

Rafał Zdunek

# Nieujemna faktoryzacja macierzy i tensorów

Zastosowanie do klasyfikacji  
i przetwarzania sygnałów



Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej  
Wrocław 2014

### **Recenzenci**

**Andrzej CICHOCKI  
Ewaryst RAFAJŁOWICZ**

### **Opracowanie redakcyjne i korekta**

**Alina KACZAK**

### **Projekt okładki**

**Marcin ZAWADZKI**

Wszelkie prawa zastrzeżone. Żadna część niniejszej książki, zarówno w całości, jak i we fragmentach, nie może być reprodukowana w sposób elektroniczny, fotograficzny i inny bez zgody wydawcy i właściciela praw autorskich.

© Copyright by Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2014

**OFICyna WYDAWNICZA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ**

Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

<http://www.oficyna.pwr.edu.pl>

e-mail: [oficwyd@pwr.edu.pl](mailto:oficwyd@pwr.edu.pl)

[zamawianie.ksiazek@pwr.edu.pl](mailto:zamawianie.ksiazek@pwr.edu.pl)

ISBN 978-83-7493-844-0

Drukarnia Oficyny Wydawniczej Politechniki Wrocławskiej. Zam. nr 564/2014.

## Spis treści

Przedmowa . . . . .	7
Wykaz oznaczeń . . . . .	11
Rozdział 1. Wprowadzenie . . . . .	17
1.1. Podstawowe modele . . . . .	18
1.1.1. Nieujemna faktoryzacja macierzy . . . . .	19
1.1.2. Nieujemna faktoryzacja tensora . . . . .	21
1.2. Algorytm naprzemiennej minimalizacji funkcji celu . . . . .	23
1.3. Estymacja liczby komponentów ukrytych . . . . .	26
1.4. Zarys historyczny . . . . .	31
Rozdział 2. Podstawowe funkcje celu . . . . .	35
2.1. Odległość euklidesowa . . . . .	36
2.2. Dywergencja Csiszára . . . . .	37
2.2.1. Dywergencja $\alpha$ . . . . .	37
2.2.2. Dywergencja Kullbacka–Leiblera . . . . .	39
2.2.3. Model Tweedie dla dywergencji $\alpha$ . . . . .	40
2.3. Dywergencja Bregmana . . . . .	43
2.3.1. Dywergencja $\beta$ . . . . .	43
2.3.2. Model Tweedie dla dywergencji $\beta$ . . . . .	45
2.4. Inne funkcje celu . . . . .	46
Rozdział 3. Podstawy teoretyczne . . . . .	49
3.1. Niejednoznaczność nieujemnej faktoryzacji macierzy . . . . .	49
3.1.1. Normalizacja czynników . . . . .	50
3.1.2. Miary rzadkości . . . . .	54
3.1.3. Podejście geometryczne . . . . .	55
3.1.4. Warunki jednoznaczności . . . . .	60
3.2. Cechy czynników . . . . .	73
3.2.1. Rzadkość czynników . . . . .	74
3.2.2. Gładkość czynników . . . . .	79
3.2.3. Ortogonalność czynników . . . . .	85
3.2.4. Korelacja czynników . . . . .	87
3.2.5. Lokalna niezmienniczość czynników . . . . .	91

---

Rozdział 4. Algorytmy . . . . .	99
4.1. Inicjalizacja czynników . . . . .	101
4.1.1. Inicjalizacja losowa . . . . .	101
4.1.2. Inicjalizacja wektorami centroidów . . . . .	103
4.1.3. Inicjalizacja wektorami osobliwymi . . . . .	106
4.1.4. Inicjalizacja wektorami bidiagonalizacji Lanczosa . . . . .	109
4.1.5. Inicjalizacja wierzchołkami otoczki wypukłej . . . . .	110
4.2. Warunki optymalności . . . . .	114
4.3. Kryteria stopu . . . . .	116
4.4. Algorytmy mnożeniowe . . . . .	118
4.4.1. Algorytm MUE . . . . .	119
4.4.2. Algorytm MKL . . . . .	124
4.4.3. Algorytm $\alpha$ -NMF . . . . .	126
4.4.4. Algorytm $\beta$ -NMF . . . . .	128
4.4.5. Algorytmy zregularizowane . . . . .	130
4.5. Algorytmy projekcyjne najmniejszych kwadratów . . . . .	140
4.5.1. Algorytm ALS . . . . .	141
4.5.2. Algorytm RALS . . . . .	142
4.6. Algorytmy blokowo-sekwencyjne . . . . .	144
4.6.1. Algorytm HALS . . . . .	144
4.6.2. Algorytm SCWA . . . . .	147
4.7. Gradientowe algorytmy kierunków poprawy . . . . .	150
4.7.1. Projekcyjna metoda Landwebera . . . . .	151
4.7.2. Algorytm rzutowania gradientu . . . . .	153
4.7.3. Algorytm gradientów skalowanych . . . . .	154
4.7.4. Algorytm gradientów optymalnych . . . . .	155
4.8. Algorytmy punktów wewnętrznych . . . . .	157
4.9. Algorytmy zbioru aktywnego . . . . .	162
4.9.1. Algorytm LH-NNLS . . . . .	162
4.9.2. Algorytm FC-NNLS . . . . .	165
4.9.3. Zregularizowany NNLS . . . . .	166
4.10. Algorytmy quasi-Newtona . . . . .	174
4.10.1. Regularyzacja hesjanu . . . . .	175
4.10.2. Algorytm obszaru zaufania . . . . .	178
4.10.3. Tłumione iteracje Newtona . . . . .	182
4.10.4. Algorytm punktów wewnętrznych w obszarach zaufania . . . . .	187
4.10.5. Algorytm spektralnego rzutowania gradientu . . . . .	193
4.11. Wyniki testów numerycznych . . . . .	196
4.11.1. Testy metod inicjalizacji czynników . . . . .	197
4.11.2. Liniowe zadanie najmniejszych kwadratów . . . . .	199
4.11.3. Testy prostych algorytmów NMF . . . . .	202
4.11.4. Testy zregularizowanych algorytmów NMF . . . . .	219



---

4.11.5. Testy uogólnionych algorytmów NMF . . . . .	222
Rozdział 5. Struktura modelu NMF . . . . .	225
5.1. Struktura symetryczna . . . . .	225
5.1.1. Algorytmy multiplikatywne . . . . .	226
5.1.2. Algorytmy addytywne . . . . .	231
5.1.3. Wyniki badań . . . . .	233
5.2. Struktura wielowarstwowa . . . . .	237
5.3. Struktura splotowa . . . . .	239
5.4. Struktura trójczłonowa . . . . .	241
5.4.1. Struktura dwuortogonalna . . . . .	241
5.4.2. Liniowa kombinacja funkcji bazowych . . . . .	243
5.4.3. Struktura wypukła . . . . .	246
5.5. Struktura afiniczna . . . . .	249
5.6. Struktura nieliniowa . . . . .	250
Rozdział 6. Modele dekompozycji tensorów . . . . .	253
6.1. Wybrane działania na tensorach . . . . .	253
6.2. Nieujemna faktoryzacja tensora . . . . .	256
6.2.1. Estymacja czynników . . . . .	259
6.2.2. Model NTF1 . . . . .	260
6.2.3. Model NTF2 . . . . .	262
6.2.4. Modele hybrydowe . . . . .	262
6.3. Dekompozycja Tuckera . . . . .	265
6.3.1. Ortogonalność czynników . . . . .	265
6.3.2. Nieujemność czynników . . . . .	266
6.3.3. Cechy mieszane . . . . .	268
6.4. Dekompozycja dużych zbiorów danych . . . . .	270
Rozdział 7. Przykładowe zastosowania modeli NMF i NTF . . . . .	275
7.1. Ślepa separacja źródeł . . . . .	275
7.1.1. Separacja sygnałów spektralnych . . . . .	276
7.1.2. Separacja sygnałów akustycznych . . . . .	279
7.2. Grupowanie danych . . . . .	290
7.2.1. Grupowanie twarde . . . . .	290
7.2.2. Grupowanie probabilistyczne . . . . .	296
7.2.3. Grupowanie dokumentów tekstowych . . . . .	297
7.3. Klasyfikacja nadzorowana . . . . .	301
7.3.1. Klasyfikacja obrazów twarzy . . . . .	302
7.3.2. Klasyfikacja obrazów tekstury . . . . .	305
7.3.3. Klasyfikacja obrazów algorytmem UO-NTF . . . . .	308
Rozdział 8. Podsumowanie . . . . .	313
Bibliografia . . . . .	325
Streszczenie w języku angielskim . . . . .	361



## Przedmowa

Jedną z podstawowych koncepcji, głęboko zakorzenioną w rozwoju nauki i postępie cywilizacyjnym, jest poszukiwanie prostych i efektywnych modeli reprezentujących złożone procesy i skomplikowane zjawiska fizyczne. Reprezentacja danych wielowymiarowych w przestrzeni o mniejszej liczbie wymiarów jest modelowaniem powszechnie stosowanym w wielu dziedzinach nauki, takich jak uczenie maszyn, ekstrakcja cech oraz analiza i przetwarzanie danych. Metody analizy składowych głównych (ang. *Principal Component Analysis*) oraz analizy składowych niezależnych (ang. *Independent Component Analysis*) są typowymi przykładami takiej reprezentacji danych.

Nieujemna faktoryzacja macierzy – ang. *Nonnegative Matrix Factorization* (NMF)<sup>1</sup> – należy do grupy metod reprezentacji danych w „zredukowanej” przestrzeni liczb nieujemnych. Podstawowa wersja metody NMF zakłada przybliżoną i liniową dekompozycję macierzy nieujemnej (np. macierzy nieujemnych danych pomiarowych) na macierze (faktory) o nieujemnych elementach i zwykle mniejszym rzędzie. Nieujemne i częstokroć rzadkie faktory mają pewne właściwości charakterystyczne, znaczeniowe i na ogół dość łatwą interpretację: nieujemną macierz danych można przedstawić jako liniową i addytywną kombinację pewnych wektorów nieujemnych cech rzadkich. Przykładowo, metodą NMF dekomponuje się obrazy twarzy na obrazy części składowych (cech), takich jak: oczy, usta, włosy, uszy itp. Lokalność, rzadkość, a przede wszystkim nieujemność wektorów reprezentacji i możliwość ich statystycznej zależności są właściwościami, które odróżniają NMF od wielu popularnych metod dekompozycji danych, np. od wspomnianych metod analizy składowych głównych lub analizy składowych niezależnych. Dodatkowo, duża elastyczność nieujemnej faktoryzacji macierzy w dostosowaniu do charakteru

---

<sup>1</sup> Ponieważ w polskim środowisku akademickim nie są jeszcze rozpowszechnione polskie skróty metody nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów, autor niniejszej monografii zdecydował się pozostać przy znanych skrótach angielskojęzycznych: NMF i NTF.

estymowanych faktorów (rzadkość, gładkość, ortogonalność, unimodalność itp.), rozkładu i mocy spektralnej zakłóceń danych pomiarowych, wymiaru dekomponowanej macierzy, stopnia dokładności aproksymacji modelu, a także struktury modelu, znajduje odzwierciedlenie w rosnącej popularności tej metody w różnych dziedzinach nauki, takich jak informatyka, elektronika, telekomunikacja, biomedycyna, chemia, ekonomia itd. Opublikowany w czasopiśmie „Nature” w 1999 roku artykuł autorstwa Lee i Seunga, który tak znacząco spopularyzował metodę NMF, ma już ponad 4500 cytowań według Google Scholar (stan z marca 2014).

Nieujemna faktoryzacja tensora – ang. *Nonnegative Tensor Factorization* (NTF) – jest metodą, którą można interpretować jako rozszerzenie nieujemnej faktoryzacji macierzy do reprezentowania danych zebranych w postaci tensora (wielowymiarowej tablicy liczb). Jest szczególnie przydatna do ekstrakcji dwuwymiarowych rzadkich i nieujemnych reprezentacji ze zbiorów obrazów dekomponowanych. W podstawowej wersji może być opisana znanym modelem PARAFAC (ang. *Parallel Factors*) lub CANDECOMP (ang. *Canonical Decomposition*) z narzuconą nieujemnością na estymowane faktory. Z kolei, ten model jest szczególnym przypadkiem modelu dekompozycji Tuckera, znanym również jako  $N$ -modalna analiza składowych głównych.

Autor niniejszej monografii uważa, że metody NMF i NTF, pomimo swej dużej popularności w literaturze angielskojęzycznej, są słabo znane w polskim środowisku akademickim i prawie w ogóle nie są omawiane w publikacjach polskojęzycznych. Celem niniejszej monografii habilitacyjnej jest zapoznanie Czytelnika z podstawami teoretycznymi, algorytmami oraz wybranymi zastosowaniami podanych metod. Książka zawiera nie tylko przegląd podstawowych zagadnień związanych z metodami NMF i NTF, ale także wyniki wieloletnich badań prowadzonych przez autora niniejszej pracy. Wyniki te są w znaczącej części nowe, a te które autor już opublikował w renomowanych czasopismach angielskojęzycznych, materiałach znanych konferencji międzynarodowych i współautorowanej monografii wydanej przez *Wiley and Sons* są zamieszczone w formie porównawczej.

Książka adresowana jest głównie do środowiska akademickiego, ale może być również przydatna inżynierom zajmującym się przetwarzaniem i analizą danych, sygnałów czy obrazów. Zawiera bowiem nie tylko materiał przeznaczony do studiowania tej tematyki, ale również pseudokody algorytmów, które mogą być łatwo zaimplementowane w różnych środowiskach obliczeniowych.

Książka zawiera osiem rozdziałów głównych oraz wykaz literatury.

Rozdział pierwszy ma charakter wprowadzający. Zawiera gruntowny opis modelu i algorytmu naprzemiennej optymalizacji (estymacji) czynników, estymacji rzędu faktoryzacji oraz krótki zarys historyczny omawianych metod.

W kolejnym rozdziale (rozdz. 2) omówiono podstawowe funkcje celu, stosowane w nieujemnych faktoryzacjach. Są to miary metryczne lub miary rozbieżności między rozkładami prawdopodobieństwa. Omówiono podstawowe rodziny miar rozbieżności, a także zinterpretowano ich związek z charakterystyką danych obserwowanych.

Rozdział trzeci wprowadza Czytelnika do teorii nieujemnej faktoryzacji macierzy, zawiera interpretację geometryczną analizowanego modelu i warunki jednoznaczności faktoryzacji. Omówiono też kryteria wymuszające określone cechy czynników.

W rozdziale czwartym przedstawiono podstawowe algorytmy numeryczne stosowane w metodach NMF i NTF, zwłaszcza te, którymi autor zajmował się w swoich badaniach. Zamieszczono pseudokody wybranych algorytmów, jak również empiryczne wyniki badań ich zbieżności dla syntetycznych problemów występujących w metodzie NMF. Rozdział ten zawiera również krótki przegląd podstawowych metod inicjalizacji iteracyjnego algorytmu naprzemiennej optymalizacji funkcji celu, który jest fundamentalną częścią metod NMF i NTF, a także kryteria zatrzymania tego algorytmu.

W rozdziale piątym zaprezentowano różne struktury modelu NMF, które są szczególnymi przypadkami bądź rozszerzeniami podstawowego modelu NMF. W zależności od zastosowania, struktury te wymuszają określoną charakterystykę czynników.

Rozdział szósty dotyczy faktoryzacji tensorów, ze szczególnym uwzględnieniem modelu NTF. Przedstawiono modele, związki między nimi oraz szczególne podejścia algorytmiczne.

W rozdziale siódmym pokazano wybrane zastosowania metod NMF i NTF, zwłaszcza tych, które wykorzystują algorytmy omawiane w rozdziale czwartym. Omówiono trzy podstawowe obszary zastosowań: grupowanie danych, nadzorowana klasyfikacja obiektów/obrazów i ślepa separacja źródeł.

Rozdział ósmy jest podsumowaniem zaprezentowanego materiału, zawiera komentarze wyników eksperymentów, wnioski, a także przewidywane kierunki badań.



# Wykaz oznaczeń

## Wybrane symbole

$\mathbb{R}$	zbiór liczb rzeczywistych
$\mathbb{R}_+$	zbiór nieujemnych liczb rzeczywistych
$\mathbb{R}^I$	zbiór $I$ -wymiarowych wektorów rzeczywistych
$\mathbb{R}^{I \times J}$	zbiór macierzy o wymiarze $I \times J$ i elementach z ciała liczb rzeczywistych
$\mathbb{R}^{I \times J \times K}$	zbiór tensorów trzeciego stopnia o wymiarze $I \times J \times K$ i elementach z ciała liczb rzeczywistych
$\mathbb{C}$	zbiór liczb zespolonych
$\mathbb{Z}$	zbiór liczb całkowitych
$a$	skalar
$\mathbf{a}$	wektor (kolumnowy)
$a_i = [\mathbf{a}]_i \in \mathbb{R}^I$	$i$ -ty element $I$ -wymiarowego wektora rzeczywistego $\mathbf{a}$
$\mathbf{A}$	macierz
$a_{ij} = [\mathbf{A}]_{ij} \in \mathbb{R}^{I \times J}$	$ij$ -ty element rzeczywistej macierzy $\mathbf{A}$ o wymiarach $I \times J$
$\mathbf{a}_j = a_{*,j} = [\mathbf{A}]_{*,j}$	$j$ -ty wektor kolumnowy ( $I \times 1$ ) macierzy $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_J] \in \mathbb{R}^{I \times J}$
$\underline{\mathbf{a}}_i = a_{i,*} = [\mathbf{A}]_{i,*}$	$i$ -ty wektor wierszowy ( $1 \times J$ ) macierzy $\mathbf{A} = [\underline{\mathbf{a}}_1^T, \dots, \underline{\mathbf{a}}_i^T, \dots, \underline{\mathbf{a}}_J^T]^T \in \mathbb{R}^{I \times J}$
$\mathcal{A}$	tensor (wielowymiarowa tablica liczb)
$a_{i_1 i_2 \dots i_N} = [\mathcal{A}]_{i_1 i_2 \dots i_N} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$	$i_1 i_2 \dots i_N$ -ty element ( $N$ -tego stopnia lub $N$ -wymiarowego) tensora $\mathcal{A}$ o rzeczywistych elementach
$\mathfrak{A}$	zbiór obiektów pewnej klasy (wektorów, macierzy, tensorów, funkcji itp.)
$\#\{\mathfrak{A}\}$ lub $ \mathfrak{A} $	moc (liczebność) zbioru $\mathfrak{A}$

$\mathbf{A}^T$	macierz transponowana
$\mathbf{A}^{-1}$	macierz odwrotna
$\mathbf{A}^\alpha = [a_{ij}^\alpha]$	podniesienie do potęgi $\alpha$ każdego elementu macierzy $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^\dagger$	pseudoodwrotność Moora–Penrosa macierzy $\mathbf{A}$
$\text{rank}(\mathbf{A})$	rzęd macierzy $\mathbf{A}$
$\text{tr}(\mathbf{A})$	śląd macierzy $\mathbf{A}$
$\text{cond}(\mathbf{A})$	wskaźnik uwarunkowania macierzy $\mathbf{A}$
$\text{span}(\mathbf{A})$	podprzestrzeń wektorowa rozpięta na kolumnach macierzy $\mathbf{A}$
$\det(\mathbf{A})$	wyznacznik macierzy $\mathbf{A}$
$\text{diag}(\mathbf{a})$	macierz diagonalna zawierająca na głównej przekątnej elementy wektora $\mathbf{a}$
$\text{vec}(\mathbf{A})$	wektoryzacja macierzy $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ : $\text{vec}(\mathbf{A}) = [a_{11}, a_{21}, \dots, a_{I1}, a_{12}, \dots, a_{IJ}]^T \in \mathbb{R}^{IJ}$
$\text{mtx}(\mathbf{a}, I, J)$	matrycyzacja wektora $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$ : $\text{mtx}(\mathbf{a}, I, J) = \begin{bmatrix} a_1 & a_{I+1} & \cdots & a_{N-I+1} \\ a_2 & a_{I+2} & \cdots & a_{N-I+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_I & a_{2I} & \cdots & a_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{I \times J} \text{ (jeśli } N = IJ)$
$R(\mathbf{A})$	obraz (przestrzeń kolumnowa) macierzy $\mathbf{A}$
$N(\mathbf{A})$	jądro (przestrzeń zerowa) macierzy $\mathbf{A}$
$\lambda_{\max}(\mathbf{A})$	maksymalna wartość własna macierzy $\mathbf{A}$
$\lambda_{\min}(\mathbf{A})$	minimalna wartość własna macierzy $\mathbf{A}$
$\lambda_i(\mathbf{A})$	$i$ -ta wartość własna macierzy $\mathbf{A}$
$\sigma_i(\mathbf{A})$	$i$ -ta wartość osobliwa macierzy $\mathbf{A}$
$\mathbf{A} \geq \mathbf{0}$	macierz $\mathbf{A}$ o nieujemnych elementach $a_{ij} \geq 0$
$\mathbf{A} \geq \varepsilon$	macierz $\mathbf{A}$ o dodatnich elementach $a_{ij} \geq \varepsilon$ , gdzie $\varepsilon$ jest dodatnią stałą
$\mathbf{0}$	wektor lub macierz samych zer
$\mathbf{I}_n$	macierz jednostkowa rozmiaru $n \times n$
$\mathcal{I}_n$	tensor jednostkowy $n$ -tego stopnia
$\mathbf{1}_{I \times J}$	macierz wymiaru $I \times J$ zawierająca same jedynki
$D(\mathbf{P}  \mathbf{Q})$	funkcja miary podobieństwa (rozbieżności lub odległości) pomiędzy obiektami $\mathbf{P}$ i $\mathbf{Q}$ (skalarami, wektorami, macierzami lub tensorami)



$p(\mathbf{x})$ lub $p_x(\mathbf{x})$	funkcja gęstości prawdopodobieństwa zmiennej $\mathbf{x}$
$\mathcal{U}[0, 1]$	równomierny rozkład prawdopodobieństwa na odcinku $[0, 1]$
$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	standardowy rozkład normalny o parametrach $\mu$ i $\sigma^2$
$\arg \min_{\theta} J(\theta)$	wartość $\theta$ , która minimalizuje funkcję $J(\theta)$
$\nabla_{x_i} D$	gradient funkcji $D$ względem zmiennej $x_i$
$\nabla_{\mathbf{X}} D$	gradient funkcji $D$ względem wszystkich zmiennych w $\mathbf{X}$
$\triangleq$	z definicji
$\exp(a) = e^a$	funkcja eksponencjalna zmiennej $a$
$\ln(a)$	logarytm naturalny zmiennej $a$
$\text{sign}(a)$	funkcja znaku = $\begin{cases} 1 & \text{dla } a > 0 \\ 0 & \text{dla } a = 0 \\ -1 & \text{dla } a < 0 \end{cases}$
$[a]_+ = \max\{0, a\}$	projekcja na przestrzeń $\mathbb{R}_+$ ; ujemne wartości zmiennej $a$ są zamieniane na wartości zerowe
$ a $	wartość bezwzględna (moduł) zmiennej $a$
$\ \mathbf{a}\ _p$	norma $l_p$ wektora $\mathbf{a}$ , gdzie $p = 0, 1, 2, \dots, \infty$
$\mathcal{E}\{X\}$	wartość oczekiwana zmiennej losowej $X$
$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$	iloczyn skalarny (wewnętrzny) wektorów $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^I$ i $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^I$ : $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \mathbf{a}^T \mathbf{b} \in \mathbb{R}$
$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle$	iloczyn skalarny (wewnętrzny) macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ i $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ : $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B}^T \mathbf{A}) \in \mathbb{R}$
$\mathbf{a} \circ \mathbf{b}$	iloczyn zewnętrzny wektorów $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^I$ i $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^J$ : $\mathbf{a} \circ \mathbf{b} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T \in \mathbb{R}^{I \times J}$
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	iloczyn Kroneckera macierzy $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ i $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ : $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = [a_{ij} \mathbf{B}] \in \mathbb{R}^{IM \times JN}$
$\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$	iloczyn Khatri–Rao macierzy $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ i $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_J] \in \mathbb{R}^{M \times J}$ : $\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = [\mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{a}_J \otimes \mathbf{b}_J] \in \mathbb{R}^{IM \times J}$
$\mathbf{A} \circledast \mathbf{B}$	iloczyn Hadamarda (iloczyn Schura lub iloczyn po współrzędnych) $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ i $\mathbf{B} = [b_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ : $\mathbf{A} \circledast \mathbf{B} = [a_{ij} b_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$
$\mathbf{A} \oslash \mathbf{B}$	dzielenie elementów macierzy $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ i $\mathbf{B} = [b_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J}$ : $\mathbf{A} \oslash \mathbf{B} = \left[ \frac{a_{ij}}{b_{ij}} \right] \in \mathbb{R}^{I \times J}$
$\mathcal{G} \times_n \mathbf{A}$	iloczyn tensora $\mathcal{G} = [g_{j_1 j_2, \dots, j_n}] \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_n}$ i macierzy $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J_n}$ względem modu $n$ : $\mathcal{G} \times_n \mathbf{A} = \left[ \sum_{j_n=1}^{J_n} g_{j_1, \dots, j_n} a_{ij_n} \right] \in \mathbb{R}^{J_1 \times \dots \times J_{n-1} \times I \times J_{n+1} \times \dots \times J_n}$

- $\mathcal{G} \bar{\times}_n \mathbf{a}$  iloczyn tensora  $\mathcal{G} = [g_{j_1 j_2 \dots j_N}] \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}$  i wektora  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{J_n}$  względem modu  $n$ :
- $\mathcal{G} \bar{\times}_n \mathbf{a} = \left[ \sum_{j_n=1}^{J_n} g_{j_1, \dots, j_N} a_{j_n} \right] \in \mathbb{R}^{J_1 \times \dots \times J_{n-1} \times J_{n+1} \times \dots \times J_N}$
- $\mathbf{G}_{(n)}$  rozwinięcie (ang. *unfolding*) lub matrycyzacja tensora  $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}$  względem  $n$ -tego modu do macierzy  $\mathbf{G}_{(n)} \in \mathbb{R}^{J_n \times \prod_{p \neq j_n} J_p}$
- $\mathbf{A}^{(n)}$   $n$ -ty faktor dekompozycji tensora
- $\mathbf{a}_j^{(n)}$   $j$ -ty wektor kolumnowy faktora  $\mathbf{A}^{(n)}$
- $\{\mathbf{A}\}$  zbiór wszystkich faktorów dekompozycji  $\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{A}^{(2)}, \dots, \mathbf{A}^{(N)}$
- $\{\mathbf{a}_j\}$  zbiór  $j$ -tych wektorów kolumnowych wszystkich faktorów  $\mathbf{a}_j^{(1)}, \mathbf{a}_j^{(2)}, \dots, \mathbf{a}_j^{(N)}$
- $\mathbf{A}^{\odot}$   $\mathbf{A}^{(N)} \odot \mathbf{A}^{(N-1)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(1)}$
- $\mathbf{A}^{\odot-n}$   $\mathbf{A}^{(N)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(n+1)} \odot \mathbf{A}^{(n-1)} \odot \dots \odot \mathbf{A}^{(1)}$
- $\mathbf{A}^{\otimes}$   $\mathbf{A}^{(N)} \otimes \mathbf{A}^{(N-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{A}^{(1)}$
- $\mathbf{A}^{\otimes-n}$   $\mathbf{A}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{A}^{(n+1)} \otimes \mathbf{A}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{A}^{(1)}$
- $\widehat{\mathbf{Y}}$  estymowana macierz  $\mathbf{Y}$

## Wybrane skróty

Skrótowiec	Wyrażenie angielskie	Definicja polska
AIC	Akaike Information Criterion	Kryterium <i>AIC</i>
ALS	Alternating Least Squares	Naprzemienna optymalizacja według kryterium najmniejszych kwadratów
BSS	Blind Source Separation	Ślepa separacja źródeł
CNMF	Constrained NMF	Metoda NMF z ograniczeniami
CP	CANDECOMP/PARAFAC	Dekompozycja CP
EMML	Expectation-Maximization Maximum-Likelihood algorithm	Algorytm maksymalizacji funkcji wiarygodności za pomocą algorytmu maksymalizacji wartości oczekiwanej
EVD	Eigenvalue Decomposition	Dekompozycja macierzy względem wartości własnych
HALS	Hierarchical Alternating Least Squares	Hierarchiczna i naprzemienna optymalizacja według kryterium najmniejszych kwadratów
ICA	Independent Component Analysis	Analiza składowych niezależnych
IS	Itakura–Saito divergence	Miara lub dywergencja Itakura–Saito
ISRA	Image Space Reconstruction Algorithm	Algorytm rekonstrukcji obrazu minimalizujący odległość euklidesową
KL	Kullback–Leibler divergence	Miara lub dywergencja Kullbacka–Leiblera
MRF	Markov Random Field	Losowe pole Markowa
NMF	Nonnegative Matrix Factorization	Nieujemna faktoryzacja macierzy
NTD	Nonnegative Tucker Decomposition	Nieujemna faktoryzacja Tuckera
NTF	Nonnegative Tensor Factorization	Nieujemna faktoryzacja tensora

---

PAF	Patch Alignment Framework	Struktura wyśrodkowywania łań
PARAFAC	Parallel Factor Analysis	Dekompozycja PARAFAC
PCA	Principal Component Analysis	Analiza składowych głównych
PLSI	Probabilistic Latent Semantic Indexing	Probabilistyczne indeksowanie semantyczne
RALS	Regularized Alternating Least Squares	Zregulowana naprzemienna optymalizacja według kryterium najmniejszych kwadratów
RLA	Richardson-Lucy Algorithm	Algorytm zaproponowany przez Richardsona i Luciego
SIR	Signal-to-Interference Ratio	Współczynnik sygnał/zakłócenie
SNR	Signal-to-Noise Ratio	Współczynnik sygnał/szum
SVD	Singular Value Decomposition	Dekompozycja macierzy względem wartości osobliwych
SVM	Support Vector Machine	Klasyfikator wektorów podpierających

# 1. Wprowadzenie

Intensywny rozwój techniki pozyskiwania danych cyfrowych spowodował, że ilość danych jest częstokroć zbyt duża do przetwarzania i analizy klasycznymi narzędziami informatycznymi. Istnieje więc potrzeba kompresji lub „redukcji” pozyskiwanej informacji do takiej formy, która byłaby zarówno dobrą reprezentacją pozyskanych danych, jak i łatwą do przetwarzania i przechowywania w pamięci wirtualnej. Zadanie reprezentacji danych można zrealizować przez tzw. redukcję wymiarowości modelu, czyli transformację wielowymiarowych danych oryginalnych do przestrzeni o zredukowanej liczbie wymiarów. Transformacja ta powinna mieć takie właściwości, aby „zredukowane” dane zawierały maksymalną ilość istotnych informacji, odzwierciedlały ukrytą strukturę oryginalnych danych, a także aby miały łatwą interpretację.

Tematyka redukcji wymiarowości modelu jest szeroko omawiana w literaturze, np. w [29, 244, 334, 404, 419]. Rozważania przedstawione w niniejszej pracy ograniczają się do pewnej grupy metod redukcji wymiarowości modelu, które mogą być również postrzegane jako metody ekstrakcji cech (ang. *feature extraction*).

Generalnie, ekstrakcja cech może być wykonywana metodami liniowymi lub nieliniowymi, z danych zapisanych w postaci macierzy lub tensora (wielowymiarowej tablicy liczb). Do podstawowych liniowych metod ekstrakcji cech z danych macierzowych należy zaliczyć: analizę składowych głównych (PCA – ang. *Principal Component Analysis*) [214, 347], analizę składowych niezależnych (ICA – ang. *Independent Component Analysis*) [7, 200], liniową analizę dyskryminacyjną (LDA – ang. *Linear Discriminant Analysis*) [299, 373] i związany z nią liniowy dyskryminator Fiszera (ang. *Fisher linear discriminant*) [132], analizę czynnikową (FA – ang. *Factor Analysis*) [56, 318] i wreszcie nieujemną faktoryzację macierzy (NMF – ang. *Nonnegative Matrix Factorization*) [257, 258, 338, 341].

Jeśli dane obserwowane wyrażone są w postaci wielowymiarowego tensora o wymiarach łatwych do interpretowania lub mających fizyczne znaczenie, eks-

trakcji cech można dokonać, stosując dekompozycję Tuckera (ang. *Tucker Decomposition*) [435, 436], metodę PARAFAC (ang. PARAllel FACtor analysis) [173, 175] lub CANDECOMP [53], metodę HOSVD (ang. *Higher-Order Singular Value Decomposition*) [103], nieujemną faktoryzację tensora (NTF – ang. *Non-negative Tensor Factorization*) [54, 224, 339, 397] lub multiliniowe rozszerzenia metod PCA i LDA [295].

Nieliniowe metody ekstrakcji cech [260] zasadniczo dzielą się na dwie grupy. Do pierwszej należy zaliczyć metody jądrowe, które transformują nieliniowo oryginalne dane do przestrzeni cech o znacznie większym wymiarze. Następnie, z tej przestrzeni wykonywana jest redukcja modelu metodami liniowymi. Drugą grupę stanowią metody transformujące oryginalne dane wielowymiarowe do przestrzeni cech w tzw. zanurzonej nieliniowej rozmaitości (ang. *embedded nonlinear manifold*) o niższym wymiarze.

Właściwości i charakter cech estymowanych są różne w zależności od zastosowanej metody. Przykładowo metoda PCA dostarcza ortogonalnych reprezentacji o maksymalnej wariancji, metoda ICA zaś znajduje składowe, które są zarówno statystycznie niezależne, jak i niegaussowskie. Cechy uzyskiwane metodami PCA i ICA mogą zatem zawierać elementy ujemne, które nie mają fizycznego znaczenia ani łatwej interpretacji, gdy obserwowane dane są nieujemne, jak np. obrazy, widma, spektrogramy mocy widmowej lub macierz rozkładu prawdopodobieństw. Istnieje więc potrzeba wymuszania nieujemności ekstrahowanych cech dla nieujemnych danych obserwowanych.

Przedmiotem rozważań w niniejszej monografii są metody NMF i NTF, które z założenia mogą być zastosowane do ekstrakcji cech lub redukcji wymiarowości modelu, jeśli obserwowane dane są nieujemne albo mogą być łatwo i z małym błędem przekształcone do postaci nieujemnej.

## 1.1. Podstawowe modele

W algebrze numerycznej znanych jest wiele faktoryzacji macierzy, np. LU, QR, EVD, SVD czy faktoryzacja Choleskiego [30, 154], które są kluczowymi narzędziami w analizie i implementacji wielu algorytmów do obliczeń numerycznych.

Metody NMF i NTF nie są jeszcze obecnie zaliczane do podstawowych metod algebry numerycznej, ale niewątpliwie są istotnymi narzędziami w modelowaniu, przetwarzaniu i analizie danych nieujemnych. Znalazły liczne zastosowania w różnych dziedzinach nauki, badaniach stosowanych i technikach inżynierskich.

Metoda NMF najczęściej ogranicza się do liniowego modelu dekompozycji macierzy nieujemnej na iloczyn dwóch macierzy o nieujemnych elementach. Metoda NTF jest opisywana multiliniowym modelem dekompozycji wielowymiarowego tensora na iloczyn supertensora jednostkowego i nieujemnych macierzy modalnych wzdłuż każdego modu (wymiaru), czyli tzw. nieujemna wersja modelu PARAFAC. Należy jednak podkreślić, że nie są to jedyne modele, które definiują nieujemną faktoryzację macierzy lub tensora. W rozdziale tym omówiono jedynie podstawowe wersje modeli NMF i NTF. Inne warianty nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensora znajdują się w rozdziale 5 i 6.

### 1.1.1. Nieujemna faktoryzacja macierzy

**Definicja 1.1.** *Zadaniem metody NMF jest znalezienie dla nieujemnej macierzy<sup>1</sup>  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  takich nieujemnych i pełnego rzędu macierzy (faktorów)  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , aby*

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}, \quad (1.1)$$

dla zadanej liczby  $J$  oraz przy ewentualnie dostępnej wiedzy a priori o charakterze poszukiwanych faktorów.

Zbiór nieujemnych liczb rzeczywistych oznaczony jest przez  $\mathbb{R}_+$ . Liczba  $J$  jest często określana mianem *rzędu faktoryzacji*.

Model można wyrazić równoważną postacią:

$$\mathbf{Y} = \sum_{j=1}^J \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j = \sum_{j=1}^J \mathbf{a}_j \circ \mathbf{b}_j, \quad (1.2)$$

gdzie  $\mathbf{a}_j$  jest  $j$ -tą kolumną macierzy  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J]$ ,  $\mathbf{x}_j$  jest  $j$ -tym wierszem macierzy  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{b}_j$  jest  $j$ -tą kolumną macierzy  $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_J] = [\mathbf{x}_1^T, \dots, \mathbf{x}_J^T] = \mathbf{X}^T \in \mathbb{R}_+^{T \times J}$ , zaś symbol  $\circ$  oznacza iloczyn zewnętrzny macierzy. Ze wzoru (1.2) wynika, że model (1.1) można wyrazić przez dekompozycję macierzy nieujemnej  $\mathbf{Y}$  na sumę  $J$  nieujemnych macierzy  $\mathbf{a}_j \circ \mathbf{b}_j$  rzędu pierwszego.

Formuła (1.2) jest blisko związana z nieujemną faktoryzacją rzędu (ang. *Nonnegative Rank Factorization*) [208] lub tzw. nieujemnym rzędem (ang. *Nonnegative Rank*) macierzy nieujemnej [90]. Nieujemny rząd macierzy  $\mathbf{Y}$  określany jest jako

<sup>1</sup> Macierz nieujemna definiowana jest jako macierz o nieujemnych elementach. Macierz, której wszystkie wartości własne są nieujemne określana jest jako macierz nieujemnie określona.

najmniejsza naturalna liczba  $J$  w (1.2), dla której nieujemną macierz  $\mathbf{Y}$  można rozłożyć na sumę nieujemnych macierzy rzędu pierwszego.

Faktoryzacja określona formułą (1.1) możliwa jest dla wąskiej klasy macierzy  $\mathbf{Y}$  – klasy macierzy faktoryzowalnych. W praktyce, ten przypadek zdarza się rzadko, ponieważ trudno znaleźć takie sytuacje, w których dokładny i liniowy model deterministyczny w pełni opisuje rzeczywistość. Dlatego też najczęściej model NMF dotyczy faktoryzacji przybliżonej i może być określony następująco:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{N}, \quad (1.3)$$

gdzie  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , natomiast  $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{I \times T}$  – macierz zaburzeń modelu, szumów lub macierz błędów residualnych.

Modelu (1.3) nie można łączyć ze wspomnianym modelem nieujemnej faktoryzacji rzędu. Metoda NMF w ogólnym znaczeniu dotyczy faktoryzacji przybliżonej i może być zastosowana do znacznie szerszej klasy macierzy nieujemnych niż nieujemna faktoryzacja rzędu.

Ponieważ zwykle zaburzenia definiowane macierzą  $\mathbf{N}$  nie mają określonego znaku, macierz  $\mathbf{Y} = [y_{it}]$  w modelu (1.3) może nie być macierzą nieujemną. Gdy taka sytuacja występuje, należy najpierw wykonać transformację:  $\forall i, t : y_{it} \leftarrow \max\{0, y_{it}\}$ , sprowadzającą nieujemne elementy do wartości zerowej. To działanie, chociaż może zmieniać rozkład elementów w  $\mathbf{N}$ , usprawnia pracę algorytmów numerycznych dla estymacji, z założenia nieujemnych czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ .

Model (1.3) obowiązuje dla znacznie szerszej klasy macierzy  $\mathbf{Y}$  niż model (1.1). Jeśli nawet nieujemna macierz  $\mathbf{Y}$  nie może być opisana modelem (1.1), zwykle może być lepiej lub gorzej aproksymowana modelem przybliżonej faktoryzacji (1.3). Dokładność przybliżenia zależy od wielu czynników, między innymi, liczby  $J$ , algorytmu użytego do estymacji czynników, czy też liczby iteracji procesu estymacji.

Faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  mają różną interpretację w zależności od zastosowania. W dalszej części krótko scharakteryzowano przykładowe zastosowania metody NMF: analiza skupień, nadzorowana klasyfikacja i ślepa separacja źródeł. Dokładny opis wybranych zastosowań znajduje się w rozdziale 8.

Jedną z podstawowych aplikacji nieujemnej faktoryzacji macierzy jest analiza skupień (ang. *clustering*) wielowymiarowych danych nieujemnych. W tym zastosowaniu przyjmuje się, że kolumny macierzy  $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T] \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  są wektorami obserwacji, które należy przydzielić do zadanej liczby skupień. Stosując model NMF do  $\mathbf{Y}$ , kolumny macierzy  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  mogą być interpretowane jako wektory wskazujące geometryczne środki skupień (centroidy), a każdy element  $x_{jt}$  macierzy  $\mathbf{X} = [x_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  jest wskaźnikiem (prawdopodobieństwem)



przynależności wektora  $\mathbf{y}_t$  do  $j$ -tego skupienia. Zakłada się, że liczba  $J$  określa liczbę skupień.

W przypadku nadzorowanej klasyfikacji wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$  są  $I$ -wymiarowymi wektorami uczącymi i znana jest przynależność każdego wektora do określonej klasy. Po zastosowaniu metody NMF do macierzy  $\mathbf{Y}$ , kolumny macierzy  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  są rzadkimi i nieujemnymi wektorami cech (ang. *feature vectors*). Natomiast kolumny macierzy  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  są  $J$ -wymiarowymi, trenującymi wektorami kodującymi (gdzie  $J \ll I$ ), zawierającymi nieujemne współczynniki liniowej kombinacji wektorów cech, o właściwościach dyskryminacyjnych. Rzutuąc wektory testowe na podprzestrzeń kolumnową macierzy  $\mathbf{A}$  (wektorów cech), otrzymuje się  $J$ -wymiarowe testowe wektory kodujące. Mogą one być łatwo porównane z trenującymi wektorami kodującymi, stosując np. regułę  $k$  najbliższych sąsiadów (ang.  $k$ -NN).

W ślepej separacji źródeł, wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  reprezentują obserwowane i zmieszane (poprzez superpozycję) sygnały lub zwektoryzowane obrazy. Macierz  $\mathbf{A}$  jest macierzą mieszającą, a wiersze macierzy  $\mathbf{X}$  określają źródłowe sygnały lub jednowymiarowe reprezentacje obrazu.

Jeśli kolumny macierzy  $\mathbf{Y}$  są zwektoryzowanymi obrazami obiektów podobnych do siebie, wektory cech w macierzy  $\mathbf{A}$  są rzadkimi reprezentacjami charakterystycznych i wspólnych części tych obrazów (obiektów). Przykładowo, jeśli macierz  $\mathbf{Y}$  utworzona jest z wyśrodkowanych, przeskalowanych i monochromatycznych obrazów twarzy, wektory cech reprezentują części charakterystyczne twarzy, takie jak oczy, nos, uszy, usta itp. Takie wektory cech są *wektorami cząstkowych reprezentacji* w odróżnieniu od wektorów cech uzyskiwanych metodą PCA, które mają charakter holistyczny. Wniosek ten, opublikowany w pracy [257], najprawdopodobniej znacząco przyczynił się do intensywnego rozwoju metody NMF.

### 1.1.2. Nieujemna faktoryzacja tensora

**Definicja 1.2.**  $N$ -wymiarowa tablica (ang.  $N$ -way array) liczb rzeczywistych jest określana mianem *tensora*<sup>2</sup>  $\mathcal{Y} = [y_{i_1, i_2, \dots, i_N}] \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  o stopniu  $N$ , gdzie  $I_n$  oznacza liczbę elementów tensora wzdłuż  $n$ -tego modu ( $n$ -tego wymiaru tablicy)

<sup>2</sup> Stosowany w fizyce czy matematyce tensor typu  $(p, q)$  jest  $(p + q)$ -liniowym odwzorowaniem:  $y : V^p \otimes (V^*)^q \rightarrow W$ , gdzie  $V$  jest przestrzenią liniową nad ciałem  $W$ ,  $V^*$  jest przestrzenią sprzężoną do  $V$ , a  $\otimes$  oznacza iloczyn tensorowy. Jest to tensor  $p$ -krotnie kowariantny i  $q$ -krotnie kontrawariantny. Tensor zdefiniowany w tej monografii jest uproszczoną (kowariantną) wersją tensora typu  $(p, q)$ . Przyjęto bowiem, kierując się charakterystyką obserwacji oraz modelem je opisującym, że  $p = N$  oraz  $q = 0$ , a zatem tensor ten nie ma części kontrawariantnej.

oraz  $y_{i_1, i_2, \dots, i_N}$  jest elementem tensora  $\mathcal{Y}$  przy ustalonych indeksach  $i_1, i_2, \dots, i_N$  dla  $i_n \in \{1, \dots, I_n\}$ ,  $1 \leq n \leq N$ .

Według definicji 1.2 tensor zerowego stopnia jest skalar, tensor pierwszego stopnia ( $N = 1$ ) jest wektorem, tensor drugiego stopnia ( $N = 2$ ) jest macierzą, a dla  $N > 2$  tensor taki nazwany jest tensorem wyższego stopnia lub tensorem wielowymiarowym.

Model określony przez (1.2) łatwo rozszerzyć do postaci dekompozycji nieujemnego tensora wyższego stopnia, przyjmując, że nieujemny  $N$ -tego stopnia tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  można wyrazić przez sumę nieujemnych tensorów  $N$ -tego stopnia i rzędu pierwszego, a więc

$$\mathcal{Y} = \sum_{j=1}^J \mathbf{u}_j^{(1)} \circ \mathbf{u}_j^{(2)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_j^{(N)}, \quad (1.4)$$

gdzie  $\mathbf{u}_j^{(n)} \geq 0$  dla  $j = 1, \dots, J$  oraz  $n = 1, \dots, N$ .

Model definiuje nieujemną faktoryzację tensora, czyli metodę NTF. Jeśli wektory  $\mathbf{u}_j^{(n)}$  nie mają określonego znaku, model (1.4) jest równoważny standardowemu modelowi PARAFAC lub CANDECOMP.

Dla  $N = 2$  model (1.4) sprowadza się do postaci (1.2), przyjmując  $\mathbf{u}_j^{(1)} = \mathbf{a}_j$  oraz  $\mathbf{u}_j^{(2)} = \mathbf{x}_j^T$ .

Podobnie jak model (1.2) łatwo przekształcić do postaci (1.1), model (1.4) można również wyrazić jako:

$$\mathcal{Y} = \mathcal{I} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)}, \quad (1.5)$$

gdzie  $\mathcal{I} \in \mathbb{R}_+^{J \times \dots \times J}$  – tensor jednostkowy stopnia  $N$  (zawiera jedynki na głównej diagonalu i zera poza),  $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times J}$  dla  $n = 1, \dots, N$ , oraz  $\times_n$  – iloczyn tensor-macierz<sup>3</sup> względem  $n$ -tego modu.

Podobnie jak dla modelu NMF, w praktycznych zastosowaniach model dokładnej faktoryzacji (1.5) zastępowany jest przybliżoną wersją:

$$\mathcal{Y} = \mathcal{I} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)} + \mathcal{N}, \quad (1.6)$$

gdzie  $\mathcal{N} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  – tensor zaburzeń modelu, np. szumów.

<sup>3</sup> Niech  $\mathcal{G} = [g_{j_1 j_2 \dots j_N}] \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}$  oraz macierz  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{I \times J_n}$ . Iloczyn tensor-macierz względem modu  $n$  wyraża się jako  $\mathcal{G} \times_n \mathbf{A} = \left[ \sum_{j_n=1}^{J_n} g_{j_1, \dots, j_N} a_{ij_n} \right] \in \mathbb{R}^{J_1 \times \dots \times J_{n-1} \times I \times J_{n+1} \times \dots \times J_N}$ .

Nieujemna faktoryzacja tensora jest multiliniowym rozszerzeniem metody NMF, co sugeruje, że jest to metoda do ekstrakcji rzadkich i nieujemnych wektorów, reprezentujących ukryte cechy tensora względem każdego z modów. To podejście jest szczególnie przydatne w analizie danych wielowymiarowych, gdzie każdy wymiar ma oddzielną interpretację lub znaczenie. Przykładowo, spektrogramy sygnałów obserwowanych wielokanałowo mogą tworzyć tensor trzeciego stopnia, gdzie poszczególne mody związane są z wielkościami pomiarowymi: czas, częstotliwość, kanał. Stosując NTF do takich danych, można uzyskać wektory reprezentujące rozkład cech ukrytych (nieobserwowanych) w funkcji czasu, częstotliwości oraz indeksu kanału. Cechy te mają fizyczne znaczenie i mogą być łatwo interpretowane. Gdyby ekstrakcja cech odbywała się z wektoryzowanych spektrogramów, informacja o rozkładzie „udziału” komponentów ukrytych (ang. *latent components*) w obserwacjach względem czasu i częstotliwości byłaby utracona.

Wybrane zastosowania modelu NTF, takie jak nadzorowana klasyfikacja obrazów, omówiono w rozdziale 8.

## 1.2. Algorytm naprzemiennej minimalizacji funkcji celu

Zadanie postawione w definicji 1.1 jest najczęściej rozwiązywane algorytmem naprzemiennej minimalizacji (ang. *alternating minimization algorithm*) zadanej funkcji celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{AX})$ , która jest miarą rozbieżności (braku podobieństwa) między macierzą obserwacji  $\mathbf{Y}$  a estymowaną macierzą modelu  $\mathbf{AX}$ . To podejście do estymacji czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  jest stosowane w prawie wszystkich wariantach metody NMF.

Algorytm naprzemiennej minimalizacji jest przedmiotem badań od wczesnych lat pięćdziesiątych XX wieku. Węgierscy matematycy: Csiszár i Tusnády [98] sformułowali warunki jego zbieżności na podstawie 3-punktowych i 4-punktowych właściwości. W pracy [327] algorytm ten został rozszerzony do wersji adaptacyjnej. Obecnie jest stosowany w wielu dziedzinach nauki, takich jak przetwarzanie sygnałów, teoria informacji, statystyka, ekonomia itp.

Zadaniem algorytmu naprzemiennej minimalizacji jest znaleźć punkt przecięcia się dwóch lub więcej zbiorów argumentów minimalizowanej funkcji. Przyjmując  $0 \leq D(\mathbf{Y}||\mathbf{AX}) \leq +\infty$  dla każdego  $\mathbf{A} \in \mathfrak{A}$  i  $\mathbf{X} \in \mathfrak{X}$ , gdzie  $\mathfrak{A}$  i  $\mathfrak{X}$  są zbiorami odpowiednich macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , zadanie naprzemiennej minimalizacji funkcji celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{AX})$  sprowadza się do problemu znalezienia takiej pary  $\{\mathbf{A}, \mathbf{X}\}$ , dla

której

$$\min_{\{\mathbf{A}, \mathbf{X}\} \in \mathfrak{A} \times \mathfrak{X}} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}). \quad (1.7)$$

Zadanie to można realizować, rozwiązując naprzemiennie dwa problemy minimalizacji funkcji celu  $D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X})$ :

$$\mathbf{A}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{A} \in \mathfrak{A}} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}^{(n-1)}) \quad \text{oraz} \quad \mathbf{X}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{X} \in \mathfrak{X}} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}), \quad (1.8)$$

zaczynając od dowolnej macierzy początkowej  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathfrak{X}$ , gdzie  $n \geq 1$  jest numerem kroku optymalizacji naprzemiennnej. Warunki zbieżności algorytmu (1.8) są określone twierdzeniem 1.1.

**Twierdzenie 1.1.** *Dla funkcji celu  $D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X})$  spełniającej warunek  $D : \mathfrak{A} \times \mathfrak{X} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ , algorytm (1.8) jest zbieżny do*

$$d = \lim_{n \rightarrow \infty} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}) = \min_{\{\mathbf{A}, \mathbf{X}\} \in \mathfrak{A} \times \mathfrak{X}} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}), \quad (1.9)$$

jeśli istnieje  $\mathbf{A} \in \mathfrak{A}$  taka, że  $D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}^{(0)}) < \infty$  i jeżeli istnieje nieujemna funkcja  $\Phi_A : \mathfrak{A} \times \mathfrak{A} \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$  taka, że dla  $\forall n \geq 1$  spełnione są następujące właściwości:

- 3-punktowa  $(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n+1)}, \mathbf{X}^{(n)})$ :

$$D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}^{(n)}) \geq D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{X}^{(n)}) + \Phi_A(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n+1)}), \quad \forall \mathbf{A} \in \mathfrak{A}, \quad (1.10)$$

- 4-punktowa  $(\mathbf{A}, \mathbf{X}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)})$ :

$$D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}^{(n)}) \leq D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}) + \Phi_A(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}), \quad \forall \mathbf{A} \in \mathfrak{A}, \forall \mathbf{X} \in \mathfrak{X}. \quad (1.11)$$

Dowód twierdzenia 1.1 znajduje się w pracy [98], a także w zmodyfikowanej i uproszczonej wersji [44].

Z twierdzenia 1.1 wynika, że sekwencja punktów  $\{\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)}\}$  dla  $n \geq 1$  generowana algorytmem (1.8) spełnia warunek monotoniczności:

$$\begin{aligned} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(0)} \mathbf{X}^{(0)}) &\geq \dots \geq D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}) \geq D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{X}^{(n)}) \\ &\geq D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{X}^{(n+1)}) \geq \dots \geq d. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Jeśli faktor  $\mathbf{A}^{(n)}$  spełnia 3-punktową właściwość dla każdego  $n$ , to z (1.10) wynika:

$$D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}) - D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{X}^{(n)}) \geq \Phi_A(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{A}^{(n+1)}), \quad (1.13)$$

a po uwzględnieniu (1.12) otrzymuje się:

$$\begin{aligned} D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)}) &\geq D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n+1)}\mathbf{X}^{(n)}) + \Phi_A(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{A}^{(n+1)}) \\ &\geq D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n+1)}\mathbf{X}^{(n+1)}) + \Phi_A(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{A}^{(n+1)}). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Z warunku (1.11) określającego 4-punktową właściwość wynika, że dla faktora  $\mathbf{A}^{(n)}$  spełniona jest nierówność:

$$\Phi_A(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{A}^{(n+1)}) \geq D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n+1)}) - D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)}) \geq 0. \quad (1.15)$$

Jeśli więc spełniony jest warunek (1.12), można wnioskować z (1.14) i (1.15), że monotoniczna i nieujemna sekwencja  $\lim_{n \rightarrow \infty} \{\Phi_A(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{A}^{(n+1)})\} \rightarrow 0$ .

Byrne wspomniał [44], że  $\mathfrak{A}$  i  $\mathfrak{X}$  mogą być podzbiarami niekoniecznie tej samej przestrzeni metrycznej. Algorytm (1.8) może być więc rozszerzony do postaci:

$$\mathbf{A}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{A} \in \mathfrak{A}} D_A(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}^{(n-1)}) \quad \text{oraz} \quad \mathbf{X}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{X} \in \mathfrak{X}} D_X(\mathbf{Y}|\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}), \quad (1.16)$$

dla  $n \geq 1$ , gdzie  $D_A(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X})$  i  $D_X(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X})$  są różnymi funkcjami celu. Rozszerzony algorytm (1.16) przydatny jest w metodzie NMF, zwłaszcza wtedy gdy występuje duża różnica w rozmiarach lub właściwościach macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ . Aktualizacja macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  może zatem odbywać się różnymi algorytmami numerycznymi.

Uproszczony schemat (szkielet) algorytmu naprzemiennej estymacji czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w modelu NMF zilustrowano algorytmem 1.

---

#### Algorytm 1. Algorytm naprzemiennej estymacji czynników

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji  
**Wyjście:** Estymowane czynniki  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$

- 1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ;  $n = 0$ ;
- 2 **repeat**
- 3      $n \leftarrow n + 1$ ;
- 4      $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \text{AlgorytmA}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n-1)}, \mathbf{X}^{(n-1)})$ ; // Aktualizacja czynnika  $\mathbf{A}$
- 5      $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n-1)})$ ; // Aktualizacja czynnika  $\mathbf{X}$
- 6 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

### 1.3. Estymacja liczby komponentów ukrytych

Rząd faktoryzacji  $J$  w metodzie NMF lub NTF jest zwykle ustalony „z góry” i podany jako parametr faktoryzacji, który określa liczbę komponentów ukrytych w estymowanych faktorach. Stopień trudności w estymowaniu właściwego rzędu faktoryzacji zależy od dokładności modelowania danych obserwowanych. Jeśli dane obserwowane można łatwo opisać modelem (1.3), a zaburzenia modelu wyrażone macierzą  $\mathbf{N}$  nie zmieniają w istotnym stopniu rozkładu znaczących wartości osobliwych macierzy kowariancji danych obserwowanych, to parametr  $J$  można dość dokładnie estymować. Wniosek ten wynika z następującego twierdzenia.

**Twierdzenie 1.2.** *Niech będzie dany zbiór wektorów obserwowanych  $\tilde{\mathbf{y}}_t \in \mathbb{R}^I$  dla  $t = 1, \dots, T$ , stacjonarnego (w szerszym sensie) procesu stochastycznego. Jeśli  $\forall t : \tilde{\mathbf{y}}_t = \mathbf{y}_t + \mathbf{n}_t$ , gdzie  $\mathbf{n}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_N^2 \mathbf{I}_I)$  oraz  $\mathbf{n}_t$  nie jest skorelowany z  $\mathbf{y}_t$ , to  $\sigma_i(\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t}) = \sigma_i(\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t}) + \sigma_N^2$  dla  $i = 1, \dots, I$ , gdzie  $\sigma_i(\mathbf{Z})$  jest  $i$ -tą wartością osobliwą macierzy  $\mathbf{Z}$ , a  $\mathbf{C}_{\mathbf{y}}$  jest macierzą kowariancji zmiennych losowych w wektorze  $\mathbf{y}$ .*

**Dowód 1.1.** *Macierz kowariancji danych zaburzonych  $\tilde{\mathbf{y}}_t$  można zapisać jako:*

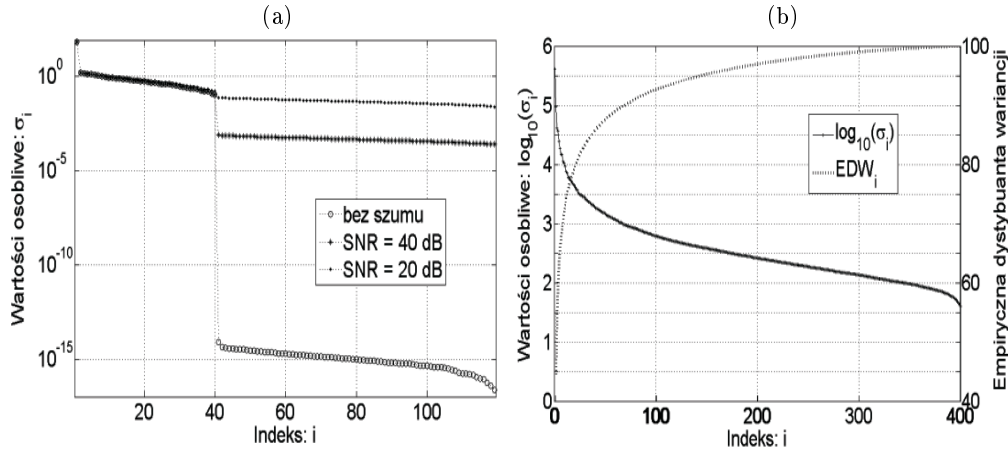
$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t} &= \mathcal{E}\{(\tilde{\mathbf{y}}_t - \mathcal{E}(\tilde{\mathbf{y}}_t))(\tilde{\mathbf{y}}_t - \mathcal{E}(\tilde{\mathbf{y}}_t))^T\} = \mathcal{E}\{\dot{\mathbf{y}}_t \dot{\mathbf{y}}_t^T\} + 2\mathcal{E}\{\dot{\mathbf{y}}_t \mathbf{n}_t^T\} + \mathcal{E}\{\mathbf{n}_t \mathbf{n}_t^T\} \\ &= \mathbf{C}_{\mathbf{y}_t} + \sigma_N^2 \mathbf{I}_I, \end{aligned} \quad (1.17)$$

gdzie  $\dot{\mathbf{y}}_t = \mathbf{y}_t - \mathcal{E}(\mathbf{y}_t)$ ,  $\mathcal{E}(\cdot)$  oznacza wartość oczekiwaną, a z założenia  $\mathcal{E}(\mathbf{n}_t) = \mathbf{0}$ ,  $\mathcal{E}\{\dot{\mathbf{y}}_t \mathbf{n}_t^T\} = \mathbf{0}$  oraz  $\mathcal{E}\{\mathbf{n}_t \mathbf{n}_t^T\} = \sigma_N^2 \mathbf{I}_I$ . Macierze kowariancji  $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  i  $\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  są symetryczne, a więc stosując twierdzenie o diagonalizacji symetrycznej i rzeczywistej macierzy w bazie jej wektorów własnych, uzyskuje się:  $\sigma_i(\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t}) = \sigma_i(\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t}) + \sigma_N^2$ , gdzie  $\sigma_i(\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t})$  i  $\sigma_i(\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t})$  są wartościami osobliwymi odpowiednio macierzy  $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t}$  i  $\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t}$ .

Przyjmując, że dla modelu (1.3),  $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{X}) = J$  oraz  $J \leq \min\{I, T\}$ , zbiór wartości osobliwych macierzy kowariancji  $\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t}$  można przedstawić wektorem:  $\sigma(\mathbf{C}_{\mathbf{y}_t}) = [\sigma_1, \dots, \sigma_J, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^I$ , gdzie  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_J$ . Z twierdzenia 1.2 wynika, że  $\sigma(\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{y}}_t}) = [\sigma_1 + \sigma_N^2, \dots, \sigma_J + \sigma_N^2, \sigma_N^2, \dots, \sigma_N^2]^T \in \mathbb{R}^I$ . Jeśli wariancja szumu  $\sigma_N^2$  jest znana i spełniona jest zależność  $\sigma_J > \sigma_N^2$ , to parametr  $J$  można wyznaczyć jako  $J = \#\{i : \sigma_i > \sigma_N^2\}$ , gdzie  $\#\{\mathcal{K}\}$  oznacza liczebność zbioru  $\mathcal{K}$ . Jeśli wariancja szumu jest nieznana, ale słuszna jest zależność  $\sigma_J \gg \sigma_N^2$ , nie trudno zidentyfikować wartości osobliwe, które znacząco różnią się od wariancji szumu. Rozważania zilustrowano przykładem 1.1.

**Przykład 1.1.** Zakładając,  $J = 40$ ,  $I = 3J$ ,  $T = 1000$ , wygenerowano nieujemne macierze  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} = [\max\{0, x_{ij}\}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , gdzie  $\forall i, j : a_{ij} \sim \mathcal{U}[0, 1]$  (rozkład równomierny),  $\forall j, t : x_{jt} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . Następnie otrzymano macierz  $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{N}$ , gdzie  $\mathbf{N} = [n_{it}] \in \mathbb{R}^{I \times T}$  oraz  $\forall i, t : n_{it} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_N^2)$ . W kolejnym kroku wyznaczono wartości osobliwe macierzy kowariancji  $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{Y}}} \in \mathbb{R}^{120 \times 120}$ , zakładając stacjonarność procesu  $\{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T\}$ . Rozkład wartości osobliwych  $\sigma_i(\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{Y}}})$  dla  $i = 1, \dots, I$  pokazano na rysunku 1.1(a) dla trzech przypadków zaburzeń modelu: (i) bez szumu ( $\sigma_N^2 = 0$ ), (ii)  $SNR = 40$  dB, co odpowiada  $\sigma_N^2 = 4, 572 \times 10^{-4}$ , (iii)  $SNR = 20$  dB ( $\sigma_N^2 = 4, 75 \times 10^{-2}$ ). Współczynnik  $SNR$  (ang. *Signal-to-Noise Ratio*) wyraża stosunek sygnał/szum. Rysunek 1.1(a) potwierdza teoretyczne rozważania, oparte na twierdzeniu 1.2. Należy jednak zaznaczyć, że wykonując obliczenia numeryczne na maszynie o skończonej precyzji obliczeniowej (w tym przypadku ograniczonej do  $\text{eps} = 2^{-52}$ ), najmniejsze wartości osobliwe nie mogą być zerowe, a jedynie mogą mieć minimalne wartości bliskie liczby eps. Z rysunku 1.1(a) wynika, że dla każdego analizowanego zaburzenia modelu możliwe jest dokładne wyznaczenie liczby  $J$ , chociaż dla  $SNR = 20$  dB zadanie znalezienia punktu załamania krzywej rozkładu wartości osobliwych nie jest takie łatwe. Niemniej jednak wizualnie punkt ten jest dostrzegalny.

W przykładzie 1.1 omówiono typowy sposób wyznaczania liczby  $J$  dla macierzy obserwacji należącej do tzw. klasy macierzy faktoryzowalnych. Macierze



Rys. 1.1. Rozkład wartości osobliwych macierzy kowariancji obserwacji dla zadania: (a) faktoryzowalnego – generowanego modelem (1.3); (b) niefaktoryzowalnego – baza obrazów ORL. Krzywa EDW przedstawia funkcję rozkładu empirycznej dystrybuanty wariancji względem indeksu wartości osobliwej

tej klasy można dokładnie opisać modelem (1.3) i generowane są poprzez nieujemne faktory pełnego rzędu, z dopuszczalnymi addytywnymi zaburzeniami modelu. Zbiór wartości osobliwych macierzy kowariancji obserwacji zawiera klaster  $J$  dużych wartości i klaster  $I - J$  małych wartości, a różnica pomiędzy klastrami jest łatwo zauważalna.

Jak już wcześniej wspomniano, metodę NMF można stosować do przybliżonej faktoryzacji macierzy, czyli do macierzy niefaktoryzowalnych. Rozkład wartości osobliwych macierzy kowariancji obserwacji dla tej klasy macierzy jest ciągły i gładki, a podział na wspomniane klastry nie jest łatwy. Jakakolwiek redukcja wymiarowości modelu wiąże się więc ze stratą części informacji o ukrytych komponentach. Ten przypadek zilustrowano przykładem 1.2.

**Przykład 1.2.** Niech wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  będą zwektoryzowanymi obrazami z bazy ORL<sup>4</sup>. Baza ta zawiera 400 zdjęć twarzy 40 osób, w różnym wieku oraz różnym kolorze skóry. Twarze są zróżnicowane ze względu na profil ujęcia, mimikę, gradient oświetlenia oraz okluzję. Są to obrazy monochromatyczne, wyśrodkowane i przeskalowane, o rozdzielczości  $112 \times 92$  pikseli, zatem:  $I = 400$  oraz  $T = 112 \times 92 = 10304$ .

Rozkład wartości osobliwych macierzy kowariancji  $\mathbf{C}_Y \in \mathbb{R}^{400 \times 400}$  zilustrowano na rysunku 1.1(b). Jak widać, rozkład ten jest gładki, ciągły i monotonicznie malejący. W zakresie do pierwszych około pięćdziesięciu wartości osobliwych można zauważyć dość stromy trend malejący, a następnie zarysowuje się trend łagodny. Nie można jednak wyszczególnić wyraźnych klastrów podziału wartości. Jest to więc przypadek macierzy niefaktoryzowalnej, którą można jedynie aproksymować przez model NMF. Problem znalezienia odpowiedniego rzędu faktoryzacji dla takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  jest bardzo skomplikowany i nie ma jasnych kryteriów pozwalających wybrać optymalną wartość parametru  $J$ .

Na rysunku 1.1(b) pokazano również wykres empirycznej dystrybucyjności wariancji ( $EDW$ ) w funkcji liczby wartości osobliwych. Funkcja  $EDW_i$  dla  $i$ -tej wartości osobliwej zdefiniowana jest następująco:

$$EDW_i = 100 \frac{\sum_{r=1}^i \sigma_r(\mathbf{C}_Y)}{\sum_{i=1}^I \sigma_i(\mathbf{C}_Y)}. \quad (1.18)$$

Funkcja ta określa, tzw. wariancję wyjaśnioną (ang. *explained variance*), używając terminologii stosowanej dla metody PCA. Stosując metodę NMF w celu redukcji wymiaru modelu można założyć jaka część wariancji pierwotnego modelu powinna

<sup>4</sup> <http://people.cs.uchicago.edu/~dinoj/vis/orl/>



zostać zachowana w modelu zredukowanym. Następnie dla założonej wariancji można wyznaczyć parametr  $J$ , stosując krzywą  $EDW$ .

Na przykładzie 1.2 pokazano, że ani rozkład wartości osobliwych macierzy kowariancji obserwacji, ani funkcja  $EDW$  nie wskazują wystarczająco dokładnie na optymalną wartość parametru  $J$ . W przypadku macierzy niefaktoryzowalnych należy uwzględnić również inne czynniki, np. koszt obliczeniowy faktoryzacji, cechy charakterystyczne czynników, a nawet spójność czynników podczas powtarzania faktoryzacji. Przykładowo, stosując model NMF do macierzy opisanej w przykładzie 1.2, parametr  $J$  określa liczbę wektorów cech. Jeśli ta liczba jest mała, wektory cech powinny odzwierciedlać tylko składowe wspólne obrazów o mocy widmowej skupionej w zakresie małych częstotliwości. Zwiększając parametr  $J$ , rozszerza się zakres widmowy cech, czyli w wektorach cech pojawia się coraz więcej szczegółów. Należy też pamiętać o tym, że koszt obliczeniowy metody NMF znacząco rośnie ze wzrostem liczby  $J$ .

W przypadku gdy wybór metody szacowania parametru  $J$  nie jest prosty, zwykle zakłada się  $J \ll \frac{IT}{I+T}$  dla silnej nadmiarowości<sup>5</sup> obserwowanych danych  $\mathbf{Y}$ . Natomiast gdy nadmiarowość jest słabsza, wystarczy założenie  $J \leq \min\{I, T\}$  oraz  $T \gg I$  lub  $I \gg T$ .

Zadanie znalezienia optymalnej wartości rzędu  $J$  może być również sformułowane jako zadanie poszukiwania takiej minimalnej wartości  $J$ , dla której stopień dopasowania modelu do obserwacji jest możliwie duży. Tak postawione zadanie może być realizowane metodą DIFFIT (ang. *difference in fit*), która została zaproponowana przez Timmermana i Kiersa [432] w celu estymacji liczby komponentów ukrytych w dekompozycji trójstopniowego tensora. Metoda ta jest szczególnie skuteczna, gdy występują zaburzenia (nieregularności) przebiegu funkcji (1.18), wykrywa bowiem nieregularną zmianę (uskok) w przebiegu funkcji dopasowania:

$$f_k = 1 - \frac{\|\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{A}}^{(k)} \hat{\mathbf{X}}^{(k)}\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F}, \quad (1.19)$$

gdzie  $\hat{\mathbf{A}}^{(k)} \in \mathbb{R}_+^{I \times k}$  oraz  $\hat{\mathbf{X}}^{(k)} \in \mathbb{R}_+^{k \times T}$  są czynnikami estymowanymi dla rzędu faktoryzacji równego  $k$  ( $k = 1, 2, \dots, K$ ). Funkcja ta jest miarą wariancji wyja-

<sup>5</sup> Pojęcie nadmiarowości (ang. *redundancy*) najczęściej występuje w teorii informacji i określa różnicę między liczbą bitów użytych do przesłania danej wiadomości a liczbą bitów koniecznych do zapisania istotnej informacji w przesyłanej wiadomości. W tematyce redukcji modelu, termin ten ma analogiczne znaczenie, a mianowicie określa różnicę między liczbą wymiarów przestrzeni danych obserwowanych a minimalną liczbą wymiarów przestrzeni danych źródłowych lub ukrytych, niosących istotną informację. Nadmiarowość wyraża więc stopień kompresji informacji.

śnionej, a więc powinna być monotonicznie rosnąca względem  $k$ . Nieregularności w przebiegu funkcji  $f_k$  mogą być łatwiej zaobserwowane przez analizę przebiegu przyrostów:

$$g_k = f_k - f_{k-1}, \quad \text{dla } k = 2, 3, \dots, K. \quad (1.20)$$

Jeśli dla jakiejś wartości rzędu  $k$  przyrost wartości dopasowania jest relatywnie duży w stosunku do wartości przyrostu dla rzędu  $k+1$  i jednocześnie dla kolejnych wartości rzędu nie uzyskuje się tak dużego przyrostu, to należy przypuszczać, że  $k$  jest wartością optymalną. Ponieważ funkcją  $g_k$  w (1.20) może nie być funkcją monotonicznie malejącą, analizę przyrostów (1.20) przeprowadza się dla, tzw. sekwencyjnie maksymalnych przyrostów. Są to elementy zbioru  $\{g_k\}$ , dla których przy danym  $k$  spełniony jest warunek  $g_k > g_{k+l}$  dla  $l = 1, \dots, K - k$ . Elementy te oznaczono poprzez  $g_{k(m)}$ , gdzie  $m = 1, \dots, M$  oraz  $M \leq K - 1$  jest liczbą sekwencyjnie maksymalnych przyrostów. Następnie przyrosty te są oceniane przez analizę współczynnika istotności przyrostu (ang. *salience value*):

$$\xi_{k(m)} = \frac{g_{k(m)}}{g_{k(m+1)}}. \quad (1.21)$$

Stosunkowo duża wartość współczynnika  $\xi_{k(m)}$  sugeruje, że włączenie do modelu komponentu  $k(m)$  w stosunku do liczby komponentów  $k(m-1)$  spowodowało znaczny wzrost wartości dopasowania modelu, natomiast wzrost ten nie jest już taki znaczący podczas przejścia z liczby  $k(m)$  dla  $k(m+1)$ . Optymalne dopasowanie modelu  $\mathbf{A}^{(k)} \mathbf{X}^{(k)}$  do danych w  $\mathbf{Y}$  powinno zatem wystąpić dla

$$J = \arg \max_m \xi_{k(m)}, \quad (1.22)$$

pod warunkiem, że  $\xi_{k(m)} > \tau$ , gdzie  $\tau = k^{-1} \|\mathbf{Y}\|_F^2$  jest progową wartością określającą średnią część wariancji obserwacji przypadającą na pojedynczy komponent. Metodę DIFFIT można też łatwo zastosować do estymacji liczby komponentów ukrytych w modelu NTF.

Wspomniane metody estymacji rzędu faktoryzacji, pomimo swej popularności, nie wyczerpują wszystkich zagadnień dotyczących omawianej tematyki. Estymacji parametru  $J$  w modelu NMF można także dokonać metodą SURE (ang. *Stein's Unbiased Risk Estimator*) [438], jeśli wariancja szumu  $\sigma^2$  jest znana, bayesowską metodą z aproksymacją Laplace'a [309], metodami walidacji krzyżowej (ang. *cross-validation*) [141, 418], metodą selekcji rzędu modelu (ang. *model order selection*) [178] stosowaną w wielowymiarowym grupowaniu probabilistycznym,

a także metodami: CORCONDIA (ang. *Core Consistency Diagnostic*) [37] stosowaną głównie w dekompozycji Tuckera, MAP (ang. *Minimum Average Partial*) [532], QDA (ang. *Quotient of Differences in Additional values*) [328] oraz ARD (ang. *Automatic Relevance Determination*) [421, 422].

Przegląd metod estymacji liczby komponentów ukrytych dla wielowymiarowych modeli (PARAFAC lub TUCKER) można odnaleźć w siódmym rozdziale książki [408], a także w pierwszym rozdziale monografii [89].

## 1.4. Zarys historyczny

Podstawowy model NMF pojawił się po raz pierwszy w pracy fińskich naukowców: Paatero i Tappera [341], opublikowanej w 1994 roku i początkowo występował pod nazwą „dodatnia faktoryzacja macierzy” (PMF – ang. *Positive Matrix Factorization*). Można też spotkać się ze stwierdzeniem [113, 268], że pierwsze wzmianki o tego rodzaju faktoryzacji pochodzą już z lat siedemdziesiątych XX wieku z niepublikowanych prac Goluba [154]. Idei NMF można też doszukiwać się w pracy Lawtona i Sylvestra [256] z 1971 roku. W 1997 roku Paatero [338, 339] usprawnił metodę PMF stosując iteracyjne algorytmy ważonych najmniejszych kwadratów oraz rozszerzył metodę PMF do modelu PARAFAC z nieujemnymi faktorem. Początkowe zastosowanie metody PMF ograniczało się głównie do chemometrii i analizy środowiska naturalnego.

Jednakże, intensywny rozwój metody NMF rozpoczął się dopiero po ukazaniu się w czasopiśmie „Nature” w 1999 roku pracy autorów Lee i Seunga [257] na temat związku modelu NMF z percepcyjnymi właściwościami struktury neuronowej mózgu. W artykule tym zaproponowano rozwiązanie zadania nieujemnej faktoryzacji macierzy przez naprzemienną minimalizację funkcji celu za pomocą prostych algorytmów multiplikatywnych. W kolejnej, bardzo ważnej pracy na temat metody NMF, którą przedstawiono na konferencji NIPS 2000, Lee i Seung [258] udowodnili, że zaproponowane algorytmy multiplikatywne gwarantują monotoniczność naprzemiennej minimalizacji odległości euklidesowej oraz uogólnionej dywergencji Kullbacka–Leiblera.

Należy jednak zauważyć, że zarówno algorytm naprzemiennej optymalizacji funkcji celu, jak też algorytmy multiplikatywne stosowane w pracach Lee i Seunga znane były już od kilku lat przed ukazaniem się tych prac. Csiszár i Tusnády [98] w 1984 roku opublikowali dowód zbieżności algorytmu naprzemiennej optymalizacji funkcji celu. Algorytm multiplikatywny minimalizujący dywergencję Kullbacka–Leiblera stosowany był już w astronomii w latach siedemdziesią-

tych XX wieku, a obecnie znany jest pod nazwą RLA (ang. *Richardson-Lucky Algorithm*) [296, 379] lub jako EMMML (ang. *Expectation-Maximization Maximum Likelihood*) [43, 248, 400]. Natomiast algorytm multiplikatywny minimalizujący odległość euklidesową to algorytm ISRA (ang. *Image Space Reconstruction Algorithm*) [100], zaproponowany w 1986 roku przez Daube-Witherspoona i Muehlelehnera do rekonstrukcji obrazu pozytronowej tomografii emisyjnej. Prace Lee i Seunga nie wniosły zatem nowych rozwiązań do teorii algorytmów, a jedynie pokazały, że zadanie nieujemnej faktoryzacji macierzy można rozwiązać znacznie prościej niż dotychczas sądzono. Ponadto, ujawniły ogromny potencjał metody NMF w uczeniu maszyn i rozwiązywaniu problemów sztucznej inteligencji.

W pierwszych latach ubiegłego dziesięciolecia model NMF rozwijał się głównie w kierunku następujących zastosowań: rozpoznawania i klasyfikacji obrazów twarzy [41, 126, 163–166, 267, 454], grupowania danych [457], klasyfikacji obrazów pozytronowej tomografii emisyjnej [1, 261], analizy i klasyfikacji dokumentów tekstowych [330, 343, 346, 461], separacji widm spektralnych [152, 359, 385–387], analizy ekspresji genów [38, 228, 374], a także transkrypcji muzyki [405, 407]. W pracach tych stosowano głównie algorytmy multiplikatywne, podstawowe lub w wersjach zmodyfikowanych, np. uwzględniających w funkcji celu dodatkowe człony kary lub regularyzujące. W ten sposób uzyskiwano, poza nieujemnością, również inne cechy faktorów, takie jak rzadkość, gładkość, ortogonalność oraz niezależność. Spośród wielu takich modyfikacji najczęściej spotyka się w literaturze odwołania do następujących algorytmów: NNSC [194], SCNMF [195], LNMF [126, 267], FNMF [454], DNMF [473], GNMF [47], nsNMF [344] oraz algorytmy Dinga (ONMF, Uni-NMF, Tri-NMF, wypukły NMF) [110, 113]. Kolejną grupę algorytmów multiplikatywnych stanowią algorytmy minimalizujące inne miary rozbieżności, np. dywergencję Csiszára [71, 74, 82, 87], Bregmana [107],  $\beta$  [236] oraz Itakura–Saito [128, 130].

Różne zastosowania modelu NMF oraz wady algorytmów multiplikatywnych stały się motywacją do powstania licznej grupy algorytmów niemultiplikatywnych. Do najważniejszych (według liczby cytowań w Google Scholar) należy zaliczyć: algorytm Hoyera [195], rzutowania gradientu zaproponowany przez C. Lina [280], quasi-Newtona [495] oraz jego modyfikacje [220, 497], HALS [84] lub RRI [189], zbiorów aktywnych [223], projekcyjny Barzilai–Borweina [171], BPP [225] oraz CBGP [31].

W kolejnym etapie rozwoju pojawiły się złożone modele NMF, np. spłotowy [12, 405, 406], trójczłonowy [110, 113, 344, 469, 470], wielowarstwowy [78, 80], ważony [163, 166, 232, 298, 518], jądrowy [40, 259, 275], afiniczny [254], a także

---

symetryczny [55, 181, 269, 292, 439, 447] jako szczególny przypadek modelu podstawowego.

Modelem złożonym rozszerzającym podstawowy model NMF do dekompozycji nieujemnego i wielowymiarowego tensora jest NTF, który jest szczególnym przypadkiem modelu PARAFAC lub CANDECOMP [53, 173]. Z kolei, PARAFAC jest szczególnym przypadkiem dekompozycji Tuckera [435, 436], która znana była już w latach sześćdziesiątych XX wieku. Algorytmy multiplikatywne dla metody NTF zostały zaproponowane przez Shashua, Hanzana i Polaka [176, 397] w pracach, które ukazały się w 2005 roku. Podobnie jak NMF, NTF rozwija się również bardzo intensywnie, motywowany wieloma istotnymi zastosowaniami [133, 136, 183, 224, 235, 319, 398].

Obszerny przegląd algorytmów stosowanych do omawianych faktoryzacji znajduje się w [19, 85, 89, 413].

W ostatnich kilku latach można dostrzec jeszcze silniejszy wzrost zainteresowania metodami NMF i NTF. Liczba artykułów dotyczących metody NMF lub NTF, publikowanych w czasopismach i materiałach znanych konferencji, rośnie w tempie wykładniczym, a liczba cytowań artykułów Lee i Seunga przekroczyła 4500 według Google Scholar (stan z marca 2014).



## 2. Podstawowe funkcje celu

Funkcja celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{AX})$ , występująca w algorytmie naprzemiennej minimalizacji, powinna być tak sformułowana, aby wyrażała miarę rozbieżności między macierzami  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{AX}$ . Miara ta może być definiowana przez odległość między dwoma obiektami w przestrzeni euklidesowej lub przez różnicę (dywergencję) między rozkładami prawdopodobieństw w przestrzeni probabilistycznej. Funkcja celu w metodzie NMF powinna być nieujemna i osiągać wartość zero, gdy  $\mathbf{Y} = \mathbf{AX}$ . Jeśli jest to miara odległości, powinna być ponadto symetryczna, tzn.  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{AX}) = D(\mathbf{AX}||\mathbf{Y})$ , a także spełniać nierówność trójkąta:  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{Q}) \leq D(\mathbf{Y}||\mathbf{Z}) + D(\mathbf{Z}||\mathbf{Q})$ . Typowymi miarami odległości są funkcje odległości euklidesowej, Mahalanobisa, czy Minkowskiego. Miary dywergencji rozkładów prawdopodobieństwa generują pewne topologie na przestrzeni uogólnionych rozkładów prawdopodobieństwa, ale nie są metrykami odległości ze względu na ich asymetrię i niespełnianie nierówności trójkąta. Przykładowymi statystycznymi miarami rozbieżności są dywergencje: Kullbacka–Leiblera, Csiszára, Bregmana, Jensena–Shannona oraz Rényi.

Wybór funkcji celu jest bardzo istotny w praktycznych zastosowaniach, tzn. wtedy gdy posługujemy się modelem przybliżonej faktoryzacji (1.3). W takim przypadku, kryterium wyboru powinno być przede wszystkim warunkowane rozkładem zaburzeń modelu, czyli macierzą  $\mathbf{N}$  w (1.3), lub rozkładem prawdopodobieństwa danych obserwowanych. Inne czynniki decydujące o wyborze danej funkcji celu to rozmiar i właściwości faktorów (rzadkość, gładkość i rozkład gęstości prawdopodobieństwa), zastosowany algorytm optymalizacji, a także koszt wyznaczania gradientu, hesjanu i jego odwrotności.

