は, 以下の様に定式化される. 両者の違いは, w_{kt} が変数であるか u_{sk} が変数であるかの点だけである.

重み行列 W を求める問題 (U は固定)

$$\text{PLEMD}_{L1}(F, U) \left\| \begin{array}{ll} \min_{g_{sht}, w_{kt}} & \sum_{s \in \mathcal{M}} \sum_{h \in \mathcal{M}_1(s)} \sum_{t \in \mathcal{N}} g_{sht} \\ \text{s.t.} & \sum_{h \in \mathcal{M}_1(s)} (g_{sht} - g_{hst}) = f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt}, \\ & \forall s \in \mathcal{M}, \forall t \in \mathcal{N} \\ & w_{kt} \geq 0, \quad \forall k \in \mathcal{R}, \forall t \in \mathcal{N} \\ & g_{sht} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall h \in \mathcal{M}_1(s), \forall t \in \mathcal{N} \end{array} \right.$$

分解された r 個の部品は, データ行列 F を表現するのに必ず利用されることが望ましい. そこで, W を解く問題に, 以下の制約式を追加することにより, どの構成部品も必ず使われるようにする.

W を求める問題に追加する制約式 (W の各行は, 和が一定値以上)

- 各 $k \in \mathcal{R}$ について制約式に,

$$\sum_{t \in \mathcal{N}} w_{kt} \geq \rho$$

を加える ($\rho > 0$ は, パラメータ) .

7.2 人工変数の導入 (部品行列 U を解く問題)

一対の画像に対して非類似度を計算する際, EMD の定式化では,

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} p_{(i,j)} = \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} q_{(i,j)}$$

という条件を満たしている必要がある. 部品行列 U を求める際, 与えられた重み行列 W の値によってこの条件が満たされない場合が存在する. そこで, 人工変数を導入し, 重み λ を乗じた人工変数を目的関数に足し込み, 人工変数はできるだけ値が 0 に近づくようにする.

部品行列 U を求めるために, 人工変数 $(\alpha_{st}, \beta_{st})$ を導入した EMD_{L1} の問題

$$\text{PL}'_{\text{EMD}_{L1}}(F, W) \left\{ \begin{array}{ll} \min_{g_{sht}, u_{sk}, \alpha_{st}, \beta_{st}} & \sum_{s \in \mathcal{M}} \sum_{h \in \mathcal{M}_1(s)} \sum_{t \in \mathcal{N}} g_{sht} + \lambda \sum_{s \in \mathcal{M}} \sum_{t \in \mathcal{N}} (\alpha_{st} + \beta_{st}) \\ \text{s.t.} & \sum_{h \in \mathcal{M}_1(s)} (g_{sht} - g_{hst}) = f_{st} - \sum_{k \in \mathcal{R}} u_{sk} w_{kt} + \alpha_{st} - \beta_{st}, \\ & \forall s \in \mathcal{M}, \forall t \in \mathcal{N} \\ & u_{sk} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall k \in \mathcal{R} \\ & g_{sht} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall h \in \mathcal{M}_1(s), \forall t \in \mathcal{N} \\ & \alpha_{st}, \beta_{st} \geq 0, \quad \forall s \in \mathcal{M}, \forall t \in \mathcal{N} \end{array} \right.$$

8 計算実験

本稿では, 1-ノルムと ∞ -ノルムを利用した非負行列分解の結果を示す. EMD を利用した非負行列分解については, 実験が継続中なため, その結果は改めて後日報告する.

8.1 実験結果

繰り返し回数を 20 回とし, 得られた部品行列 U の各列に対応する画像を示す. (b) 制約式の工夫ありとした実験結果は, 7.1 制約式の追加で示した制約式の工夫をすべて利用したアルゴリズムによって得られた結果である.

