

べき乗法による行列の非負分解

村上 純 鄧 天波 田所 嘉昭

豊橋技術科学大学・工学部・情報工学系

画像処理等に用いられる基本的な処理技術である2次元デジタルフィルタ(2DDF)の一設計法は次の通りである。2次元の周波数応答行列を何らかの分解法により、1次元のベクトルの積の和に分解する。これらのベクトルを設計仕様と考え、2つの1次元デジタルフィルタを設計し縦続接続することにより2DDFを実現する。ここで周波数応答の振幅は非負であるから、分解した1次元ベクトルの成分も非負でなければならない。われわれは、べき乗法を応用して行列の非負分解を行なう新しいアルゴリズムを開発した。そして、従来の手法と比較した結果、計算時間が短縮でき、誤差も小さくなることが分かった。

Nonnegative Decomposition of Matrices by the Power Method

Jun MURAKAMI Tian-bo DENG Yoshiaki TADOKORO

Department of Information and Computer Sciences, Faculty of Engineering,
Toyohashi University of Technology

Two-dimensional (2-D) digital filters (2DDF's) are the basic tools for 2-D digital signal processing. As a design method for 2DDF's, we can obtain it by designing two one-dimensional (1-D) digital filters. Actually, when 2-D magnitude specifications are given, we have to decompose them into the 1-D magnitude specifications. Although the singular value decomposition method is applied to them for this purpose by a few researchers, the method is not efficient since it results in negative magnitude specifications. In this paper, a new nonnegative decomposition technique is proposed for solving this problem. This technique is based on the power method for eigenvalue problems.

1. はじめに

2次元デジタルフィルタは画像処理等に用いられる基本的な処理技術である¹⁾。特に分母分離形と呼ばれるタイプの2DDFは、設計が容易なことからよく用いられる。この場合には、2次元の周波数応答行列を1次元のベクトルの積の和に分解すれば、1次元デジタルフィルタの設計問題に帰着できる²⁾。すなわち、2つの1次元ベクトルをそれぞれ周波数仕様とする1入力多出力と多入力1出力の1DDFを設計し、縦続接続すればよい。

2次元の行列から1次元ベクトルへの分解にはLU分解や特異値分解(SVD)等が用いられる³⁾。物理的に、周波数応答の振幅は非負であるから、ベクトルのすべての成分は非負となる必要がある。従来の分解法ではこのような非負ベクトルへの分解は不可能であった。しかし、近年、分解の各段においてSVDを用いて、逐次近似的に非負ベクトルを計算する手法が開発されている^{4)・5)}。この手法は、逐次特異値分解法(ISVD)と名付けられているが、計算時間および精度の点から必ずしも満足できる方法ではない。

本論文では、べき乗法を利用して行列の非負分解を行なう新しいアルゴリズムを提案し、ISVD法と比較検討した結果を示す。べき乗法は、行列の固有値計算法の一つであり、アルゴリズムが簡単で、計算時間が速いことから、最大から数個の固有値と固有ベクトルを求める場合に用いられる。

2. 行列の非負分解

2.1 行列の特異値分解

行列を1次元のベクトルの積の和の形に分解する一般的な方法として、特異値分解がある⁴⁾。(m,n)行列AのSVDは

$$A = UDV^T = \sum_{i=1}^r d_i u_i v_i^T \quad (1)$$

で定義される。ここで、rは行列Aのランク、Uは(m,

m)直交行列、 V^T は(n,n)直交行列の転置、Dは対角成分に特異値 d_i をもつ(m,n)対角行列である。 u_i 、 v_i は行列U、Vのi列、すなわち左特異ベクトル、右特異ベクトルで、

$$Av_i = d_i u_i, \quad (2)$$

$$A^T u_i = d_i v_i, \quad (3)$$

の関係がある。

式(1)は2次元の行列が、1次元のベクトルの積の和の形に分解できることを示している。

2.2 逐次特異値分解法による非負分解法

2DDFの設計では、2次元の行列を1次元非負ベクトルの積の和に分解する必要がある。そのような手法として近年提案されたISVD法の概略を述べる^{5)・6)}。

行列AのSVDは式(1)で表わされる。ただし、 $d_1 > d_2 > \dots > d_r > 0$ とする。行列Aは物理的性質から非負行列であるから、ベクトル u_i 、 v_i はすべての成分が非負である非負特異ベクトルとなる⁷⁾。したがって、

$$B_i = d_i u_i v_i^T \quad (4)$$

をAの近似行列の第1段目(第1項)とする。次に、残差行列

$$A_1 = A - B_i \quad (5)$$

は一般に非負行列ではないので、

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= A_1^+ - A_1^-, \\ A_1^+(i,j) &= \max(A_1(i,j), 0), \\ A_1^-(i,j) &= -\min(A_1(i,j), 0) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