Krótko scharakteryzowano najważniejsze rodziny miar odległości lub dywergencji statystycznych, które stosuje się w różnych zastosowaniach metod NMF i NTF.

## 2.1. Odległość euklidesowa

Przyjmując, że kolumny macierzy  $\mathbf{N} = [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_T] \in \mathbb{R}^{I \times T}$  w modelu (1.3) są wektorami zmiennych losowych niezależnych i o identycznym rozkładzie gaussowskim ze średnią  $\mu(\mathbf{n}_t) = 0$  dla  $t = 1, \dots, T$  i macierzą kowariancji  $\boldsymbol{\Sigma}_N = \sigma_N^2 \mathbf{I}_I \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$ , macierz  $\mathbf{N}$  może być modelowana łącznym rozkładem gaussowskim:

$$p(\mathbf{N}) = \frac{1}{((2\pi)^I \det\{\boldsymbol{\Sigma}_N\})^{T/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{N}^T \boldsymbol{\Sigma}_N^{-1} \mathbf{N}) \right\}, \quad (2.1)$$

gdzie  $\sigma_N^2 > 0$  – wariancja zaburzeń.

Ponieważ  $\mathbf{N} = \mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}$ , problem estymacji faktorów  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  dla danej macierzy  $\mathbf{Y}$  może być wyrażony za pomocą zadania maksymalizacji funkcji gęstości prawdopodobieństwa (2.1) ze względu na macierz  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ .

Według kryterium *AIC* (ang. *Akaike Information Criterion*) [2], maksymalizacja funkcji gęstości prawdopodobieństwa sprowadza się do znalezienia takich macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , które minimalizują funkcję  $AIC = TI - 2 \ln p(\mathbf{N})$ . Przyjmując  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) \triangleq AIC$ , uzyskuje się

$$D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = \text{tr}((\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X})^T \boldsymbol{\Sigma}_N^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X})) + \text{const}. \quad (2.2)$$

Dla  $\boldsymbol{\Sigma}_N = \sigma_N^2 \mathbf{I}_I \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$ , funkcja (2.2) sprowadza się do postaci:

$$D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = \frac{1}{\sigma_N^2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \text{const}, \quad (2.3)$$

gdzie  $\|\cdot\|_F$  oznacza normę Frobeniusa. Ponieważ punkty stacjonarne funkcji (2.3) nie zależą od wariancji  $\sigma_N^2$  ani od jej wartości stałej, do celów optymalizacji numerycznej przyjęto uproszczoną wersję, którą krótko nazwano *funkcją odległości euklidesowej*:

$$D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2, \quad (2.4)$$

choć *de facto* jest to funkcja kwadratu odległości euklidesowej.

Funkcja (2.4) jest nieujemną funkcją kwadratową, symetryczną, osiąga wartość zerową dla  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$ , spełnia nierówność trójkąta oraz ma regularną i prostą strukturę macierzy hesjanu. Te właściwości funkcji oraz fakt, że najczęściej spotykane zaburzenia modelu w praktycznych zastosowaniach mają rozkład gaussowski, najprawdopodobniej przyczyniły się do jej dużej popularności, nie tylko w rozwiązywaniu zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensora, ale także w wielu dziedzinach nauki.



## 2.2. Dywergencja Csiszára

Dywergencja Csiszára (ang. *Csiszar  $f$ -divergence*) należy do rodziny  $f$ -dywergencji, która była niezależnie zaproponowana w 1963 roku i rozwijana przez wielu naukowców, m.in. Csiszára [96, 97], Morimoto [317] oraz Aliego i Silveya [3]. Jest miarą rozbieżności między rozkładami prawdopodobieństwa  $P$  i  $Q$  pewnej rzeczywistej zmiennej losowej  $X$  określonej w zbiorze wartości  $\Omega$  i wyraża się następująco:

$$D_C(P||Q) = \sum_{x \in \Omega} q(x) f\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right), \quad (2.5)$$

gdzie  $p(x)$  i  $q(x)$  są funkcjami gęstości prawdopodobieństwa odpowiednich rozkładów  $P$  i  $Q$ , natomiast  $f: [0, \infty) \rightarrow (-\infty, \infty)$  jest funkcją wypukłą na zbiorze  $(0, \infty)$ , ciągłą w zerze oraz  $f(1) = 0$ .

Niech  $\mathbf{p} = [p_1, \dots, p_N]^T \in \mathbb{R}_+^N$  i  $\mathbf{q} = [q_1, \dots, q_N]^T \in \mathbb{R}_+^N$  będą skończonymi i dyskretnymi reprezentacjami odpowiednich funkcji gęstości prawdopodobieństwa  $p(x)$  i  $q(x)$ , zatem

$$D_C(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \sum_{n=1}^N q_n f\left(\frac{p_n}{q_n}\right), \quad (2.6)$$

gdzie  $p_n \geq 0$ ,  $q_n \geq 0$  dla  $n = 1, \dots, N$ . Dla  $p_n = 0$  i  $q_n = 0$ , przyjęto:  $0f\left(\frac{0}{0}\right) = 0$ , a gdy  $p_n > 0$  i  $q_n = 0$ , wówczas  $0f\left(\frac{p_n}{0}\right) = \lim_{q_n \rightarrow 0^+} q_n f\left(\frac{p_n}{q_n}\right) = p_n f'(\infty)$ .

Z dywergencji Csiszára (2.5) lub (2.6) można wyznaczyć wiele innych miar rozbieżności, definiując odpowiednio funkcję  $f(\cdot)$ . Przykłady podano w tabeli 2.1 dla  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{q}$  oraz  $z = \frac{p_n}{q_n} \in \mathbb{R}$ .

W dalszych rozważaniach skupiono się na dywergencji  $\alpha$  w kontekście jej zastosowań do rozwiązywania zadań nieujemnej faktoryzacji.

### 2.2.1. Dywergencja $\alpha$

Dywergencja  $\alpha$  była przedmiotem zainteresowań wielu wybitnych naukowców, m.in. Chernoffa [63], Amariego [4], Liese'a i Vajdy [277], Cressie'a i Reada [376], Minka [308], Taneja [424] oraz Zhu i Rohwera [530]. Obecnie jest stosowana w wielu dziedzinach nauki. Miara ta była również szczegółowo badana przez zespół prof. A. Cichockiego [71, 82, 87, 89] z *RIKEN Brain Science Institute w Japonii*

Tabela 2.1. Przykładowe funkcje  $f(z)$  i odpowiadające im miary rozbieżności dla  $z = \frac{p_n}{q_n}$ 

Funkcja $f(z)$	Miara rozbieżności $D(P  Q)$
$z \ln(z)$ dla $z \geq 0$	Dywergencja Kullbacka–Leiblera: $\sum_n p_n \ln \left( \frac{p_n}{q_n} \right)$
$ z - 1 $	Odległość TV: $\sum_n q_n \left  \frac{p_n}{q_n} - 1 \right $
$(z - 1)^2$	Dywergencja Pearson- $\chi^2$ : $\frac{1}{2} \sum_n \frac{(p_n - q_n)^2}{q_n}$
$(\sqrt{z} - 1)^2$	Odległość Hellingera: $2 \sum_n (\sqrt{p_n} - \sqrt{q_n})^2$
$\frac{z(z^{\alpha-1} - 1)}{\alpha^2 - \alpha} + \frac{1 - z}{\alpha}$	Dywergencja $\alpha$ : $\sum_n p_n \frac{(p_n/q_n)^{\alpha-1} - 1}{\alpha(\alpha - 1)} + \frac{q_n - p_n}{\alpha}$

w kontekście jej zastosowania do zadań nieujemnych faktoryzacji, co doprowadziło do powstania rodziny algorytmów dla modeli NMF, NTF i innych podobnych faktoryzacji. W niniejszym rozdziale ograniczono się jedynie do podania podstawowych właściwości tej miary rozbieżności.

Niech

$$D_A^{(\alpha)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \sum_n p_n \frac{(p_n/q_n)^{\alpha-1} - 1}{\alpha(\alpha - 1)} + \frac{q_n - p_n}{\alpha}, \quad (2.7)$$

dla  $\alpha \in [-\infty, +\infty]$  oznacza dywergencję  $\alpha$  podaną w tabeli 2.1. Funkcja (2.7) jest wypukła ze względu na  $\mathbf{p}$  lub  $\mathbf{q}$ , nieujemna oraz osiąga wartość zerową dla  $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ .

Rozważając szczególne przypadki tej miary, dla wybranych wartości parametru  $\alpha$ , uzyskuje się dla:

- $\alpha = -1$ , dywergencję Neyman- $\chi^2$  lub odwrotną dywergencję Pearson- $\chi^2$ :

$$D_A^{(-1)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_n \frac{(p_n - q_n)^2}{p_n}, \quad (2.8)$$

- $\alpha = 0$ , dualną dywergencję Kullbacka–Leiblera lub dualną dywergencję  $I$ :

$$\begin{aligned} D_A^{(0)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} D_A^{(\alpha)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \sum_n q_n \ln \left( \frac{q_n}{p_n} \right) + p_n - q_n \\ &\triangleq D_{KL}(\mathbf{q}||\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (2.9)$$

- $\alpha = 1/2$ , odległość Hellingera:

$$D_A^{(1/2)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = 2 \sum_n (\sqrt{p_n} - \sqrt{q_n})^2, \quad (2.10)$$

- $\alpha = 1$ , uogólnioną dywergencję Kullbacka–Leiblera lub dywergencję  $I$ :

$$\begin{aligned} D_A^{(1)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) &= \lim_{\alpha \rightarrow 1} D_A^{(\alpha)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \sum_n p_n \ln \left( \frac{p_n}{q_n} \right) + q_n - p_n \\ &\triangleq D_{KL}(\mathbf{p}||\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (2.11)$$

- $\alpha = 2$ , dywergencję Pearson- $\chi^2$ :

$$D_A^{(2)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_n \frac{(p_n - q_n)^2}{q_n}. \quad (2.12)$$

Po przyjęciu, że  $q_n$  aproksymuje  $p_n$  w funkcji (2.7) dla  $n = 1, \dots, N$ , jeśli  $\alpha \rightarrow -\infty$ ,  $q_n \leq p_n$ ; gdy  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $q_n \geq p_n$ ; gdy  $\alpha \leq 0$  i  $p_n \rightarrow 0 \Rightarrow q_n \rightarrow 0$ ; dla  $\alpha > 1$  oraz  $p_n > 0 \Rightarrow q_n > 0$ .

### 2.2.2. Dywergencja Kullbacka–Leiblera

Standardową postać dywergencji Kullbacka–Leiblera ( $KL$ ) [245] można wyrazić jako:  $D_{KL}(\mathbf{q}||\mathbf{p}) = \sum_n p_n \ln \left( \frac{p_n}{q_n} \right)$  dla  $\sum_{n=1}^N p_n = \sum_{n=1}^N q_n = 1$ . Uogólniona dywergencja Kullbacka–Leiblera, dana zależnością (2.11), rozszerza standardową postać o człony normalizujące i może być stosowana jako miara rozbieżności dowolnych ciągów liczb  $p_n \geq 0$  i  $q_n \geq 0$  dla  $n = 1, \dots, N$ .

Podobnie jak dla odległości euklidesowej (2.4) pomiędzy macierzami  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{AX}$  a rozkładem gaussowskim macierzy  $\mathbf{N}$  istnieje również związek między uogólnioną dywergencją  $KL$  i rozkładem prawdopodobieństwa opisującym obserwacje. Zakładając, że elementy  $\{y_{it}\}$  macierzy  $\mathbf{Y}$  są realizacjami zmiennych losowych  $\{Y_{it}\}$  o rozkładzie Poissona, a elementy macierzy  $\mathbf{AX}$  są średnimi tych zmiennych, zatem  $\forall i, t : y_{it} \sim \text{Poisson}(Y_{it}; \lambda_{it})$ , gdzie  $\lambda_{it} = \mathcal{E}\{Y_{it}\} = \sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}$ . Łączny rozkład prawdopodobieństwa dla macierzy  $\mathbf{Y}$  przyjmuje postać:

$$p(Y = \mathbf{Y} | \mathbf{AX}) = \prod_{i=1}^I \prod_{t=1}^T \frac{\lambda_{it}^{y_{it}}}{y_{it}!} \exp(-\lambda_{it}). \quad (2.13)$$

Stosując kryterium  $AIC$  do rozkładu (2.13) oraz wzór Stirlinga, uzyskuje się:

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) &= TI - 2 \ln p(Y = \mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) \\
&= 2 \sum_{i,t} (\lambda_{it} - y_{it} \ln(\lambda_{it}) + \ln(y_{it}!)) + TI \\
&= 2 \sum_{i,t} \left( \lambda_{it} + y_{it} \ln \left( \frac{y_{it}}{\lambda_{it}} \right) - y_{it} + O(\log(y_{it})) \right) + TI \\
&= 2D_{KL}(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \text{const}, \tag{2.14}
\end{aligned}$$

gdzie

$$D_{KL}(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = \sum_{i,t} y_{it} \ln \left( \frac{y_{it}}{\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}} \right) + \sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt} - y_{it} \tag{2.15}$$

jest uogólnioną dywergencją  $KL$  według (2.11), która aproksymuje nieujemną macierz  $\mathbf{Y}$  nieujemnym estymatorem  $\mathbf{A}\mathbf{X}$ . Zagadnienie maksymalizacji rozkładu Poissona przez minimalizację uogólnionej dywergencji  $KL$  jest dobrze znane i występuje, np. w problematyce rekonstrukcji obrazów tomograficznych, zwłaszcza w pozytronowej tomografii emisyjnej [127, 248]. W metodzie NMF problem minimalizacji uogólnionej dywergencji  $KL$  pojawił się po raz pierwszy w pracach Lee i Seunga [257, 258].

### 2.2.3. Model Tweedie dla dywergencji $\alpha$

Rozważania przedstawione w rozdziale 2.2.2 pokazały, że uogólniona dywergencja  $KL$  jest optymalną miarą rozbieżności pomiędzy macierzą  $\mathbf{Y}$  a  $\mathbf{A}\mathbf{X}$ , jeśli elementy macierzy  $\mathbf{Y}$  modelowane są rozkładem Poissona. Rodzi się więc pytanie, jaki jest związek dywergencji  $\alpha$  we wzorze (2.7) z rozkładem zaburzeń  $\mathbf{N}$  w modelu (1.3) lub rozkładem elementów macierzy  $\mathbf{Y}$ ? Odpowiedzi na tak postawione pytanie można szukać, analizując model Tweedie [215, 437] i jego związek z dywergencją  $\alpha$ .

Model Tweedie lub model dyspersji [409] z parametrami: pozycji (ang. *location parameter*)  $\mu$  i dyspersji (ang. *dispersion parameter*)  $\sigma^2$ , opisuje rodzinę rozkładów eksponencjalnych, których funkcje gęstości prawdopodobieństwa można przedstawić jako:

$$p(y; \mu, \sigma^2) = a(y, \sigma^2) \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} d(y; \mu) \right\}, \tag{2.16}$$

gdzie  $y \in \mathbb{C}$ ,  $\mu \in \Omega$ ,  $\sigma^2 > 0$ ,  $a \geq 0$  jest współczynnikiem skalującym, niezależnym od  $\mu$ , a  $d(y; \mu)$  jest funkcją jednostkowego odchylenia (ang. *unit deviance*). Funkcja  $d(y; \mu)$  musi spełniać następujące właściwości:  $d(y; y) = 0$  dla  $\forall y \in \Omega$  oraz  $d(y; \mu) > 0$  dla  $\forall y \neq \mu$ .

Niech  $Z$  oznacza zmienną losową o złożonym rozkładzie Poissona (ang. *compound Poisson*), czyli

$$Z = \sum_{n=1}^N X_n,$$

gdzie  $N \sim \text{Poisson}(\lambda)$  oraz  $X_n \sim \text{Gamma}(\mu_G, \sigma_G^2)$ . Można wykazać [119, 215, 409], że rozkład zmiennej losowej  $Z$  może być również opisany modelem Tweedie, tzn.  $Z \sim \text{Tweedie}_p(\mu, \sigma^2)$ , z funkcją  $d(y; \mu)$  wyrażoną zależnością:

$$d(y; \mu) = 2 \left( \frac{y^{2-p}}{(1-p)(2-p)} - \frac{y\mu^{1-p}}{1-p} + \frac{\mu^{2-p}}{2-p} \right) \quad (2.17)$$

dla  $p \in [-\infty, 0] \cup (1, 2) \cup (2, +\infty]$ , gdzie:

$$p = \frac{1 + 2\sigma_G^2}{1 + \sigma_G^2}, \quad \mu = \lambda\mu_G, \quad \sigma^2 = \frac{\lambda^{1-p}\mu_G^{2-p}}{2-p}.$$

Zależność (2.17) można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} d(y; \mu) &= 2\mu^{1-p} \left( \frac{y^{2-p}\mu^{-(1-p)}}{(1-p)(2-p)} - \frac{y}{1-p} + \frac{\mu}{2-p} \right) \\ &= 2\mu^{1-p} \left( y \frac{(y/\mu)^{1-p} - 1}{(1-p)(2-p)} + \frac{\mu - y}{2-p} \right). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Łatwo zauważyć, że  $d(y; \mu) = 2\mu^{1-p} D_A^\alpha(y|\mu)$ , gdzie  $D_A^\alpha(y|\mu)$  jest dywergencją  $\alpha$  (według tabeli 2.1) z parametrem  $\alpha = 2 - p$ . Dla  $p = 3/2$  uzyskuje się:

$$\begin{aligned} d(y; \mu) &= 2 \left( -4\sqrt{y} + 2\frac{y}{\sqrt{\mu}} + 2\sqrt{\mu} \right) \\ &= \frac{4}{\sqrt{\mu}} (\sqrt{y} - \sqrt{\mu})^2 = \frac{2}{\sqrt{\mu}} D_A^{(1/2)}(y|\mu), \end{aligned} \quad (2.19)$$

gdzie  $D_A^{(1/2)}(y|\mu)$  jest odległością Hellingera wyrażoną przez zależność (2.10).

Jeśli  $p = 0$ , model (2.16) opisuje rozkład normalny zmiennej losowej  $y$ , a funkcja jednostkowego odchylenia sprowadza się do postaci:

$$d(y; \mu) = (y - \mu)^2 = 2\mu D_A^{(2)}(y|\mu), \quad (2.20)$$

gdzie  $D_A^{(2)}(y|\mu)$  jest dywergencją Pearson- $\chi^2$ , daną zależnością (2.12). Gdy  $p = 3$ , model Tweedie wyraża odwrotny rozkład gaussowski z funkcją:

$$d(y; \mu) = \frac{(y - \mu)^2}{y\mu^2} = 2\mu^{-2} D_A^{(-1)}(y|\mu), \quad (2.21)$$

gdzie  $D_A^{(-1)}(y|\mu)$  jest dywergencją Neyman- $\chi^2$ .

Dla  $p = 1$  lub  $p = 2$ , funkcja (2.17) jest osobliwa i podobnie jak dla (2.9) i (2.11) musi być wyznaczona w granicy. Z literatury [119, 409] wiadomo, że dla  $p = 1$  model Tweedie opisuje rozkład Poissona zmiennej losowej  $y$ , a funkcja  $d(y; \mu)$  ma postać:

$$d(y; \mu) = 2 \left( y \ln \left( \frac{y}{\mu} \right) - y + \mu \right) = 2D_{KL}(y|\mu), \quad (2.22)$$

gdzie  $D_{KL}(y|\mu)$  jest uogólnioną dywergencją  $KL$ , zgodnie z (2.11). Jeśli  $p = 2$ , model Tweedie określa rozkład Gamma [119, 409], a odpowiadająca funkcja jednostkowego odchylenia ma postać:

$$d(y; \mu) = 2 \left( \ln \left( \frac{\mu}{y} \right) + \frac{y}{\mu} - 1 \right) = 2\mu^{-1} D_{KL}(\mu|y), \quad (2.23)$$

gdzie  $D_{KL}(\mu|y)$  jest dualną wersją uogólnionej dywergencji  $KL$ .

Tabela 2.2. Zależność między uogólnioną dywergencją  $\alpha$  a modelem Tweedie

$\alpha$	Miara rozbieżności	$p$	Rozkład Tweedie
-1	Dywergencja Neyman- $\chi^2$	3	Odwrotny gaussowski
0	Dualna uogólniona dywergencja $KL$	2	Gamma
$\frac{1}{2}$	Odległość Hellingera	$\frac{3}{2}$	Złożony Poissona
1	Uogólniona dywergencja $KL$	1	Poissona
2	Dywergencja Pearson- $\chi^2$	0	Gaussowski

Zakładając, że czynnik  $\mu^{1-p}$  jest jedynie parametrem skalującym wariancję w modelu (2.16), podane rozważania pokazują relację między parametrem  $\alpha$  funkcji (2.7) a rozkładem prawdopodobieństwa zmiennych losowych w macierzy  $\mathbf{Y}$ . Związki te podano w tabeli 2.2.

## 2.3. Dywergencja Bregmana

Dywergencja Bregmana [35], podobnie jak dywergencja Csiszára, tworzy rodzinę znanych miar rozbieżności i może być stosowana jako miara rozbieżności między wektorami, rozkładami gęstości prawdopodobieństwa lub funkcjami.

Można ją również opisać modelem eksponencjalnych rozkładów. Jest stosowana w wielu dziedzinach nauki. Dhillon i Sra [107], korzystając z tej miary rozbieżności, zaproponowali multiplikatywne algorytmy do rozwiązywania zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy. W niniejszej monografii miara ta zastosowana jest do oceny rozbieżności między wektorami.

Dla danych wektorów  $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^N$  oraz ściśle wypukłej funkcji  $\phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  klasy  $C^1$ , standardowa dywergencja Bregmana [35] ma postać:

$$D_\phi(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \phi(\mathbf{p}) - \phi(\mathbf{q}) - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^T \nabla \phi(\mathbf{q}), \quad (2.24)$$

gdzie  $\nabla \phi(\mathbf{q})$  jest gradientem funkcji  $\phi(\cdot)$  w punkcie  $\mathbf{q}$ .

Zamieniając składniki w (2.24), uzyskuje się:

$$\phi(\mathbf{p}) = \phi(\mathbf{q}) + (\mathbf{p} - \mathbf{q})^T \nabla \phi(\mathbf{q}) + D_\phi(\mathbf{p}||\mathbf{q}). \quad (2.25)$$

Łatwo zauważyć, że dywergencja Bregmana jest resztą szeregu Taylora rozwinięcia pierwszego stopnia funkcji  $\phi(\cdot)$  względem punktu  $\mathbf{q}$ . Miara (2.24) jest nieujemna, wypukła względem  $\mathbf{p}$ , ale niekoniecznie względem  $\mathbf{q}$ , a także  $D_\phi(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = 0$ , jeśli  $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ .

W zależności od definicji funkcji  $\phi(\cdot)$  uzyskuje się wiele znanych miar rozbieżności lub odległości. Przykładowe funkcje  $\phi(\cdot)$  i odpowiadające im miary rozbieżności znajdują się w tabeli 2.3.

### 2.3.1. Dywergencja $\beta$

Pierwsze wzmianki o dywergencji  $\beta$  pochodzą z materiałów seminaryjnych Eguchiego i Kano [122], ogłoszonych w 2001 roku w *Institute of Statistical Mathematics* (ISM) w Tokio. Następnie Minami i Eguchi [306] pokazali, że miara ta może być bardzo efektywna w ślepej separacji sygnałów. Dywergencja ta znalazła

Tabela 2.3. Funkcje  $\phi(z)$  i odpowiadające im miary rozbieżności

Funkcja $\phi(z)$	Miara rozbieżności $D(\mathbf{p}  \mathbf{q})$
$z \ln(z)$ dla $z \geq 0$	Uogólniona dywergencja <i>KL</i> : $\sum_n p_n \ln \left( \frac{p_n}{q_n} \right) - p_n + q_n$
$-\ln(z)$ dla $z \geq 0$	Dywergencja Itakura–Saito: $\sum_n \ln \left( \frac{q_n}{p_n} \right) + \frac{p_n}{q_n} - 1$
$\frac{1}{2}z^2$	Kwadrat odległości euklidesowej: $\frac{1}{2}\ \mathbf{p} - \mathbf{q}\ _2^2$
$\frac{1}{2}\sum_{m,n} z_m w_{mn} z_n$	Kwadrat odległości Mahalanobisa: $\frac{1}{2}\ \mathbf{p} - \mathbf{q}\ _{\mathbf{W}}^2$

również liczne zastosowania w metodzie NMF. Kompass [236], stosując pewną modyfikację tej miary, przedstawił multiplikatywny algorytm, łączący dwa podstawowe algorytmy zaproponowane przez Lee i Seunga [257, 258]. W rozdziale szóstym monografii [89] można odnaleźć projekcyjne algorytmy Newtona, które minimalizują dywergencję  $\beta$ . Févotte i Idier [130] rozszerzyli grupę algorytmów multiplikatywnych dla dywergencji  $\beta$  o dodatkowe dwa, bazujące na zagadnieniu minimalizacji tzw. funkcji majoryzacji i maksymalizacji korekty pomocniczej funkcji kosztu. Rozważania teoretyczne na temat związku dywergencji Bregmana i  $\beta$  w kontekście zastosowania do metody NMF znajdują się w [184]. Dywergencja  $\beta$  jest również stosowana do estymacji czynników w metodzie NTF, np. w [87, 134]. Cichocki i Amari [70, 72] sformułowali nową klasę dywergencji *AB*, która łączy dywergencje  $\alpha$  i  $\beta$ , a także zaproponowali nowe algorytmy multiplikatywne dla nieujemnej faktoryzacji macierzy, minimalizujące dywergencję *AB*.

Dywergencja  $\beta$  jest szczególnym przypadkiem dywergencji Bregmana. Jeśli funkcja  $\phi$  w (2.24) zostanie zdefiniowana jako:

$$\phi(z) = \begin{cases} \frac{1}{\beta(\beta+1)} (z^{\beta+1} - (\beta+1)z + \beta) & \text{dla } \beta \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 0\} \\ z - \ln(z) - 1, \quad z \geq 0 & \text{dla } \beta = -1 \\ z \ln(z) - z + 1, \quad z \geq 0 & \text{dla } \beta = 0 \end{cases} \quad (2.26)$$

to dla  $\mathbf{p}_n, \mathbf{q}_n \geq 0$  uzyskuje się dywergencję  $\beta$ :

$$D_B^{(\beta)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \begin{cases} \sum_n \frac{p_n^{\beta+1} - q_n^{\beta+1}}{\beta(\beta+1)} - \frac{q_n^\beta (p_n - q_n)}{\beta} & \text{dla } \beta \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 0\} \\ \sum_n \ln \left( \frac{q_n}{p_n} \right) + \frac{p_n}{q_n} - 1 & \text{dla } \beta = -1 \\ \sum_n p_n \ln \left( \frac{p_n}{q_n} \right) - p_n + q_n & \text{dla } \beta = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$



Dywergencja  $\beta$ , podobnie jak dywergencja  $\alpha$ , łączy w sobie wiele znanych miar rozbieżności lub odległości, takich jak uogólniona dywergencja  $KL$  oraz odległość euklidesowa. Jest to funkcja parametru  $\beta$ , co oznacza możliwość parametrycznej adaptacji miary rozbieżności do rozkładu zaburzeń  $\mathbf{N}$  w modelu (1.3) lub rozkładu gęstości prawdopodobieństwa danych obserwowanych. Jak łatwo zauważyć, dywergencja  $\beta$  w (2.27) dla  $\beta = 0$  jest uogólnioną dywergencją  $KL$ , czyli  $D_B^{(0)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = D_{KL}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$ . Jeśli  $\beta = 1$ , uzyskuje się kwadrat odległości euklidesowej:  $D_B^{(1)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_n (p_n - q_n)^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{p} - \mathbf{q}\|_2^2$ . Dla  $\beta = -1$ , funkcja  $D_B^{(-1)}(\mathbf{p}||\mathbf{q})$  sprowadza się do dywergencji Itakura–Saito (IS) [205], podanej w tabeli 2.3.

Miara IS jest szczególnie przydatna dla percepcyjnej oceny dopasowania widma gęstości mocy sygnału rekonstruowanego do widma jego oryginału. Miara ta jest niezmiennicza ze względu na amplitudę widma, co jest szczególnie istotne dla oceny spektrogramów sygnałów akustycznych o dużej dynamice i szerokim paśmie. Ze względu na te właściwości, miara IS jest również stosowana w metodzie NMF, np. do ślepej separacji widm sygnałów akustycznych [128, 336].

### 2.3.2. Model Tweedie dla dywergencji $\beta$

Dywergencję  $\beta$  dla  $\beta \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 0\}$  można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} D_B^{(\beta)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) &= \sum_n \frac{p_n^{\beta+1} - q_n^{\beta+1}}{\beta(\beta+1)} - \frac{q_n^\beta (p_n - q_n)}{\beta} \\ &= \sum_n \frac{p_n^{\beta+1}}{\beta(\beta+1)} - \frac{p_n q_n^\beta}{\beta} + \frac{q_n^{\beta+1}}{\beta+1}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Po podstawieniu  $\beta = 1 - p$  do (2.28) otrzymuje się:

$$\begin{aligned} D_B^{(\beta)}(\mathbf{p}||\mathbf{q}) &= \sum_n \frac{p_n^{2-p}}{(1-p)(2-p)} - \frac{p_n q_n^{1-p}}{1-p} + \frac{q_n^{2-p}}{2-p} \\ &= \frac{1}{2} \sum_n d(p_n; q_n), \end{aligned} \quad (2.29)$$

gdzie  $d(p_n; q_n)$  dla  $p_n = y$  i  $q_n = \mu$  jest funkcją jednostkowego odchylenia w modelu Tweedie, która wyraża się zależnością (2.17) dla  $p \in [-\infty, 0] \cup (1, 2) \cup (2, +\infty]$ . Dla  $\beta = 0$  oraz  $\beta = -1$ , funkcja  $d(p_n; q_n)$  przyjmuje odpowiednio postać (2.22) oraz (2.23).

Tabela 2.4. Zależność między uogólnioną dywergencją  $\beta$  a modelem Tweedie

$\beta$	Miara rozbieżności	$p$	Rozkład Tweedie
-2	$D_B^{(-2)}(\mathbf{p}  \mathbf{q})$	3	Odwrotny gaussowski
-1	Dywergencja <i>IS</i>	2	Gamma
(-1, 0)	$D_B^{(\beta)}(\mathbf{p}  \mathbf{q})$	(1, 2)	Złożony Poissona
0	Uogólniona dywergencja <i>KL</i>	1	Poissona
1	Kwadrat odległości euklidesowej	0	Gaussowski

Z tego wynika, że minimalizacja dywergencji  $\beta$  dla dowolnej wartości parametru  $\beta$  odpowiada maksymalizacji odpowiedniej funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa danych obserwowanych. Znak sumy w (2.29) oznacza, że odpowiednia funkcja rozkładu (gęstości) prawdopodobieństwa jest funkcją łączną, tzn. modeluje wielowymiarowy charakter rozkładu.

Podane rozważania pokazują, że związek między wartością parametru  $\beta$  w dywergencji  $\beta$  a rozkładem gęstości prawdopodobieństwa opisującego zmienne losowe w  $\mathbf{Y}$  lub  $\mathbf{N}$  (dla odległości euklidesowej) można dość łatwo określić. Należy również wspomnieć, że w przypadku dywergencji  $\beta$ , wariancja modelu Tweedie nie jest skalowana, tak jak dla dywergencji  $\alpha$ . Model Tweedie ma zatem łatwiejszą interpretację. Podobnie jak dla dywergencji  $\alpha$ , przykładowe zależności podano w tabeli 2.4.

## 2.4. Inne funkcje celu

W podanych rozważaniach przedstawiono krótki przegląd przez fundamentalne i najbardziej znane miary odległości lub rozbieżności, które są stosowane do rozwiązywania zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów. Zagadnienia te będą jeszcze poruszane w niniejszej monografii w kontekście algorytmów optymalizacji lub zastosowań. Obszerne omówienie miar odległości lub rozbieżności stosowanych w nieujemnych faktoryzacjach można odnaleźć w drugim rozdziale książki [89].

Należy również wspomnieć, że istnieją także inne, nietypowe funkcje celu stosowane w omawianych zagadnieniach. Przykładowo, Sandler i Lindenbaum [388, 389] zastosowali do metody NMF miarę EMD (ang. *Earth Mover's Distance*), która jest bardzo skuteczna w ocenie podobieństwa obrazów z lokal-

---

nymi deformacjami lub rozmyciem scen (ang. *blurring*). Miara ta, znana również jako metryka Wassersteina, określa podobieństwo rozkładów prawdopodobieństw, zwłaszcza wyrażonych przez wielowymiarowe histogramy.

Miary analizowane w niniejszym rozdziale dotyczą jedynie związku macierzy obserwowanej  $\mathbf{Y}$  z macierzą estymowaną  $\mathbf{AX}$ . Jeśli dostępna jest dodatkowa informacja o charakterze estymowanych czynników, funkcja celu określająca związek między  $\mathbf{Y}$  a  $\mathbf{AX}$  zwykle ulega rozszerzeniu o dodatkowe człony, tzw. człony kary lub człony regularyzujące. Te zagadnienia będą omawiane w następnym rozdziale.



### 3. Podstawy teoretyczne

Metoda NMF, pomimo swej dużej elastyczności w dostosowaniu do danego zadania, ma też pewne ograniczenia. Właściwy wybór odpowiedniego modelu faktoryzacji, funkcji celu, algorytmu optymalizacji tej funkcji, a także metod inicjalizacji i zatrzymania procedur iteracyjnych nie jest zadaniem łatwym i wymaga znajomości podstaw teoretycznych metody NMF. W niniejszym rozdziale omówiono wybrane zagadnienia problemu niejednoznaczności czynników w modelu NMF oraz sposoby wyboru pożądanego rozwiązania.

#### 3.1. Niejednoznaczność nieujemnej faktoryzacji macierzy

Model faktoryzacji (1.1) w ogólnym przypadku nie określa czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  jednoznacznie. Mogą więc istnieć takie  $\bar{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\bar{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , które spełniają zależność  $\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{X}}$  dla  $\bar{\mathbf{A}} \neq \mathbf{A}$  i  $\bar{\mathbf{X}} \neq \mathbf{X}$ . Wynika z tego, że

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{X} = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{X}}, \quad (3.1)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{Q}$  i  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{X}$  oraz  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{J \times J}$  – macierz niejednoznaczności. Jeśli  $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{X}) = \text{rank}(\mathbf{Y}) = J$ , to  $\text{span}(\mathbf{A}) = \text{span}(\mathbf{Y}) = \text{span}(\bar{\mathbf{A}})$ . Wynika stąd wniosek, że wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\bar{\mathbf{A}}$  określają bazę dla tej samej przestrzeni, a więc  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{J \times J}$  jest macierzą przesunięcia bazy lub macierzą rotacji, dla której  $\text{rank}(\mathbf{Q}) = J$ .

Zadanie określenia zbioru wszystkich klas macierzy  $\mathbf{Q}$ , dla których spełniona jest zależność (3.1), jest bardzo trudne i zależy od właściwości macierzy  $\mathbf{Y}$ . Jednakże nietrudno zauważyć, że tożsamość (3.1) jest spełniona dla co najmniej jednej klasy macierzy, tzw. *skalowanej macierzy permutacyjnej*. Według [253, 307], jeśli nieujemna macierz należy do tej klasy, jej odwrotność jest zawsze nieujemna. Tak

więc, niejednoznaczności skali i permutacji w faktorach są podstawowymi cechami przyjętego modelu. Aby usunąć takie niejednoznaczności, konieczna jest wiedza *a priori* o uporządkowaniu i skalowaniu wektorów kolumnowych w macierzy  $\mathbf{A}$  lub wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{X}$ . Przyjęto więc następującą definicję jednoznaczności modelu NMF:

**Definicja 3.1.** *Przyjmuje się, że faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  otrzymane w wyniku nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$  są jednoznaczne, jeśli ich niejednoznaczność ograniczona jest tylko do skalowania i permutacji kolumn w  $\mathbf{A}$  i odpowiednio wierszy w  $\mathbf{X}$ .*

Niejednoznaczność skali i permutacji estymowanych macierzy występuje w wielu problemach ślepej separacji źródeł i w praktyce zwykle nie stanowi istotnego utrudnienia. Jednak istnienie tych niejednoznaczności nie pozostaje bez wpływu na iteracyjny proces estymacji faktorów.

Niejednoznaczność permutacji powoduje, że funkcja celu klasy  $C^1$  ma wiele globalnych minimów, a więc taka funkcja nie może być wypukła w całym obszarze rozwiązań dopuszczalnych. Wynika stąd konkluzja, że każda funkcja celu (nawet odległość euklidesowa) minimalizowana naprzemiennie według algorytmu (1.8) jest niewypukła jednocześnie względem obu faktorów  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ . Wypukłość funkcji celu można jedynie analizować względem jednego z faktorów, przy drugim ustalonym jako zbiór parametrów.

Minimalizacja niewypukłej funkcji celu metodami gradientowymi nie gwarantuje znalezienia rozwiązania pożądanego, tzn. jednego z wielu minimów globalnych. Co więcej, z powodu występowania również innych niejednoznaczności, funkcja celu może mieć różne minima lokalne oraz punkty przegięcia, a to oznacza, że naprzemienna minimalizacja może utknąć w jednym z punktów stacjonarności, który jest daleki od rozwiązania pożądanego. Aby minimalizować takie ryzyko należy, oprócz właściwego wyboru algorytmu numerycznego i metody inicjalizacji faktorów, również łagodzić wpływ niejednoznaczności skali na proces minimalizacji naprzemiennej.

### 3.1.1. Normalizacja faktorów

Niech  $\mathbf{Q} = \mathbf{D}$ , gdzie  $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_J) \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$ , będzie diagonalną macierzą o nieujemnych elementach. Jeśli  $\forall j : 0 < d_j < \infty$ ,  $\text{rank}(\mathbf{D}) = J$  i macierz  $\mathbf{Y}$  pozostaje niezmiennicza względem  $\mathbf{Q}$ . W wyniku kolejnych kroków naprzemiennej minimalizacji funkcji celu może jednak zdarzyć się, że  $\exists j : d_j \rightarrow 0$ , czyli przekształcenia liniowe  $Q_A : \mathbf{A} \rightarrow \bar{\mathbf{A}}$  i  $Q_X : \mathbf{X} \rightarrow \bar{\mathbf{X}}$  nie są odwracalne. Jeśli

$\exists j : \bar{\mathbf{a}}_j \rightarrow 0 \Rightarrow \text{rank}(\bar{\mathbf{A}}) < J$ , a z kolei  $\bar{\mathbf{x}}_j \rightarrow \infty$ , wywołując numeryczną niestabilność algorytmów aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$ . Analogiczna sytuacja może wystąpić dla  $d_j \rightarrow \infty$ . Aby uniknąć złego skalowania i w konsekwencji niestabilności numerycznej, można po każdym kroku naprzemiennej minimalizacji normalizować kolumny w  $\mathbf{A}$  lub wiersze w  $\mathbf{X}$ . Zwykle po każdym kroku aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$  przyjmuje się następujące normalizacje:

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{D}_A, \quad \mathbf{X} \leftarrow \mathbf{D}_A^{-1} \mathbf{X}, \quad (3.2)$$

gdzie

$$\mathbf{D}_A = \text{diag}\{\|\mathbf{a}_1\|_p^{-1}, \|\mathbf{a}_2\|_p^{-1}, \dots, \|\mathbf{a}_J\|_p^{-1}\}, \quad (3.3)$$

dla  $p \in [0, \infty]$  oraz  $\forall j : \|\mathbf{a}_j\|_p > 0$ . Natomiast po aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$  normalizacja ma postać:

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{D}_X^{-1}, \quad \mathbf{X} \leftarrow \mathbf{D}_X \mathbf{X}, \quad (3.4)$$

gdzie

$$\mathbf{D}_X = \text{diag}\{\|\mathbf{x}_1\|_p^{-1}, \|\mathbf{x}_2\|_p^{-1}, \dots, \|\mathbf{x}_J\|_p^{-1}\} \quad \text{dla} \quad \forall j : \|\mathbf{x}_j\|_p > 0. \quad (3.5)$$

Po uwzględnieniu normalizacji (3.2) i (3.4), algorytm naprzemiennej estymacji czynników (algorytm 1 w rozdz. 1) ma postać algorytmu 2.

W zależności od zastosowania parametr  $p$  określający normę w (3.3) i (3.5) może przybierać różne wartości z zakresu  $[0, \infty]$ . Jeśli  $p = 2$ , normalizacja zapewnia jednostkowe długości wektorów według normy euklidesowej. Najczęściej jednak  $p = 1$ , czyli normalizacja do jednostkowych norm  $l_1$ . Taka normalizacja faworyzuje rzadkie elementy w wektorach. Ma też łatwą interpretację statystyczną, ponieważ elementy tak znormalizowanego nieujemnego wektora mogą wyrażać pewne prawdopodobieństwo.

Normalizacja czynników nie zawsze ma postać „dwustronnego” skalowania (3.2) i (3.4). Może być również zrealizowana w znacznie uproszczonej formie, np. stosując normalizację  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{D}_A$  tylko po aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$ . Oczywiście takie podejście zmienia wartość funkcji celu i utrudnia jej optymalizację, ale nie zmienia kierunków wektorów kolumnowych w  $\mathbf{A}$ . Badania eksperymentalne [89, 112, 225, 395, 461] pokazują, że takie „jednostronne” skalowanie jest wystarczające do ekstrakcji pożądaných komponentów ukrytych w wielu zastosowaniach modelu NMF.

---

**Algorytm 2. Algorytm naprzemiennej estymacji znormalizowanych czynników**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $p$  – parametr metryki normalizacji czynników

**Wyjście:** Estymowane czynniki  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$

- 1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ;  $n = 0$ ;
- 2 **repeat**
- 3      $n \leftarrow n + 1$ ;
- 4      $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \text{AlgorytmA}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n-1)}, \mathbf{X}^{(n-1)})$ ; // Aktualizacja czynnika  $\mathbf{A}$
- 5      $\mathbf{D}_A^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{a}_1^{(n)}\|_p^{-1}, \|\mathbf{a}_2^{(n)}\|_p^{-1}, \dots, \|\mathbf{a}_J^{(n)}\|_p^{-1}\}$ ;
- 6      $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{D}_A^{(n)}$ ,     $\mathbf{X}^{(n-1)} \leftarrow (\mathbf{D}_A^{(n)})^{-1} \mathbf{X}^{(n-1)}$ ;    // Normalizacja
- 7      $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n-1)})$ ; // Aktualizacja czynnika  $\mathbf{X}$
- 8      $\mathbf{D}_X^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{x}_1^{(n)}\|_p^{-1}, \|\mathbf{x}_2^{(n)}\|_p^{-1}, \dots, \|\mathbf{x}_J^{(n)}\|_p^{-1}\}$ ;
- 9      $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} (\mathbf{D}_X^{(n)})^{-1}$ ,     $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \mathbf{D}_X^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}$ ;    // Normalizacja
- 10 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

Ding, Li i Peng [112] pokazali jeszcze inną postać normalizacji czynników w modelu NMF, przyjęto bowiem:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{D}_A\mathbf{D}_A^{-1}\mathbf{D}_X^{-1}\mathbf{D}_X\mathbf{X} = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{X}}, \quad (3.6)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{D}_A$ ,  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{D}_X\mathbf{X}$  oraz  $\bar{\mathbf{D}} = \text{diag}[d_j] = \mathbf{D}_A^{-1}\mathbf{D}_X^{-1}$  dla  $\mathbf{D}_A$  i  $\mathbf{D}_X$  wyrażonych odpowiednio przez (3.3) i (3.5), gdy  $p = 1$ . Z zależności (3.6) wynika, że  $\forall j : \sum_{i=1}^I \bar{a}_{ij} = 1$  oraz  $\forall j : \sum_{t=1}^T \bar{x}_{jt} = 1$ . Jeśli macierz  $\mathbf{Y}$  jest znormalizowana, tak aby  $\sum_{i=1}^I \sum_{t=1}^T y_{it} = 1$ , to  $1 = \sum_{i=1}^I \sum_{t=1}^T \sum_{j=1}^J \bar{a}_{ij} d_j \bar{x}_{jt} = \sum_{j=1}^J d_j$ . Te przekształcenia pokazują, że NMF z normalizacją według (3.6) i dla  $p = 1$  jest modelowo równoważna metodzie PLSI (ang. *Probabilistic Latent Semantic Indexing*) [193], stosowanej w analizie dokumentów tekstowych. Jednak eksperymenty przeprowadzone w [112] pokazują, że metody PLSI i NMF dają różne wyniki, ponieważ wykazują zbieżność do różnych lokalnych minimów funkcji celu, pomimo tej samej inicjalizacji.

Niejednoznaczności skali i permutacji nie są jedynymi niejednoznacznościami w modelu NMF. W wielu zastosowaniach wybór właściwego spośród zbioru możliwych rozwiązań musi być wspomagany dodatkową informacją *a priori* o charakterze poszukiwanych czynników. Problem ten pokazano na przykładzie 3.1.



**Przykład 3.1.** Niech

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 7 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

gdzie  $x_1(t)$  i  $x_2(t)$  są danymi nieujemnymi sygnałami, zatem

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{bmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 3x_1(t) + 2x_2(t) \\ 7x_1(t) + 2x_2(t) \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Łatwo pokazać, że możliwa jest również inna nieujemna dekompozycja macierzy  $\mathbf{Y}$ , w wyniku której uzyskuje się:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 3x_1(t) + 2x_2(t) \\ 7x_1(t) + 2x_2(t) \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ 3x_1(t) + 2x_2(t) \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Z zależności (3.9) wynika, że

$$\bar{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ 3x_1(t) + 2x_2(t) \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

są nowymi nieujemnymi czynnikami, które nie wynikają z niejednoznaczności skalowania i permutacji. Stosując normalizację czynników  $\mathbf{A}$  i  $\bar{\mathbf{A}}$  według normy  $l_1$ , uzyskuje się:

$$\mathbf{A}\mathbf{D}_A = \begin{bmatrix} 0,3 & 0,5 \\ 0,7 & 0,5 \end{bmatrix}, \quad \bar{\mathbf{A}}\mathbf{D}_{\bar{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 0,5 \\ 1 & 0,5 \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Analizując unormowaną odległość euklidesową między czynnikami: estymowanym  $\bar{\mathbf{A}}$  i oryginalnym  $\mathbf{A}$ , otrzymuje się:

$$\delta_A = \frac{\|\bar{\mathbf{A}} - \mathbf{A}\|_F}{\|\mathbf{A}\|_F} = 0,5505, \quad \delta_{AD} = \frac{\|\bar{\mathbf{A}}\mathbf{D}_{\bar{A}} - \mathbf{A}\mathbf{D}_A\|_F}{\|\mathbf{A}\mathbf{D}_A\|_F} = 0,4082, \quad (3.12)$$

gdzie  $\delta_A$  jest względnym błędem estymacji bez normalizacji, a  $\delta_{AD}$  jest wyznaczony po normalizacji. Normalizacja zmniejszyła błąd estymacji, ale nie jest wystarczająca do wyeliminowania innych niejednoznaczności. Konieczna jest więc wiedza aprioryczna na temat estymowanych czynników. Zakładając, że estymowane sygnały  $x_1(t)$  i  $x_2(t)$  są nieujemne i rzadkie, nietrudno zauważyć, że rzadkość sygnału  $\bar{x}_2(t) = 3x_1(t) + 2x_2(t)$  jest mniejsza niż sygnału  $x_2(t)$ . W takim przypadku zastosowanie pewnych sposobów wymuszających rzadkość estymowanej macierzy  $\bar{\mathbf{X}}$  może usprawnić poszukiwania właściwego rozwiązania.

### 3.1.2. Miary rzadkości

W literaturze można spotkać różne definicje i miary rzadkości. Sygnał lub wektor może być intuicyjnie oceniony jako rzadki (ang. *sparse*), jeśli przyjmuje wartość zerową dla znacznej liczby jego próbek lub elementów. Jednak obiektywna ocena rzadkości wektora lub zbioru wektorów wymaga określenia precyzyjnych miar. Najprostszy sposób obiektywnej oceny rzadkości wektora bazuje na normie  $l_0$ , która określa liczbę niezerowych elementów wektora. Jeśli analizowany wektor zawiera niewielkie zaburzenia, np. wywołane szumem o małej mocy widmowej, lepiej jest zliczać te niezerowe elementy, których wartości przekraczają pewien założony poziom. Taka miara rzadkości została podana przez Stadlthannera i in. [414]. Hoyer [195] wprowadził miarę rzadkości opartą na współczynniku stosunku normy  $l_1$  do  $l_2$ . Niech  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^T$ , wówczas

$$\text{Sp}(\mathbf{x}) = \frac{\sqrt{T} - \frac{\|\mathbf{x}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_2}}{\sqrt{T} - 1} \in [0, 1]. \quad (3.13)$$

Według miary (3.13), wektor zawierający tylko jeden dodatni element jest doskonale rzadki, tzn.  $\text{Sp}([0, \dots, 0, \xi, 0, \dots, 0]) = 1$  dla  $\forall \xi > 0$ , natomiast wektor o elementach tej samej dodatniej wartości jest kompletnie gęsty, tzn.  $\text{Sp}([\xi, \dots, \xi]) = 0$  dla  $\forall \xi > 0$ . Omawiane miary rzadkości nie są jednak zbyt użyteczne do oceny rzadkości grupy sygnałów lub macierzy. Do oceny całościowej lub grupowej rzadkości macierzy lepiej nadają się miary stosowane w literaturze [468, 527, 528].

**Definicja 3.2.** Grupową,  $p$ -tego stopnia rzadkość macierzy  $\mathbf{X} = [x_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , można zdefiniować następująco:

$$\text{SG}^{(p)}(\mathbf{X}) = \frac{\#\{t : \sum_{j=1}^J b_{jt} = J - p\}}{T} \in [0, 1], \quad (3.14)$$

dla  $p = 1, \dots, J$ , gdzie  $b_{jt} = \begin{cases} 1 & \text{dla } x_{jt} > 0 \\ 0 & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$

Miara  $\text{SG}^{(p)}(\mathbf{X})$  w (3.14) określa stosunek liczby kolumn w macierzy  $\mathbf{X}$ , które mają dokładnie  $p$  zerowych wartości do liczby wszystkich kolumn. Jeśli wymagana jest dodatkowa informacja o rozkładzie zerowych elementów w  $j$ -tym wierszu macierzy  $\mathbf{X}$ , można zastosować miarę  $\text{SI}_j^{(p)}(\mathbf{X})$ , zdefiniowaną w (3.15).

**Definicja 3.3.** Indywidualna  $p$ -tego stopnia rzadkość macierzy  $\mathbf{X} = [x_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  dla jej  $j$ -tego wiersza wyraża się następująco:

$$\text{SI}_j^{(p)}(\mathbf{X}) = \begin{cases} \frac{\#\{t : x_{jt} = 0, \sum_{j=1}^J b_{jt} = J - p\}}{T(\text{SG}^{(p)}(\mathbf{X}))} & \text{dla } \text{SG}^{(p)}(\mathbf{X}) > 0, \\ 0 & \text{dla } \text{SG}^{(p)}(\mathbf{X}) = 0. \end{cases} \quad (3.15)$$

Dla  $p = 1, \dots, J$  oraz  $\forall j : \text{SI}_j^{(p)}(\mathbf{X}) \in [0, 1]$ . Jeśli w  $j$ -tym wierszu macierzy  $\mathbf{X}$  nie występuje ani jeden element zerowy, to  $\text{SI}_j^{(p)}(\mathbf{X}) = 0$ , a gdy wszystkie elementy tego wiersza są zerowe, wówczas  $\text{SI}_j^{(p)}(\mathbf{X}) = 1$ .

### 3.1.3. Podejście geometryczne

Faktoryzacja (1.1) oznacza, że każdy wektor kolumnowy  $\mathbf{y}_t$  można wyrazić przez nieujemną liniową kombinację nieujemnych wektorów kolumnowych w macierzy  $\mathbf{A}$ . Taka kombinacja wektorów  $\{\mathbf{a}_j\}$  nazywana jest kombinacją koniczną (ang. *conic combination*). Współczynniki tej kombinacji dla  $\forall \mathbf{y}_t$  są zawarte w odpowiednim wektorze  $\mathbf{x}_t$ . Ten algebraiczny model ma też interpretację geometryczną.

Niech  $I \geq J$  oraz  $\mathfrak{U} = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$  będzie zbiorem nieujemnych wektorów, a  $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}_+^I$ ,  $\mathbf{e}_2 = [0, 1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}_+^I$ , ...,  $\mathbf{e}_I = [0, \dots, 0, 1]^T \in \mathbb{R}_+^I$  wektorami bazy kanonicznej  $I$ -wymiarowej przestrzeni euklidesowej. Aby wyjaśnić geometryczne podejście, zdefiniowano następujące zbiory wypukłe:

- **Stożek wielościanowy** (ang. *polyhedral cone*)

$$\mathcal{C}(\mathfrak{U}) = \left\{ \mathbf{u} : \mathbf{u} = \sum_{j=1}^J \alpha_j \mathbf{u}_j, \quad \alpha_j \geq 0 \right\}, \quad (3.16)$$

- **Stożek dualny** (ang. *dual cone*):

$$\mathcal{C}^*(\mathfrak{U}) = \{ \mathbf{v} : \mathbf{v}^T \mathbf{u} \geq 0, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathfrak{U}) \}, \quad (3.17)$$

- **Otoczka wypukła** (ang. *convex hull*)

$$\mathcal{H}(\mathfrak{U}) = \left\{ \mathbf{u} : \mathbf{u} = \sum_{j=1}^J \alpha_j \mathbf{u}_j, \quad \alpha_j \geq 0, \quad \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1 \right\}, \quad (3.18)$$

- **Otoczka afiniczna** (ang. *affine hull*)

$$\mathcal{A}(\mathcal{U}) = \left\{ \mathbf{u} : \mathbf{u} = \sum_{j=1}^J \alpha_j \mathbf{u}_j, \quad \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1, \quad \forall j : \alpha_j \in \mathbb{R} \right\}, \quad (3.19)$$

- **$(I-1)$ -wymiarowy standardowy lub probabilistyczny simpleks** (ang. *standard  $(I-1)$ -simplex*)

$$\mathcal{S}^{(I-1)} = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^I \alpha_i \mathbf{e}_i, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^I \alpha_i = 1 \right\}, \quad (3.20)$$

- **Ortant nieujemny** (ang. *nonnegative orthant*)

$$\mathbb{R}_+^I = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^I \alpha_i \mathbf{e}_i, \quad \alpha_i \geq 0 \right\}. \quad (3.21)$$

- **Ortant dodatni** (ang. *positive orthant*)

$$\mathbb{R}_{++}^I = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^I \alpha_i \mathbf{e}_i, \quad \alpha_i > 0 \right\}. \quad (3.22)$$

Z zależności (3.16), (3.20) i (3.21) wynika, że  $\mathcal{C}(\mathcal{U}) \subset \mathbb{R}_+^I$  oraz  $\mathcal{S}^{(I-1)} \subset \mathbb{R}_+^I$ . Podobnie  $\mathcal{H}(\mathcal{U}) \subset \mathcal{A}(\mathcal{U})$  oraz  $\mathbb{R}_{++}^I \subset \mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $\mathbb{R}_{++}^I$  jest zbiorem otwartym,  $\mathbb{R}_+^I$  zaś jest zbiorem zamkniętym.

Między zbiorami prymalnym  $\mathcal{C}(\mathcal{U})$  i dualnym  $\mathcal{C}^*(\mathcal{U})$  zachodzą relacje [115, 253, 381]:

- $(\mathcal{C}^*(\mathcal{U}))^* = \mathcal{C}(\mathcal{U})$ ,
- $(\mathbb{R}_{++}^I)^* = \mathbb{R}_{++}^I$ ,
- $\mathcal{C}(\mathcal{U}) \subseteq \mathcal{C}(\mathcal{B}) \Rightarrow \mathcal{C}^*(\mathcal{B}) \subseteq \mathcal{C}^*(\mathcal{U})$ ,
- jeśli  $\mathcal{C}(\mathcal{U})$  i  $\mathcal{C}(\mathcal{B})$  są zbiorami zamkniętymi i gdy  $\mathcal{C}(\mathcal{U}) \subset \mathcal{C}(\mathcal{B}) \Rightarrow \mathcal{C}^*(\mathcal{B}) \subset \mathcal{C}^*(\mathcal{U})$ ,
- jeżeli  $\mathcal{C}(\mathcal{U})$  generowany jest elementami zbioru  $\underline{\mathbf{u}} = \{\mathbf{u}_1^T, \dots, \mathbf{u}_J^T\}$ , gdzie  $\mathbf{u}_j$  jest  $j$ -tym wierszem odwracalnej macierzy  $\mathbf{U}$ , to  $\mathcal{C}^*(\underline{\mathbf{u}}) = \mathcal{C}(\mathbf{U}^{-1})$ , gdzie  $\mathbf{U}^{-1}$  zawiera kolumny macierzy  $\mathbf{U}^{-1}$ .

**Definicja 3.4.** *Promień ekstremalny* (ang. *extreme ray*) stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathcal{U})$  jest określony poprzez taki  $\mathbf{u}_r \in \mathcal{C}(\mathcal{U})$ , którego nie można wyrazić przez ściśle wypukłą kombinację liniową – ze współczynnikami kombinacji w przedziale  $(0, 1)$  – dowolnych różnych wektorów należących do  $\mathcal{C}(\mathcal{U})$ .

**Definicja 3.5.** *Stożek wielościanowy, w którym wszystkie promienie ekstremalne są liniowo niezależne nazywany jest stożkiem simplicjalnym (ang. simplicial cone).*

Jeśli  $\mathcal{C}(\mathfrak{U}) = \{\mathbf{u} = \mathbf{U}\boldsymbol{\alpha} \mid \boldsymbol{\alpha} \geq \mathbf{0}\}$  jest stożkiem simplicjalnym, to  $\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathfrak{U})$  istnieje jednoznaczny wektor  $\boldsymbol{\alpha}$ , który zawiera informację o konicznej kombinacji wektorów ekstremalnych w  $\mathbf{U}$ .

**Definicja 3.6.** *Skończony zbiór punktów, generujących otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\mathfrak{U})$ , nazywany jest wielokomórką (ang. polytope).*

**Definicja 3.7.** *Jeśli zbiór wektorów  $\mathfrak{U} = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_J\}$  jest afinicznie niezależny, to otoczka wypukła  $\mathcal{H}(\mathfrak{U})$  jest  $(J - 1)$ -wymiarowym simpleksem  $\mathcal{S}(\mathfrak{U})$  [381].*

Wektory z  $\mathfrak{U}$  w definicji 3.7 wyznaczają  $J$  wierzchołków  $(J - 1)$ -wymiarowego simpleksu. Simpleks jest obiektem geometrycznym, łatwym do wizualizowania dla  $1 \leq J \leq 4$ . Gdy  $J = 1, 2, 3, 4$ , otrzymuje się, kolejno: punkt, odcinek, trójkąt, czworościan. Dla wyższych modów wizualizacja nie jest łatwa. Każdy punkt  $\mathbf{u} \in \mathcal{S}(\mathfrak{U})$  może być wyrażony we współrzędnych barycentrycznych simpleksu jako kombinacja wypukła jego wierzchołków.

**Wniosek 3.1.** Ponieważ  $\forall t : \mathbf{y}_t = \sum_{j=1}^J x_{jt} \mathbf{a}_j$  oraz  $\forall j, t : x_{jt} \geq 0$ , z definicji (3.16) wynika, że  $\forall t : \mathbf{y}_t \in \mathcal{C}(\mathfrak{A})$ , gdzie  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$ , zatem wektory  $\mathbf{y}_t$  macierzy  $\mathbf{Y}$  należą do stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$ , generowanego wektorami zbioru  $\mathfrak{A}$ . Ponadto, jeśli  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$  oraz  $I \geq J$ , zbiór  $\mathfrak{A}$  zawiera wektory liniowo niezależne, a więc  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  jest stożkiem simplicjalnym.

Przyjmując skalowanie niezerowych kolumn macierzy  $\mathbf{A}$  według (3.2) i (3.3) dla  $p = 1$ , uzyskuje się:

$$\forall t : \sum_{i=1}^I y_{it} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left( \frac{a_{ij}}{\sum_{l=1}^I a_{lj}} \right) \left( \sum_{l=1}^I a_{lj} x_{jt} \right) = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \bar{a}_{ij} \bar{x}_{jt} = \sum_{j=1}^J \bar{x}_{jt}.$$

Skalowanie niezerowych kolumn macierzy  $\mathbf{Y}$  według:

$$\bar{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y} \mathbf{D}_Y = \bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{X}} \mathbf{D}_Y = \bar{\mathbf{A}} \bar{\bar{\mathbf{X}}}, \quad (3.23)$$

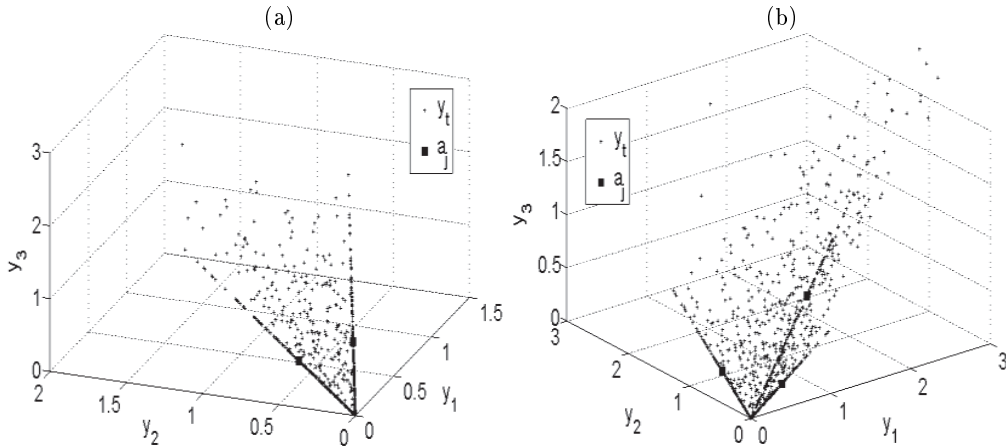
gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \mathbf{D}_A$ ,  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{D}_A^{-1} \mathbf{X}$  oraz  $\bar{\bar{\mathbf{X}}} = \bar{\mathbf{X}} \mathbf{D}_Y$  dla

$$\mathbf{D}_Y = \text{diag}\{\|\mathbf{y}_1\|_1^{-1}, \|\mathbf{y}_2\|_1^{-1}, \dots, \|\mathbf{y}_T\|_1^{-1}\}, \quad (3.24)$$

prowadzi do równości:  $1 = \sum_{i=1}^I \bar{y}_{it} = \sum_{j=1}^J \bar{x}_{jt}$ . Wynika stąd, że  $\forall t : \bar{\mathbf{y}}_t = \sum_{j=1}^J \bar{x}_{jt} \bar{\mathbf{a}}_j$ , gdzie  $\forall j, t : \bar{x}_{jt} \geq 0$  oraz  $\sum_{j=1}^J \bar{x}_{jt} = 1$ , zatem zbiór wektorów

$\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$  rozpiną otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ , do której należą wektory zbioru  $\bar{\mathfrak{Y}} = \{\bar{\mathbf{y}}_1, \bar{\mathbf{y}}_2, \dots, \bar{\mathbf{y}}_T\} \subset \mathbb{R}_+^I$ . Ponadto, jeśli  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$  zawiera wektory afinicznie niezależne, to wektory przeskalowane w zbiorze  $\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$  są również afinicznie niezależne. Na mocy definicji 3.7 zbiór punktów generowanych wektorami zbioru  $\bar{\mathfrak{Y}} \subset \mathbb{R}_+^I$  zawarty również jest w  $(J-1)$ -wymiarowym simpleksie  $\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}})$  z  $J$  wierzchołkami wyznaczonymi przez zbiór  $\bar{\mathfrak{A}}$  oraz współrzędnymi barycentrycznymi  $\bar{x}_{jt}$ . Przekształcenie (3.23) pokazuje także, że skalowanie (3.24) realizuje rzutowanie punktów zawartych w stożku wielościanowym  $\mathcal{C}(\bar{\mathfrak{Y}})$  na hiperpłaszczyznę  $H = \{\mathbf{y} \mid \langle \mathbf{y}, \mathbf{1} \rangle = 1\}$  wzdłuż wektorów  $\mathbf{y}_t$ . Wynikiem takiego rzutowania jest więc przekrój zbioru  $\mathcal{C}(\bar{\mathfrak{Y}})$  hiperpłaszczyzną tnącą  $H$ . Jeśli  $I \geq J$ , każdy punkt rzutowany na  $H$  jest również punktem na  $(I-1)$ -wymiarowym probabilistycznym simpleksie  $\mathcal{S}^{(I-1)}$ , zdefiniowanym przez (3.20). W ogólnym przypadku, wynikiem przekroju będzie wielokomórka. Dla  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{D}_A$  zachodzi odwzorowanie:  $\mathbf{D}_Y : \mathcal{C}(\bar{\mathfrak{Y}}) \rightarrow \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$ , gdzie  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}}) \subseteq \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}) \subseteq \mathcal{S}^{(I-1)} \subset \mathbb{R}_+^I$ . Podane rozważania zilustrowano przykładem 3.2 dla  $I = 3$  i  $J = 2$  oraz  $I = J = 3$ .

**Przykład 3.2.** Niech  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} = [x_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  będą nieujemnymi macierzami o losowych elementach generowanych według zasady:  $\forall i, j : a_{ij} \sim \mathcal{U}[0, 1]$  (rozkład równomierny) oraz  $\forall j, t : x_{jt} = \max\{0, \tilde{x}_{jt}\}$ , gdzie  $\tilde{x}_{jt} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . Zakładając  $I = 3$  oraz  $T = 1000$ , wyznaczono odpowiednie macierze  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$  dla  $J = 2$  oraz  $J = 3$ . Rozkład obserwowanych punktów generowanych przez kolumny

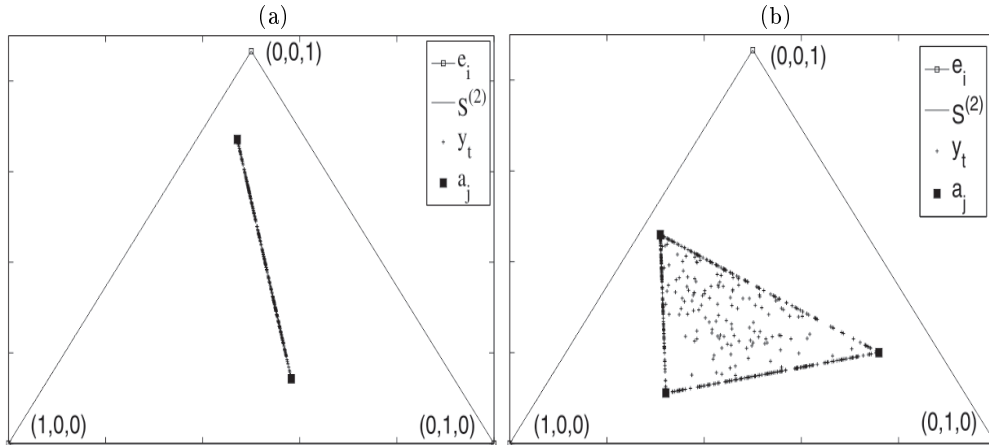


Rys. 3.1. Rozkład punktów generowanych przez wektory  $\mathbf{y}_t$  dla: (a)  $J = 2$ ; (b)  $J = 3$ . Czarnymi kwadratami zaznaczono kierunki wektorów  $\mathbf{a}_j$

macierzy  $\mathbf{Y}$  w  $\mathbb{R}_+^3$  pokazano na rysunku 3.1(a) dla  $J = 2$  oraz rysunku 3.1(b) dla  $J = 3$ . Z obu rysunków wynika, że obserwowane punkty zawarte są w stożkach wielościanowych  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \subset \mathbb{R}_+^3$ , generowanych przez zbiory  $\mathfrak{Y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T\}$ . Z bardzo dużym prawdopodobieństwem można stwierdzić, że w obu przypadkach macierze  $\mathbf{X}$  po permutacji kolumn mogą być wyrażone w postaci:

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}_p \ \mathbf{D}_p^{(X)}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}, \quad (3.25)$$

gdzie  $\mathbf{X}_p \in \mathbb{R}^{J \times (T-J)}$  jest dowolną macierzą nieujemną (lub dodatnią), a  $\mathbf{D}_p^{(X)} = \text{diag}(d_j) \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  jest macierzą diagonalną pełnego rzędu. Promienie ekstremalne zatem zarówno stożka  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$ , jak i  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  generowane są wektorami kolumnowymi macierzy  $\mathbf{A}$ . W obu przypadkach:  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{A}) \subset \mathbb{R}_+^3$ . Następnie, stosując przekształcenie (3.23), przeskalowano niezerowe kolumny obu macierzy  $\mathbf{Y}$ . W wyniku przeskalowania otrzymano punkty, które znajdują się na dwuwymiarowym probabilistycznym simpleksie  $\mathcal{S}^{(2)}$  (trójkącie równobocznym dla  $I = 3$ ). Na rysunku 3.2(a) pokazano przekroje zbiorów  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  i  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  płaszczyzną tnącą  $H$  dla  $J = 2$ . Podobne przekroje pokazano na rysunku 3.2(b) dla  $J = 3$ . Zakładając skalowanie:  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{D}_A$ , przekroje te tworzą zbiory  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$  i  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ . W obu przypadkach wierzchołki otoczek wypukłych  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  są takie same jak wierzchołki otoczek  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$ . Łatwo zauważyć, że punkty zbioru  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$  dla  $J = 3$  zawarte są w dwuwymiarowym simpleksie  $\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}})$  (trójkąt), którego wierzchołki wyznaczone są wektorami



Rys. 3.2. Przekroje zbiorów  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  płaszczyzną tnącą  $H$  dla: (a)  $J = 2$ ; (b)  $J = 3$ .

Czarnymi kwadratami zaznaczono położenia wektorów  $\bar{\mathbf{a}}_j$ . Wektory bazy kanonicznej zaznaczono jako:  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$ ,  $(0, 0, 1)$ . Przekrój zbioru  $\mathbb{R}_+^I$  względem płaszczyzny  $H$  jest dwuwymiarowym simpleksem probabilistycznym  $\mathcal{S}^{(2)}$

kolumnowymi macierzy  $\bar{\mathbf{A}}$ . Dla  $J = 2$ , zbiór  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  należy do jednowymiarowego simpleksu  $\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}})$ . Jest to odcinek, którego końce określone są położeniami wektorów kolumnowych w  $\bar{\mathbf{A}}$ .

Przedstawione rozważania, poparte przykładem 3.2, prowadzą do następujących wniosków:

**Wniosek 3.2.** Według definicji (1.1), zadanie nieujemnej faktoryzacji macierzy w ujęciu geometrycznym sprowadza się do znalezienia  $J$  promieni ekstremalnych stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  w  $\mathbb{R}_+^I$ , zawierającego wszystkie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$ .

**Wniosek 3.3.** Jeśli zadanie nieujemnej faktoryzacji macierzy należy do klasy zadań faktoryzowalnych (pkt 1.3) według modelu dokładnego (1.1), to jest równoważne zadaniu znalezienia  $J$  wierzchołków otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  lub  $(J - 1)$ -wymiarowego simpleksu  $\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}})$ , zawierającego wszystkie wektory  $\bar{\mathbf{y}}_t$ , przeskalowane zgodnie z przekształceniem (3.23).

### 3.1.4. Warunki jednoznaczności

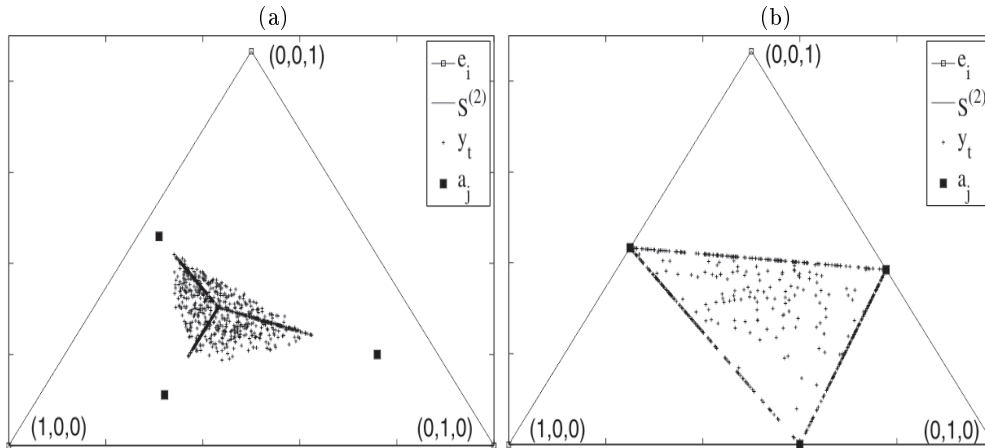
Rozważania teoretyczne na temat jednoznaczności czynników w modelu NMF można odnaleźć w wielu pracach, np. [66, 115, 233, 253, 324, 335, 391, 414, 427, 441, 449, 481]. W ujęciu geometrycznym, dana macierz  $\mathbf{Y}$  ma jednoznaczną nieujemną faktoryzację, jeśli istnieje tylko jeden stożek symplecjalny w  $\mathbb{R}_+^I$ , zawierający wszystkie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$ . Niewątpliwie, warunek ten nie jest spełniony dla szerokiej klasy macierzy  $\mathbf{Y}$ , pomijając omówione wcześniej niejednoznaczności skali i permutacji. Donoho i Stodden [115] wykazali, że jeśli

$$\forall i, t : y_{it} \geq \epsilon > 0, \quad (3.26)$$

to istnieje wiele różnych stożków symplecjalnych, które są w  $\mathbb{R}_+^I$  i zawierają wszystkie dane z macierzy  $\mathbf{Y}$ . Przykładowo, stożek symplecjalny  $\mathcal{C}(\mathfrak{B})$ , generowany wektorami zbioru  $\mathfrak{B} = \{\mathbf{e}_1 + \delta \mathbf{1}, \dots, \mathbf{e}_J + \delta \mathbf{1}\}$  dla  $0 < \delta < \epsilon$  również zawiera wszystkie wektory macierzy  $\mathbf{Y}$ , jeśli spełniony jest warunek (3.26).

**Przykład 3.3.** Dla macierzy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 3}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 1000}$ , analizowanych w przykładzie 3.2, wygenerowano macierz obserwacji  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{X}}$ , przyjmując  $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X} + \epsilon$  oraz  $\epsilon > 0$ . Ponieważ  $\forall i, j : a_{ij} > 0$  oraz  $\forall j, t : \tilde{x}_{jt} > 0$ , więc  $\forall i, t : y_{ij} > 0$ . Spełniony jest więc warunek (3.26). Następnie, wektory  $\mathbf{y}_t$  przeskalowano według (3.23). Rozkład punktów generowanych przez  $\bar{\mathbf{y}}_t$  na powierzchni dwuwymiarowego





Rys. 3.3. Rozkład punktów generowanych wektorami  $\bar{\mathbf{y}}_t$  na dwuwymiarowym probabilistycznym simpleksie  $\mathcal{S}^{(2)}$  dla: (a) gęstych macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  ( $\epsilon = \frac{1}{2}$ ); (b) rzadkich macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  ( $\epsilon = 0$ ). Czarnymi kwadratami zaznaczono położenia wektorów  $\bar{\mathbf{a}}_j$

probabilistycznego simpleksu  $\mathcal{S}^{(2)}$  pokazano na rysunku 3.3(a) dla  $\epsilon = \frac{1}{2}$ . W tym eksperymencie,  $\text{cond}(\mathbf{A}) = 3,9$ , czyli macierz  $\mathbf{A}$  jest dobrze uwarunkowana. Na powierzchni tej zaznaczono również położenia wektorów  $\bar{\mathbf{a}}_j$  dla  $j = 1, 2, 3$ .

Z rysunku 3.3(a) wynika, że  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \subset \mathcal{C}(\mathfrak{X})$  oraz promienie ekstremalne zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{X})$  nie wyznaczają promieni ekstremalnych zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ . Dlatego żaden z wierzchołków otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\mathfrak{Y})$  nie pokrywa się z położeniem jakiegokolwiek wektora  $\bar{\mathbf{a}}_j$ . Nie dość, że istnieje nieskończenie wiele takich  $\mathcal{C}(\mathfrak{X}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , które zawierają wszystkie wektory  $\mathbf{y}_t$ , to również promienie ekstremalne zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  nie wyznaczają kolumn macierzy  $\mathbf{A}$ . Nieujemna faktoryzacja takich danych jest z pewnością niejednoznaczna.

Z przykładu 3.3 wynika, że jeśli  $\forall i, j : a_{ij} > 0$  i  $\forall j, t : x_{jt} > 0$ , to spełniony jest warunek (3.26), a zatem taka macierz  $\mathbf{Y}$  nie ma jednoznacznej nieujemnej faktoryzacji. Można wnioskować, że co najmniej jedna z macierzy  $\mathbf{A}$  lub  $\mathbf{X}$  musi być w pewnym stopniu rzadka, aby oczekiwać jednoznaczności takiej faktoryzacji. Aby wyjaśnić strukturę rzadkości macierzy  $\mathbf{X}$ , należy odpowiedzieć na pytanie, kiedy promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  wyznaczają wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}$ , a więc są też promieniami stożka simplicjalnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{X})$ .

**Definicja 3.8.** Macierz  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  jest wystarczająco rzadka, jeśli istnieje taka macierz diagonalna  $\tilde{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  o pełnym rzędzie ( $\text{rank}(\tilde{\mathbf{X}}) = J$ ), której wektory kolumnowe tworzą podzbiór wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{X}$ .

Łatwo zauważyć, że jeśli macierz  $\mathbf{X}$  po permutacji jej kolumn można przedstawić w postaci (3.25), to według definicji 3.8 macierz ta jest wystarczająco rzadka oraz  $\mathbf{Y} = \mathbf{AX} = [\mathbf{AX}_p \quad \mathbf{AD}_p^{(X)}]$ . Wynika z tego konkluzja, że wszystkie promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  są wyznaczone przez kolumny macierzy  $\mathbf{A}$ , czyli są również promieniami ekstremalnymi zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$ .

Jeśli wszystkie wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  określone są przez pewien podzbiór  $J$  liniowo niezależnych wektorów kolumnowych macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , to zadanie postawione we wniosku 3.3 sprowadza się do znalezienia wierzchołków wielokomórki wypukłej w podprzestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$ . Ponieważ dla przyjętych założeń, taka wielokomórka ma dokładnie  $J$  wierzchołków, czyli tak sformułowane zadanie może prowadzić do jednoznacznej faktoryzacji, pod pewnymi dodatkowymi warunkami. Aby jednak stwierdzić czy taka faktoryzacja jest jednoznaczna bez dodatkowych warunków, należy wykazać, że stożek  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  jest jedynym stożkiem simplicjalnym w  $\mathbb{R}_+^I$ , zawierającym wszystkie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$ . Alternatywnie, wystarczy udowodnić, że jeśli  $\exists \mathcal{C}(\mathfrak{B}) : \mathcal{C}(\mathfrak{A}) \subset \mathcal{C}(\mathfrak{B}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $\mathfrak{B} \neq \mathfrak{A}$ , to nieujemna faktoryzacja takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  jest niejednoznaczna. Analizując dane z przykładu 3.2 dla  $J = 2$ , można sformułować następujące twierdzenie:

**Lemat 3.1.** *Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 2}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{2 \times 1000}$  będą macierzami z przykładu 3.2 dla  $J = 2$ . Ponieważ wektory zbioru  $\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2\}$  nie leżą na brzegu simpleksu  $\mathcal{S}^{(2)}$ , więc nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{AX} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 1000}$  bez dodatkowych warunków jest niejednoznaczna.*

**Dowód 3.1.** *Na rysunku 3.2(a) pokazano, że  $\forall t : \bar{\mathbf{y}}_t \in \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ , gdzie  $\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2\}$ . Ponieważ  $\forall i, j : a_{ij} > 0$ , więc żaden punkt wskazywany przez  $\bar{\mathbf{a}}_j$  nie leży na granicy obszaru wyznaczonego przez  $\mathcal{S}^{(2)}$ . Niech  $\bar{\mathbf{v}} = \alpha \bar{\mathbf{a}}_1 + (1 - \alpha) \bar{\mathbf{a}}_2$  dla  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Jeśli  $\alpha \in [0, 1]$ , to  $\bar{\mathbf{v}} \in \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}) \subset \mathcal{S}^{(2)} \subset \mathbb{R}_+^3$ . Jeśli  $\alpha \in \left[ \max_{i, \xi_i < 0} \xi_i, 0 \right) \cup \left( 1, \min_{i, \xi_i > 0} \xi_i \right]$ , gdzie  $\xi_i = \frac{[\bar{\mathbf{a}}_2]_i}{[\bar{\mathbf{a}}_2 - \bar{\mathbf{a}}_1]_i}$  dla  $i = 1, \dots, I$ , to  $\bar{\mathbf{v}} \in \mathcal{S}^{(2)} \subset \mathbb{R}_+^3$ , ale  $\bar{\mathbf{v}} \notin \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ . Wynika stąd, że  $\exists \bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_2 : \bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_2 \notin \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  oraz  $\forall t : \bar{\mathbf{y}}_t = \beta \bar{\mathbf{v}}_1 + (1 - \beta) \bar{\mathbf{v}}_2$ , gdzie  $\beta \in (0, 1)$ . Przyjmując  $\bar{\mathfrak{B}} = \{\bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_2\}$ , z podanych rozważań otrzymuje się:  $\bar{\mathfrak{B}} \neq \bar{\mathfrak{A}}$  oraz  $\mathcal{C}(\bar{\mathfrak{A}}) \subset \mathcal{C}(\bar{\mathfrak{B}}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , a więc nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  z przykładu 3.2 dla  $J = 2$  nie jest jednoznaczna.*

Dowód 3.1 dotyczy jedynie prostego przypadku dla  $J = 2$ . Postępując analogicznie można wykazać dla  $J > 2$  słuszność tezy, że nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest generalnie niejednoznaczna, jeśli macierz  $\mathbf{A}$  jest całkowicie gęsta.

**Przykład 3.4.** Dla rzadkiej macierzy

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 & 0,2 \\ 0 & 0,5 & 0,3 \\ 0,5 & 0,4 & 0 \end{bmatrix}$$

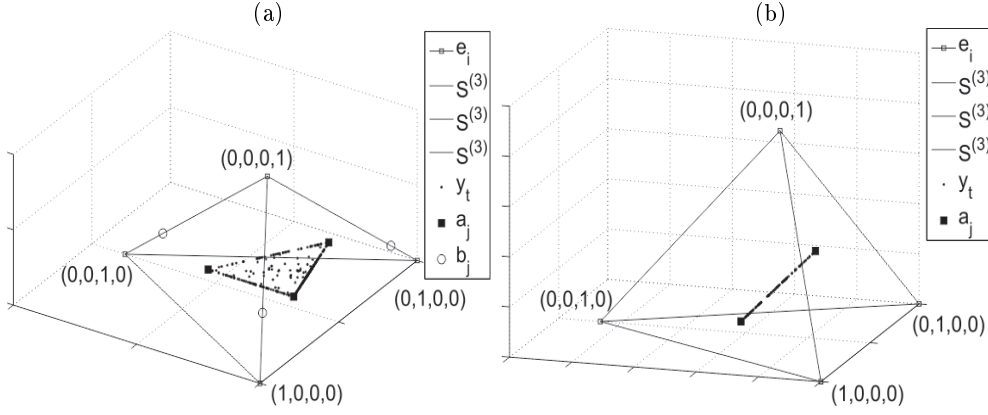
i rzadkiej macierzy  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 1000}$  (analizowanej w przykładzie 3.2) wyznaczono macierz  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 1000}$ , którą następnie przeskalowano do postaci  $\bar{\mathbf{Y}}$  zgodnie z (3.23). Rozkład punktów generowanych przez wektory  $\bar{\mathbf{y}}_t$  na powierzchni  $\mathcal{S}^{(2)}$  pokazano na rysunku 3.3(b). Ponieważ  $\forall j, \exists m : \bar{a}_{mj} = 0$  oraz wektory zbioru  $\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3\}$  są liniowo niezależne, stąd każdy wierzchołek otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  ma jeden punkt wspólny z brzegiem obszaru  $\mathcal{S}^{(2)}$ . Wynika z tego wniosek, że nie istnieje taki stożek simplicjalny  $\mathcal{C}(\mathfrak{B})$ , który spełniałby warunek:  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}) \subset \mathcal{C}(\mathfrak{B}) \subset \mathbb{R}_+^I$ . Nieujemna faktoryzacja takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  jest zatem jednoznaczna, z pominięciem trywialnego przypadku, gdy  $\mathbf{A} = \mathbf{I}$  oraz  $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ , gdzie  $\mathbf{I}$  jest macierzą jednostkową (również z permutacją kolumn). Przypadek trywialny może wystąpić, ponieważ wszystkie wektory kolumnowe z  $\mathbf{Y}$  zawarte są w  $\mathbb{R}_+^I$ .