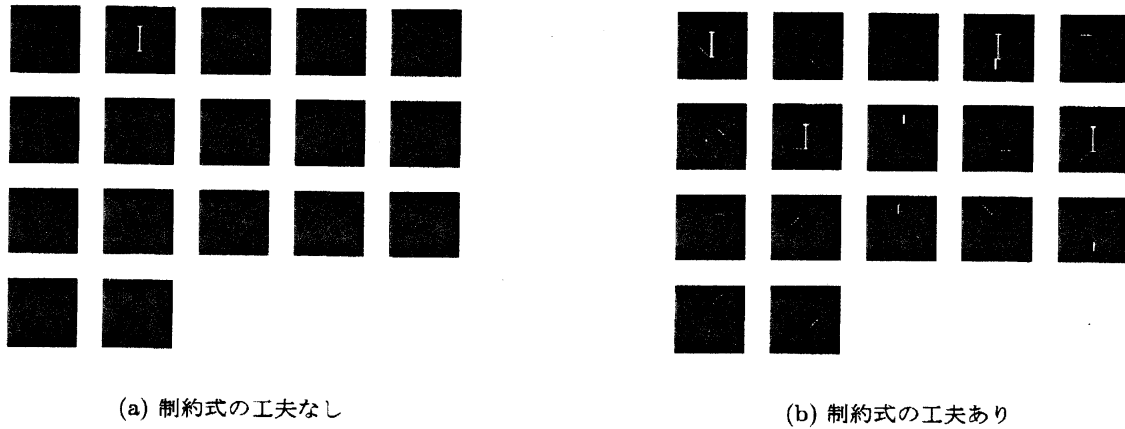


図 3: 1-ノルムを利用した実験結果

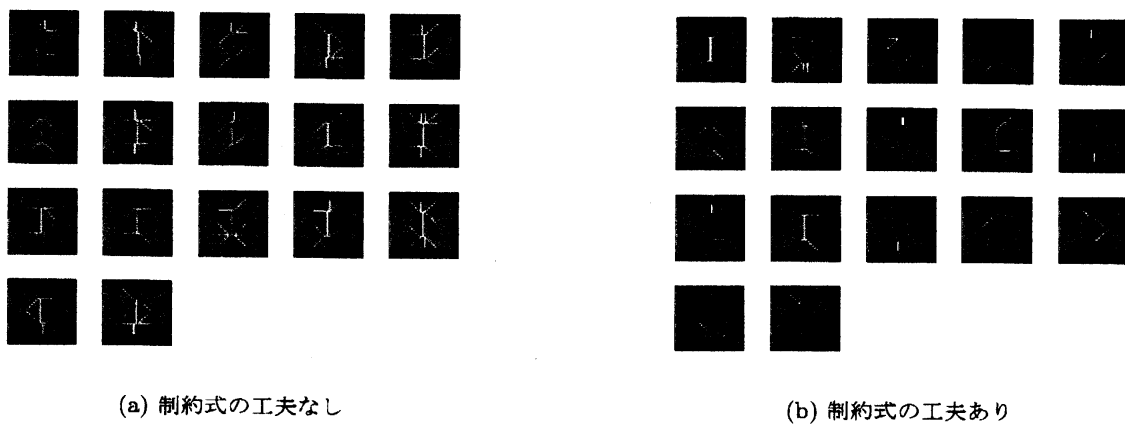
図 4: ∞ -ノルムを利用した実験結果

図 3(a) に示す 1-ノルムを利用した非負行列分解では、すべての画像の共通部分である胴体のみが現れ、手足を抽出できていない。図 3(b) の結果は、制約式の工夫を加えると、より良く構成部品を抽出できることを示している。しかしながら、現在の工夫では共通部分である胴体だけの部品画像を作ることができず、一枚が背景だけの画像となり、16 枚の構成部品への分解となった。なお、1-ノルムの実験結果は、制約式の工夫なし、あり共に、部品行列 U と重み行列 W の更新が行われなくなった時点で得られた結果である。

一方、 ∞ -ノルムを利用した非負行列分解では、一枚の画像に多くの部位が現れ、うまく部品の抽出ができていない。制約式を追加すると、解の性質は良くなった。しかしながら、1-ノルムと比べると、うまく分解できているとは言えない。ただし、 ∞ -ノルムを利用した場合、繰り返し回数が上限の 20 回に達し、途中で計算を終了させている。

9 おわりに

1-ノルムを利用した非負行列分解は、部品行列 U 、重み行列 W を交互に求める定式化により、うまく構成部品を抽出することに何度か成功した。しかしながら、重み行列 W の値により、最終的に得られる部品行列 U が変化する。従って、性質の良い初期行列をつくることが必要であり、今後の課題となる。

また、本稿で提案に留まった EMD を利用した非負行列分解の計算実験を進め、画像の非類似度を EMD で測ることにより、うまく構成部品を抽出できるかどうかを検証したい。特に、位置のずれた画像が混在するデータ画像から部品抽出を行い、EMD を利用した非負行列分解の効果を検証することが必要である。

参考文献

- [1] M. W. Berry, M. Browne, A. N. Langville, V. P. Pauca and R. J. Plemmons, "Algorithms and applications for approximate nonnegative matrix factorization," *Computational Statistics and Data Analysis*, 52:155-173, 2007.
- [2] A. Cichocki and R. Zdunek, NMFLAB - MATLAB Toolbox for Non-Negative Matrix Factorization. On-line:<http://www.bsp.brain.riken.jp/ICALAB/nmflab.html>, 2006.
- [3] D. Donoho and V. Stodden, "When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts?," In *Advances in Neural Information Processing Systems 16*, MIT Press, 2004.
- [4] P. O. Hoyer, "Non-negative matrix factorization with sparseness constraints," *Journal of Machine Learning Research*, 5:1457-1469, 2004.
- [5] 小林光夫, 『絵画における色彩美の数理的分析の研究』 東京大学大学院情報理工学研究所 学位 (博士) 請求論文, 1999.
- [6] D. D. Lee and H. S. Seung, "Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization," *Nature*, 401:788-791, 1999.
- [7] H. Ling and K. Okada, "An efficient earth mover's distance algorithm for robust histogram comparison," *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 29:840-853, 2007.
- [8] Y. Rubner, C. Tomasi and L. J. Guibas, "The earth mover's distance as a metric for image retrieval," *International Journal of Computer Vision*, 40:99-121, 2000.
- [9] Y. Takano and Y. Yamamoto, "Metric-preserving reduction of earth mover's distance and its application to non-negative matrix factorization," Discussion Paper Series, University of Tsukuba, 2008.