として、2つの非負行列に分解する。ただし、 \max と \min はそれぞれ最大値、最小値を表わしている。 A_1^+ 、 A_1^- についてSVDを行なうと、

3.1 べき乗法による特異値分解の計算

$$A_1^+ = \sum_{i=1}^{r^+} d_{11}^+ u_{11}^+ (v_{11}^+)^T, \quad (7)$$

$$A_1^- = \sum_{i=1}^{r^-} d_{11}^- u_{11}^- (v_{11}^-)^T \quad (8)$$

となる。\$r^+\$, \$r^-\$ はそれぞれ行列 \$A^+\$, \$A^-\$ のランクである。\$u_{11}^+\$, \$v_{11}^+\$, \$u_{11}^-\$, \$v_{11}^-\$ は非負特異ベクトルであるから、

$$B_1^+ = d_{11}^+ u_{11}^+ (v_{11}^+)^T, \quad (9)$$

$$B_1^- = d_{11}^- u_{11}^- (v_{11}^-)^T \quad (10)$$

の近似行列の候補が得られる。そこで

$$e_1^+ = \|A_1 - B_1^+\|, \quad (11)$$

$$e_1^- = \|A_1 - B_1^-\| \quad (12)$$

を評価し、小さい方を第2段目での近似行列

$$B_2 = \begin{cases} B_1^+ & (e_1^+ \leq e_1^-) \\ B_1^- & (e_1^+ > e_1^-) \end{cases} \quad (13)$$

とする。すなわち、行列 \$B_2\$ が近似行列の第2項目である。ただし、式 (11), (12) ではユークリッドノルム⁸⁾を用いている。

さらに、残差行列

$$A_2 = A_1 - B_2 \quad (14)$$

について同様の操作を繰り返す。この操作を残差ベクトルのノルムが十分小さくなるまで続けると、最終的に、行列 \$A\$ を非負特異ベクトルの外積項の和で近似することができる。

3. べき乗法による非負分解法

任意に選んだ初期ベクトルに、行列を繰り返し掛けると、その行列の最大固有値に対する固有ベクトルの成分が他の方向の成分に比べて次第に優越になるという原理が、べき乗法の基本である。2番目以降の固有値と固有ベクトルは、求めた固有ベクトルの成分をもとの行列から引いて、この行列について同様の操作を行なえばよい。しかし、反復の過程で生じた丸め誤差の成分が次第に無視できなくなるため、2番目以降の固有値については正しく計算できないことがある⁹⁾。そのため、アルゴリズムが簡単で使いやすいという特長を生かして、最大固有値と固有ベクトルのみが必要な場合等によく用いられている。また、このべき乗法は、SVDの計算にも応用することができ^{10), 11)}、特に逐次的に非負分解を計算する場合には、最大特異値のみが必要であるから都合がよい。

\$(m, n)\$ 行列 \$A\$ に対して、初期ベクトル \$x_0\$ (成分数 \$m\$), \$y_0\$ (成分数 \$n\$) を任意に選ぶ。

$$x_k = A y_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (15)$$

$$y_k = A^T x_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (16)$$

として、\$A\$ または \$A^T\$ を掛ける操作を繰り返す。ベクトル \$x_0, y_0\$ は \$A\$ の特異ベクトルの1次結合で表現することができ、係数を \$a_1, b_1\$ とすると、

$$x_0 = \sum_{i=1}^m a_i u_i, \quad (17)$$

$$y_0 = \sum_{i=1}^n b_i v_i \quad (18)$$

となる。実際の計算では \$x_k, y_k\$ はユークリッドノルムが1となるように正規化を行なって、

$$x_0' = \alpha_0 x_0, \quad (19)$$

$$y_0' = \beta_0 y_0 \quad (20)$$

とする。ただし、 $\alpha_0 = 1 / \|x_0\|$, $\beta_0 = 1 / \|y_0\|$ である。2k回目の反復で x_{2k} , y_{2k} は、