Wizualizacja danych w przestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$  dla  $I > 3$  nie jest łatwa. Jednak dla  $I = 4$  i  $J \leq 4$  można wizualizować rozkład elementów zbiorów  $\bar{\mathfrak{A}}$  i  $\bar{\mathfrak{Y}}$ , ponieważ simpleks probabilistyczny  $\mathcal{S}^{(3)}$  jest czworościanem foremny. Rozważania na temat jednoznaczności nieujemnej faktoryzacji dla  $I = 4$  i  $J = 3$  przedstawiono w przykładzie 3.5.

**Przykład 3.5.** Niech  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{3 \times 1000}$  będzie macierzą rzadką, generowaną według zasady z przykładu 3.2. Dla

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0,3 & 0,5 \\ 0,6 & 0 & 0,2 \\ 0,2 & 0,4 & 0 \\ 0,2 & 0,3 & 0,3 \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

wyznaczono zbiór elementów  $\mathfrak{Y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T\}$ , które następnie przeskalowano, otrzymując zbiór  $\bar{\mathfrak{Y}}$ . Macierz  $\mathbf{X}$  dla  $T = 1000$  jest z bardzo dużym prawdopodobieństwem wystarczająco rzadka (według definicji 3.8) i można stwierdzić, że promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  są elementami zbioru  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ . Ponieważ  $\text{rank}(\mathbf{A}) = 3$  i  $\forall j, \exists m : a_{mj} = 0$ , więc elementy zbioru  $\bar{\mathfrak{Y}}$  są współpłaszczyznowe oraz każdy wierzchołek otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  ma punkt wspólny z jedną ze ścian sympleksu  $\mathcal{S}^{(3)}$ . Sytuację tę zilustrowano na rysunku 3.4(a). Wierzchołki simpleksu  $\mathcal{S}^{(3)}$  i otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  zaznaczono,



Rys. 3.4. Rozkład punktów generowanych przez wektory  $\bar{\mathbf{y}}_t$  w trójwymiarowym probabilistycznym simpleksie  $\mathcal{S}^{(3)}$  dla: (a)  $J = 3$ ; (b)  $J = 2$ . Czarnymi kwadratami zaznaczono położenia wektorów  $\bar{\mathbf{a}}_j$ . Czarne okręgi (dla  $I = 3$ ) pokazują położenia wektorów  $\bar{\mathbf{b}}_j$ , które wyznaczają nieujemną faktoryzację macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$

odpowiednio, niewypełnionymi i wypełnionymi kwadratami. Wszystkie elementy zbioru  $\bar{\mathfrak{Y}}$  (zaznaczone czarnymi punktami) zawarte są w  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ . Płaszczyzna przechodząca przez punkty zbioru  $\bar{\mathfrak{Y}}$  przecina krawędzie simpleksu  $\mathcal{S}^{(3)}$  w punktach zbioru  $\mathfrak{B} = \{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3\} \in \mathcal{S}^{(3)}$ , które są różne od punktów zbioru  $\bar{\mathfrak{A}}$ . Wynika z tego wniosek, że  $\exists \mathcal{C}(\mathfrak{B}) : \mathcal{C}(\bar{\mathfrak{A}}) \subset \mathcal{C}(\mathfrak{B}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $\mathfrak{B} \neq \bar{\mathfrak{A}}$ , a zatem nieujemna faktoryzacja takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  jest niejednoznaczna. Macierz  $\mathbf{B}$  utworzona z elementów zbioru  $\mathfrak{B}$  jest następująca:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0,66 & 0 & 0 \\ 0 & 0,825 & 0 \\ 0 & 0 & 0,7333 \\ 0,34 & 0,175 & 0,2667 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Ponieważ  $\forall j : \sum_{i=1}^4 a_{ij} = \sum_{i=1}^4 b_{ij} = 1$ , więc niejednoznaczność ta nie jest powodowana niejednoznacznością skalowania. Łatwo sprawdzić, że wszystkie elementy macierzy  $\mathbf{X}_B = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{Y}$  są nieujemne oraz  $\mathbf{X}_B \neq \mathbf{X}$ , gdzie  $\mathbf{B}^\dagger$  jest macierzą pseudoodwrotną do  $\mathbf{B}$ .

Z przykładu 3.4 widać, że nieujemna faktoryzacja macierzy dla  $I = 3$  jest jednoznaczna, jeśli zbiór  $\bar{\mathfrak{A}}$  składa się z wektorów niezależnych i wszystkie wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  mają punkty wspólne z brzegiem simpleksu probabilistycznego  $\mathcal{S}^{(2)}$ . Z kolei, przykład 3.5 dowodzi, że dla  $I = 4$  warunek styczności

otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  z brzegiem obszaru wyznaczonego poprzez  $\mathcal{S}^{(3)}$  nie jest wystarczający, aby taka faktoryzacja była jednoznaczna. Z tego wniosek, że wielokomórka tworzona poprzez  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  musi mieć bardzo specyficzne „zaczepienie” w simpleksie probabilistycznym, aby oczekiwać jednoznacznej nieujemnej faktoryzacji. Przykład 3.6 ilustruje przypadek jednoznacznej faktoryzacji dla  $I = 4$  i  $J = 2$ .

**Przykład 3.6.** Niech  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{2 \times 1000}$  będzie rzadką macierzą, generowaną według zasady z przykładu 3.2 oraz niech macierz  $\mathbf{A}$  będzie dana następująco:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0,2 & 0,8 \\ 0,7 & 0,3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.29)$$

Rozkład punktów  $\{\mathbf{y}_t\}$  macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$ , zrzutowanych na  $\mathcal{S}^{(3)}$ , pokazano na rysunku 3.4(b). Punkty te tworzą otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$  i są współliniowe, ponieważ  $\text{rank}(\mathbf{A}) = 2$ . Wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$  stykają się ze ścianami simpleksu  $\mathcal{S}^{(3)}$ , w tym przypadku nie istnieją inne punkty współliniowe zawarte w  $\mathcal{S}^{(3)}$  i nie zawarte w  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$ . Dlatego faktoryzacja takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  musi być jednoznaczna.

Faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  estymowane są naprzemiennie według algorytmu 2. Jeśli więc faktoryzacja  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$  przy danym rzędzie  $J$  jest jednoznaczna, to również jednoznaczna będzie faktoryzacja  $\mathbf{Y}^T = \mathbf{X}^T \mathbf{A}^T$ , przy tym samym rzędzie  $J$ . Ta dualna zasada faktoryzacji przekłada się też na interpretację geometryczną faktoryzacji. Warunek konieczny jednoznaczności nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$  zakłada, że promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$  są elementami zbioru  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_J\}$ . Z tego wniosek, że promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y}^{\mathfrak{x}})$ , gdzie  $\mathfrak{Y}^{\mathfrak{x}} = \{\mathbf{y}_1^T, \mathbf{y}_2^T, \dots, \mathbf{y}_I^T\}$  powinny być również elementami zbioru  $\mathfrak{X}^{\mathfrak{x}} = \{\mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T, \dots, \mathbf{x}_J^T\}$ , gdzie  $\mathbf{x}_j^T$  jest transponowanym  $j$ -tym wektorem wierszowym macierzy  $\mathbf{X}$ .

Analogicznie do modelu (3.25), jeśli macierz  $\mathbf{A}^T$ , w wyniku permutacji jej kolumn, można przekształcić do postaci:

$$\mathbf{A}^T = [\mathbf{A}_p^T \quad \mathbf{D}_p^{(A)}] \in \mathbb{R}_+^{J \times I}, \quad (3.30)$$

gdzie  $\mathbf{A}_p \in \mathbb{R}^{(I-J) \times J}$  jest dowolną macierzą nieujemną (lub dodatnią), a  $\mathbf{D}^{(A)} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  jest macierzą diagonalną pełnego rzędu, wówczas

$$\mathbf{Y}^T = \mathbf{X}^T \mathbf{A}^T = [\mathbf{X}^T \mathbf{A}_p^T \quad \mathbf{X}^T \mathbf{D}^{(A)}].$$

Wszystkie zatem promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q}^{\mathfrak{X}})$  są wyznaczone przez wiersze macierzy  $\mathbf{X}$ , czyli są również promieniami ekstremalnymi zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{X}^{\mathfrak{X}})$ .

**Wniosek 3.4.** Jeśli macierz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  w wyniku permutacji wierszy sprowadza się do postaci (3.30), jak i macierz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  po permutacji kolumn ma postać (3.25), to nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  dla zadanego rzędu faktoryzacji  $J$  jest jednoznaczna.

Stosując miary rzadkości wyrażone przez (3.14) i (3.15), dla macierzy  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  postaci (3.25) grupowa rzadkość  $(J-1)$ -stopnia wynosi:  $\text{SG}^{(J-1)}(\mathbf{X}) = \frac{J}{T}$ , gdy  $\mathbf{X}_p$  jest macierzą całkowicie gęstą. Z kolei, indywidualną  $(J-1)$ -stopnia rzadkość macierzy  $\mathbf{X}$  dla jej  $j$ -tego wiersza można wyrazić jako:  $\text{SI}_j^{(J-1)}(\mathbf{X}) = \frac{J-1}{J}$ .

**Wniosek 3.5.** Jeśli  $\text{SG}^{(J-1)}(\mathbf{A}^T) \geq \frac{J}{T}$  i  $\forall j : \text{SI}_j^{(J-1)}(\mathbf{A}^T) \geq \frac{J-1}{J}$ , a także  $\text{SG}^{(J-1)}(\mathbf{X}) \geq \frac{J}{T}$  i  $\forall j : \text{SI}_j^{(J-1)}(\mathbf{X}) \geq \frac{J-1}{J}$ , to nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  dla zadanego rzędu faktoryzacji  $J$  jest jednoznaczna.

Macierz  $\mathbf{X}$  w przykładzie 3.6 sprowadza się do postaci (3.25), macierz (3.29) zaś można wyrazić przez (3.30), a zatem wniosek 3.4 potwierdza jednoznaczność nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$  z tego przykładu. Stosując analogiczne podejście do macierzy  $\mathbf{Y}$  z przykładu 3.5, można łatwo zauważyć, że macierzy (3.27) nie można sprowadzić do postaci (3.30) przez permutacje jej wierszy. Pomimo spełnienia warunku (3.25), z wniosku 3.4 wynika, że nieujemna faktoryzacja takiej macierzy  $\mathbf{Y}$  może nie być jednoznaczna.

Należy zauważyć, że implikacje odwrotne niż występujące we wnioskach 3.4 i 3.5 nie zawsze są prawdziwe, potwierdza to przykład 3.4. Macierzy  $\mathbf{A}$  z tego przykładu nie można wyrazić przez (3.30), a mimo to nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest jednoznaczna. Wnioski 3.4 i 3.5 dotyczą jedynie pewnej klasy macierzy  $\mathbf{Y}$ . Można więc stwierdzić, że zbiór wszystkich macierzy, które mają jednoznaczną nieujemną faktoryzację zawiera macierze, które spełniają założenia twierdzeń we wnioskach 3.4 i 3.5.

Kolejne kryteria jednoznaczności modelu NMF podane zostały przez Laurberga i in. [253].

**Twierdzenie 3.1.** *Jeśli  $\text{rank}(\mathbf{Y}) = J$ , nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest jednoznaczna, gdy nieujemny ortant  $\mathbb{R}_+^J$  jest jedynym stożkiem simplicjalnym, generowanym przez  $J$  promieni ekstremalnych, który spełnia warunek  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}}) \subseteq$*

$\mathbb{R}_+^J \subseteq \mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$ , gdzie  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$  jest stożkiem dualnym,  $\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}} = \{\underline{\mathbf{a}}_1^T, \dots, \underline{\mathbf{a}}_T^T\}$  oraz  $\mathfrak{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T\}$ .

Dowód twierdzenia 3.1 może być przeprowadzony na podstawie dowodu przedstawionego przez Thomasa [428] dla problemu Bermiana [16]. Korzystając z literatury [253], twierdzenie to można zilustrować następującym przykładem:

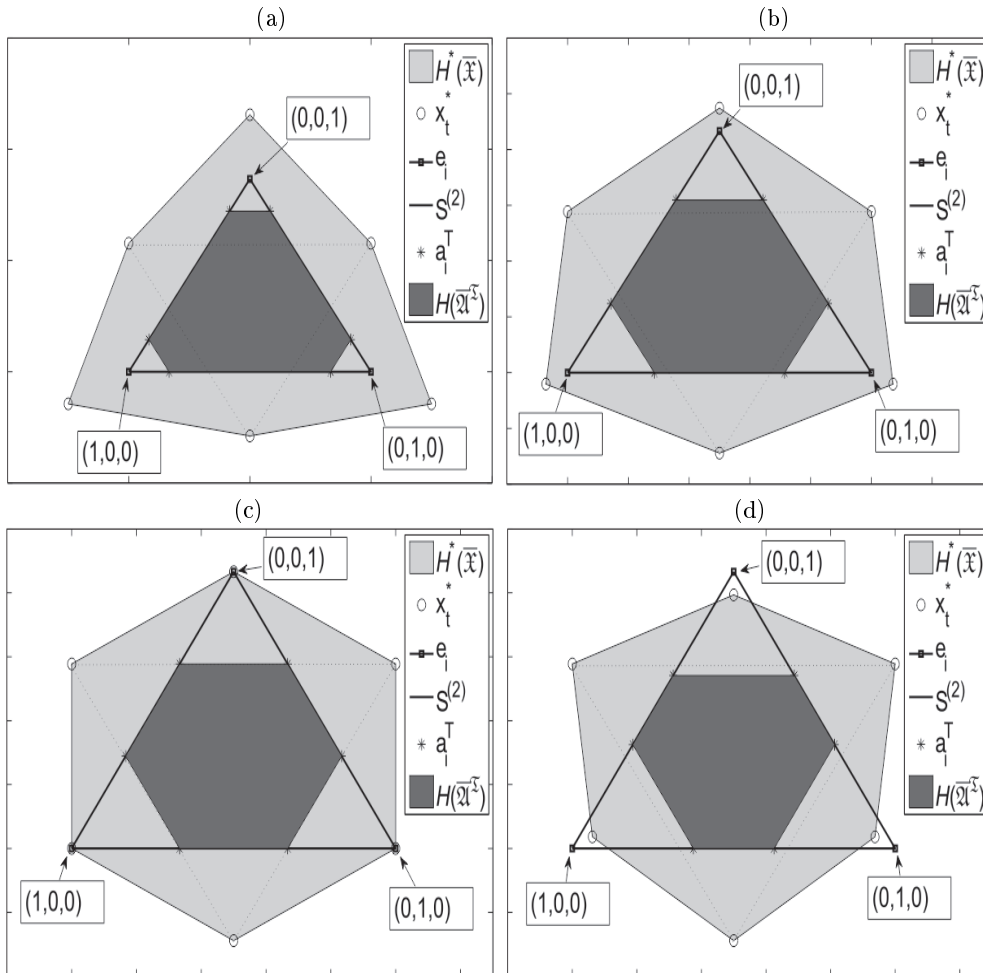
**Przykład 3.7.** Niech

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \xi & 1 & 1 & \xi & 0 & 0 \\ 1 & \xi & 0 & 0 & \xi & 1 \\ 0 & 0 & \xi & 1 & 1 & \xi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{X}^T, \quad (3.31)$$

gdzie  $0 < \xi < 1$ . Wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{X}$  wyznaczają promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}})$ . Stożek dualny  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$  wyznaczono na podstawie wskazówek podanych w [216]. Przecinając te stożki płaszczyzną tnącą  $H : x_1 + x_2 + x_3 = 1$  w  $\mathbb{R}^3$  uzyskano otoczki wypukłe:  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}})$  i  $\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$ . Punkty o współrzędnych  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$  i  $(0, 0, 1)$  są wierzchołkami simpleksu probabilistycznego  $\mathcal{S}^{(2)}$ . Na rysunku 3.5 zaznaczono zbiory  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}})$ ,  $\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$  oraz  $\mathcal{S}^{(2)}$  (trójkąt równoboczny) dla (a)  $\xi = 0, 2$ ; (b)  $\xi = 0, 4$ ; (c)  $\xi = 0, 5$ ; (d)  $\xi = 0, 6$ .

Przykład 3.7 pokazuje, że dla  $\xi = 0, 2$  jest spełniony warunek  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}) \subset \mathcal{S}^{(2)} \subset \mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$ . Dlatego też  $\mathbb{R}_+^J$  jest jedynym stożkiem simplicjalnym spełniającym warunek  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}}) \subseteq \mathbb{R}_+^J \subseteq \mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$ , a więc dla tego przypadku macierz  $\mathbf{Y}$  utworzona z macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  podanych w (3.31) ma jednoznaczną nieujemną faktoryzację. Do podobnych wniosków można dojść, analizując przypadek  $\xi = 0, 4$ . Gdy  $\xi = 0, 5$ , można łatwo zauważyć, że  $\mathcal{S}^{(2)}$  nie jest jedynym wielokątem, który spełnia warunek  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}) \subset \mathcal{H}(\bar{\mathcal{B}}) \subset \mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$  dla  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{B}}) = \mathcal{S}^{(2)}$ . Linia przerywaną zaznaczono wielokąt, który zawarty jest w  $\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$  i zawiera  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}})$ . Implikuje to wniosek, że dla  $\xi = 0, 5$  nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest niejednoznaczna. Dla  $\xi = 0, 6$ ,  $\mathcal{S}^{(2)} \not\subset \mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}})$ , a zatem odpowiednia macierz  $\mathbf{Y}$  nie ma jednoznacznej nieujemnej faktoryzacji.

Niech  $P(\mathcal{B})$  oznacza pole wielokąta  $\mathcal{B}$ . Z rysunku 3.5 wynika, że dla  $\xi \geq 0, 5$ :  $P(\mathcal{S}^{(2)}) \geq \frac{3}{2}P(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}))$  i  $P(\mathcal{S}^{(2)}) \geq \frac{1}{2}P(\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}}))$ . Dla  $\xi < 0, 5$ :  $P(\mathcal{S}^{(2)}) < \frac{3}{2}P(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}))$  i  $P(\mathcal{S}^{(2)}) < \frac{1}{2}P(\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}}))$ . Po uwzględnieniu wniosku 3.4 oraz podanych rozważań można stwierdzić, że dla  $\xi = 0$ ,  $P(\mathcal{S}^{(2)}) = P(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}))$ . Tak więc w przykładzie 3.7, nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest jednoznaczna, jeśli  $P(\mathcal{S}^{(2)}) = \nu P(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}^{\mathfrak{X}}))$  dla  $1 \leq \nu < \frac{3}{2}$  i  $P(\mathcal{S}^{(2)}) = \zeta P(\mathcal{H}^*(\bar{\mathfrak{X}}))$  dla  $\zeta < \frac{1}{2}$ .



Rys. 3.5. Przekroje odpowiednich zbiorów wypukłych względem płaszczyzny tnącej  $H : x_1 + x_2 + x_3 = 1$  w  $\mathbb{R}^3$ , przechodzącej przez punkty o współrzędnych:  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$  i  $(0, 0, 1)$ . Zbiory generowane są macierzą (3.31) dla: (a)  $\xi = 0, 2$ ; (b)  $\xi = 0, 4$ ; (c)  $\xi = 0, 5$ ; (d)  $\xi = 0, 6$ . Trójkąt równoboczny zaznaczony linią pogrubioną oznacza simpleks probabilistyczny  $S^{(2)}$ . Położenia wektorów wierszowych  $\mathbf{a}_i$  zaznaczono punktami \*. Punkty te na płaszczyźnie  $H$  tworzą wielokąt wypukły  $\mathcal{H}(\bar{\mathbf{x}}^\xi)$  (obszar ciemnoszary). Położenia promieni ekstremalnych stożka dualnego  $C^*(\bar{\mathbf{x}})$  zaznaczono symbolami  $\circ$ . Wielokąt zaznaczony kolorem jasnoszarym ilustruje zbiór  $\mathcal{H}^*(\bar{\mathbf{x}})$ , który jest przekrojem stożka  $C^*(\bar{\mathbf{x}})$  płaszczyzną tnącą  $H$



Według wniosków 3.4 i 3.5, macierz  $\mathbf{Y}$  z przykładu 3.7 ma jednoznaczną nieujemną faktoryzację tylko dla  $\xi = 0$ . Dla  $\xi > 0$  macierz  $\mathbf{Y}$  ma postać:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \xi^2 + 1 & 2\xi & \xi & \xi^2 & \xi & 1 \\ 2\xi & \xi^2 + 1 & 1 & \xi & \xi^2 & \xi \\ \xi & 1 & \xi^2 + 1 & 2\xi & \xi & \xi^2 \\ \xi^2 & \xi & 2\xi & \xi^2 + 1 & 1 & \xi \\ \xi & \xi^2 & \xi & 1 & \xi^2 + 1 & 2\xi \\ 1 & \xi & \xi^2 & \xi & 2\xi & \xi^2 + 1 \end{bmatrix},$$

a więc  $\forall i, t : y_{it} > 0$ . Kryterium (3.26) również nie sugeruje jednoznaczności nieujemnej faktoryzacji dla jakiegokolwiek  $\xi > 0$ . Twierdzenie 3.1 określa zatem jednoznaczność nieujemnej faktoryzacji pod względem szerszej klasy macierzy faktoryzowalnych. Jednak, warunki jednoznaczności podane w twierdzeniu 3.1 nie są zawsze łatwe do zbadania. Gdy  $J > 3$ , zbadanie warunku  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}}) \subseteq \mathbb{R}_+^J \subseteq \mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$  jest zadaniem trudnym i dlatego kryteria określone we wnioskach 3.4 i 3.5 mogą mieć większe znaczenie praktyczne.

Laurberg i in. [251, 253] podali również inne twierdzenia dotyczące jednoznaczności nieujemnej faktoryzacji macierzy. Jedno z nich zakłada, że jeśli zbiór wektorów kolumnowych pary macierzy  $[\mathbf{A}^T, \mathbf{X}]$  jest wystarczająco rozproszony oraz silnie granicznie zamknięty, to nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$  jest jednoznaczna. Zbiór nieujemnych wektorów  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T\} \in \mathbb{R}_+^J$  jest wystarczająco rozproszony, gdy  $\forall t : \mathbf{x}_t > \gamma \sum_{p \neq t} \mathbf{x}_p$  dla  $\gamma > 0$ . Natomiast zbiór ten jest granicznie zamknięty, jeśli  $\forall t \neq p : \mathbf{x}_t < \gamma \mathbf{x}_p$  dla  $\gamma > 0$ . Silna graniczna zamkniętość zbioru implikuje jego graniczną zamkniętość oraz dodatkowo spełnienie warunku ograniczonego wskaźnika uwarunkowania pewnej podmacierzy, utworzonej ze zbioru wektorów analizowanego zbioru. Szczegóły definicji silnej granicznej zamkniętości zbioru można odnaleźć w literaturze [252, 253]. W przykładzie 3.7 zbiór wektorów kolumnowych pary macierzy  $[\mathbf{A}^T, \mathbf{X}]$  jest wystarczająco rozproszony oraz granicznie zamknięty dla  $\xi \geq 0$ . Jeśli dodatkowo  $\xi < \frac{1}{2}$ , zbiór ten spełnia warunki silnej granicznej zamkniętości, a więc nieujemna faktoryzacja odpowiedniej macierzy  $\mathbf{Y}$  jest jednoznaczna. W ogólnym przypadku analiza spełnienia założeń tego twierdzenia nie jest łatwa, dlatego też podobnie jak w przypadku twierdzenia 3.1 jego użyteczność praktyczna wydaje się być ograniczona.

Rozważania dotyczące niejednoznaczności czynników w modelu NMF można odnaleźć również w innych pracach. Gillis [145] analizował bardziej praktyczne

warunki badania jednoznaczności faktorów. Wynikają one z badań przedstawionych przez Moussaoui, Brie i Idiera [321]. Warunki te zawarto w twierdzeniu 3.2.

**Twierdzenie 3.2.** *Niech  $\mathcal{I}_j = \{i : a_{ij} \neq 0\}$  oraz  $\mathcal{T}_j = \{t : x_{jt} \neq 0\}$ . Jeśli nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest jednoznaczna, to dla  $j_1, j_2 \in \{1, \dots, J\}$ ,  $j_1 \neq j_2$ , aby  $\mathcal{I}_{j_1} \subseteq \mathcal{I}_{j_2}$  oraz  $\mathcal{T}_{j_1} \subseteq \mathcal{T}_{j_2}$ .*

Dowód twierdzenia 3.2 można odnaleźć w pracy [145], a także w literaturze [196, 197]. Z twierdzenia tego wynika, że w każdej kolumnie macierzy  $\mathbf{A}$  oraz w każdym wierszu macierzy  $\mathbf{X}$  powinien być co najmniej jeden element o zerowej wartości. Są to tzw. warunki konieczne do istnienia jednoznacznej nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$ .

Huang, Sidiropoulos i Swami [196, 197] zaproponowali także warunki wystarczające, które rozszerzają warunki podane w twierdzeniu 3.1. Niech

$$\mathcal{Q} = \left\{ \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^J : \boldsymbol{\xi}^T \mathbf{1}_J \geq \sqrt{J-1} \|\boldsymbol{\xi}\|_2 \right\} \quad (3.32)$$

będzie stożkiem simplicjalnym drugiego stopnia, a

$$\mathcal{Q}^* = \left\{ \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^J : \boldsymbol{\xi}^T \mathbf{1}_J = \|\boldsymbol{\xi}\|_2 \right\} \quad (3.33)$$

dualnym stożkiem drugiego stopnia. Łatwo zauważyć, że  $\mathcal{Q} \subset \mathcal{Q}^*$  dla  $J > 2$  oraz wersory  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_J\}$  są promieniami ekstremalnymi stożka  $\mathcal{Q}^*$ , ponieważ  $\forall j : \mathbf{e}_j^T \mathbf{1}_J = \|\mathbf{e}_j\|_2$ . Warunki wystarczające są podane w twierdzeniu 3.3.

**Twierdzenie 3.3.** *Jeśli macierz  $\mathbf{A}$  spełnia warunki:*

$$\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}}) \quad \text{oraz} \quad \mathcal{Q}^* \cap \mathcal{C}^*(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}}) = \{\xi \mathbf{e}_j \mid \xi \geq 0, j = 1, \dots, J\}, \quad (3.34)$$

*a macierz  $\mathbf{X}$  spełnia warunki:*

$$\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{X}) \quad \text{oraz} \quad \mathcal{Q}^* \cap \mathcal{C}^*(\mathfrak{X}) = \{\xi \mathbf{e}_j \mid \xi \geq 0, j = 1, \dots, J\}, \quad (3.35)$$

*gdzie  $\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}} = \{\mathbf{a}_1^T, \dots, \mathbf{a}_J^T\} \subset \mathbb{R}_+^J$  oraz  $\mathfrak{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T\} \subset \mathbb{R}_+^J$ , to faktoryzacja  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$  przy zadanym rzędzie faktoryzacji  $J$  jest jednoznaczna.*

Dowód twierdzenia 3.3 przedstawiono w pracy [197]. Wynika z tego, że wszystkie promienie ekstremalne stożków  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}})$  oraz  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$  powinny być zawarte w  $\mathcal{Q}^*$ . Jednak tylko wersory  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_J\}$ , które są również promieniami ekstremalnymi stożków  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{A}^{\mathfrak{X}})$  i  $\mathcal{C}^*(\mathfrak{X})$ , muszą być na brzegu obszaru  $\mathcal{Q}^*$ , żeby faktoryzacja mogła być jednoznaczna. Aby jednak jednoznacznie stwierdzić, czy dane faktory

$\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są jednoznaczne, konieczne jest także sprawdzenie warunków  $\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{X})$  i  $\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{X})$ , co jest zadaniem NP-kompletnym [197, 441] dla dużych wymiarów. Twierdzenie to nadal ma małe znaczenie praktyczne, chociaż może mieć istotny wpływ na rozwój badań podstawowych.

Podane rozważania na temat jednoznaczności faktoryzacji dotyczą tylko faktoryzacji dokładnej, tzn. opisanej modelem (1.1). Model ten ma istotne znaczenie w rozważaniach teoretycznych, zwłaszcza w celu wyjaśnienia podstaw metody NMF. Jak już wspomniano, w praktyce najczęściej występuje model faktoryzacji przybliżonej (1.3), gdzie rząd faktoryzacji nie jest łatwy do wyznaczenia. W takim przypadku znalezienie jednoznacznych nieujemnych czynników jest prawie niemożliwe. Pomimo to stosowanie metody NMF do problemów niefaktoryzowalnych ma nadal sens, jeśli otrzymywane czynniki zawierają istotne cechy i mają fizyczną interpretację. Co więcej, wynik nieujemnej faktoryzacji macierzy niefaktoryzowalnej jest często powtarzalny z bardzo dużym prawdopodobieństwem, jeśli stosuje się dodatkowe założenia i pewną klasę metod aktualizacji czynników. Kolejną, bardzo istotną zaletą metody NMF jest możliwość uzyskiwania czynników o określonych cechach, np. rzadkich reprezentacjach cząstkowych. W wielu zastosowaniach ważniejsze są cechy czynników i ich potencjał do reprezentacji danych niż ich jednoznaczność.

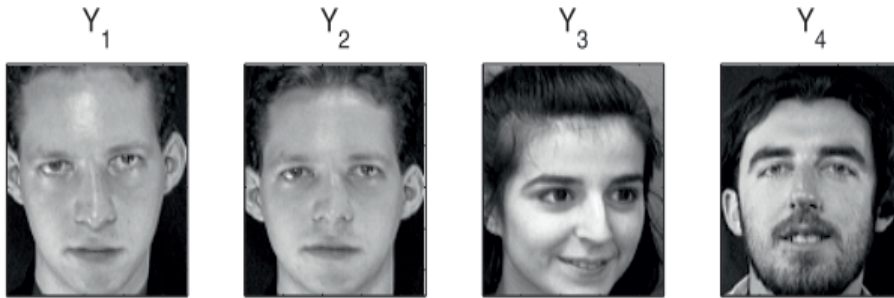
Problem reprezentacji danych dla problemu niefaktoryzowalnego przedstawiono w przykładzie 3.8.

**Przykład 3.8.** Niech

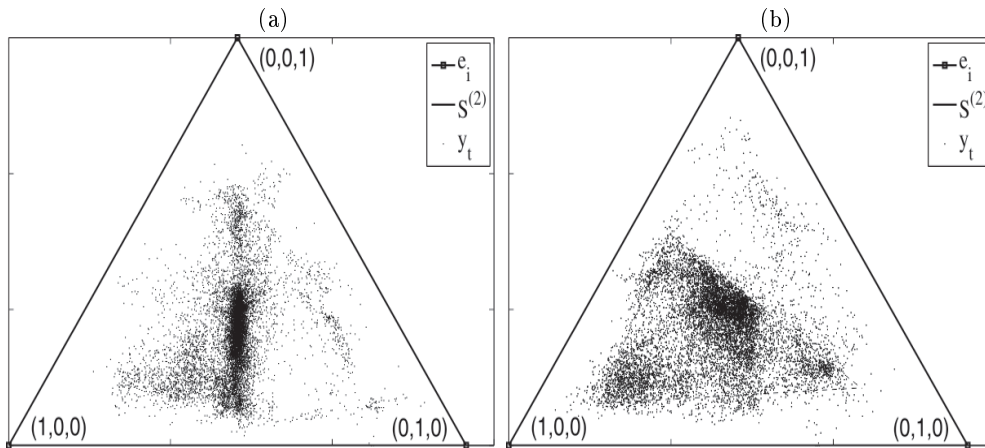
$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \mathbf{y}_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_+^{I \times T},$$

gdzie  $\mathbf{y}_i = \text{vec}(\mathbf{Y}_i)^T$  jest zwektoryzowanym  $i$ -tym obrazem  $\mathbf{Y}_i$  z bazy zdjęć twarzy ORL. Baza ta została opisana w przykładzie 1.2. Do analizy wybrano zdjęcia pokazane na rysunku 3.6. Obrazy  $\mathbf{Y}_1$  i  $\mathbf{Y}_2$  przedstawiają różne ujęcia twarzy tej samej osoby, a więc należą do tej samej klasy problemu klasyfikacji obiektów. Obrazy  $\mathbf{Y}_2$  i  $\mathbf{Y}_3$  pochodzą z różnych klas. Na rysunku 3.7(a) przedstawiono rozkład punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  generowanych macierzą  $\mathbf{Y}$  na simpleksie probabilistycznym  $\mathcal{S}^{(2)}$ , gdzie  $\mathbf{y}_1 = \text{vec}(\mathbf{Y}_1)^T$ ,  $\mathbf{y}_2 = \text{vec}(\mathbf{Y}_2)^T$  i  $\mathbf{y}_3 = \text{vec}(\mathbf{Y}_3)^T$ . Na rysunku 3.7(b) pokazano podobny rozkład punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$ , ale wektorami wierszowymi macierzy  $\mathbf{Y}$  są:  $\mathbf{y}_1 = \text{vec}(\mathbf{Y}_1)^T$ ,  $\mathbf{y}_2 = \text{vec}(\mathbf{Y}_3)^T$  i  $\mathbf{y}_3 = \text{vec}(\mathbf{Y}_4)^T$ .

Z rysunku 3.7(a) wynika, że pomimo rozproszenia punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  prawie na całej powierzchni obszaru  $\mathcal{S}^{(2)}$  dość łatwo można wskazać obszar o bardzo dużej kon-



Rys. 3.6. Wybrane zdjęcia z bazy ORL:  $\mathbf{Y}_1$  – klasa 1,  $\mathbf{Y}_2$  – klasa 1,  $\mathbf{Y}_3$  – klasa 2,  $\mathbf{Y}_4$  – klasa 3



Rys. 3.7. Rozkład punktów generowanych przez wektory  $\bar{\mathbf{y}}_t$  na dwuwymiarowym probabilistycznym simpleksie  $\mathcal{S}^{(2)}$  dla trzech zwektoryzowanych zdjęć z bazy ORL ( $I = 3$ ) i liczbie klas: (a)  $J = 2$  (dwie klasy); (b)  $J = 3$  (trzy klasy)

centracji punktów pomiarowych. Jest to obszar przypominający odcinek, a zatem rozkład znaczącej liczby punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  można modelować otoczką wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$ , gdzie  $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2\}$  są wektorami niezależnymi. Wniosek ten jest uzasadniony, ponieważ obrazy  $\mathbf{Y}_1$  i  $\mathbf{Y}_2$  należą do tej samej klasy, a  $\mathbf{Y}_3$  reprezentuje odmienną klasę. Modelując więc rozkład punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  linią regresyjną, można wyznaczyć położenia punktów  $\{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2\}$  na obszarze  $\mathcal{S}^{(2)}$ , stosując np. dopasowanie według kryterium najmniejszych kwadratów. Łatwo jednak zauważyć, że nawet gdyby punkty  $\{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2\}$  znajdowały się na brzegu simpleksu  $\mathcal{S}^{(2)}$ , to  $\exists t : \bar{\mathbf{y}}_t \notin \mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$ , a zatem macierz  $\mathbf{X} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{Y}$  zawierałaby elementy ujemne, gdzie  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2] \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ . Do podobnych wniosków można dojść, opisując rozkład punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  otoczką

wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$  dla zbioru niezależnych wektorów  $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3\}$ , przy czym w tym przypadku  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$  może zawierać znacznie więcej wektorów  $\bar{\mathbf{y}}_t$  niż dla  $J = 2$ . Prawdopodobnie można byłoby znaleźć takie  $J > 3$ , aby  $\forall t : \bar{\mathbf{y}}_t \in \mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}}) \subset \mathcal{S}^{(2)}$  dla  $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J\}$ , ale takie modelowanie nie prowadziło do redukcji wymiarowości. Z analizy rysunku 3.7(b) wynika, że rozkład punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$  może być aproksymowany różnymi otoczkami wypukłymi  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$  dla  $J = 3$ , chociaż żaden ze zbiorów  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}}) \subset \mathcal{S}^{(2)}$  nie będzie obejmował wszystkich punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$ . Możliwe jest jednak wybranie takich dodatnich wektorów  $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \bar{\mathbf{a}}_2, \bar{\mathbf{a}}_3\}$ , dla których wiele punktów  $\bar{\mathbf{y}}_t$  znajdzie się na brzegu otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{A}})$ , co prowadzi do znacznej rzadkości macierzy  $\mathbf{X}$ . Wektory wierszowe macierzy  $\mathbf{X}$  mogą zatem mieć cechy rzadkich wektorów reprezentacji danych, pomimo że nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest niejednoznaczna i może być tylko w większym lub mniejszym stopniu aproksymowana.

### 3.2. Cechy czynników

W przypadku gdy nieujemna faktoryzacja macierzy jest niejednoznaczna, wybór odpowiednich czynników spośród zbioru możliwych nieujemnych czynników może być wspomagany dodatkowymi informacjami. Może to być, tzw. informacja *a priori* o charakterze poszukiwanych czynników. Taką informację można włączyć do procesu aktualizacji czynników, stosując różne sposoby, takie jak filtracja czynników podczas ich aktualizacji, transformacja lub rzutowanie na podprzestrzeń o charakterystycznych właściwościach lub poprzez wnioskowanie statystyczne. To ostatnie podejście jest najczęściej stosowane w zastosowaniach praktycznych i zwykle realizowane jest przez twierdzenie Bayesa:

$$p(\mathbf{A}, \mathbf{X} | \mathbf{Y}) = \frac{p(\mathbf{Y} | \mathbf{A}, \mathbf{X})p(\mathbf{A}, \mathbf{X})}{p(\mathbf{Y})}, \quad (3.36)$$

gdzie  $p(\mathbf{A}, \mathbf{X} | \mathbf{Y})$  – rozkład gęstości prawdopodobieństwa *a posteriori*,  $p(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  – rozkład gęstości prawdopodobieństwa *a priori* dla zmiennych  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ ,  $p(\mathbf{Y} | \mathbf{A}, \mathbf{X})$  – łączny rozkład gęstości prawdopodobieństwa obserwacji  $\mathbf{Y} = [y_{it}]$  dla danych czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , natomiast  $p(\mathbf{Y})$  – rozkład brzegowy dla  $\mathbf{Y}$ .

Gdy zmienne losowe  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są statystycznie niezależne:  $p(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = p_A(\mathbf{A})p_X(\mathbf{X})$ . Rozkłady *a priori*  $p_A(\mathbf{A})$  i  $p_X(\mathbf{X})$  w ogólnym przypadku mają formę rozkładów Gibbsa:

$$p_A(\mathbf{A}) = \frac{1}{Z_A} \exp \{-\alpha_A U_A(\mathbf{A})\}, \quad p_X(\mathbf{X}) = \frac{1}{Z_X} \exp \{-\alpha_X U_X(\mathbf{X})\} \quad (3.37)$$

gdzie  $Z_A$  i  $Z_X$  – funkcje podziału (ang. *partition functions*) lub stałe normalizujące,  $\alpha_A \geq 0$  i  $\alpha_X \geq 0$  – parametry kary lub regularyzacji,  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  – funkcje energii całkowitej odpowiednich zmiennych  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ .

Stosując kryterium *AIC* (rozdz. 2.1) do (3.36) z uwzględnieniem (3.37), zadanie maksymalizacji funkcji gęstości prawdopodobieństwa *a posteriori* sprowadza się do zadania minimalizacji zregularyzowanej funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ :

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= -\ln p(\mathbf{A}, \mathbf{X}|\mathbf{Y}) = -\ln p(\mathbf{Y}|\mathbf{A}, \mathbf{X}) - \ln p(\mathbf{A}) - \ln p(\mathbf{X}) + \text{const} \\ &= D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A U_A(\mathbf{A}) + \alpha_X U_X(\mathbf{X}) + \text{const},\end{aligned}\quad (3.38)$$

gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = -\ln p(\mathbf{Y}|\mathbf{A}, \mathbf{X})$  może być dowolną miarą podobieństwa pomiędzy macierzami  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{A}\mathbf{X}$ . Funkcje te zostały szczegółowo omówione w rozdziale 2. Wyrażenia  $\alpha_A U_A(\mathbf{A})$  i  $\alpha_X U_X(\mathbf{X})$  są członami kary lub regularyzacji (w przypadku wystąpienia złego uwarunkowania), wymuszającymi określoną charakterystykę macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ . Funkcje  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  są miarami cech faktorów (np. rzadkość, gęstość, ortogonalność, itp.), a parametry kary  $\alpha_A$  i  $\alpha_X$  umożliwiają regulowanie ilości wprowadzanej informacji *a priori*.

### 3.2.1. Rzadkość faktorów

Rzadkość faktorów  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  można wymuszać, zakładając, że ich rozkłady *a priori* opisane są łącznymi rozkładami Laplace'a, ze średnimi  $\mu_{ij}^{(A)} = \mu_{jt}^{(X)} = 0$  oraz parametrami skali  $\lambda_A$  i  $\lambda_X$ , zatem:

$$p_A(\mathbf{A}) = \prod_{i,j} \frac{1}{2\lambda_A} \exp\left\{-\frac{|a_{ij} - \mu_{ij}^{(A)}|}{\lambda_A}\right\}, \quad p_X(\mathbf{X}) = \prod_{j,t} \frac{1}{2\lambda_X} \exp\left\{-\frac{|x_{jt} - \mu_{jt}^{(X)}|}{\lambda_X}\right\}.\quad (3.39)$$

Po podstawieniu (3.39) do (3.38), funkcje  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  można wyrazić w postaci:

$$U_A(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J a_{ij} = \sum_{i=1}^I \|\mathbf{a}_i\|_1, \quad U_X(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^J \sum_{t=1}^T x_{jt} = \sum_{t=1}^T \|\mathbf{x}_t\|_1, \quad (3.40)$$

dla  $a_{ij} \geq 0$  oraz  $x_{ij} \geq 0$ . Parametry kary wynoszą odpowiednio  $\alpha_A = \lambda_A^{-1}$  i  $\alpha_X = \lambda_X^{-1}$ .

Minimalizacja zregularyzowanej funkcji celu (3.38), złożonej z funkcji (3.40) oraz funkcji odległości euklidesowej (2.4), sprowadza się do rozwiązania następu-

jących liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności i zregularyzowanych według normy  $l_1$ :

$$\min_{\underline{\mathbf{a}}_i \geq \mathbf{0}} \|\underline{\mathbf{y}}_i^T - \mathbf{X}^T \underline{\mathbf{a}}_i^T\|_2^2 + \alpha_A \|\underline{\mathbf{a}}_i\|_1, \quad \text{dla } i = 1, \dots, I \quad (3.41)$$

$$\min_{\mathbf{x}_t \geq \mathbf{0}} \|\mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t\|_2^2 + \alpha_X \|\mathbf{x}_t\|_1, \quad \text{dla } t = 1, \dots, T \quad (3.42)$$

Łatwo zauważyć, że zadania (3.41) i (3.42), z pominięciem ograniczeń nieujemności, są równoważne tzw. zadaniom LASSO (ang. *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) [431] lub BPD (ang. *Basis Pursuit De-noising*) [60], które są formułowane w celu poszukiwania rzadkich rozwiązań dla podokreślonych zadań najmniejszych kwadratów. Norma  $l_1$  dla wielu problemów dość dobrze aproksymuje normę  $l_0$ , zwłaszcza dla dużych zadań podokreślonych [116]. Ponadto, funkcje celu w obu zadaniach (3.41) i (3.42) są wypukłe ze względu na ich argumenty, co znacznie ułatwia ich minimalizację. Takie podejście do wymuszania rzadkości zostało wprowadzone przez Hoyera [194] w tzw. nieujemnym kodowaniu rzadkim, a następnie badane i wykorzystywane w różnych algorytmach nieujemnej faktoryzacji macierzy [83, 89, 121, 201, 289].

Wymuszanie rzadkości można również realizować przez miarę rzadkości z (3.13). Po wykonaniu pewnych przekształceń uzyskuje się:

$$U_A(\mathbf{A}) = (\xi_A \|\text{vec}(\mathbf{A})\|_2 - \|\text{vec}(\mathbf{A})\|_1)^2, \quad (3.43)$$

$$U_X(\mathbf{X}) = (\xi_X \|\text{vec}(\mathbf{X})\|_2 - \|\text{vec}(\mathbf{X})\|_1)^2, \quad (3.44)$$

gdzie  $\xi_A = \sqrt{IJ} - (\sqrt{IJ} - 1)\eta_A$  i  $\xi_X = \sqrt{JT} - (\sqrt{JT} - 1)\eta_X$ , a  $\eta_A, \eta_X \in [0, 1]$  są parametrami sterującymi rzadkością.

Rzadkość można również regulować przez uogólnioną miarę różnorodności (ang. *diversity measure*)  $J^{(p,q)}$ :

$$J^{(p,q)} = \sum_{j=1}^J (\|\underline{\mathbf{x}}_j\|_q)^p, \quad (3.45)$$

gdzie  $0 \leq p \leq 1$  i  $q \geq 1$ . Miara ta określa grupową rzadkość macierzy  $\mathbf{X}$  przez wynikową ocenę rzadkości jej wierszy. Została zaproponowana przez Cottera i innych [95] w celu usprawnienia estymacji rzadkich rozwiązań problemu podokreślonego z danych (wektorów) pomiarowych, rejestrowanych w czasie dyskretnym. Jej minimalizacja może być realizowana za pomocą rodziny algorytmów

M-FOCUSS [95, 500], które mogą być również zastosowane do zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensora.

W pracy [497] miara (3.45) została zastosowana do wymuszania rzadkości faktorów w metodzie NMF w kontekście ślepej separacji źródeł. Miarę tę zmodyfikowano, tak aby uwzględniała profile rzadkości kolumn macierzy  $\mathbf{X}$  oraz wierszy macierzy  $\mathbf{A}$ , zatem:

$$U_X(\mathbf{X}) = J^{(2,1)} = \sum_{t=1}^T (\|\mathbf{x}_t\|_1)^2 = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{1}_{J \times J} \mathbf{X}), \quad (3.46)$$

$$U_A(\mathbf{A}) = J^{(2,1)} = \sum_{i=1}^I (\|\mathbf{a}_i\|_1)^2 = \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{1}_{J \times J} \mathbf{A}^T), \quad (3.47)$$

gdzie  $q = 1$  i  $p = 2$  oraz  $\mathbf{1}_{J \times J} \in \mathbb{R}^{J \times J}$  – macierz samych jedynek. Funkcję  $U_X(\mathbf{X})$ , wyrażoną poprzez (3.46), można odnaleźć w różnych zastosowaniach metody NMF. Kim i Park [222, 223] zastosowali ją do wymuszania rzadkości w faktorze  $\mathbf{X}$  i taki algorytm nazwali SNMF/R. Analogicznie, SNMF/L oznacza algorytm NMF z wymuszaniem rzadkości według (3.47), tzn. tylko w faktorze  $\mathbf{A}$ . Jeśli  $D(\mathbf{Y} \|\mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest przez funkcję odległości euklidesowej (2.4), to zadania minimalizacji zregulowanej funkcji celu (3.38), w połączeniu z funkcjami (3.46) i (3.47) oraz przy ograniczeniach nieujemności, można zapisać odpowiednio:

$$\min_{\mathbf{X} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha_X} \mathbf{1}_{1 \times J} \end{pmatrix} \mathbf{X} - \begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0}_{1 \times T} \end{pmatrix} \right\|_F^2, \quad (3.48)$$

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{X}^T \\ \sqrt{\alpha_A} \mathbf{1}_{1 \times J} \end{pmatrix} \mathbf{A}^T - \begin{pmatrix} \mathbf{Y}^T \\ \mathbf{0}_{1 \times I} \end{pmatrix} \right\|_F^2. \quad (3.49)$$

Funkcja (3.46) ma również zastosowanie w ślepej separacji widm absorpcyjnych lodu astrofizycznego, realizowanej za pomocą zregulowanego algorytmu NMF [290].

Należy również wspomnieć, że wymuszanie rzadkości w jednym z estymowanych faktorów często powoduje wymuszenie „nieradkości”, czyli gładkości w drugim faktorze. Jest to spowodowane tym, że oba faktory są ze sobą związane w sposób multiplikatywny. Jednoczesne wymuszanie rzadkości w obu faktorach  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  może powodować pogorszenie dopasowania modelu do obserwowanych danych, czyli zwiększanie wartości funkcji celu (3.38). Aby modelować to zjawisko,



Pascuala-Montano i pozostali współautorzy [344] zaproponowali model nsNMF (ang. *non-smooth NMF*), w którym wymuszanie rzadkości w jednym z estymowanych czynników odbywa się w inny sposób niż bayesowski model wprowadzania informacji *a priori*. Model nsNMF zakłada następującą dekompozycję macierzy  $\mathbf{Y}$ :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}, \quad (3.50)$$

gdzie  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ .

Macierz  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  zdefiniowano następująco:

$$\mathbf{S} = (1 - \theta)\mathbf{I}_J + \frac{\theta}{J}\mathbf{1}_{J \times J}, \quad (3.51)$$

gdzie  $\mathbf{I}_J \in \mathbb{R}^{J \times J}$  – macierz jednostkowa oraz  $0 \leq \theta \leq 1$ .

Jeśli  $\theta = 0$ , model (3.50) sprowadza się do podstawowego modelu NMF. Gdy  $\theta = 1$ , wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{S}\mathbf{X}$  są maksymalnie gładkie, tzn. wszystkie ich elementy mają takie same niezerowe wartości. Wymuszanie gładkości w macierzy  $\mathbf{X}$  będzie skutkowało wymuszaniem rzadkości w macierzy  $\mathbf{A}$ . Analogicznie, jeśli wymuszanie gładkości odbywa się przez czynnik  $\mathbf{A}\mathbf{S}$ , to czynnik  $\mathbf{X}$  charakteryzuje się dużą rzadkością.

Rzadkość czynnika  $\mathbf{X}$  można również regulować przez odpowiedni dobór wektorów bazowych w macierzy  $\mathbf{A}$ . Analogicznie, rzadkość czynnika  $\mathbf{A}$  jest zależna od wyboru wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{X}$ . Stwierdzenie to można wyjaśnić, stosując podejście geometryczne do modelu NMF. Z definicji 3.4, wniosku 3.1 oraz skalowania (3.23) i (3.24) wynika, że jeśli  $\bar{\mathbf{y}}_t$  jest wierzchołkiem otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$ , gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J\}$  jest zbiorem przeskalowanych wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{A}$ , to wektor współrzędnych barycentrycznych  $\bar{\mathbf{x}}_t$  ma tylko jeden element niezerowy. Gdy zaś  $\bar{\mathbf{y}}_t$  leży na krawędzi łączącej dwa wierzchołki otoczki  $\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$ , wówczas co najwyżej dwa elementy wektora  $\bar{\mathbf{x}}_t$  są niezerowe. Wynika stąd, że rzadkość czynnika  $\mathbf{X}$  zależy od wyboru wektorów zbioru  $\bar{\mathbf{A}}$ .

Niech  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$  oznacza otoczkę wypukłą utworzoną z elementów zbioru  $\bar{\mathcal{Y}} = \{\bar{\mathbf{y}}_1, \dots, \bar{\mathbf{y}}_T\}$ . Łatwo zauważyć, że jeśli  $\exists t : \bar{\mathbf{y}}_t \in \mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$  i  $\bar{\mathbf{y}}_t \notin \mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$ , to odpowiedni wektor  $\bar{\mathbf{x}}_t$  ma co najmniej jeden element ujemny. Przyjęte ograniczenia nieujemności dla czynnika  $\mathbf{X}$  implikują warunek:  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}}) \subseteq \mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$ . Wynika stąd, że  $\text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})) \leq \text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}}))$ , gdzie  $\text{vol}(\mathcal{H})$  jest objętością wielokomórki utworzonej z otoczki wypukłej  $\mathcal{H}$ . Zatem istnieje taka dolna granica objętości dla  $\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$ , poniżej której jakieś elementy macierzy  $\mathbf{X}$  stają się ujemne. Z drugiej strony, oczywiste jest, że  $\text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})) \leq \text{vol}(\mathcal{S}^{(I-1)})$ , gdzie  $\mathcal{S}^{(I-1)}$  jest  $(I-1)$ -wymiarowym simpleksem probabilistycznym. Jeśli  $\text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})) < \text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}}))$  oraz  $\exists j : \bar{\mathbf{a}}_j \in \mathcal{H}(\bar{\mathbf{A}})$

i  $\bar{\mathbf{a}}_j \notin \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ , to  $\exists t : \bar{\mathbf{y}}_t = \bar{\mathbf{a}}_j$ . Nie można więc wyrazić macierzy  $\mathbf{X}$  w postaci (3.25), co może oznaczać niejednoznaczność faktoryzacji.

Z przedstawionych rozważań wynika, że wymuszanie rzadkości w faktorze  $\mathbf{X}$  można realizować przez minimalizowanie objętości otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$ . Podczas ograniczenia nieujemności dla obu faktorów, podejście to ma na celu znalezienie takiego zbioru  $\bar{\mathfrak{A}}$ , dla którego  $\text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})) \rightarrow \text{vol}(\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}}))$ . Zadanie estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  może być więc sformułowane w postaci następującego zadania optymalizacji nieliniowej z ograniczeniami obszaru rozwiązań dopuszczalnych:

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \text{vol}(\mathcal{H}([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J])), \quad \text{p.o. } \mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} \text{ oraz } \mathbf{1}_I^T \mathbf{A} = \mathbf{1}_J^T. \quad (3.52)$$

Problem (3.52) rozważano w kontekście modelu NMF w wielu pracach, np. [233, 303, 391, 449, 527]. Stosując metodę mnożników Lagrange'a [329] oraz modelując podobieństwo macierzy  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{A}\mathbf{X}$  funkcją  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , zadanie (3.52) może być przekształcone do postaci równoważnej:

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \{D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \lambda \text{vol}(\mathcal{H}([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J]))\}, \quad \text{p.o. } \mathbf{1}_I^T \mathbf{A} = \mathbf{1}_J^T, \quad (3.53)$$

gdzie  $\lambda \geq 0$  jest współczynnikiem kary.

Zgodnie z zapisem (3.38) otrzymuje się:

$$U_A(\mathbf{A}) = \text{vol}(\mathcal{H}([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J])), \quad (3.54)$$

oraz  $\alpha_A = \lambda$ .

Jeśli  $J = I + 1$  oraz wektory zbioru  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J\}$  są afinicznie niezależne, to  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  jest  $I$ -wymiarowym simpleksem  $\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}})$ . Wynika stąd, że funkcja kary  $U_A(\mathbf{A})$  może być modelowana przez  $\text{vol}(\mathcal{S}(\bar{\mathfrak{A}}))$ , gdzie:

$$\text{vol}(\mathcal{S}([\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J])) = \frac{1}{(J-1)!} |\det([\bar{\mathbf{a}}_2 - \bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J - \bar{\mathbf{a}}_1])|, \quad (3.55)$$

lub alternatywnie:

$$\text{vol}(\mathcal{S}([\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J])) = \frac{1}{(J-1)!} \left| \det \left( \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \bar{\mathbf{a}}_1 & \dots & \bar{\mathbf{a}}_J \end{bmatrix} \right) \right|. \quad (3.56)$$

Gdy  $J \leq I$ , macierz  $\begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \bar{\mathbf{a}}_1 & \dots & \bar{\mathbf{a}}_J \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(I+1) \times J}$  jest prostokątna, co uniemożliwia obliczenie wyznacznika.

Miao i Qi [303] zaproponowały, aby aproksymować  $\text{vol}(\mathcal{H}([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J]))$  dla  $J \leq I$ , stosując  $(J-1)$ -wymiarowe zredukowane wektory bazowe  $\tilde{\mathbf{A}} = \{\tilde{\mathbf{a}}_j\} \in \mathbb{R}^{(J-1) \times J}$ . Wektory takie można uzyskać przez rzutowanie  $I$ -wymiarowych wektorów bazowych z macierzy  $\mathbf{A}$  na podprzestrzeń rozpiętą na wektorach komponentów głównych macierzy obserwacji  $\mathbf{Y}$ . W związku z tym  $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}^T(\mathbf{A} - T^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{1}_T\mathbf{1}_J^T)$ , gdzie kolumny macierzy  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{I \times (J-1)}$  są  $(J-1)$  najbardziej znaczącymi komponentami głównymi macierzy  $\mathbf{Y}$  (uzyskane metodą PCA). Ponadto, ze względu na łatwość optymalizacji wartość bezwzględna w (3.56) została zastąpiona funkcją kwadratową, co nie zmienia punktów ekstremalnych funkcji (3.56). W efekcie funkcja  $U_A(\mathbf{A})$  w (3.54) przyjmuje postać:

$$U_A(\mathbf{A}) = \det \left( \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \tilde{\mathbf{a}}_1 & \dots & \tilde{\mathbf{a}}_J \end{bmatrix} \right)^2, \quad (3.57)$$

gdzie  $\alpha_A = \frac{\lambda}{2(J-1)}$ . Algorytm NMF minimalizujący funkcję odległości euklidesowej, zregularyzowaną członem (3.57), nazwano MVC-NMF (ang. *Minimum Volume Constrained NMF*) [303].

Schachtner, Pöppel i Lang [303] wyrażają człon kary  $U_A(\mathbf{A})$  przez miarę zgrubnie aproksymującą objętość  $\text{vol}(\mathcal{H}([\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J]))$  dla  $J \leq I$ . W ich podejściu  $U_A(\mathbf{A}) = |\det(\mathbf{A}^T \mathbf{A})|$ , po założeniu normalizacji wektorów kolumnowych w macierzy  $\mathbf{A}$ .

### 3.2.2. Gładkość faktorów

Gładkość faktorów  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  można wymuszać przez modelowanie rozkładu elementów w macierzach łącznymi rozkładami gaussowskimi:

$$p_A(\mathbf{A}) \propto \prod_{i,j} \exp \left\{ -\frac{(a_{ij} - \mu_{ij}^{(A)})^2}{2\sigma_A^2} \right\}, \quad p_X(\mathbf{X}) \propto \prod_{j,t} \exp \left\{ -\frac{(x_{jt} - \mu_{jt}^{(X)})^2}{2\sigma_X^2} \right\}, \quad (3.58)$$

gdzie  $\mu_{ij}^{(A)}$  i  $\mu_{jt}^{(X)}$  – znane *a priori* średnie,  $\sigma_A^2$  i  $\sigma_X^2$  – odpowiednie wariancje.

Po uwzględnieniu (3.58) w (3.38) uzyskuje się:

$$U_A(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left( \frac{a_{ij} - \mu_{ij}^{(A)}}{\sigma_A} \right)^2 = \text{tr}((\mathbf{A} - \bar{\mathbf{A}})\Sigma_A^{-1}(\mathbf{A} - \bar{\mathbf{A}})^T), \quad (3.59)$$

$$U_X(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^J \sum_{t=1}^T \left( \frac{x_{jt} - \mu_{jt}^{(X)}}{\sigma_X} \right)^2 = \text{tr}((\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^T \boldsymbol{\Sigma}_X^{-1} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})), \quad (3.60)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = [\mu_{ij}^{(A)}]$ ,  $\bar{\mathbf{X}} = [\mu_{jt}^{(X)}]$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}_A = \text{diag}(\sigma_A^2)$  oraz  $\boldsymbol{\Sigma}_X = \text{diag}(\sigma_X^2)$ .

Po założeniu  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{0}$  i  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{0}$  oraz  $\boldsymbol{\Sigma}_A = \boldsymbol{\Sigma}_X = \mathbf{I}_J \in \mathbb{R}^{J \times J}$  (skalowane komponenty), otrzymuje się:

$$U_A(\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) = \|\mathbf{A}\|_F^2, \quad U_X(\mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \|\mathbf{X}\|_F^2. \quad (3.61)$$

Dla funkcji odległości euklidesowej (2.4), zregularyzowana funkcja celu (3.38) w połączeniu z członami (3.61) ma postać:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \alpha_A \|\mathbf{A}\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{X}\|_F^2 + \text{const}. \quad (3.62)$$

Człony te mogą spełniać funkcje standardowej regularyzacji Tichonowa [30], stosowanej w rozwiązywaniu źle uwarunkowanych lub źle postawionych zadań najmniejszych kwadratów. Zadanie minimalizacji funkcji (3.62) ze względu na macierz  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  oraz przy ograniczeniach nieujemności można sformułować w następującej postaci:

$$\min_{\mathbf{X} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha_X} \mathbf{I}_J \end{pmatrix} \mathbf{X} - \begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0}_{J \times T} \end{pmatrix} \right\|_F^2, \quad (3.63)$$

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{X}^T \\ \sqrt{\alpha_A} \mathbf{I}_J \end{pmatrix} \mathbf{A}^T - \begin{pmatrix} \mathbf{Y}^T \\ \mathbf{0}_{J \times I} \end{pmatrix} \right\|_F^2. \quad (3.64)$$

Można także pokazać, że minimalizacja funkcji (3.62) jest równoważna następującym zadaniom:

$$\min_{\mathbf{A}} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{A}\|_F^2 \leq \Delta_A^2, \quad (3.65)$$

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{X}\|_F^2 \leq \Delta_X^2, \quad (3.66)$$

gdzie parametry  $\Delta_A$  i  $\Delta_X$  są odwrotnie proporcjonalne do odpowiednich parametrów  $\alpha_A$  i  $\alpha_X$ . W dalszej części pracy parametry te będą nazywane promieniami obszarów zaufania. Określają one stopień gładkości estymowanych rozwiązań i są zwykle wybierane kompromisowo między minimalnym błędem residulany a stopniem gładkości rozwiązania. Z zadań (3.65) i (3.66) wynika, że człony

regularyzujące w (3.62) nie tylko stabilizują źle postawione problemy, ale także wymuszają określoną wariancję rozwiązań (dla  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{0}$  i  $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{0}$ ), a tym samym odpowiednią gładkość estymowanych czynników.

Funkcje  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  mogą też być zdefiniowane na podstawie modelu losowego pola Markowa (MRF – ang. *Markov Random Field*). Jest on powszechnie stosowany do opisu lokalnej gładkości w rekonstrukcji obrazów – zwłaszcza tomograficznych. Zakładając jedynie interakcje między elementami wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{A}$  oraz elementami wektorów wierszowych macierzy  $\mathbf{X}$ , funkcje  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  mają następujące postaci:

$$U_A(\mathbf{A}) = \sum_{i,j} \sum_{l \in S_i} \nu_{il} \psi(a_{ij} - a_{lj}, \delta_A), \quad (3.67)$$

$$U_X(\mathbf{X}) = \sum_{j,t} \sum_{l \in S_t} \nu_{tl} \psi(x_{jt} - x_{jl}, \delta_X). \quad (3.68)$$

Dla pierwszego rzędu interakcji, czyli dla najbliższego sąsiedztwa, zbiory  $S_i$  oraz  $S_t$  są wyrażone następująco:  $S_i = \{i - 1, i + 1\}$  oraz  $S_t = \{t - 1, t + 1\}$ , zaś współczynniki wagowe wynoszą odpowiednio  $\nu_{il} = 1$  i  $\nu_{tl} = 1$ . Dla drugiego rzędu interakcji:  $S_i = \{i - 2, i - 1, i + 1, i + 2\}$  oraz  $S_t = \{t - 2, t - 1, t + 1, t + 2\}$ . Parametry  $\delta_A$  i  $\delta_X$  są czynnikami skalującymi, natomiast  $\psi(\xi, \delta)$  jest funkcją potencjału zmiennej  $\xi$ . Przykładowe funkcje potencjału, które mogą być stosowane w metodzie NMF, zamieszczono w tabeli 3.1.

Tabela 3.1. Funkcje potencjału zmiennej  $\xi$ 

Autorzy (nazwa)	Funkcja: $\psi(\xi, \delta)$	Literatura
Funkcja gaussowska	$(\xi/\delta)^2$	
Besag (Laplace'a)	$ \xi/\delta $	[25]
Bouman i Sauer (GGMRF)	$ \xi/\delta ^p$	[33]
Geman i McClure	$\frac{16}{3\sqrt{3}} \frac{(\xi/\delta)^2}{(1 + (\xi/\delta)^2)}$	[142]
Geman i Reynolds	$\frac{ \xi/\delta }{1 +  \xi/\delta }$	[143]
Green	$\delta \ln[\cosh(\xi/\delta)]$	[157]
Hebert i Leahy	$\delta \ln [1 + (\xi/\delta)^2]$	[182]

Według badań przeprowadzonych przez Lange'a [247], optymalnie dobrana funkcja potencjału powinna być: nieujemna, parzysta,  $\psi(\xi = 0) = 0$ , ściśle rosnąca dla  $\xi > 0$ , nieograniczona, wypukła z ograniczoną pierwszą pochodną. Pośród funkcji przedstawionych w tabeli 3.1, jedynie funkcja Greena spełnia podane właściwości. Skuteczność tej funkcji została potwierdzona licznymi badaniami w kontekście następujących zastosowań: ślepa separacja nieujemnych sygnałów [496], ślepa separacja obrazów [498], ślepa separacja sygnałów akustycznych w modelu podokreślonym [483], estymacja komponentów ukrytych w modelu NTF [517], a także różne aspekty tomograficznej rekonstrukcji obrazów [369, 477, 480, 482, 514, 516].

Skuteczność stosowania funkcji Greena jest jednak uzależniona nie tylko od doboru parametrów kary  $\alpha_A$  i  $\alpha_X$  w (3.38), ale także od parametrów skalujących  $\delta_A$  i  $\delta_X$  w (3.67) i (3.68). W modelu estymacji bayesowskiej, parametry te można traktować jako hiperparametry. Ich estymacja przez maksymalizację rozkładów granicznych lub maksymalizację funkcji wiarygodności typu II wymaga użycia skomplikowanych narzędzi statystyki matematycznej [514].

Funkcja gaussowska  $\psi(\xi, \delta) = (\xi/\delta)^2$ , podana w tabeli 3.1, nie ma ograniczonej pierwszej pochodnej, ale jej parametr skalujący  $\delta$  może być połączony z parametrem kary  $\alpha$ . W efekcie, dla modelu MRF z gaussowską funkcją potencjału tylko dwa parametry kary powinny być określone. Można też pokazać, że model ten sprowadza się do modelu jednoczesnej autoregresji (SAR – ang. *Simultaneous Auto-regression*) [24, 380, 456]. Jest on powszechnie stosowany w wielu dziedzinach nauki [316, 380] do modelowania interakcji między zmiennymi losowymi, zaburzonymi szumem gaussowskim.

Niech  $\mathbf{a}_j \in \mathbb{R}_+^I$  jest  $j$ -tym wektorem kolumnowym macierzy  $\mathbf{A}$ , a  $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}_+^{1 \times T}$   $j$ -tym wektorem wierszowym macierzy  $\mathbf{X}$ . Model SAR zakłada, że zmienne losowe w wektorach  $\mathbf{a}_j$  i  $\mathbf{x}_j$  modelowane są równaniami stochastycznymi:

$$\mathbf{a}_j = \mathbf{S}^{(A)} \mathbf{a}_j + \boldsymbol{\epsilon}, \quad \mathbf{x}_j = \mathbf{x}_j \mathbf{S}^{(X)} + \boldsymbol{\epsilon}^T, \quad (3.69)$$

gdzie  $\mathbf{S}^{(A)} \in \mathbb{R}^{I \times I}$  oraz  $\mathbf{S}^{(X)} \in \mathbb{R}^{T \times T}$  są symetrycznymi macierzami przestrzennych zależności pomiędzy zmiennymi losowymi,  $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$  jest wektorem jednorodnego szumu gaussowskiego o wariancji  $\sigma^2$ , a  $\mathbf{I}$  jest macierzą jednostkową o odpowiednim wymiarze.

Według [138, 316], macierze przestrzennych zależności mogą być wyrażone jako  $\mathbf{S}^{(A)} = \gamma \mathbf{Z}^{(A)}$  i  $\mathbf{S}^{(X)} = \gamma \mathbf{Z}^{(X)}$ , gdzie  $\gamma$  jest stałą, dobraną tak, aby macierze  $\mathbf{C}^{(A)} = \mathbf{I}_I - \mathbf{S}^{(A)}$  i  $\mathbf{C}^{(X)} = \mathbf{I}_T - \mathbf{S}^{(X)}$  były dodatnio określone. Macierze  $\mathbf{Z}^{(A)} = [z_{mi}^{(A)}]$  i  $\mathbf{Z}^{(X)} = [z_{tn}^{(X)}]$  są binarnymi, symetrycznymi i wstęgowymi macierzami wskaźników sąsiadujących elementów w odpowiednich wektorach  $\mathbf{a}_j$  i  $\mathbf{x}_j$ .

Dla interakcji pierwszego rzędu, zachodzą relacje:  $z_{1,2}^{(A)} = z_{I,I-1}^{(A)} = z_{m,m-1}^{(A)} = z_{m,m+1}^{(A)} = 1$  dla  $m \in \{2, \dots, I-1\}$ ;  $z_{2,1}^{(X)} = z_{T-1,T}^{(X)} = z_{n-1,n}^{(X)} = z_{n+1,n}^{(X)} = 1$  dla  $n \in \{2, \dots, T-1\}$ . Dla pozostałych elementów:  $z_{mi} = z_{tn} = 0$ . Dla interakcji  $P$ -tego rzędu, każdy element  $a_{ij}$  i  $x_{jt}$  ma odpowiednie zbiory sąsiadów:  $\{a_{i-\nu,j}\}$ ,  $\{a_{i+\nu,j}\}$ ,  $\{x_{j,t-\nu}\}$ ,  $\{x_{j,t+\nu}\}$  dla  $\nu = 1, \dots, P$ . W konsekwencji,  $\mathbf{Z}^{(A)}$  i  $\mathbf{Z}^{(X)}$  są symetrycznymi macierzami wstęgowymi z  $P$  wstęgami pod i nad główną diagonalną. Elementy wstęg są równe jedności, pozostałe zaś elementy są zerowe. Macierze  $\mathbf{C}^{(A)}$  i  $\mathbf{C}^{(X)}$  są dodatnio określone, jeżeli  $\gamma < (2P)^{-1}$  dla interakcji  $P$ -tego rzędu [138, 316]. Najczęściej wybiera się:  $\gamma = (2P)^{-1} - \tilde{\epsilon}$ , gdzie  $\tilde{\epsilon}$  jest stałą o małej wartości, np.  $\tilde{\epsilon} = 10^{-16}$ .

Po przekształceniu równania (3.69) dla  $\mathbf{a}_j$  uzyskuje się:  $\boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{I}_I - \mathbf{S}^{(A)})\mathbf{a}_j = \mathbf{C}^{(A)}\mathbf{a}_j$ . Ponieważ  $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$ , zatem

$$p(\mathbf{a}_j) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \boldsymbol{\epsilon}^T \boldsymbol{\epsilon} \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{C}^{(A)}\mathbf{a}_j\|_2^2 \right\}.$$

Podobne zależności można wyprowadzić dla wektora  $\mathbf{x}_j$ . Wynika stąd, że dla modelu SAR rozkłady Gibbsa podane w (3.37) można wyrazić poprzez łączne wielowymiarowe rozkłady normalne:

$$p_A(\mathbf{A}) = \prod_{j=1}^J Z_A^{-1} \exp \left\{ -\frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{C}^{(A)}\mathbf{a}_j\|_2^2 \right\}, \quad (3.70)$$

$$p_X(\mathbf{X}) = \prod_{j=1}^J Z_X^{-1} \exp \left\{ -\frac{\alpha_X}{2} \|\mathbf{x}_j \mathbf{C}^{(X)}\|_2^2 \right\} \quad (3.71)$$

gdzie  $Z_A = \left(\frac{2\pi}{\alpha_A}\right)^{I/2} \left(\prod_{i=1}^I \lambda_i^2(\mathbf{C}^{(A)})\right)^{-1/2}$ , a  $\lambda_i(\mathbf{C}^{(A)})$  jest  $i$ -tą wartością własną macierzy  $\mathbf{C}^{(A)}$ . Podobnie  $Z_X = \left(\frac{2\pi}{\alpha_X}\right)^{T/2} \left(\prod_{t=1}^T \lambda_t^2(\mathbf{C}^{(X)})\right)^{-1/2}$ . Dla  $P = 1$ :  $\lambda_i(\mathbf{C}^{(A)}) \cong 1 - \cos\left(\frac{\pi i}{T}\right)$  oraz  $\lambda_t(\mathbf{C}^{(X)}) \cong 1 - \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)$ , co znacznie upraszcza estymację hiperparametrów.

Z rozkładów (3.70) i (3.71) wynika, że zregularyzowana funkcja celu w (3.38) ma postać:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \|\mathbf{C}^{(A)}\mathbf{A}\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{X}\mathbf{C}^{(X)}\|_F^2 + \text{const.} \quad (3.72)$$

Macierze  $\mathbf{C}^{(A)}$  i  $\mathbf{C}^{(X)}$  w (3.72) mogą być również definiowane przez inne modele niż SAR i MRF. W pracy [62] założono, że wiersze macierzy  $\mathbf{X}$  reprezentują gładkie sygnały w dziedzinie czasu. W związku z tym, przyjęto wygładzanie tych sygnałów według modelu ważonego uśredniania:  $\bar{\mathbf{x}}_t = \alpha \bar{\mathbf{x}}_{t-1} + (1 - \alpha)\mathbf{x}_t$ , gdzie  $0 < \alpha < 1$  jest parametrem wygładzania, a  $\bar{\mathbf{x}}_t$  jest uśrednionym  $t$ -tym wek-

torem kolumnowym macierzy  $\mathbf{X}$ . W rezultacie macierz  $\mathbf{C}^{(X)}$  przyjmuje postać  $\mathbf{C}^{(X)} = \mathbf{I} - \mathbf{T}$ , gdzie  $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{T \times T}$  jest macierzą Toeplitza z przesuwany szablonem wygładzania.

Wygładzanie profilu czasowego komponentów modelu NMF można odnaleźć również w innych pracach. Przykładowo, Virtanen [443] zaproponował wygładzanie struktury czasowej źródłowych sygnałów akustycznych, estymowanych z nagrań monofonicznych, stosując model MRF z gaussowską funkcją potencjału. Févotte, Bertin i Durrieu [128] zaproponowali wygładzanie profilu czasowego estymowanych komponentów poprzez modelowanie rozkładów *a priori* według łańcuchów Markowa, z funkcjami gęstości prawdopodobieństwa rozkładów Gamma lub inwersyjnym Gamma. Koncepcję tę wykorzystano również w innych pracach dotyczących ślepej separacji sygnałów akustycznych za pomocą metody NMF [21, 91].

W nawiązaniu do modelu (3.50) należy zauważyć, że wymuszanie gładkości rzadko odbywa się jednocześnie dla obu czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ . Najczęściej człon kary wymuszający gładkość jest stosowany tylko do jednego z czynników, a drugi czynnik estymowany jest bez informacji *a priori* lub z wymuszaniem rzadkości. Zakładając jednocześnie wymuszanie gładkości w czynniku  $\mathbf{A}$  oraz rzadkości w  $\mathbf{X}$  według członu (3.46), zregularyzowana funkcja celu ma postać:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \|\mathbf{C}^{(A)} \mathbf{A}\|_F^2 + \alpha_X \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{1}_{J \times J} \mathbf{X}) + \text{const} \\ &= D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \|\mathbf{C}^{(A)} \mathbf{A}\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{1}_J^T \mathbf{X}\|_2^2 + \text{const}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Jeśli  $\mathbf{C}^{(A)} = \mathbf{I}_I$  oraz  $D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej, to zadanie minimalizacji funkcji (3.73) ze względu na macierz  $\mathbf{A}$  i przy ograniczeniach nieujemności sprowadza się do postaci (3.64). Natomiast dla estymacji czynnika  $\mathbf{X}$  uzyskuje się zadanie (3.48). Dla  $\mathbf{C}^{(A)} \neq \mathbf{I}_I$ , funkcję (3.73) można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \alpha_A \|\mathbf{C}^{(A)} \mathbf{A}\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{1}_J^T \mathbf{X}\|_2^2 + \text{const} \\ &= \|\text{vec}(\mathbf{Y}) - (\mathbf{X}^T \otimes \mathbf{I}_I) \text{vec}(\mathbf{A})\|_2^2 + \|(\mathbf{I}_J \otimes \sqrt{\alpha_A} \mathbf{C}^{(A)}) \text{vec}(\mathbf{A})\|_2^2 \\ &\quad + \alpha_X \|\mathbf{1}_J^T \mathbf{X}\|_2^2 + \text{const}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

gdzie symbol  $\otimes$  oznacza iloczyn Kroneckera. W efekcie, zadanie estymacji czynnika  $\mathbf{A}$  wyraża się następująco:

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{X}^T \otimes \mathbf{I}_I \\ \mathbf{I}_J \otimes \sqrt{\alpha_A} \mathbf{C}^{(A)} \end{pmatrix} \text{vec}(\mathbf{A}) - \begin{pmatrix} \text{vec}(\mathbf{Y}) \\ \mathbf{0}_{IJ} \end{pmatrix} \right\|_2^2. \quad (3.75)$$

Dla czynnika  $\mathbf{X}$  zadanie estymacji ma postać (3.48).



Po założeniu wymuszania gładkości w faktorze  $\mathbf{X}$  oraz rzadkości w faktorze  $\mathbf{A}$  zregularyzowaną funkcję celu można zdefiniować jako:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \alpha_A \|\mathbf{A}\mathbf{1}_J\|_2^2 + \alpha_X \|\mathbf{X}\mathbf{C}^{(X)}\|_F^2 + \text{const} \\ &= \|\text{vec}(\mathbf{Y}) - (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A})\text{vec}(\mathbf{X})\|_2^2 + \|(\sqrt{\alpha_X}(\mathbf{C}^{(X)})^T \otimes \mathbf{I}_J)\text{vec}(\mathbf{X})\|_2^2 \\ &\quad + \alpha_A \|\mathbf{A}\mathbf{1}_J\|_2^2 + \text{const.}\end{aligned}\quad (3.76)$$

zatem:

$$\min_{\mathbf{X} \geq \mathbf{0}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha_X}(\mathbf{C}^{(X)})^T \otimes \mathbf{I}_J \end{pmatrix} \text{vec}(\mathbf{X}) - \begin{pmatrix} \text{vec}(\mathbf{Y}) \\ \mathbf{0}_{JT} \end{pmatrix} \right\|_2^2. \quad (3.77)$$

Zadanie estymacji faktora  $\mathbf{A}$  przyjmuje postać (3.49).

### 3.2.3. Ortogonalność faktorów

W pewnych zastosowaniach modelu NMF, efekt niejednoznaczności faktorów można osłabiać lub eliminować przez założenie, że jeden z estymowanych faktorów spełnia również dodatkowe warunki ortogonalności. W rezultacie można sformułować następujące zadania, których wybór zależy od danego zastosowania:

- ortogonalizacja kolumn w faktorze  $\mathbf{A}$ :

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}, \mathbf{X} \geq \mathbf{0}} D(\mathbf{Y} \|\mathbf{A}\mathbf{X}), \quad \text{p.o. } \mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J, \quad (3.78)$$

- ortogonalizacja wierszy w faktorze  $\mathbf{X}$ :

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}, \mathbf{X} \geq \mathbf{0}} D(\mathbf{Y} \|\mathbf{A}\mathbf{X}), \quad \text{p.o. } \mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{I}_J. \quad (3.79)$$

**Wniosek 3.6.** Faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w zadaniu (3.78) są niejednoznaczne tylko co do permutacji kolumn w macierzy  $\mathbf{A}$  i wierszy w macierzy  $\mathbf{X}$ .

**Dowód 3.2.** Z zależności (3.1) i z warunku ortogonalności dla  $\bar{\mathbf{A}}$  wynika  $\bar{\mathbf{A}}^T \bar{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{I}_J$ . Ponieważ  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J$ , a zatem  $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_J$  albo  $\mathbf{Q}$  jest macierzą permutacyjną, albo  $\mathbf{Q}$  jest macierzą ortogonalną. Gdyby  $\mathbf{Q} = [q_{mn}]$  była macierzą ortogonalną, wówczas  $\exists m \neq n : q_{mn} < 0$ . Ponieważ  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J$ , więc  $\forall i, \exists m : a_{im} > 0$  oraz  $\forall j \neq m : a_{ij} = 0$ , zatem  $[\mathbf{A}\mathbf{Q}]_{in} = \sum_{j=1}^J a_{ij} q_{jn} = a_{im} q_{mn} < 0$ , a więc  $\mathbf{Q}$  nie może być macierzą ortogonalną. Z tego wynika, że jedyna niejednoznaczność w faktorze  $\mathbf{A}$  to niejednoznaczność permutacji kolumn, a w faktorze  $\mathbf{X}$  to permutacja wierszy.

Podobny wniosek można również udowodnić dla zadania (3.79). Należy również zauważyć, że wymuszanie ortogonalności faktora i jednocześnie jego nieujemności prowadzi do wymuszania dużej rzadkości. Można stwierdzić, że ortogonalny model NMF (ang. ONMF – *Orthogonal NMF*) jest szczególnym przypadkiem modelu NMF z wymuszaniem rzadkości.

Zregularyzowana funkcja celu (3.38) dla zadań (3.78) lub (3.79) ma postać:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \|\mathbf{A}^T \mathbf{A} - \mathbf{I}_J\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{X}\mathbf{X}^T - \mathbf{I}_J\|_F^2, \quad (3.80)$$

gdzie  $\alpha_A \geq 0$  oraz  $\alpha_X \geq 0$ . Jeśli rozwiązywane jest zadanie (3.78), to  $\alpha_A > 0$  i  $\alpha_X = 0$ . Dla zadania (3.79),  $\alpha_A = 0$  i  $\alpha_X > 0$ .