$$\begin{aligned} x_{2k} &= \alpha_{2k} \sum_{i=1}^r a_i d_i^{2k} u_i \\ &= \alpha_{2k} a_1 d_1^{2k} \left\{ u_1 + \sum_{i=2}^r \frac{a_i}{a_1} \left(\frac{d_i}{d_1} \right)^{2k} u_i \right\}, \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_{2k} &= \beta_{2k} \sum_{i=1}^r b_i d_i^{2k} v_i \\ &= \beta_{2k} b_1 d_1^{2k} \left\{ v_1 + \sum_{i=2}^r \frac{b_i}{b_1} \left(\frac{d_i}{d_1} \right)^{2k} v_i \right\}, \quad (22) \end{aligned}$$

$$\alpha_{2k} = \alpha_0 \beta_1 \alpha_2 \cdots \beta_{2k-1} \alpha_{2k}, \quad (23)$$

$$\beta_{2k} = \beta_0 \alpha_1 \beta_2 \cdots \alpha_{2k-1} \beta_{2k} \quad (24)$$

となる。ただし、 $\alpha_j = 1 / \|x_j\|$, $\beta_j = 1 / \|y_j\|$ である。2以上のiに対して $|d_i / d_1| < 1$ であるから、十分大きいkについて

$$x_{2k} \approx \alpha_{2k} a_1 d_1^{2k} u_1, \quad (25)$$

$$y_{2k} \approx \beta_{2k} b_1 d_1^{2k} v_1 \quad (26)$$

となり、最大特異値に対する特異ベクトル u_1 , v_1 の定数倍のベクトルが得られる。また、式(25) , (26)で x_{2k} , u_1 , y_{2k} , v_1 はノルムが1に正規化されているので、式(23) , (24)から

$$\alpha_0 \beta_1 \alpha_2 \cdots \beta_{2k-1} \alpha_{2k} a_1 d_1^{2k} \approx 1, \quad (27)$$

$$\beta_0 \alpha_1 \beta_2 \cdots \alpha_{2k-1} \beta_{2k} b_1 d_1^{2k} \approx 1 \quad (28)$$

となる。同様に x_{2k-1} , y_{2k-1} の場合には

$$\beta_0 \alpha_1 \beta_2 \cdots \beta_{2k-2} \alpha_{2k-1} b_1 d_1^{2k-1} \approx 1, \quad (29)$$

$$\alpha_0 \beta_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{2k-2} \beta_{2k-1} a_1 d_1^{2k-1} \approx 1 \quad (30)$$

となる。式(27) , (30)から

$$d_1 \approx 1 / \alpha_{2k}, \quad (31)$$

式(28) , (29)から

$$d_1 \approx 1 / \beta_{2k} \quad (32)$$

の関係が得られるので、これらの式から最大特異値を計算することができる。以上がべき乗法によるSVDの計算の原理である。

3.2 べき乗法の非負分解への応用

べき乗法によるSVDの計算アルゴリズムを部分的に修正すると、非負分解の計算に応用することができる。すなわち式(15) , (16)の反復の過程で、反復ベクトル x_k を

$$\left. \begin{aligned} x_k &= x_k^+ - x_k^-, \\ x_k^+(i) &= \max(x_k(i), 0), \\ x_k^-(i) &= -\min(x_k(i), 0), \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

として、正の成分で構成されるベクトルと負の成分で構成されるベクトルに分ける。ベクトル y_k についても同様に

$$\left. \begin{aligned} y_k &= y_k^+ - y_k^-, \\ y_k^+(i) &= \max(y_k(i), 0), \\ y_k^-(i) &= -\min(y_k(i), 0) \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

とする。これらのベクトルについてノルムを計算し、大きい方を修正した反復ベクトル

$$\hat{x}_k = \begin{cases} x_k^+ & (\|x_k^+\| \geq \|x_k^-\|) \\ -x_k^- & (\|x_k^+\| < \|x_k^-\|) \end{cases}, \quad (35)$$

$$\hat{y}_k = \begin{cases} y_k^+ & (\|y_k^+\| \geq \|y_k^-\|) \\ -y_k^- & (\|y_k^+\| < \|y_k^-\|) \end{cases} \quad (36)$$

とする。つまり、反復ベクトル x_k, y_k が特異ベクトル u_1, v_1 に近づく過程において、1個でも負（または正）の成分が現われたら強制的に0にするのである。このような修正を施し、反復ベクトルとして \hat{x}_k, \hat{y}_k を用いれば、最終的に行列を非負分解するベクトルが得られる。

4. 計算結果

4.1 2次元周波数応答行列の構成

周波数軸 ω_1 と ω_2 の平面上的のサンプル点を $(\omega_{1m}, \omega_{2n})$ で表わし、次のような $(M+1) \times (N+1)$ 個のサンプル点をとることにする。

$$\left. \begin{aligned} \omega_{1m} &= m\pi/M, & 0 \leq m \leq M \\ \omega_{2n} &= n\pi/N, & 0 \leq n \leq N. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

各サンプル点での周波数応答の振幅 $H_d(\omega_{1m}, \omega_{2n})$ から周波数応答行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} H_d(0,0) & H_d(0,1) & \cdots & H_d(0,N) \\ H_d(1,0) & H_d(1,1) & \cdots & H_d(1,N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_d(M,0) & H_d(M,1) & \cdots & H_d(M,N) \end{pmatrix} \quad (38)$$

と構成する。ただし、各成分は $H_d(\omega_{1m}, \omega_{2n})$ であるが、簡単化のために $H_d(m, n)$ で表わした。具体例として、図1に示したような

$$H_d(\omega_{1m}, \omega_{2n}) = \begin{cases} 1 & (R \leq 0.4) \\ (0.6-R)/0.2 & (0.4 \leq R \leq 0.6) \\ 0 & (R \geq 0.6) \end{cases} \quad (39)$$

の特性をもつ低域通過フィルタを考える。ここで R は

$$R = \sqrt{\omega_{1m}^2 + \omega_{2n}^2} / \pi \quad (40)$$

である。

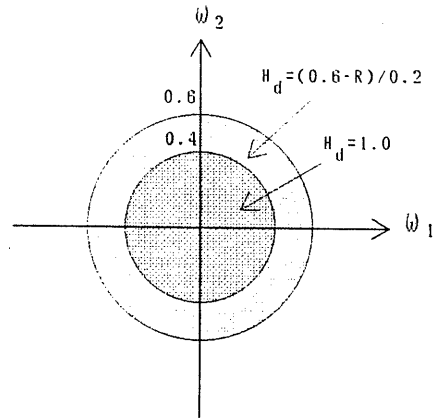


図1 2次元周波数応答特性の例
Fig.1 Example of 2-D frequency response.

4.2 計算結果の比較

われわれの提案するべき乗法による行列の非負分解法を、従来のISVDによる方法と比較する。

図2に $M=N=10$ の場合の計算結果の各段階の誤差を10段(10項)まで示す。ただし、初めに与えられた周波数応答行列のノルムを100%としたとき、近似結果の行列から計算した残差行列のノルムをパーセントで示した。べき乗法では2段目の誤差が1段目よりも大きくなるが、3段目から急激に減少し、10段目ではISVDの約1/4に誤差を小さくすることができる。 M, N を大きくしてもほぼ同様の結果が得られる。

また、図3は計算時間の比較である。一般にSVDの計算は、行列のサイズを m としたとき m^3 のオーダーの計算量が必要であり、ISVDでは各段で2回ずつSVDを呼び出すのでかなりの計算時間がかかることになる。一方、べき乗法は m^2 のオーダーであり、非負分解も同程度の計算量であるから、計算時間はほぼ m のオーダーで短縮できる。

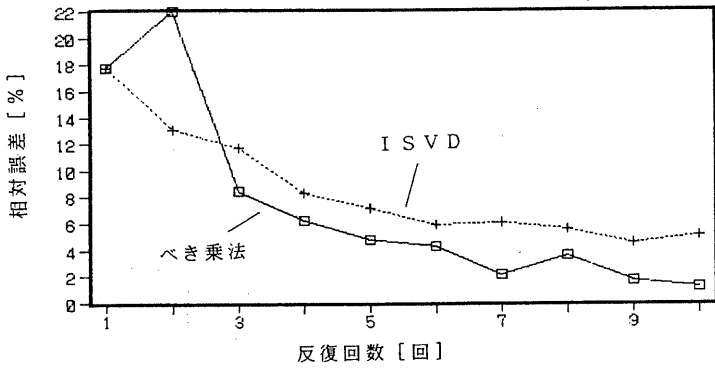


図2 収束性の比較
Fig.2 Comparison of convergence characteristics.