Zadania (3.78) i (3.79) mogą też być postrzegane jako zadania naprzemiennej minimalizacji funkcji celu z kwadratowymi ograniczeniami równościowymi. Wprowadzając macierze mnożników Lagrange’a  $\mathbf{\Lambda}_A \in \mathbb{R}^{J \times J}$  i  $\mathbf{\Lambda}_X \in \mathbb{R}^{J \times J}$ , odpowiednio dla ograniczeń w zadaniach (3.78) i (3.79), funkcję celu można zapisać następująco:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{\Lambda}_A^T (\mathbf{A}^T \mathbf{A} - \mathbf{I}_J)) + \text{tr}(\mathbf{\Lambda}_X^T (\mathbf{X}\mathbf{X}^T - \mathbf{I}_J)). \quad (3.81)$$

Dla zadań (3.78) i (3.79) zregularyzowaną funkcję celu można również wyrazić w postaci:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \sum_{m=1}^J \sum_{n \neq m} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{mn} + \alpha_X \sum_{m=1}^J \sum_{n \neq m} [\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{mn}. \quad (3.82)$$

Założenia ortogonalności minimalizują również nadmiarowość informacji w estymowanych komponentach. Tak jest w przypadku algorytmu LNMF (ang. *Local NMF*) [267], w którym narzucono kilka ograniczeń na estymowane faktory, tak aby estymowane cechy, reprezentowane wektorami bazowymi, miały jeszcze silniejszy charakter rozłożonych przestrzennie skupień. Przyjęto więc następujące założenia:

- ortogonalność wektorów bazowych – warunek ten zrealizowano przez narzucenie ortogonalności na kolumny macierzy  $\mathbf{A}$ , zgodnie z drugim członem funkcji celu (3.82).
- gładkość wektorów bazowych – po założeniu skalowania wektorów kolumnowych do jednostkowej normy  $l_1$ , tj.  $\forall j : \|\mathbf{a}_j\|_1 = 1$ , wymuszanie gładkich lokalnych skupień można realizować przez minimalizację funkcji kary  $U_A(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_F^2$ .
- ekspresywność wektorów kodujących – wariancja wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{X}$  powinna być maksymalizowana, co przy narzuceniu skalowania wektorów bazowych powoduje, że tylko najistotniejsze informacje są

kodowane w macierzy  $\mathbf{X}$ . Maksymalizacja wariancji jest realizowana poprzez minimalizację funkcji  $U_X(\mathbf{X}) = -\|\mathbf{X}\|_F^2$ .

Z podanych założeń wynika, że funkcja celu dla algorytmu LNMF ma postać:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \sum_{m=1}^J \sum_{n \neq m}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{mn} + \alpha_A \|\mathbf{A}\|_F^2 - \alpha_X \|\mathbf{X}\|_F^2 \\ &= D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_A \sum_{m=1}^J \sum_{n=1}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{mn} - \alpha_X \sum_{m=1}^J [\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{mm}. \quad (3.83)\end{aligned}$$

Algorytm LNMF [267] należy do grupy fundamentalnych algorytmów NMF i można go uważać za inicjatora modelu ONMF. Ze względu na założenia ortogonalności faktorów, LNMF jest w jakimś sensie podobny do metody estymacji komponentów głównych (PCA). Założenia nieujemności powodują jednak, że estymowane komponenty metodą LNMF mają zupełnie inne cechy niż estymowane metodą PCA.

W późniejszym okresie pojawiają się kolejne tego typu algorytmy. Zespół naukowy profesora Dinga [109, 112, 113, 268] opublikował multiplikatywne algorytmy minimalizujące funkcję (3.81) oraz badał związek ortogonalnego modelu NMF z algorytmem grupowania  $k$ -średnich. Z ich badań wynika, że algorytm NMF z ortogonalnymi wierszami macierzy  $\mathbf{X}$  jest równoważny metodzie  $k$ -średnich. Jeśli zaś ortogonalność jest spełniona w przybliżeniu, to ten przypadek odpowiada rozmytemu algorytmowi  $k$ -średnich (ang. *fuzzy k-means*). Istotny wkład w rozwój tej tematyki ma również zespół naukowy profesora Choi [64, 469, 470], który opublikował multiplikatywne algorytmy dla modelu ONMF, operujące na rozmaitości Stiefela. Li, Wu i Peng [274] zaproponowali multiplikatywny algorytm minimalizujący funkcję (3.80). Zbieżność algorytmów dla modelu ONMF jest badana w pracy [311]. Kolejne algorytmy dla modelu ONMF można także odnaleźć w pracach [283, 361, 448].

### 3.2.4. Korelacja faktorów

Estymacja faktorów w nieujemnej faktoryzacji macierzy odbywa się tzw. metodą uczenia bez nauczyciela. Niemniej jednak metoda NMF jest również stosowana w technikach nadzorowanego uczenia, a zwłaszcza w nadzorowanej klasyfikacji obiektów. W takim przypadku wspomaganie procesu uczenia można realizować przez wymuszanie odpowiedniej korelacji wektorów współczynników uczenia lub kodowania. Obiekty należące do tej samej klasy powinny być ze sobą bardziej

skorelowane niż obiekty pochodzące z różnych klas. Niejednoznaczność estymacji czynników w modelu NMF pozwala w jakimś stopniu na wybór określonych cech estymowanych wektorów. Regulację korelacji wektorów współczynników uczenia lub kodowania można realizować przez wprowadzenie odpowiedniego rozkładu *a priori* dla wektorów kolumnowych w czynniku  $\mathbf{X}$ , czyli rozkładu  $p(\mathbf{X})$  w funkcji celu (3.38). W konsekwencji, funkcja kary  $U_X(\mathbf{X})$  może być zdefiniowana na podstawie próbkowych macierzy kowariancji między wektorami współczynników kodowania.

Takie podejście do metody NMF zostało zapoczątkowane przez Wanga i pozostałych autorów pracy [454]. Jest ono motywowane liniową analizą dyskryminacyjną (ang. LDA – *Linear Discriminant Analysis*), opracowaną przez Fishera [132] w 1936 roku. Celem metody LDA jest znalezienie liniowej kombinacji cech, które najlepiej rozróżniają dwie lub więcej klas obiektów. W literaturze metoda LDA bywa też określana skrótowcem FLDA (ang. *Fisher LDA*), algorytm NMF zaś oparty na metodzie FLDA jest określany jako FNMF (ang. *Fisher NMF*) [454].

Podobne podejście do nadzorowanej klasyfikacji obiektów z wykorzystaniem metody NMF i LDA zaproponowali Zafeiriou i inni w [473]. W pracy tej szczegółowo omówiono problem wspomagania estymacji wektorów cech w modelu NMF za pomocą kryterium dyskryminacyjnego Fishera. W rezultacie przedstawiono algorytm DNMF (ang. *Discriminant NMF*), w którym człon kary  $\alpha_X U_X(\mathbf{X})$  jest definiowany nieco inaczej niż w FNMF. W algorytmie DNMF, człon kary  $U_X(\mathbf{X})$  określony jest na podstawie próbkowych macierzy kowariancji wewnątrzgrupowej i międzygrupowej – podobnie jak w wieloklasowej metodzie FLDA.

Niech  $\mathcal{K} = \{1, \dots, K\}$  będzie zbiorem indeksów  $K$  klas, a  $\mathcal{Z} = \{z_t\}_{t=1, \dots, T}$  zbiorem indeksów klas przyporządkowanych do  $T$  próbek, gdzie  $z_t$  oznacza indeks klasy, do której należy  $t$ -ta próbka (wektor kolumnowy) macierzy  $\mathbf{X}$ . Niech  $\mathcal{R}_k = \{t : z_t = k\}$  będzie zbiorem indeksów próbek należących do  $k$ -tej klasy. Liczebność zbioru  $\mathcal{R}_k$  oznaczono poprzez  $|\mathcal{R}_k|$ . Macierze kowariancji wewnątrzgrupowej  $\mathbf{S}_X$  i międzygrupowej  $\mathbf{S}_{\bar{X}}$  można zatem zdefiniować następująco:

$$\mathbf{S}_X = \sum_{k \in \mathcal{K}} \sum_{\rho=1}^{|\mathcal{R}_k|} (\mathbf{x}_\rho^{(k)} - \bar{\mathbf{x}}^{(k)})(\mathbf{x}_\rho^{(k)} - \bar{\mathbf{x}}^{(k)})^T, \quad (3.84)$$

$$\mathbf{S}_{\bar{X}} = \sum_{k \in \mathcal{K}} |\mathcal{R}_k| (\bar{\mathbf{x}}^{(k)} - \bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}^{(k)} - \bar{\mathbf{x}})^T, \quad (3.85)$$

gdzie  $\mathbf{x}_\rho^{(k)}$  jest  $\rho$ -tą próbką w  $k$ -tej klasie,  $\bar{\mathbf{x}}^{(k)}$  jest wektorem próbkowej średniej  $k$ -tej klasy, natomiast  $\bar{\mathbf{x}}$  jest wektorem próbkowej średniej wszystkich wektorów kolumnowych w macierzy  $\mathbf{X}$ .

Macierz  $\mathbf{S}_X$  wyraża sumaryczne rozproszenie wewnątrzgrupowe, czyli rozproszenie próbek w  $\mathbf{X}$  względem ich wartości średnich. Macierz rozproszenia międzygrupowego  $\mathbf{S}_{\bar{X}}$  określa rozproszenie centralnych punktów klas. Wektory kolumnowe w  $\mathbf{X}$  będą miały charakter dyskryminacyjny, jeśli rozproszenie wewnątrzgrupowe będzie minimalizowane, natomiast rozproszenie międzygrupowe maksymalizowane. Stąd człon kary  $\alpha_X U_X(\mathbf{X})$  w (3.38) dla tego typu algorytmów NMF ma postać:

$$\alpha_X U_X(\mathbf{X}) = \gamma \operatorname{tr}(\mathbf{S}_X) - \delta \operatorname{tr}(\mathbf{S}_{\bar{X}}), \quad (3.86)$$

gdzie  $\gamma > 0$ ,  $\delta > 0$ , macierze  $\mathbf{S}_X$  i  $\mathbf{S}_{\bar{X}}$  są modelowane odpowiednio zależnościami (3.84) i (3.85). Gdy wektorami kolumnowymi macierzy  $\mathbf{Y}$  są próbki uczące, w obu algorytmach FNMF i DNMF występują jedynie człony kary  $\alpha_X U_X(\mathbf{X})$ , a więc  $\alpha_A = 0$ .

Algorytmy FNMF i DNMF były analizowane, modyfikowane i ulepszone w kolejnych pracach [42, 239]. W pracy [502] pokazano, że człon kary w (3.86) może być wyrażony w postaci funkcji kwadratowej, co w połączeniu z funkcją odległości euklidesowej znacznie ułatwia zadanie optymalizacji. Definiując macierz  $\mathbf{M} = [m_{st}] \in \mathbb{R}^{T \times T}$  dla  $(s, t) \in \{1, \dots, T\}$ ,  $k = 1, \dots, K$ , tak aby:

$$m_{st} = \begin{cases} \frac{1}{|\mathcal{R}_k|}, & \text{jeżeli } (s, t) \in \mathcal{R}_k \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (3.87)$$

łatwo zauważyć, że macierz  $\mathbf{S}_X$  można przekształcić do postaci:

$$\mathbf{S}_X = (\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{M})(\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{M})^T = \mathbf{X}\mathbf{W}_1\mathbf{X}^T, \quad (3.88)$$

gdzie  $\mathbf{W}_1 = (\mathbf{I}_T - \mathbf{M})(\mathbf{I}_T - \mathbf{M})^T$  oraz  $\mathbf{I}_T \in \mathbb{R}^{T \times T}$  jest macierzą jednostkową.

Podobnie macierz  $\mathbf{S}_{\bar{X}}$  może być przedstawiona jako:

$$\mathbf{S}_{\bar{X}} = (\mathbf{X}\mathbf{M} - \mathbf{X}\mathbf{E}_T)(\mathbf{X}\mathbf{M} - \mathbf{X}\mathbf{E}_T)^T = \mathbf{X}\mathbf{W}_2\mathbf{X}^T, \quad (3.89)$$

gdzie  $\mathbf{E}_T = \frac{1}{T}\mathbf{1}\mathbf{1}^T$ ,  $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^T$  oraz  $\mathbf{W}_2 = (\mathbf{M} - \mathbf{E}_T)(\mathbf{M} - \mathbf{E}_T)^T$ .

Zregularyzowaną funkcję celu (3.38) dla członu kary (3.86) można zatem wyrazić następująco:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \gamma \operatorname{tr}(\mathbf{S}_X) - \delta \operatorname{tr}(\mathbf{S}_{\bar{X}}) = D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{X}^T) \\ &= D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \|\mathbf{X}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\|_F^2, \end{aligned} \quad (3.90)$$

gdzie  $\mathbf{W} = \gamma\mathbf{W}_1 - \delta\mathbf{W}_2$  jest macierzą symetryczną. Tak więc człon kary w (3.90) ma podobną postać jak w funkcji (3.72), jednakże w tym przypadku macierz

wagowa  $\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}$  wymusza określone korelacje pomiędzy wektorami kolumnowymi macierzy  $\mathbf{X}$ .

Wymuszanie cech dyskryminacyjnych problemu klasyfikacji binarnej można też realizować przez połączenie modelu NMF z klasyfikatorem wektorów podpierających (ang. SVM – *Support Vector Machine*). Das Gupta i Xiao [99] definiują funkcję kary  $U_X(\mathbf{X})$  we wzorze (3.38) na podstawie funkcji celu w SVM, zatem:

$$U_X(\mathbf{X}) = \|\mathbf{w}\|_2^2 + C \sum_{t=1}^T L(\tilde{y}_t, \mathbf{w}^T \mathbf{x}_t + \beta_0), \quad (3.91)$$

gdzie  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^J$ ,  $\forall t : \tilde{y}_t \in \{-1, 1\}$  jest indeksem klasy, do której należy próbka  $\mathbf{y}_t$ ,  $C$  jest współczynnikiem kary,  $\beta_0$  jest stałą przesunięcia, natomiast  $L(\tilde{y}_t, \phi)$  jest lokalną funkcją celu, zwykle definiowaną jako:  $L(\tilde{y}_t, \phi) = \max\{0, (1 - \phi\tilde{y}_t)^p\}$  dla  $p = 1$  lub  $p = 2$ . W ogólnym przypadku, skupienia próbek uczących mogą nie być łatwe do separacji hiperpłaszczyzną, czyli liniową funkcją w przestrzeni obserwacji. Uwzględniając zależności nieliniowe, wektor  $\mathbf{w}$  normalny do hiperpłaszczyzny dyskryminacyjnej (separującej klasy) można wyrazić w bazie funkcji nieliniowych:  $\mathbf{w} = \sum_{l=1}^T \beta_l \phi(\mathbf{x}_l)$ , gdzie  $\forall t : \phi(\mathbf{x}_t)$  jest nieliniowym przekształceniem cech, zwykle do przestrzeni o większej liczbie wymiarów. W rezultacie rzutowane dane są rzadsze, a funkcję kary (3.91) można zapisać jako:

$$\begin{aligned} U_X(\mathbf{X}) &= \frac{1}{C} \sum_{l,t=1}^T \beta_l \beta_t k(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_l) + \sum_{t=1}^T L\left(\tilde{y}_t, \sum_{l=1}^T \beta_l k(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_t)\right) \\ &= C^{-1} \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\beta} + \sum_{t=1}^T L(\tilde{y}_t, \mathbf{k}_t^T \boldsymbol{\beta}), \end{aligned} \quad (3.92)$$

gdzie  $\mathbf{K} = [\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_t] = [k(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_l)]$ ,  $\boldsymbol{\beta} = [\beta_t]$  dla  $t, l \in \{1, \dots, T\}$ , a  $k(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_l) = \langle \phi(\mathbf{x}_t), \phi(\mathbf{x}_l) \rangle$  jest funkcją jądrową względem przekształcenia  $\phi(\cdot)$ .

Połączenie modelu NMF z klasyfikatorem SVM pojawia się również w pracy [531], gdzie funkcja kary  $U_X(\mathbf{X})$  wyrażona jest przez dualną formę, czyli względem mnożników Lagrange'a funkcji ograniczających. Tak więc:

$$U_X(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \sum_{l,t=1}^T \lambda_l \lambda_t \tilde{y}_l \tilde{y}_t \mathbf{x}_l^T \mathbf{x}_t - \sum_{t=1}^T \lambda_t, \quad (3.93)$$

gdzie  $\lambda_t \geq 0$  –  $t$ -ty mnożnik Lagrange'a.

Zoidi, Tefas i Pitas [531] połączyli funkcję kary (3.93) z funkcją celu algorytmu DNMF, uzyskując kompleksowy algorytm do nadzorowanej klasyfikacji.

### 3.2.5. Lokalna niezmienniczość czynników

Celem metody NMF jest znalezienie takich nieujemnych wektorów  $\{\mathbf{x}_t\}$  w przestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$ , które dla danych wektorów bazowych  $\{\mathbf{a}_j\}$  najlepiej aproksymują topologię wektorów  $\{\mathbf{y}_t\}$  w przestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $I \gg J$ . Cai i inni [49] zakładają, że jeśli dwa dowolne punkty  $\mathbf{y}_s$  i  $\mathbf{y}_t$  położone są blisko siebie względem pewnej metryki w przestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$ , to punkty  $\mathbf{x}_s$  i  $\mathbf{x}_t$  w nowej bazie wektorów reprezentacji będą również położone blisko siebie. Stosując wybrane modele z geometrii różniczkowej i topologii, lokalną geometrię rozkładu punktów w  $\mathbb{R}_+^I$  można łatwiej analizować w pewnej podprzestrzeni  $\mathcal{M}$ , zanurzonej i niezmienniczej względem  $\mathbb{R}_+^I$ . Taka podprzestrzeń będzie nazywana rozmaitością (ang. *manifold*). Każdy punkt rozmaitości  $J$ -wymiarowej ma homeomorficzne sąsiedztwo w otwartym podzbiórze przestrzeni  $\mathbb{R}_+^I$ . Niech liniowe odwzorowanie  $\phi: \mathbf{y}_t \rightarrow \mathbf{x}_t$  dla  $t = 1, \dots, T$  będzie określone rodziną funkcji  $\phi_j: \mathbf{y}_t \rightarrow x_{jt}$  dla  $j = 1, \dots, J$ , rzutujących próbki  $\{\mathbf{y}_t\}$  na podprzestrzeń  $\text{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J\}$ . Jeśli funkcje  $\phi_j$  są gładkie w podprzestrzeni  $\mathcal{M}$ , powinny zachowywać lokalną geometrię rozkładu próbek  $\{\mathbf{y}_t\}$  w  $\mathbb{R}_+^I$ . Miarę gładkości w podprzestrzeni  $\mathcal{M}$  można wyrazić poprzez funkcjonal:

$$\|\phi\|_{\mathcal{M}}^2 = \sum_{j=1}^J \|\phi_j\|_{\mathcal{M}}^2 = \sum_{j=1}^J \int_{\mathbf{x} \in \mathcal{M}} \|\nabla_{\mathcal{M}} \phi_j\|^2 dP_X(\mathbf{x}), \quad (3.94)$$

gdzie  $P_X(\mathbf{x})$  jest funkcją gęstości rozkładu prawdopodobieństwa, z którego próbkowane są obserwacje  $\mathbf{x}$  w rozmaitości  $\mathcal{M}$ , a  $\nabla_{\mathcal{M}} \phi_j$  jest gradientem funkcji  $\phi_j$  wzdłuż  $\mathcal{M}$ .

Ponieważ zarówno rozmaitość  $\mathcal{M}$  jak i rozkład  $P_X(\mathbf{x})$  nie są dane w postaci jawnej, stąd miara (3.94) musi być estymowana empirycznie, czyli na podstawie próbkowych estymatorów. W pracach [49, 68] pokazano, że funkcjonal (3.94) może być aproksymowany do postaci dyskretnej przez strukturę grafu, którego wierzchołkami są punkty  $\{\mathbf{y}_t\}$  w  $\mathbb{R}_+^I$ , krawędziami zaś są połączenia punktów z najbliższych sąsiadów. Krawędzie modelowane są macierzą wagową  $\mathbf{W} = [w_{st}]$ , gdzie  $w_{st}$  reprezentuje krawędź łączącą  $s$ -ty wierzchołek z  $t$ -tym wierzchołkiem grafu. Macierz ta może być wyrażona na różne sposoby. Przykładowo,  $k$  najbliższych sąsiadów może być modelowane:

- binarnie:

$$w_{st} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t) \text{ lub } t \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_s) \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (3.95)$$

- jądrem gaussowskim lub jądrem przewodnictwa ciepła (ang. *heat kernel*):

$$w_{st} = \begin{cases} \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{y}_s - \mathbf{y}_t\|_2^2}{2\delta^2} \right\}, & \text{jeżeli } s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t) \text{ lub } t \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_s) \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (3.96)$$

- miarą kosinusową:

$$w_{st} = \begin{cases} \mathbf{y}_s^T \mathbf{y}_t, & \text{jeżeli } s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t) \text{ lub } t \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_s) \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (3.97)$$

gdzie  $\mathcal{N}_k(\mathbf{y})$  – zbiór indeksów (wskaźników)  $k$  najbliższych sąsiadów próbki  $\mathbf{y}$ ,  $\delta$  – współczynnik skali.

Miara gładkości (3.94) może być więc aproksymowana do postaci:

$$\begin{aligned} \|\phi\|_M^2 &\cong \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \sum_{s,t=1}^T w_{st} (\phi_j(\mathbf{y}_s) - \phi_j(\mathbf{y}_t))^2 \\ &= \sum_{j=1}^J \left( \sum_{t=1}^T (\phi_j(\mathbf{y}_t))^2 \sum_{s=1}^T w_{st} - \sum_{s,t=1}^T (\phi_j(\mathbf{y}_t)) (\phi_j(\mathbf{y}_s)) w_{st} \right) \\ &= \sum_{j=1}^J \left( \sum_{t=1}^T x_{jt}^2 d_{tt} - \sum_{s,t=1}^T x_{jt} x_{js} w_{st} \right) = \sum_{t=1}^T d_{tt} \mathbf{x}_t^T \mathbf{x}_t - \sum_{s,t=1}^T w_{st} \mathbf{x}_s^T \mathbf{x}_t \\ &= \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{D} \mathbf{X}^T) - \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{W} \mathbf{X}^T) = \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{L} \mathbf{X}^T) = \|\mathbf{X} \mathbf{L}^{\frac{1}{2}}\|_F^2, \end{aligned} \quad (3.98)$$

gdzie  $d_{tt} = \sum_{s=1}^T w_{st}$ ,  $\mathbf{D} = \text{diag}(d_{tt}) \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$ ,  $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ .

Wyglądanie funkcji  $\phi_j$  w rozmiarowości  $\mathcal{M}$  jest równoważne minimalizacji funkcji (3.98). W algorytmie GNMF (ang. *Graph regularized NMF*) [47, 49] funkcja (3.98) jest traktowana jako człon regularyzujący w funkcji celu (3.38), a zatem jej minimalizacja realizowana jest przez minimalizację zregularyzowanej funkcji celu:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X}) + \alpha_X \|\mathbf{X} \mathbf{L}^{\frac{1}{2}}\|_F^2. \quad (3.99)$$

Takie podejście równoważne jest integracji, tzw. mapy Laplace'a (ang. *Laplace eigenmaps*) [13] z funkcją celu w metodzie NMF.

W algorytmie LPNMF (ang. *Locality Preserving NMF*) [48] miara gładkości (3.94) jest wyrażona przez dywergencję  $KL$  między próbkami z danego sąsiedztwa, zatem:

$$\|\phi\|_M^2 \cong \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \sum_{s,t=1}^T w_{st} (D_{KL}(\mathbf{x}_t \| \mathbf{x}_s) + D_{KL}(\mathbf{x}_s \| \mathbf{x}_t))$$



$$= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \sum_{s,t=1}^T w_{st} \left( x_{jt} \log \frac{x_{jt}}{x_{js}} + x_{js} \log \frac{x_{js}}{x_{jt}} \right), \quad (3.100)$$

gdzie  $D_{KL}(\cdot, \cdot)$  – dywergencja  $KL$ .

Miara gładkości (3.100) jest szczególnie przydatna, gdy funkcja celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest również wyrażona przez dywergencję  $KL$ .

Algorytmy GNMF i LPNMF są szczególnie użyteczne w rozwiązywaniu zadań grupowania danych. Dla dwustronnego grupowania danych (ang. *co-clustering*), czyli dla jednoczesnego grupowania wierszy i kolumn macierzy  $\mathbf{Y}$ , Shang i inni [396] zaproponowali, aby człon modelujący lokalną niezmienniczość był zastosowany zarówno do kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ , jak i wierszy macierzy  $\mathbf{A}$ .

W klasyfikacji obiektów lepszą skutecznością charakteryzują się algorytmy hybrydowe. Wykorzystują one zarówno informację o strukturze grafu sąsiedztwa, jak i informację dyskryminacyjną o przynależności próbek uczących do danych klas. Łączenie tych dwóch rodzajów informacji może odbywać się różnymi sposobami.

Przykładowo, An, Yoo i Choi [5] definiują dwie wagowe macierze grafu:  $\mathbf{W}^{(w)} = [w_{st}^{(w)}]$  dla  $k$  najbliższych sąsiadów próbek należących do tej samej klasy oraz  $\mathbf{W}^{(z)} = [w_{st}^{(z)}]$  dla  $k$  najbliższych sąsiadów próbek należących do różnych klas. W rezultacie, człon  $\psi_1 = \frac{1}{2} \sum_{s,t=1}^T w_{st}^{(w)} \|\phi(\mathbf{y}_s) - \phi(\mathbf{y}_t)\|_2^2$  powinien być minimalizowany. Natomiast człon  $\psi_2 = \frac{1}{2} \sum_{s,t=1}^T w_{st}^{(z)} \|\phi(\mathbf{y}_s) - \phi(\mathbf{y}_t)\|_2^2$  należy maksymalizować, podobnie jak człon zależności międzyklasowej w algorytmie DNMF. Zgodnie z zależnością (3.98) macierz mapy Laplace'a ma postać:  $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(w)} - \mathbf{L}^{(z)}$ , gdzie  $\mathbf{L}^{(w)}$  modeluje graf połączeń wewnątrzklasowych,  $\mathbf{L}^{(z)}$  zaś dotyczy połączeń międzyklasowych. Niestety tak wyznaczona macierz  $\mathbf{L}$  może nie być dodatnio określona, co komplikuje proces optymalizacji.

Guan i inni [160] zauważyli, że funkcję  $U_X(\mathbf{X})$  we wzorze (3.38), można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned} U_X(\mathbf{X}) &= \psi_1 - \psi_2 = \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{L}^{(w)}\mathbf{X}^T) - \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{L}^{(z)}\mathbf{X}^T) \\ &= \text{tr} \left( \mathbf{X} \left( (\tilde{\mathbf{L}}^{(z)})^{-\frac{1}{2}} \right)^T \mathbf{L}^{(w)} \left( \tilde{\mathbf{L}}^{(z)} \right)^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}^T \right), \end{aligned} \quad (3.101)$$

gdzie  $\tilde{\mathbf{L}}^{(z)} = \mathbf{L}^{(z)} + \xi \mathbf{I}$  oraz  $\xi > 0$  jest stałą o małej wartości, tak aby macierz  $\tilde{\mathbf{L}}^{(z)}$  była dodatnio określona. W algorytmie MD-NMF (ang. *Manifold regularized Discriminative NMF*) [160], oprócz członu (3.101), przyjęto również człony wymuszające ortogonalność wektorów bazowych w macierzy  $\mathbf{A}$  oraz człon wymuszający

gładkość wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{X}$ . W konsekwencji, zregularyzowana funkcja celu w algorytmie MD-NMF ma postać:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \frac{\alpha}{2} \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{E}_J\mathbf{A}^T) + \frac{\beta}{2} \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T) + \frac{\gamma}{2} U_X(\mathbf{X}), \quad (3.102)$$

gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest przez uogólnioną dywergencję  $KL$ ,  $\alpha, \beta, \gamma \geq 0$ ,  $\mathbf{E}_J = \mathbf{1}\mathbf{1}^T - \mathbf{I}_J$ ,  $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^J$ , natomiast  $U_X(\mathbf{X})$  jest podana w (3.101).

Regularyzacja zadań optymalizacji w metodzie NMF za pomocą struktury grafu  $k$  najbliższych sąsiadów jest również rozważana w innych pracach [466, 522]. Zhang i inni [519] badają lokalną niezmienniczość czynników w modelu NMF w kontekście rozpoznawania obrazów twarzy. Ich podejście ma na celu znalezienie takiego przekształcenia z niskowymiarowej przestrzeni różnorodności do wysokowymiarowej przestrzeni obserwacji, aby przekształcenie to zachowywało strukturę lokalnej topologii.

Gu i Zhou [158] zakładają, że każdy punkt obserwacji (wektor kolumnowy w macierzy  $\mathbf{Y}$ ) może być aproksymowany przez liniową kombinację  $k$  wektorów obserwacji z jego najbliższego sąsiedztwa, zatem:

$$\min_{m_{st}} \left\| \mathbf{y}_t - \sum_{s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t)} m_{st} \mathbf{y}_s \right\|_2^2, \quad \text{p.o.} \quad \sum_{s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t)} m_{st} = 1, \quad (3.103)$$

oraz  $m_{st} = 0$  dla  $s \notin \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t)$ . Macierz  $\mathbf{M} = [m_{st}] \in \mathbb{R}^{T \times T}$  jest macierzą współczynników liniowej kombinacji wektorów  $k$  najbliższych sąsiadów. Używając takich samych lub podobnych współczynników liniowej kombinacji, każdy wektor w niskowymiarowej przestrzeni różnorodności może być zrekonstruowany, gdy znane są wskaźniki jego  $k$  najbliższych sąsiadów. W rezultacie funkcja  $U_X(\mathbf{X})$  ma postać:

$$\begin{aligned} U_X(\mathbf{X}) &= \sum_{t=1}^T \left\| \mathbf{x}_t - \sum_{s \in \mathcal{N}_k(\mathbf{y}_t)} m_{st} \mathbf{x}_s \right\|_2^2 \\ &= \text{tr}(\mathbf{X}(\mathbf{I} - \mathbf{M})(\mathbf{I} - \mathbf{M})^T \mathbf{X}^T) = \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T), \end{aligned} \quad (3.104)$$

gdzie macierz  $\mathbf{L}$  ma podobną interpretację jak macierz mapy Laplace'a.

Guan i inni [161] definiują człon kary  $U_X(\mathbf{X})$  na podstawie, tzw. struktury wyśrodkowywania łat (ang. PAF – *Patch Alignment Framework*) [520]. Metoda PAF łączy w sobie kilka znanych algorytmów redukcji wymiarowości modelu: FLDA, mapy Laplace'a, LLE (ang. *Locally Linear Embedding*) [383], ISOMAP

[426] oraz LPP (ang. *Locality Preserving Projections*) [177]. W metodzie PAF dla każdej próbki  $\mathbf{y}_t$  z macierzy obserwacji  $\mathbf{Y}$  definiuje się tzw. łąkę:

$$\mathbf{Y}^{(t)} = \left[ \mathbf{y}_t, \mathbf{y}_{t^1}, \dots, \mathbf{y}_{t^{k_1}}, \mathbf{y}_{t_1}, \dots, \mathbf{y}_{t_{k_2}} \right] \in \mathbb{R}_+^{I \times (k_1 + k_2 + 1)}, \quad (3.105)$$

gdzie próbki  $\{\mathbf{y}_{t^1}, \dots, \mathbf{y}_{t^{k_1}}\}$  stanowią zbiór  $k_1$  najbliższych sąsiadów próbki  $\mathbf{y}_t$ , należących do tej samej klasy co próbka  $\mathbf{y}_t$ , natomiast zbiór  $\{\mathbf{y}_{t_1}, \dots, \mathbf{y}_{t_{k_2}}\}$  zawiera  $k_2$  najbliższych sąsiadów próbki  $\mathbf{y}_t$ , które nie należą do klasy próbki  $\mathbf{y}_t$ . Analogicznie, zbiór  $\mathbf{X}^{(t)} = \left[ \mathbf{x}_t, \mathbf{x}_{t^1}, \dots, \mathbf{x}_{t^{k_1}}, \mathbf{x}_{t_1}, \dots, \mathbf{x}_{t_{k_2}} \right] \in \mathbb{R}_+^{J \times (k_1 + k_2 + 1)}$  stanowi łąkę dla próbki  $\mathbf{x}_t$ . Lokalna strategia wyśrodkowywania łąty  $\mathbf{X}^{(t)}$  ma na celu znalezienie takiej macierzy  $\mathbf{X}^{(t)}$ , dla której spełnione jest zadanie:

$$\min_{\mathbf{X}} \left\{ \text{tr} \left( \mathbf{X}^{(t)} \mathbf{L}^{(t)} (\mathbf{X}^{(t)})^T \right) \right\}, \quad (3.106)$$

gdzie  $\mathbf{L}^{(t)}$  jest macierzą kodującą informację dyskryminacyjną i lokalną topologię łąty  $\mathbf{X}^{(t)}$ . Każda łąta  $\mathbf{X}^{(t)}$  ma własny układ współrzędnych. Zbiór łąt  $\{\mathbf{X}^{(t)}\}$  może być jednak reprezentowany względem globalnego układu współrzędnych  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T]$ , zakładając przekształcenie  $\mathbf{X}^{(t)} = \mathbf{X} \mathbf{S}^{(t)}$ , gdzie  $\mathbf{S}^{(t)}$  jest macierzą selekcji współrzędnych dla  $t$ -tej łąty. Globalna strategia wyśrodkowywania łąt sprowadza się do rozwiązania następującego zadania:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^* &= \arg \min_{\mathbf{X}} \sum_{t=1}^T \text{tr} \left( \mathbf{X}^{(t)} \mathbf{L}^{(t)} (\mathbf{X}^{(t)})^T \right) \\ &= \arg \min_{\mathbf{X}} \sum_{t=1}^T \text{tr} \left( \mathbf{X} \mathbf{S}^{(t)} \mathbf{L}^{(t)} (\mathbf{S}^{(t)})^T \mathbf{X}^T \right) \\ &= \arg \min_{\mathbf{X}} \text{tr} \left( \mathbf{X} \left( \sum_{t=1}^T \mathbf{S}^{(t)} \mathbf{L}^{(t)} (\mathbf{S}^{(t)})^T \right) \mathbf{X}^T \right) \\ &= \arg \min_{\mathbf{X}} \text{tr} (\mathbf{X} \mathbf{L} \mathbf{X}^T), \end{aligned} \quad (3.107)$$

gdzie  $\mathbf{L} = \sum_{t=1}^T \mathbf{S}^{(t)} \mathbf{L}^{(t)} (\mathbf{S}^{(t)})^T$ .

W algorytmie NPAF (ang. *Nonnegative PAF*) [161] zadanie (3.107) jest zintegrowane z zadaniem NMF przez człon funkcji kary w (3.38). Tak więc  $U_X(\mathbf{X}) = \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{L} \mathbf{X}^T)$ . Podobnie jak w algorytmach GNMF, DNMF, czy MD-NMF, macierz

mapy Laplace'a  $\mathbf{L}$  jest określana na podstawie przyjętych cech faktorów. W podejściu hybrydowym, inspirowanym algorytmem MD-NMF [160], macierz  $\mathbf{L}$  ma postać:  $\mathbf{L} = \left( (\tilde{\mathbf{L}}^{(z)})^{-\frac{1}{2}} \right)^T \mathbf{L}^{(w)} \left( \tilde{\mathbf{L}}^{(z)} \right)^{-\frac{1}{2}}$ , gdzie

$$\mathbf{L}^{(w)} = \sum_{t=1}^T \mathbf{S}_{(w)}^{(t)} \mathbf{L}_{(w)}^{(t)} (\mathbf{S}_{(w)}^{(t)})^T, \quad \tilde{\mathbf{L}}^{(z)} = \mathbf{L}^{(z)} + \xi \mathbf{I} = \sum_{t=1}^T \mathbf{S}_{(z)}^{(t)} \mathbf{L}_{(z)}^{(t)} (\mathbf{S}_{(z)}^{(t)})^T + \xi \mathbf{I},$$

$$\mathbf{L}_{(w)}^{(t)} = \begin{bmatrix} k_1 & -\mathbf{e}_{(w)}^T \\ \mathbf{e}_{(w)} & \text{diag}(\mathbf{e}_{(w)}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_{(z)}^{(t)} = \begin{bmatrix} k_2 & -\mathbf{e}_{(z)}^T \\ \mathbf{e}_{(z)} & \text{diag}(\mathbf{e}_{(z)}) \end{bmatrix}, \quad (3.108)$$

dla  $\mathbf{e}_{(w)} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^{k_1}$  i  $\mathbf{e}_{(z)} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^{k_2}$ . Macierze selekcji  $\mathbf{S}_{(w)}^{(t)}$  i  $\mathbf{S}_{(z)}^{(t)}$  określają grafy połączeń najbliższych sąsiadów, odpowiednio dla wewnątrzklasowych i międzyklasowych próbek. Podobnie jak dla mapy Laplace'a, macierz  $\mathbf{L}$  może być przekształcona do postaci:  $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ . Jednak w odróżnieniu od GNMF, dla NPAF uzyskuje się:  $\mathbf{D} = \left( (\mathbf{L}^{(z)})^{-\frac{1}{2}} \right)^T \tilde{\mathbf{D}}_{(w)} \left( \mathbf{L}^{(z)} \right)^{-\frac{1}{2}}$  oraz  $\mathbf{W} = \left( (\mathbf{L}^{(z)})^{-\frac{1}{2}} \right)^T \mathbf{S}_{(w)} \left( \mathbf{L}^{(z)} \right)^{-\frac{1}{2}}$ , gdzie  $\tilde{\mathbf{D}}_{(w)} = \mathbf{D}_{(w)} + \xi \mathbf{I} = \text{diag}(\mathbf{e}_T^T \mathbf{W} + \xi)$ . Ponieważ macierz  $\mathbf{L}^{(z)}$  należy do klasy  $M$ -macierzy i jest dodatnio określona, więc  $(\mathbf{L}^{(z)})^{-\frac{1}{2}}$  jest macierzą nieujemną. Podobnie symetryczność macierzy  $\mathbf{L}^{(z)}$  implikuje symetryczność macierzy  $(\mathbf{L}^{(z)})^{-\frac{1}{2}}$ , a zatem macierze  $\mathbf{D}$  i  $\mathbf{W}$  są symetryczne i nieujemne.

Reasumując, w wielu algorytmach NMF (zwłaszcza z wymuszaniem lokalnej niezmienniczości) funkcję celu można przedstawić w postaci:

$$\psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y} \parallel \mathbf{A}\mathbf{X}) + \frac{\alpha_A}{2} \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{L}_A \mathbf{A}) + \frac{\alpha_X}{2} \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{L}_X \mathbf{X}^T), \quad (3.109)$$

gdzie  $\alpha_A, \alpha_X \geq 0$  są parametrami regularyzującymi, a macierze  $\mathbf{L}_A \in \mathbb{R}^{I \times I}$  oraz  $\mathbf{L}_X \in \mathbb{R}^{T \times T}$  są symetrycznymi i dodatnio określonymi macierzami wymuszającymi określone cechy kolumn macierzy  $\mathbf{A}$  i wierszy macierzy  $\mathbf{X}$ . Jeśli funkcja  $D(\mathbf{Y} \parallel \mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest przez odległość euklidesową, to funkcja celu w (3.109) jest kwadratowa. Minimalizacja takiej funkcji przy ograniczeniach nieujemności może być realizowana różnymi algorytmami numerycznymi.

Aby zastosować metody programowania kwadratowego do estymacji fatora  $\mathbf{A}$ , funkcję celu w (3.109) przekształcono do postaci:

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{L}_A^{\frac{1}{2}} \mathbf{A}\|_F^2 + \text{const} \\
&= \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - (\mathbf{X}^T \otimes \mathbf{I}_I) \mathbf{a}\|_2^2 + \frac{\alpha_A}{2} \|(\mathbf{I}_J \otimes \mathbf{L}_A^{\frac{1}{2}}) \mathbf{a}\|_2^2 + \text{const} \\
&= \frac{1}{2} \mathbf{a}^T \mathbf{Q}_A \mathbf{a} + \mathbf{c}_A^T \mathbf{a} + \text{const}, \tag{3.110}
\end{aligned}$$

gdzie  $\mathbf{y} = \text{vec}(\mathbf{Y}) \in \mathbb{R}_+^{IT}$ ,  $\mathbf{a} = \text{vec}(\mathbf{A}) \in \mathbb{R}_+^{IJ}$ ,  $\mathbf{Q}_A = \mathbf{X}\mathbf{X}^T \otimes \mathbf{I}_I + \alpha_A(\mathbf{I}_J \otimes \mathbf{L}_A) \in \mathbb{R}_+^{IJ \times IJ}$  oraz  $\mathbf{c}_A = -\text{vec}(\mathbf{Y}\mathbf{X}^T) \in \mathbb{R}^{IJ}$ .

Podobnie dla estymacji faktora  $\mathbf{X}$ , funkcję celu (3.109) można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \frac{\alpha_X}{2} \|\mathbf{X}\mathbf{L}_X^{\frac{1}{2}}\|_F^2 + \text{const} \\
&= \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}) \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\alpha_X}{2} \|(\mathbf{L}_X^{\frac{1}{2}} \otimes \mathbf{I}_J) \mathbf{x}\|_2^2 + \text{const} \\
&= \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q}_X \mathbf{x} + \mathbf{c}_X^T \mathbf{x} + \text{const}, \tag{3.111}
\end{aligned}$$

gdzie  $\mathbf{x} = \text{vec}(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}_+^{JT}$ ,  $\mathbf{Q}_X = \mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{L}_X \otimes \mathbf{I}_J \in \mathbb{R}^{JT \times JT}$  oraz  $\mathbf{c}_X = -\text{vec}(\mathbf{A}^T \mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{JT}$ .



## 4. Algorytmy

Zadanie minimalizacji funkcji celu (3.38) ze względu na nieujemne faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  można realizować za pomocą różnych algorytmów optymalizacji numerycznej. Wybór właściwego algorytmu do danego zadania z reguły nie jest łatwy, ponieważ zależy od wielu czynników. Z pewnością w wyborze tym należy uwzględnić funkcję celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , czynniki kary  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$ , a także szybkość zbieżności danego algorytmu. Oprócz tych czynników istotne znaczenie ma też rodzaj problemu (faktoryzowalny lub nefaktoryzowalny), jednoznaczność lub niejednoznaczność faktoryzacji, rozkład i moc zaburzeń modelu, stopień rzadkości oraz wymiar czynników. Można zatem stwierdzić, że wybór algorytmu optymalizacji znacząco zależy od danych poddawanych faktoryzacji, a zatem od danego zastosowania.

W rozdziale tym omówiono wybrane algorytmy optymalizacji numerycznej, które są stosowane do różnych zadań zarówno modelu NMF, jak i NTF. Są to algorytmy, którymi można estymować (aktualizować) faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w algorytmie naprzemiennej estymacji znormalizowanych czynników (kroki 4 i 7 w algorytmie 2). Funkcja `AlgorytmA` w kroku 4 realizuje aktualizację czynnika  $\mathbf{A}$  w  $n$ -tym kroku iteracyjnym ( $n = 1, 2, \dots$ ), zatem zwraca pewną aproksymację rozwiązania następującego zadania:

$$\mathbf{A}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n-1)}), \quad (4.1)$$

gdzie  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n-1)})$  – funkcja celu wyrażoną przez (3.38) dla zmiennej  $\mathbf{X}$  przybierającej wartości z  $\mathbf{X}^{(n-1)}$ .

Analogicznie, funkcja `AlgorytmX` w kroku 7 aproksymuje rozwiązanie zadania:

$$\mathbf{X}^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{X} \geq \mathbf{0}} \Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}), \quad (4.2)$$

gdzie  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(n)}$  w  $n$ -tym kroku iteracyjnym.

Zadania (4.1) i (4.2) można rozwiązywać różnymi algorytmami optymalizacji numerycznej, zwłaszcza algorytmami optymalizacji nieliniowej z ograniczeniami

nieujemności. Są to zwykle algorytmy iteracyjne, w których należy określić przybliżenie początkowe (inicjalizacja) oraz kryterium zatrzymania procesu iteracyjnego. W dalszej części pracy, kroki iteracyjne tych algorytmów nazwano *iteracjami wewnętrznymi*, a kroki iteracyjne algorytmu 2 określono mianem *iteracji naprzemiennych* lub *iteracji zewnętrznych*.

Problem doboru przybliżenia początkowego dla czynników  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  występuje zarówno w algorytmie 2, jak również w iteracyjnych algorytmach aproksymacji zadań (4.1) i (4.2). Metody doboru czynników  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  omówiono w rozdziale 4.1. Natomiast, jeśli nie określono inaczej, przybliżeniem początkowym dla zadania (4.1) jest aproksymacja  $\mathbf{A}^{(n-1)}$ , a dla zadania (4.2) przybliżeniem tym jest aproksymacja  $\mathbf{X}^{(n-1)}$ .

Kryteria zatrzymania zarówno procesu iteracji zewnętrznych, jak i procesów iteracji wewnętrznych przedstawiono w rozdziale 4.3.

Z założenia  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = D(\mathbf{Y}^T||\mathbf{X}^T\mathbf{A}^T)$  wynika, że jeśli  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = D_A(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = D_X(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  w algorytmie (1.16) oraz pomijając funkcje kary  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  w (3.38), zadania estymacji czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są symetryczne ze względu na ich argumenty. Symetryczność oznacza, że stosując dany algorytm do estymacji macierzy  $\mathbf{X}$  w układzie równań  $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ , macierz  $\mathbf{A}$  może być również estymowana tym samym algorytmem, stosując go do transponowanego układu równań:  $\mathbf{X}^T\mathbf{A}^T = \mathbf{Y}^T$ . Co więcej, jeśli  $U_A(\mathbf{A}) = \|\mathbf{L}_A\mathbf{A}\|_F^2$  i  $U_X(\mathbf{X}) = \|\mathbf{X}\mathbf{L}_X\|_F^2$  oraz  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = D_A(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) = D_X(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , to zadania (4.1) i (4.2) wykazują także podobne cechy symetryczności. Mogą być więc estymowane tym samym algorytmem optymalizacji. Z podanych założeń wynika, że jeśli krok 7 w algorytmie 2 realizowany jest według funkcji:  $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n-1)})$ , to krok 4 tego algorytmu (aktualizację macierzy  $\mathbf{A}$ ) można wykonać według następującej reguły aktualizacji:

$$\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \left( \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}^T, (\mathbf{X}^{(n-1)})^T, (\mathbf{A}^{(n-1)})^T) \right)^T. \quad (4.3)$$

Ponieważ przypadek symetryczności zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy ze względu na ich argumenty jest dość częsty w zastosowaniach praktycznych, w dalszej części tego rozdziału rozważania ograniczono głównie do algorytmów numerycznych aproksymujących zadanie (4.2). Założono bowiem, że zadanie (4.1) może być rozwiązane za pomocą reguły (4.3). W przypadkach, w których reguła symetryczności argumentów nie obowiązuje lub opis procedury aktualizacji czynnika  $\mathbf{A}$  jest konieczny, podano pełen opis algorytmów optymalizacji (zarówno dla  $\mathbf{A}$  jak i  $\mathbf{X}$ ). Należy też zauważyć, że liczba argumentów wejściowych dla funkcji  $\text{AlgorytmX}$  w kroku 4 może być inna niż w kroku 7, nawet dla zadań symetrycz-



nych. Różnica ta może wynikać, np. z przyjęcia członów kary, różnych dla każdego z estymowanych czynników.

## 4.1. Inicjalizacja czynników

Inicjalizacja czynników w metodzie NMF oraz w wybranych modelach NTF, np. w nieujemnej dekompozycji Tuckera, odgrywa istotną rolę ze względu na zbieżność procesu iteracji naprzemiennych. Jeśli rozważany problem ma jednoznaczną faktoryzację (według definicji 3.1), inicjalizacja jest istotna tylko ze względu na szybkość procesu zbieżności. Gdy dodatkowo problem nie ma jednoznaczej faktoryzacji, wówczas wybór przybliżenia początkowego może mieć znaczący wpływ na finalny wynik estymacji czynników. Wynika to z przyjętego schematu naprzemiennych optymalizacji funkcji celu. Dowolna funkcja celu wyrażona w postaci  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , która jest ściśle wypukła względem jednego zbioru argumentów  $\{a_{ij}\}$  albo  $\{x_{jt}\}$ , nie zachowuje swojej właściwości wypukłości ze względu na łączny zbiór argumentów. Oznacza to, że nawet funkcja odległości euklidesowej w (2.4), która jest wypukła ze względu na argument  $\mathbf{A}$  albo  $\mathbf{X}$ , może mieć wiele lokalnych minimów w łącznym zbiorze rozwiązań dopuszczalnych. Minimalizacja takiej funkcji według algorytmu 2 może prowadzić do zbieżności lokalnej, tzn. do punktu stacjonarnej funkcji celu, który należy do zbioru rozwiązań dopuszczalnych, ale nie jest punktem optymalnego minimum. Włączenie odpowiedniej informacji *a priori* o cechach poszukiwanego rozwiązania (rozdz. 3.2), wybór odpowiedniego algorytmu optymalizacji funkcji celu oraz wybór odpowiedniego przybliżenia początkowego są bardzo istotne w celu zmniejszenia ryzyka zatrzymywania się procesu zbieżności w niekorzystnym punkcie stacjonarności funkcji celu.

Tematyka inicjalizacji czynników w metodzie NMF jest omawiana w wielu pracach, np. [34, 39, 89, 125, 207, 230, 249, 378, 453, 457, 458, 465, 472, 490, 521]. W dalszej części scharakteryzowano wybrane metody inicjalizacji czynników, które mogą być szczególnie przydatne w rozważanych zastosowaniach (rozdział 7) i mogą też być wykorzystane w pewnych obszarach dekompozycji tensorów.

### 4.1.1. Inicjalizacja losowa

Typowe i zarazem najprostsze podejście do inicjalizacji czynników zakłada, że przybliżenia początkowe dla obu czynników są generowane z rozkładów równomiernych:

$$\mathbf{A}^{(0)} = [a_{ij}^{(0)}], \quad \mathbf{X}^{(0)} = [x_{jt}^{(0)}], \quad \text{gdzie } \forall i, j, t : a_{ij}^{(0)}, x_{jt}^{(0)} \sim \mathcal{U}[0, 1]. \quad (4.4)$$

Jednak takie podejście niesie ze sobą dość duże ryzyko, zarówno zbyt powolnej zbieżności, jak i zatrzymywania się procesu naprzemiennych optymalizacji w nieoptymalnych punktach ekstremalnych. Ryzyko to można minimalizować, jeśli inicjalizacja losowa odbywa się wielokrotnie, a następnie spośród zbioru testowanych przybliżeń początkowych zostaną wybrane te inicjalizatory, dla których proces zbieżności iteracji naprzemiennych spełnia dane kryterium selekcji.

W wielostartowej inicjalizacji losowej (ang. *multi-start random initialization*) [89] kryterium selekcji określono na podstawie szybkości zbieżności procesu naprzemiennych iteracji w jego fazie początkowej. Założono, że przybliżenie początkowe, dla którego uzyskano najmniejszą wartość funkcji celu po wykonaniu ustalonej liczby iteracji  $N$ , daje największe szanse na uzyskanie optymalnej faktoryzacji. Kryterium to jest motywowane domniemaniem, że szybsza redukcja wartości funkcji celu odbywa się wzdłuż bardziej stromego kierunku poprawy, a zatem kierunku wyznaczającego głębsze minimum funkcji celu. W przeciwnym razie, powolna zbieżność w początkowej fazie aktualizacji faktorów może oznaczać, że proces zbieżności podąża w kierunku płytkiego lokalnego minimum.

Algorytm 3 przedstawia wielostartową inicjalizację losową. Funkcja  $[\mathbf{A}_k, \mathbf{X}_k] \leftarrow \text{nmf\_algorithm}(\mathbf{A}_k^{(0)}, \mathbf{X}_k^{(0)}, J, N)$  w kroku 3 może być realizowana dowolnym algorytmem NMF. W zależności od przyjętego algorytmu parameter  $N$  może mieć różne wartości, ale zwykle  $N = 10$ .

W pracy [89] pokazano, że algorytm 3 jest szczególnie efektywny w połączeniu z wielowarstwowym modelem NMF [78], zwłaszcza dla danych rzadkich i słabo nadmiarowych.

---

### Algorytm 3. Wielostartowa inicjalizacja losowa

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $K$  – liczba restartów,  $N$  – liczba początkowych kroków naprzemiennych,  
**Wyjście:**  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – początkowe przybliżenia faktorów

- 1 **for**  $k = 1, \dots, K$  **do**
- 2     **Inicjalizacja:** Inicjalizuj losowo  $\mathbf{A}_k^{(0)}$  i  $\mathbf{X}_k^{(0)}$  według reguły (4.4);
- 3      $[\mathbf{A}_k, \mathbf{X}_k] \leftarrow \text{nmf\_algorithm}(\mathbf{A}_k^{(0)}, \mathbf{X}_k^{(0)}, J, N)$ ;     // Aktualizacje
- 4      $d_k = D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}_k \mathbf{X}_k)$ ;
- 5      $k_{\min} = \arg \min_{1 \leq k \leq K} d_k$ ;
- 6 **Ustaw:**  $\mathbf{A}^{(0)} \leftarrow \mathbf{A}_{k_{\min}}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \leftarrow \mathbf{X}_{k_{\min}}$

---

Usprawnione wersje inicjalizacji losowej zaproponowano też w pracy [249]. W jednej wersji macierz  $\mathbf{A}^{(0)}$  jest utworzona z uśrednienia pewnej liczby losowo wybranych kolumn macierzy  $\mathbf{Y}$ , tak aby liczba uśrednionych wektorów wynosiła  $J$ . W innej wersji, kolumny macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$  są wybierane spośród tych wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{Y}$ , które mają największe długości w metryce  $l_2$ . Są to zwykle wektory o najmniejszej rzadkości. Te rodzaje inicjalizacji pozwalają uzyskać trochę lepsze wyniki faktoryzacji niż kompletnie losowa inicjalizacja, zwłaszcza dla danych o dużej rzadkości.

#### 4.1.2. Inicjalizacja wektorami centroidów

Inicjalizację faktorów w metodzie NMF można też realizować za pomocą metod grupowania danych, np. metodą  $k$ -średnich (ang.  $k$ -means) [238, 244]. Wild i pozostali autorzy prac [457, 458] zaproponowali, aby wektory bazowe w  $\mathbf{A}^{(0)}$  były wektorami centroidów, otrzymanymi za pomocą sferycznej metody  $k$ -średnich. Ideę tę wyrażono algorytmem 4. Wektory centroidów  $\{\mathbf{c}_j\}$  są to wektory wskazujące centralne punkty skupień, zwane też środkami skupień obserwowanych danych. Wektory  $J$  centroidów dla grupy wektorów obserwacji  $\{\mathbf{y}_t\}$  wyszukiwane są na

---

#### Algorytm 4. Inicjalizacja sferyczną metodą $k$ -średnich

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz obserwacji,  $J$  – rząd faktoryzacji,  
**Wyjście:**  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  – początkowe przybliżenie dla fatora  $\mathbf{A}$ ,

- 1 **Inicjalizacja:** Inicjalizuj losowo  $J$  centroidów  $\{\mathbf{c}_j^{(0)}\}$ , gdzie  $j = 1, \dots, J$ ;  
 $\bar{\mathbf{y}}_t = \frac{\mathbf{y}_t}{\|\mathbf{y}_t\|_2}$  dla  $t = 1, \dots, T$ ; // Normalizacja do jednost. normy  $l_2$
- 2 Ustaw  $k = 0$ ;
- 3 **repeat**
- 4      $k \leftarrow k + 1$ ;
- 5     Oblicz:  $d_{tj}^{(k)} = \bar{\mathbf{y}}_t^T \mathbf{c}_j^{(k-1)}$ ; // Kosinusowa miara podobieństwa
- 6      $\pi_j^{(k)} = \left\{ t : d_{tj}^{(k)} = \hat{d}_t^{(k)}, \text{ gdzie } \hat{d}_t^{(k)} = \max_{l=1, \dots, J} d_{tl}^{(k)} \right\}$ ; // Podział
- 7      $\mathbf{c}_j^{(k)} = \frac{\sum_{t \in \pi_j^{(k)}} \mathbf{y}_t}{\|\sum_{t \in \pi_j^{(k)}} \mathbf{y}_t\|_2}$ ; // Aktualizacja centroidów
- 8 **until** Kryterium stopu spełnione;
- 9 Ustaw:  $\mathbf{A}^{(0)} = [\hat{\mathbf{c}}_1, \dots, \hat{\mathbf{c}}_J]$ , gdzie  $\hat{\mathbf{c}}_j$  jest estymatorem  $j$ -tego centroidu

---

podstawie kosinusowej miary podobieństwa (ang. *Cosine Similarity*), wyrażonej następująco:

$$\cos(\angle(\bar{\mathbf{y}}_t, \mathbf{c}_j)) = \bar{\mathbf{y}}_t^T \mathbf{c}_j, \quad (4.5)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{y}}_t$  jest  $t$ -tym wektorem obserwacji, znormalizowanym do jednostkowej normy  $l_2$ , a  $\mathbf{c}_j$  jest znormalizowanym wektorem  $j$ -tego centroidu. Wynika stąd, że końce wektorów  $\bar{\mathbf{y}}_t$  położone są na sferze o jednostkowym promieniu, natomiast podobieństwo między wektorami  $\bar{\mathbf{y}}_t$  i  $\mathbf{c}_j$  może być wyrażone przez miarę kąta pomiędzy tymi wektorami. Miarę (4.5) wykorzystano w kroku 5 algorytmu 4. W kroku 6 wyznaczany jest zbiór  $\pi_j^{(k)}$  zawierający indeksy wektorów  $\{\mathbf{y}_t\}$  przypisanych do  $j$ -tej grupy, gdzie  $j = 1, \dots, J$ . W kolejnym kroku aktualizowane są wektory centroidów.

Algorytm 4 jest efektywniejszy niż losowa metoda inicjalizacji. Wymaga jednak dość dużego nakładu obliczeniowego oraz realizuje niewypukłą optymalizację. Nie gwarantuje zatem znalezienia optymalnych wektorów przybliżenia początkowego.

Ulepszoną wersję algorytmu 4 zaproponowano w pracy [465], gdzie miara podobieństwa między wektorami określona jest przez dywergencję *KL*. Metodę tę wyrażono algorytmem 5. To podejście jest geometrycznie równoważne znajdowaniu wektorów centroidów, które są kolinearne z promieniami ekstremalnymi stożka wielościanowego, określonego poprzez zbiór wektorów obserwacji  $\{\mathbf{y}_t\}$ . Podobnie jak inicjalizacja sferyczną metodą  $k$ -średnich, metoda ta wykazuje lepsze właściwości niż inicjalizacja losowa, ale również jest wrażliwa na wybór początkowych wektorów  $\{\mathbf{c}_j^{(0)}\}$ .

Kim i Choi [230] zaproponowali inicjalizację z zastosowaniem hierarchicznego grupowania. W metodzie tej estymowana jest macierz  $\mathbf{X}^{(0)}$  poprzez hierarchiczne grupowanie wierszy macierzy  $\mathbf{Y}$ . W kroku inicjalizacyjnym wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  dzielone są na  $I$  grup, a następnie dla każdej dowolnej pary grup obliczany jest współczynnik *CRO* (ang. *Closeness to Rank-One*):

$$CRO(\mathbf{Y}^{(m,n)}) = \frac{\sigma_1^2}{\sum_{r=1}^R \sigma_r^2} = \frac{\sigma_1^2}{\|\mathbf{Y}^{(m,n)}\|_F^2}, \quad (4.6)$$

gdzie  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_R \geq 0$  są wartościami osobliwymi macierzy

$$\mathbf{Y}^{(m,n)} = \begin{bmatrix} \mathbf{Y}^{(m)} \\ \mathbf{Y}^{(n)} \end{bmatrix},$$

$R$  – rząd macierzy  $\mathbf{Y}^{(m,n)}$  oraz  $\mathbf{Y}^{(m)}$  i  $\mathbf{Y}^{(n)}$  są macierzami zawierającymi wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  odpowiednio przypisane do  $m$ -tej i  $n$ -tej grupy. Następnie

---

**Algorytm 5. Inicjalizacja strukturyzowaną metodą  $k$ -średnich**

---

- Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz obserwacji,  $J$  – rząd faktoryzacji,  
**Wyjście:**  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  – początkowe przybliżenie dla faktora  $\mathbf{A}$
- 1 **Inicjalizacja:** Inicjalizuj losowo  $J$  centr.  $\{\mathbf{c}_j^{(0)}\}$ , gdzie  $j = 1, \dots, J$ ;  $k = 0$   
 $\bar{\mathbf{y}}_t = \frac{\mathbf{y}_t}{\|\mathbf{y}_t\|_1}$  dla  $t = 1, \dots, T$ ; // Normalizacja do jednost. normy  $l_1$
  - 2 **repeat**
  - 3      $k \leftarrow k + 1$ ;
  - 4      $d_{tj}^{(k)} = \sum_{i=1}^I \left( \bar{y}_{it} \ln \left( \frac{\bar{y}_{it}}{c_{ij}^{(k-1)}} \right) - \bar{y}_{it} + c_{ij}^{(k-1)} \right)$ ; // Dywergencja KL
  - 5      $\pi_j^{(k)} = \left\{ t : d_{tj}^{(k)} = \hat{d}_t^{(k)}, \text{ gdzie } \hat{d}_t^{(k)} = \min_{l=1, \dots, J} d_{tl}^{(k)} \right\}$ ; // Podział
  - 6      $\mathbf{c}_j^{(k)} = \frac{\sum_{t \in \pi_j^{(k)}} \mathbf{y}_t}{\|\sum_{t \in \pi_j^{(k)}} \mathbf{y}_t\|_1}$ ; // Aktualizacja centroidów
  - 7 **until** Kryterium stopu spełnione;
  - 8 Ustaw:  $\mathbf{A}^{(0)} = [\hat{\mathbf{c}}_1, \dots, \hat{\mathbf{c}}_J]$ , gdzie  $\hat{\mathbf{c}}_j$  jest estymatorem  $j$ -tego centroidu
- 

wyszukiwana jest taka para grup, dla której współczynnik  $CRO$  w (4.6) ma największą wartość (bliską jedności). Grupy te łączone są w jedną grupę, dla której obliczane są współczynniki  $CRO$  w stosunku do pozostałych grup. Iteracyjna procedura łączenia grup powtarzana jest do momentu utworzenia  $J$  grup. Współczynnik  $CRO$  w (4.6) jest przybliżoną miarą liniowej zależności wektorów w  $\mathbf{Y}^{(m,n)}$ . Jeśli  $CRO(\mathbf{Y}^{(m,n)}) = 1$ , wektory wierszowe lub kolumnowe macierzy  $CRO(\mathbf{Y}^{(m,n)})$  są liniowo zależne.

Łatwo zauważyć, że podana procedura inicjalizacyjna może być również zastosowana do estymacji faktora  $\mathbf{A}^{(0)}$ , tworząc grupy z kolumn macierzy  $\mathbf{Y}$ . Gdy spełniony jest warunek  $J \leq I \ll T$ , estymacja faktora  $\mathbf{X}^{(0)}$  wymaga znacznie większego nakładu obliczeniowego niż dla faktora  $\mathbf{A}^{(0)}$ .

Koszt obliczeniowy omawianej procedury inicjalizacyjnej znacznie zależy od nadmiarowości zadania poddanego faktoryzacji. Jeśli  $I \gg J$  i  $T \gg J$ , metoda ta wymaga ogromnego nakładu obliczeniowego, który wynika z wielokrotnego obliczania współczynnika  $CRO$ . Już w pierwszym kroku iteracyjnym należy wyznaczyć wartości osobliwe aż dla  $\binom{I}{2}$  macierzy  $\mathbf{Y}^{(m,n)} \in \mathbb{R}^{2 \times T}$ . Liczba kroków iteracyjnych wynosi  $I - J$ . W celu zmniejszenia kosztu obliczeniowego wartości

osobliwe macierzy  $\mathbf{Y}^{(m,n)}$  mogą być wyznaczone z wartości osobliwych macierzy  $\mathbf{Y}^{(m,n)}(\mathbf{Y}^{(m,n)})^T$ , czyli z macierzy  $2 \times 2$  w początkowym kroku iteracyjnym. Kolejne redukcje kosztu obliczeniowego mogą być otrzymane przez zastosowanie uproszczeń zaproponowanych w pracy [230].

Metoda inicjalizacji za pomocą hierarchicznego grupowania wydaje się więc najefektywniejsza dla problemów faktoryzowalnych o małej nadmiarowości i przy słabych zaburzeniach szumowych modelu faktoryzacji.

Inicjalizację faktorów w modelu NMF można też realizować innymi metodami grupowania danych, np. przez rozmyte grupowanie  $C$ -średnich (ang. *Fuzzy C-means*) [378, 521].

Wspólną cechą metod inicjalizacji opartych na metodach grupowania wektorów obserwacji jest poszukiwanie takich wektorów inicjalizacyjnych, które wskazują punkty centralne (centroidy) grup danych. W ujęciu geometrycznym zakładając, że obserwowane dane w macierzy  $\mathbf{Y}$  po przeskalowaniu tworzą stożek wielościanowy  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , wektory centroidów wskazują na takie obszary w  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q})$ , które zawierają największe koncentrację punktów wyznaczonych przez  $\bar{\mathbf{Y}}$ . Jeśli jednak wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\mathfrak{Q})$  są znacznie oddalone od punktów centralnych, takie metody inicjalizacji nie będą efektywne.

### 4.1.3. Inicjalizacja wektorami osobliwymi

Koncepcja wykorzystania rozkładu SVD (ang. *Singular Value Decomposition*) macierzy  $\mathbf{Y}$  do inicjalizacji faktorów w metodzie NMF pojawiła się już w pracy [249]. W podejściu tym wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$  uzyskiwane są z wektorów osobliwych macierzy  $\mathbf{Y}$  za pomocą dekompozycji centroidów (ang. *centroid decomposition*) [67]. Metoda ta nie jest jednak zbyt skuteczna, jeśli macierz obserwacji jest dużych rozmiarów.

Dla zadań faktoryzacji o dużych rozmiarach lepszym rozwiązaniem wydaje się być metoda inicjalizacji NNDSVD (ang. *Nonnegative Double SVD*), zaproponowana przez Boutsidisa i Gallopoulosa [34]. Metoda ta wykorzystuje aproksymacje macierzy rzędu pierwszego utworzone z wektorów osobliwych macierzy  $\mathbf{Y}$ , tak aby rozwiązanie przybliżone było nieujemne i zawierało możliwie dużą część widmową macierzy obserwacji. W podejściu tym wykorzystano twierdzenie Eckarta–Younga [30], z którego wynika, że dowolna macierz  $\mathbf{Y}$  może być aproksymowana macierzą  $\hat{\mathbf{Y}}^{(r)}$  o rzędzie  $r \leq \text{rank}(\mathbf{Y})$  według zasady:

$$\hat{\mathbf{Y}}^{(r)} = \sum_{j=1}^r \sigma_j \mathbf{C}^{(j)} = \arg \min_{\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{I \times T}} \{ \|\mathbf{Y} - \mathbf{Z}\|_F^2 \mid r = \text{rank}(\mathbf{Z}) \leq \text{rank}(\mathbf{Y}) \}, \quad (4.7)$$

gdzie  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r \geq \sigma_{\min} \geq 0$  – wartości osobliwe macierzy  $\mathbf{Y}$ , a  $\mathbf{C}^{(j)} = \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T \in \mathbb{R}^{I \times T}$  – macierz rzędu 1 utworzona z wektorów osobliwych macierzy  $\mathbf{Y} = \sum_{j=1}^{\text{rank}(\mathbf{Y})} \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T$ .

Z twierdzenia Perrona-Frobeniusa [17] wynika, że  $\mathbf{C}^{(1)} \geq \mathbf{0}$ , a zatem tylko wektory osobliwe odpowiadające najistotniejszej wartości osobliwej mogą być użyte bezpośrednio do aproksymacji nieujemnych czynników w modelu NMF. Aby jednak wykorzystać część informacji widmowej zawartej w  $\mathbf{C}^{(j)}$  dla  $j > 1$ , Boutsidis i Gallopoulos [34] zastosowali dekompozycję:  $\forall j : \mathbf{C}^{(j)} = \mathbf{C}_+^{(j)} - \mathbf{C}_-^{(j)}$ , gdzie  $\mathbf{C}_+^{(j)} \geq \mathbf{0}$  jest macierzą otrzymaną z  $\mathbf{C}^{(j)}$  przez zamienienie elementów ujemnych wartościami zerowymi, a  $\mathbf{C}_-^{(j)} \geq \mathbf{0}$  zawiera wartości bezwzględne elementów ujemnych z  $\mathbf{C}^{(j)}$  i elementy zerowe w miejscu elementów dodatnich w  $\mathbf{C}^{(j)}$ . Wynika z tego:

$$\begin{aligned} \forall j : \mathbf{C}^{(j)} &= \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T = (\mathbf{u}_j^{(+)} - \mathbf{u}_j^{(-)}) (\mathbf{v}_j^{(+)} - \mathbf{v}_j^{(-)})^T \\ &= \left( \mathbf{u}_j^{(+)} (\mathbf{v}_j^{(+)})^T + \mathbf{u}_j^{(-)} (\mathbf{v}_j^{(-)})^T \right) - \left( \mathbf{u}_j^{(+)} (\mathbf{v}_j^{(-)})^T + \mathbf{u}_j^{(-)} (\mathbf{v}_j^{(+)})^T \right) \\ &= \mathbf{C}_+^{(j)} - \mathbf{C}_-^{(j)}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

gdzie wektory  $\mathbf{u}_j^{(+)}, \mathbf{u}_j^{(-)} \in \mathbb{R}_+^I$  zostały utworzone z wektora  $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^I$  oraz wektory  $\mathbf{v}_j^{(+)}, \mathbf{v}_j^{(-)} \in \mathbb{R}_+^T$  otrzymano z  $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^T$ , podobnie jak macierze  $\mathbf{C}_+^{(j)}$  i  $\mathbf{C}_-^{(j)}$  z  $\mathbf{C}^{(j)}$ . Ze wzoru (4.8) wynika, że jeśli  $\text{rank}(\mathbf{C}^{(j)}) = 1$ , to  $\text{rank}(\mathbf{C}_+^{(j)}) \leq 2$  oraz  $\text{rank}(\mathbf{C}_-^{(j)}) \leq 2$ . Po uwzględnieniu (4.7) rozkład macierzy  $\mathbf{C}_+^{(j)}$  i  $\mathbf{C}_-^{(j)}$  względem ich wartości osobliwych można wyrazić następująco:

$$\mathbf{C}_+^{(j)} = \hat{\mu}_j^{(+)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(+)})^T + \hat{\mu}_j^{(-)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(-)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(-)})^T, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{C}_-^{(j)} = \hat{\xi}_j^{(-)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(-)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(+)})^T + \hat{\xi}_j^{(+)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(-)})^T, \quad (4.10)$$

gdzie  $\hat{\mu}_j^{(+)} = \|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2$ ,  $\hat{\mu}_j^{(-)} = \|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2$ ,  $\hat{\xi}_j^{(-)} = \|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2$  oraz  $\hat{\xi}_j^{(+)} = \|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2$  – odpowiednio wartości osobliwe, natomiast  $\hat{\mathbf{u}}_j^{(+)} = \frac{\mathbf{u}_j^{(+)}}{\|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2}$ ,  $\hat{\mathbf{u}}_j^{(-)} = \frac{\mathbf{u}_j^{(-)}}{\|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2}$ ,  $\hat{\mathbf{v}}_j^{(+)} = \frac{\mathbf{v}_j^{(+)}}{\|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2}$  i  $\hat{\mathbf{v}}_j^{(-)} = \frac{\mathbf{v}_j^{(-)}}{\|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2}$  – wektory osobliwe. Po wstawieniu (4.8), (4.9) i (4.10) do (4.7) otrzymano:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{Y}}^{(r)} &= \sigma_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \sigma_j \mathbf{C}^{(j)} = \sigma_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \sigma_j \mathbf{C}_+^{(j)} - \sum_{j=2}^r \sigma_j \mathbf{C}_-^{(j)} \\
&= \sigma_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \sigma_j \hat{\mu}_j^{(+)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(+)})^T + \hat{\mathbf{R}}, \tag{4.11}
\end{aligned}$$

gdzie  $\hat{\mathbf{R}} = \sum_{j=2}^r \sigma_j \hat{\mu}_j^{(-)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(-)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(-)})^T - \sum_{j=2}^r \sigma_j \mathbf{C}_-^{(j)}$ .

W metodzie NNDSVD założono:

$$\mathbf{A}^{(0)} \mathbf{X}^{(0)} = \sigma_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \sigma_j \hat{\mu}_j^{(+)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(+)})^T = \hat{\mathbf{Y}}^{(r)} - \hat{\mathbf{R}}, \tag{4.12}$$

co dla  $r = J$  prowadzi do algorytmu 6. Funkcja  $[\mathbf{U}_J, \mathbf{\Sigma}_J, \mathbf{V}_J] = \text{psvd}(\mathbf{Y}, J)$  realizuje częściową dekompozycję macierzy  $\mathbf{Y}$  względem jej  $J$  największych wartości osobliwych (ang. *Partial SVD*).

---

#### Algorytm 6. Inicjalizacja metodą NNDSVD

---

- Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz obserwacji,  $J$  – rząd faktoryzacji,  
**Wyjście:**  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – przybliżenia początkowe dla  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ ,
- 1 **Inicjalizacja:** Oblicz  $[\mathbf{U}_J, \mathbf{\Sigma}_J, \mathbf{V}_J] = \text{psvd}(\mathbf{Y}, J)$ , gdzie  
 $\mathbf{\Sigma}_J = \text{diag}(\sigma_j) \in \mathbb{R}^{J \times J}$  zawiera  $J$  największych wartości osobliwych,  
 $\mathbf{U}_J = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_J] \in \mathbb{R}^{I \times J}$  jest macierzą utworzoną z odpowiednich  $J$   
lewych wektorów osobliwych,  $\mathbf{V}_J = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_J] \in \mathbb{R}^{T \times J}$  zawiera  $J$  prawych  
wektorów osobliwych ; // Częściowy rozkład SVD
  - 2 Inicjalizuj:  $\mathbf{a}_1^{(0)} = \sqrt{\sigma_1} \mathbf{u}_1$  oraz  $\mathbf{x}_1^{(0)} = \sqrt{\sigma_1} \mathbf{v}_1^T$ ;
  - 3 **for**  $j = 2, \dots, J$  **do**
  - 4      $\hat{\mu}_j^{(+)} = \|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2$ ,  $\hat{\mu}_j^{(-)} = \|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2$  ;
  - 5     **if**  $\hat{\mu}_j^{(+)} > \hat{\mu}_j^{(-)}$  **then**
  - 6          $\mathbf{a}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\sigma_j \hat{\mu}_j^{(+)}} \mathbf{u}_j^{(+)}}{\|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2}$  oraz  $\mathbf{x}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\sigma_j \hat{\mu}_j^{(+)}} (\mathbf{v}_j^{(+)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2}$ ,
  - 7     **else**
  - 8          $\mathbf{a}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\sigma_j \hat{\mu}_j^{(-)}} \mathbf{u}_j^{(-)}}{\|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2}$  oraz  $\mathbf{x}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\sigma_j \hat{\mu}_j^{(-)}} (\mathbf{v}_j^{(-)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2}$ ,
  - 9 Ustaw:  $\mathbf{A}^{(0)} = [\mathbf{a}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(0)}]$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)} = [(\mathbf{x}_1^{(0)})^T, \dots, (\mathbf{x}_J^{(0)})^T]^T$
-



#### 4.1.4. Inicjalizacja wektorami bidiagonalizacji Lanczosa

Metoda NNDSVD bazuje na  $J$  wektorach osobliwych macierzy  $\mathbf{Y}$ . Pomimo zastosowania rozkładu PSVD, koszt wyznaczenia tych wektorów wciąż może być zbyt wysoki w stosunku do kosztu zastosowanego algorytmu NMF, zwłaszcza jeśli macierz  $\mathbf{Y}$  jest dużych rozmiarów. Dla rzadkich i dużych zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensorów koszt ten można znacząco zmniejszyć, jeśli zamiast rozkładu PSVD zastosuje się bidiagonalizację Lanczosa [154]. Podobnie jak w (4.7), macierz  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$  można aproksymować macierzą  $\hat{\mathbf{Y}}^{(r)} = \mathbf{U}_r \mathbf{B}_r \mathbf{V}_r^T$ , gdzie  $\mathbf{U}_r = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r] \in \mathbb{R}^{I \times r}$  i  $\mathbf{V}_r = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r] \in \mathbb{R}^{T \times r}$  są macierzami ortogonalnymi, a  $\mathbf{B}_r \in \mathbb{R}^{r \times r}$  jest górną macierzą bidiagonalną:

$$\mathbf{B}_r = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & & 0 & \alpha_r \end{bmatrix} \quad \text{dla } r \leq \text{rank}(\mathbf{Y}). \quad (4.13)$$

Zakładając  $\alpha_r \neq 0$  i  $\beta_r \neq 0$  dla  $r = 1, \dots, J$ , macierze  $\mathbf{U}_r$ ,  $\mathbf{V}_r$  i  $\mathbf{B}_r$  można łatwo wyznaczyć algorytmem Lanczosa dla bidiagonalizacji macierzy prostokątnych [154] (algorytm 7). Podobnie jak w (4.11), macierz  $\hat{\mathbf{Y}}^{(r)}$  można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Y}}^{(r)} &= \mathbf{U}_r \mathbf{B}_r \mathbf{V}_r^T = \sum_{j=1}^r \alpha_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T + \sum_{j=1}^{r-1} \beta_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_{j+1}^T \\ &= \sum_{j=1}^r \alpha_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T + \sum_{j=2}^r \beta_{j-1} \mathbf{u}_{j-1} \mathbf{v}_j^T \\ &= \alpha_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \alpha_j \mathbf{C}_+^{(j)} - \sum_{j=2}^r \alpha_j \mathbf{C}_-^{(j)} + \sum_{j=2}^r \beta_{j-1} \mathbf{D}_+^{(j)} - \sum_{j=2}^r \beta_{j-1} \mathbf{D}_-^{(j)} \\ &= \alpha_1 \mathbf{C}^{(1)} + \sum_{j=2}^r \alpha_j \hat{\mu}_j^{(C+)} \hat{\mathbf{u}}_j^{(C+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(C+)})^T + \sum_{j=2}^r \beta_{j-1} \hat{\mu}_j^{(D+)} \hat{\mathbf{u}}_{j-1}^{(D+)} (\hat{\mathbf{v}}_j^{(D+)})^T \\ &\quad + \hat{\mathbf{R}}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

gdzie  $\mathbf{C}^{(j)} = \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T = \mathbf{C}_+^{(j)} - \mathbf{C}_-^{(j)}$ ,  $\mathbf{D}^{(j)} = \mathbf{u}_{j-1} \mathbf{v}_j^T = \mathbf{D}_+^{(j)} - \mathbf{D}_-^{(j)}$ ,  $\{\hat{\mathbf{u}}_j^{(C+)}, \hat{\mathbf{v}}_j^{(C+)}\}$  jest parą wektorów osobliwych odpowiadających wartości osobliwej  $\hat{\mu}_j^{(C+)}$  macie-

---

**Algorytm 7. Bidiagonalizacja Lanczosa**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz obserwacji,  $J$  – rząd faktoryzacji,

**Wyjście:**  $\mathbf{U}_r$ ,  $\mathbf{V}_r$  i  $\mathbf{B}_r$  – macierze wynikowe,

- 1 **Inicjalizacja:**  $\mathbf{v}_1 \in \mathbb{R}^T$  – losowy wektor o jednostkowej normie  $l_2$ ;
  - 2  $\tilde{\mathbf{v}}_0 = \mathbf{v}_1$ ,  $\beta_0 = 1$ ,  $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ ;
  - 3 **for**  $k = 1, \dots, J$  **do**
  - 4      $\mathbf{v}_k = \frac{\tilde{\mathbf{v}}_{k-1}}{\beta_{k-1}}$ ;
  - 5      $\tilde{\mathbf{u}}_k = \mathbf{Y} \mathbf{v}_k - \beta_{k-1} \mathbf{u}_{k-1}$ ;
  - 6      $\alpha_k = \|\tilde{\mathbf{u}}_k\|_2$ ;
  - 7      $\mathbf{u}_k = \frac{\tilde{\mathbf{u}}_k}{\alpha_k}$ ;
  - 8      $\tilde{\mathbf{v}}_k = \mathbf{Y}^T \mathbf{u}_k - \alpha_k \mathbf{v}_k$ ;
  - 9      $\beta_k = \|\tilde{\mathbf{v}}_k\|_2$ ;
- 

rzy  $\mathbf{C}_+^{(j)}$ , natomiast  $\{\hat{\mathbf{u}}_{j-1}^{(D+)}, \hat{\mathbf{v}}_j^{(D+)}\}$  zawiera wektory osobliwe związane z wartością osobliwą  $\hat{\mu}_j^{(D+)}$  macierzy  $\mathbf{D}_+^{(j)}$ . Macierz  $\hat{\mathbf{R}}$  w (4.14) można wyrazić w podobny sposób jak w (4.11), co prowadzi do aproksymacji:

$$\mathbf{A}^{(0)} \mathbf{X}^{(0)} = \hat{\mathbf{Y}}^{(r)} - \hat{\mathbf{R}} \quad (4.15)$$

Finalna postać inicjalizacji opartej na bidiagonalizacji Lanczosa jest wyrażona algorytmem 8.

Podobna metoda inicjalizacji przez bidiagonalizację Lanczosa macierzy obserwacji została również zaproponowana przez Wanga, Xie i Lu [453] w celu inicjalizacji ortogonalnej wersji NMF.

#### 4.1.5. Inicjalizacja wierzchołkami otoczki wypukłej

Metoda inicjalizacji faktora  $\mathbf{A}^{(0)}$  za pomocą estymowanych położeń wierzchołków otoczki wypukłej, utworzonej przez zbiór danych obserwowanych została przedstawiona w [490]. Metoda ta opiera się na wniosku 4.1

**Wniosek 4.1.** Niech wektory kolumnowe macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , skalowanej według zależności (3.23), rozpinają otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $\bar{\mathcal{Y}} = \{\bar{\mathbf{y}}_1, \dots, \bar{\mathbf{y}}_T\}$ . Zakładając dokładny model faktoryzacji, tzn. według definicji 1.1, gdzie faktor  $\mathbf{X}$  na mocy definicji 3.8 jest wystarczająco rzadki, wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$  określone są przez te kolumny macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , które rozpinają wielokomórkę w  $\mathbb{R}_+^I$  o największej objętości [449].