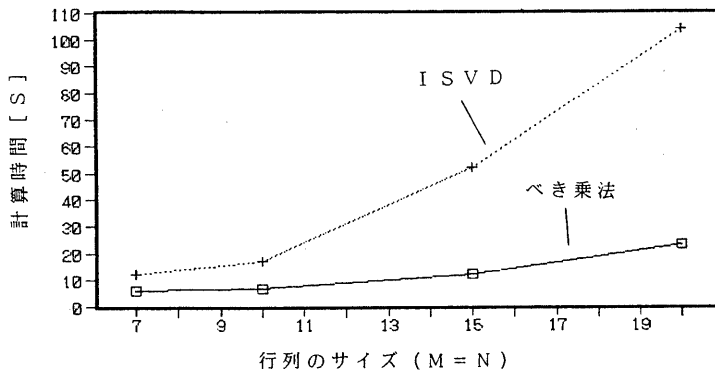


図3 計算時間の比較
Fig.3 Comparison of computation time.

なお、計算はパーソナル・コンピュータ、NEC-PC98 01-NS (32ビットCPU) を使用し、Fortranの単精度演算で行なった。

5 おわりに

べき乗法を応用した行列の非負分解法が、ISVDと比較して収束性、計算時間の点で有利であることを示した。ただし、べき乗法で2段階目の誤差が1段階目より大きくなることは改善すべき問題点である。2段階目では、1段階目の分解で得られた近似行列を、もとの行列

Aから引いて残った行列の近似を行なう。1段階目の分解はAが非負行列であるから、通常のSVDであり2乗誤差が最小である。このような場合、残差行列の構成成分に正の値と負の値がほぼ同数存在すると考えられる。この行列を2つのベクトルの積で近似すると、各ベクトルは正負ほぼ同数の成分を持つと考えてよい。

べき乗法を修正した際、式(35)、(36)で強制的に反復ベクトルの非零の成分がすべて正または負となるようにしたので、約半数の成分を無視してしまうことになる。これが、2段階目の誤差が大きくなる原因と考えられる。今後、この点について改善を試みる予定

である。

参考文献

- 1) D.E.Dudgeon and R.M.Mersereau : Multidimensional Digital Signal Processing, Prentice-Hall(1984).
- 2) 樋口龍雄 : デジタル信号処理の基礎, p.147, 昭晃堂(1986).
- 3) 川又政征, 樋口龍雄 : 多次元信号処理の基礎 [IV] - 多次元デジタルフィルタの設計 (近似法) -, 信学誌, Vol.74, No.8, pp.847-856(1991).
- 4) G.H.Golub and C.Reinshe : Singular Value Decomposition and Least Squares Solutions, Numer.Math., Vol.14, pp.403-420(1970).
- 5) T.B.Deng and M.Kawamata : Design of Two-Dimensional Recursive Digital Filters Based on the Iterative Singular Value Decomposition, Trans.IEICE, Vol.E73, No.6, pp.882-892(1990).
- 6) T.B.Deng and M.Kawamata : Design of Separable-Denominator 2-D Digital Filters Based on the Iterative Singular Value Decomposition of the Prescribed Magnitude Specification Matrix, Proc.ICSP'90, pp.777-780(1991).
- 7) R.E.Twogood and S.K.Mitra : Computer-aided design of Separable Two-Dimensional Digital Filters, IEEE Tran. Acoust., Speech, Signal Processing., Vol.ASSP-25, pp.165-169(1977).
- 8) 柳井晴夫, 竹内啓 : 射影行列・一般逆行列・特異値分解, p.42, 東京大学出版会(1983).
- 9) 洲之内治男, 四条忠雄 : パソコンによる数値計算, p.113, サイエンス社(1984).
- 10) I.J.Good : Some Applications of the Singular Decomposition of a Matrix, Technometrics, Vol.11, No.4, pp.823-831(1969).
- 11) 村上純, 大岩元 : べき乗法による特異値と特異ベクトルの計算, 信学春全大, D-1(1990).