---

**Algorytm 8. Inicjalizacja bidiagonalizacją Lanczosa**

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz obserwacji,  $J$  – rząd faktoryzacji,

**Wyjście:**  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – przybliżenia początkowe dla  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ ,

- 1 **Inicjalizacja:** Oblicz  $\mathbf{U}_J \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{V}_J \in \mathbb{R}^{T \times J}$  i  $\mathbf{B}_J \in \mathbb{R}^{J \times J}$  stosując Algorytm 7 ; // Bidiagonalizacja Lanczosa
  - 2 Inicjalizuj:  $\mathbf{a}_1^{(0)} = \alpha_1 \mathbf{u}_1$  oraz  $\mathbf{x}_1^{(0)} = \mathbf{v}_1^T$ ;
  - 3 **for**  $j = 2, \dots, J$  **do**
  - 4      $\hat{\mu}_j^{(C+)} = \|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2$ ,  $\hat{\mu}_j^{(C-)} = \|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2$  ;
  - 5      $\hat{\mu}_j^{(D+)} = \|\mathbf{u}_{j-1}^{(+)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2$ ,  $\hat{\mu}_j^{(D-)} = \|\mathbf{u}_{j-1}^{(-)}\|_2 \|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2$  ;
  - 6     **if**  $\hat{\mu}_j^{(C+)} > \hat{\mu}_j^{(C-)}$  **then**
  - 7          $\check{\mathbf{a}}_j^{(0)} = \frac{\alpha_j \sqrt{\hat{\mu}_j^{(C+)}} \mathbf{u}_j^{(+)}}{\|\mathbf{u}_j^{(+)}\|_2}$  oraz  $\check{\mathbf{x}}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\hat{\mu}_j^{(C+)}} (\mathbf{v}_j^{(+)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2}$ ,
  - 8     **else**
  - 9          $\check{\mathbf{a}}_j^{(0)} = \frac{\alpha_j \sqrt{\hat{\mu}_j^{(C-)}} \mathbf{u}_j^{(-)}}{\|\mathbf{u}_j^{(-)}\|_2}$  oraz  $\check{\mathbf{x}}_j^{(0)} = \frac{\sqrt{\hat{\mu}_j^{(C-)}} (\mathbf{v}_j^{(-)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2}$ ,
  - 10     **if**  $\hat{\mu}_j^{(D+)} > \hat{\mu}_j^{(D-)}$  **then**
  - 11          $\mathbf{a}_j^{(0)} = \check{\mathbf{a}}_j^{(0)} + \frac{\beta_{j-1} \hat{\mu}_j^{(D+)} \mathbf{u}_{j-1}^{(+)}}{\|\mathbf{u}_{j-1}^{(+)}\|_2}$  oraz  $\mathbf{x}_j^{(0)} = \check{\mathbf{x}}_j^{(0)} + \frac{\hat{\mu}_j^{(D+)} (\mathbf{v}_j^{(+)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(+)}\|_2}$ ,
  - 12     **else**
  - 13          $\mathbf{a}_j^{(0)} = \check{\mathbf{a}}_j^{(0)} + \frac{\beta_{j-1} \hat{\mu}_j^{(D-)} \mathbf{u}_{j-1}^{(-)}}{\|\mathbf{u}_{j-1}^{(-)}\|_2}$  oraz  $\mathbf{x}_j^{(0)} = \check{\mathbf{x}}_j^{(0)} + \frac{\hat{\mu}_j^{(D-)} (\mathbf{v}_j^{(-)})^T}{\|\mathbf{v}_j^{(-)}\|_2}$ ,
  - 14 Ustaw:  $\mathbf{A}^{(0)} = [\mathbf{a}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(0)}]$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)} = [(\mathbf{x}_1^{(0)})^T, \dots, (\mathbf{x}_J^{(0)})^T]^T$
- 

Niech  $\bar{\mathbf{Y}}^{(J)} = [\bar{\mathbf{y}}_1^{(J)}, \dots, \bar{\mathbf{y}}_J^{(J)}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  będzie macierzą utworzoną z  $J$  wektorów kolumnowych macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , gdzie  $J \leq I$ . Z wniosków 3.3 oraz 4.1 wynika:

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J] = \arg \max_{\bar{\mathbf{Y}}^{(J)} \subset \bar{\mathbf{Y}}} \text{vol}(\bar{\mathbf{Y}}^{(J)}), \quad (4.16)$$

gdzie  $\text{vol}(\bar{\mathbf{Y}}^{(J)})$  oznacza objętość wielokomórki rozpiętej na wektorach kolumnowych macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}^{(J)}$ , a wektory kolumnowe w macierzy  $\mathbf{A}$  wyznaczają  $J$  wierzchołków otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\mathfrak{Q})$ .

Stosując uproszczenia zaproponowane przez Schachtnera, Pöppela i Langa [303], miarę  $\text{vol}(\bar{\mathbf{Y}}^{(J)})$  można aproksymować zależnością:

$$\text{vol}(\bar{\mathbf{Y}}^{(J)}) = \left| \det \left\{ (\bar{\mathbf{Y}}^{(J)})^T (\bar{\mathbf{Y}}^{(J)}) \right\} \right|, \quad (4.17)$$

Zakładając dokładny model faktoryzacji (bez zaburzeń szumowych), zadanie (4.16) może być rozwiązane algorytmem rekursywnych estymacji miary objętości w (4.17). W kroku inicjalizacyjnym macierzy  $\mathbf{Y}$  przekształcana jest do postaci  $\bar{\mathbf{Y}}$ , stosując skalowanie według zależności (3.23). Wektory kolumnowe macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$  rozpinają otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$ . Następnie w pierwszym kroku iteracyjnym poszukiwany jest taki wektor  $\bar{\mathbf{y}}_t$  ze zbioru wektorów kolumnowych macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , który jest najbardziej oddalony od wektora  $\mathbf{z} = \frac{1}{T} \sum_{n=1}^T \bar{\mathbf{y}}_n$ , według danej metryki  $D(\bar{\mathbf{y}}_t | | \mathbf{z})$ . Punkt  $\mathbf{z}$  jest geometrycznym środkiem punktów  $\{\bar{\mathbf{y}}_t\}$ . Może to być również dowolny losowo wybrany wektor  $\mathbf{z} \sim \mathcal{U}[0, 1] \in \mathbb{R}_+^I$ . Funkcja  $D$  najczęściej definiowana jest przez kwadrat odległości euklidesowej. W przypadku wektorów rzadkich może to być również metryka  $l_1$ . Przyjęto, że wybrany wektor  $\bar{\mathbf{y}}_t$  wyznacza jeden z poszukiwanych wierzchołków otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$ , a więc  $\mathbf{a}_1 = \bar{\mathbf{y}}_t$ . W następnym kroku wybierany jest kolejny wektor  $\bar{\mathbf{y}}_s$  ze zbioru  $\bar{\mathbf{Y}}$ , który maksymalizuje pole powierzchni równoległoboku rozpiętego na wektorach  $\bar{\mathbf{y}}_t$  i  $\bar{\mathbf{y}}_s$ . Ponieważ wektory  $\bar{\mathbf{y}}_t$  i  $\bar{\mathbf{y}}_s$  są znormalizowane do jednostkowej normy  $l_1$ , można więc sądzić, że w kroku tym poszukiwany jest taki wierzchołek otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$ , który jest najbardziej odległy od wierzchołka wyznaczonego przez wektor  $\bar{\mathbf{y}}_t$ . Z wniosku 4.1 wynika, że  $\mathbf{a}_2 = \bar{\mathbf{y}}_s$ . W kolejnym kroku poszukiwany jest następny wektor  $\bar{\mathbf{y}}_q$ , który maksymalizuje objętość stożka simplicjalnego rozpiętego na wektorach  $\bar{\mathbf{y}}_t$ ,  $\bar{\mathbf{y}}_s$  i  $\bar{\mathbf{y}}_q$ . Wektory te wyznaczają trójkąt na  $\mathcal{S}^{(I-1)}$  o największej powierzchni, a więc są wierzchołkami otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$  według wniosku 4.1 i stąd  $\mathbf{a}_3 = \bar{\mathbf{y}}_q$ . W każdym kolejnym kroku baza wektorów wierzchołków otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$  rozszerzana jest o kolejny wektor z  $\bar{\mathbf{Y}}$ , który według miary (4.17) maksymalizuje objętość stożka simplicjalnego rozpiętego na wektorach bazowych. Procedura ta zatrzymywana jest po znalezieniu  $J$  wektorów z macierzy  $\bar{\mathbf{Y}}$ , które wyznaczają wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\bar{\mathcal{Y}})$ .

Po rozwiązaniu zadania (4.16) uzyskuje się faktor  $\mathbf{A}$ , dla założeń podanych we wniosku 4.1. Jednak w praktycznych zastosowaniach, założenia te mogą nie być łatwe do spełnienia (zwłaszcza model dokładnej faktoryzacji). Dlatego też przyjęto, że estymowany faktor  $\mathbf{A}$  według kryterium (4.16) jest wykorzystywany jedynie jako przybliżenie początkowe w procesie aktualizacji faktorów w metodzie NMF.

---

**Algorytm 9. CHV**

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $p$  – liczba najbliższych sąsiadów

**Wyjście:**  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  – macierzy estymowanych wektorów bazowych

- 1 **Inicjalizacja:**  $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ , Zamień ujemne elementy (jeśli występują) w  $\mathbf{Y}$  elementami zerowymi i usuń kolumny zerowe z  $\mathbf{Y}$  ;
  - 2  $\bar{\mathbf{Y}} = \left\{ \frac{\mathbf{y}_1}{\|\mathbf{y}_1\|_1}, \dots, \frac{\mathbf{y}_T}{\|\mathbf{y}_T\|_1} \right\}$  ; // Skalowanie
  - 3  $\mathbf{z} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \bar{\mathbf{y}}_t \in \mathbb{R}_+^I$  ;
  - 4  $r_t = D(\bar{\mathbf{y}}_t, \mathbf{z})$  ;
  - 5  $\left[ \mathbf{r}^{(sort)}, \mathcal{K}_p^{(0)} \right] = \text{sort}(\mathbf{r}, p, \text{descend})$ , gdzie  $\mathbf{r} = [r_t] \in \mathbb{R}^T$  ;
  - 6  $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{p} \sum_{k \in \mathcal{K}_p^{(0)}} \bar{\mathbf{y}}_k$  ;
  - 7 **for**  $j = 1, 2, \dots, J - 1$  **do**
  - 8      $\mathbf{d} = [d_t] = \mathbf{0}$  ;
  - 9     **for**  $t = 1, 2, \dots, T$  **do**
  - 10          $\mathbf{D} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_j, \bar{\mathbf{y}}_t] \in \mathbb{R}_+^{I \times (j+1)}$  ;
  - 11          $d_t = \det(\mathbf{D}^T \mathbf{D})$  ;
  - 12          $\left[ \mathbf{d}^{(sort)}, \mathcal{K}_p \right] = \text{sort}(\mathbf{d}, p, \text{descend})$ , gdzie  $\mathbf{d} = [d_t] \in \mathbb{R}^T$  ;
  - 13          $\mathbf{a}_{j+1} = \frac{1}{p} \sum_{k \in \mathcal{K}_p} \bar{\mathbf{y}}_k$  ;
- 

W przypadku pojawienia się zaburzeń modelu dokładnej faktoryzacji lub dla problemów nefaktoryzowalnych, podana procedura może wyszukiwać takie wierzchołki otoczki wypukłej  $\mathcal{H}(\mathfrak{Q})$ , które nie są promieniami ekstremalnymi stożka simplicjalnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  dla  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J\} \subset \mathbb{R}_+^I$  według definicji 3.4 i na mocy wniosku 3.1. Aby minimalizować błędy estymacji dla takiego przypadku, zmodyfikowano podaną procedurę. W każdym kroku rekurencyjnym zamiast wybierać po jednym wektorze ze zbioru  $\bar{\mathbf{Y}}$ , wybieranych jest  $p$  wektorów, które mają największy wpływ na miarę (4.17). Następnie wyznacza się wektor geometrycznego środka tych wektorów. Założono bowiem, że tak estymowany wektor środka jest zgrubnym estymatorem promienia ekstremalnego stożka simplicjalnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$ .

Finalna postać zaproponowanego algorytmu rekursywnego wyrażona jest algorytmem 9. Funkcja  $[\mathbf{c}^{(sort)}, \mathcal{K}] = \text{sort}(\mathbf{c}, p, \text{descend})$  sortuje elementy wektora  $\mathbf{c}$  w porządku malejącym,  $\mathbf{c}^{(sort)}$  zawiera  $p$  największych wartości z  $\mathbf{c}$ , a  $\mathcal{K}$  jest zbiorem indeksów posortowanych elementów. Liczbę  $p = 1, 2, \dots$  należy dobierać

eksperymentalnie i powinna ona być tym większa, im większa jest liczba próbek obserwacji i moc zakłóceń.

## 4.2. Warunki optymalności

Niech  $F(\mathbf{x}) = F(x_1, \dots, x_J) : \mathbb{R}^J \rightarrow \mathbb{R}$ , gdzie  $\mathbf{x} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^J$ , będzie nieliniową funkcją, a  $\Omega$  zbiorem rozwiązań dopuszczalnych (ang. *feasible set*). Zadanie (4.2) może być wyrażone w postaci ogólnej jako zadanie optymalizacji nieliniowej:

$$\min_{\mathbf{x} \in \Omega} F(\mathbf{x}), \quad (4.18)$$

przy ograniczeniach:

$$\hat{c}_i(\mathbf{x}) \geq \hat{d}_i : \quad i = 1, 2, \dots, m_1, \quad (4.19)$$

$$\check{c}_i(\mathbf{x}) \leq \check{d}_i : \quad i = m_1 + 1, \dots, m_2, \quad m_1 \leq m_2, \quad (4.20)$$

$$\bar{c}_i(\mathbf{x}) = \bar{d}_i : \quad i = m_2 + 1, \dots, m, \quad m_2 \leq m, \quad (4.21)$$

gdzie  $\hat{c}_i(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^J \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\check{c}_i(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^J \rightarrow \mathbb{R}$ , oraz  $\bar{c}_i(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^J \rightarrow \mathbb{R}$  są funkcjami różniczkowalnymi w punkcie  $\mathbf{x} \in \Omega$ . Lokalne minimum  $\mathbf{x}^*$  zadania (4.18) jest punktem stacjonarnym funkcji Lagrange'a [329]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\nu}) &= F(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{m_1} \lambda_i (\hat{c}_i(\mathbf{x}) - \hat{d}_i) \\ &\quad - \sum_{i=m_1+1}^{m_2} \theta_i (\check{c}_i(\mathbf{x}) - \check{d}_i) - \sum_{i=m_2+1}^m \nu_i (\bar{c}_i(\mathbf{x}) - \bar{d}_i), \end{aligned} \quad (4.22)$$

gdzie  $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_i] \in \mathbb{R}^{m_1}$ ,  $\boldsymbol{\theta} = [\theta_i] \in \mathbb{R}^{m_2 - m_1}$ , oraz  $\boldsymbol{\nu} = [\nu_i] \in \mathbb{R}^{m - m_2}$  są tzw. mnożnikami Lagrange'a. Jeżeli  $\mathbf{x}^*$  jest lokalnym minimum zadania (4.18), to w punkcie tym spełnione są tzw. warunki optymalności Karusha–Kuhna–Tuckera (KKT):

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\theta}^*, \boldsymbol{\nu}^*) = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\lambda}^* = [\lambda_i^*], \quad \boldsymbol{\theta}^* = [\theta_i^*], \quad \boldsymbol{\nu}^* = [\nu_i^*], \quad (4.23)$$

$$\lambda_i^* (\hat{c}_i(\mathbf{x}^*) - \hat{d}_i) = 0, \quad \theta_i^* (\check{c}_i(\mathbf{x}^*) - \check{d}_i) = 0, \quad \nu_i^* (\bar{c}_i(\mathbf{x}^*) - \bar{d}_i) = 0, \quad (4.24)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad \theta_i^* \leq 0, \quad (4.25)$$

gdzie  $\nu_i^*$  – mnożnik dowolnego znaku,  $\boldsymbol{\lambda}^*$ ,  $\boldsymbol{\theta}^*$  i  $\boldsymbol{\nu}^*$  – wektory mnożników Lagrange’a w punkcie  $\boldsymbol{x}^*$ .

Z warunku stacjonarności funkcji Lagrange’a w (4.22) wynika:

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}F(\boldsymbol{x}^*) - (\boldsymbol{\lambda}^*)^T \nabla_{\boldsymbol{x}}\hat{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{x}^*) - (\boldsymbol{\theta}^*)^T \nabla_{\boldsymbol{x}}\check{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{x}^*) - (\boldsymbol{\nu}^*)^T \nabla_{\boldsymbol{x}}\bar{\boldsymbol{c}}(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}. \quad (4.26)$$

Pomijając ograniczenia (4.20) i (4.21), a dla ograniczeń (4.19) zakładając:  $m_1 = J$ ,  $\hat{c}_i(\boldsymbol{x}) = x_i$  oraz  $\hat{d}_i = 0$  dla  $i = 1, \dots, J$ , z (4.24), (4.25) i (4.26) wynika, że warunki KKT przyjmują postać:

$$\boldsymbol{x}^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{x}^* = 0, \quad (4.27)$$

gdzie  $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \nabla_{\boldsymbol{x}}F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\lambda}$ .

Dla zadania minimalizacji zregulowanej funkcji celu w (3.38) i przy ograniczeniach nieujemności dla  $\boldsymbol{A}$  i  $\boldsymbol{X}$ , funkcja Lagrange’a wyraża się następująco:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{\Lambda}_A, \boldsymbol{\Lambda}_X) = \Psi(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{X}) - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda}_A^T \boldsymbol{A}) - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda}_X^T \boldsymbol{X}), \quad (4.28)$$

gdzie  $\boldsymbol{\Lambda}_A = [\lambda_{ij}^{(A)}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\boldsymbol{\Lambda}_X = [\lambda_{jt}^{(X)}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – macierze mnożników Lagrange’a. Ponieważ to zadanie minimalizacji jest regularne, optymalne rozwiązanie  $(\boldsymbol{A}^*, \boldsymbol{X}^*)$  spełnia konieczne warunki optymalności KKT:

$$\nabla_{\boldsymbol{A}}\mathcal{L}(\boldsymbol{A}^*, \boldsymbol{X}^*, \boldsymbol{\Lambda}_A^*, \boldsymbol{\Lambda}_X^*) = \mathbf{0}, \quad \nabla_{\boldsymbol{X}}\mathcal{L}(\boldsymbol{A}^*, \boldsymbol{X}^*, \boldsymbol{\Lambda}_A^*, \boldsymbol{\Lambda}_X^*) = \mathbf{0}, \quad (4.29)$$

$$\boldsymbol{A}^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\Lambda}_A^* \geq \mathbf{0}, \quad \text{tr}((\boldsymbol{\Lambda}_A^*)^T \boldsymbol{A}^*) = 0, \quad (4.30)$$

$$\boldsymbol{X}^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\Lambda}_X^* \geq \mathbf{0}, \quad \text{tr}((\boldsymbol{\Lambda}_X^*)^T \boldsymbol{X}^*) = 0. \quad (4.31)$$

W punkcie stacjonarnym spełnione są warunki:

$$(\lambda_{ij}^*)^{(A)} = 0 \text{ i } a_{ij}^* > 0 \text{ lub } (\lambda_{ij}^*)^{(A)} \geq 0 \text{ i } a_{ij}^* = 0, \quad (4.32)$$

$$(\lambda_{jt}^*)^{(X)} = 0 \text{ i } x_{jt}^* > 0 \text{ lub } (\lambda_{jt}^*)^{(X)} \geq 0 \text{ i } x_{jt}^* = 0, \quad (4.33)$$

a także warunki komplementarności:

$$a_{ij}^* (\lambda_{ij}^*)^{(A)} = 0 \quad \text{oraz} \quad x_{jt}^* (\lambda_{jt}^*)^{(X)} = 0. \quad (4.34)$$

Jeśli  $(\lambda_{ij}^*)^{(A)} = 0$ , gdy  $a_{ij}^* = 0$  lub jeśli  $(\lambda_{jt}^*)^{(X)} = 0$ , gdy  $x_{jt}^* = 0$ , to rozwiązanie jest zdegenerowane.

Podobnie jak w (4.27), warunek (4.31) w punkcie  $\mathbf{X}^*$  można zapisać w postaci:

$$\mathbf{X}^* \geq \mathbf{0}, \quad \mathbf{G}_X(\mathbf{X}^*) \geq \mathbf{0}, \quad \text{tr}(\mathbf{G}_X(\mathbf{X}^*)^T \mathbf{X}^*) = 0, \quad (4.35)$$

gdzie  $\mathbf{G}_X = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{J \times T}$  – macierz gradientów.

Analogicznie w punkcie  $\mathbf{A}^*$  uzyskuje się:

$$\mathbf{A}^* \geq \mathbf{0}, \quad \mathbf{G}_A(\mathbf{A}^*) \geq \mathbf{0}, \quad \text{tr}(\mathbf{G}_A(\mathbf{A}^*)^T \mathbf{A}^*) = 0, \quad (4.36)$$

gdzie  $\mathbf{G}_A = \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{I \times J}$ .

### 4.3. Kryteria stopu

Dobór właściwej liczby zarówno iteracji naprzemiennych, jak i iteracji wewnętrznych w algorytmie 2 istotny jest nie tylko ze względu na minimalizację kosztu obliczeniowego, ale także ze względu na dopasowanie modelu do danych obserwowanych. Należy zauważyć, że w przypadku metody NMF nie zawsze większa liczba iteracji naprzemiennych oznacza większą dokładność estymacji czynników. Aby oczekiwać progresywnej poprawy jakości estymowanych czynników, algorytmy wykorzystane do aktualizacji czynników muszą zapewniać monotoniczność procesu zbieżności iteracji wewnętrznych oraz zadanie musi być faktoryzowalne i bez zaburzeń modelu. W praktyce metodę NMF stosuje się często do przybliżonej faktoryzacji danych zaburzonych. W takim przypadku przerwanie wszelakich procesów iteracyjnych w odpowiednim momencie może być bardzo istotne ze względu na oczekiwany rezultat. Dla zadań sprzecznych (zaburzonych lub niefaktoryzowalnych) większa liczba iteracji zwykle oznacza duży wpływ zaburzeń modelu na wynik estymowanych czynników.

Wybór odpowiedniego momentu przerywania procesu iteracyjnego nie jest łatwy. Istnieje wiele kryteriów zatrzymania procesów iteracyjnych. Najprostsze kryterium zakłada przerywanie zarówno procesu iteracji wewnętrznych, jak i zewnętrznych po wykonaniu „z góry” ustalonej liczby iteracji. Dobór tej liczby jest zwykle intuicyjny lub poprzedzony obserwacjami zachowania funkcji celu w zadaniach należących do podobnej klasy problemów. Bardziej zaawansowane kryteria stopu wymagają poniesienia pewnego kosztu obliczeniowego.

Niech  $\mathbf{A}^{(n)}$  i  $\mathbf{X}^{(n)}$  będą estymatorami macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w  $n$ -tym kroku iteracji naprzemiennych,  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  funkcją celu w (3.38), a  $\varepsilon$  parametrem progowym związanym z błędem dopasowania modelu, definiowanym przez użytkownika. Proces iteracji naprzemiennych można przerwać, gdy spełniony jest co najmniej jeden z podanych warunków:



- kryterium dopasowania modelu do obserwacji, mierzone wartością funkcji celu:

$$\Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)}) \leq \varepsilon, \quad (4.37)$$

- kryterium dopasowania modelu do obserwacji, mierzone znormalizowaną odległością euklidesową:

$$\frac{\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F} \leq \varepsilon, \quad (4.38)$$

- kryterium stagnacji funkcji celu:

$$\frac{|\Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)}) - \Psi(\mathbf{A}^{(n-1)}, \mathbf{X}^{(n-1)})|}{\Psi(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{X}^{(1)})} \leq \varepsilon, \quad \text{dla } n = 2, 3, \dots \quad (4.39)$$

- kryterium jednoczesnej stagnacji aktualizacji obu czynników:

$$\frac{\|\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)} - \mathbf{A}^{(n-1)} \mathbf{X}^{(n-1)}\|_F}{\|\mathbf{A}^{(1)} \mathbf{X}^{(1)}\|_F} \leq \varepsilon, \quad \text{dla } n = 2, 3, \dots \quad (4.40)$$

- kryterium stagnacji aktualizacji jednego z czynników:

$$\frac{\|\mathbf{A}^{(n)} - \mathbf{A}^{(n-1)}\|_F}{\|\mathbf{A}^{(1)}\|_F} \leq \varepsilon \text{ lub } \frac{\|\mathbf{X}^{(n)} - \mathbf{X}^{(n-1)}\|_F}{\|\mathbf{X}^{(1)}\|_F} \leq \varepsilon \text{ dla } n = 2, 3, \dots \quad (4.41)$$

- kryterium gradientów rzutowanych:

$$\|\nabla^P \Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)})\|_F^2 \leq \varepsilon \|\nabla \Psi(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{X}^{(1)})\|_F^2, \quad (4.42)$$

gdzie

$$\nabla \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \\ (\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}))^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{\mathbf{A}} \\ \mathbf{G}_{\mathbf{X}^T} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(I+T) \times J}, \quad (4.43)$$

$$\nabla^P \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{\mathbf{A}}^P \\ \mathbf{G}_{\mathbf{X}^T}^P \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_{\mathbf{A}}^P = [(g_A^P)_{ij}], \quad \mathbf{G}_{\mathbf{X}^T}^P = [(g_X^P)_{jt}]^T, \quad (4.44)$$

$$(g_A^P)_{ij} = \begin{cases} \nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}), & \text{jeżeli } a_{ij} > 0, \\ \min(\nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}), 0), & \text{jeżeli } a_{ij} = 0, \end{cases} \quad (4.45)$$

$$(g_X^P)_{jt} = \begin{cases} \nabla_{x_{jt}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}), & \text{jeżeli } x_{jt} > 0, \\ \min(\nabla_{x_{jt}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}), 0), & \text{jeżeli } x_{jt} = 0. \end{cases} \quad (4.46)$$

Kryterium (4.42) zostało zaproponowane przez Lina w pracy [280]. Jest ono wyrażone przez miarę odległości aktualizacji  $\mathbf{A}^{(n)}$  i  $\mathbf{X}^{(n)}$  od punktu stacjonarności, określonego warunkami *KKT*. Łatwo zauważyć, że gdy spełnione są warunki optymalności (4.36) i (4.35) dla  $\mathbf{A}^{(n)} \rightarrow \mathbf{A}^*$  i  $\mathbf{X}^{(n)} \rightarrow \mathbf{X}^*$ , wówczas  $\|\nabla^P \Psi(\mathbf{A}^*, \mathbf{X}^*)\|_F^2 \rightarrow 0$  oraz  $\|\nabla \Psi(\mathbf{A}^*, \mathbf{X}^*)\|_F^2 \geq 0$ .

Kryterium to można również zastosować do przerywania iteracji wewnętrznych w algorytmie 2. Dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$  (krok 4) i  $\mathbf{X}$  (krok 7) w  $n$ -tym kroku iteracji zewnętrznych, kryteria stopu mają postaci:

$$\|\nabla^P \Psi(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{X}^{(n-1)})\|_F^2 \leq \bar{\varepsilon}_A \quad \text{oraz} \quad \|\nabla^P \Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(k)})\|_F^2 \leq \bar{\varepsilon}_X, \quad (4.47)$$

gdzie  $k = 1, 2, \dots$  jest numerem kroku iteracji wewnętrznych, a parametry  $\bar{\varepsilon}_A$  i  $\bar{\varepsilon}_X$  określają tolerancje błędów aktualizacji. Zwykle przyjmuje się:

$$\bar{\varepsilon}_A = \bar{\varepsilon}_X = \max(0, 001, \varepsilon) \|\nabla \Psi(\mathbf{A}^{(1)}, \mathbf{X}^{(1)})\|_F^2. \quad (4.48)$$

Jeśli proces iteracji wewnętrznych zatrzymuje się po wykonaniu zaledwie pierwszej iteracji, to współczynniki tolerancji  $\bar{\varepsilon}_A$  oraz  $\bar{\varepsilon}_X$  są zmniejszane, np. według reguły:

$$\bar{\varepsilon}_X \leftarrow \frac{\bar{\varepsilon}_X}{10}, \quad \bar{\varepsilon}_A \leftarrow \frac{\bar{\varepsilon}_A}{10}, \quad (4.49)$$

co pozwala na wykonanie większej liczby iteracji wewnętrznych w kolejnym kroku iteracji zewnętrznej.

## 4.4. Algorytmy multiplikatywne

Algorytmy multiplikatywne są powszechnie stosowane w aktualizacji czynników w modelu NMF. To dzięki tym algorytmom Lee i Seung [257, 258] tak znacząco spopularyzowali metodę NMF. Istotną ich zaletą jest prostota, łatwość implementacji, a także niski koszt obliczeniowy przypadający na pojedynczy krok iteracyjny.

Typowe podejście do wyznaczenia multiplikatywnych reguł aktualizacji czynników bazuje na metodzie gradientu prostego [329] z odpowiednio dobranym współczynnikiem długości kroku. Niech  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_T] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  oraz  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  będzie gradientem funkcji celu (3.38) w punkcie  $\mathbf{x}_t$  dla  $t = 1, \dots, T$ . Algorytm gradientu prostego dla aktualizacji wektora  $\mathbf{x}_t$  można wyrazić następująco:

$$\mathbf{x}_t \leftarrow \mathbf{x}_t - \eta \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t), \quad (4.50)$$

gdzie  $\eta$  jest współczynnikiem długości kroku. Jeśli  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  można przedstawić w postaci:  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) = \nabla_{\mathbf{x}_t}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) - \nabla_{\mathbf{x}_t}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$ , gdzie  $\nabla_{\mathbf{x}_t}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) > \mathbf{0}$  i  $\nabla_{\mathbf{x}_t}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) \geq \mathbf{0}$ , a współczynnik długości kroku będzie określony przez macierz diagonalną:  $\eta = \text{diag} \left( \frac{\mathbf{x}_t}{\nabla_{\mathbf{x}_t}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)} \right) \in \mathbb{R}^{J \times J}$ , to regułę (4.50) można łatwo zapisać w postaci:

$$\mathbf{x}_t \leftarrow \mathbf{x}_t \circledast \nabla_{\mathbf{x}_t}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) \oslash \nabla_{\mathbf{x}_t}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t), \quad (4.51)$$

gdzie symbole  $\circledast$  i  $\oslash$  oznaczają odpowiednio mnożenie oraz dzielenie elementów wektorów lub w postaci równoważnej:

$$x_{jt} \leftarrow x_{jt} \frac{[\nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})]_{jt}}{[\nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})]_{jt}}. \quad (4.52)$$

Analogiczne reguły można przedstawić dla aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ . Łatwo zauważyć, że jeśli w pierwszym kroku iteracyjnym  $x_{jt} > 0$  i spełnione są warunki  $\nabla_{\mathbf{x}_t}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) > \mathbf{0}$  i  $\nabla_{\mathbf{x}_t}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) \geq \mathbf{0}$  w kolejnych krokach iteracyjnych, to sekwencje iteracyjne  $\{x_{jt}\}$  algorytmu (4.52) są nieujemne.

#### 4.4.1. Algorytm MUE

Algorytm MUE (ang. *Multiplicative Updates for Euclidean distance*) jest moltiplicatywnym algorytmem minimalizującym funkcję odległości euklidesowej (2.4). Bazuje na znanym algorytmie ISRA (ang. *Image Space Reconstruction Algorithm*), zaproponowanym przez Daube-Witherspoona i Muehlehnera [100] do rekonstrukcji obrazu tomograficznego. W metodzie NMF algorytm MUE pojawił się po raz pierwszy w pracy Lee i Seunga [257], opublikowanej w czasopiśmie „Nature” w 1999 roku. Algorytm ten jest niewątpliwie fundamentalnym algorytmem nieujemnej fatoryzacji macierzy. Można go łatwo wyprowadzić, stosując regułę aktualizacji (4.52).

Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$ , gdzie  $D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$  dana jest zależnością (2.4). Gradienty funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  ze względu na  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  mają postaci:

$$\mathbf{G}_A = \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{X}^T - \mathbf{Y}\mathbf{X}^T, \quad (4.53)$$

$$\mathbf{G}_X = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{A}^T \mathbf{Y}. \quad (4.54)$$

Gdy przyjmiemy się  $\nabla_{\mathbf{A}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{X}^T$  i  $\nabla_{\mathbf{A}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{Y}\mathbf{X}^T$  oraz  $\nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X}$  i  $\nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}^T \mathbf{Y}$ , wówczas na podstawie reguły iteracyjnej (4.52) uzyskuje się algorytm MUE:

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{X}^T]_{ij}}{[\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{ij}}, \quad x_{jt} \leftarrow x_{jt} \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X}]_{jt}}. \quad (4.55)$$

**Twierdzenie 4.1.** *Jeśli w pierwszym kroku iteracyjnym  $\forall i, j, t : a_{ij} > 0$  i  $x_{jt} > 0$ , to reguły aktualizacji (4.55) nie zwiększają wartości funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ , a więc spełniają warunek monotoniczności w (1.12).*

W celu udowodnienia twierdzenia 4.1 zdefiniowano funkcję pomocniczą dla funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x})$  (definicja 4.1).

**Definicja 4.1.** *Funkcja  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(n)})$  nazywana jest funkcją pomocniczą dla dowolnej funkcji  $\Psi(\mathbf{x})$ , jeśli spełnia następujące warunki:*

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(n)}) \geq \Psi(\mathbf{x}), \quad G(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}). \quad (4.56)$$

Pomysł wykorzystania funkcji pomocniczej do udowodnienia twierdzenia 4.1 pojawił się w pracy [258]. Nie jest to jednak nowy pomysł, był bowiem już wcześniej wykorzystywany w wielu obszarach matematyki, np. w dowodzie zbieżności algorytmu EM (ang. *Expectation-Maximization*) [105].

**Lemat 4.1.** *Funkcja*

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) &= \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}) + (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)})^T \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}) \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)})^T \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_t^{(n)}) (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)}) \end{aligned} \quad (4.57)$$

jest funkcją pomocniczą dla funkcji  $\Psi(\mathbf{x}_t) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t\|_2^2$  dla  $t = 1, \dots, T$ , gdzie

$$\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_t^{(n)}) = \text{diag} \left( (\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^{(n)}) \oslash \mathbf{x}_t^{(n)} \right). \quad (4.58)$$

**Dowód 4.1.** *Warunek  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t) = \Psi(\mathbf{x}_t)$  jest oczywisty. Aby pokazać, że  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) \geq \Psi(\mathbf{x}_t)$ , funkcję  $\Psi(\mathbf{x}_t)$  rozwinięto w szereg Taylora względem punktu  $\mathbf{x}_t^{(n)}$ :*

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_t) &= \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}) + (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)})^T \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}) \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)})^T \mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(n)}) (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)}), \end{aligned} \quad (4.59)$$

gdzie  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(n)}) = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ .

Podany warunek jest spełniony, jeśli:

$$(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)})^T \mathbf{M}(\mathbf{x}_t^{(n)}) (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)}) \geq 0, \quad (4.60)$$

gdzie  $\mathbf{M} = \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_t^{(n)}) - \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ . Niech  $\mathbb{R}^J \ni \mathbf{z} \neq \mathbf{0}$  oraz  $\mathbf{M} = [m_{jl}]$ , zatem

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^T \mathbf{M} \mathbf{z} &= \sum_{j,l} z_j m_{jl} z_l = \sum_j z_j^2 \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^{(n)}]_j}{x_{jt}^{(n)}} - \sum_{j,l} z_j [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} z_l \\ &= \sum_j z_j^2 \frac{\sum_l [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} x_{lt}^{(n)}}{x_{jt}^{(n)}} - \sum_{j,l} z_j [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} z_l \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j,l} z_j^2 \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} x_{lt}^{(n)}}{x_{jt}^{(n)}} + \frac{1}{2} \sum_{j,l} z_l^2 \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{lj} x_{jt}^{(n)}}{x_{lt}^{(n)}} - \sum_{j,l} z_j [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} z_l \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j,l} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jl} \left( z_j \sqrt{\frac{x_{lt}^{(n)}}{x_{jt}^{(n)}}} - z_l \sqrt{\frac{x_{jt}^{(n)}}{x_{lt}^{(n)}}} \right)^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Z zależności (4.61) wynika, że macierz  $\mathbf{M}$  jest nieujemnie określona, a zatem spełniony jest warunek (4.60) i tym samym  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) \geq \Psi(\mathbf{x}_t)$ .

**Lemat 4.2.** Aktualizacja  $\mathbf{x}_t^{(n+1)}$  generowana algorytmem (4.55) w  $n$ -tym kroku iteracyjnym dla faktora  $\mathbf{X}$  minimalizuje funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)})$ , zatem

$$\mathbf{x}_t^{(n+1)} = \arg \min_{\mathbf{x}_t} G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}). \quad (4.62)$$

**Dowód 4.2.** Z warunku stacjonarności funkcji  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)})$  wynika:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}_t} G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) &= \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}) + \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_t^{(n)}) (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(n)}) \\ &= \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^{(n)} \oslash \mathbf{x}_t^{(n)} \otimes \mathbf{x}_t - \mathbf{A}^T \mathbf{y}_t = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Stąd otrzymujemy formułę iteracyjną  $\mathbf{x}_t^{(n+1)} = \mathbf{x}_t^{(n)} \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{y}_t \oslash \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^{(n)}$  dla  $n = 0, 1, \dots$ , która jest równoważna regule (4.55) dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$ .

Z definicji 4.1 oraz lematu 4.2 wynika:

$$\Psi(\mathbf{x}_t^{(n+1)}) \leq G(\mathbf{x}_t^{(n+1)}, \mathbf{x}_t^{(n)}) \leq G(\mathbf{x}_t^{(n)}, \mathbf{x}_t^{(n)}) = \Psi(\mathbf{x}_t^{(n)}). \quad (4.64)$$

Analogiczne rozważania można pokazać dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$ . Wynika stąd, że reguły aktualizacji spełniają warunek monotoniczności w zależności (1.12), co kończy dowód twierdzenia 4.1.

Algorytm MUE w (4.55), pomimo spełniania warunku monotoniczności, nie gwarantuje zbieżności do punktu optymalnego  $(\mathbf{A}^*, \mathbf{X}^*)$  określonego przez warunki optymalności KKT. Aby taką zbieżność uzyskać, Lin [279] zaproponował usprawnioną wersję algorytmu MUE. W wersji tej, współczynnik długości kroku  $\eta$  w (4.50) dla aktualizacji elementu  $x_{jt}$  przyjmuje postać:

$$\eta_{jt} = \frac{\bar{x}_{jt}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{X}}]_{jt} + \epsilon}, \quad (4.65)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{X}} = [\bar{x}_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ,

$$\bar{x}_{jt} = \begin{cases} x_{jt}, & \text{jeżeli } [\mathbf{G}_X]_{jt} \geq 0, \\ \max(x_{jt}, \rho), & \text{jeżeli } [\mathbf{G}_X]_{jt} < 0, \end{cases} \quad (4.66)$$

$\mathbf{G}_X$  – macierz gradientu w (4.54),  $\epsilon, \rho > 0$  – stałe o małej wartości.

Zmodyfikowany algorytm MUE dla aktualizacji elementu  $x_{jt}$  ma postać:

$$x_{jt} \leftarrow x_{jt} - \frac{\bar{x}_{jt}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{X}}]_{jt} + \epsilon} [\mathbf{G}_X]_{jt}, \quad (4.67)$$

Jeśli  $\rho = 0$  oraz człony kary w funkcji celu (3.38) zostaną zdefiniowane w następujący sposób:  $U_A(\mathbf{A}) = \sum_{i,j} a_{ij}$ ,  $U_X(\mathbf{X}) = \sum_{j,t} x_{jt}$ ,  $\alpha_A = \alpha_X = \epsilon$ , to zmodyfikowany algorytm MUE sprowadza się do postaci:

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} \frac{[\mathbf{Y} \mathbf{X}^T]_{ij}}{[\mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{X}^T + \epsilon]_{ij}}, \quad x_{jt} \leftarrow x_{jt} \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X} + \epsilon]_{jt}}. \quad (4.68)$$

Zdefiniowane człony regularyzujące wymuszają odpowiedni poziom rzadkości estymowanych czynników (rozd. 3.2.1), zależny od wartości parametru  $\epsilon$ . Inne wersje algorytmu MUE z wymuszaniem rzadkości estymowanych czynników można odnaleźć w pracach [83, 89].

W praktyce, użycie parametru  $\epsilon$  w implementacji algorytmu MUE jest konieczne, nie tylko ze względu na wymuszanie rzadkości, ale przede wszystkim ze względu na stabilizację numeryczną algorytmu. Łatwo zauważyć, że jeśli  $\exists j, t : [\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}^{(n)}]_{jt} \rightarrow 0$  oraz  $x_{jt}^{(n)} > 0$  i  $[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt} > 0$  w  $n$ -tym kroku iteracyjnym, to stosując algorytm MUE w (4.55), uzyskuje się:  $x_{jt}^{(n+1)} \rightarrow \infty$ . W obliczeniach zmiennopozycyjnych o skończonej precyzji, taki przypadek spowoduje błąd

przepelnienia, a tym samym pojawienie się nieokreślonych wartości (typu  $NaN$ ) w aktualizowanych macierzach. Dlatego też najczęściej w praktyce przyjmuje się:  $\epsilon = \text{eps} = 2^{-52}$ .

Istotną zaletą algorytmu MUE jest jego mała złożoność obliczeniowa, która zależy znacząco od kosztu wyznaczenia odpowiednich gradientów  $\mathbf{G}_A$  i  $\mathbf{G}_X$ . Złożoność obliczeniową wyrażeń  $\mathbf{Y}\mathbf{X}^T$  i  $\mathbf{A}^T\mathbf{Y}$ , które występują w licznikach formuł iteracyjnych w (4.68), można oszacować jako  $O(IJT)$ . Dla wyrażeń w mianownikach, złożoność obliczeniowa zależy od sposobu ich obliczania. Stosując formę:  $\mathbf{A}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T)$  i  $(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{X}$  uzyskuje się  $O(J^2(I+T))$ , natomiast  $O(IJT)$  dla form  $(\mathbf{A}\mathbf{X})\mathbf{X}^T$  i  $\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{X})$ . Jeśli  $J \ll T$  lub  $J \ll I$ , pierwsza forma prowadzi do mniejszego kosztu obliczeniowego. Finalnie, złożoność obliczeniową algorytmu MUE można oszacować jako  $O(IJT + J^2I + J^2T)$ .

Niestety mała złożoność obliczeniowa (szacowana dla wykonania pojedynczej iteracji) nie oznacza niskiego kosztu obliczeniowego aktualizacji czynników. Należy również brać pod uwagę szybkość zbieżności algorytmu. Całkowity koszt obliczeniowy (aktualizacji czynników), to koszt obliczeniowy pojedynczej iteracji pomnożony przez liczbę iteracji wymaganą do spełnienia określonego kryterium zatrzymania.

Han i inni autorzy pracy [170] z roku 2009 analizowali szybkość zbieżności algorytmu ISRA, który jest blisko związany z algorytmem MUE. Niech

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}_t) = \{j : x_{jt} > 0\}, \quad \mathcal{A}(\mathbf{x}_t) = \{j : x_{jt} = 0\}, \quad (4.69)$$

są odpowiednio zbiorami indeksów zmiennych pasywnych i aktywnych w punkcie  $\mathbf{x}_t$ , zatem  $\mathcal{P}(\mathbf{x}_t) \cup \mathcal{A}(\mathbf{x}_t) = \{1, 2, \dots, J\}$ . Z ich badań wynika, że jeśli w punkcie granicznym  $\mathbf{x}_t^*$  spełnione są warunki komplementarności (4.34) oraz macierz zredukowanego hesjanu  $\mathbf{H}_R(\mathbf{x}_t^*) = [\mathbf{A}^T\mathbf{A}]_{j_1, j_2} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ , dla  $j_1, j_2 \in \mathcal{P}(\mathbf{x}_t^*)$  i  $r = |\mathcal{P}(\mathbf{x}_t^*)|$ , jest dodatnio określona w tym punkcie, to współczynnik asymptotycznej zbieżności sekwencji iteracyjnej  $\{\mathbf{x}_t^{(n)}\}$  dla  $n = 1, 2, \dots$  można wyrazić jako:

$$\tilde{\rho} = \max \{\rho(\mathbf{I}_r - \mathbf{D}_1\mathbf{H}_R(\mathbf{x}_t^*)), \rho(\mathbf{D}_2)\}, \quad (4.70)$$

gdzie

$$\mathbf{D}_1 = \text{diag} \left( \frac{x_{jt^*}}{[\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}_t^*]_j} \quad \text{dla } j \in \mathcal{P}(\mathbf{x}_t^*) \right), \quad (4.71)$$

$$\mathbf{D}_2 = \text{diag} \left( \frac{[\mathbf{A}^T\mathbf{y}_t]_j}{[\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}_t^*]_j} \quad \text{dla } j \in \mathcal{A}(\mathbf{x}_t^*) \right), \quad (4.72)$$

oraz  $\rho(\cdot)$  jest promieniem spektralnym macierzy. Z zależności (4.70) wynika górna granica wspomnianego współczynnika zbieżności:

$$\tilde{\rho} \leq \max \left\{ 1 - \rho_1 \min_{1 \leq j \leq r} \lambda_j(\mathbf{H}_R(\mathbf{x}_t^*)), \rho_2 \right\} < 1, \quad (4.73)$$

$\rho_1 = \min_{j \in \mathcal{P}(\mathbf{x}_t^*)} \left\{ \frac{x_{jt}^*}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^*]_j} \right\}$ ,  $\rho_2 = \max_{j \in \mathcal{A}(\mathbf{x}_t^*)} \left\{ \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{y}_t]_j}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_t^*]_j} \right\}$ , a  $\lambda_j(\cdot)$  jest  $j$ -tą wartością własną macierzy. Z rozważań przeprowadzonych w pracy [170] wynika, że  $\tilde{\rho} = 0$ , jeśli macierz  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  jest dodatnio określoną macierzą diagonalną. Dla losowo generowanych macierzy  $\mathbf{A}$  i wektora  $\mathbf{y}_t$ , współczynnik  $\tilde{\rho} \lesssim 1$ , co oznacza bardzo powolną zbieżność.

#### 4.4.2. Algorytm MKL

Algorytm MKL (ang. *Multiplicative updates for KL divergence*) jest moltiplikatywnym algorytmem minimalizującym uogólnioną dywergencję  $KL$ , wyrażoną przez (2.15). Bazuje na algorytmach RLA (ang. *Richardson-Lucky Algorithm*) [296, 379] i EMLL (ang. *Expectation-Maximization Maximum Likelihood*) [43, 248, 400]. W metodzie NMF pojawił się po raz pierwszy w pracy Lee i Seunga [257]. Obecnie należy do fundamentalnych algorytmów NMF. Podobnie jak algorytm MUE, można go wyprowadzić z reguły aktualizacji (4.52).

Niech funkcja  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D_{KL}(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$ , gdzie  $D_{KL}(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest zależnością (2.15). Gradienty funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  ze względu na  $a_{ij}$  i  $x_{jt}$  można przedstawić w postaci:

$$\nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T x_{jt} \left( 1 - \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}} \right), \quad (4.74)$$

$$\nabla_{x_{jt}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^I a_{ij} \left( 1 - \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}} \right). \quad (4.75)$$

Dekomponując gradienty (4.74) i (4.75) na składniki:  $\nabla_{a_{ij}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T x_{jt}$  i  $\nabla_{a_{ij}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T \frac{x_{jt} y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}}$  oraz  $\nabla_{x_{jt}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^I a_{ij}$  i  $\nabla_{x_{jt}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^I \frac{a_{ij} y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}}$ , a następnie stosując regułę aktualizacji (4.52), otrzymuje się algorytm MKL:

$$a_{ij} \leftarrow \frac{a_{ij}}{\sum_{t=1}^T x_{jt}} \sum_{t=1}^T \frac{x_{jt} y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}}, \quad x_{jt} \leftarrow \frac{x_{jt}}{\sum_{i=1}^I a_{ij}} \sum_{i=1}^I \frac{a_{ij} y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}}. \quad (4.76)$$



Postępując podobnie jak dla algorytmu MUE, zdefiniowano funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)})$  dla funkcji celu w zależności (2.15).

**Lemat 4.3.** *Funkcja*

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) &= \sum_i (y_{it} \ln y_{it} - y_{it}) + \sum_{i,j} a_{ij} x_{jt} \\ &\quad - \sum_{i,j} y_{it} \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \left( \ln a_{ij} x_{jt} - \ln \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right) \end{aligned} \quad (4.77)$$

jest funkcją pomocniczą dla funkcji  $\Psi(\mathbf{x}_t) = D_{KL}(\mathbf{y}_t || \mathbf{A}\mathbf{x}_t)$ , gdy  $t = 1, \dots, T$ .

**Dowód 4.3.** *Warunek  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t) = \Psi(\mathbf{x}_t)$  nie wymaga dowodu. Aby pokazać, że  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) \geq \Psi(\mathbf{x}_t)$ , zastosowano nierówność Jensena<sup>1</sup> do wypukłej funkcji  $-\ln \sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt}$  dla  $a_{ij} > 0$  i  $x_{jt} > 0$ , otrzymując:*

$$-\ln \sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt} \leq -\sum_{j=1}^J \varsigma_{ijt} \ln \frac{a_{ij} x_{jt}}{\varsigma_{ijt}}, \quad (4.78)$$

dla  $\forall i, j, t : \varsigma_{ijt} > 0$  oraz  $\sum_{j=1}^J \varsigma_{ijt} = 1$ . Jeśli  $\varsigma_{ijt} = \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}}$ , zachodzi nierówność:

$$-\ln \sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt} \leq -\sum_{j=1}^J \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \left( \ln a_{ij} x_{jt} - \ln \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right), \quad (4.79)$$

a więc spełniony jest warunek  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)}) \geq \Psi(\mathbf{x}_t)$ .

Reguły iteracyjne (4.76) nie zwiększają wartości funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ , jeśli przybliżenie początkowe spełnia warunek  $\forall i, j, t : a_{ij} > 0$  i  $x_{jt} > 0$ . Wynika to z nierówności (4.64), ponieważ przybliżenia iteracyjne faktora  $\mathbf{X}$  realizowane algorytmem (4.76) są rozwiązaniami zadania (4.62) z funkcją pomocniczą (4.77). Analogiczne rozważania można pokazać dla aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ , zatem spełniony jest warunek monotoniczności w (1.12).

Implementując formuły aktualizacji (4.76) na maszynach obliczeniowych o skończonej precyzji, należy dodać stałą eps do wyrażenia  $\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}$  w celu

<sup>1</sup> Dla rzeczywistej i wypukłej funkcji  $\phi$ , liczb  $\{x_j\}$  w jej dziedzinie i współczynników wagowych  $\varsigma_j > 0$ , gdy  $j = 1, \dots, J$ , spełniona jest nierówność Jensena:  $\phi \left( \frac{\sum_{j=1}^J \varsigma_j x_j}{\sum_{j=1}^J \varsigma_j} \right) \leq \frac{\sum_{j=1}^J \varsigma_j \phi(x_j)}{\sum_{j=1}^J \varsigma_j}$ .

uniknięcia niestabilności numerycznej algorytmu. Ponadto, stosując te formuły do estymacji czynników w algorytmie 2 oraz skalując estymowane komponenty do jednostkowych norm  $l_1$ , czyli dla  $p = 1$ , formuły aktualizacji (4.76) można uprościć. W notacji macierzowej uproszczone formuły iteracyjne algorytmu MKL mają postaci:

$$\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{A}^{(n-1)} \circledast \left( \mathbf{Y} \oslash (\mathbf{A}^{(n-1)} \mathbf{X}^{(n-1)} + \epsilon) \right) (\mathbf{X}^{(n-1)})^T, \quad (4.80)$$

$$\mathbf{X}^{(n)} = \mathbf{X}^{(n-1)} \circledast (\mathbf{A}^{(n)})^T \left( \mathbf{Y} \oslash (\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n-1)} + \epsilon) \right), \quad (4.81)$$

gdzie  $n$  – indeks kroku iteracji naprzemiennych oraz  $\epsilon = \text{eps}$ .

W algorytmie 2 krok 4 realizowany jest formułą (4.80), natomiast krok 7 formułą (4.81).

Złożoność obliczeniową algorytmu MKL można oszacować funkcją  $O(IJT)$ . Eksperymenty numeryczne [89] pokazują, że zbieżność algorytmu MKL jest również bardzo powolna.

#### 4.4.3. Algorytm $\alpha$ -NMF

Multiplikatywny algorytm minimalizujący dywergencję  $\alpha$ , wyrażoną wzorem (2.7), został zaproponowany w pracy [82]. W literaturze [70, 74, 89] często występuje pod nazwą  $\alpha$ -NMF. Dowód zbieżności tego algorytmu przedstawiono w pracy [74].

Niech w dywergencji  $\alpha$ ,  $\mathbf{p} = \mathbf{y}_t$  oraz  $\mathbf{q} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t$  dla  $t = 1, \dots, T$ . Po przyjęciu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T D_A^{(\alpha)}(\mathbf{y}_t || \mathbf{A}\mathbf{x}_t)$  i po przekształceniach uzyskuje się:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \sum_{i,t} y_{it} \frac{\left( \frac{y_{it}}{\sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt}} \right)^{\alpha-1} - 1}{\alpha(\alpha-1)} + \frac{\sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt} - y_{it}}{\alpha} \\ &= \sum_{i,t} y_{it} \phi \left( \frac{\sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt}}{y_{it}} \right), \end{aligned} \quad (4.82)$$

gdzie  $\phi(x) = \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} (\alpha + (1-\alpha)x - x^{1-\alpha})$  jest funkcją wypukłą dla  $x \neq 0$  i  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

Stosując w zależności (4.82) nierówność Jensena do funkcji  $\phi(\cdot)$ , można otrzymać funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  dla funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ :

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \sum_{i,t} y_{it} \phi \left( \frac{\sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt}}{y_{it}} \right) \leq \sum_{i,j,t} y_{it} \varsigma_{ijt} \phi \left( \frac{a_{ij} x_{jt}}{y_{it} \varsigma_{ijt}} \right) \\ &= G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}),\end{aligned}\quad (4.83)$$

gdzie  $\varsigma_{ijt} = \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_{j=1}^J a_{ij} x_{jt}^{(n)}} > 0$ . Łatwo zauważyć, że  $\forall i, t : \sum_j \varsigma_{ijt} = 1$ . Funkcja  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  spełnia oba warunki podane w (4.56).

Posługując się regułą iteracyjną (4.62), algorytm aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  można otrzymać z warunku stacjonarności funkcji pomocniczej  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$ , zatem z warunku:

$$\nabla_{x_{jt}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^I a_{ij} \left( 1 - \left( \frac{y_{it} \varsigma_{ijt}}{a_{ij} x_{jt}} \right)^\alpha \right) = 0, \quad (4.84)$$

wynika formuła iteracyjna dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ :

$$x_{jt}^{(n+1)} = x_{jt}^{(n)} \left( \frac{\sum_{i=1}^I a_{ij} \left( \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right)^\alpha}{\sum_{i=1}^I a_{ij}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}, \quad (4.85)$$

dla  $\alpha \neq 0$  i  $n$ -tego kroku iteracyjnego.

Wykonując analogiczne przekształcenia, można otrzymać następującą formułę iteracyjną dla aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ :

$$a_{ij}^{(n+1)} = a_{ij}^{(n)} \left( \frac{\sum_{t=1}^T x_{jt} \left( \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right)^\alpha}{\sum_{t=1}^T x_{jt}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}, \quad (4.86)$$

dla  $\alpha \neq 0$ .

Z podobnych względów jak w algorytmach MUE i MKL, implementując formuły iteracyjne (4.85) i (4.86), do wyrażenia  $a_{ip} x_{pt}^{(n)}$  należy dodać stałą  $\epsilon = \text{eps}$ , jeśli  $\alpha > 0$ , a także do  $y_{it}$ , jeśli  $\alpha < 0$  i  $\exists i, t : y_{it} \rightarrow 0$ .

W pracach [82, 89] formuły iteracyjne (4.85) i (4.86) wyprowadzone są za pomocą innych przekształceń. Posłużono się bowiem gradientową regułą aktualizacji

zmiennych transformowanych. Przykładowo, do aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  reguła ta dana jest zależnością:

$$\mathbf{X} \leftarrow \Phi^{-1}(\Phi(\mathbf{X}) - \eta \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})), \quad (4.87)$$

gdzie  $\Phi: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  – monotoniczna funkcja projekcji dla  $\mathbf{X} \geq \mathbf{0}$ .

Po przyjęciu  $\Phi(x) = x^\alpha$  uzyskuje się formułę iteracyjną w (4.85). Dla  $\Phi(x) = \ln(x)$  otrzymuje się regułę aktualizacji wzdłuż gradientów eksponencjalnych, dzięki której wyprowadzono rodzinę algorytmów multiplikatywnych SMART-NMF [71, 89]. Są to algorytmy minimalizujące różne miary statystyczne. Podejście to jest motywowane algorytmem SMART (ang. *Simultaneous Multiplicative Algebraic Reconstruction Technique*), stosowanym np. w rekonstrukcji obrazów tomograficznych [368, 369].

Teoretyczną złożoność obliczeniową algorytmu  $\alpha$ -NMF można również zgrubnie oszacować jako  $O(IJT)$ , uwzględniając jedynie operacje mnożenia elementarnego. Niestety faktyczna złożoność obliczeniowa jest znacznie większa, jeśli uwzględni się koszt potęgowania elementów macierzy, zwłaszcza jeśli potęgi te nie są liczbami całkowitymi. Podobnie jak algorytmy MUE i MKL, algorytm  $\alpha$ -NMF również charakteryzuje się bardzo powolną zbieżnością.

#### 4.4.4. Algorytm $\beta$ -NMF

Multiplikatywny algorytm  $\beta$ -NMF został zaproponowany przez Kompassa w [236], a następnie badany i rozwijany w pracach [71, 82, 89, 128]. Algorytm ten minimalizuje dywergencje  $\beta$ , wyrażoną w (2.27) dla  $\beta \in [0, 1]$ . Poniżej przedstawiono sposób wyprowadzenia formuł iteracyjnych algorytmu  $\beta$ -NMF, przeprowadzając podobne rozważania jak dla algorytmu  $\alpha$ -NMF. Sposób ten wydaje się prostszy od przedstawionego w pracy [236].

Niech zatem  $\mathbf{p} = \mathbf{y}_t$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t$  oraz  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T D_B^{(\beta)}(\mathbf{y}_t || \mathbf{A}\mathbf{x}_t)$  dla  $\beta \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 0\}$ . Funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \sum_{i,t} \frac{y_{it}^{\beta+1} - (\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt})^{\beta+1}}{\beta(\beta+1)} - \frac{(\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt})^\beta (y_{it} - (\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}))}{\beta} \\ &= \sum_{i,t} y_{it}^{\beta+1} \phi\left(\frac{\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}}{y_{it}}\right), \end{aligned} \quad (4.88)$$

gdzie  $\phi(x) = \frac{1}{\beta(\beta+1)} (1 - (\beta+1)x^\beta + \beta x^{\beta+1})$ . Dla  $x \in \mathbb{R}_+$  oraz  $\beta \in (0, 1]$  spełniony jest warunek:  $\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = (1 - \beta)x^{\beta-2} + \beta x^{\beta-1} > 0$ , a zatem w tym zakresie

parametru funkcja  $\phi(\cdot)$  jest ściśle wypukła w  $\mathbb{R}_+$ . Stosując w zależności (4.88) nierówność Jensena do funkcji  $\phi(\cdot)$ , uzyskuje się funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  dla funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ :

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \sum_{i,t} y_{it}^{\beta+1} \phi\left(\frac{\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}}{y_{it}}\right) \leq \sum_{i,j,t} y_{it}^{\beta+1} \varsigma_{ijt} \phi\left(\frac{a_{ij}x_{jt}}{y_{it}\varsigma_{ijt}}\right) \\ &= G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}),\end{aligned}\quad (4.89)$$

gdzie  $\varsigma_{ijt} = \frac{a_{ij}x_{jt}^{(n)}}{\sum_{j=1}^J a_{ij}x_{jt}^{(n)}} > 0$  oraz  $\forall i, t : \sum_j \varsigma_{ijt} = 1$ .

Funkcja  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  w (4.89) spełnia oba warunki podane w (4.56). Rozwiązanie zadania (4.62) można uzyskać z warunku stacjonarności funkcji  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$ , zatem:

$$\nabla_{x_{jt}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \sum_{i=1}^I y_{it}^{\beta+1} a_{ij} \left[ \left(\frac{a_{ij}x_{jt}}{y_{it}\varsigma_{ijt}}\right)^\beta - \left(\frac{a_{ij}x_{jt}}{y_{it}\varsigma_{ijt}}\right)^{\beta-1} \right] = 0. \quad (4.90)$$

Po przekształceniach równania (4.90) otrzymujemy regułę aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ :

$$x_{jt}^{(n+1)} = x_{jt}^{(n)} \frac{\sum_{i=1}^I a_{ij}y_{it} \left(\sum_{p=1}^J a_{ip}x_{pt}^{(n)}\right)^{\beta-1}}{\sum_{i=1}^I a_{ij} \left(\sum_{p=1}^J a_{ip}x_{pt}^{(n)}\right)^\beta}, \quad (4.91)$$

w  $n$ -tym kroku iteracyjnym. Analogicznie formuła iteracyjna dla aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  ma postać:

$$a_{ij}^{(n+1)} = a_{ij}^{(n)} \frac{\sum_{t=1}^T x_{jt}y_{it} \left(\sum_{p=1}^J a_{ip}x_{pt}^{(n)}\right)^{\beta-1}}{\sum_{t=1}^T x_{jt} \left(\sum_{p=1}^J a_{ip}x_{pt}^{(n)}\right)^\beta}. \quad (4.92)$$

Łatwo zauważyć, że dla  $\beta = 0$ , formuły iteracyjne (4.91) i (4.92) sprowadzają się do algorytmu (4.76), czyli minimalizują uogólnioną dywergencję  $KL$ . Z rozważań przedstawionych w rozdziale 4.4.2 wynika, że dla  $\beta = 0$ , formuły iteracyjne w (4.91) i (4.92) nie zwiększają uogólnionej dywergencji  $KL$ . Algorytm ten jest więc zbieżny do jakiegoś punktu granicznego, pomimo że dla  $\beta = 0$  funkcja  $\phi(\cdot)$  w zależności (4.88) nie jest ściśle wypukła w dziedzinie  $[0, \infty)$ . W praktyce zaobserwowano, że algorytm ten nie zwiększa wartości dywergencji  $\beta$  nawet dla  $\beta > 1$

lub  $\beta < 0$  (włączając dywergencję *IS*). Jednak dla tego przypadku nie jest jeszcze znany dowód zbieżności.

Jeśli  $\beta \neq 0$  lub  $\beta \neq 1$ , algorytm  $\beta$ -NMF charakteryzuje się największym kosztem obliczeniowym przypadającym na pojedynczą iterację, jak również bardzo powolną zbieżnością.

#### 4.4.5. Algorytmy zregularyzowane

Zregularyzowane algorytmy multiplikatywne minimalizują zregularyzowaną funkcję celu podaną w (3.38), gdzie jeden lub oba człony kary są w pewien sposób określone. Człony te mogą być powiązane z prawie każdą funkcją celu, a zatem każdy z omawianych wcześniej algorytmów multiplikatywnych może być rozszerzony o pewne elementy, wynikające z istnienia członów kary. Przykładowo, dla zregularyzowanej funkcji celu:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \alpha_A U_A(\mathbf{A}) + \alpha_X U_X(\mathbf{X}), \quad (4.93)$$

gdzie  $\alpha_A, \alpha_X \geq 0$ , zregularyzowany algorytm MUE przyjmuje postać:

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{X}^T]_{ij}}{\max\left\{\epsilon, [\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{ij} + \alpha_A \nabla_{a_{ij}} U_A(\mathbf{A})\right\}}, \quad (4.94)$$

$$x_{jt} \leftarrow x_{jt} \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}}{\max\left\{\epsilon, [\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X}]_{jt} + \alpha_X \nabla_{x_{jt}} U_X(\mathbf{X})\right\}}, \quad (4.95)$$

gdzie  $\epsilon = \text{eps}$ .

Dla członów kary występujących w zadaniach (3.41) i (3.42),  $\nabla_{a_{ij}} U_A(\mathbf{A}) = 1$  oraz  $\nabla_{x_{jt}} U_X(\mathbf{X}) = 1$ , a zatem funkcje  $\max\{\cdot, \cdot\}$  występujące w regułach (4.94) i (4.95) mogą być pominięte.

Jeśli  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  są dane zależnościami (3.67) i (3.68), to

$$\nabla_{a_{ij}} U_A(\mathbf{A}) = \sum_{l \in S_i} \left( \frac{\nu_{il}}{\delta_A} \right) \frac{\partial \psi(a_{ij} - a_{lj}, \delta_A)}{\partial a_{ij}}, \quad (4.96)$$

$$\nabla_{x_{jt}} U_X(\mathbf{X}) = \sum_{l \in S_t} \left( \frac{\nu_{tl}}{\delta_X} \right) \frac{\partial \psi(x_{jt} - x_{jl}, \delta_X)}{\partial x_{jt}}. \quad (4.97)$$

Algorytm multiplikatywny oparty na iteracyjnej formule (4.95), który wymusza gładkość wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{X}$  za pomocą członu (4.97),

został zaproponowany w pracy [496]. W pracy tej badano różne funkcje potencjału w kontekście użyteczności do ślepej separacji gładkich sygnałów ukrytych. Najefektywniejsze wyniki uzyskano dla funkcji potencjału  $\psi(\xi, \delta)$ , zaproponowanej przez Greena [157] (tabela 3.1) do usprawnienia bayesowskiej rekonstrukcji obrazów tomograficznych. Podobne wyniki otrzymano stosując ten algorytm do ślepej separacji obrazów [498].

Jednym z fundamentalnych algorytmów w grupie zregularyzowanych algorytmów multiplikatywnych jest algorytm LNMF [267]. Jego funkcja celu ma postać (3.83), gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest uogólnioną dywergencją  $KL$ . Algorytm ten można wyprowadzić w podobny sposób jak algorytm MKL. Przyjęto, że pomocnicze funkcje celu,  $\tilde{G}(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)})$  dla faktora  $\mathbf{A}$  i  $\tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  dla faktora  $\mathbf{X}$ , można wyrazić zależnościami:

$$\tilde{G}(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) = G_A(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) + \Upsilon(\mathbf{A}, \mathbf{X}), \quad (4.98)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = G_X(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \Upsilon(\mathbf{A}, \mathbf{X}), \quad (4.99)$$

$$\Upsilon(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \alpha_A \sum_{m=1}^J \sum_{n=1}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{mn} - \alpha_X \sum_{m=1}^J [\mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{mm}, \quad (4.100)$$

gdzie  $G_X(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \sum_{t=1}^T G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)})$  oraz  $G(\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_t^{(n)})$  ma postać (4.77). Funkcję  $G_A(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)})$  można przedstawić w podobny sposób jak funkcję  $G_X(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$ . Ponieważ funkcja  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_t^{(n)})$  spełniają warunki (4.56), można więc łatwo udowodnić, że funkcje  $\tilde{G}(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)})$  i  $\tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  są funkcjami pomocniczymi dla funkcji celu w algorytmie LNMF. Zgodnie z formułą aktualizacji w (4.62), aproksymacja  $\mathbf{X}^{(n+1)}$  może być wyznaczona z warunku:  $\nabla_{\mathbf{X}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \mathbf{0}$ , zatem:

$$\nabla_{x_{jt}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \sum_{i=1}^I a_{ij} - \sum_{i=1}^I \frac{1}{x_{jt}} \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} - 2\alpha_X x_{jt} = 0. \quad (4.101)$$

Sprowadzając równanie (4.101) do postaci równania kwadratowego dla  $x_{jt} > 0$ , zakładając normalizację:  $\sum_{i=1}^I a_{ij} = 1$ , a następnie wybierając rozwiązanie dopuszczalne, otrzymuje się formułę iteracyjną:

$$x_{jt}^{(n+1)} = \frac{1 - \sqrt{1 - 8\alpha_X \hat{x}_{jt}^{(n)}}}{4\alpha_X}, \quad \text{gdzie} \quad \hat{x}_{jt}^{(n)} = \sum_{i=1}^I \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \quad (4.102)$$

dla  $\alpha_X > 0$ .

Po przyjęciu  $\bar{x}_{jt}^{(n)} = \sup(\hat{x}_{jt}^{(n)})$  oraz  $\alpha_X \ll \frac{1}{8\bar{x}_{jt}^{(n)}}$  aktualizacje  $x_{jt}^{(n+1)}$  w (4.102) można aproksymować zależnością:  $x_{jt}^{(n+1)} \cong \xi \sqrt{\hat{x}_{jt}^{(n)}}$ , gdzie  $\xi > 0$  jest skalar. Jeśli wektory wierszowe w  $\mathbf{X}$  są normalizowane, formuła aktualizacji w (4.102) sprowadza się do reguły iteracyjnej algorytmu LNMF podanego w [267] dla faktora  $\mathbf{X}$ :

$$x_{jt}^{(n+1)} = \sqrt{x_{jt}^{(n)} \frac{\sum_{i=1}^I a_{ij} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}}}. \quad (4.103)$$

Z warunku  $\nabla_{\mathbf{A}} \tilde{G}(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) = \mathbf{0}$  otrzymujemy:

$$\nabla_{a_{ij}} \tilde{G}(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) = \sum_{t=1}^T x_{jt} - \sum_{t=1}^T \frac{1}{a_{ij}} \frac{a_{ij}^{(n)} x_{jt} y_{it}}{\sum_p a_{ip}^{(n)} x_{pt}} - 2\alpha_A \sum_{p=1}^J a_{ip} = 0. \quad (4.104)$$

Dla rozwiązania dopuszczalnego uzyskuje się formułę iteracyjną faktora  $\mathbf{A}$ :

$$a_{ij}^{(n+1)} = \frac{b_{ij}^{(n)} - \sqrt{(b_{ij}^{(n)})^2 - 8\alpha_A \hat{a}_{ij}}}{4\alpha_A}, \quad \text{gdzie} \quad \hat{a}_{ij} = \sum_{t=1}^T \frac{a_{ij}^{(n)} x_{jt} y_{it}}{\sum_p a_{ip}^{(n)} x_{pt}} \quad (4.105)$$

oraz  $b_{ij}^{(n)} = \sum_{t=1}^T x_{jt} - 2\alpha_A \sum_{p \neq j} a_{ip}^{(n)}$  dla  $\alpha_A > 0$ .

Stosując algorytmy multiplikatywne, można również minimalizować zregularizowane funkcje celu w (3.80) i (3.81), wymuszające ortogonalność estymowanych komponentów. Aby wyprowadzić algorytm minimalizujący funkcję celu w (3.80) ze względu na  $\mathbf{X}$  założono, że funkcja  $D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażona jest przez odległość euklidesową w (2.4). Ortogonalność wymuszana jest tylko w wierszach macierzy  $\mathbf{X}$ , czyli  $\alpha_A = 0$  i  $\alpha_X > 0$ . Z przyjętych założeń wynika, że funkcję celu w (3.81) można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \alpha_X \|\mathbf{X}\mathbf{X}^T - \mathbf{I}_J\|_F^2 \\ &= \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}) - 2 \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{A}\mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X}) \\ &\quad + \alpha_X \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T \mathbf{X}\mathbf{X}^T) - 2\alpha_X \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T) + \alpha_X J. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Punkt stacjonarny funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  występuje dla takiego  $\mathbf{X}$ , dla którego  $\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{0}$ , a zatem:



$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= -2\mathbf{A}^T \mathbf{Y} + 2\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X} + 4\alpha_X \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{X} - 4\alpha_X \mathbf{X} \\ &= \nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{0},\end{aligned}\quad (4.107)$$

gdzie  $\nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X} + 4\alpha_X \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$  oraz  $\nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T \mathbf{Y} + 4\alpha_X \mathbf{X}$ . Stosując formułę aktualizacji w (4.52), algorytm iteracyjny aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  ma postać:

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} \circledast (\mathbf{A}^T \mathbf{Y} + 2\alpha_X \mathbf{X}) \oslash (\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X} + 2\alpha_X \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{X}). \quad (4.108)$$

Jeśli  $\alpha_A > 0$  i  $\alpha_X = 0$ , to

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \circledast (\mathbf{Y} \mathbf{X}^T + 2\alpha_A \mathbf{A}) \oslash (\mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{X}^T + 2\alpha_A \mathbf{A} \mathbf{A}^T \mathbf{A}). \quad (4.109)$$

Li, Wu i Peng [274] wyprowadzili formuły iteracyjne podobne jak w (4.108) i (4.109), stosując inne podejście, a mianowicie oparte na analizie warunków optymalności *KKT*. Następnie definiując funkcją pomocniczą udowodnili, że algorytm ten gwarantuje monotoniczną zbieżność do punktu stacjonarnego.

Minimalizacja funkcji celu w (3.81) za pomocą algorytmów multiplikatywnych jest trochę bardziej skomplikowana, należy bowiem też estymować macierze mnożników Lagrange'a  $\mathbf{\Lambda}_A$  i  $\mathbf{\Lambda}_X$ . Zakładając, że  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest wyrażona przez funkcję odległości euklidesowej (2.4) oraz  $\mathbf{\Lambda}_A = \mathbf{0}$ , funkcję celu w (3.81) przekształcono do postaci:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \text{tr}(\mathbf{\Lambda}_X^T (\mathbf{X} \mathbf{X}^T - \mathbf{I}_J)) \\ &= -2 \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{\Lambda}_X^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T) + \text{const} \\ &= -2 \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) + \text{tr}((\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{\Lambda}_X^T) \mathbf{X} \mathbf{X}^T) + \text{const}.\end{aligned}\quad (4.110)$$

Ding i pozostali autorzy pracy [113] udowodnili, że dla dowolnych macierzy symetrycznych  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}_+^{P \times P}$  i  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}_+^{Q \times Q}$  oraz macierzy  $\mathbf{S} = [s_{pq}] \in \mathbb{R}_+^{P \times Q}$ ,  $\tilde{\mathbf{S}} = [\tilde{s}_{pq}] \in \mathbb{R}_+^{P \times Q}$ , jest spełniona nierówność:

$$\sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q \frac{[\mathbf{U} \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{V}]_{pq} s_{pq}^2}{\tilde{s}_{pq}} \geq \text{tr}(\mathbf{S}^T \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}). \quad (4.111)$$

Niech  $\mathbf{U} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{\Lambda}_X^T$ ,  $\mathbf{V} = \mathbf{I}_T$ ,  $\mathbf{S} = \mathbf{X}$  oraz  $\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{X}^{(n)}$ . Korzystając z nierówności (4.111) oraz nierówności  $\xi \geq 1 + \ln(\xi)$  dla  $\xi > 0$ , uzyskuje się funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  do funkcji (4.110):

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) &= -2 \sum_{j,t} [\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt} x_{jt}^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{x_{jt}}{x_{jt}^{(n)}} \right) \\
&+ \sum_{j,t} \frac{[(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{\Lambda}_X^T) \mathbf{X}^{(n)}]_{jt} x_{jt}^2}{x_{jt}^{(n)}} + \text{const.} \quad (4.112)
\end{aligned}$$

Z warunku  $\nabla_{\mathbf{X}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \mathbf{0}$  oraz z reguły (4.62) otrzymano:

$$x_{jt}^{(n+1)} = x_{jt}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}}{[(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{\Lambda}_X^T) \mathbf{X}^{(n)}]_{jt}}}. \quad (4.113)$$

Do wyznaczenia macierzy mnożników Lagrange'a  $\mathbf{\Lambda}_X$  wykorzystano warunek komplementarności podany w (4.34), z którego wynika:  $\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^*) \circledast \mathbf{X}^* = \mathbf{0}$ , zatem:

$$\begin{aligned}
\mathbf{1}_{1 \times J} (\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \circledast \mathbf{X}) \mathbf{1}_{T \times 1} &= \mathbf{1}_{1 \times J} ([\mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X} - \mathbf{Y}) + \mathbf{\Lambda}_X^T \mathbf{X}] \circledast \mathbf{X}) \mathbf{1}_{T \times 1} \\
&= \text{tr} (\mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X} - \mathbf{Y}) \mathbf{X}^T) \\
&+ \text{tr} (\mathbf{\Lambda}_X^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T) = 0. \quad (4.114)
\end{aligned}$$

Po uwzględnieniu warunku ortogonalności  $\mathbf{X} \mathbf{X}^T = \mathbf{I}_J$  w zależności (4.114) otrzymano macierz mnożników  $\mathbf{\Lambda}_X$ :

$$\mathbf{\Lambda}_X = \mathbf{A}^T \mathbf{Y} \mathbf{X}^T - \mathbf{A}^T \mathbf{A}. \quad (4.115)$$

Dla  $n$ -tej iteracji macierz mnożników ma postać:  $\mathbf{\Lambda}_X^{(n)} = \mathbf{A}^T \mathbf{Y} (\mathbf{X}^{(n)})^T - \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ . Po podstawieniu do (4.113) algorytm minimalizujący funkcję (4.110) ze względu na  $\mathbf{X}$  ma następującą formę:

$$x_{jt}^{(n+1)} = x_{jt}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y} (\mathbf{X}^{(n)})^T \mathbf{X}^{(n)}]_{jt}}}. \quad (4.116)$$

Po przyjęciu  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J$  oraz  $\mathbf{\Lambda}_X = \mathbf{0}$  w (3.81) algorytm dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$  ma postać:

$$a_{ij}^{(n+1)} = a_{ij}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{Y} \mathbf{X}^T]_{ij}}{[\mathbf{A}^{(n)} (\mathbf{A}^{(n)})^T \mathbf{Y} \mathbf{X}^T]_{ij}}}. \quad (4.117)$$

Poszukiwanie rozwiązań zadania minimalizacji funkcji celu wyrażonej w postaci (3.81) można też realizować multiplikatywnymi algorytmami aproksymacji

w rozmaiłości Stiefela (ang. *Stiefel manifold*) [417]. Algorytmy bazujące na takim podejściu można odnaleźć w pracach [64, 469, 470]. Zakładając aktualizację fatora  $\mathbf{X}$ , rozmaiłość Stiefela określa w przestrzeni  $\mathbb{R}^{J \times T}$  zbiór macierzy ortogonalnych, spełniających warunek  $\mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{I}_J$ . Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2}D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej w (2.4). Gradient funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jest styczny do rozmaiłości Stiefela w punkcie  $\mathbf{X}^{(n)}$ . Jest to tzw. gradient naturalny [64, 120] na tej rozmaiłości i dla  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  w punkcie  $\mathbf{X}^{(n)}$  wyrażony jest następująco:

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n)}) &= \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n)}) - \mathbf{X}^{(n)} \left( \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n)}) \right)^T \mathbf{X}^{(n)} \\ &= \mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{X}^{(n)} - \mathbf{Y}) - \mathbf{X}^{(n)} \left( \mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{X}^{(n)} - \mathbf{Y}) \right)^T \mathbf{X}^{(n)} \\ &= \mathbf{X}^{(n)} \mathbf{Y}^T \mathbf{A}\mathbf{X}^{(n)} - \mathbf{A}^T \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (4.118)$$

Stosując regułę aktualizacji w (4.52), gdzie gradient dany jest zależnością (4.118), otrzymuje się:

$$\mathbf{X}^{(n+1)} = \mathbf{X}^{(n)} \circledast (\mathbf{A}^T \mathbf{Y}) \circledcirc (\mathbf{X}^{(n)} \mathbf{Y}^T \mathbf{A}\mathbf{X}^{(n)}), \quad (4.119)$$

$$\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{A}^{(n)} \circledast (\mathbf{Y}\mathbf{X}^T) \circledcirc (\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}\mathbf{Y}^T \mathbf{A}^{(n)}). \quad (4.120)$$

Kolejne algorytmy wymuszające ortogonalność estymowanych faktorów oraz ich zastosowanie można odnaleźć, np. w pracach [311, 361].

Do kolejnej grupy zregularyzowanych algorytmów multiplikatywnych należy zaliczyć algorytmy FNMF i DNMF. Ponieważ algorytm DNMF powstał na bazie FNMF, podane rozważania dotyczą tylko algorytmu DNMF. Algorytm ten minimalizuje zregularyzowaną funkcję celu (3.90). Aby wyprowadzić regułę iteracyjną aktualizacji fatora  $\mathbf{X}$ , zdefiniowano funkcję pomocniczą  $\tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  zgodnie z (4.99). Składnik  $G_X(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  wyrażono za pomocą funkcji pomocniczej algorytmu MKL, a  $\Upsilon(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jako człon regularyzujący w funkcji (3.90), zatem:

$$\tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{W}\mathbf{X}^T). \quad (4.121)$$

Przyjmując oznaczenia takie jak w (3.88)–(3.90), z warunku  $\nabla_{\mathbf{X}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) = \mathbf{0}$  wynika:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{X}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) &= \nabla_{\mathbf{X}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \mathbf{X}\mathbf{W} \\ &= \nabla_{\mathbf{X}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \gamma \mathbf{X}\mathbf{W}_1 - \delta \mathbf{X}\mathbf{W}_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \nabla_{\mathbf{X}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \gamma \mathbf{X} (\mathbf{I}_T - \mathbf{M}) (\mathbf{I}_T - \mathbf{M})^T \\
&- \delta \mathbf{X} (\mathbf{M} - \mathbf{E}_T) (\mathbf{M} - \mathbf{E}_T)^T = \nabla_{\mathbf{X}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) + \gamma \mathbf{X} \\
&- 2\gamma \mathbf{X} \mathbf{M} + (\gamma - \delta) \mathbf{X} \mathbf{M} \mathbf{M}^T + 2\delta \mathbf{X} \mathbf{M} \mathbf{E}_T^T - \delta \mathbf{X} \mathbf{E}_T \mathbf{E}_T^T \\
&= \mathbf{0}.
\end{aligned} \tag{4.122}$$

Po podstawieniu za  $G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)})$  funkcję z (4.77) oraz wyrażeniu macierzy  $\mathbf{M}$  za pomocą (3.87), równanie  $\left[ \nabla_{\mathbf{X}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) \right]_{jt} = 0$  można zapisać następująco:

$$\begin{aligned}
\nabla_{x_{jt}} \tilde{G}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) &= \sum_{i=1}^I a_{ij} - \sum_{i=1}^I \frac{1}{x_{jt}} \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} + \gamma x_{jt} \\
&- \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|} \sum_{k \in \mathcal{R}_k} x_{jk} + \frac{\delta}{T} \sum_{s=1}^T x_{js} = 0.
\end{aligned} \tag{4.123}$$

W algorytmie DNMF zaproponowanym w pracy [473] przyjęto, że wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}$  podlegają skalowaniu do jednostkowej normy  $l_1$ , czyli  $\sum_{i=1}^I a_{ij} = 1$ . Ponadto, przyjęto że ostatni składnik w (4.123) w nieznacznym stopniu zależy od  $x_{jt}$ , a więc może być aproksymowany przez  $j$ -ty element średniej próbkowej wektorów  $\{\mathbf{x}_t^{(n)}\}$ . Niech  $\bar{\mathbf{x}}^{(n)} = [\bar{x}_j^{(n)}]$ , gdzie  $\bar{x}_j^{(n)} = \frac{1}{T} \sum_{s=1}^T x_{js}^{(n)}$ . Uwzględnivszy te założenia, równanie (4.123) dla  $x_{jt} > 0$  można przekształcić do równania kwadratowego:

$$\alpha_{jt} x_{jt}^2 + \beta_{jt}^{(n)} x_{jt} + c_{jt}^{(n)} = 0, \tag{4.124}$$

gdzie

$$\alpha_{jt} = \gamma - \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|}, \quad \beta_{jt}^{(n)} = 1 + \delta \bar{x}_j^{(n)} - \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|} \sum_{k \in \mathcal{R}_k \setminus \{t\}} x_{jk}^{(n)}, \quad c_{jt}^{(n)} = - \sum_{i=1}^I \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}}.$$

Jeśli  $\gamma > \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|}$ , to  $\alpha_{jt} > 0$ . Warunek ten spełniony jest w praktycznych zastosowaniach, ponieważ  $|\mathcal{R}_k| \geq 2$  i zwykle przyjmuje się:  $0 < \delta < \gamma < 1$ . Ponieważ  $c_{jt}^{(n)} < 0$ , więc  $(\beta_{jt}^{(n)})^2 - 4\alpha_{jt} c_{jt}^{(n)} > (\beta_{jt}^{(n)})^2 > 0$ . Z podanych rozważań wynika, że rozwiązaniem zadania (4.62) z funkcją pomocniczą (4.121) jest następujący pierwiastek równania (4.124):

$$x_{jt}^{(n+1)} = \frac{-\beta_{jt}^{(n)} + \sqrt{(\beta_{jt}^{(n)})^2 - 4\alpha_{jt} c_{jt}^{(n)}}}{2\alpha_{jt}}. \tag{4.125}$$

Jeśli  $x_{jt}^{(0)} > 0$ , sekwencje iteracyjne  $\{x_{jt}^{(n)}\}$  generowane formułą (4.125) są nieujemne.

Przyjmując uproszczenia podane w pracy [473], ostatni składnik równania (4.123) można zapisać w postaci:  $\frac{\delta}{T} \sum_{s=1}^T x_{js} = \frac{\delta}{T} x_{jt} + \frac{\delta}{T} \sum_{s \neq t} x_{js}$ . Zakładając, że człon  $\frac{\delta}{T} \sum_{s \neq t} x_{js}$  jest określony na podstawie macierzy  $\mathbf{X}^{(n)}$ , współczynniki  $\alpha_{jt}$  i  $\beta_{jt}^{(n)}$  w (4.124) można wyrazić w postaci uproszczonej:

$$\alpha_{jt} = \gamma - \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|} + \frac{\delta}{T}, \quad \beta_{jt}^{(n)} = 1 + \frac{\delta}{T} \sum_{s \neq t} x_{js}^{(n)} - \frac{\gamma + \delta}{|\mathcal{R}_k|} \sum_{k \in \mathcal{R}_k \setminus \{t\}} x_{jk}^{(n)}, \quad (4.126)$$

oraz  $c_{jt}^{(n)}$  pozostaje bez zmian. Jeśli  $|\mathcal{R}_k| \geq 2$  i  $0 < \delta < \gamma < 1$ , to  $\alpha_{jt} > 0$ .

Algorytmy NMF z klasyfikatorem SVM (tzw. NMF/SVM), które zaproponowano w pracy [531], również należą do klasy algorytmów multiplikatywnych. Dalej krótko scharakteryzowano algorytm, który minimalizuje funkcję celu (3.38), gdzie  $D(\mathbf{Y} \parallel \mathbf{A}\mathbf{X}) = \alpha D_{KL}(\mathbf{Y} \parallel \mathbf{A}\mathbf{X})$ ,  $\alpha_X = 1$  i  $\alpha_A = 0$ , a funkcja kary  $U_X(\mathbf{X})$  wyrażona jest przez (3.93). Tak zdefiniowana funkcja celu zależy również od wektora mnożników Lagrange'a  $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_t] \in \mathbb{R}^T$ , zatem *de facto* jest postaci:  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda})$ . Jest to funkcja wypukła ze względu na argumenty  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{X}$  lub  $\boldsymbol{\lambda}$ . Parameter  $\alpha$  powinien początkowo mieć dużą wartość, a następnie jego wartość powinna maleć, np. wykładniczo, w funkcji liczby iteracji naprzemiennych. Dla minimalizacji funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda})$  ze względu na poszczególne argumenty przyjęto następujące funkcje pomocnicze:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) &= \alpha \sum_{i,t} (y_{it} \ln y_{it} - y_{it}) + \alpha \sum_{i,j,t} a_{ij} x_{jt} \\ &- \alpha \sum_{i,j,t} y_{it} \frac{a_{ij}^{(n)} x_{jt}}{\sum_p a_{ip}^{(n)} x_{pt}} \left( \ln a_{ij} x_{jt} - \ln \frac{a_{ij}^{(n)} x_{jt}}{\sum_p a_{ip}^{(n)} x_{pt}} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l,t=1}^T \sum_{j=1}^J \lambda_l \lambda_t \tilde{y}_l \tilde{y}_t x_{jl} x_{jt} - \sum_{t=1}^T \lambda_t. \end{aligned} \quad (4.127)$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) &= \alpha \sum_{i,t} (y_{it} \ln y_{it} - y_{it}) + \alpha \sum_{i,j,t} a_{ij} x_{jt} \\ &- \alpha \sum_{i,j,t} y_{it} \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \left( \ln a_{ij} x_{jt} - \ln \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{l,t=1}^T \sum_{j=1}^J \left( \frac{m_{tl}^+ x_{jl}^{(n)}}{x_{jt}^{(n)}} x_{jt}^2 - m_{tl}^- x_{jt}^{(n)} x_{jl}^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{x_{jt} x_{jl}}{x_{jt}^{(n)} x_{jl}^{(n)}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{t=1}^T \lambda_t \right), \tag{4.128}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}^{(n)}) & = \alpha \sum_{i,t} (y_{it} \ln y_{it} - y_{it}) + \alpha \sum_{i,j,t} a_{ij} x_{jt} \\
& - \alpha \sum_{i,j,t} y_{it} \frac{a_{ij} x_{jt}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}} \left( \ln a_{ij} x_{jt} - \ln \frac{a_{ij} x_{jt}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}} \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{l,t=1}^T \left( \frac{n_{tl}^+ \lambda_l^{(n)}}{\lambda_t^{(n)}} \lambda_t^2 - n_{tl}^- \lambda_t^{(n)} \lambda_l^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{\lambda_t \lambda_l}{\lambda_t^{(n)} \lambda_l^{(n)}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{t=1}^T \lambda_t \right), \tag{4.129}
\end{aligned}$$

gdzie  $n_{tl} = \tilde{y}_l \tilde{y}_t \sum_{j=1}^J x_{jl} x_{jt}$ ,  $n_{tl}^+ = \max(n_{tl}, 0)$ ,  $n_{tl}^- = \max(-n_{tl}, 0)$ ,  $m_{tl} = \lambda_l \lambda_t \tilde{y}_l \tilde{y}_t$ ,  $m_{tl}^+ = \max(m_{tl}, 0)$  oraz  $m_{tl}^- = \max(-m_{tl}, 0)$ . Dowody potwierdzające, że funkcje (4.127), (4.128) i (4.129) są funkcjami pomocniczymi funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda})$  (według definicji 4.1) można odnaleźć w pracach [394, 531].

Reguły iteracyjne naprzemiennej aktualizacji argumentów  $\{\mathbf{A}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\lambda}\}$  uzyskiwane są z warunków stacjonarności odpowiednich funkcji (4.127), (4.128) i (4.129). Warunek:  $\nabla_{a_{ij}} G(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n)}) \triangleq 0$  prowadzi zatem do podobnej reguły iteracyjnej jak w algorytmie MKL (reguła aktualizacji w (4.76) dla macierzy  $\mathbf{A}$ ). Z kolei, z warunku:  $\nabla_{x_{ij}} G(\mathbf{X}, \mathbf{X}^{(n)}) \triangleq 0$  uzyskuje się:

$$\alpha \left( \sum_{i=1}^I a_{ij} - \sum_{i=1}^I \frac{1}{x_{jt}} \frac{a_{ij} x_{jt}^{(n)} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} \right) + \sum_{l=1}^J \left( \frac{m_{tl}^+ x_{jl}^{(n)}}{x_{jt}^{(n)}} x_{jt} - \frac{m_{tl}^- x_{jt}^{(n)} x_{jl}^{(n)}}{x_{jt}} \right) = 0.$$

Wykonując podobne przekształcenia jak dla algorytmu DNMF, uzyskuje się regułę aktualizacji dla faktora  $\mathbf{X}$  w postaci (4.125), gdzie:

$$\alpha_{jt}^{(n)} = \sum_{l=1}^J m_{tl}^+ x_{jl}^{(n)}, \quad \beta_{jt}^{(n)} = \alpha x_{jt}^{(n)} \sum_{i=1}^I a_{ij}, \tag{4.130}$$

$$c_{jt}^{(n)} = -(x_{jt}^{(n)})^2 \sum_{l=1}^T \left( \frac{\alpha a_{ij} y_{it}}{\sum_p a_{ip} x_{pt}^{(n)}} + m_{tl}^- x_{jl}^{(n)} \right). \quad (4.131)$$

Warunek stacjonarności:  $\nabla_{\lambda_t} G(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}^{(n)}) \triangleq 0$  również prowadzi do równania kwadratowego, z którego wynika następująca reguła aktualizacji:

$$\lambda_t^{(n+1)} = \lambda_t^{(n)} \frac{1 + \sqrt{1 + 4(\sum_{l=1}^T n_{tl}^+ \lambda_l^{(n)})(\sum_{l=1}^T n_{tl}^- \lambda_l^{(n)})}}{2 \sum_{l=1}^T n_{tl}^+ \lambda_l^{(n)}}. \quad (4.132)$$

Na podstawie lematu 4.2 i zależności (4.64) podane reguły iteracyjne algorytmu NMF/SVM zapewniają monotoniczną zbieżność. Jednak ze względu na naprzemienną minimalizację aż trzech argumentów, algorytm ten może łatwiej zatrzymywać się w nieoptymalnych punktach stacjonarnych funkcji celu.

Algorytmy multiplikatywne stosuje się również do modelu NMF z wymuszeniem lokalnej niezmienniczości (rozd. 3.2.5). Są to algorytmy, takie jak GNMF [47, 49], MD-NMF [160] oraz NPAF [161]. Wspólną cechą tych algorytmów jest możliwość wyrażenia funkcji celu w postaci:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X}) + \alpha_X \text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{L}_X\mathbf{X}^T) + \alpha_A \text{tr}(\mathbf{A}^T\mathbf{L}_A\mathbf{A}), \quad (4.133)$$

gdzie  $\mathbf{L}_X \in \mathbb{R}^{T \times T}$  oraz  $\mathbf{L}_A \in \mathbb{R}^{I \times I}$ . Niech  $\mathbf{L}_X = \mathbf{L}_X^+ - \mathbf{L}_X^-$ , gdzie  $\mathbf{L}_X^+ \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$  oraz  $\mathbf{L}_X^- \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$ . Jeśli  $D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej, to z warunku stacjonarności  $\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \triangleq \mathbf{0}$  otrzymuje się:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= 2\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{X} + 2\alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^+ - 2\mathbf{A}^T\mathbf{Y} - 2\alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^- \\ &= \nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (4.134)$$

gdzie  $\nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{X} + 2\alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^+$  oraz  $\nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T\mathbf{Y} + 2\alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^-$ .

Stosując regułę aktualizacji (4.52), uzyskuje się algorytm iteracyjny aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ :

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} \circledast (\mathbf{A}^T\mathbf{Y} + \alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^-) \oslash (\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{X} + \alpha_X\mathbf{X}\mathbf{L}_X^+). \quad (4.135)$$

Regułę aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  można wyznaczyć w podobny sposób.

W algorytmie GNMF [47, 49] macierz  $\mathbf{L}_X$  można przedstawić w postaci:  $\mathbf{L}_X = \mathbf{D} - \hat{\mathbf{W}}$ , gdzie  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$  oraz  $\hat{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$ . Stąd formuła iteracyjna faktora  $\mathbf{X}$  ma postać:

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} \circledast (\mathbf{A}^T\mathbf{Y} + \alpha_X\mathbf{X}\hat{\mathbf{W}}) \oslash (\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{X} + \alpha_X\mathbf{X}\mathbf{D}). \quad (4.136)$$

W algorytmie tym funkcja  $U_A(\mathbf{A})$  nie jest definiowana, a zatem warunek stacjonarności:  $\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \triangleq \mathbf{0}$  prowadzi do reguły aktualizacji algorytmu MUE faktora  $\mathbf{A}$ .

Formuły iteracyjne w (4.135) lub (4.136) można również wyprowadzić, minimalizując odpowiednio zdefiniowane funkcje pomocnicze. Dla członów  $\text{tr}(\mathbf{X}\mathbf{L}_X\mathbf{X}^T)$  lub  $\text{tr}(\mathbf{A}^T\mathbf{L}_A\mathbf{A})$  funkcje te można łatwo wyrazić przez nierówność (4.111). Minimalizacja takich funkcji prowadzi do podobnych formuł iteracyjnych. Formuły te gwarantują monotoniczną zbieżność, na warunkach określonych w definicji 4.1, lemacie 4.2 i zależności (4.64).

## 4.5. Algorytmy projekcyjne najmniejszych kwadratów

Algorytmy projekcyjne najmniejszych kwadratów wykorzystywane do estymacji nieujemnych czynników zarówno w modelu NMF, jak i NTF są projekcyjnymi wersjami algorytmu ALS (ang. *Alternating Least Squares*). Jest to najstarszy i zarazem najprostszy algorytm naprzemiennej estymacji zmiennych według kryterium najmniejszych kwadratów. Koncepcja zastosowania algorytmu ALS do estymacji czynników w dekompozycji PARAFAC pojawiła się w pracy Harshmana [173], a także niezależnie w pracy Carrola i Changa [53] jako model zwany CANDECOMP. Następnie, idea ta była rozwijana i stosowana w wielu obszarach badań naukowych [104, 235, 240, 241, 340, 408].

Podstawowa wersja algorytmu ALS nie gwarantuje znalezienia czynników o nieujemnych elementach. Aby jednak algorytm ten był użyteczny do estymacji nieujemnych czynników, konieczne są usprawnienia, wymuszające nieujemne rozwiązania. Najprostszą i dość popularną techniką wymuszania nieujemności jest rzutowanie estymowanych czynników na nieujemny ortant, czyli zastąpienie ujemnych elementów w estymowanym czynie wartościami zerowymi. Rzutowanie to dla elementu  $\xi \in \mathbb{R}$  realizowane jest przekształceniem:

$$[\xi]_+ = \max\{0, \xi\}. \quad (4.137)$$

W praktycznych zastosowaniach najczęściej wykonuje się rzutowanie na dodatni ortant, czyli  $[\xi]_\epsilon = \max\{\epsilon, \xi\}$ , gdzie  $\epsilon > 0$  i  $\xi \in \mathbb{R}$ . Takie podejście stosowane jest we wszystkich algorytmach projekcyjnych najmniejszych kwadratów, omawianych w rozdziale 4.5, a także w wielu pracach na temat nieujemnej faktoryzacji macierzy, np. w [18, 19, 89, 194, 395].

Podstawowe algorytmy projekcyjne ALS pomimo swej prostoty w implementacji i niskiego kosztu obliczeniowego mają bardzo istotną wadę, a mianowicie nie



gwarantują monotoniczności procesu iteracyjnego ani też zbieżności do punktu stacjonarnego, określonego warunkami optymalności *KKT*. Pomimo tych wad, badania eksperymentalne [81, 489] pokazują, że dla specyficznych zadań algorytmy te zachowują monotoniczną zbieżność. Nie można więc ich wykluczyć z obszaru zastosowania modelu NMF lub NTF.

### 4.5.1. Algorytm ALS

Algorytm ALS w wersji podstawowej minimalizuje funkcję odległości euklidesowej (2.4), naprzemiennie ze względu na argumenty  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ . Z warunków stacjonarności funkcji celu w (3.38), gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją w (2.4) oraz  $\alpha_A = \alpha_X = 0$ , wynika:

$$\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{Y})\mathbf{X}^T \triangleq \mathbf{0}, \quad (4.138)$$

$$\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{Y}) \triangleq \mathbf{0}. \quad (4.139)$$

Zakładając  $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{X}) = J$  dla  $J \leq \min\{I, T\}$ , z równań (4.138) i (4.139) otrzymano algorytm ALS:

$$\mathbf{A} = \mathbf{Y}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{X}^T)^{-1} = \mathbf{Y}\mathbf{X}^\dagger, \quad \mathbf{X} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{Y} = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{Y}, \quad (4.140)$$

gdzie  $\mathbf{X}^\dagger$  i  $\mathbf{A}^\dagger$  są pseudoodwrotnościami Moore'a–Penrose'a odpowiednich macierzy  $\mathbf{X}$  i  $\mathbf{A}$ . Po zastosowaniu przekształcenia (4.137), uzyskuje się naprzemienny algorytm projekcyjny najmniejszych kwadratów<sup>2</sup>:

$$\mathbf{A} = [\mathbf{Y}\mathbf{X}^\dagger]_+, \quad \mathbf{X} = [\mathbf{A}^\dagger\mathbf{Y}]_+. \quad (4.141)$$

Złożoność obliczeniową algorytmu (4.140) dla aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  lub  $\mathbf{X}$  można zgrubnie oszacować jako  $O(J^3 + J^2(I + T) + IJT)$ , przyjmując że koszt obliczania macierzy odwrotnych w (4.140) wynosi  $O(J^3)$ .

Algorytm postaci (4.141) jednak rzadko stosowany jest w praktyce. Pomimo założeń  $\text{rank}(\mathbf{A}^*) = \text{rank}(\mathbf{X}^*) = J$  oraz  $\text{rank}(\mathbf{A}^{(0)}) = \text{rank}(\mathbf{X}^{(0)}) = J$  dla  $J \leq \min\{I, T\}$ , naprzemienna estymacja czynników może spowodować, że w  $n$ -tym kroku iteracyjnym  $\text{rank}_\epsilon(\mathbf{A}^{(n)}) < J$  lub  $\text{rank}_\epsilon(\mathbf{X}^{(n)}) < J$ . Funkcja  $\text{rank}_\epsilon(\cdot)$  oznacza numeryczny rząd macierzy, szacowany jako liczba wartości osobliwych, które są większe od przyjętej tolerancji  $\epsilon$ . Niech  $\text{rank}_\epsilon(\mathbf{A}^{(n)}) < J$  w  $n$ -tym kroku iteracyjnym. W takim przypadku estymacja faktora  $\mathbf{X}^{(n)}$  odbywa się z utratą części

<sup>2</sup> W dalszej części pracy naprzemienny algorytm projekcyjny najmniejszych kwadratów jest oznaczany skrótowcem ALS, zgodnie z powszechnie przyjętą nomenklaturą.

informacji widmowej, co może przekładać się na gorszy wynik estymacji faktora  $\mathbf{A}^{(n+1)}$ . W praktyce lepsze efekty uzyskuje się, jeśli proces estymacji czynników podlega kontroli, np. przez odpowiednią regularyzację.

### 4.5.2. Algorytm RALS

Zregularyzowane algorytmy ALS (RALS – ang. *Regularized ALS*) minimalizują funkcję celu w (3.38), gdzie  $D(\mathbf{Y}|\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją w (2.4), a człony regularyzujące są lub mogą być modelowane funkcjami kwadratowymi. Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jest postaci (3.62) dla  $\alpha_A > 0$  i  $\alpha_X > 0$ , wówczas

$$\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{Y})\mathbf{X}^T + 2\alpha_A \mathbf{A} \triangleq \mathbf{0}, \quad (4.142)$$

$$\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = 2\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{Y}) + 2\alpha_X \mathbf{X} \triangleq \mathbf{0}. \quad (4.143)$$

Po przekształceniu równań (4.142) i (4.143) oraz uwzględnieniu rzutowania (4.137) otrzymuje się projekcyjny algorytm RALS:

$$\mathbf{A} = [\mathbf{Y}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \alpha_A \mathbf{I}_J)^{-1}]_+, \quad \mathbf{X} = [(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{I}_J)^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_+. \quad (4.144)$$

Jeśli  $\alpha_A > 0$  i  $\alpha_X > 0$ , macierze odwrotne w (4.144) istnieją niezależnie od rzędu macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ .

Gdyby założyć, że  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$  oraz czynnik  $\mathbf{X}$  jest rzadki, a informacja *a priori* o rzadkości tego czynnika modelowana jest członem  $U_X(\mathbf{X})$  w (3.46), wówczas reguła aktualizacji czynnika  $\mathbf{X}$  miałaby postać:

$$\mathbf{X} = [(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{1}_{J \times J})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_+, \quad (4.145)$$

gdzie  $\alpha_X > 0$  oraz  $\mathbf{1}_{J \times J} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  jest macierzą samych jedynek. Jeśli rzadkość wymuszana jest w czynniku  $\mathbf{A}$ ,  $\text{rank}(\mathbf{X}) = J$  i  $\alpha_A > 0$ , to po uwzględnieniu funkcji (3.47) reguła aktualizacji dla macierzy  $\mathbf{A}$  ma postać:  $\mathbf{A} = [\mathbf{Y}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \alpha_A \mathbf{1}_J)^{-1}]_+$ .

Zgodnie z modelem (3.50) wymuszanie rzadkości powinno odbywać się tylko w jednym z estymowanych czynników. Jeśli czynnik  $\mathbf{X}$  aktualizowany jest według (4.145), to czynnik  $\mathbf{A}$  powinien być estymowany według reguły (4.144) lub innej wymuszającej gładkość estymowanego czynnika.

Stosując algorytm RALS należy także mieć na uwadze właściwy dobór parametrów  $\alpha_A$  i  $\alpha_X$ . Korzystając z reguły aktualizacji w (4.144) oraz jeśli  $\text{rank}(\mathbf{A}) < J$  lub  $\text{rank}(\mathbf{X}) < J$ , zadania estymowane są źle uwarunkowane, a parametry  $\alpha_A$

i  $\alpha_X$  mają charakter parametrów regularyzacji. W takim przypadku można zastosować typowe narzędzia do estymacji parametrów regularyzacji Tichonowa. Mogą to być metody krzywej  $L$  (ang. *L-curve*) lub metody uogólnionej walidacji krzyżowej (ang. *Generalized Cross-Validation – GCV*) [30, 172]. Jeśli jednak faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są pełnego rzędu i dobrze uwarunkowane, to wspomniane metody estymacji parametrów regularyzacji nie są użyteczne. W takim przypadku zadaniem członów kary w funkcji celu (3.38) nie jest regularyzacja źle postawionych lub źle uwarunkowanych zadań, a wymuszanie określonych cech estymowanych faktorów. Parametry te powinny być tak dobierane, aby uzyskać zadawalający charakter estymowanych faktorów. Niestety, tak sformułowane zadanie jest bardzo trudne do realizacji w praktycznych zastosowaniach. Zwykle nie można „z góry” oszacować jaki jest stopień rzadkości lub gładkości estymowanego fatora. W praktyce, najczęściej parametry te dobierane są na podstawie symulacji.

Możliwe jest też alternatywne rozwiązanie, polegające na adaptacyjnym lub zaplanowanym wspomaganie procesu aktualizacji faktorów daną informacją *a priori*. Tak więc, parametry kary  $\alpha_A$  lub  $\alpha_X$  mogą zmieniać się z krokami iteracji naprzemiennych. Sposób ich zmian może być określony przez narzuconą regułę deterministyczną lub poprzez regułę adaptacyjną, zależną od oceny pewnych cech.

Wyniki badań eksperymentalnych przedstawione w wielu pracach [81, 89, 484–486, 497, 502, 511] pokazują, że parametry kar powinny przyjmować duże wartości na początku iteracyjnego procesu aktualizacji faktorów, a następnie wartości tych współczynników powinny asymptotycznie maleć w funkcji liczby iteracji do pewnej małej wartości progowej. Podejście to będzie analizowane i wyjaśniane w dalszej części pracy. Przyjęto więc następujące reguły:

- eksponencjalna:

$$\alpha^{(n)} = \bar{\alpha} + \alpha^{(0)} \exp\{-\tau n\}, \quad (4.146)$$

- bisekcyjna:

$$\alpha^{(n)} = \bar{\alpha} + \alpha^{(0)} 2^{-n}, \quad (4.147)$$

gdzie  $\alpha^{(n)}$  – parametr  $\alpha_A$  lub  $\alpha_X$  w  $n$ -tym kroku iteracyjnym,  $\alpha^{(0)} > 0$  – początkowa wartość parametru,  $0 < \tau \leq 1$  – szybkość zmian parametru,  $\bar{\alpha} > 0$  – wartość progowa parametru.

Omówione algorytmy RALS nie wyczerpują w pełni tej tematyki. Obszerny przegląd różnych wersji algorytmu RALS można znaleźć w pracach [81, 89].

## 4.6. Algorytmy blokowo-sekwencyjne

Algorytmy sekwencyjne minimalizują funkcję celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  w taki sposób, aby w danym kroku iteracyjnym aktualizowana była tylko pojedyncza zmienna  $a_{ij}$  lub  $x_{jt}$ , odpowiednio z grupy zmiennych estymowanych  $\{\mathbf{A}, \mathbf{X}\}$ . Koszt obliczeniowy takich algorytmów jest zwykle większy niż algorytmów równoległych, czyli np. algorytmów ALS przedstawionych w rozdziale 4.5. Niemniej jednak, algorytmy sekwencyjne generalnie charakteryzują się lepszymi właściwościami zbieżności (szybkość i stacjonarność) niż wspomniane algorytmy równoległe. W celu zmniejszenia kosztu obliczeniowego, wybrane algorytmy sekwencyjne można częściowo „zrównoleglić”, czyli sekwencyjnie aktualizować grupy (bloki) zmiennych. Zmienne estymowane występujące w faktorach  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  można pogrupować w następujący sposób:  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J]$  i  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1; \dots; \mathbf{x}_J]$ , gdzie wektory  $\mathbf{a}_j$  i  $\mathbf{x}_j$  można traktować jako bloki zmiennych dla  $j = 1, \dots, J$ .

Dla minimalizacji blokowo-sekwencyjnej, zadania w (4.1) i (4.2) można wyrazić w  $n$ -tym kroku iteracji następująco:

$$\mathbf{a}_j^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{a} \in \Omega_A^{(j)} \subset \mathbb{R}_+^I} \Psi \left( [\mathbf{a}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{a}_{j-1}^{(n)}, \mathbf{a}, \mathbf{a}_{j+1}^{(n-1)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(n-1)}], \mathbf{X}^{(n-1)} \right) \quad (4.148)$$

dla  $j = 1, \dots, J$  (sekwencyjnie),  $\Omega_A^{(j)} = \{a_{1j}, \dots, a_{Ij}\}$  oraz  $\mathbf{A}^{(n)} = [\mathbf{a}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(n)}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ .

Dla faktora  $\mathbf{X}$  otrzymujemy:

$$\mathbf{x}_j^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \Omega_X^{(j)} \subset \mathbb{R}_+^T} \Psi \left( \mathbf{A}^{(n)}, [\mathbf{x}_1^{(n)}; \dots; \mathbf{x}_{j-1}^{(n)}; \mathbf{x}; \mathbf{x}_{j+1}^{(n-1)}; \dots; \mathbf{x}_J^{(n-1)}] \right), \quad (4.149)$$

gdzie  $\Omega_X^{(j)} = \{x_{j1}, \dots, x_{jT}\}$  oraz  $\mathbf{X}^{(n)} = [\mathbf{x}_1^{(n)}; \dots; \mathbf{x}_J^{(n)}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ .

### 4.6.1. Algorytm HALS

Algorytm HALS (ang. *Hierarchical ALS*) należy do grupy algorytmów blokowo-sekwencyjnych. Został zaproponowany przez zespół naukowy prof. Cichockiego [84] do estymacji faktorów w metodzie NMF i NTF. Niezależnie, identyczny algorytm, ale występujący pod nazwą RRI (ang. *Rank-one Residue Iteration*) został również przedstawiony w pracach [26, 188, 189]. Technika blokowo-sekwencyjnej optymalizacji funkcji celu, leżąca u podstaw algorytmu HALS, została również wykorzystana do minimalizacji innych funkcji celu, takich

jak dywergencja  $\alpha$  lub  $\beta$  [89]. Bardzo efektywne techniki jego implementacji omówiono w pracach [75, 76]. Obecnie liczne prace [61, 148, 149, 226, 227, 265, 266] pokazują, że algorytm HALS jest jednym z najskuteczniejszych algorytmów estymacji czynników w modelu NMF, jak i NTF, użyteczny w wielu zastosowaniach.

Koncepcja algorytmu HALS jest bardzo prosta. Korzystając z modelu (1.2) oraz funkcji odległości euklidesowej (2.4), funkcję celu (3.38) można przedstawić następująco:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \sum_{j=1}^J \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j\|_F^2 + \alpha_A U_A(\mathbf{A}) + \alpha_X U_X(\mathbf{X}) + \text{const} \\ &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r \mathbf{x}_r - \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j\|_F^2 + \alpha_A U_A(\mathbf{A}) + \alpha_X U_X(\mathbf{X}) + \text{const} \\ &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y}^{(j)} - \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j\|_F^2 + \alpha_A U_A(\mathbf{A}) + \alpha_X U_X(\mathbf{X}) + \text{const},\end{aligned}\quad (4.150)$$

gdzie  $\mathbf{Y}^{(j)} = \mathbf{Y} - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r \mathbf{x}_r \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  dla  $j = 1, \dots, J$ .

W punktach stacjonarności funkcji (4.150) są spełnione warunki:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{a}_j} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \left( \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j - \mathbf{Y}^{(j)} \right) \mathbf{x}_j^T + \alpha_A \frac{\partial U_A(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{a}_j} \triangleq \mathbf{0}, \quad (4.151)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{a}_j^T \left( \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j - \mathbf{Y}^{(j)} \right) + \alpha_X \frac{\partial U_X(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{x}_j} \triangleq \mathbf{0}. \quad (4.152)$$

Stosując rzutowanie (4.137) oraz zakładając  $\alpha_A = \alpha_X = 0$ ,  $\mathbf{a}_j \neq \mathbf{0}$  i  $\mathbf{x}_j \neq \mathbf{0}$ , równania (4.151) i (4.152) prowadzą do podstawowej wersji algorytmu HALS:

$$\mathbf{a}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{x}_j^T}{\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T} \right]_+, \quad \mathbf{x}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)}}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right]_+. \quad (4.153)$$

Reguły (4.153) w połączeniu z algorytmem 2 i skalowaniem dla  $p = 2$  mogą być uproszczone do postaci:

$$\mathbf{a}_j \leftarrow \left[ \mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{x}_j^T \right]_+, \quad \mathbf{x}_j \leftarrow \left[ \mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)} \right]_+, \quad (4.154)$$

dla  $j = 1, \dots, J$ .

Jeśli  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  są modelowane wyrażeniami (3.61), to z równań (4.151) i (4.152) oraz z przekształcenia (4.137) otrzymuje się:

$$\mathbf{a}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{x}_j^T}{\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T + 2\alpha_X} \right]_+, \quad \mathbf{x}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)}}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j + 2\alpha_X} \right]_+. \quad (4.155)$$

Dla  $U_A(\mathbf{A})$  i  $U_X(\mathbf{X})$  zdefiniowanych odpowiednio poprzez (3.47) i (3.46), zregularyzowany algorytm HALS ma postać:

$$\mathbf{a}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{x}_j^T - 2\alpha_X \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r}{\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T + 2\alpha_X} \right]_+, \quad \mathbf{x}_j \leftarrow \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)} - 2\alpha_X \sum_{r \neq j} \mathbf{x}_r}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j + 2\alpha_X} \right]_+ \quad (4.156)$$

Reguły aktualizacji (4.153) mogą być implementowane na różne sposoby. W pracach [75, 76] zaproponowano bardzo efektywną technikę implementacji, a zmodyfikowany algorytm nazwano FAST-HALS. Technika ta oparta jest na następujących przekształceniach:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_j &\leftarrow \left[ \frac{\mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{x}_j^T}{\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T} \right]_+ = \left[ \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j) \mathbf{x}_j^T}{\mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T} \right]_+ = \left[ \mathbf{a}_j + \frac{\mathbf{Y} \mathbf{x}_j^T - \mathbf{A}\mathbf{X} \mathbf{x}_j^T}{\|\mathbf{x}_j\|_2^2} \right]_+ \\ &= \left[ \mathbf{a}_j + \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{X}^T]_{*,j} - \mathbf{A}[\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{*,j}}{[\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{jj}} \right]_+, \end{aligned} \quad (4.157)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_j &\leftarrow \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)}}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right]_+ = \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T (\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_j \mathbf{x}_j)}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right]_+ = \left[ \mathbf{x}_j + \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{Y} - \mathbf{a}_j^T \mathbf{A}\mathbf{X}}{\|\mathbf{a}_j\|_2^2} \right]_+ \\ &= \left[ \mathbf{x}_j + \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{j,*} - [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{j,*} \mathbf{X}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jj}} \right]_+. \end{aligned} \quad (4.158)$$

Łatwo zauważyć, że macierze  $\mathbf{Y}\mathbf{X}^T$  i  $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$  w (4.157) oraz macierze  $\mathbf{A}^T \mathbf{Y}$  i  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  w (4.158) mogą być wyznaczone przed rozpoczęciem odpowiednich aktualizacji sekwencyjnych. Takie podejście znacznie zmniejsza koszt obliczeniowy w stosunku do standardowej implementacji reguł (4.153). Przykładowo, reguła aktualizacji w (4.158) może być zaimplementowana za pomocą algorytmu 10.

Złożoność obliczeniową algorytmu 10 można oszacować jako  $O(kJ^2T) + O(J^2I + IJT)$ , gdzie  $k$  jest liczbą iteracji. Dla pojedynczego kroku iteracyjnego, złożoność obliczeniowa jest podobna jak dla algorytmu MUE.

W pracy [147] wykazano, że jeśli w algorytmie (4.153) projekcja na nieujemny ortant zastąpiona jest projekcją na dodatni ortant oraz wartości początkowe są dodatnie, to algorytm ten zbieżny jest do punktu stacjonarnego określonego warunkami optymalności  $KKT$ . Dla pozostałych algorytmów HALS nie są znane teoretyczne dowody ich zbieżności, ale badania eksperymentalne [89] potwierdzają, że zbieżność tego typu algorytmów jest monotoniczna.

---

**Algorytm 10. HALS**

---

**Wejście:**  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}^{J \times T}$ ,  $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych,

**Wyjście:**  $\mathbf{X}$  – estymowany faktor

```

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \mathbf{Y}$ ,  $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ ;
2 for  $k = 0, 1, \dots, k_{\max}$  do
3   for  $j = 1, \dots, J$  do
4      $\mathbf{x}_j^{(k+1)} = \left[ \mathbf{x}_j^{(k)} + \frac{\mathbf{c}_j - \mathbf{b}_j \mathbf{X}^{(k)}}{b_{jj}} \right]_+$  ; // Aktualizacje projekcyjne
```

---

**4.6.2. Algorytm SCWA**

Algorytm SCWA (ang. *Sequential Coordinate-Wise Algorithm*) został zaproponowany przez Franca i pozostałych współautorów pracy [135] do rozwiązywania liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. Po raz pierwszy zastosowano go do modelu NMF [499], a następnie w wersji zregularyzowanej do nadzorowanej klasyfikacji obrazów twarzy [502].

W niniejszej pracy przedstawiona jest zregularyzowana wersja algorytmu SCWA, gdzie człon regularyzujący wyrażony jest funkcją kwadratową. Jest to algorytm przeznaczony do estymacji faktora  $\mathbf{X}$ , jednakże może być łatwo zaadaptowany również do estymacji faktora  $\mathbf{A}$ . Jeśli więc funkcja celu  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej, zadanie minimalizacji zregularyzowanej funkcji celu sprowadza się do zadania programowania kwadratowego (ang. QP – *Quadratic Programming*). Człon kary modelowany funkcją kwadratową jest dość uniwersalny i powszechny w metodzie NMF. Zregularyzowane funkcje celu z takim członem są omówione w rozdziale 3.2.

Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  dana jest funkcją (3.90), gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej w (2.4). Funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned}
 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \|\mathbf{X}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\|_F^2 \\
 &= \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) - 2 \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Y}) + \text{tr}(\mathbf{X} \mathbf{W} \mathbf{X}^T) + \text{const} \\
 &= \sum_{p,u,v} x_{up} x_{vp} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv} - 2 \sum_{p,u} x_{up} [\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{up} + \sum_{u,p,r} x_{up} w_{pr} x_{ur} \\
 &= ([\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jj} + w_{tt}) x_{jt}^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left( 2 \sum_{u \neq j} x_{ut} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uj} - 2[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt} + \sum_{r \neq t} w_{tr} x_{jr} + \sum_{p \neq t} w_{pt} x_{jp} \right) x_{jt} \\
& + \sum_{p \neq t} \sum_{u, v} x_{up} x_{vp} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv} - 2 \sum_{p \neq t} \sum_u x_{up} [\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{up} \\
& + \sum_{u \neq j} \sum_{v \neq j} x_{ut} x_{vt} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv} - 2 \sum_{u \neq j} x_{ut} [\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{ut} \\
& + \sum_{p \neq t} \sum_{r \neq t} x_{jp} w_{pr} x_{jr} + \sum_{u \neq j} \sum_{p, r} x_{up} w_{pr} x_{ur} + \text{const} \\
& = x_{jt}^2 \alpha_{jt} + x_{jt} \beta_{jt} + \gamma_{jt}. \tag{4.159}
\end{aligned}$$

Minimalizacja funkcji (4.159) względem  $x_{jt}$  prowadzi do następującego rozwiązania analitycznego:

$$\begin{aligned}
x_{jt}^* & = \arg \min_{x_{jt}} D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X}) = \arg \min_{x_{jt}} \{x_{jt}^2 \alpha_{jt} + x_{jt} \beta_{jt} + \gamma_{jt}\} \\
& = \max_{x_{jt}} \left( 0, -\frac{\beta_{jt}}{2\alpha_{jt}} \right), \tag{4.160}
\end{aligned}$$

gdzie

$$\alpha_{jt} = [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jj} + w_{tt}, \tag{4.161}$$

$$\beta_{jt} = 2 \sum_{u \neq j} x_{ut} [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uj} - 2[\mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt} + \sum_{r \neq t} w_{tr} x_{jr} + \sum_{p \neq t} w_{pt} x_{jp}. \tag{4.162}$$

Zakładając, że  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{T \times T}$  jest symetryczna, wyrażenie  $\beta_{jt}$  w (4.162) może być zapisane jako:

$$\beta_{jt} = 2[\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt} - 2[\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jj} x_{jt} + 2\mathbf{x}_j \mathbf{w}_t - 2w_{tt} x_{jt}, \tag{4.163}$$

gdzie  $\mathbf{x}_j = [x_{j1}, \dots, x_{jT}] \in \mathbb{R}^{1 \times T}$ .

Po wstawieniu (4.161) i (4.163) do (4.160) reguła aktualizacji dla  $x_{jt}$  ma postać:

$$x_{jt} \leftarrow \max \left( 0, x_{jt} - \frac{g_{jt} + \mathbf{x}_j \mathbf{w}_t}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{jj} + w_{tt}} \right), \tag{4.164}$$

gdzie  $g_{jt} = [\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{A}^T \mathbf{Y}]_{jt}$ .



Regułę (4.164) można łatwo zwektoryzować względem indeksu  $t$ . Niestety wektoryzacja względem indeksu  $j$  nie jest możliwa bez zmiany charakteru aktualizacji. Dlatego też reguła (4.164) należy do rodziny algorytmów blokowo-sekwencyjnych.

Pomijając człon regularyzacji w (4.159), czyli dla  $\mathbf{W} = \mathbf{0}$ , regułę aktualizacji w (4.164) dla  $\forall j : \mathbf{a}_j \neq \mathbf{0}$  można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} x_{jt} &\leftarrow \max \left( 0, \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j x_{jt} - g_{jt}}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right) = \max \left( 0, \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j x_{jt} - \mathbf{a}_j^T (\mathbf{A} \mathbf{x}_t - \mathbf{y}_t)}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right) \\ &= \max \left( 0, \frac{\mathbf{a}_j^T (\mathbf{y}_t - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r x_{rt})}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right) = \left[ \frac{\mathbf{a}_j^T \mathbf{y}_t^{(j)}}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j} \right]_+, \end{aligned} \quad (4.165)$$

gdzie  $\mathbf{y}_t^{(j)} = \mathbf{y}_t - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r x_{rt} \in \mathbb{R}^I$ .

Algorytm SCWA bez regularyzacji sprowadza się do algorytmu HALS, wyrażonego za pomocą (4.153) dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ .

Gdyby macierz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  była symetryczna, tzn.  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ , wówczas dla  $\mathbf{W} = \mathbf{0}$  i  $\forall j : \mathbf{a}_j \neq \mathbf{0}$ , algorytm (4.164) sprowadzałby się do algorytmu Kaczmarza [217, 362, 423], znanego w rekonstrukcji obrazów tomograficznych. Jednak symetryczna macierz  $\mathbf{A}$  jest mało prawdopodobna w modelu NMF.

Pomijając rzutowanie na nieujemny ortant, regułę (4.165) dla  $n$ -tego kroku iteracyjnego można zapisać w postaci:

$$x_{jt}^{(n)} = \frac{\mathbf{a}_j^T (\mathbf{y}_t - \sum_{r=1}^{j-1} \mathbf{a}_r x_{rt}^{(n)} - \sum_{r=j+1}^J \mathbf{a}_r x_{rt}^{(n-1)})}{\mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j}, \quad (4.166)$$

gdzie  $j = 1, \dots, J$  i  $t = 1, \dots, T$ . Reguła (4.166) jest więc formułą iteracyjną algorytmu Gaussa–Seidela dla rozwiązywania równań normalnych pierwszego rodzaju [30, 154]. Wynika stąd, że podstawowe algorytmy HALS i SCWA są projekcyjnymi wersjami liniowego algorytmu Gaussa–Seidela. Ponieważ macierz normalna  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = [\mathbf{a}_u^T \mathbf{a}_v] \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  dla  $u, v \in \{1, \dots, J\}$  jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną, jeśli  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$  dla  $J \leq I$ , więc na mocy twierdzenia 10.1.2 [154] algorytm Gaussa–Seidela w (4.166) jest zbieżny dla dowolnego  $x_{jt}^{(0)}$ . Szczegółowa analiza zbieżności algorytmów blokowo-sekwencyjnych stosowanych w kontekście modelu NMF została przedstawiona w pracy [31].

## 4.7. Gradientowe algorytmy kierunków poprawy

Formułę iteracyjną gradientowych algorytmów kierunków poprawy dla aktualizacji wektora  $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^J$  w  $k$ -tym kroku iteracji wewnętrznych można wyrazić następująco:

$$\mathbf{x}_t^{(k+1)} = \mathbf{x}_t^{(k)} + \eta_t^{(k)} \mathbf{p}_t^{(k)}, \quad (4.167)$$

gdzie  $\mathbf{p}_t^{(k)} \in \mathbb{R}^J$  jest *kierunkiem poprawy*, określającym kierunek poszukiwań minimum funkcji celu, a  $\eta_t^{(k)} > 0$  jest *długością kroku* poszukiwań lub współczynnikiem uczenia.

Analogiczną formułę iteracyjną można zapisać dla aktualizacji  $i$ -tego wektora wierszowego macierzy  $\mathbf{A}$ . Dla tego typu algorytmów,  $k$ -ty krok iteracyjny jest rozumiany jako krok iteracji wewnętrznych, natomiast  $n$ -ty krok iteracyjny jako krok iteracji zewnętrznych (naprzemiennych). W każdym  $n$ -tym kroku iteracji naprzemiennych zakłada się, że aktualizacja zarówno faktora  $\mathbf{A}$ , jak i faktora  $\mathbf{X}$ , wymaga wykonania określonej liczby (zwykle większej od jeden) kroków iteracji wewnętrznych.

Aby sekwencje iteracyjne generowane przez (4.167) były nieujemne, trzeba określić strategię wymuszania nieujemności. Typowym i najprostszym rozwiązaniem jest zastosowanie rzutowania (4.137) do (4.167), co w efekcie prowadzi do formuły iteracyjnej algorytmu rzutowania gradientu dla ograniczeń przedziałowych [153]:

$$\mathbf{x}_t^{(k+1)} = \left[ \mathbf{x}_t^{(k)} + \eta_t^{(k)} \mathbf{p}_t^{(k)} \right]_+. \quad (4.168)$$

Niestety takie podejście nie gwarantuje zbieżności procesu iteracyjnego do punktu stacjonarnego określonego warunkami *KKT*. Niemniej jednak regułę aktualizacji (4.168) można zastosować do modelu NMF lub NTF, jeśli połączy się ją z odpowiednim kryterium zatrzymania, np. z kryterium gradientów rzutowanych w (4.42).

Nieujemność iteracyjnych aktualizacji można też wymuszać poprzez odpowiedni dobór długości kroku  $\eta_t^{(k)}$ . Jeśli aktualizowany faktor  $\mathbf{X}$  jest rzadki, można założyć:  $\forall t : \min_j x_{jt}^{(k+1)} = 0$ . W rezultacie z reguły (4.167) otrzymuje się:

$$\eta_t^{(k)} = \min_j \left\{ -\frac{x_{jt}^{(k)}}{p_{jt}^{(k)}} \quad \text{dla} \quad p_{jt}^{(k)} < 0 \right\}, \quad (4.169)$$

gdzie  $\mathbf{p}_t^{(k)} = [p_{jt}^{(k)}] \in \mathbb{R}^J$ . W przeciwnym razie współczynnik  $\eta_t^{(k)}$  można otrzymać z założenia  $\exists t : \min_j x_{jt}^{(k+1)} = 0$ .

Wektor kierunku poprawy  $\mathbf{p}_t^{(k)}$  może być definiowany na różne sposoby. Wspólną cechą gradientowych metod kierunków poprawy jest założenie, że wektor ten jest wyznaczany na podstawie gradientu funkcji celu w pewnym punkcie – niekoniecznie punkcie  $\mathbf{x}_t^{(k)}$ . W wielu metodach omawianych w niniejszej pracy wektor kierunku poprawy można zapisać następująco:

$$\mathbf{p}_t^{(k)} = -\mathbf{B}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)}, \quad (4.170)$$

gdzie  $\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{x}}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}^J$  – gradient funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  w punkcie  $\bar{\mathbf{x}}_t^{(k)}$ ,  $\mathbf{B}_t^{(k)} \in \mathbb{R}^{J \times J}$  – macierz skalująca, która może przybierać różne formy, w zależności od przyjętej metody.

Punkt  $\bar{\mathbf{x}}_t^{(k)}$  może być wybierany jako punkt  $\mathbf{x}_t^{(k)}$  (metoda gradientów prostych) albo może być definiowany przez funkcję określoną na zbiorze punktów  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$  (metoda gradientów optymalnych). Jeśli  $\mathbf{B}_t^{(k)}$  jest macierzą dodatnio określoną, to  $(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{p}_t^{(k)} = -(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{B}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)} < 0$ . Sugeruje to, że przesuując się z punktu  $\mathbf{x}_t^{(k)}$  w kierunku wektora  $\mathbf{p}_t^{(k)}$ , możliwe jest zmniejszenie wartości funkcji celu, tzn.  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k+1)}) < \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$  dla dowolnego  $\mathbf{x}_t^{(0)} \in \mathbb{R}^J$ . Jeśli  $\mathbf{B}_t^{(k)}$  jest macierzą nieujemnie określoną, to  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k+1)}) \leq \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$ .

W niniejszym rozdziale przedstawiono wybrane algorytmy NMF, które należą do rodziny gradientowych algorytmów kierunków poprawy. Formuły iteracyjne bazują wprost na regułach (4.167) lub (4.168). Należy jednak zauważyć, że algorytmy multiplikatywne przedstawione w rozdziale 4.4, algorytmy projekcyjne najmniejszych kwadratów (rozd. 4.5) oraz algorytmy blokowo-sekwencyjne (rozd. 4.6) można również w jakimś sensie zakwalifikować do rodziny gradientowych algorytmów kierunków poprawy. Zgodnie z regułą aktualizacji (4.50) algorytmy multiplikatywne wynikają bezpośrednio z formuły iteracyjnej algorytmu gradientowego. Można łatwo pokazać, że algorytmy ALS, omówione w rozdziale 4.5, są szczególnymi przypadkami projekcyjnej metody Newtona, która bazuje na schemacie (4.168) [89]. Analogicznie, zgodnie z (4.165) metody HALS i SCWA, można wyrazić formułą (4.168). Niemniej jednak wspomniane algorytmy zaliczono do oddzielnych grup algorytmów, ze względu na ich finalne reguły aktualizacji faktorów.

### 4.7.1. Projekcyjna metoda Landwebera

Metoda Landwebera [20], nazywana też metodą Richardsona pierwszego rodzaju [30], bazuje na regule iteracyjnej (4.167), w której kierunek poprawy wyrażony jest przez (4.170), gdzie  $\mathbf{B}_t^{(k)} = \mathbf{I}_J$ , zatem:  $\mathbf{p}_t^{(k)} = -\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$ . Jeśli

$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t) = \frac{1}{2}D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{x}_t)$ , gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{x}_t)$  jest funkcją odległości euklidesowej w (2.4), to  $\mathbf{p}_t^{(k)} = -\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{x}_t^{(k)} - \mathbf{y}_t)$ . Sekwencje iteracyjne  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$  generowane taką regułą dla dowolnego  $\mathbf{x}_t^{(0)} \in \mathbb{R}^J$  są zbieżne do rozwiązania w sensie kryterium najmniejszych kwadratów, tzn.  $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_t^{(k)} = \mathbf{x}_t^*$ , jeśli  $\eta_t^{(k)} \in (0, \eta_{\max})$ . Aby wyznaczyć  $\eta_{\max}$ , regułę iteracyjną w (4.167) można przekształcić do postaci:  $\mathbf{x}_t^{(k+1)} = \mathbf{x}_t^{(k)} - \eta_t^{(k)} \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{x}_t^{(k)} - \mathbf{y}_t) = (\mathbf{I}_J - \eta_t^{(k)} \mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{x}_t^{(k)} + \eta_t^{(k)} \mathbf{A}^T \mathbf{y}_t = \mathbf{G}_t^{(k)} \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{b}_t$ . Sekwencje  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$  są zbieżne, jeśli  $\rho(\mathbf{G}_t^{(k)}) < 1$ , gdzie  $\rho(\mathbf{G}_t^{(k)}) = \max_{1 \leq j \leq J} |\lambda_j(\mathbf{G}_t^{(k)})|$  jest promieniem spektralnym macierzy  $\mathbf{G}_t^{(k)}$ , a  $\lambda_j(\mathbf{G}_t^{(k)})$  jest jej  $j$ -tą wartością własną. Łatwo zauważyć, że jeśli  $\eta_{\max} = \frac{2}{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$ , gdzie  $\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$  jest maksymalną wartością własną macierzy  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ , to  $\rho(\mathbf{G}_t^{(k)}) < 1$ .

Niestety estymacja maksymalnej długości kroku  $\eta_{\max}$  bezpośrednio z definicji wymaga zbyt dużego kosztu obliczeniowego. Dlatego takie podejście nie może być zastosowane do omawianych metod faktoryzacji macierzy lub tensorów. Ponieważ macierz  $\mathbf{A}$  jest macierzą nieujemną,  $\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$  może być oszacowana na podstawie twierdzenia Perrona-Frobeniusa [17]. Jeśli  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  jest macierzą nieredukowalną<sup>3</sup>, promień spektralny macierzy  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  spełnia nierówność:  $\min_{1 \leq u \leq J} \sum_{v=1}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv} \leq \rho(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \leq \max_{1 \leq u \leq J} \sum_{v=1}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv}$ . Z tego wynika:

$$\eta_{\max} = \frac{2}{\max_{1 \leq u \leq J} \sum_{v=1}^J [\mathbf{A}^T \mathbf{A}]_{uv}}. \quad (4.171)$$

Stosując ograniczenia nieujemności według reguły w (4.168), projekcyjny algorytm Landwebera można wyrazić następującą formułą iteracyjną:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \left[ \mathbf{X}^{(k)} - \eta_X \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Y}) \right]_+, \quad \eta_X = \xi \eta_{\max}, \quad (4.172)$$

gdzie  $0 < \xi \lesssim 1$ .

Johansson i inni współautorzy pracy [213] pokazali, że proces iteracyjny w (4.172) można dodatkowo przyspieszyć, jeśli macierz  $\mathbf{B}_t^{(k)}$  w (4.170) zdefiniowana jest jako diagonalna macierz skalująca, tzn.

$$\mathbf{B}_t^{(k)} = \mathbf{D} = \text{diag} \left( [\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{1}_J]_j^{-1} \right). \quad (4.173)$$

<sup>3</sup> Dowolna macierz kwadratowa jest macierzą nieredukowalną, wtedy i tylko wtedy, gdy nie można ją sprowadzić do macierzy blokowej górnotrójkątnej przez jednoczesne permutacje jej wierszy i kolumn.

Dla tak zdefiniowanej macierzy skalującej, projekcyjny algorytm Landwebera w (4.172) sprowadza się do algorytmu OPL (ang. *Oblique Projected Landweber*):

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \left[ \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{D}\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Y}) \right]_+, \quad (4.174)$$

gdzie  $\mathbf{D}$  jest wyrażone przez (4.173).

Łatwo zauważyć, że współczynnik  $\eta_{\max}$  zawarty jest w definicji macierzy  $\mathbf{D}$ . W pracy [213] udowodniono, że sekwencje iteracyjne  $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$  generowane przez (4.174) dla  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X}^{(0)} \geq \mathbf{0}$  są zbieżne do rozwiązania liniowego zadania najmniejszych kwadratów przy ograniczeniach nieujemności. Algorytm OPL został zastosowany po raz pierwszy do modelu NMF w pracy [499].

### 4.7.2. Algorytm rzutowania gradientu

Typowym przedstawicielem algorytmów rzutowania gradientu w metodzie NMF jest algorytm zaproponowany przez Lina w [280]. Oznaczono go skrótowcem: LPG (ang. *Lin's Projected Gradient*). Algorytm ten bazuje na formule iteracyjnej, podanej w (4.168), gdzie długość kroku  $\eta_t^{(k)}$  estymowano w sposób przybliżony na podstawie reguły Armijo [23]. Reguła ta określa jeden z podstawowych warunków Wolfe'a [329], wymaganych w celu zapewnienia wystarczającej poprawy wzdłuż kierunku  $\mathbf{p}_t^{(k)}$ . Długość kroku  $\eta_t^{(k)}$  dobierana jest z ciągu liczb:  $1, \beta, \beta^2, \beta^3, \dots$ , gdzie  $\beta \in (0, 1)$ . Optymalna długość kroku spełnia warunek:  $\eta_t^{(k)} = \beta^{m_k}$  dla pewnej nieujemnej liczby całkowitej  $m_k = 0, 1, 2, \dots$ , dobranej w taki sposób, aby:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k+1)}) - \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \leq \sigma \left( \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \right)^T (\mathbf{x}_t^{(k+1)} - \mathbf{x}_t^{(k)}), \quad (4.175)$$

gdzie  $\sigma \in (0, 1)$ . W praktyce najczęściej:  $\sigma = 0, 01$ . Bertsekas [22] udowodnił, że istnieje takie  $\eta_t^{(k)} > 0$ , dla którego punkt graniczny aproksymacji (4.168) jest punktem stacjonarnym.

Lin [280] zastosował do metody NMF również zmodyfikowaną wersję reguły Armijo. Lin oraz Moré [281] zauważyli, że  $\eta_t^{(k)}$  i  $\eta_t^{(k-1)}$  mogą mieć podobne wartości. Dlatego zamiast rozpoczynać proces selekcji długości kroku od wartości  $\eta_t^{(k)} = \beta^0 = 1$ , można zaczynać od wartości  $\eta_t^{(k-1)}$ , a następnie krok ten zwiększać lub zmniejszać w zależności od warunku (4.175). Jeśli w kroku początkowym spełniony jest warunek (4.175),  $\eta_t^{(k)}$  należy zwiększać. W przeciwnym wypadku, parameter  $\eta_t^{(k)}$  jest zmniejszany, zgodnie z pierwotną zasadą Armijo. Takie podejście znacząco obniża koszt obliczeniowy procesu aktualizacji.

### 4.7.3. Algorytm gradientów skalowanych

Algorytm gradientów skalowanych bazuje na algorytmie gradientowych punktów wewnętrznych (IPG – ang. *Interior-Point Gradient*), który ukazał się w pracy Merritta i Zhanga [302]. Przeznaczony jest do rozwiązywania liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. Do metody NMF zastosowano go w pracach [85, 89, 499]. Algorytm ten realizuje aktualizacje addytywne według reguły (4.167), gdzie kierunek poprawy  $\mathbf{p}_t^{(k)}$  określony jest przez (4.170). Macierz  $\mathbf{B}_t^{(k)}$  zdefiniowana jest przez diagonalną macierz skalującą – stąd algorytm skalowanych gradientów. Przyjęto więc:  $\mathbf{B}_t^{(k)} = \text{diag} \left\{ \frac{x_{jt}^{(k)}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)}]_{jt}} \right\}$ .

W rezultacie kierunek poprawy ma postać:

$$\mathbf{P}^{(k)} = -\tilde{\mathbf{D}}^{(k)} \circledast \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}), \quad (4.176)$$

gdzie  $\tilde{\mathbf{D}}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} \circledast \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)}$  – macierz skalująca.

Jeśli  $\forall t : \eta_t^{(k)} = 1$  w (4.167), algorytm ten sprowadza się do algorytmu MUE, przedstawionego w rozdziale 4.4.1. W algorytmie IPG [302] faktor  $\mathbf{X}$  aktualizowany jest według reguły:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \eta^{(k)} \mathbf{P}^{(k)}. \quad (4.177)$$

Długość kroku  $\eta^{(k)}$  dobierana jest w taki sposób, aby aktualizacje były nieujemne i jeśli to możliwe, zgodne z regułą najszybszego spadku (ang. *steepest descent*). Tak więc  $\eta^{(k)} = \min\{\tau \hat{\eta}^{(k)}, \bar{\eta}^{(k)}\}$ , gdzie  $\hat{\eta}^{(k)} = \arg \max_{\eta} \left\{ \mathbf{X}^{(k)} + \eta \mathbf{P}^{(k)} \geq \mathbf{0} \right\}$ ,  $\tau \lesssim 1$  oraz  $\bar{\eta}^{(k)} = \arg \min_{\eta} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)} + \eta \mathbf{P}^{(k)})$ . Krok  $\hat{\eta}^{(k)}$  zapewnia nieujemność aktualizacji i może być dobierany na podstawie reguły (4.169), zatem:  $\hat{\eta}^{(k)} = \min_{j,t} \left\{ -\frac{x_{jt}^{(k)}}{p_{jt}^{(k)}} \text{ dla } p_{jt}^{(k)} < 0 \right\}$ . Jeśli  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X})$ , gdzie  $D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A} \mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej, otrzymuje się:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)} + \eta \mathbf{P}^{(k)}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} + \eta \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)}\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2} \eta^2 \text{tr} \left( (\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)} \right) + \eta \text{tr} \left( (\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{G}^{(k)} \right) \\ &\quad + \text{const}, \end{aligned} \quad (4.178)$$

gdzie  $\mathbf{G}^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Y})$ . Z warunku  $\frac{\partial}{\partial \eta} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k+1)}) \triangleq \mathbf{0}$  oraz z (4.178) wynika:

$$\bar{\eta}^{(k)} = -\frac{(\text{vec}(\mathbf{P}^{(k)}))^T \text{vec}(\mathbf{G}^{(k)})}{(\text{vec}(\mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)}))^T \text{vec}(\mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)})}. \quad (4.179)$$

Długości kroków  $\hat{\eta}^{(k)}$  i  $\bar{\eta}^{(k)}$  mogą być też definiowane, oddzielnie dla każdego  $t$  i wówczas faktor  $\mathbf{X}$  aktualizowany jest według reguły (4.167), gdzie  $\eta_t^{(k)} = \min\{\tau\hat{\eta}_t^{(k)}, \bar{\eta}_t^{(k)}\}$ . Parametr  $\hat{\eta}_t^{(k)}$  estymowany jest na podstawie (4.169), natomiast:

$$\bar{\eta}_t^{(k)} = -\frac{(\mathbf{p}_t^{(k)})^T \mathbf{g}_t^{(k)}}{(\mathbf{A}\mathbf{p}_t^{(k)})^T \mathbf{A}\mathbf{p}_t^{(k)}}, \quad (4.180)$$

gdzie  $\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$ . Takie podejście zapewnia lepszą jakość estymacji, ale koszt obliczeniowy jest nieco większy.

#### 4.7.4. Algorytm gradientów optymalnych

Algorytm gradientów optymalnych opracowano na podstawie metody Nestorowa [326], przeznaczonej do rozwiązywania zadań optymalizacji nieliniowej bez ograniczeń dziedziny. Jest to metoda gradientowa, której współczynnik zbieżności wynosi  $O(1/k^2)$ , jeśli minimalizowana funkcja  $f(\cdot) \in C_L^{1,1} : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$  jest wypukłą funkcją klasy  $C_L^{1,1}$  (z ciągłym gradientem i jednostajnie ciągłą z warunkiem Lipschitza). Łatwo zauważyć, że funkcja odległości euklidesowej w (2.4) jest funkcją klasy  $C_L^{1,1}$ , zarówno ze względu na argument  $\mathbf{A}$ , jak i  $\mathbf{X}$ . Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2}D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  wyrażone jest poprzez (2.4), zatem:

$$\|\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\bar{\mathbf{A}}^{(k)}, \mathbf{X})\|_F \leq L_A \|\mathbf{A} - \bar{\mathbf{A}}^{(k)}\|_F, \quad (4.181)$$

$$\|\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)})\|_F \leq L_X \|\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}^{(k)}\|_F, \quad (4.182)$$

gdzie  $\{\mathbf{A}, \bar{\mathbf{A}}^{(k)}\} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\{\mathbf{X}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}\} \in \mathbb{R}^{J \times T}$ . Czynniki  $L_A = \|\mathbf{X}\mathbf{X}^T\|_2$  i  $L_X = \|\mathbf{A}^T \mathbf{A}\|_2$  są stałymi Lipschitza.

Z nierówności (4.181) i (4.182) wynika:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &\leq \Psi(\bar{\mathbf{A}}^{(k)}, \mathbf{X}) + \left\langle \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\bar{\mathbf{A}}^{(k)}, \mathbf{X}), \mathbf{A} - \bar{\mathbf{A}}^{(k)} \right\rangle + \frac{\tilde{L}_A}{2} \|\mathbf{A} - \bar{\mathbf{A}}^{(k)}\|_F^2 \\ &= F_A(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{A}}^{(k)}), \end{aligned} \quad (4.183)$$

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &\leq \Psi(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}) + \left\langle \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}), \mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}^{(k)} \right\rangle + \frac{\tilde{L}_X}{2} \|\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}}^{(k)}\|_F^2 \\ &= F_X(\mathbf{X}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}). \end{aligned} \quad (4.184)$$

jeśli  $L_A \leq \tilde{L}_A$  i  $L_X \leq \tilde{L}_X$ .

W celu minimalizacji funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  ze względu na  $\mathbf{X}$  przyjęto, że  $F_X(\mathbf{X}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)})$  w (4.184) jest funkcją pomocniczą, której właściwości określone są

w definicji 4.1. Jest to funkcja wypukła i określona na zbiorze  $\mathbb{R}_+^{J \times T}$  dla  $L_X \leq \tilde{L}_X$ . Stosując metodę gradientów proksymalnych (ang. *proximal gradient*) [11, 92, 326], uzyskuje się:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \text{prox}_h(\bar{\mathbf{X}}^{(k)}) = \arg \min_{\mathbf{X}} \left( h(\mathbf{X}) + F_X(\mathbf{X}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}) \right), \quad (4.185)$$

gdzie  $\text{prox}_h(\bar{\mathbf{X}}^{(k)})$  – operator proksymalny pewnej wypukłej funkcji  $h(\mathbf{X})$ . Dla

$$h(x_{jt}) = \begin{cases} 0, & \text{jeżeli } x_{jt} \in \mathbb{R}_+, \\ \infty, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (4.186)$$

reguła aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  jest następująca:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \left[ \bar{\mathbf{X}}^{(k)} - \tilde{L}_X^{-1} \mathbf{G}_X(\bar{\mathbf{X}}^{(k)}) \right]_+, \quad (4.187)$$

gdzie  $\mathbf{G}_X(\bar{\mathbf{X}}^{(k)}) = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)}) = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \bar{\mathbf{X}}^{(k)} - \mathbf{Y})$ .

Punkt  $\bar{\mathbf{X}}^{(k)}$  jest punktem linearyzacji funkcji pomocniczej  $F_X(\mathbf{X}, \bar{\mathbf{X}}^{(k)})$ . Można go zdefiniować na różne sposoby. Jeśli  $\bar{\mathbf{X}}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)}$ , to reguła aktualizacji w (4.187) może być interpretowana jako reguła iteracyjna projekcyjnej metody Landwebera. W metodzie Nesterowa  $\bar{\mathbf{X}}^{(k)}$  jest wyznaczany jako punkt ekstrapolacji kierunków  $\{\mathbf{X}^{(k-1)}, \mathbf{X}^{(k)}\}$ . Stąd:

$$\bar{\mathbf{X}}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} + \beta^{(k)} (\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)}). \quad (4.188)$$

Stosując podejście Nesterowa [326], optymalny współczynnik zbieżności sekwencji iteracyjnej w (4.187) uzyskuje się, gdy czynnik  $\beta^{(k)}$  wyrażony jest przez  $\beta^{(k)} = \frac{\gamma^{(k-1)} - 1}{\gamma^{(k)}}$ . Parameter  $\gamma^{(k)}$  obliczany jest z równania  $(\gamma^{(k)})^2 - \gamma^{(k)} - (\gamma^{(k-1)})^2 = 0$ .

Finalna wersja algorytmu gradientów optymalnych dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  wyrażona jest algorytmem 11, gdzie  $k_{\max}$  oznacza maksymalną liczbę iteracji wewnętrznych. Algorytm aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  jest analogiczny do algorytmu 11.

**Twierdzenie 4.2.** *Jeśli sekwencje iteracyjne  $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$  i  $\{\mathbf{Z}^{(k)}\}$  generowane są algorytmem 11 dla  $k \geq 1$ , oraz  $\mathbf{X}^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{X}^{(k)}$ , to*

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) - \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^*) \leq \frac{2L_X \|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^*\|_F^2}{(k+2)^2}. \quad (4.189)$$

Dowód twierdzenia 4.2 można odnaleźć w pracy [11].



---

**Algorytm 11. Iteracje Nesterowa**

---

**Wejście:**  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ,  $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych

**Wyjście:**  $\mathbf{X}$  – estymowany faktor

```

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{X}^{(0)}$ ,  $L_X = \|\mathbf{A}^T \mathbf{A}\|_2$ ,  $\gamma^{(0)} = 1$ ;
2 for  $k = 1, 2, \dots, k_{\max}$  do
3    $\mathbf{G}_X^{(k)} = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{Z}^{(k-1)} - \mathbf{Y})$ ; // Gradient w punkcie  $\mathbf{Z}^{(k)}$ 
4    $\mathbf{X}^{(k)} = \left[ \mathbf{Z}^{(k-1)} - L_X^{-1} \mathbf{G}_X^{(k)} \right]_+$ ; // Aktualizacje projekcyjne
5    $\gamma^{(k)} = \frac{1 + \sqrt{4(\gamma^{(k-1)})^2 - 1}}{2}$ ,  $\beta^{(k)} = \frac{\gamma^{(k-1)} - 1}{\gamma^{(k)}}$ ;
    $\mathbf{Z}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} + \beta^{(k)} (\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)})$ ; // Kierunek poprawy

```

---

Maksymalna liczba iteracji  $k_{\max}$  w algorytmie 11 może być określana przez odpowiednie kryterium zatrzymania, np. kryterium gradientów rzutowanych w (4.42). Możliwe też są inne podejścia. Przykładowo, w pracy [504] liczbę tę dobierano według zasady:  $k_{\max} = \min \{10, n\}$ , gdzie  $n$  jest krokiem iteracji zewnętrznych. To podejście motywowane jest regułami (4.146) i (4.147). Silniejszy wpływ parametrów regularyzacji w początkowej fazie naprzemiennej aktualizacji faktorów jest równoważny w kontekście regularyzacji wcześniejszemu przerywaniu iteracji wewnętrznych. Jest to tzw. regularyzacja przez wcześniejsze przerywanie procesu iteracyjnego (ang. *truncated iterations*).

Metoda Nesterowa wykorzystywana jest w różnych dziedzinach przetwarzania sygnałów i obrazów [11, 92, 529], a także w grupowaniu dokumentów tekstowych [162]. W pracy [504] pokazano, że metoda ta jest również bardzo efektywna w klasyfikacji obrazów tekstur. Badano ją również w kontekście ekstrakcji wektorów cech z obrazów bazy ORL i z obrazów hiperspektralnych [462]. Nowe algorytmy NMF bazujące na metodzie Nesterowa można też odnaleźć w pracy [159].

## 4.8. Algorytmy punktów wewnętrznych

Metody punktów wewnętrznych (ang. *interior-point methods*) są powszechnie stosowane do rozwiązywania zadań optymalizacji liniowej i nieliniowej z ograniczeniami [155, 329]. Obecnie wiele jest algorytmów bazujących na metodzie punktów wewnętrznych, które mogą być wykorzystane w metodzie NMF. Przykładowo, w pracy [491] podjęto próbę estymacji nieujemnych faktorów za pomocą

zmodyfikowanego algorytmu IIP (ang. *Inexact Interior-Point*). Jest to algorytm zaproponowany przez Bonettini i Serafini [32] do *debluringu* obrazów. Próba ta okazała się bardzo efektywna, zwłaszcza w kontekście zadań ślepej separacji sygnałów spektralnych. Inną modyfikację tego algorytmu zastosowano do klasyfikacji obrazów tekstur.

W celu zastosowania algorytmu IIP do aktualizacji czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w modelu NMF, zadania (4.1) i (4.2) należy przekształcić do zadań programowania kwadratowego. Jeśli funkcja celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jest funkcją kwadratową, to przekształcenie jest bardzo proste. Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2}D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X}) + \frac{\alpha_A}{2}\|\mathbf{A}\|_F^2 + \frac{\alpha_X}{2}\|\mathbf{X}\|_F^2$ , gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej w (2.4). W celu estymacji czynnika  $\mathbf{A}$  funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  można przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^I \|\underline{\mathbf{y}}_i^T - \mathbf{X}^T \underline{\mathbf{a}}_i^T\|_2^2 + \frac{\alpha_A}{2} \sum_{i=1}^I \|\underline{\mathbf{a}}_i\|_2^2 + \frac{\alpha_X}{2} \|\mathbf{X}\|_F^2 \\ &= \sum_{i=1}^I \left( \frac{1}{2} \underline{\mathbf{a}}_i (\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \alpha_A \mathbf{I}_J) \underline{\mathbf{a}}_i^T - \underline{\mathbf{y}}_i \mathbf{X}^T \underline{\mathbf{a}}_i^T + \frac{1}{2} \underline{\mathbf{y}}_i \underline{\mathbf{y}}_i^T \right) \\ &\quad + \frac{\alpha_X}{2} \|\mathbf{X}\|_F^2,\end{aligned}\tag{4.190}$$

gdzie  $\underline{\mathbf{y}}_i \in \mathbb{R}_+^{1 \times T}$  i  $\underline{\mathbf{a}}_i \in \mathbb{R}_+^{1 \times J}$  –  $i$ -te wektory wierszowe odpowiednich macierzy  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{A}$ .

Analogicznie do estymacji czynnika  $\mathbf{X}$  uzyskuje się:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \sum_{t=1}^T \|\mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t\|_2^2 + \frac{\alpha_X}{2} \sum_{t=1}^T \|\mathbf{x}_t\|_2^2 + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2 \\ &= \sum_{t=1}^T \left( \frac{1}{2} \mathbf{x}_t^T (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{I}_J) \mathbf{x}_t - \mathbf{y}_t^T \mathbf{A}\mathbf{x}_t + \frac{1}{2} \mathbf{y}_t^T \mathbf{y}_t \right) \\ &\quad + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2.\end{aligned}\tag{4.191}$$

Dalsze rozważania ograniczają się do estymacji czynnika  $\mathbf{X}$ , ponieważ estymacja czynnika  $\mathbf{A}$  może być zrealizowana w podobny sposób, uwzględniając funkcję (4.190). Dla aktualizacji czynnika  $\mathbf{X}$ , zadanie (4.2) można więc wyrazić za pomocą zadania programowania kwadratowego:

$$\min_{\underline{\mathbf{x}}_t} \frac{1}{2} \underline{\mathbf{x}}_t^T \mathbf{Q} \underline{\mathbf{x}}_t + \mathbf{c}_t^T \underline{\mathbf{x}}_t + \text{const}, \quad \text{p.o. } \underline{\mathbf{x}}_t \geq \mathbf{0}, \quad \text{dla } t = 1, \dots, T,\tag{4.192}$$

gdzie  $\mathbf{c}_t = -\mathbf{A}^T \mathbf{y}_t \in \mathbb{R}^J$  oraz  $\mathbf{Q} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{I}_J \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$ .

Metody punktów wewnętrznych poszukują iteracyjnie takiego rozwiązania problemu (4.192), które w punkcie stacjonarności funkcji celu spełnia warunki optymalności *KKT*. W prymalno-dualnych metodach punktów wewnętrznych [329], warunki *KKT* formułowane są w postaci układów równań nieliniowych, które następnie rozwiązywane są za pomocą metody Newtona.

Zadanie programowania (4.192) może być analizowane w kontekście zadania (4.18), zatem funkcja Lagrange'a (4.22) związana z zadaniem (4.192) jest postaci:

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}_t, \boldsymbol{\lambda}_t) = \frac{1}{2} \mathbf{x}_t^T \mathbf{Q} \mathbf{x}_t + \mathbf{c}_t^T \mathbf{x}_t - \boldsymbol{\lambda}_t^T \mathbf{x}_t, \quad (4.193)$$

gdzie  $\boldsymbol{\lambda}_t \in \mathbb{R}_+^J$  – wektor nieujemnych mnożników Lagrange'a.

Z warunków stacjonarności funkcji (4.193) wynika:

$$\nabla_{\mathbf{x}_t} \mathcal{L}(\mathbf{x}_t^*, \boldsymbol{\lambda}_t^*) = \mathbf{Q} \mathbf{x}_t^* + \mathbf{c}_t - \boldsymbol{\lambda}_t^* = \mathbf{0}, \quad \text{dla } (\boldsymbol{\lambda}_t^*, \mathbf{x}_t^*) \geq \mathbf{0}. \quad (4.194)$$

Zgodnie z zależnością (4.34) warunek komplementarności ma postać:

$$(\boldsymbol{\lambda}_t^*)^T \mathbf{x}_t^* = 0. \quad (4.195)$$

Istotą prymalno-dualnych metod punktów wewnętrznych jest poszukiwanie punktu  $(\boldsymbol{\lambda}_t^*, \mathbf{x}_t^*) \geq \mathbf{0}$  metodą Newtona w taki sposób, aby kierunek poprawy był przesunięty do wnętrza nieujemnego ortantu. Takie podejście prowadzi do zwiększenia długości kroku poszukiwań w każdym kroku iteracyjnym. Odległość aktualizacji od granicy nieujemnego ortantu jest następnie iteracyjnie zmniejszana, proporcjonalnie z odstępem dualnym. W wyniku tego przesunięcia warunek komplementarności w  $k$ -tym kroku iteracji wewnętrznych przyjmuje postać:

$$(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)})^T \mathbf{x}_t^{(k)} = \tau_t^{(k)}, \quad (4.196)$$

gdzie  $\tau_t^{(k)} > 0$  – parametr przesunięcia,  $\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}$  i  $\mathbf{x}_t^{(k)}$  – wektory estymowane w  $k$ -tym kroku iteracyjnym.

Niech  $\mathbf{D}_\lambda^{(k)} = \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$ ,  $\mathbf{D}_x^{(k)} = \text{diag}(\mathbf{x}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  oraz  $\mathbf{1}_J = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^J$ , zatem warunek (4.196) można zapisać w postaci:

$$\mathbf{D}_\lambda^{(k)} \mathbf{D}_x^{(k)} \mathbf{1}_J = \tau_t^{(k)} \mathbf{1}_J. \quad (4.197)$$

Równania (4.194) i (4.197) mogą być wyrażone przez odwzorowanie  $\mathcal{F} : \mathbb{R}^{2J} \rightarrow \mathbb{R}^{2J}$ :

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_t^{(k)}, \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}) = \begin{bmatrix} \mathbf{Q} \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{c}_t - \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)} \\ \mathbf{D}_\lambda^{(k)} \mathbf{D}_x^{(k)} \mathbf{1}_J - \tau_t^{(k)} \mathbf{1}_J \end{bmatrix} = \mathbf{0}, \quad (\mathbf{x}_t^{(k)}, \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}) \geq \mathbf{0}. \quad (4.198)$$

Stosując metodę Newtona do (4.198), otrzymuje się:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Q} & -\mathbf{I}_J \\ \mathbf{D}_\lambda^{(k)} & \mathbf{D}_x^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_t^{(k)} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{Q} \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{c}_t - \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)} \\ \mathbf{D}_\lambda^{(k)} \mathbf{D}_x^{(k)} \mathbf{1}_J - \tau_t^{(k)} \mathbf{1}_J \end{bmatrix}, \quad (4.199)$$

gdzie  $\mathbf{d}_t^{(k)} = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_t^{(k)} \\ \Delta \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)} \end{bmatrix}$  – newtonowski kierunek poprawy.

Układ równań w (4.199) może być przekształcony do następujących formuł iteracyjnych:

$$\mathbf{T}_t^{(k)} \Delta \mathbf{x}_t^{(k)} = \mathbf{w}_t^{(k)}, \quad (4.200)$$

$$\Delta \lambda_{jt}^{(k)} = \frac{\tau_t^{(k)} - \lambda_{jt}^{(k)} \Delta x_{jt}^{(k)}}{x_{jt}^{(k)}} - \lambda_{jt}^{(k)}, \quad (4.201)$$

gdzie  $\mathbf{T}_t^{(k)} = \mathbf{Q} + \text{diag} \left( \frac{\lambda_{jt}^{(k)}}{x_{jt}^{(k)}} \right)$  oraz  $\mathbf{w}_t^{(k)} = -\mathbf{Q} \mathbf{x}_t^{(k)} - \mathbf{c}_t + \text{diag} \left( \frac{\tau_t^{(k)}}{x_{jt}^{(k)}} \right) \mathbf{1}_J$ .

Ponieważ macierz  $\mathbf{T}_t^{(k)}$  jest symetryczna i dodatnio określona, gdy  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$ , układ równań w (4.200) może być rozwiązany za pomocą faktoryzacji Choleskiego. Niech  $\mathbf{T}_t^{(k)} \triangleq \mathbf{R}^T \mathbf{R}$ , gdzie  $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{J \times J}$  jest górną macierzą trójkątną, zatem:

$$\mathbf{z}_t^{(k)} = \mathbf{R}^T \backslash \mathbf{w}_t^{(k)}, \quad \Delta \mathbf{x}_t^{(k)} = \mathbf{R} \backslash \mathbf{z}_t^{(k)}, \quad (4.202)$$

gdzie operator  $\backslash$  oznacza podstawienie wsteczne (ang. *backward substitution*). Faktoryzacja Choleskiego wymaga wykonania ok.  $\frac{J^3}{6}$  elementarnych operacji, natomiast koszt obliczeniowy podstawień w (4.202) to ok.  $J^2$ . Całkowity koszt obliczeniowy wyznaczenia rozwiązania układu równań w (4.200) za pomocą faktoryzacji Choleskiego wynosi ok.  $\frac{1}{6}J^3 + \frac{1}{2}IJ^2 + J^2$  elementarnych operacji arytmetycznych dla  $J \gg 1$ . Jeżeli układ równań w (4.200) byłby rozwiązywany metodą eliminacji Gaussa z kompletnym wyborem elementów głównych, całkowity koszt obliczeniowy takiego podejścia wynosiłby ok.  $\frac{2}{3}J^3 + \frac{1}{2}IJ^2$  dla  $J \gg 1$ .

Następnie  $\mathbf{x}_t$  i  $\boldsymbol{\lambda}_t$  aktualizowane są według reguł:

$$\mathbf{x}_t^{(k+1)} = \mathbf{x}_t^{(k)} + \alpha_t^{(k)} \Delta \mathbf{x}_t^{(k)}, \quad \boldsymbol{\lambda}_t^{(k+1)} = \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)} + \alpha_t^{(k)} \Delta \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}, \quad (4.203)$$

gdzie długość kroku  $\alpha_t^{(k)} \in (0, 1)$  dobierana jest w taki sposób, aby  $(\mathbf{x}_t^{(k+1)}, \boldsymbol{\lambda}_t^{(k+1)}) > \mathbf{0}$ . Podejście to realizowane jest według podobnej zasady jak w (4.169), zatem

$$\alpha_t^{(k)} = \xi \min_{j, \Delta x_{jt}^{(k)} < 0, \Delta \lambda_{jt}^{(k)} < 0} \left( 1, -\frac{x_{jt}^{(k)}}{\Delta x_{jt}^{(k)}}, -\frac{\lambda_{jt}^{(k)}}{\Delta \lambda_{jt}^{(k)}} \right), \quad (4.204)$$

gdzie  $\xi \lesssim 1$ .

Parametr przesunięcia  $\tau_t^{(k)}$  powinien zależeć od tzw. odległości dualnej oraz  $\lim_{k \rightarrow \infty} \tau_t^{(k)} = 0$ . Na podstawie reguł podanych w [32], przyjęto:  $\tau_t^{(k)} = \mu_t^{(k)} \rho$ , gdzie  $\rho \leq \rho_{\max} < 1$  oraz  $\mu_t^{(k)} = \frac{\bar{\mu}_t^{(k)} + \underline{\mu}_t^{(k)}}{2}$ . Parametr  $\bar{\mu}_t^{(k)} = J^{-1}(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)})^T \mathbf{x}_t^{(k)}$  określa odległość dualną, natomiast  $\underline{\mu}_t^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{J}} \phi(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}, \mathbf{x}_t^{(k)})$  motywowany jest przybliżoną metodą Newtona, gdzie

$$\phi(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}, \mathbf{x}_t^{(k)}) = \sqrt{\|\mathbf{Q}\mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{c}_t - \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}\|_2^2 + \|\mathbf{D}_\lambda^{(k)} \mathbf{D}_x^{(k)} \mathbf{1}_J\|_2^2} \quad (4.205)$$

jest miarą rozbieżności punktu  $(\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}, \mathbf{x}_t^{(k)})$  od punktu stacjonarności, określonego warunkami *KKT*. Jeśli  $\tau_t^{(k)} \rightarrow 0$ , to punkt  $(\mathbf{x}_t^{(k)}, \boldsymbol{\lambda}_t^{(k)})$  powinien spełniać warunki *KKT*. Kryterium zatrzymania iteracji wewnętrznych może więc być określone przez parameter  $\tau_t^{(k)}$ . Proces iteracyjny jest zatrzymywany, jeśli  $\forall t : \tau_t^{(k)} < \tau_{\text{stop}}$ , gdzie  $\tau_{\text{stop}}$  jest definiowanym parametrem progowym.

Parametry regularyzacji  $\alpha_A$  i  $\alpha_X$  odpowiednio w (4.190) i (4.191) mogą być ustalane zgodnie z regułami, podanymi w (4.146) i (4.147). W pracy [491] przyjęto, że parameter  $\alpha_A$  dobierany jest zgodnie z regułą bisekcji w (4.147), a parameter  $\alpha_X$  ustawiono na bardzo małą wartość, tak aby  $\mathbf{Q} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha_X \mathbf{I}_J$  była macierzą dodatnio określoną. Przyjęto więc:  $\alpha_X = 10^{-8}$ . Podejście to było motywowane wiedzą aprioryczną o charakterze estymowanych czynników. W metodzie ślepej separacji sygnałów spektralnych, która była badana w [491], wszystkie elementy macierzy  $\mathbf{A}$  były dodatnie, a jedynie macierz  $\mathbf{X}$  była rzadka. W takiej sytuacji, człon  $\alpha_A U_A(\mathbf{A})$  w funkcji (3.38) powinien wymuszać gładkość estymowanego czynnika  $\mathbf{A}$ , a zatem wybór funkcji  $U_A(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_F^2$  jest uzasadniony. Z kolei, człon  $\alpha_X U_X(\mathbf{X})$  powinien być pominięty lub określony przez funkcję wymuszającą rzadkość w czynniku  $\mathbf{X}$ . W najprostszym podejściu przyjęto:  $\alpha_X = 0$ . Z kolei, w pracy [486] oba czynniki  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są rzadkie, zatem  $\alpha_A = \alpha_X = 10^{-8}$ .

Algorytm IIP, pomimo dużej efektywności w rozwiązywaniu zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy, ma też istotne wady. Ponieważ macierz  $\mathbf{T}_t^{(k)}$  zależy od  $\mathbf{x}_t^{(k)}$  oraz  $\boldsymbol{\lambda}_t^{(k)}$ , układ równań w (4.200) rozwiązywany jest sekwencyjnie z wykorzystaniem faktoryzacji Choleskiego dla każdego  $t$ . Jeśli  $T$  jest duże, koszt obliczeniowy aktualizacji wszystkich wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{X}$  jest znaczący. Jeśli

$I \gg 1$ , koszt aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  jest również pokaźny. W rezultacie, algorytm IIP w aktualnej formie efektywny jest tylko do rozwiązywania zadań o relatywnie małych wymiarach.

## 4.9. Algorytmy zbioru aktywnego

Algorytmy zbioru aktywnego (ang. *active-set algorithm*), omawiane w niniejszej pracy, są zmodyfikowanymi wersjami znanego algorytmu NNLS (ang. *Non-Negative Least Squares*). Algorytm ten został zaproponowany przez Lawsons i Hansona [255] w 1974 roku do rozwiązywania liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. Rozwiązanie estymowane algorytmem NNLS spełnia warunki optymalności *KKT*. Obecnie istnieje kilka wersji algorytmu NNLS, które stosowane są w wielu dziedzinach nauki.

Kim i Park [223] byli pionierami w zastosowaniu algorytmu NNLS do aktualizacji czynników w metodzie NMF. Zaproponowali trzy wersje: CNMF (ang. *Constrained NMF*), SNMF/L i SNMF/R. W metodzie CNMF, algorytm NNLS zastosowano do rozwiązania zadań (3.63) i (3.64), wymuszających gładkość estymowanych czynników. W SNMF/L, zadanie aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  wyrażone jest przez (3.49), a zadanie aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  przez (3.63). Natomiast w SNMF/R, czynnik  $\mathbf{A}$  aktualizowany jest według (3.64), a czynnik  $\mathbf{X}$  według (3.48). Każde z tych zadań rozwiązywane jest algorytmem NNLS. W pracy [223] pokazano, że algorytm NNLS znacznie przyspiesza proces zbieżności iteracji zewnętrznych do punktu stacjonarnego określonego warunkami *KKT*. Badania przeprowadzono na danych biomedycznych, pochodzących z pracy [153].

Pewna modyfikacja algorytmu NNLS okazała się również bardzo efektywna w innych zastosowaniach modelu NMF. Zregulowany algorytm NNLS w połączeniu z regułą bisekcji w (4.147) charakteryzuje się dużą efektywnością w grupowaniu i klasyfikacji dokumentów tekstowych [485], w klasyfikacji obrazów tekstur [486] oraz w ślepej separacji sygnałów spektralnych [484].

### 4.9.1. Algorytm LH-NNLS

Algorytm 12 przedstawia oryginalną wersję algorytmu NNLS [255]. W niniejszym rozdziale oznaczany jest skrótowcem LH-NNLS. Algorytm ten rekursywnie znajduje takie rozwiązanie liniowego zadania najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności, które spełnia warunki optymalności *KKT*. Zbiór zmien-

ných estymowanych jest iteracyjnie dzielony na zbiór zmiennych bazowych i dopełniający zbiór zmiennych niebazowych. Proces iteracyjnego podziału jest zatrzymywany, gdy zmienne w obu zbiorach spełniają warunki *KKT*. W punkcie określonym przez warunki *KKT* zmienne bazowe mają dodatnie wartości, a zmienne niebazowe wartości zerowe.

Niech  $P = \{j : x_{jt} > 0\}$  będzie zbiorem pasywnym, zawierającym indeksy zmiennych bazowych, a  $R = \{1, \dots, J\} \setminus P$  zbiorem aktywnym z indeksami pozostałych zmiennych (niekoniecznie niebazowych). W konsekwencji przyjęto następujący podział elementów wektorów:  $\forall t : \mathbf{x}_t = [\mathbf{x}_t^{(P)}; \mathbf{x}_t^{(R)}] \in \mathbb{R}^J$  oraz  $\mathbf{g}_t = [g_{jt}] = \nabla_{\mathbf{x}_t} D(\mathbf{y}_t | \mathbf{A}\mathbf{x}_t) = [\mathbf{g}_t^{(P)}; \mathbf{g}_t^{(R)}] \in \mathbb{R}^J$ , gdzie  $\mathbf{x}_t$  jest  $t$ -tą kolumną macierzy  $\mathbf{X}$ . Kolumny macierzy  $\mathbf{A}$  mogą być podzielone analogicznie:  $\mathbf{A} = [\mathbf{A}_P \ \mathbf{A}_R]$ , gdzie  $\mathbf{A}_P = [a_{*,P}]$  oraz  $\mathbf{A}_R = [a_{*,R}]$ . Algorytm 12 inicjalizowany jest przybliżeniem:  $\mathbf{x}_t = \mathbf{0}$ , a zatem początkowo przyjęto, że wszystkie zmienne rozwiązania należą do zbioru aktywnego. Następnie, w zbiorze aktywnym rekursywnie wyszukiwane są indeksy tych zmiennych, które nie spełniają warunków *KKT*. Wyszukiwanie to realizowane jest zgodnie z zasadą, że jeśli  $\exists m : g_{mt} < -\tau$  dla dowolnej wartości progowej  $\tau > 0$ , to  $x_{mt}$  nie może być zmienną niebazową. Indeks  $m$  przenoszony jest zatem ze zbioru  $R$  do zbioru  $P$  (linia 6). Następnie zmienne bazowe aktualizowane są przez rozwiązanie następującego liniowego zadania najmniejszych kwadratów bez ograniczeń (linia 9):

$$\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} = \arg \min_{\mathbf{x}_t^{(P)}} \left\{ \|\mathbf{y}_t - \mathbf{A}_P \mathbf{x}_t^{(P)}\|_2 \right\}, \quad (4.206)$$

gdzie  $\mathbf{A}_P$  – macierz pełnego rzędu, utworzona dla zaktualizowanego zbioru  $P$ . Jeśli po aktualizacji w wektorze  $\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)}$  znajdują się elementy ujemne, to długość kroku wzdłuż kierunku poprawy jest zbyt duża i należy ją odpowiednio zmniejszyć. Kierunek poprawy określony jest wektorem  $\mathbf{p}_t = \bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} - \mathbf{x}_t^{(P)}$ . Według zasady (4.169) maksymalna długość kroku wzdłuż kierunku  $\mathbf{p}_t$  wynosi:  $\alpha_t =$

$$\min_{\substack{j \in P \\ \bar{x}_{jt}^{(P)} \leq 0}} \left\{ \frac{x_{jt}^{(P)}}{x_{jt}^{(P)} - \bar{x}_{jt}^{(P)}} \right\}. \text{ Dla takiej długości kroku aktualizacja } \mathbf{x}_t^{(P)} \leftarrow \bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} + \alpha_t \mathbf{p}_t$$

zawiera elementy z granicy obszaru rozwiązań dopuszczalnych, co prowadzi do aktualizacji zbiorów  $P$  i  $R$  (linia 14). Następnie, ponownie wykonywane jest zadanie (4.206). Wszystkie zmienne, których indeksy należą do zbioru  $R$  przybierają wartości zerowe.

**Algorytm 12. LH-NNLS**


---

**Wejście:**  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{y}_t \in \mathbb{R}^I$ ,  $k_{\max}$   
**Wyjście:**  $\mathbf{x}_t^* \geq 0$ , gdzie  $\mathbf{x}_t^* = \arg \min_{\mathbf{x}_t \geq 0} \|\mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t\|_2$

- 1 **Inicjalizacja:**  $P = \emptyset$ ,  $R = \{1, \dots, J\}$ ,  $\mathbf{x}_t = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{g}_t = -\mathbf{A}^T \mathbf{y}_t$ ,  $k = 0$ ;
- 2 **repeat**
- 3      $k \leftarrow k + 1$  ;
- 4      $m = \arg \min_{j \in R} \{g_{jt}\}$ ;                                     // indeks zmiennej pasywnej
- 5     **if**  $R \neq \emptyset$  i  $g_{mt} < -\tau$  **then**
- 6          $P \leftarrow P \cup m$  i  $R \leftarrow R \setminus m$  ;                     // aktualizacja zbiorów
- 7     **else**
- 8         **STOP:**  $\mathbf{x}_t$  jest optymalnym rozwiązaniem
- 9      $\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} = ((\mathbf{A}_P)^T \mathbf{A}_P)^{-1} (\mathbf{A}_P)^T \mathbf{y}_t$  gdzie  $\mathbf{A}_P = [a_{*,P}] \in \mathbb{R}^{I \times |P|}$  ;
- 10    **while**  $\min\{\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)}\} \leq 0$  **do**
- 11          $\alpha_t = \min_{\substack{j \in P \\ \bar{x}_{jt}^{(P)} \leq 0}} \left\{ \frac{x_{jt}^{(P)}}{x_{jt}^{(P)} - \bar{x}_{jt}^{(P)}} \right\}$  ;                     // długość kroku
- 12          $\mathbf{x}_t^{(P)} \leftarrow \mathbf{x}_t^{(P)} + \alpha_t (\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} - \mathbf{x}_t^{(P)})$ ;
- 13          $N = \{j : x_{jt}^{(P)} = 0\}$  ;     // indeksy nowych zmiennych aktywnych
- 14          $P \leftarrow P \setminus N$  oraz  $R \leftarrow R \cup N$  ;
- 15          $\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} = ((\mathbf{A}_P)^T \mathbf{A}_P)^{-1} (\mathbf{A}_P)^T \mathbf{y}_t$ , gdzie  $\mathbf{A}_P = [a_{*,P}] \in \mathbb{R}^{I \times |P|}$  ;
- 16      $\mathbf{x}_t \leftarrow [\mathbf{x}_t^{(P)}; \mathbf{x}_t^{(R)}] \in \mathbb{R}_+^J$ , gdzie  $\mathbf{x}_t^{(P)} = \bar{\mathbf{x}}_t^{(P)}$  oraz  $\mathbf{x}_t^{(R)} = \mathbf{0}$  ;
- 17      $\mathbf{g}_t = \mathbf{A}^T (\mathbf{A}_P \mathbf{x}_t^{(P)} - \mathbf{y}_t)$  ;                                     // gradient
- 18 **until**  $k > k_{\max}$ ;

---

Według [255], pętla wewnętrzna algorytmu 12 jest wykonywana nie więcej niż  $|P| - 1$  razy. Liczba iteracji w pętli głównej zależy od stopnia rzadkości rozwiązania, ale nie jest większa niż  $|P|$  dla  $\mathbf{x}_t^*$ .

Bro oraz de Jong [36] znacząco przyspieszyli ten algorytm dla  $I \gg J$ , sugerując, aby macierz normalna  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  oraz  $\mathbf{A}^T \mathbf{y}_t$  były obliczane przed wykonywaniem operacji pętlowych. Następnie zadanie w (4.206) realizowane jest w następujący sposób:

$$\bar{\mathbf{x}}_t^{(P)} = ((\mathbf{A}^T \mathbf{A})_{P,P})^{-1} (\mathbf{A}^T \mathbf{y}_t)_P. \quad (4.207)$$



Pomimo tych znaczących uproszczeń odwrotność macierzy  $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})_{P,P}$  w algorytmie 12 musi być obliczana dla każdego wektora  $\mathbf{y}_t$ , co wymaga znacznego kosztu obliczeniowego dla macierzy  $\mathbf{Y}$  o dużej liczbie kolumn.

#### 4.9.2. Algorytm FC-NNLS

Van Benthem i Keenan [15] zaproponowali algorytm FC-NNLS (ang. *Fast Combinatorial NNLS*), który znacząco przyspiesza algorytm NNLS dla zadań z danymi zapisanymi w postaci macierzy  $\mathbf{Y}$  o dużej liczbie kolumn. Ich koncepcja opiera się na założeniu, że dla rzadkiej estymowanej macierzy  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , gdzie  $T \gg J$  prawdopodobieństwo znalezienia wektorów kolumnowych  $\{\mathbf{x}_t\}$ , które mają identyczny profil rozkładu elementów o zerowej wartości jest duże. Po określeniu zbioru pasywnego  $P$  dla każdego wektora  $\mathbf{y}_t$ , aktualizacja kolumn  $\mathbf{x}_t$ , które mają identyczny profil rzadkości (wspólny zbiór  $P$ ), może odbywać się z wykonaniem tylko jednej odwrotności macierzy  $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})_{P,P}$ . Pomijając wektor  $\mathbf{x}_t = \mathbf{0}$ , liczba wszystkich możliwych profili rzadkości macierzy  $\mathbf{X}$  wynosi  $2^J - 1$  dla  $T \geq J$ . Zakładając, że każdy profil jest tak samo prawdopodobny dla  $T \gg J$ , uzyskuje się ok.  $\frac{T}{2^J}$ -krotne przyspieszenie obliczeń w stosunku do algorytmu LH-NNLS.

Algorytm FC-NNLS przedstawiono za pomocą algorytmu 13. Jest to algorytm rekurencyjny oparty na założeniach algorytmu NNLS. W linii 3 wyznaczane jest rozwiązanie liniowego zadania najmniejszych kwadratów bez ograniczeń. Następnie w linii 5 wyszukiwane są te wektory kolumnowe estymowanej macierzy  $\mathbf{X}$ , które mają co najmniej jeden element niedodatni. Kolumny te podlegają rekurencyjnej aktualizacji, zgodnie z procedurą algorytmu NNLS. Fundamentalną częścią algorytmu FC-NNLS jest funkcja `cssls` (linie 9 i 19), której realizację przedstawiono w algorytmie 14. Funkcja ta, na podstawie informacji o rozkładzie elementów niebazowych, w każdej aktualizowanej kolumnie macierzy  $\mathbf{X}$  znajduje wspólne profile rzadkości. Następnie dla każdego profilu estymuje odpowiednie kolumny w  $\mathbf{X}$ . Indeksy kolumn, które nie spełniają kryterium zatrzymania, umieszczane są w zbiorze  $F$  w linii 23. Proces rekurencyjnej aktualizacji zatrzymywany jest, gdy zbiór  $F$  jest pusty, tzn. wszystkie kolumny z  $\mathbf{X}$  spełniają warunki optymalności *KKT*.

Należy zauważyć, że algorytm CSSLS ma inną postać niż ten, zaproponowany w pracy [15]. Dzięki wykorzystaniu funkcji `unique` z Matlaba, znajdowanie wspólnych profili rzadkości w estymowanym faktorze  $\mathbf{X}$  można było zrealizować znacznie prościej niż w [15]. Takie podejście znacząco przyspiesza algorytm FC-NNLS.

**Algorytm 13. FC-NNLS**


---

**Wejście** :  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych,

**Wyjście** :  $\mathbf{X}^* \geq 0$ , gdzie  $\mathbf{X}^* = \arg \min_{\mathbf{X} \geq 0} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2$ ,

- 1 **Inicjalizacja**:  $M = \{1, \dots, T\}$ ,  $N = \{1, \dots, J\}$ ;
- 2 Oblicz:  $\mathbf{B} = [b_{ij}] = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$  i  $\mathbf{C} = [c_{it}] = \mathbf{A}^T \mathbf{Y}$ ;
- 3  $\mathbf{X} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C}$ ; // minimalizacja bez ograniczeń
- 4  $\mathbf{P} = [p_{jt}]$ , gdzie  $p_{jt} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } x_{jt} > 0, \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$ ; // zbiór pasywny
- 5  $F = \{t \in M : \sum_j p_{jt} < J\}$ ; // kolumny do zoptymalizowania
- 6  $x_{jt} \leftarrow \begin{cases} x_{jt}, & \text{jeżeli } p_{jt} = 1, \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$ ;
- 7 **while**  $F \neq \emptyset$  **do**
  - 8  $\mathbf{P}_F = [p_{*,F}] \in \mathbb{R}^{J \times |F|}$ ,  $\mathbf{C}_F = [c_{*,F}] \in \mathbb{R}^{J \times |F|}$ ,  $k = 0$ ;
  - 9  $[\bar{x}_{*,F}] = \text{cssls}(\mathbf{B}, \mathbf{C}_F, \mathbf{P}_F)$ ; // aktualizacja zmiennych bazowych
  - 10  $H = \{t \in F : \min_{j \in N} \{\bar{x}_{jt}\} < 0\}$ ; // kolumny do optymalizacji
  - 11 **while**  $H \neq \emptyset$  oraz  $k \leq k_{\max}$  **do**
    - 12  $k \leftarrow k + 1$ ;
    - 13  $S_t = \{j : \bar{x}_{jt} < 0 \text{ i } p_{jt} > 0, j \in N, t \in H\}$ ;
    - 14  $\alpha_{jt} = \frac{x_{jt}}{x_{jt} - \bar{x}_{jt}}$  dla  $j \in S_t$  i  $t \in H$ ;
    - 15  $j_t = \arg \min_{j \in S_t} \{\alpha_{jt}\}$  dla  $t \in H$ ;
    - 16  $x_{*,t} \leftarrow x_{*,t} + \alpha_{j_t}^* (\bar{x}_{*,t} - x_{*,t})$ , gdzie  $\alpha_{j_t}^* = \alpha_{j_t, t}$  dla  $t \in H$ ;
    - 17  $x_{j_t, t} = 0$ ,  $p_{j_t, t} = 0$  dla  $t \in H$ ; // zmienne aktywne
    - 18  $\mathbf{P}_H = [p_{*,H}] \in \mathbb{R}^{J \times |H|}$ ,  $\mathbf{C}_H = [c_{*,H}] \in \mathbb{R}^{J \times |H|}$ ;
    - 19  $[\bar{x}_{*,H}] = \text{cssls}(\mathbf{B}, \mathbf{C}_H, \mathbf{P}_H)$ ;
    - 20  $H = \{t \in F : \min_{j \in N} \{\bar{x}_{jt}\} < 0\}$ ; // kolumny do optymalizacji
  - 21  $\mathbf{W}_F = [w_{*,F}] = \mathbf{C}_F - \mathbf{B}\bar{\mathbf{X}}_F$ , gdzie  $\bar{\mathbf{X}}_F = [\bar{x}_{*,F}]$ ; // ujemny gradient
  - 22  $J = \{t \in F : w_{jt}(1 - p_{jt}) \leq 0, \forall j \in N\}$ ; // kolumny zoptymalizow.
  - 23  $F \leftarrow F \setminus J$ ; // kolumny do optymalizacji
  - 24 **if**  $F \neq \emptyset$  **then**
    - 25  $p_{jt} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } j = \arg \max_{j \in N} \{w_{jt}(1 - p_{jt}), \forall t \in F\}, \\ p_{jt}, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases}$ ;
    - 26  $[x_{*,F}] = [\bar{x}_{*,F}]$ ;

---

**4.9.3. Zregulowany NNLS**

W metodzie CNMF, którą zaproponowano w pracy [223], przyjęto, że parametry regularyzacji nie ulegają zmianie w procesie aktualizacji czynników. W pra-

---

**Algorytm 14. CSSLS**

---

**Wejście:**  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ ,  $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{J \times K}$ ,  $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{J \times K}$   
**Wyjście:**  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{J \times K}$

- 1  $M = \{1, \dots, K\}$ ,  $N = \{1, \dots, J\}$ ,  $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_K]$  ;
- 2 Znajdź zbiór  $L$  jednoznacznych kolumn w  $\mathbf{P}$ :  
 $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_L] = \text{unique}\{\mathbf{P}\}$  ;
- 3 **for**  $j = 1, \dots, L$  **do**
- 4      $\mathbf{h}_j = \{t \in M : \mathbf{p}_t = \mathbf{u}_j\}$  ;     // kolumny o wspólnym profilu rzadk.
- 5      $x_{\mathbf{u}_j, \mathbf{h}_j} = ([\mathbf{B}]_{\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j})^{-1} [\mathbf{C}]_{\mathbf{u}_j, \mathbf{h}_j}$  ;     // aktualizacja zm. bazowych

---

cach [484, 485] zastosowano również model CNMF, ale o zmniejszającym się parametrze regularyzacji wraz ze wzrostem liczby iteracji zewnętrznych. Podobnie jak w algorytmach RALS (omówionych w rozdz. 4.5) oraz w algorytmach punktów wewnętrznych (rozdz. 4.8), jeden z parametrów regularyzacji  $\alpha_A$  lub  $\alpha_X$  dobierany był zgodnie z regułą (4.146) lub (4.147). Zakładając, że macierz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{++}^{I \times J}$  jest gęsta a macierz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  rzadka, zmianie powinien podlegać parameter  $\alpha_A$ . Parameter  $\alpha_X$  należy dobrać w taki sposób, aby zapewniał stabilność numeryczną i możliwie mały błąd regularyzacji. W przypadku odwrotnym, regulacji podlega tylko parameter  $\alpha_X$ .

Finalną wersję algorytmu CNMF, którą badano w pracach [484–486, 494], wyrażono za pomocą algorytmu 15, gdzie estymowane faktory skalowane są do jednostkowej normy  $l_1$ . Funkcje  $\text{fcnnls}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}, \alpha_X)$  oraz  $\text{fcnnls}(\mathbf{Y}^T, \mathbf{X}^T, \alpha_A)$  znajdują rozwiązania odpowiednich zadań (3.63) oraz (3.64), za pomocą algorytmu 13.

Parameter  $\alpha_A$  dobierany jest zgodnie z regułą bisekcji w (4.147), gdzie  $\alpha^{(0)} > 0$  przyjmuje zwykle duże wartości (np. większe niż 100). Łatwo zauważyć, że po wykonaniu kilkunastu iteracji zewnętrznych, wartość tego parametru jest już tak mała, że błąd regularyzacji jest pomijalnie mały. Podejście to można intuicyjnie wyjaśnić przez analizę charakteru aktualizacji faktorów. Jeśli  $\alpha_A$  osiąga duże wartości, aktualizacja  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{Y}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \alpha_A\mathbf{I}_J)^{-1}$  może być aproksymowana przez regułę:  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} - \alpha_A^{-1}\mathbf{G}_A$ , gdzie  $\mathbf{G}_A = \nabla_{\mathbf{A}}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$ . Taka aktualizacja odbywa się zatem wzdłuż gradientowego kierunku poprawy, ale o bardzo małej długości kroku:  $\eta = \alpha_A^{-1}$ . Jeśli  $\alpha_A$  maleje, długość kroku zwiększa się, ale też elementy pozadiagonalne w macierzy hesjanu  $\mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{A}}^2\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{X}\mathbf{X}^T$  zaczynają odgrywać coraz bardziej znaczącą rolę. Gdy  $\alpha_A \rightarrow \bar{\alpha} \rightarrow 0$ , kierunek poprawy ma charakter newtonowski. W początkowym etapie aktualizacji, gdy przybliżenie

---

**Algorytm 15. RNNLS**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $\alpha^{(0)}$  – początkowa wartość parametru regularyzacji,  $\bar{\alpha}$  – wartość progowa parametru,

**Wyjście:** Estymowane faktory  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ ,

- 1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ,  $n = 0$ ;
- 2 **repeat**
- 3      $n \leftarrow n + 1$ ;
- 4      $\mathbf{X}^{(n)} = \text{fcnnls}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n-1)}, 10^{-12})$ ;                     // Aktualizacja  $\mathbf{X}$
- 5      $\mathbf{D}_X^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{x}_1^{(n)}\|_1^{-1}, \|\mathbf{x}_2^{(n)}\|_1^{-1}, \dots, \|\mathbf{x}_J^{(n)}\|_1^{-1}\}$ ;
- 6      $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \mathbf{D}_X^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}$ ;                                     // Normalizacja
- 7      $\bar{\mathbf{A}}^{(n)} = \text{fcnnls}(\mathbf{Y}^T, (\mathbf{X}^{(n)})^T, \alpha^{(n-1)})$ ;             // Aktualizacja  $\mathbf{A}$
- 8      $\mathbf{A}^{(n)} = (\bar{\mathbf{A}}^{(n)})^T$ ;
- 9      $\mathbf{D}_A^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{a}_1^{(n)}\|_1^{-1}, \|\mathbf{a}_2^{(n)}\|_1^{-1}, \dots, \|\mathbf{a}_J^{(n)}\|_1^{-1}\}$ ;
- 10     $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{D}_A^{(n)}$ ,     $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow (\mathbf{D}_A^{(n)})^{-1} \mathbf{X}^{(n)}$ ;         // Normalizacja
- 11     $\alpha^{(n)} = \max\{\bar{\alpha}, 2^{-n} \alpha^{(0)}\}$ ;                     // Reguła bisekcji parametru
- 12 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

początkowe  $\mathbf{A}^{(0)}$  jest bardzo dalekie od punktu optymalnego  $\mathbf{A}^*$  lub w pobliżu punktów siodłowych, gradientowy kierunek aktualizacji jest zwykle „bezpieczniejszy” niż newtonowski. Umożliwia bowiem łatwiejsze uniknięcie zatrzymywania się w punktach siodłowych lub lokalnych maksimach funkcji celu. Gdy aktualizacje znajdują się blisko właściwego punktu stacjonarnego, newtonowski charakter aktualizacji znacznie przyspiesza zbieżność do punktu stacjonarnego.

Dobór parametru  $\alpha_A$  według reguły bisekcji (4.147) można też uzasadnić na podstawie analizy geometrycznej aktualizacji realizowanych algorytmem 15.

Niech  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  jest macierzą faktoryzowalną, według modelu dokładnej faktoryzacji w (1.1), gdzie  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{++}^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  jest macierzą wystarczająco rzadką (według def. 3.8). Zbiory kolumn macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{Y}$  tworzą odpowiednie stożki wielościanowe  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$  i  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ , gdzie  $\mathfrak{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_J\} \subset \mathbb{R}_{++}^I$  oraz  $\mathfrak{Y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T\} \subset \mathbb{R}_+^I$ . Po wykonaniu skalowania według (3.23) i (3.24), otrzymujemy odpowiednie otoczki wypukłe  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  i  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$ , gdzie  $\bar{\mathfrak{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_J\} \subset \mathbb{R}_{++}^I$  oraz  $\bar{\mathfrak{Y}} = \{\bar{\mathbf{y}}_1, \dots, \bar{\mathbf{y}}_T\} \subset \mathbb{R}_+^I$ . Ponieważ macierz  $\mathbf{X}$  spełnia warunek (3.25), oba zbiory wypukłe  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{A}})$  i  $\mathcal{H}(\bar{\mathfrak{Y}})$  mają wspólne wierzchołki. Zgodnie z wnioskiem 3.3, zadanie nieujemnej faktoryzacji macierzy dla klasy zadań faktoryzowalnych

sprowadza się do znalezienia tych wierzchołków. Ponieważ  $\forall i, j : a_{ij} > 0$ , macierzy  $\mathbf{A}$  nie można sprowadzić do postaci (3.30), a więc według wniosku 3.4 faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  jest niejednoznaczna. Możliwy jest zatem przypadek:  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \subset \mathcal{C}(\tilde{\mathfrak{A}}) \subset \mathbb{R}_+^I$ , gdzie  $\mathcal{C}(\tilde{\mathfrak{A}})$  jest stożkiem simplicjalnym utworzonym przez kolumny macierzy  $\tilde{\mathbf{A}}$ , gdzie  $\tilde{\mathbf{A}} \neq \mathbf{A}$  oraz  $\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ .

Niech  $\mathbf{Y}^{(\mathcal{Z}_n)} = [y_{*, \mathcal{Z}_n}] \in \mathbb{R}_+^{I \times |\mathcal{Z}_n|}$ , gdzie  $\mathcal{Z}_n = \left\{ t : \sum_{j=1}^J p_{jt}^{(n)} = J \right\}$  oraz  $p_{jt}^{(n)}$  są elementami macierzy  $\mathbf{P}$  w algorytmie 13 (linia 4), zastosowanym do aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  w  $n$ -tym kroku iteracji naprzemiennych. Zbiór  $\mathcal{Z}_n$  zawiera więc indeksy tych kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ , które mają wszystkie elementy dodatnie. Aproksymację  $\mathbf{X}^{(1)}$  (dla  $n = 1$ ) w algorytmie 15 (linia 4) uzyskano za pomocą algorytmu FC-NNLS, gdzie  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  jest przybliżeniem początkowym (rozdz. 4.1). Jeśli  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(0)}) \cap \mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \neq \emptyset$ , gdzie  $\mathfrak{A}^{(0)} = \{\mathbf{a}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(0)}\}$ , po wyznaczeniu  $\mathbf{X}^{(1)}$  otrzymuje się  $\mathbf{Y}^{(\mathcal{Z}_1)} = \{\mathbf{y} : \mathbf{y} \in \mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \wedge \mathbf{y} \in \mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(0)})\}$ . Następnie wiersze macierzy  $\mathbf{X}^{(1)}$  skalowane są do jednostkowej normy  $l_1$  (linie 5 i 6 w algorytmie 15).

Jeśli początkowa wartość parametru regularyzacji  $\alpha^{(0)}$  jest wystarczająco duża, tzn. kiedy spełniony jest warunek:  $\alpha^{(0)} \gg \sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(1)})$ , gdzie  $\sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(1)})$  jest największą wartością osobliwą macierzy  $\mathbf{X}^{(1)}$ , to:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{Y}(\mathbf{X}^{(1)})^T (\mathbf{X}^{(1)}(\mathbf{X}^{(1)})^T + \alpha^{(0)} \mathbf{I}_J)^{-1} \cong \frac{1}{\alpha^{(0)}} \mathbf{Y}(\mathbf{X}^{(1)})^T. \quad (4.208)$$

Ponieważ  $\alpha^{(0)} > 0$ , a także  $\forall i, t : y_{it} \geq 0$  i  $\forall j, t : x_{jt}^{(1)} \geq 0$ , gdzie  $\mathbf{X}^{(1)} = [x_{jt}^{(1)}]$ , zatem z aproksymacji (4.208) otrzymuje się:  $\forall i, j : a_{ij}^{(1)} \geq 0$ . Wynika stąd, że  $F = \emptyset$  w algorytmie 13, a zatem algorytm ten zatrzymuje się po wykonaniu pierwszej iteracji aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ . W wyniku skalowania:  $\forall j : \sum_{t=1}^T x_{jt}^{(1)} = 1$  (linia 6 w algorytmie 15), kolumny macierzy  $\mathbf{A}^{(1)}$  są wypukłymi kombinacjami liniowymi wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{Y}$ . Po przeskalowaniu kolumn macierzy  $\mathbf{A}^{(1)}$  do jednostkowej normy  $l_1$  (linie 9 i 10 w algorytmie 15), otrzymujemy  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(1)}) \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ , gdzie  $\mathfrak{A}^{(1)} = \{\mathbf{a}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(1)}\}$ . Po wykonaniu pierwszej iteracji zewnętrznej w algorytmie 15, wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}^{(1)}$  znajdują się wewnątrz stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ .

Jeśli  $\alpha^{(n)} \gg \sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(n)})$  dla  $n > 1$ , kolejne iteracje naprzemienne nie zmieniają znacząco wektorów kolumnowych w macierzach  $\mathbf{A}^{(n)}$ . W konsekwencji należy oczekiwać stagnacji wektora residualnego w funkcji liczby iteracji zewnętrznych. Niech  $\mathfrak{A}^{(n)} = \{\mathbf{a}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(n)}\}$ . Ponieważ  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n)}) \subseteq \mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ , więc jeśli  $\mathbf{y}_t \in \mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n)})$ , to również  $\mathbf{y}_t \in \mathbf{Y}^{(\mathcal{Z}_{n+1})}$ , gdzie  $\mathcal{Z}_{n+1} = \left\{ t : \sum_{j=1}^J p_{jt}^{(n+1)} = J \right\}$ . Wszyst-

kie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{X}^{(Z_{n+1})}$ , gdzie  $\mathbf{X}^{(Z_{n+1})} = [x_{*,Z_{n+1}}] \in \mathbb{R}_+^{J \times |Z_{n+1}|}$ , mogą być więc wyznaczone w pierwszej iteracji algorytmu 13 (linia 7). Pozostałe kolumny macierzy  $\mathbf{X}$  zawierają zmienne niebazowe, które poddane są aktualizacji w wewnętrznej pętli iteracyjnej algorytmu 13. W wyniku tej aktualizacji, pewne zmienne niebazowe z tych kolumn stają się aktywne (mają zerowe wartości).

Gdy  $\alpha^{(n)} \approx \sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(n+1)})$ , największa wartość osobliwa macierzy  $\mathbf{X}^{(n+1)}$  ma znaczący udział w estymacji  $\mathbf{A}^{(n+1)}$ , a więc minimalizacja funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(n+1)})$  ze względu na  $\mathbf{A}$  zwiększa objętość stożka sympleksyjnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n+1)})$ . Wynika to z faktu, że algorytm 13 przerywa wewnętrzną pętlę iteracyjną (linie 11 do 20), jeśli tylko aktualizowane rozwiązanie spełnia warunki *KKT*. W rezultacie zbiór zmiennych aktywnych jest tak mały, jak to tylko możliwe, aby rozwiązanie było nieujemne. Taka strategia zastosowana do aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  maksymalizuje objętość stożka sympleksyjnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n+1)})$ , ponieważ wszystkie elementy znajdujące się ściśle wewnątrz tego stożka należą do zbioru pasywnego.

Według prac [123, 382, 501] liniowe zadanie najmniejszych kwadratów z regularyzacją Tichonowa można wyrazić przez zadanie poszukiwania rozwiązania według kryterium najmniejszych kwadratów w obszarze zaufania (ang. *trust-region*):

$$\min_{\mathbf{A}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2, \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{A}\|_F^2 \leq \Delta, \quad (4.209)$$

gdzie  $\Delta > 0$  – promień obszaru zaufania, który jest odwrotnie proporcjonalny do parametru regularyzacji.

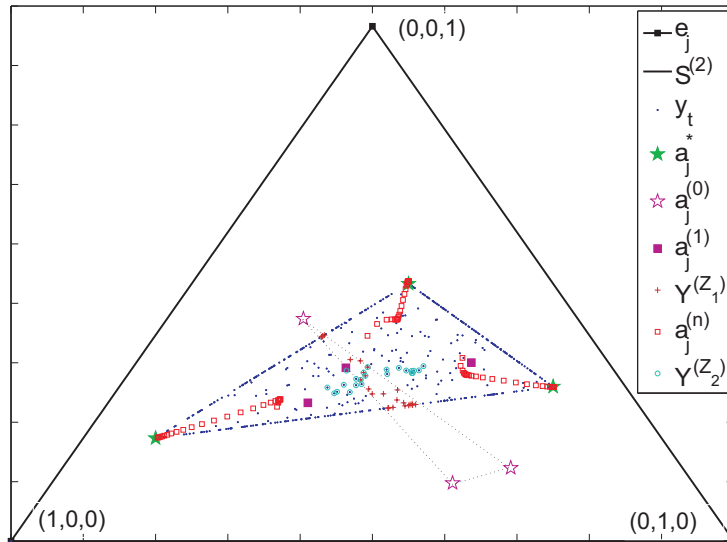
Zmniejszając parametr regularyzacji  $\alpha^{(n)}$ , zwiększa się  $\Delta$ , co prowadzi do zwiększania obszaru zaufania. W rezultacie coraz więcej zmiennych z  $\mathbf{A}$ , które były aktywne w poprzednich krokach iteracji naprzemiennych jest przesuwanych do zbioru zmiennych pasywnych. Zwiększa się więc objętość stożka sympleksyjnego  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n+1)})$  aż do momentu kiedy wszystkie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$  znajdują się w  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n+1)})$ . Moment ten oznacza, że promienie ekstremalne stożka  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^*)$  zgodne są z promieniami ekstremalnymi stożka  $\mathcal{C}(\mathfrak{A})$ , a więc w punkcie  $\{\mathbf{A}^*, \mathbf{X}^*\}$  spełnione są warunki optymalności *KKT*. Podobnie jak w metodach obszarów zaufania, gdzie promień  $\Delta$  jest adaptacyjnie dobierany, w rozważanym podejściu szybkość przyrostu objętości stożka  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(n+1)})$  jest kontrolowana przez parametr  $\alpha^{(n)}$ . Jeśli zmiana parametru  $\alpha^{(n)}$  odbywa się zbyt szybko, zwiększa się ryzyko zbieżności aktualizacji do takiego  $\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ , dla którego  $\mathbf{A}^* \neq \tilde{\mathbf{A}}$  i  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}) \subset \mathcal{C}(\tilde{\mathfrak{A}}) \subset \mathbb{R}_+^I$ . Eksperymenty numeryczne przeprowadzone w pracach [484, 485] pokazują, że zmiana parametru  $\alpha_A$  według reguły bisekcji (4.147) nie jest zbyt szybka.

Jeśli obserwowane dane są w jakiś sposób zaburzone lub zaszumione, wartość progowa parametru  $\bar{\alpha}$  w algorytmie 15 powinna być większa niż dla modelu dokładnej faktoryzacji. W tym przypadku zadanie doboru właściwej wartości tego parametru lub liczby iteracji naprzemiennych może być formułowane w kontekście standardowej regularyzacji zadań źle postawionych.

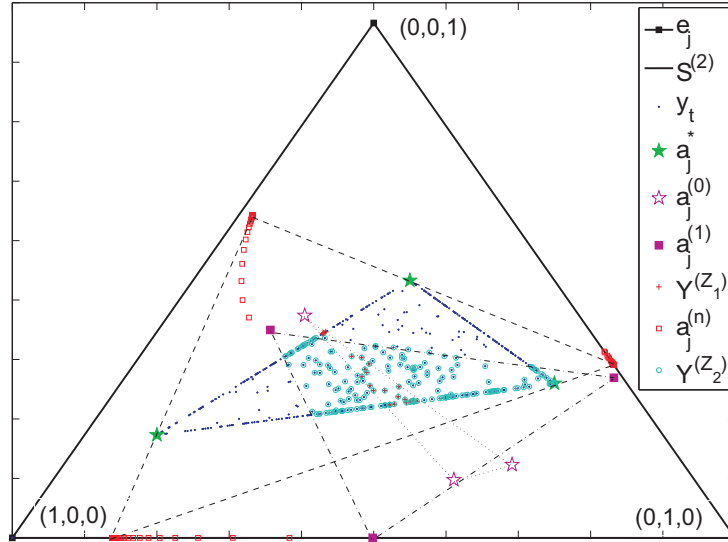
**Przykład 4.1.** Niech  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{3 \times 1000}$  będzie macierzą o losowych elementach, generowanych podobnie jak w przykładzie 3.2. Zgodnie z definicją 3.8, wygenerowana macierz jest wystarczająco rzadka. Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{++}^{3 \times 3}$  ma postać:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0,7 & 0,1 & 0,2 \\ 0,1 & 0,6 & 0,3 \\ 0,2 & 0,3 & 0,5 \end{bmatrix}, \quad (4.210)$$

gdzie  $\forall j : \sum_{i=1}^I a_{ij} = 1$ . Zakładając dokładny model faktoryzacji (1.1), wygenerowano macierz  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{3 \times 1000}$ . Następnie macierz tę poddano faktoryzacji algorytmem 15. Iteracyjny proces aktualizacji czynników zilustrowano na rysunkach 4.1–4.3, gdzie przedstawiono geometrię przekrojów analizowanych zbiorów



Rys. 4.1. Geometria aktualizacji na  $\mathcal{S}^{(2)}$  dla  $\lambda_0 = 100$  i dokładnego modelu faktoryzacji. Po 30 iteracjach naprzemiennych współczynnik *SIR* dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  wynosi 47,47 dB

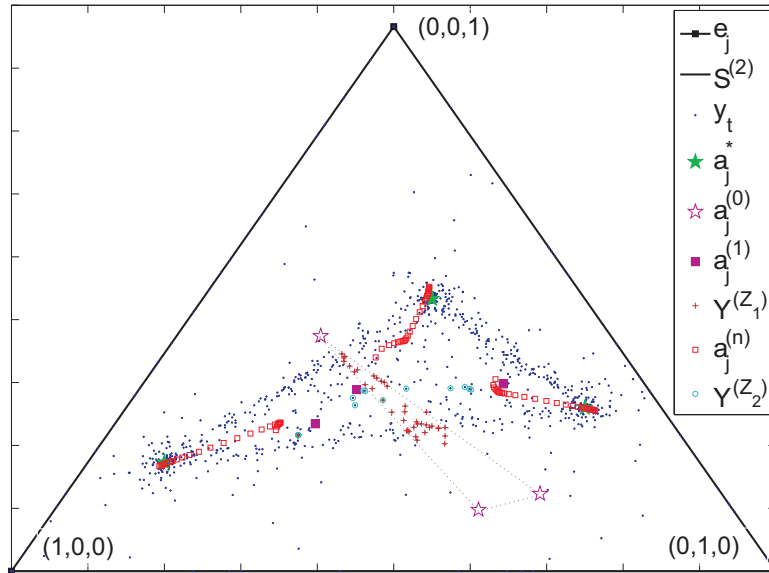


Rys. 4.2. Geometria aktualizacji na  $S^{(2)}$  dla  $\lambda_0 = 0$  i dokładnego modelu faktoryzacji. Po 30 iteracjach naprzemiennych współczynnik *SIR* dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  wynosi 11,31 dB

płaszczyznę tnącą, przechodzącą przez punkty  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$  i  $(0, 0, 1)$  kartezjańskiego układu współrzędnych w  $\mathbb{R}^3$ . Przekrój ten jest więc sympleksem probabilistycznym  $\mathcal{S}^{(2)}$ , który w  $\mathbb{R}^3$  jest trójkątem równobocznym. Punkty  $\mathbf{y}_t$  dla  $t = 1, \dots, T$  tworzą stożek wielościanowy  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ , którego przekrój względem wspomnianej płaszczyzny tnącej jest otoczką wypukłą  $\mathcal{H}(\mathfrak{Y}) \subset \mathcal{S}^{(2)}$ . Wektory kolumnowe  $\mathbf{a}_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) macierzy w (4.210) tworzą otoczkę wypukłą  $\mathcal{H}(\mathfrak{A}) \subset \mathcal{S}^{(2)}$ . Na rysunkach 4.1–4.3 położenia tych wektorów oznaczono symbolem  $\star$ . Ponieważ macierz  $\mathbf{X}$  jest wystarczająco rzadka, otoczki wypukłe  $\mathcal{H}(\mathfrak{A})$  i  $\mathcal{H}(\mathfrak{Y})$  mają wspólne wierzchołki. Wektory  $\mathbf{y}_t$ , wyznaczające brzeg obszaru  $\mathcal{H}(\mathfrak{Y})$ , otrzymane są z takich wektorów  $\mathbf{x}_t$ , które mają co najmniej jeden element o zerowej wartości.

Kolumny macierzy inicjalizacyjnej  $\mathbf{A}^{(0)}$  tworzą zbiór  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(0)})$ , taki że  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(0)}) \cap \mathcal{C}(\mathfrak{Y}) \neq \emptyset$ . Łatwo zauważyć, że po wyznaczeniu  $\mathbf{X}^{(1)}$  algorytmem 13, kolumny macierzy  $\mathbf{Y}^{(Z_1)}$  wyznaczają punkty zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{A}^{(0)}) \cap \mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ . Położenia kolumn macierzy  $\mathbf{A}^{(1)}$  oraz  $\mathbf{A}^{(n)}$  (dla  $n = 2, 3, \dots$ ) oznaczono odpowiednio symbolami  $\blacksquare$  oraz  $\square$ . Na rysunkach 4.1 i 4.3 pokazano geometrię odpowiednich zbiorów dla zregularyzowanych aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ . Jeśli  $\alpha^{(0)} = 100$ , spełniony jest warunek:  $\alpha^{(0)} > \sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(1)})$ , gdzie  $\sigma_{\max}(\mathbf{X}^{(1)}) \approx 41$ . Z rysunków tych wynika, że wektory kolumnowe aproksymacji  $\mathbf{A}^{(1)}$  znajdują się wewnątrz zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{Y})$ .





Rys. 4.3. Geometria aktualizacji na  $S^{(2)}$  dla  $\lambda_0 = 100$  i zaburzonego modelu faktoryzacji, gdzie  $SNR = 30$  dB. Po 30 iteracjach naprzemiennych współczynnik  $SIR$  dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  wynosi 32,21 dB.

Z kolei, na rysunku 4.2 zilustrowano aktualizacje bez regularyzacji, tzn. dla  $\alpha^{(0)} = 0$ . W tym przypadku wszystkie wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}^{(1)}$  znajdują się poza zbiorem  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q})$  i w dość dużej odległości od wektorów macierzy oryginalnej  $\mathbf{A}$ . W drugiej iteracji, kolumny macierzy  $\mathbf{Y}^{(Z_2)}$  należą do  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q}^{(1)})$ . Ponadto, większość wektorów  $\mathbf{y}_t$  należy do  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q}^{(1)})$ , co sugeruje szybki proces zbieżności, ale niestety do niewłaściwego minimum funkcji celu.

Na rysunku 4.3 pokazano zregularyzowane aktualizacje czynników estymowanych z zaburzonych wektorów obserwacji  $\tilde{\mathbf{y}}_t = \mathbf{y}_t + \mathbf{n}_t$ , gdzie  $\mathbf{n}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_N^2 \mathbf{I}_I)$ . Wariancja szumu  $\sigma_N^2$  dobrana jest w taki sposób, aby dla danych zaburzonych współczynnik  $SNR = 30$  dB. W wyniku zaburzeń modelu, promienie ekstremalne stożka wielościanowego  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q})$  nie pokrywają się z promieniami ekstremalnymi zbioru  $\mathcal{C}(\mathfrak{Q})$ . Pomimo to, aproksymacje  $\mathbf{A}^{(n)}$  dla  $n > 1$  są zbieżne do macierzy oryginalnej  $\mathbf{A}$ .

Estymowane macierze  $\mathbf{A}^{(n)}$  są również oceniane za pomocą współczynnika  $SIR$  (ang. *Signal-to-Interference Ratio*) [89]. Dla analizowanych przypadków, które przedstawiono na rysunku 4.1–4.3, uzyskano kolejno:  $SIR = 47, 47; 11, 31; 32, 21$  dB, po 30 krokach iteracji zewnętrznych.

## 4.10. Algorytmy quasi-Newtona

Metoda Newtona [23], wykorzystując przybliżenia gładkiej i nieliniowej funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  funkcją kwadratową  $\psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$ , generuje takie sekwencje iteracyjne  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$  według schematu aktualizacji w (4.167), które zbieżne są do punktu  $\mathbf{x}_t^*$  będącego rozwiązaniem układu równań  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^*) = \mathbf{0}$ . Niech będzie dane rozwinięcie funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  w szereg Taylora względem punktu  $\mathbf{x}_t^{(k)}$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)}) &= \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) + (\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}))^T \mathbf{p}_t^{(k)} + \frac{1}{2} (\mathbf{p}_t^{(k)})^T \mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}) \mathbf{p}_t^{(k)} \\ &+ O(\|\mathbf{p}_t^{(k)}\|_2^3), \end{aligned} \quad (4.211)$$

gdzie  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}) = \nabla_{\mathbf{x}_t}^2 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}^{J \times J}$  jest macierzą drugich pochodnych lub tzw. macierzą hesjanu. Zakładając przybliżenia szeregiem stopnia drugiego, z (4.211) oraz z warunku stacjonarności:  $\nabla_{\mathbf{p}_t^{(k)}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)}) = \mathbf{0}$ , otrzymujemy:  $\mathbf{0} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}) \mathbf{p}_t^{(k)}$ , z czego wynika kierunek poszukiwań Newtona:

$$\mathbf{p}_t^{(k)} = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_t^{(k)}) \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}). \quad (4.212)$$

Porównując (4.212) z (4.170), uzyskuje się:  $\mathbf{B}_t^{(k)} = \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_t^{(k)})$ . Macierz  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)})$  jest macierzą symetryczną. Jeśli macierz ta jest również dodatnio określona, to wektor  $\mathbf{p}_t^{(k)}$  w (4.212) jest newtonowskim kierunkiem poprawy.

**Twierdzenie 4.3.** *Jeśli  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  jest funkcją co najmniej dwukrotnie różniczkowalną, a w punkcie  $\mathbf{x}_t^*$ :  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^*) = \mathbf{0}$ , hesjan  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^*)$  jest dodatnio określony, ciągły w sensie Lipschitza w sąsiedztwie tego punktu i gdy punkt  $\mathbf{x}_t^{(0)}$  jest wystarczająco blisko względem punktu  $\mathbf{x}_t^*$ , wówczas sekwencje iteracyjne  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$  generowane metodą Newtona zbieżne są do punktu  $\mathbf{x}_t^*$  z kwadratowym współczynnikiem zbieżności.*

Dowód twierdzenia 4.3 podano w pracy [329].

Gdy  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  wyrażona jest przez funkcje odległości euklidesowej w (2.4), wówczas  $\nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) = 2\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{x}_t^{(k)} - \mathbf{y}_t)$  i  $\forall t : \mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}) = 2\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ . Jeśli  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)})$  jest macierzą dodatnio określoną, to z (4.167) i (4.212) wynika:  $\mathbf{x}_t^* = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{y}_t$ . Rozwiązanie w sensie najmniejszych kwadratów uzyskiwane jest już po wykonaniu pojedynczej iteracji. Wniosek ten jest oczywisty, ponieważ funkcja (2.4) jest kwadratowa, a macierz  $\mathbf{A}$  jest pełnego rzędu. Tak więc,

dla minimalizacji naprzemiennej funkcji odległości euklidesowej, metoda Newtona prowadzi do algorytmu ALS (rozdz. 4.5.1).

Metoda Newtona, pomimo tak dużej szybkości zbieżności, rzadko bywa stosowana bezpośrednio do rozwiązywania zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów. W wyniku naprzemiennej minimalizacji funkcji celu, macierz hesjanu zarówno dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ , jak i faktora  $\mathbf{A}$  może nie być dodatnio określona. Ponadto, jeśli przybliżenie początkowe  $\mathbf{x}_t^{(0)}$  jest dalekie od punktu  $\mathbf{x}_t^*$ , to macierz hesjanu w kolejnych iteracjach może być bardzo źle uwarunkowana, co również prowadzi do niestabilności procesu aktualizacji. W rezultacie, nawet dla funkcji odległości euklidesowej, naprzemienne iteracje Newtona mogą prowadzić do zwiększania funkcji celu i w konsekwencji do poważnych niestabilności numerycznych.

Aby minimalizować ryzyko wystąpienia problemów niestabilności numerycznej, konieczna jest modyfikacja metody Newtona, w której newtonowski charakter kierunku poprawy jest w określony sposób kontrolowany. W takim przypadku macierz  $\mathbf{B}_t^{(k)}$  aproksymuje w pewien sposób odwrotną macierz hesjanu. Takie metody nazwano w niniejszej pracy metodami quasi-Newtona<sup>4</sup>.

### 4.10.1. Regularyzacja hesjanu

Metody quasi-Newtona z regularyzacją hesjanu zostały po raz pierwszy zastosowane do zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy w pracy [495], a następnie w wersji usprawnionej w [497]. W najprostszym podejściu dodatnią określoność hesjanu można wymuszać przez wprowadzenie regularyzacji Tichonowa. W rezultacie kierunek poprawy tak otrzymanej metody quasi-Newtona ma postać:

$$\mathbf{p}_t^{(k)} = - \left( \mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}) + \alpha_X \mathbf{I}_J \right)^{-1} \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}), \quad (4.213)$$

gdzie  $\alpha_X \geq 0$  jest parametrem regularyzacji.

Łatwo zauważyć, że jeśli  $\alpha_X \gg \lambda_{\max}(\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)}))$ , gdzie  $\lambda_{\max}(\cdot)$  jest maksymalną wartością własną macierzy, to  $\mathbf{p}_t^{(k)} = -\alpha_X^{-1} \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$ . W takim przypadku kierunek poprawy jest określony przez iteracje Landwebera (rozdz. 4.7.1) z bardzo małą długością kroku poprawy:  $\eta_X = \alpha_X^{-1}$ . Z drugiej strony, jeśli  $\alpha_X = 0$ ,

<sup>4</sup> Do metod quasi-Newtona zaliczono zarówno metody o zregularyzowanym hesjanie, jak i metody, w których hesjan aproksymowany jest na podstawie historii gradientów. Należy jednak wspomnieć, że w wybranych źródłach literatury do metod quasi-Newtona zalicza się tylko metody tej drugiej grupy.

kierunek poprawy w (4.213) jest czysto newtonowski. Tak więc, parameter  $\alpha$  określa charakter aktualizacji. Na początku procesu aktualizacji faktorów powinien przyjmować raczej duże wartości, aby nie spowodować zaburzeń stabilności numerycznej procesu aktualizacji. Jeśli aktualizacje są blisko punktu optymalnego, to zmniejszenie tego parametru prowadzi do znacznego zwiększenia szybkości zbieżności – zgodnie z twierdzeniem 4.3. Zmiana tego parametru w funkcji iteracji zewnętrznych może odbywać się zgodnie z regułami (4.146) lub (4.147).

Jak już wspomniano, metoda Newtona umożliwia uzyskanie ogromnej szybkości zbieżności, jeśli funkcja celu spełnia określone założenia (twierdzenie 4.3) i proces aktualizacji faktorów jest odpowiednio kontrolowany. Metoda ta jest więc szczególnie przydatna, jeśli zadanie faktoryzacji wymaga poszukiwań głębokich minimów funkcji celu. Dotyczy to głównie zadań faktoryzowalnych i o niewielkiej mocy zaburzeń modelu.

Stosując metodę quasi-Newtona ze zregulowanym hesjanem, funkcja celu powinna, oprócz właściwości wspomnianych w twierdzeniu 4.3, być takiej postaci, aby jej macierz hesjanu można było łatwo wyznaczyć analitycznie. Dywergencje statystyczne  $\alpha$  i  $\beta$ , które omówiono w rozdziale 2, mają wspomniane właściwości. Metody quasi-Newtona stosowane do minimalizacji tych dywergencji w kontekście ślepej separacji nieujemnych źródeł szczegółowo omówiono w literaturze [89, 495, 497]. W dalszym ciągu krótko scharakteryzowano wybrane zagadnienia tej tematyki.

Dywergencja  $\alpha$  dla modelu NMF wyrażona jest zależnością (4.82). Niech  $\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}^J$  będzie gradientem tej funkcji względem  $\mathbf{x}_t$ , zatem:

$$\mathbf{g}_t^{(k)} = \begin{cases} \alpha^{-1} \mathbf{A}^T \left[ \mathbf{1} - (\mathbf{y}_t \circ \mathbf{q}_t^{(k)})^\alpha \right] & \text{dla } \alpha \neq 0, \\ \mathbf{A}^T \ln(\mathbf{q}_t^{(k)} \circ \mathbf{y}_t) & \text{dla } \alpha = 0, \end{cases} \quad (4.214)$$

gdzie  $\mathbf{q}_t^{(k)} = \mathbf{A} \mathbf{x}_t^{(k)}$  oraz symbol  $\circ$  oznacza dzielenie elementów wektora. Macierz hesjanu ma postać:

$$\mathbf{H}_t^{(k)} = \mathbf{A}^T \text{diag}(\mathbf{h}_t^{(k)}) \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{J \times J}, \quad (4.215)$$

gdzie:

$$\mathbf{h}_t^{(k)} = \frac{\mathbf{y}_t^\alpha}{\alpha (\mathbf{q}_t^{(k)})^{\alpha+1}} \in \mathbb{R}^J \text{ dla } \alpha \neq 0, \quad \mathbf{h}_t^{(k)} = \frac{1}{\mathbf{q}_t^{(k)}} \in \mathbb{R}^J \text{ dla } \alpha = 0. \quad (4.216)$$

Dywergencja  $\beta$  ma postać (4.88). Gradient tej funkcji względem  $\mathbf{x}_t$  można zapisać następująco:

$$\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) = \mathbf{A}^T \left[ \left( \mathbf{q}_t^{(k)} - \mathbf{y}_t \right) \otimes (\mathbf{q}_t^{(k)})^{\beta-1} \right] \in \mathbb{R}^J, \quad (4.217)$$

gdzie  $\otimes$  oznacza iloczyn Hadamarda. Macierz hesjanu ma również podobną strukturę jak w (4.215), gdzie

$$\mathbf{h}_t^{(k)} = (\beta \mathbf{q}_t^{(k)} - (\beta - 1) \mathbf{y}_t) \otimes (\mathbf{q}_t^{(k)})^{\beta-2} \in \mathbb{R}^J. \quad (4.218)$$

Ponieważ dla obu dywergencji macierz  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_t^{(k)})$  zależy zarówno od indeksu  $t$ , jak i kroku iteracyjnego  $k$ , koszt obliczeniowy tej metody w podejściu aktualizacji sekwencyjnej jest znaczący, zwłaszcza jeśli macierz  $\mathbf{Y}$  ma wiele kolumn (dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ ). W literaturze [89, 495, 497] metodę tę zastosowano do jednoczesnej aktualizacji wszystkich kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ . Przyjęto więc następującą regułę aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ :

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \text{mtx} \left( \left[ \text{vec}(\mathbf{X}^{(k)}) + \mathbf{p}^{(k)} \right]_+, J, T \right), \quad (4.219)$$

gdzie  $\text{mtx}(\mathbf{x}, J, T) \in \mathbb{R}^{J \times T}$  tworzy macierz z wektora  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{JT}$ ,  $\text{vec}(\cdot)$  zaś jest funkcją wektoryzacji. Wektor kierunku poprawy  $\mathbf{p}^{(k)}$  wyznaczono z układu równań:

$$(\mathbf{H}^{(k)} + \alpha_X \mathbf{I}_{JT}) \mathbf{p}^{(k)} = -\text{vec}(\mathbf{G}^{(k)}), \quad (4.220)$$

gdzie  $\mathbf{H}^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}}^2 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) = \text{diag} \left( [\mathbf{H}_t^{(k)}]_{t=1, \dots, T} \right) \in \mathbb{R}^{JT \times JT}$  oraz  $\mathbf{G}^{(k)} = [\mathbf{g}_1^{(k)}, \dots, \mathbf{g}_T^{(k)}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ . W takim podejściu macierz hesjanu  $\mathbf{H}^{(k)}$ , pomimo dużych rozmiarów, jest rzadka i o blokowo-diagonalnej strukturze. Do rozwiązania układu równań o takich właściwościach skuteczna wydaje się zredukowana faktoryzacja QR (ang. *Q-less QR*) dla macierzy rzadkich [495, 497]. W rezultacie, układ równań w (4.220) sprowadza się do postaci:

$$\mathbf{R}^{(k)} \mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{w}^{(k)}, \quad (4.221)$$

gdzie  $(\mathbf{H}^{(k)} + \alpha_X \mathbf{I}_{JT}) = \mathbf{Q}^{(k)} \mathbf{R}^{(k)}$ . Tego rodzaju faktoryzacja QR, zwykle realizowana przez obroty Givensa, zwraca bezpośrednio wektor  $\mathbf{w}^{(k)} = (\mathbf{Q}^{(k)})^T \text{vec}(\mathbf{G}^{(k)})$ , zamiast macierzy  $\mathbf{Q}^{(k)}$ , co znacznie zmniejsza zapotrzebowanie na zasoby pamięci. Układ równań w (4.221) może być łatwo rozwiązany przez podstawienie wsteczne, ponieważ  $\mathbf{R}^{(k)}$  jest górną macierzą trójkątną.

Układ równań (4.220) można też rozwiązać metodą gradientów sprzężonych, ponieważ macierz  $\mathbf{H}^{(k)} + \alpha_X \mathbf{I}_{JT}$  jest symetryczna i dodatnio określona. Jeśli dodatkowo zastosuje się odpowiednio dobrane uwarunkowanie wstępne, przyspieszenie procesu zbieżności może być znaczące. Takie podejście zastosowano w pracy [180] do usprawnienia obliczeń algorytmem FOCUSS.

W metodach regularyzacji hesjanu, przedstawionych w literaturze [89, 495, 497], wymuszanie nieujemności odbywa się przez zastosowanie rzutowania według reguły (4.137). Takie podejście nie gwarantuje zbieżności do punktu optymalnego według warunków *KKT*. Dlatego też metodę tę należy stosować łącznie z kryterium zatrzymania, podanym w (4.42). Usprawnione wersje metody quasi-Newtona, które gwarantują zbieżność do punktów stacjonarnych według warunków *KKT*, można odnaleźć w pracach [220, 221] w kontekście zastosowań do modelu NMF.

#### 4.10.2. Algorytm obszaru zaufania

Algorytm obszaru zaufania (ang. *trust region*) zastosowano do metody NMF w pracy [492], w kontekście ślepej separacji sygnałów nieujemnych. Algorytm ten minimalizuje funkcję celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  przez iteracyjne poszukiwanie takich kierunków poprawy  $\{\mathbf{p}_t^{(k)}\}$ , które prowadzą do minimalizacji funkcji kwadratowych  $\{\psi_k(\mathbf{A}, (\mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)}))\}$ , aproksymujących funkcję celu w zadanych obszarach zaufania, otaczających punkty aktualizacji  $\{\mathbf{x}_t^{(k)}\}$ . Zakłada się, że w  $k$ -tym kroku iteracyjnym obszar ten wyznaczany jest przez kulę  $\mathcal{B}$  o środku w punkcie  $\mathbf{x}_t^{(k)}$  i promieniu  $\Delta_t^{(k)}$ , adaptacyjnie dobieranym w procesie aktualizacji. Wynika z tego, że w  $k$ -tym kroku iteracyjnym, funkcja celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  aproksymowana jest następującym modelem kwadratowym:

$$\psi_k(\mathbf{A}, \mathbf{d}_t^{(k)}) = \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) + (\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{d}_t^{(k)} + \frac{1}{2} (\mathbf{d}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{d}_t^{(k)}, \quad (4.222)$$

gdzie  $\mathbf{d}_t^{(k)} = \mathbf{x}_t - \mathbf{x}_t^{(k)}$  jest kierunkiem poszukiwań, który spełnia warunek  $\|\mathbf{d}_t^{(k)}\|_2 \leq \Delta_t^{(k)}$ ,  $\mathbf{g}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}^J$  oraz  $\mathbf{H}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t}^2 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \in \mathbb{R}^{J \times J}$  są odpowiednio gradientem i hesjanem funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  w punkcie  $\mathbf{x}_t^{(k)}$ . Kula  $\mathcal{B} = \{\mathbf{x} : \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_t^{(k)}\|_2 \leq \Delta_t^{(k)}\}$  nazywana jest obszarem zaufania. Promień  $\Delta_t^{(k)}$  wyznacza wielkość obszaru zaufania, otaczającego punkt  $\mathbf{x}_t^{(k)}$ , w którym model kwadratowy (4.222) powinien wiernie aproksymować funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$ .

Kierunek poprawy  $\mathbf{p}_t^{(k)}$ , nazywany również kierunkiem próbnym, wyznacza się z następującego zadania minimalizacji funkcji  $\psi_k(\mathbf{A}, \mathbf{d}_t^{(k)})$ :

$$\mathbf{p}_t^{(k)} = \arg \min_{\mathbf{d}_t^{(k)}} \psi_k(\mathbf{A}, \mathbf{d}_t^{(k)}) \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{d}_t^{(k)}\|_2 \leq \Delta_t^{(k)}. \quad (4.223)$$

Następnie kierunek ten podlega ocenie na podstawie dopasowania modelu (4.222) do funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  w punkcie  $\mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)}$ . Jakość dopasowania mierzona jest współczynnikiem zysku  $\rho_t^{(k)}$ . Wyraża on stosunek rzeczywistej zmiany wartości funkcji celu do prognozowanej zmiany według modelu kwadratowego, zatem:

$$\rho_t^{(k)} = \frac{\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) - \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)})}{\psi_k(\mathbf{A}, \mathbf{0}) - \psi_k(\mathbf{A}, \mathbf{p}_t^{(k)})}. \quad (4.224)$$

Jeśli  $\rho_t^{(k)} < 0$ , to kierunek  $\mathbf{p}_t^{(k)}$  powoduje wzrost wartości funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)} + \mathbf{p}_t^{(k)})$  i dlatego musi zostać odrzucony, a promień  $\Delta_t^{(k)}$  zmniejszony. Gdy  $\rho_t^{(k)} = 1$ , dopasowanie jest doskonałe, a zatem obszar zaufania powinien być powiększony, aby przyspieszyć proces zbieżności. Rozszerzenie obszaru zaufania realizowane jest według zasady:  $\Delta_t^{(k+1)} = \min(2\Delta_t^{(k)}, \bar{\Delta})$ , gdzie  $\bar{\Delta}$  jest maksymalnym dopuszczalnym promieniem obszaru. Jeśli  $\rho_t^{(k)} \in [0, 25; 0, 75]$ , to w następnym kroku iteracyjnym promień  $\Delta_t^{(k)}$  pozostaje bez zmian.

Zadanie minimalizacji funkcji (4.223) może być rozwiązane za pomocą wielu metod, np. wyznaczenia punktu Cauchy'ego, metody *dogleg*, dwuwymiarowej minimalizacji w podprzestrzeni lub algorytmu CG-Steihauga [329]. W pracy [492] wybrano metodę punktu Cauchy'ego ze względu na symetryczną i blokowo-diagonalną strukturę macierzy hesjanu dla dywergencji  $\alpha$  i  $\beta$ . Metoda ta wyznacza kierunek poprawy, wykorzystując skalowany kierunek gradientowy o najszybszym spadku wartości funkcji celu. Prowadzi to do zależności:  $\mathbf{p}_t^{(k)} = \tau_t^{(k)} \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}$ , gdzie wektor  $\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}$  jest wyznaczany z następującego zadania:

$$\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)} = \arg \min_{\mathbf{d}_t^{(k)}} \left\{ \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) + (\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{d}_t^{(k)} \right\} \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{d}_t^{(k)}\|_2 \leq \Delta_t^{(k)}, \quad (4.225)$$

które wynika z liniowej aproksymacji zadania (4.223). Łatwo zauważyć, że rozwiązanie zadania (4.225) może być przedstawione w postaci analitycznej:

$$\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)} = -\frac{\Delta_t^{(k)}}{\|\mathbf{g}_t^{(k)}\|_2} \mathbf{g}_t^{(k)}. \quad (4.226)$$

Wynika stąd, że metoda punktu Cauchy'ego charakteryzuje się liniowym współczynnikiem zbieżności. Jeśli jest spełniony warunek:

$$(\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)})^T \mathbf{g}_t^{(k)} = -\xi(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{g}_t^{(k)} < 0,$$

gdzie  $\xi = \frac{\Delta_t^{(k)}}{\|\mathbf{g}_t^{(k)}\|_2} > 0$ ,  $\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}$  jest kierunkiem poprawy.

Skalar  $\tau_t^{(k)} > 0$  określa długość kroku wzdłuż kierunku  $\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}$ , zatem:

$$\tau_t^{(k)} = \arg \min_{\tau > 0} \psi_k(\mathbf{A}, \tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}) \quad \text{p.o.} \quad \|\tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}\|_2 \leq \Delta_t^{(k)}. \quad (4.227)$$

Dla zadania (4.227) model (4.222) jest postaci:

$$\psi_k(\mathbf{A}, \tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}) = \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) + \tau(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)} + \frac{\tau^2}{2} (\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}. \quad (4.228)$$

Jeśli  $(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)} \leq 0$ , funkcja  $\psi_k(\mathbf{A}, \tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)})$  jest monotonicznie malejąca względem zmiennej  $\tau$  dla  $\mathbf{g}_t^{(k)} \neq \mathbf{0}$ . W tym przypadku długość kroku dobiera się w taki sposób, aby punkt  $\mathbf{x}_t^{(k+1)}$  znajdował się na granicy obszaru zaufania, czyli  $\tau_t^{(k)} = 1$ . W przeciwnym razie, gdy  $(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)} > 0$ , funkcja  $\psi_k(\mathbf{A}, \tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)})$  jest kwadratowa i skalar  $\tau_t^{(k)}$  dobierany jest według reguły najszybszego spadku, spełniając warunek:  $\frac{\partial}{\partial \tau} \psi_k(\mathbf{A}, \tau \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}) \triangleq 0$ , zatem:

$$\hat{\tau}_t^{(k)} = -\frac{(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}}{(\hat{\mathbf{p}}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \hat{\mathbf{p}}_t^{(k)}} = \frac{\|\mathbf{g}_t^{(k)}\|_2^3}{\Delta_t^{(k)} (\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)}}. \quad (4.229)$$

Jeśli jednak krok ten powoduje, że punkt  $\mathbf{x}_t^{(k+1)}$  wychodzi poza obszar zaufania, to przyjmuje się:  $\tau_t^{(k)} = 1$ . Ogólnie, długość kroku  $\tau_t^{(k)}$  można zapisać następująco:

$$\tau_t^{(k)} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } (\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)} \leq 0, \\ \min(1, \hat{\tau}_t^{(k)}), & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases} \quad (4.230)$$

Uwzględniając symetryczną i blokowo-diagonalną strukturę macierzy hesjanu  $\mathbf{H}^{(k)}$ , wyrażenie  $(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)}$  w (4.229) i (4.230) można zapisać następująco:

$$(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)} = (\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{A}^T \text{diag}(\mathbf{h}_t^{(k)}) \mathbf{A} \mathbf{g}_t^{(k)} = \mathbf{1}_J^T (\mathbf{h}_t^{(k)} \odot (\mathbf{A} \mathbf{g}_t^{(k)})^2),$$



$$= \left[ \mathbf{1}_J^T \left( \check{\mathbf{H}}^{(k)} \odot (\mathbf{A}\mathbf{G}^{(k)})^2 \right) \right]_t, \quad (4.231)$$

gdzie  $\check{\mathbf{H}}^{(k)} = [\mathbf{h}_1^{(k)}, \dots, \mathbf{h}_T^{(k)}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ ,  $\mathbf{G}^{(k)} = [\mathbf{g}_1^{(k)}, \dots, \mathbf{g}_T^{(k)}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$  oraz  $\mathbf{1}_J = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^J$ . Operacja potęgowania wykonywana jest oddzielnie dla każdego elementu macierzy.

Korzystając z zależności (4.231), długość kroku w (4.229) można wyrazić następująco:

$$\hat{\tau}_t^{(k)} = \frac{\left[ \mathbf{1}_J^T (\mathbf{G}^{(k)})^3 \right]_t}{\Delta_t^{(k)} \left[ \mathbf{1}_J^T \left( \check{\mathbf{H}}^{(k)} \odot (\mathbf{A}\mathbf{G}^{(k)})^2 \right) \right]_t}. \quad (4.232)$$

Wyrażenie (4.226) może być więc uproszczone do postaci:

$$\hat{\mathbf{X}}^{(k)} = -\mathbf{1}_J \left( \frac{\Delta^{(k)}}{\mathbf{1}_J^T (\mathbf{G}^{(k)})^2} \right) \odot \mathbf{G}^{(k)}, \quad (4.233)$$

dla  $\Delta^{(k)} = [\Delta_1^{(k)}, \dots, \Delta_T^{(k)}] \in \mathbb{R}^{1 \times T}$ , a punkt Cauchy'ego można wyrazić zależnością:

$$\tilde{\mathbf{X}}^{(k)} = \mathbf{1}_J \underline{\boldsymbol{\tau}}^{(k)} \odot \hat{\mathbf{X}}^{(k)}, \quad (4.234)$$

gdzie  $\underline{\boldsymbol{\tau}}^{(k)} = [\tau_1^{(k)}, \dots, \tau_T^{(k)}] \in \mathbb{R}^{1 \times T}$  wynika z zależności (4.230) i (4.232).

Stosując uproszczenia przedstawione w (4.231), obliczanie punktu Cauchy'ego wymaga znacznie mniejszego kosztu obliczeniowego niż w przypadku wykorzystania pełnej macierzy hesjanu  $\mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{X}}^2 D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{JT \times JT}$ . Ponadto wyrażenia  $(\mathbf{g}_t^{(k)})^T \mathbf{H}_t^{(k)} \mathbf{g}_t^{(k)}$  mogą być obliczane bez konieczności stosowania obliczeń sekwencyjnych względem indeksu  $t$ .

Finałny algorytm obszaru zaufania dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$  zapisano za pomocą algorytmu 16 (iteracje TR).

Rozwiązując zadania (4.1) i (4.2) algorytmem TR oraz bazując na algorytmie 2, otrzymuje się algorytm TR-NMF (algorytm 17). W każdym kroku iteracji naprzemiennych, aktualizacja zarówno faktora  $\mathbf{A}$ , jak i  $\mathbf{X}$  wymaga wykonania kilku kroków iteracji wewnętrznych (liczba  $k_{TR}$  w algorytmie 16). Aby wykonać iteracje wewnętrzne, należy określić początkowe promienie obszarów zaufania  $\Delta_A^{(0)}$  i  $\Delta_X^{(0)}$ . W algorytmie 17 promienie te zmieniają się podczas iteracji zewnętrznych, tzn. ostatnia aktualizacja w  $n$ -tym kroku iteracyjnym algorytmu 17 jest przybliżeniem początkowym dla kroku  $(n + 1)$ . Zaczynając proces iteracji zewnętrznych

**Algorytm 16. Iteracje TR**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – przybliżenie początkowe,  
 $k_{TR}$  – liczba iteracji,  $\Delta^{(0)} \in \mathbb{R}^T$  – początkowy promień obszaru  
zaufania,  
**Wyjście:**  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – estymowany faktor

- 1 **for**  $k = 0, 1, \dots, k_{TR}$  **do**
- 2     Wyznacz punkty Cauchy'ego  $\tilde{\mathbf{X}}^{(k)} = [\tilde{\mathbf{x}}_1^{(k)}, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_T^{(k)}]$  za pomocą (4.234);
- 3     Wyznacz współczynniki zysku  $\rho_t^{(k)}$  według (4.224);
- 4 **if**  $\rho_t^{(k)} > \frac{3}{4}$  oraz  $\|\tilde{\mathbf{x}}_t^{(k)}\|_2 = \Delta_t^{(k)}$  **then**
- 5      $\Delta_t^{(k+1)} = \min(2\Delta_t^{(k)}, \bar{\Delta})$ ;                     // Rozszerzenie obszaru zaufania
- 6      $\mathbf{X}^{(k+1)} = [\mathbf{X}^{(k)} + \tilde{\mathbf{X}}^{(k)}]_+$ ;
- 7 **else if**  $\frac{3}{4} \geq \rho_t^{(k)} \geq \frac{1}{4}$  **then**
- 8      $\Delta_t^{(k+1)} = \Delta_t^{(k)}$ ;
- 9      $\mathbf{X}^{(k+1)} = [\mathbf{X}^{(k)} + \tilde{\mathbf{X}}^{(k)}]_+$ ;
- 10 **else**
- 11      $\Delta_t^{(k+1)} = \frac{1}{4} \|\tilde{\mathbf{x}}_t^{(k)}\|_2$ ;                     // Redukcja obszaru zaufania
- 12      $\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)}$ ;

---

od bardzo małych wartości  $\Delta_A^{(0)} \geq 0$  i  $\Delta_X^{(0)} \geq 0$ , początkowe długości kierunków poprawy są bardzo krótkie (kula  $\mathcal{B}$  o bardzo małym promieniu). Następnie, promień obszaru zaufania zwiększa się, gdy zmniejsza się wartość funkcji celu. Jest to analogiczna sytuacja do aktualizacji quasi-newtonowskich, w których początkowa wartość parametru regularyzacji hesjanu osiąga bardzo duże wartości, prowadząc do aktualizacji gradientowej o bardzo małej długości kroku. Jednak w tym przypadku długość kroku zmieniana jest adaptacyjnie, w zależności od funkcji celu i faktoryzowanych danych.

Aktualizacje w algorytmie 16 mogą być przerywane za pomocą dowolnego kryterium stopu (rozd. 4.3). Najczęściej jednak parametr  $k_{TR}$  ma stałą wartość, np.  $k_{TR} = 5$ .

**4.10.3. Tłumione iteracje Newtona**

Algorytm tłumionych iteracji Newtona (ang. *Damped Newton Iterations*) został zaproponowany w pracy [511] i jest przeznaczony do separacji sygnałów nie-

---

**Algorytm 17. TR-NMF**

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $\Delta$  – początkowy promień obszaru zaufania,  $\bar{\Delta}$  – maksymalny promień obszaru zaufania  
**Wyjście:** Estymowane faktory:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$

1 **Inicjalizacja:**  $\mathbf{A}^{(0)}$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)}$ ,  $n = 0$ ,  $\Delta_X^{(0)} = \Delta \mathbf{1}_T^T$ ,  $\Delta_A^{(0)} = \Delta \mathbf{1}_I^T$ ;  
2 **repeat**  
3      $[\mathbf{X}^{(n+1)}, \Delta_X^{(n+1)}] = \text{AlgorytmTR}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)}, \Delta_X^{(n)}, \bar{\Delta})$ ;  
4      $\bar{d}_j^{(n+1)} = \sum_{t=1}^T x_{jt}^{(n+1)}$ ,  
5      $\mathbf{X}^{(n+1)} \leftarrow \text{diag} \left\{ \left( \bar{d}_j^{(n+1)} \right)^{-1} \right\} \mathbf{X}^{(n+1)}$ ,  $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} \text{diag} \left\{ \bar{d}_j^{(n+1)} \right\}$ ;  
6      $[\bar{\mathbf{A}}^{(n+1)}, \Delta_A^{(n+1)}] = \text{AlgorytmTR}(\mathbf{Y}^T, (\mathbf{X}^{(n+1)})^T, (\mathbf{A}^{(n)})^T, \Delta_A^{(n)}, \bar{\Delta})$ ;  
7      $\mathbf{A}^{(n+1)} = (\bar{\mathbf{A}}^{(n+1)})^T$ ,  $\bar{d}_j^{(n+1)} = \sum_{i=1}^I a_{ij}^{(n+1)}$ ;  
8      $\mathbf{X}^{(n+1)} \leftarrow \text{diag} \left\{ \bar{d}_j^{(n+1)} \right\} \mathbf{X}^{(n+1)}$ ,  $\mathbf{A}^{(n+1)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n+1)} \text{diag} \left\{ \left( \bar{d}_j^{(n+1)} \right)^{-1} \right\}$ ;  
9      $n \leftarrow n + 1$ ;  
9 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

ujemnych, jeśli  $T \gg I$  oraz gdy liczba  $I$  nie jest dużo większa od rzędu faktoryzacji  $J$  (nadmiarowość zadania faktoryzacji nie jest zbyt duża). Algorytm ten minimalizuje zregularyzowaną funkcję odległości euklidesowej. Zadanie estymacji faktora  $\mathbf{A}$  zrealizowano za pomocą zmodyfikowanego zadania programowania kwadratowego. Dla estymacji faktora  $\mathbf{X}$  zastosowano zmodyfikowaną wersję metody Newtona. Parameter regularyzacji dobierany jest adaptacyjnie na podstawie informacji o zachowaniu funkcji celu.

Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}\mathbf{X}) + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2$ , gdzie  $\alpha_A \geq 0$  oraz  $D(\mathbf{Y} \| \mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej (2.4). Po przekształceniach uzyskuje się:

$$\begin{aligned}
 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2 \\
 &= \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T) - \text{tr}(\mathbf{Y}\mathbf{X}^T\mathbf{A}^T) + \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{A}^T\mathbf{X}\mathbf{X}^T\mathbf{A}) + \frac{\alpha_A}{2} \|\mathbf{A}\|_F^2 \\
 &= \frac{1}{2} (\text{vec}(\mathbf{A}^T))^T (\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{X}\mathbf{X}^T + \alpha_A \mathbf{I}_{IJ}) \text{vec}(\mathbf{A}^T) \\
 &\quad - (\text{vec}(\mathbf{X}\mathbf{Y}^T))^T \text{vec}(\mathbf{A}^T) + \text{const.}
 \end{aligned} \tag{4.235}$$

Funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  można też przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) - \operatorname{tr}((\mathbf{A}^T \mathbf{Y})^T \mathbf{X}) + \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}) + \frac{\alpha_A}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{vec}(\mathbf{X})^T (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A}) \operatorname{vec}(\mathbf{X}) - (\operatorname{vec}(\mathbf{A}^T \mathbf{Y}))^T \operatorname{vec}(\mathbf{X}) \\ &\quad + \operatorname{const.}\end{aligned}\tag{4.236}$$

Niech  $\mathbf{Q}_A = \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{X} \mathbf{X}^T + \alpha_A \mathbf{I}_{IJ} \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ}$ ,  $\mathbf{Q}_X = \mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{JT \times JT}$ ,  $\mathbf{c}_A = -\operatorname{vec}(\mathbf{X} \mathbf{Y}^T) \in \mathbb{R}^{IJ}$ ,  $\mathbf{c}_X = -\operatorname{vec}(\mathbf{A}^T \mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{JT}$ ,  $\bar{\mathbf{a}} = \operatorname{vec}(\mathbf{A}^T) \in \mathbb{R}^{IJ}$  oraz  $\bar{\mathbf{x}} = \operatorname{vec}(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{JT}$ . Zadanie wyznaczenia faktorów  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  można więc sprowadzić do zadań programowania kwadratowego z ograniczeniami nieujemności:

$$\min_{\bar{\mathbf{a}}} \frac{1}{2} \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{Q}_A \bar{\mathbf{a}} + \mathbf{c}_A^T \bar{\mathbf{a}}, \quad \text{p.o.} \quad \bar{\mathbf{a}} \geq \mathbf{0},\tag{4.237}$$

$$\min_{\bar{\mathbf{x}}} \frac{1}{2} \bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{Q}_X \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{c}_X^T \bar{\mathbf{x}}, \quad \text{p.o.} \quad \bar{\mathbf{x}} \geq \mathbf{0}.\tag{4.238}$$

Ponieważ funkcja celu  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jest kwadratowa, więc macierze  $\mathbf{Q}_A$  i  $\mathbf{Q}_X$  są również macierzami hesjanu tej funkcji, odpowiednio w punktach  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ .

Do rozwiązania zadań (4.237) i (4.238) można zastosować różne metody, np. takie jak metodę zbiorów aktywnych (rozd. 4.9) lub metodę punktów wewnętrznych (rozd. 4.8) [329]. Ponieważ macierze  $\mathbf{Q}_A$  i  $\mathbf{Q}_X$  mają ogólnie duże rozmiary, w pracy [511] przyjęto pewne uproszczenia:

Jeśli  $\forall i, j : a_{ij} > 0$ , z warunku stacjonarności:  $\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{Q}_A \bar{\mathbf{a}} + \mathbf{c}_A = \mathbf{0}$  wynika:  $\bar{\mathbf{a}} = -\mathbf{Q}_A^{-1} \mathbf{c}_A$ . Uwzględniając jednak możliwą rzadkość macierzy  $\mathbf{A}$ , rozwiązanie zadania (4.237) powinno spełniać warunki *KKT*. Niech  $\bar{\mathbf{a}} = [\bar{a}_s]$  dla  $s = 1, \dots, IJ$  oraz  $\mathcal{P} = \{s : \bar{a}_s > 0\}$  jest zbiorem elementów pasywnych. Wektor  $\bar{\mathbf{a}}^{(R)} = [\bar{a}_{\mathcal{P}}] \in \mathbb{R}_+^{|\mathcal{P}|}$  zawiera tylko dodatnie elementy z wektora  $\bar{\mathbf{a}}$ . Po założeniu, że znany jest profil rzadkości wektora  $\bar{\mathbf{a}}$ , czyli zbiór  $\mathcal{P}$ , wektor  $\bar{\mathbf{a}}^{(R)}$  można wyznaczyć za pomocą zredukowanego układu równań:

$$\mathbf{Q}_A^{(R)} \bar{\mathbf{a}}^{(R)} = -\mathbf{c}_A^{(R)}, \quad \text{p.o.} \quad \bar{\mathbf{a}}^{(R)} > \mathbf{0},\tag{4.239}$$

gdzie  $\mathbf{Q}_A^{(R)} = \mathbf{D}_A \mathbf{Q}_A \mathbf{D}_A - \mathbf{D}_A + \mathbf{I}_{IJ}$  oraz  $\mathbf{c}_A^{(R)} = \mathbf{D}_A \mathbf{c}_A$ .

Macierz skalująca  $\mathbf{D}_A$  ma postać:

$$\mathbf{D}_A = \operatorname{diag}(\operatorname{vec}(\mathbf{Z}_A^T)),\tag{4.240}$$

gdzie  $\mathbf{Z}_A$  – macierz binarna, zawierająca informacje o rozkładzie elementów pasywnych w macierzy  $\mathbf{A}$ .

Zdefiniowano ją w następujący sposób:

$$\mathbf{Z}_A = [z_{ij}^{(A)}], \quad z_{ij}^{(A)} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } a_{ij} > \epsilon_A, \\ 0, & \text{jeżeli } |a_{ij}| \leq \epsilon_A \text{ oraz } \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) > \epsilon_G. \end{cases} \quad (4.241)$$

Jeśli  $\epsilon_A = \epsilon_G = 0$ , to macierz  $\mathbf{Z}_A$  dotyczy rozwiązania spełniającego warunki optymalności *KKT*. Jeżeli  $\exists i, j : a_{ij} = 0$  i  $\frac{\partial}{\partial a_{ij}} D(\mathbf{Y} || \mathbf{A}\mathbf{X}) = 0$ , to rozwiązanie jest zdegenerowane i ten przypadek wymaga odpowiedniej regularyzacji [329].

Zbiór elementów pasywnych  $\mathcal{P}$  nie jest jednak znany „z góry” i powinien być estymowany podczas procesu aktualizacji faktorów. W algorytmie GPCG [89, 497] do estymacji tego zbioru zastosowano metodę rzutowania gradientu. Takie podejście jest bardzo skuteczne, ale wymaga znacznego kosztu obliczeniowego. W pracy [511] przyjęto podejście uproszczone. Założono bowiem, że na początku procesu aktualizacji wszystkie elementy przybliżenia początkowego są dodatnie. Następnie, jeśli macierz  $\mathbf{A}^*$  zawiera elementy o zerowej wartości, to w procesie iteracyjnych aktualizacji i po założeniu  $\epsilon_A > 0$  i  $\epsilon_G > 0$  ze zbioru  $\mathcal{P}$  stopniowo usuwane są indeksy elementów aktywnych (o zerowej wartości). Jeśli w  $k$ -tym kroku iteracyjnym,  $\exists i, j : |a_{ij}^{(k)}| \leq \epsilon_A$  oraz  $\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{X}) > \epsilon_G$ , to  $z_{ij}^{(A)} = 0$  i element  $a_{ij}^{(k)}$  nie podlega dalszej aktualizacji według (4.239). Ponadto, usunięcie takiego elementu pozostaje bez wpływu na efekt aktualizacji pozostałych elementów macierzy  $\mathbf{A}$ , natomiast jest istotne ze względu na szybkość zbieżności. Jeśli liczba elementów zerowych w macierzy  $\mathbf{A}^*$  jest znacząca, przyspieszenie obliczeń jest pokaźne, ponieważ macierz  $\mathbf{Q}_A^{(R)}$  w (4.239) staje się macierzą rzadszą. Parametry  $\epsilon_A$  i  $\epsilon_G$  zwykle ustawiane są na stałe wartości progowe, np.  $\epsilon_A = 10^{-4}$  i  $\epsilon_G = 10^{-8}$ , ale mogą też być zmniejszane z iteracjami zewnętrznymi, według podobnych zasad jak parametry regularyzacji.

Macierz  $\mathbf{Q}_A^{(R)}$  jest dodatnio określona i o blokowo-diagonalnej strukturze. Do rozwiązania układu równań (4.239) z macierzą  $\mathbf{Q}_A^{(R)}$  o takich właściwościach można zastosować metodę gradientów sprzężonych [185]. Aby jednak aktualizowane rozwiązanie było nieujemne, do generowanych sekwencji iteracyjnych  $\{\bar{\mathbf{a}}^{(k)}\}$  zastosowano rzutowanie (4.137). Tak otrzymaną metodę nazwano projekcyjną metodą gradientów sprzężonych.

Jeśli  $T \gg I$ , macierz  $\mathbf{Q}_X$  ma bardzo duże rozmiary, a zatem rozwiązanie zadania (4.238) za pomocą omówionej strategii obliczeniowej wymagałoby zbyt dużych zasobów pamięci i dużego kosztu obliczeniowego. Ponieważ macierz  $\mathbf{Q}_X$  ma strukturę blokowo-diagonalną o identycznych blokach, zadanie (4.238) może

być realizowane, stosując pewne modyfikacje metody Newtona. Przyjęto bowiem następującą regułę aktualizacji:

$$\mathbf{X} \leftarrow [\mathbf{X} + \mathbf{P}_X \circledast \mathbf{Z}_X]_+, \quad (4.242)$$

gdzie  $\mathbf{P}_X = -(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X} - \mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{J \times T}$  jest newtonowskim kierunkiem poprawy. Macierz skalującą  $\mathbf{Z}_X$  zdefiniowano podobnie jak dla macierzy  $\mathbf{A}$ , a zatem:

$$\mathbf{Z}_X = [z_{jt}^{(X)}], \quad z_{jt}^{(X)} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } x_{jt} > \epsilon_X, \\ 0, & \text{jeżeli } |x_{jt}| \leq \epsilon_X \text{ oraz } \frac{\partial}{\partial x_{jt}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) > \epsilon_G. \end{cases} \quad (4.243)$$

gdzie  $\epsilon_X \geq 0$  i  $\epsilon_G \geq 0$  są stałymi.

Jeśli parameter  $\alpha_A$  ma początkowo dużą wartość, tzn. gdy  $\alpha_A \gg \lambda_{\max}(\mathbf{X} \mathbf{X}^T)$ , gdzie  $\lambda_{\max}(\cdot)$  jest maksymalną wartością własną macierzy, aktualizacje macierzy  $\mathbf{A}$  mają charakter gradientowy o bardzo małej długości kroku wzdłuż kierunku poprawy. Utrzymanie takiej wartości parametru  $\alpha_A$  w procesie iteracji naprzemiennych powoduje stagnację błędu residualnego na dużym poziomie. Aby zmniejszyć poziom błędu, konieczna jest również odpowiednia zmiana parametru  $\alpha_A$ . Przyjęto zatem następującą procedurę zmian tego parametru: (a) początkową wartość parametru  $\alpha_A$  należy ustawić na dość dużą wartość, np.  $\alpha_A = 10^4$ ; (b) estymacja błędu residualnego w  $n$ -tym kroku iteracji naprzemiennych:  $r^{(n)} = \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$ ; (c) jeżeli  $c^{(n)} = r^{(n-1)} - r^{(n)} < \tau$  dla  $n > n_1$ , gdzie  $\tau > 0$  jest wartością progową (np.  $\tau = 10^{-6}$ ), to występuje stagnacja błędu residualnego. Konieczne jest zatem zmniejszenie wartości parametru regularyzacji, np. według reguły:  $\alpha_A \leftarrow \frac{\alpha_A}{2}$ , a następnie kontynuowanie procesu iteracji naprzemiennych do napotkania następnego punktu stagnacji. Jeżeli  $c_l < 0$  dla  $\forall l \in \{n-2, n-1, n\}$  oraz dla  $n > n_2$ , proces aktualizacji faktorów należy zakończyć. Parameter  $n_1$  określa minimalną liczbę iteracji zewnętrznych, powyżej której możliwa jest zmiana parametru  $\alpha_A$ . Wprowadzenie parametru  $n_1$  wynika z założenia, że w pierwszych krokach iteracji naprzemiennych aktualizacja faktorów nie powinna mieć charakteru newtonowskiego. Przyspieszenie procesu zbieżności możliwe jest więc po przekroczeniu danej liczby, np.  $n_1 = 5$ . Z kolei, parameter  $n_2$  wyznacza minimalną liczbę iteracji zewnętrznych (zwykle  $n_2 \gtrsim 30$ ). Zabezpiecza on przez wcześniejszym przerwaniem procesu aktualizacji faktorów z powodu słabej zmiany wartości błędu residualnego w trzech kolejnych krokach iteracyjnych.

Finalną wersję algorytmu tłumionych iteracji Newtona dla metody NMF przedstawiono za pomocą algorytmu 18 (algorytm DN).

---

**Algorytm 18. DN**

---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $\lambda$  – początkowa wartość parametru tłumienia,  $\tau$  – próg stagnacji,  $n_1$  – inicjalizacja tłumienia,  $n_2$  – minimalna liczba iteracji zewnętrznych,  $n_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji zewnętrznych

**Wyjście:** Estymowane faktory:  $\mathbf{A}$  oraz  $\mathbf{X}$

```

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)}$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)}$ ;  $n = 0$ ;
2 repeat
3    $n \leftarrow n + 1$  ;
4   begin Aktualizacja dla  $\mathbf{A}$ 
5      $\mathbf{Q}_A^{(n)} = \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{X}^{(n-1)} (\mathbf{X}^{(n-1)})^T + \lambda \mathbf{I}_{IJ}$ ,  $\mathbf{c}_A^{(n)} = -\text{vec}(\mathbf{X}^{(n-1)} \mathbf{Y}^T)$  ;
6     Wyznacz  $\mathbf{Z}_A^{(n)}$  według (4.241) oraz  $\mathbf{D}_A^{(n)}$  według (4.240) ;
7      $\mathbf{Q}_A^{(R)} = \mathbf{D}_A^{(n)} \mathbf{Q}_A^{(n)} \mathbf{D}_A^{(n)} - \mathbf{D}_A^{(n)} + \mathbf{I}_{IJ}$  oraz  $\mathbf{c}_A^{(R)} = \mathbf{D}_A^{(n)} \mathbf{c}_A^{(n)}$  ;
8     Wyznacz  $\bar{\mathbf{a}}^{(R)}$ , rozwiązując układ równań w (4.239) za pomocą
      projekcyjnej metody gradientów sprzężonych ;
9      $\mathbf{A}^{(n)} = (\text{mtx}(\bar{\mathbf{a}}, J, I))^T$ , gdzie  $\bar{\mathbf{a}} = [\bar{\mathbf{a}}^{(R)}; \mathbf{0}]$  ;
10    begin Aktualizacja dla  $\mathbf{X}$ 
11       $\mathbf{P}_X^{(n)} = ((\mathbf{A}^{(n)})^T \mathbf{A}^{(n)})^{-1} (\mathbf{A}^{(n)})^T (\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n-1)} - \mathbf{Y})$  ;
12      Oblicz  $\mathbf{Z}_X^{(n)}$  za pomocą (4.243) ;
13       $\mathbf{X}^{(n)} = [\mathbf{X}^{(n-1)} - \mathbf{P}_X^{(n)} \odot \mathbf{Z}_X^{(n)}]_+$  ;
14      Oblicz  $d_j^{(n)} = \|\mathbf{a}_j^{(n)}\|_2$ , gdzie  $\mathbf{a}_j^{(n)}$  jest  $j$ -tą kolumną macierzy  $\mathbf{A}^{(n)}$  ;
15       $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} \text{diag}\{(d_j^{(n)})^{-1}\}$  ;
16       $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \text{diag}\{d_j^{(n)}\} \mathbf{X}^{(n)}$  ;
17       $r^{(n)} = \frac{\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F}$  ;
18      Dla  $n > 1$ , oblicz  $c^{(n)} = r^{(n-1)} - r^{(n)}$  ;
19      if  $c^{(n)} < \tau$  oraz  $n > n_1$  then
20         $\lambda \leftarrow \frac{\lambda}{2}$  ;
21 until  $n > n_{\max}$  lub  $c^{(l)} < 0$  dla  $n > n_2$  oraz  $\forall l \in \{n-2, n-1, n\}$ ;

```

---

#### 4.10.4. Algorytm punktów wewnętrznych w obszarach zaufania

Algorytm punktów wewnętrznych w obszarach zaufania (ang. IPTR – *Interior-Point Trust-Region*) został zaproponowany przez Rojas i Steihauga [382]

do rozwiązywania liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności i regularyzacją Tichonowa. W algorytmie tym zadanie tak sformułowane jest przekształcane do zadania minimalizacji kwadratowej funkcji celu z logarytmiczną (wewnętrzną) funkcją kary, a następnie aproksymowane przez zadanie programowania kwadratowego z kwadratowymi ograniczeniami. Tak otrzymane zadanie rozwiązywane jest za pomocą algorytmu LSTRS (ang. *Large-Scale Trust-Region Subproblem*), który jest algorytmem obszaru zaufania, stosowanym do rozwiązywania bardzo dużych zadań programowania kwadratowego. Z kolei, parameter kary jest zmniejszany wraz z iteracjami wewnętrznymi, podobnie jak parameter przesunięcia w algorytmie punktów wewnętrznych (rozd. 4.8).

Algorytm IPTR został po raz pierwszy zastosowany do modelu NMF w pracy [501], gdzie funkcję kosztu wyrażono przez zregularyzowaną funkcję odległości euklidesowej. Następnie algorytm ten został rozszerzony do dywergencji  $\alpha$  i  $\beta$  w pracy [211]. Dalej krótko scharakteryzowano algorytm zaproponowany w [501].

Uwzględniając koncepcję algorytmu obszaru zaufania do aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$ , sformułowano następujące zadanie:

$$\min_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}), \quad \text{p.o.} \quad \|\mathbf{X}\|_F \leq \Delta, \quad \mathbf{X} \geq \mathbf{0}, \quad (4.244)$$

gdzie  $\Delta > 0$  – promień obszaru zaufania.

Niech  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2}D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$ , gdzie  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  jest funkcją odległości euklidesowej w (2.4). Uwzględniając przekształcenia (4.236), zadanie (4.244) może być wyrażone w postaci zadania (4.18), przy ograniczeniach (4.19)–(4.21). Wynika z tego, że:

$$F(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\text{vec}(\mathbf{X}))^T \mathbf{Q} \text{vec}(\mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{C}^T \mathbf{X}), \quad (4.245)$$

gdzie  $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{JT \times JT}$ ,  $\mathbf{C} = -\mathbf{A}^T \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{J \times T}$ , a funkcje ograniczeń są postaci:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{jt}(\mathbf{X}) &= x_{jt}, & \hat{d}_{jt} &= 0, & j &= 1, \dots, J, \quad t = 1, \dots, T, \\ \check{c}(\mathbf{X}) &= \|\mathbf{X}\|_F, & \check{d} &= \Delta, \\ \bar{c}(\mathbf{X}) &= 0, & \bar{d} &= 0. \end{aligned}$$

Posługując się zależnością (4.22), funkcja Lagrange'a przyjmuje postać:

$$\mathcal{L}(\mathbf{X}, \boldsymbol{\Lambda}, \theta) = F(\mathbf{X}) - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda}^T \mathbf{X}) - \frac{\theta}{2} (\|\mathbf{X}\|_F^2 - \Delta^2), \quad (4.246)$$

z następującymi warunkami *KKT*:



$$\nabla_{\mathbf{X}} F(\mathbf{X}) - \theta \mathbf{X} - \mathbf{\Lambda} = \mathbf{0}, \quad \theta \leq 0, \quad \lambda_{jt} \geq 0, \quad \mathbf{\Lambda} = [\lambda_{jt}], \quad (4.247)$$

$$\theta (\|\mathbf{X}\|_F^2 - \Delta^2) = 0, \quad \text{tr}(\mathbf{\Lambda}^T \mathbf{X}) = 0. \quad (4.248)$$

Po podstawieniu (4.245) do (4.247) macierz  $\bar{\mathbf{X}}$  może być wyznaczona z zależności:

$$(\mathbf{Q} - \theta \mathbf{I}_{JT}) \text{vec}(\mathbf{X}) = -\text{vec}(\mathbf{C} - \mathbf{\Lambda}). \quad (4.249)$$

Pomijając macierz  $\mathbf{\Lambda}$ , rozwiązanie układu równań (4.249) może być interpretowane jako rozwiązanie liniowego zadania najmniejszych kwadratów z regularyzacją Tichonowa. Macierz  $\mathbf{\Lambda}$  zawiera mnożniki Lagrange'a, wymuszające nieujemne rozwiązanie, które nie jest rozwiązaniem w sensie kryterium najmniejszych kwadratów. Macierz ta może być estymowana w procesie iteracyjnych aktualizacji, np. stosując podobne podejście jak w algorytmie punktów wewnętrznych (rozdz. 4.8). Rojas i Steihaug [382] zaproponowali jednak inną technikę, a mianowicie, zamiast estymować macierz mnożników Lagrange'a estymują jedynie jeden parametr, zastępując miarę odległości dualnej  $\text{tr}(\mathbf{\Lambda}^T \mathbf{X})$  funkcją kary wewnętrznej. Takie podejście wymusza rozwiązanie dodatnie, a ponadto zmniejsza złe uwarunkowanie macierzy hesjanu. Dlatego też, może być szczególnie przydatne do estymowania faktorów gęstych. Funkcję kary wyrażono za pomocą funkcji logarytmicznej:

$$\phi(\mathbf{X}) = \lambda \sum_{j=1}^J \sum_{t=1}^T \ln x_{jt}, \quad (4.250)$$

gdzie  $\lambda \geq 0$ . W rezultacie, funkcja celu w połączeniu z funkcją kary ma postać:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2 - \frac{\theta}{2} (\|\mathbf{X}\|_F^2 - \Delta^2) - \phi(\mathbf{X}). \quad (4.251)$$

Funkcja  $\phi(\mathbf{X})$  wprowadza do zadania optymalizacji dość silną nieliniowość. Aby można było zadanie minimalizacji wyrazić za pomocą zadania programowania kwadratowego, funkcja  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  musi być aproksymowana szeregiem Taylora do stopnia drugiego względem punktu  $\mathbf{X}$ , zatem:

$$\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X} + \Delta\mathbf{X}) \cong \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) + \text{tr}(\mathbf{G}^T \Delta\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \text{vec}(\Delta\mathbf{X})^T \mathbf{H} \text{vec}(\Delta\mathbf{X}), \quad (4.252)$$

gdzie:

$$\mathbf{G} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{A}^T (\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{Y}) - \theta \mathbf{X} - \lambda [x_{jt}^{-1}] \in \mathbb{R}^{J \times T}, \quad (4.253)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \nabla_{\mathbf{X}}^2 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} - \theta \mathbf{I}_{JT} \\ &+ \lambda \operatorname{diag}(\operatorname{vec}([x_{jt}^{-2}])) \in \mathbb{R}^{JT \times JT}. \end{aligned} \quad (4.254)$$

Zadanie minimalizacji funkcji celu w obszarze zaufania ma postać:

$$\min_{\Delta \mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}), \quad \text{p.o. } \|\mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}\|_F \leq \Delta. \quad (4.255)$$

Po wstawieniu funkcji (4.252) do zadania (4.255) oraz podstawieniu  $\mathbf{Z} = \mathbf{X} + \Delta \mathbf{X}$ , uzyskuje się zadanie programowania kwadratowego:

$$\min_{\mathbf{Z}} \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{vec}(\mathbf{Z})^T \mathbf{H} \operatorname{vec}(\mathbf{Z}) + \operatorname{tr}(\mathbf{C}_Z^T \mathbf{Z}) \right\}, \quad \text{p.o. } \|\mathbf{Z}\|_F \leq \Delta, \quad (4.256)$$

gdzie

$$\mathbf{C}_Z = -2\lambda [x_{jt}^{-1}] - \mathbf{A}^T \mathbf{Y}, \quad \lambda \geq 0, \quad \theta \leq 0. \quad (4.257)$$

Zadanie to jest więc równoważne prymalnemu zadaniu programowania kwadratowego:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{X}} \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{vec}(\mathbf{X})^T (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A}) \operatorname{vec}(\mathbf{X}) - \operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{A} \mathbf{X}) \right\}, \\ \text{p.o. } x_{jt} \geq 0, \quad \|\mathbf{X}\|_F \leq \Delta \end{aligned} \quad (4.258)$$

Macierz  $\mathbf{H}$  jest dodatnio określona, gdy  $\mathbf{A}$  jest macierzą pełnego rzędu. Niemniej jednak, możliwe jest złe uwarunkowanie macierzy hesjanu, zwłaszcza gdy macierz  $\mathbf{A}$  jest bardzo rzadka. Gdy  $\exists j, s : x_{js} \rightarrow 0$ ,  $\lambda < \infty$  i  $|\theta| < \infty$ , wówczas  $h_{ss} \rightarrow \infty$ , gdzie  $s = j + (t-1)J$ ,  $\mathbf{H} = [h_{mn}]$ ,  $m, n \in \{1, \dots, JT\}$ . Regularyzacja hesjanu przez dużą wartość parametru  $|\theta|$  może być więc istotna, zwłaszcza w początkowych iteracjach tego algorytmu.

Do rozwiązania zadania (4.256) można zastosować algorytmy programowania kwadratowego z ograniczeniami nierównościami, zwłaszcza ograniczeniami sferycznymi [329]. Problem ten może być też aproksymowany przez punkt Cauchy'ego, stosowany w metodach obszarów zaufania (rozd. 4.10.2). Możliwe jest też wyznaczenie macierzy  $\mathbf{Z}$  dla problemu kwadratowego bez ograniczeń (pominając ograniczenia  $\|\mathbf{Z}\|_F \leq \Delta$ ), a następnie przeskalowanie macierzy  $\mathbf{Z}$ , tak aby spełnione było ograniczenie. To ostatnie podejście zastosowano w pracy [501].

Po wyznaczeniu macierzy  $\mathbf{Z}$ , macierz  $\mathbf{X}$  estymowana jest na podstawie reguły aktualizacji:  $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X} + \eta(\mathbf{Z} - \mathbf{X})$ , gdzie  $\eta$  jest parametrem długości kroku. Można go dobrać, stosując regułę (4.169) dla zapewnienia nieujemnych aktualizacji.

Iteracyjna aktualizacja macierzy  $\mathbf{X}$  wymaga też iteracyjnej aktualizacji parametru  $\lambda$  w macierzach (4.253) i (4.254). Niech  $\Phi(\mathbf{Z}) = \frac{1}{2}\text{vec}(\mathbf{Z})^T \mathbf{H} \text{vec}(\mathbf{Z}) + \text{tr}(\mathbf{C}_Z^T \mathbf{Z})$  będzie funkcją celu w zadaniu (4.256). Z warunku stacjonarności:  $\nabla_{\mathbf{Z}} \Phi(\mathbf{Z}_*) = \mathbf{0}$  wynika:

$$\mathbf{H}\mathbf{z} = -\text{vec}(\mathbf{C}_Z), \quad (4.259)$$

gdzie  $\mathbf{z} = \text{vec}(\mathbf{Z}) \in \mathbb{R}^{JT}$ .

Po wstawieniu (4.254) i (4.257) do (4.259), po przekształceniach otrzymuje się:

$$\begin{aligned} & - (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} - \theta \mathbf{I}_{JT}) \mathbf{z} + \text{vec}(\mathbf{A}^T \mathbf{Y}) \\ & = 2\lambda \text{vec}([x_{jt}^{-1}]) - \lambda \text{diag}(\text{vec}([x_{jt}^{-2}])) \mathbf{z}. \end{aligned} \quad (4.260)$$

Z kolei, z zależności (4.249) uzyskuje się:

$$\text{vec}(\mathbf{\Lambda}) = - (\mathbf{I}_T \otimes \mathbf{A}^T \mathbf{A} - \theta \mathbf{I}_{JT}) \text{vec}(\mathbf{X}) + \text{vec}(\mathbf{A}^T \mathbf{Y}). \quad (4.261)$$

Mając na uwadze wyrażenie (4.261), lewą stronę równania w (4.260) można zatem aproksymować wektorem mnożników Lagrange'a, stąd:

$$\text{vec}(\tilde{\mathbf{\Lambda}}) \cong 2\lambda \text{vec}([x_{jt}^{-1}]) - \lambda \text{diag}(\text{vec}([x_{jt}^{-2}])) \mathbf{z}. \quad (4.262)$$

Miarę odległości dualnej  $\text{tr}(\mathbf{\Lambda}^T \mathbf{X})$  w (4.246) można więc wyrazić następującym estymatorem:  $\text{tr}(\tilde{\mathbf{\Lambda}}^T \mathbf{X}) = \text{vec}(\tilde{\mathbf{\Lambda}})^T \text{vec}(\mathbf{X}) \cong \lambda JT$ . Wynika stąd, że parameter  $\lambda$  może być estymowany w  $k$ -tym kroku iteracyjnym według reguły aktualizacji:

$$\lambda^{(k)} = \frac{\rho}{JT} \text{vec}(\mathbf{\Lambda}^{(k)})^T \text{vec}(\mathbf{X}^{(k)}), \quad (4.263)$$

gdzie  $\rho \in (0, 1)$ .

W pracy [501] algorytm ten został zastosowany do aktualizacji tylko macierzy  $\mathbf{A}$ . Macierz  $\mathbf{X}$  aktualizowano za pomocą projekcyjnego algorytmu najmniejszych kwadratów (rozd. 4.5.1). Takie podejście jest wskazane, jeśli macierz  $\mathbf{X}$  jest znacznie większa od macierzy  $\mathbf{A}$ . Algorytm ten wykazuje się dużą skutecznością w rozwiązywaniu zadań ślepej separacji sygnałów nieujemnych, ale niestety jest algorytmem o dużych wymaganiach zasobu pamięci i dość wolnym. Jest to spowodowane tym, że w każdym kroku iteracji wewnętrznych, algorytm ten rozwiązuje

**Algorytm 19. IPTR**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  – macierz danych,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $\theta \in \mathbb{R}_+$  – parameter regularyzacji,  $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych,  $\rho, \eta, \varepsilon_A, \varepsilon_X$  – inne parametry,

**Wyjście:** Faktory:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ .

- 1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ;  $n = 0$ ;
- 2  $\mathbf{Y} \leftarrow \text{diag} \left\{ \sigma^{-1}(\mathbf{y}_i) \right\} \mathbf{Y}$ , gdzie  $\sigma(\mathbf{y}_i)$  jest odchyleniem standardowym  $i$ -tego wiersza macierzy  $\mathbf{Y}$ ; // Skalowanie wierszy macierzy  $\mathbf{Y}$  do jednostkowej wariancji
- 3 **repeat**
- 4      $n \leftarrow n + 1$ ;
- 5      $\mathbf{X} \leftarrow \max\{\varepsilon_X, (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{Y}\}$ ;
- 6      $\mathbf{H} = \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{X} \mathbf{X}^T + \theta \mathbf{I}_{IJ}$ ,  $\bar{\mathbf{c}} = \text{vec}(\mathbf{X} \mathbf{Y}^T)$ ;
- 7      $\lambda = -\frac{\rho}{IJ} \mathbf{1}_I^T (\mathbf{Y} - \mathbf{1}_I \mathbf{1}_J^T \mathbf{X}) \mathbf{X}^T \mathbf{1}_J$ ,  $\mathbf{a} = \mathbf{1}_{IJ}$ ,  $k = 0$ ;
- 8     **repeat**
- 9          $k \leftarrow k + 1$ ;
- 10          $\mathcal{I} = \{t : a_t \geq \varepsilon_A\}$ , gdzie  $\mathbf{a} = [a_t]$ ; // Zbiór pasywny
- 11          $\mathcal{A} = \{t : a_t < \varepsilon_A\}$ ; // Zbiór aktywny
- 12          $\bar{\mathbf{H}} \leftarrow \mathbf{H}_{\mathcal{I}, \mathcal{I}} - \lambda \text{diag} \{ \mathbf{a}_{\mathcal{I}}^{-2} \}$ ;
- 13          $\mathbf{c}_Z \leftarrow 2\lambda \mathbf{a}_{\mathcal{I}}^{-1} - \bar{\mathbf{c}}_{\mathcal{I}}$ ;
- 14          $[\mathbf{R}, \mathbf{w}] \leftarrow \text{lqr}(\bar{\mathbf{H}}, \mathbf{c}_Z)$ ; // Zredukowana faktoryzacja QR
- 15          $\tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{R} \setminus \mathbf{w}$ ;
- 16          $\tilde{\mathbf{h}} = \tilde{\mathbf{z}} - \mathbf{a}_{\mathcal{I}}$ ;
- 17          $\mathbf{a}_{\mathcal{I}} \leftarrow \mathbf{a}_{\mathcal{I}} + \min \left\{ 1, \tau \min(\mathbf{a}_{\mathcal{I}} \otimes \tilde{\mathbf{h}}) \right\} \tilde{\mathbf{h}}$ ;
- 18          $\mathbf{a}_{\mathcal{A}} = \mathbf{0}$ ;
- 19          $\lambda \leftarrow \left( \frac{\rho \lambda}{IJ} \right) (2|\mathcal{I}| - \mathbf{1}^T (\tilde{\mathbf{z}} \otimes \mathbf{a}_{\mathcal{I}}))$ ;
- 20     **until**  $|\lambda| < \frac{\rho \eta}{IJ} \|\mathbf{a}_{\mathcal{I}}\|_2$  lub  $k > k_{\max}$ ;
- 21      $\mathbf{A} \leftarrow \text{mtx}(\mathbf{a}, I, J)^T$ ;
- 22      $a_{ij} \leftarrow \frac{a_{ij}}{\sum_{q=1}^I a_{qj}}$ ; // Normalizacja do jednostkowej normy  $l_1$
- 23 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

zadanie programowania kwadratowego z macierzą  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{JT \times JT}$ . Liczba iteracji wewnętrznych nie jest jednak duża i dla typowych zadań zwykle nie przekracza pięciu iteracji.

Jeśli aktualizowany faktor jest rzadki, możliwe jest znaczne przyspieszenie procesu zbieżności, przyjmując podobną strategię do aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  (rozdz. 4.10.3) jak w algorytmie tłumionych iteracji Newtona. Wprowadzono zatem pojęcie zbioru pasywnego, który zdefiniowano w następujący sposób:  $\mathcal{I} = \{t : a_t \geq \varepsilon_A\}$ , gdzie  $\varepsilon_A \geq 0$  jest parametrem progowym. Zbiór ten zawiera indeksy tych zmiennych, które należy aktualizować w bieżącym kroku iteracyjnym. Macierz  $\mathbf{H}_{\mathcal{I},\mathcal{I}}$  zatem otrzymano z macierzy  $\mathbf{H}$  przez usunięcie z niej tych wierszy i odpowiednich kolumn, których indeksy nie są zawarte w zbiorze  $\mathcal{I}$ . Do estymacji wektora  $\mathbf{z}$  z układu równań (4.259) zastosowano zredukowaną faktoryzację QR, podobnie jak dla rozwiązania zadania (4.220).

Algorytm NMF, w którym zastosowano algorytm punktów wewnętrznych w obszarach zaufania (algorytm IPTR) do aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$  oraz projekcyjny algorytm najmniejszych kwadratów do aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$ , wyrażono za pomocą algorytmu 19. Eksperymentalnie stwierdzono, że algorytm ten jest dość wrażliwy na skalowanie obserwowanych komponentów. Najlepszy rezultat uzyskuje się, jeśli komponenty te mają jednakową wariancję. Dlatego też wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  przeskalowano następująco:  $\mathbf{Y} \leftarrow \text{diag} \left\{ \sigma^{-1}(\underline{\mathbf{y}}_i) \right\} \mathbf{Y}$ , gdzie  $\sigma(\underline{\mathbf{y}}_i)$  jest odchyleniem standardowym  $i$ -tego wiersza macierzy  $\mathbf{Y}$ . Po wykonaniu faktoryzacji, wiersze macierzy  $\mathbf{A}$  należy przeskalować według zasady:  $\mathbf{A} \leftarrow \text{diag} \left\{ \sigma(\underline{\mathbf{y}}_i) \right\} \mathbf{A}$ .

#### 4.10.5. Algorytm spektralnego rzutowania gradientu

Metoda spektralnego rzutowania gradientu (ang. SPG – *Spectral Projected Gradient*) [28] łączy w sobie standardową metodę rzutowania gradientu [22, 23] oraz niemonotoniczną metodę Barzilai–Borweina (BB) [10, 375], służącą do wyznaczania długości kroku w gradientowych metodach kierunków poprawy. Jest stosowana do minimalizacji wypukłej funkcji celu z przedziałowymi ograniczeniami obszaru rozwiązań dopuszczalnych. Może być łatwo zastosowana do estymacji faktorów w modelu NMF. Zmodyfikowaną wersję metody SPG, występującą pod nazwą GPSR-BB (ang. *Gradient Projection for Sparse Reconstruction-BB*), zaproponowano w pracy [131] do estymacji rzadkich rozwiązań dla podokreślonych zadań najmniejszych kwadratów. Taką wersję metody SPG zastosowano po raz pierwszy do nieujemnej faktoryzacji macierzy [499], a następnie wykorzystano ją do jednoortogonalnej nieujemnej dekompozycji Tuckera [487]. Zregularyzowaną wersję metody SPG zastosowano także do nadzorowanej klasyfikacji obrazów

ORL [512]. Inne zmodyfikowane wersje metody BB analizowano w kontekście zastosowania modelu NMF w pracach [171, 271, 434].

Metoda SPG bazuje na regule aktualizacji (4.167), w której kierunek poprawy  $\mathbf{p}_t^{(k)}$  aktualizacji wektora  $\mathbf{x}_t$  zdefiniowany jest następująco:

$$\mathbf{p}_t^{(k)} = \left[ \mathbf{x}_t^{(k)} - (\alpha_t^{(k)})^{-1} \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \right]_+ - \mathbf{x}_t^{(k)}, \quad (4.264)$$

dla parametru  $\alpha_t^{(k)} > 0$  dobraneo w taki sposób, aby macierz  $\alpha_t^{(k)} \mathbf{I}_J$  aproksymowała macierz hesjanu. Jest to więc metoda quasi-Newtona, gdzie macierz hesjanu w  $k$ -tej iteracji wewnętrznej modelowana jest w następujący sposób:  $\mathbf{H}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t}^2 \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)}) \cong \alpha_t^{(k)} \mathbf{I}_J = \tilde{\mathbf{H}}_t^{(k)} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ . Równanie siecznej funkcji  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t)$  na odcinku  $(\mathbf{x}_t^{(k)}, \mathbf{x}_t^{(k+1)})$  ma postać:  $\tilde{\mathbf{H}}_t^{(k+1)} \mathbf{s}_t^{(k)} = \mathbf{w}_t^{(k)}$ , gdzie  $\mathbf{w}_t^{(k)} = \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k+1)}) - \nabla_{\mathbf{x}_t} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{x}_t^{(k)})$  oraz  $\mathbf{s}_t^{(k)} = \mathbf{x}_t^{(k+1)} - \mathbf{x}_t^{(k)}$ . Jeśli  $(\mathbf{s}_t^{(k)})^T \mathbf{w}_t^{(k)} > 0$ , równanie to ma rozwiązanie. Z liniowego zadania najmniejszych kwadratów:  $\min_{\alpha_t^{(k+1)}} \frac{1}{2} \|\tilde{\mathbf{H}}_t^{(k+1)} \mathbf{s}_t^{(k)} - \mathbf{w}_t^{(k)}\|_2^2$  otrzymujemy:

$$\alpha_t^{(k+1)} = \frac{(\mathbf{w}_t^{(k)})^T \mathbf{s}_t^{(k)}}{(\mathbf{s}_t^{(k)})^T \mathbf{s}_t^{(k)}}. \quad (4.265)$$

W pracach [89, 499] metodę GPSR-BB przystosowano do równoległego przetwarzania wszystkich wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{X}$ . Regułę aktualizacji (4.167) można zapisać w postaci:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{P}^{(k)} \text{diag}\{\boldsymbol{\eta}^{(k)}\}, \quad (4.266)$$

gdzie  $\boldsymbol{\eta}^{(k)} \in \mathbb{R}_+^T$  jest wektorem długości kroków poprawy, które minimalizują funkcję  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k+1)})$ . Kolumny macierzy  $\mathbf{P}^{(k)} \in \mathbb{R}^{J \times T}$  są kierunkami poprawy, odpowiednio dla aktualizacji wektorów  $\{\mathbf{x}_t\}$ . Zgodnie z (4.264), macierz ta ma postać:

$$\mathbf{P}^{(k)} = \left[ \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{G}_X^{(k)} \mathbf{D}^{(k)} \right]_+ - \mathbf{X}^{(k)}, \quad (4.267)$$

gdzie  $\mathbf{G}_X^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) \in \mathbb{R}^{J \times T}$  oraz  $\mathbf{D}^{(k)} = \text{diag}\{\alpha_t^{(k)}\} \in \mathbb{R}^{T \times T}$ .

Dla zbioru wektorów  $\{\mathbf{x}_t\}$ , czynniki  $\{\alpha_t^{(k)}\}$  wyznaczone są z następujących równań siecznych:  $\mathbf{S}^{(k)} \tilde{\mathbf{H}}^{(k+1)} = \mathbf{W}^{(k)}$ , gdzie  $\mathbf{S}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}$  oraz  $\mathbf{W}^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k+1)}) - \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{X}^{(k)})$ .

Jeśli  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F^2$ , macierz  $\mathbf{W}^{(k)}$  upraszcza się do postaci:  $\mathbf{W}^{(k)} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(k)}$ . Z reguły (4.266) uzyskuje się:  $\mathbf{S}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)} \text{diag}\{\boldsymbol{\eta}^{(k)}\}$ . W rezultacie otrzymano:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}^{(k+1)} &= \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{W}^{(k)}\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)}\right\}} = \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(k)}\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)}\right\}} \\ &= \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)}\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{P}^{(k)}\right\}} = \frac{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \otimes (\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)}) \right]}{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \otimes \mathbf{P}^{(k)} \right]}, \quad (4.268) \end{aligned}$$

gdzie symbol  $\otimes$  oznacza iloczyn Hadamarda, a  $\text{diag}\{\mathbf{X}\}$  jest wektorem utworzonym z elementów głównej diagonalnej macierzy  $\mathbf{X}$ .

Metodę SPG można też dość łatwo zastosować do zregulowanej funkcji celu, wyrażonej w postaci (3.99). Takie podejście nie wymaga wektoryzacji macierzy  $\mathbf{X}$ , co znacząco zmniejsza koszt obliczeniowy. Dla funkcji celu w (3.99),  $\mathbf{G}_X^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Y}) + \alpha_X \mathbf{X}^{(k)} \mathbf{L}_X$  oraz macierz  $\mathbf{W}^{(k)}$  przyjmuje postać:  $\mathbf{W}^{(k)} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(k)} + \alpha_X \mathbf{S}^{(k)} \mathbf{L}_X$ . W konsekwencji, z równania siecznych otrzymuje się:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}^{(k+1)} &= \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{W}^{(k)}\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)}\right\}} = \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(k)} + \alpha_X (\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)} \mathbf{L}_X\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{S}^{(k)})^T \mathbf{S}^{(k)}\right\}} \\ &= \frac{\text{diag}\left\{(\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)} + \alpha_X (\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{Z}^{(k)} \mathbf{L}_X (\mathbf{Z}^{(k)})^{-1}\right\}}{\text{diag}\left\{(\mathbf{P}^{(k)})^T \mathbf{P}^{(k)}\right\}} \\ &= \frac{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \otimes \left( \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)} + \alpha_X \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{Z}^{(k)} \mathbf{L}_X (\mathbf{Z}^{(k)})^{-1} \right) \right]}{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \otimes \mathbf{P}^{(k)} \right]}. \quad (4.269) \end{aligned}$$

Ponieważ macierz  $\mathbf{Z}^{(k)} = \text{diag}\{\boldsymbol{\eta}^{(k)}\}$  jest diagonalna, wyznaczenie wyrażenia  $\mathbf{Z}^{(k)} \mathbf{L}_X (\mathbf{Z}^{(k)})^{-1}$  nie wymaga poniesienia dużego kosztu obliczeniowego.

Długość kroku uczenia  $\boldsymbol{\eta}^{(k)}$  uzyskuje się z zadania:

$$\boldsymbol{\eta}_*^{(k)} = \arg \min_{\boldsymbol{\eta}^{(k)}} \Psi \left( \mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{P}^{(k)} \text{diag}\{\boldsymbol{\eta}^{(k)}\} \right), \quad (4.270)$$

stosując np. regułę Armijo [329].

**Algorytm 20. SPG**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – przybliżenie początkowe,  
 $k_{\max}$  – liczba iteracji wewnętrznych,  $\alpha_{\min} > 0$ ,  $\alpha_{\max} > 0$ ,  
 $\forall t : \bar{\alpha}_t^{(0)} = \frac{\alpha_{\max} + \alpha_{\min}}{2}$ ,

**Wyjście:**  $\hat{\mathbf{X}}$  – estymowany faktor,

1 **for**  $k = 0, 1, \dots, k_{\max}$  **do**

2      $\mathbf{G}_X^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Y})$ ;                     // Gradient

3      $\mathbf{P}^{(k)} = \left[ \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{G}_X^{(k)} \text{diag}\{(\bar{\alpha}_t^{(k)})^{-1}\} \right]_+ - \mathbf{X}^{(k)}$ ;   // Kierunek poprawy

4      $\bar{\eta}^{(k)} = \max\{0, \min\{1, \eta^{(k)}\}\}$ ;   // gdzie  $\eta^{(k)}$  dany jest w (4.271)

5      $\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{P}^{(k)} \text{diag}\{\bar{\eta}^{(k)}\}$ ;

6      $\bar{\alpha}^{(k+1)} = \max\{\alpha_{\min}, \min\{\alpha_{\max}, \alpha^{(k+1)}\}\}$ ;   // gdzie  $\alpha^{(k+1)}$  wyrażony jest przez (4.268)

---

Jeśli  $\alpha_X = 0$ , z warunku stacjonarności:  $\frac{\partial}{\partial \eta^{(k)}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k+1)}) \triangleq \mathbf{0}$  oraz z (4.266) otrzymano regułę aktualizacji dla  $\eta^{(k)}$  w postaci analitycznej:

$$\eta^{(k)} = - \frac{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \circledast \mathbf{G}_X^{(k)} \right]}{\mathbf{1}_J^T \left[ \mathbf{P}^{(k)} \circledast (\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{P}^{(k)}) \right]}. \quad (4.271)$$

Finalna postać zmodyfikowanego algorytmu SPG wyrażona jest przez algorytm 20.

**Uwaga:** Złożoność obliczeniową pojedynczego kroku iteracyjnego algorytmu SPG dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$  można zgrubnie oszacować funkcją  $O(IJT) + O(J^2T)$ . Uwzględniając człon regularyzujący oraz zakładając, że wyrażenie  $\mathbf{X}^{(k)} \mathbf{L}_X$  wymaga kosztu obliczeniowego  $O(JT^2)$ , całkowita złożoność zregularyzowanego algorytmu SPG wynosi  $O(IJT) + O(J^2T) + O(JT^2)$ . Jeśli macierz  $\mathbf{L}_X$  jest bardzo rzadka, złożoność tę można jeszcze zmniejszyć.

## 4.11. Wyniki testów numerycznych

Algorytmy numeryczne omawiane w niniejszym rozdziale były obszernie badane i testowane w różnych pracach, z wykorzystaniem różnych zbiorów danych. W tym rozdziale przedstawiono jedynie wybrane wyniki badań symulacyjnych,



które zostały wykonane na danych syntetycznych, pochodzących głównie z zadań ślepej separacji sygnałów nieujemnych. W badaniach tych macierz obserwacji  $\mathbf{Y}$  generowana jest na podstawie znanych macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , które nazwano macierzami oryginalnymi. Dla modelu dokładnej faktoryzacji, macierz  $\mathbf{Y}$  wyznaczona jest przez zależność (1.1). Dane dla modelu przybliżonej faktoryzacji generowane są według modelu (1.3). Przyjęto, że  $\mathbf{N} = [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_T]$ , gdzie  $\forall t : \mathbf{n}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_t^2 \mathbf{I}_I)$ . Wariancje szumu  $\sigma_t^2$  dobierano w taki sposób, aby uzyskać zamierzoną wartość współczynnika  $SNR$ .

Estymowane macierze  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$  oceniano jakościowo według miary  $SIR$  (ang. *Signal-to-Interference Ratio*) [89]:

$$SIR^{(A)} = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J SIR_j^{(A)}, \quad \text{gdzie } SIR_j^{(A)} = -20 \log \left( \frac{\|\hat{\mathbf{a}}_j - \mathbf{a}_j\|_2}{\|\mathbf{a}_j\|_2} \right), \quad (4.272)$$

$$SIR^{(X)} = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J SIR_j^{(X)}, \quad \text{gdzie } SIR_j^{(X)} = -20 \log \left( \frac{\|\hat{\mathbf{x}}_j - \mathbf{x}_j\|_2}{\|\mathbf{x}_j\|_2} \right), \quad (4.273)$$

gdzie  $\hat{\mathbf{a}}_j$  –  $j$ -ty wektor kolumnowy macierzy  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{x}}_j$  –  $j$ -ty wektor wierszowy macierzy  $\hat{\mathbf{X}}$ .

#### 4.11.1. Testy metod inicjalizacji czynników

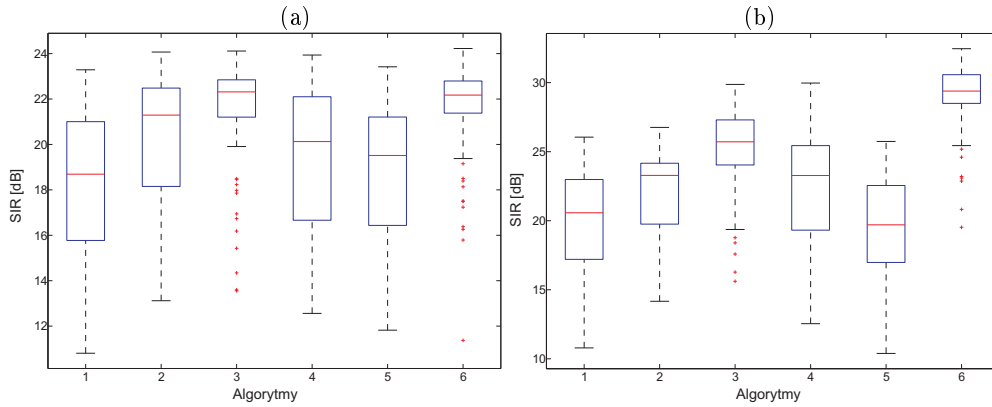
Metody inicjalizacji czynników modelu NMF omówiono w rozdziale 4.1. W celu oszacowania ich efektywności przeprowadzono eksperyment estymacji czynników oryginalnych  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w zadaniu ślepej separacji sygnałów nieujemnych. Do realizacji tego zadania wykorzystano dokładny oraz zaburzony model NMF, odpowiednio (1.1) oraz (1.3). Macierze oryginalne  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} = [x_{jt}] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  wygenerowano losowo w następujący sposób:

$$\forall i, j : a_{ij} \sim \mathcal{U}[0, 1], \quad (4.274)$$

$$\forall j, t : x_{jt} = \max\{0, \xi_{jt}\}, \quad \text{gdzie } \xi_{jt} \sim \mathcal{N}(0, 1). \quad (4.275)$$

Przyjęto:  $I = 100$ ,  $J = 10$  oraz  $T = 1000$ .

Do oceny przybliżeń początkowych  $\mathbf{A}^{(0)}$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)}$  wybrano następujące metody: inicjalizacja losowa (rozd. 4.1.1), wielostartowa inicjalizacja losowa (algorytm 3) ( $K = N = 10$ ), inicjalizacja sferyczną metodą  $k$ -średnich (algorytm 4),



Rys. 4.4. Statystyki rozkładu współczynników  $SIR$  macierzy  $\hat{\mathbf{A}}$  estymowanych algorytmem HALS. Przybliżenia początkowe  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  uzyskano za pomocą następujących metod inicjalizacji czynników: 1 – zwykła losowa, 2 – wielostartowa inicjalizacja losowa, 3 – inicjalizacja sferyczną metodą  $k$ -średnich, 4 – NNDSVD, 5 – inicjalizacja bidiagonalizacją Lanczosa, 6 – metoda CHV. Statystyki pokazano dla: (a)  $SNR = 20$  dB, (b)  $SNR = 40$  dB. Dla danych bez zakłóceń szumowych metoda CHV estymuje macierz  $\mathbf{A}$  ze współczynnikiem  $SIR > 200$  dB

metoda NNDSVD [34] (algorytm 6), inicjalizacja bidiagonalizacją Lanczosa (algorytm 8) oraz metoda CHV (algorytm 9) z funkcją  $D$  wyrażoną przez kwadrat odległości euklidesowej.

Ocenę efektywności badanych metod przeprowadzono na podstawie wnioskowania statystycznego z danej liczby prób. Wygenerowano 100 różnych macierzy  $\mathbf{Y}$ , gdzie macierze  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  otrzymywane były według odpowiednich zależności (4.274) i (4.275). Macierze  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  dla każdej próby estymowane były za pomocą badanych metod inicjalizacji czynników. Następnie przeprowadzono faktoryzację każdej macierzy  $\mathbf{Y}$  algorytmem HALS. Dla każdej próby wykonywano 50 iteracji naprzemiennych. Estymowane macierze  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$  oceniano według miar  $SIR$  w (4.272) i (4.273). Statystyki rozkładów wartości współczynników  $SIR$  uzyskanych dla próbek  $\hat{\mathbf{A}}$  przedstawiono na rysunku 4.4. W eksperymencie tym stosowano dane zakłócone zakłóceniami szumowymi o różnej mocy. W tabeli 4.1 zamieszczono wyniki estymacji macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$  uzyskane tylko metodą CHV (bez łączenia z jakimkolwiek algorytmem NMF).

**Wniosek 4.2.** Wyniki przedstawione w tabeli 4.1 pokazują, że dla danych faktoryzowalnych i niezakłóconych, metoda CHV dla  $p = 1$  znajduje macierz  $\mathbf{A}^{(0)}$ , dla której  $SIR > 200$  dB. W takim przypadku nie ma potrzeby stosowania jakichkolwiek algorytmów NMF. Niestety, nawet dla niezbyt silnych zakłóceń szumowych

Tabela 4.1. Średnie wartości współczynnika  $SIR$  dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$ , uzyskane algorytmem CHV dla 100 próbek (bez algorytmu NMF). Parametr  $p$  definiuje liczbę najbliższych sąsiadów. W nawiasach podano odchylenia standardowe

Dane	dokładne	$SIR = 40$ dB	$SIR = 30$ dB	$SIR = 20$ dB
$p = 1$	204,5 (49,95)	21,66 (2,61)	11,98 (2,27)	3,37 (0,92)
$p = 3$	24,98 (18,07)	10,13 (2,74)	7,45 (1,92)	5,02 (0,92)
$p = 10$	8,66 (0,51)	8,17 (0,5)	7,4 (0,44)	6,2 (0,43)

( $SNR = 30$  dB), współczynnik  $SIR$  dla macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$  znacząco maleje i dlatego aproksymację  $\mathbf{A}^{(0)}$  można jedynie traktować jako przybliżenie początkowe dla metody NMF.

Na rysunku 4.4 pokazano, że dla faktoryzacji przybliżonej, dla której  $SNR \geq 40$  dB oraz wystarczająco rzadkiej macierzy  $\mathbf{X}$  (według def. 3.8), metoda CHV prowadzi do najlepszej jakości estymacji macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$ . Jednak jakość ta znacząco zależy od mocy zakłóceń modelu faktoryzacji. Jeśli  $SNR \cong 40$  dB oraz  $p = 1$ , macierz  $\mathbf{A}^{(0)}$  estymowana jest ze współczynnikiem  $SIR \geq 21$  dB (tabela 4.1), a po zastosowaniu algorytmu HALS, współczynnik  $SIR$  dla estymacji faktora  $\mathbf{A}$  zwiększa się do wartości ok. 30 dB. Gdy dane obserwowane są silnie zaburzone ( $SNR \leq 20$  dB), konieczna jest adaptacja parametru  $p$  w algorytmie 9 do określonego poziomu mocy zakłóceń. Ponadto, z rysunku 4.4 wynika, że dla silnych zakłóceń metoda  $k$ -średnich będzie najlepszym wyborem.

#### 4.11.2. Liniowe zadanie najmniejszych kwadratów

W podanym eksperymencie numerycznym oceniano przebieg zbieżności wybranych algorytmów iteracyjnych w liniowym zadaniu najmniejszych kwadratów:

$$\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}\|_F, \quad \text{p.o. } \mathbf{X} \geq \mathbf{0}. \quad (4.276)$$

Testy wykonano, stosując dane wygenerowane z losowych macierzy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . Założono:  $I = 100$ ,  $J = 10$ ,  $T = 1000$  oraz  $\forall i, j : a_{ij} \sim \mathcal{U}(0, 1)$ , czyli  $a_{ij} > 0$ . Macierz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  była również generowana z rozkładu równomiernego. Następnie ok. 50% jej elementów losowo wybranych zastąpiono zerami, tak aby w każdym jej wektorze kolumnowym co najmniej dwa elementy były dodatnie.

Do badań wybrano następujące algorytmy:

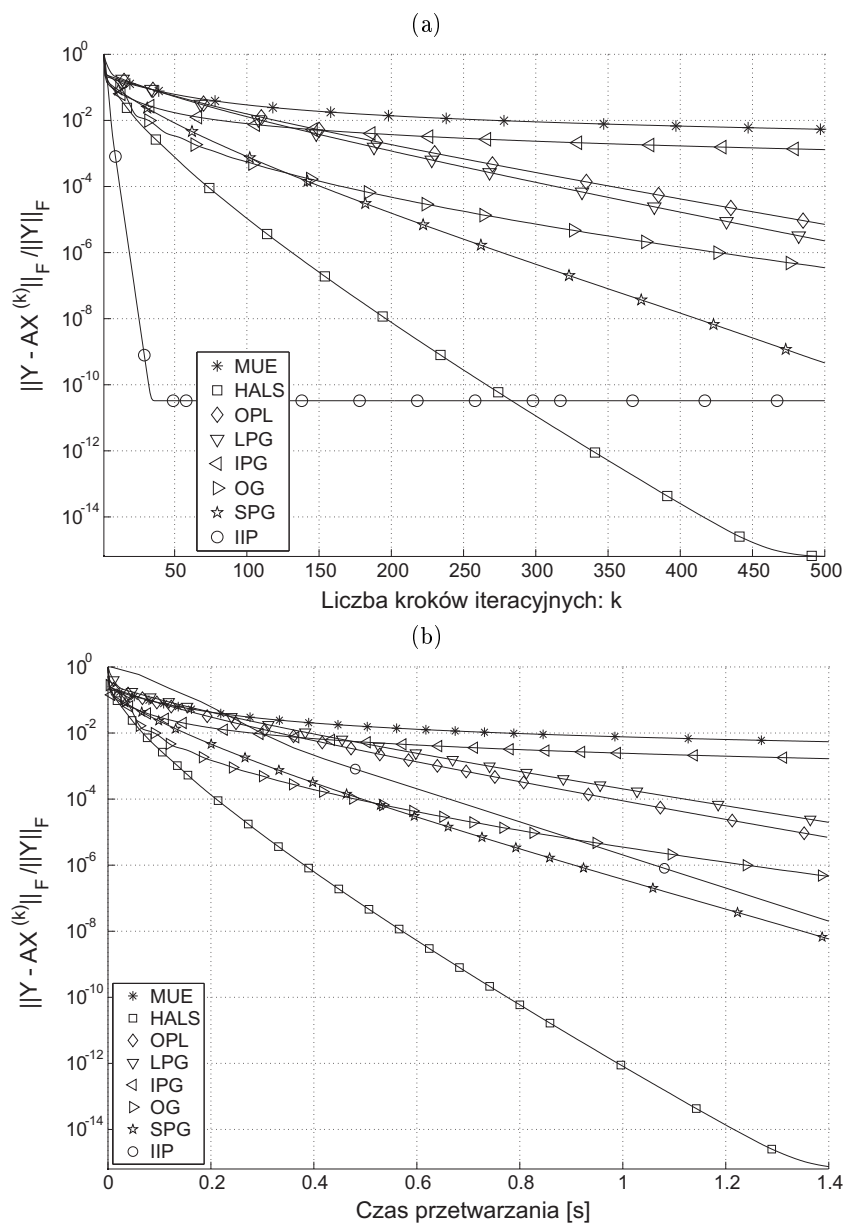
- MUE – algorytm multiplikatywny, wyrażony regułą (4.68) do aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$  (rozd.4.4.1),

- **HALS** – algorytm blokowo-sekwencyjny (rozdz. 4.6.1) do aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$ , przedstawiony za pomocą algorytmu 10,
- **OPL** – skalowany i projekcyjny algorytm Landwebera (rozdz. 4.7.1), wyrażony regułą iteracyjną w (4.174),
- **LPG** – algorytm rzutowania gradientu (rozdz. 4.7.2), zaproponowany przez Lina w [280],
- **IPG** – algorytm gradientów skalowanych, przedstawiony w rozdziale 4.7.3,
- **OG** – algorytm gradientów optymalnych, wyrażony przez iteracje Nesterowa w algorytmie 11 (rozdz. 4.7.4),
- **SPG** – algorytm spektralnego rzutowania gradientu, wyrażony przez algorytm 20 w rozdziale 4.10.5,
- **IIP** – algorytm punktów wewnętrznych, opisany w rozdziale 4.8.

Proces iteracyjny każdego algorytmu inicjalizowano macierzą  $\mathbf{X}^{(0)}$ , którą wygenerowano z rozkładu równomiernego. Macierz ta była taka sama dla każdego algorytmu. W celu oszacowania średnich szybkości zbieżności, eksperyment ten powtarzano 100 krotnie, gdzie za każdym razem losowo dobierano macierze  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{X}$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)}$ . Średnie wartości oraz odchylenia standardowe wskaźników uwarunkowania tych macierzy wynoszą odpowiednio:  $\overline{\text{cond}(\mathbf{A})} = 7,4$ ,  $\sigma(\text{cond}(\mathbf{A})) = 0,4$ ,  $\overline{\text{cond}(\mathbf{X})} = 2,88$ ,  $\sigma(\text{cond}(\mathbf{X})) = 0,053$ .

Szybkości zbieżności procesu iteracyjnego oceniano na podstawie uśrednionych przebiegów znormalizowanej odległości euklidesowej (błędu residualnego):  $\Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)}) = \frac{\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)}\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F}$  w funkcji liczby iteracji  $k$  oraz uśrednionego czasu wykonywania się algorytmów. Przebiegi te pokazano na rysunku 4.5.

**Wniosek 4.3.** Na rysunku 4.5(a) pokazano, że algorytm IIP charakteryzuje się największą szybkością zbieżności, znacznie różniącą się od pozostałych algorytmów. Wniosek ten nie jest zaskakujący, ponieważ jest to algorytm oparty na aktualizacjach wzdłuż kierunku Newtona. W odróżnieniu od prostej, projekcyjnej metody Newtona (rozdz. 4.10), algorytm ten zapewnia monotoniczną zbieżność. Należy jednak zauważyć, że regularyzacja hesjanu i wprowadzenie parametru przesunięcia  $\tau_t^{(k)} > 0$  w (4.196) ograniczają błąd residualny od dołu, co jest widoczne w postaci stagnacji błędu poniżej wartości ok.  $10^{-10}$ . Z drugiej strony, taka stagnacja jest łatwiejsza do wykrycia przez kryteria zatrzymania procesów iteracyjnych i nie ma znaczącego wpływu na finalny wynik aproksymacji rozwiązania. W tym rankingu na kolejnych miejscach znalazły się algorytmy: HALS, SPG, OG, LPG, OPL, IPG i MUE. Algorytm MUE okazał się najwolniejszy, co potwierdza analizę teoretyczną zamieszczoną w rozdziale 4.4.1.



Rys. 4.5. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w liniowym zadaniu najmniejszych kwadratów w funkcji: (a) liczby iteracji, (b) czasu przetwarzania

Należy jednak zauważyć, że efektywna szybkość zbieżności procesu iteracyjnego zależy zarówno od współczynnika zbieżności, jak i kosztu obliczeniowego przypadającego na pojedynczy krok iteracyjny. Współczynnik zbieżności można szacować na podstawie błędu residualnego danych dokładnych, czyli na podstawie rysunku 4.5(a). Złożoność obliczeniowa jest trudniejsza do oszacowania numerycznego, ponieważ zależy od wielu czynników: środowiska obliczeniowego, techniki implementacji oraz rzadkości macierzy. W badaniach tych złożoność obliczeniowa wnioskowana jest na podstawie czasu wykonywania się algorytmów. W konsekwencji, efektywna szybkość zbieżności algorytmów może być szacowana z przebiegów błędu residualnego w funkcji czasu, co pokazane jest na rysunku 4.5(b). W takiej klasyfikacji, zdecydowanie najlepszy okazał się algorytm HALS. Algorytm MUE również w tej klasyfikacji okazał się najgorszy, pomimo że jego złożoność obliczeniowa jest bardzo mała.

Podane testy pokazują, że algorytm HALS i ewentualnie algorytm SPG są najlepszymi kandydatami do efektywnego rozwiązywania liniowego zadania najmniejszych kwadratów. Z kolei, algorytm MUE charakteryzuje się najmniejszą szybkością zbieżności.

### 4.11.3. Testy prostych algorytmów NMF

Mianem prostych algorytmów NMF nazwano takie algorytmy, które naprzemiennie minimalizują nieregularyzowaną funkcję odległości euklidesowej, tzn. bez jakichkolwiek członów kary w funkcji celu. Do testów wybrano algorytmy badane w rozdziale 4.11.2, a także dodatkowo:

- ALS – projekcyjny algorytm najmniejszych kwadratów omówiony w rozdziale 4.5 i wyrażony przez reguły (4.141),
- FC-NNLS – algorytm zmiennych aktywnych wyrażony przez algorytm 13 (zastosowany zarówno do aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ , jak i  $\mathbf{A}$ ),

Testy algorytmów numerycznych stosowanych do rozwiązania problemu nieujemnej faktoryzacji przeprowadzono na pewnego rodzaju platformie testowej, bazującej na algorytmie 2 i wspólnej dla wszystkich badanych algorytmów oraz zadań. Platforma ta wyrażona przez algorytm 21 jest wzorowana strukturą algorytmu LPG [280]. Celem zastosowania takiej platformy testowej było zbudowanie takiego środowiska testowego, w którym testy wykonywane będą w tych samych warunkach, tzn. przy jednakowej inicjalizacji, normalizacji oraz kryteriach zatrzymania.

---

**Algorytm 21. Algorytm NMF stosowanych w testach**

---

**Wejście :**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych,  $n_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji zewnętrznych,  $\varepsilon_{\text{proj}}$  – tolerancja dla kryterium gradientów rzutowanych,  $\varepsilon_{\Psi}$  – tolerancja stagnacji funkcji celu,  $\tilde{c}$  – czynnik skalujący funkcję celu,

**Wyjście :** Estymowane faktory  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$

```

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ;  $n = 0$ ;
2  $\mathbf{G}_A^{(0)} = \nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}^{(0)}, \mathbf{X}^{(0)})$ ,  $\mathbf{G}_X^{(0)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}^{(0)}, \mathbf{X}^{(0)})$ ; // Grad. początk.
3  $\varepsilon_{\text{grad}} = \left\| \left[ (\mathbf{G}_A^{(0)})^T \ \mathbf{G}_X^{(0)} \right] \right\|_F$ ,  $\varepsilon_A^{(0)} = \varepsilon_X^{(0)} = \max \{ 10^{-8}, \varepsilon_{\text{proj}} \} \varepsilon_{\text{grad}}$ ;
4  $f^{(0)} = \tilde{c} \Psi(\mathbf{A}^{(0)}, \mathbf{X}^{(0)})$ ; // Początkowa wartość funkcji celu
5 repeat
6    $n \leftarrow n + 1$ ;
7    $\varepsilon_P^{(n)} = \|\nabla^P \Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)})\|_F$ , gdzie  $\nabla^P \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  jest macierzą gradientów
   rzutowanych, wyrażoną przez (4.44) – (4.46);
8   if  $\varepsilon_P^{(n)} < \varepsilon_{\text{proj}} \varepsilon_{\text{grad}}$  then
9     stop
10     $\left[ (\mathbf{A}^{(n)})^T, (\mathbf{G}_A^{(n)})^T, k_A^{(n)} \right] \leftarrow \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}^T, (\mathbf{X}^{(n-1)})^T, (\mathbf{A}^{(n-1)})^T, \varepsilon_A^{(n)}, k_{\max})$ ;
11    if  $k_A^{(n)} = 1$  then
12       $\varepsilon_A^{(n+1)} = \frac{\varepsilon_A^{(n)}}{10}$ ,
13    else
14       $\varepsilon_A^{(n+1)} = \varepsilon_A^{(n)}$ ,
15       $\mathbf{D}_A^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{a}_1^{(n)}\|_1^{-1}, \dots, \|\mathbf{a}_J^{(n)}\|_1^{-1}\}$ ;
16       $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{D}_A^{(n)}$ ,  $\mathbf{X}^{(n-1)} \leftarrow (\mathbf{D}_A^{(n)})^{-1} \mathbf{X}^{(n-1)}$ ; // Normalizacja
17       $\left[ \mathbf{X}^{(n)}, \mathbf{G}_X^{(n)}, k_X^{(n)} \right] \leftarrow \text{AlgorytmX}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n-1)}, \varepsilon_X^{(n)}, k_{\max})$ ;
18      if  $k_X^{(n)} = 1$  then
19         $\varepsilon_X^{(n+1)} = \frac{\varepsilon_X^{(n)}}{10}$ ,
20      else
21         $\varepsilon_X^{(n+1)} = \varepsilon_X^{(n)}$ ,
22         $\mathbf{D}_X^{(n)} = \text{diag}\{\|\mathbf{x}_1^{(n)}\|_1^{-1}, \dots, \|\mathbf{x}_T^{(n)}\|_1^{-1}\}$ ;
23         $\mathbf{A}^{(n)} \leftarrow \mathbf{A}^{(n)} (\mathbf{D}_X^{(n)})^{-1}$ ,  $\mathbf{X}^{(n)} \leftarrow \mathbf{D}_X^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}$ ; // Normalizacja
24         $f^{(n)} = \tilde{c} \Psi(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{X}^{(n)})$ ; // Funkcja celu
25 until  $|f^{(n-1)} - f^{(n)}| \leq \varepsilon_{\Psi}$  lub  $n > n_{\max}$ ;
```

---

---

**Algorytm 22. AlgorytmX**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}^{(0)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  – przybliżenie początkowe,  
 $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji wewnętrznych,  $\varepsilon$  – tolerancja,  
**Wyjście:**  $\hat{\mathbf{X}}$  – estymowany faktor,  $\mathbf{G}_X^{(k_X)}$  – estymowany gradient,  
 $k_X$  – liczba wykonanych iteracji,

```

1 for  $k = 1, 2, \dots, k_{\max}$  do
2    $\mathbf{X}^{(k)} \leftarrow \text{RegułaX}(\mathbf{Y}, \mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k-1)});$ 
3    $\mathbf{G}_X^{(k)} = \nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{A}, \mathbf{X}^{(k)});$  // Gradient funkcji celu w  $k$ -tym kroku
4    $\varepsilon_P^{(k)} = \|\mathbf{G}_X^P\|_F$ , gdzie  $\mathbf{G}_X^P = [(g_X^P)_{jt}]$  jest macierzą gradientu
   rzutowanego, według zależności (4.46);
5   if  $\varepsilon_P^{(k)} < \varepsilon$  then
6     stop

```

---

Ponadto, przy takich założeniach, porównania badanych algorytmów mogą być łatwo odniesione do algorytmu LPG, który jest uznawany za jeden z najefektywniejszych algorytmów NMF.

W algorytmie 21 wprowadzono potrójne kryterium zatrzymania procesu iteracji zewnętrznych i podwójne dla iteracji wewnętrznych. Oba procesy mogą być przerwane po wykonaniu zadanej liczby iteracji lub gdy spełnione jest kryterium gradientów rzutowanych (4.42), przy zadanym poziomie błędu tolerancji  $\varepsilon$ . Iteracje zewnętrzne mogą być dodatkowo przerwane, gdy spełnione jest kryterium stagnacji funkcji celu w (4.39), przy założonej tolerancji  $\varepsilon_\Psi$ . Stosowanie tak wielu różnych kryteriów stopu ma na celu badanie ich efektywności dla różnych klas danych. Ponadto, kryteria stagnacyjne mogą być nieskuteczne, jeśli przebieg funkcji celu ma charakter fluktuacyjny, np. z powodu niestabilności numerycznych. W algorytmie tym przyjęto też, że aktualizacja obu faktorów odbywa się za pomocą tego samego algorytmu numerycznego, zgodnie z zasadą (4.3). Rozwiązanie zarówno zadania (4.1), jak i zadania (4.2) odbywa się przez iteracyjny AlgorytmX, który wykonuje pewną liczbę iteracji wewnętrznych. Algorytm 22 przedstawia jego realizację, z uwzględnieniem kryterium zatrzymania iteracji wewnętrznych. Sugerując się pracą [280] przyjęto, że jeśli algorytm 22 zatrzymywany jest po wykonaniu pojedynczego kroku iteracyjnego, to tolerancja  $\varepsilon$  zmniejszana jest dziesięciokrotnie, aby w następnym kroku iteracji zewnętrznych umożliwić wykonywanie większej liczby kroków iteracji wewnętrznych. Podobnie jak w [280], założono  $k_{\max} = 10$ . W przypadku algorytmu ALS, kryterium zatrzymywania ite-



racji wewnętrznych nie jest stosowane, ponieważ algorytm ten zawsze wykonuje tylko jeden krok iteracyjny. Jest to pojedynczy krok reguły aktualizacji Newtona. W badaniach algorytmu ALS nie stosowano również kryterium gradientów rzutowanych ze względu na konieczność wyznaczania gradientów funkcji celu w każdym kroku iteracyjnym, co znacząco zwiększa złożoność obliczeniową.

W testach przyjęto normalizację czynników do jednostkowej normy  $l_1$ . Normalizację przeprowadzono według zależności w (3.2) i (3.4).

Podane testy wykonano zarówno dla faktoryzowalnych, jak i nefaktoryzowalnych zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy. Macierze  $\mathbf{Y}$  w zadaniach faktoryzowalnych utworzono na podstawie modelu (1.3), stosując dane wygenerowane z losowych macierzy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , gdzie  $\forall j, t : x_{jt} = \max\{0, \xi_{jt}\}$  oraz  $\xi_{jt} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ , zatem rzadkość( $\mathbf{X}$ ) = 50%. Badano zadania o różnym stopniu rzadkości fatora  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ . Jeśli rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 0%, to  $\forall i, j : a_{ij} \sim \mathcal{U}(0, 1)$ . W przypadku gdy rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%,  $\forall i, j : a_{ij} = \max\{0, \xi_{ij}^{(A)}\}$  oraz  $\xi_{ij}^{(A)} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . W pozostałych przypadkach rzadkości,  $\xi_{ij}^{(A)} \sim \mathcal{N}(\mu_A, 1)$ , gdzie  $\mu_A$  dobierano dla określonego stopnia rzadkości macierzy  $\mathbf{A}$ . Elementy macierzy zaburzeń  $\mathbf{N} = [n_{it}] \in \mathbb{R}^{I \times T}$  generowane są z rozkładu gaussowskiego  $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$  o wariancji  $\sigma^2$  dobieranej w taki sposób, aby uzyskać założoną wartość współczynnika  $SNR$ . Ujemne elementy macierzy  $\mathbf{Y}$  zastąpiono wartością zerową. Do badania zadania nefaktoryzowalnego wykorzystano obrazy twarzy z bazy ORL.

Badania algorytmów dla zadań faktoryzowalnych przeprowadzono dla różnych typów danych, różniących się rozmiarem, liczbą estymowanych komponentów, stopniem rzadkości estymowanych komponentów oraz mocą zaburzeń szumowych modelu. Krótko scharakteryzowano badane zadania:

- **Zadanie A:**  $I = 100, T = 1000, J = 10$ ; rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 0%;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń).
- **Zadanie B:**  $I = 100, T = 1000, J = 10$ ; rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 0%,  $SNR = 20$  dB.
- **Zadanie C:**  $I = 100, T = 1000, J = 10$ ; rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń).
- **Zadanie D:**  $I = 100, T = 1000, J = 10$ ; rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $SNR = [0, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40]$  dB.
- **Zadanie E:**  $I = 100, T = 1000, J = 10$ ;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń); rzadkość( $\mathbf{A}$ ) =  $[0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90]\%$ .
- **Zadanie F:**  $I = 100, T = 1000, J = [5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50]$ ; rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń).
- **Zadanie G:**  $I = 30$ ; Pozostałe parametry jak w zadaniu A.
- **Zadanie H:**  $I = 30$ ; Pozostałe parametry jak w zadaniu B.

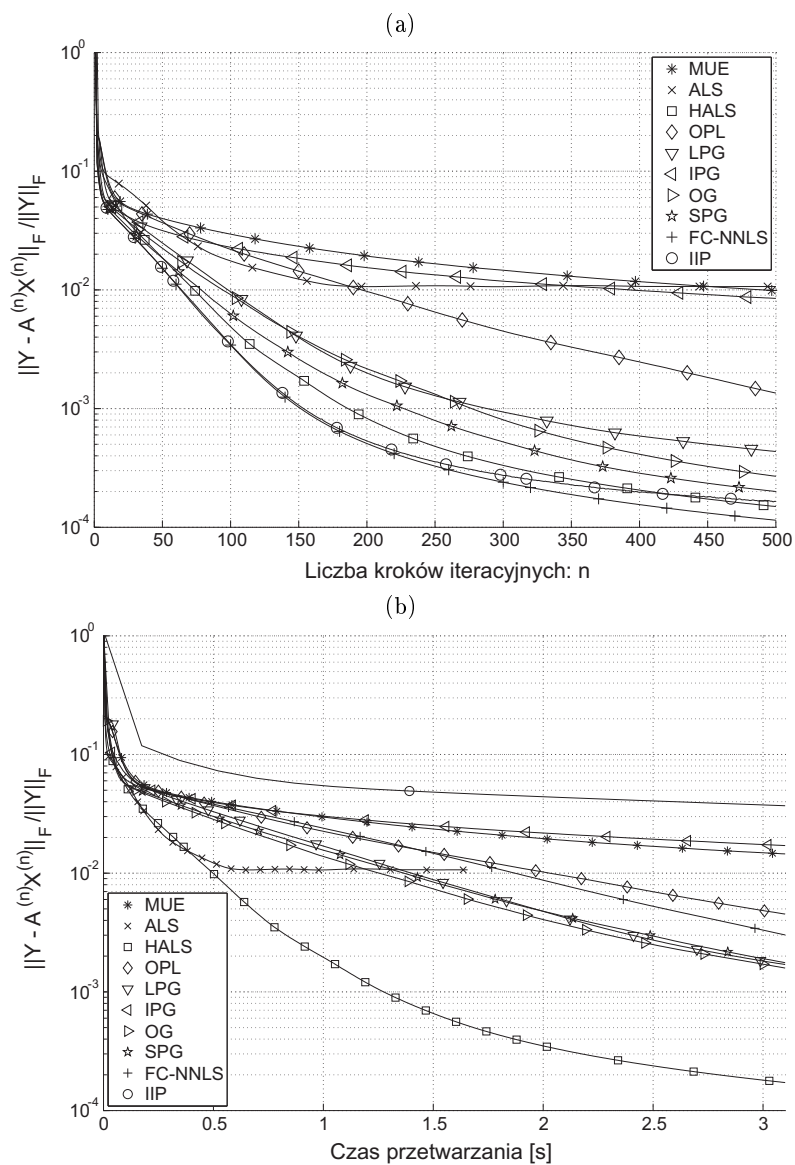
- **Zadanie I:**  $I = T = 2000$ ,  $J = 100$ , rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń).
- **Zadanie J:**  $I = T = 2000$ ,  $J = 100$ , rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $SNR = 20$  dB.
- **Zadanie K:**  $I = T = 20000$ ,  $J = 500$ , rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $\mathbf{N} = \mathbf{0}$  (model bez zakłóceń).
- **Zadanie L:**  $I = T = 20000$ ,  $J = 500$ , rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = 50%;  $SNR = 20$  dB.

W wielu zadaniach macierz  $\mathbf{A}$  jest dodatnia, a zatem faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y}$  nie jest jednoznaczna. Badane algorytmy mogą zatrzymywać się w niewłaściwych lokalnych minimach funkcji celu. Aby minimalizować problem lokalnej zbieżności, eksperyment powtarzano 100-krotnie dla różnych realizacji macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  oraz różnych przybliżeń początkowych  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  (rozd. 4.1.1). Wyniki uzyskane ze wszystkich prób uśredniono. Estymowane faktory  $\hat{\mathbf{A}}$  i  $\hat{\mathbf{X}}$  oceniano, stosując miary  $SIR$  podane w (4.272) i (4.273).

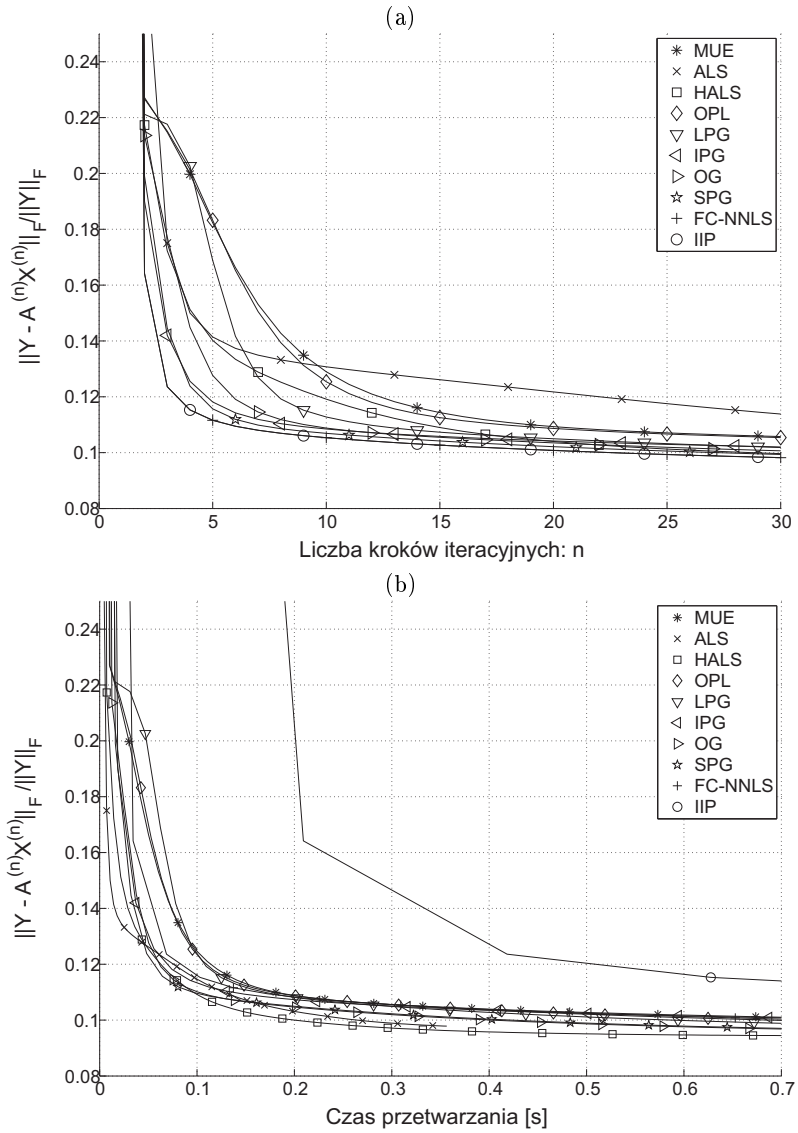
Szybkość zbieżności procesów aktualizacji czynników oceniono na podstawie przebiegu znormalizowanego błędu residualnego:  $\frac{\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F}$  w funkcji liczby iteracji naprzemiennych. Krzywe błędów otrzymane dla zadań A, B i C pokazano odpowiednio na rysunkach 4.6(a)–4.8(a). Przebiegi znormalizowanego błędu residualnego w funkcji czasu wykonywania się algorytmów przedstawiono na rysunkach 4.6(b)–4.8(b). Rezultaty pokazane na rysunkach 4.6–4.8 uzyskano dla następujących założeń:  $n_{\max} = 500$ ,  $\varepsilon_{\text{proj}} < 10^{-8}$ ,  $\varepsilon_{\Psi} = 10^{-15}$ .

Złożoność obliczeniową algorytmów można także oszacować zgrubnie na podstawie uśrednionego czasu wykonywania się zadanej liczby iteracji zewnętrznych. Algorytmy były kodowane w programie Matlab 2008a i wykonywane na komputerze z dwoma procesorami CPU X5650 Xeon (łącznie 12 rdzeni), 32 nm, 64 bit, RAM 64 GB. Czas wykonywania się 500 iteracji zewnętrznych w zadaniu A za pomocą algorytmów: MUE, ALS, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP wynosił odpowiednio: 4,03; 1,2; 2,92; 4,93; 6,21; 8,41; 4,96; 6,71; 11,53; 64,98 sekund. W wartościach tych zawarto również czas oceny warunków zatrzymania procesów iteracji wewnętrznych, jak i zewnętrznych.

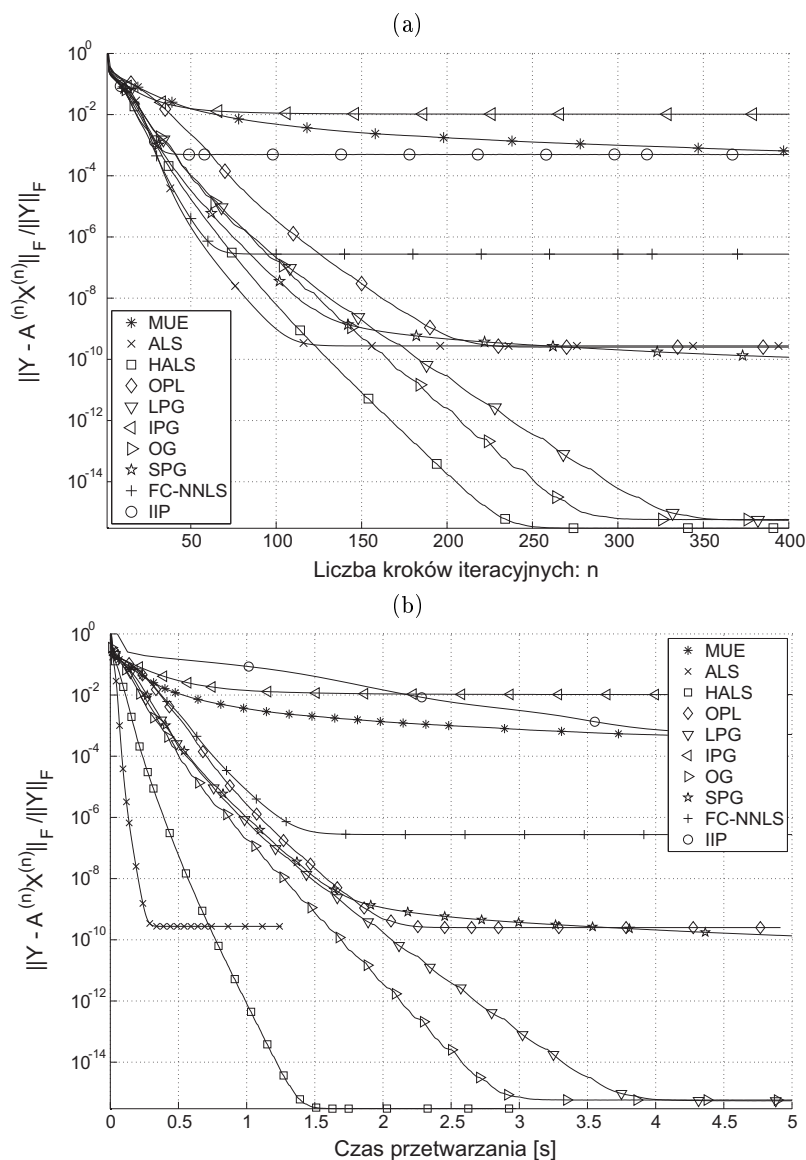
**Wniosek 4.4.** Z rysunku 4.6(a) wynika, że algorytm FC-NNLS najgłębiej eksploatuje funkcję celu po wykonaniu 500 kroków iteracyjnych. Jednak uwzględniając czas wykonywania się iteracji zewnętrznych, najlepszy okazuje się algorytm HALS – rysunek 4.6(b). W początkowej fazie aktualizacji, algorytm ALS wykazuje się nieznacznie większą efektywnością niż algorytm HALS, jednak po ok. 0,5 sekundy zatrzymuje się w punkcie płytkiego lokalnego minimum. Efektywność rozumiana jest jako szybkość zbieżności (gradient błędu residualnego w danej chwili) względem czasu wykonywania się algorytmu. Ranking efektywności algorytmów NMF



Rys. 4.6. Znormalizowany błąd residualny:  $\|Y - A^{(n)} X^{(n)}\|_F / \|Y\|_F$  w zadaniu A w funkcji:  
 (a) liczby iteracji zewnętrznych, (b) czasu przetwarzania. Dla  $n = 500$  uzyskano  $SIR^{(X)} =$   
 19,9; 24,33; 36,88; 32,1; 34,02; 21,28; 35,45; 35,6; 37,29; 32,95 dB, odpowiednio dla  
 algorytmów: MUE, ALS, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP



Rys. 4.7. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w zadaniu B w funkcji:  
 (a) liczby iteracji zewnętrznych, (b) czasu przetwarzania. Dla  $n = 500$  uzyskano  $SIR^{(X)} =$   
 15,33; 15,04; 17,64; 17,51; 17,62; 16,01; 17,64; 17,64; 17,64; 17,64 dB, odpowiednio dla  
 algorytmów: MUE, ALS, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP



Rys. 4.8. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w zadaniu C w funkcji:  
 (a) liczby iteracji zewnętrznych, (b) czasu przetwarzania. Dla  $n = 500$  uzyskano  $SIR^{(X)} =$   
 62,08; 195; 308,87; 191,7; 300,6; 40,46; 299,6; 198,2; 124,7; 62,35 dB, odpowiednio dla  
 algorytmów: MUE, ALS, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP

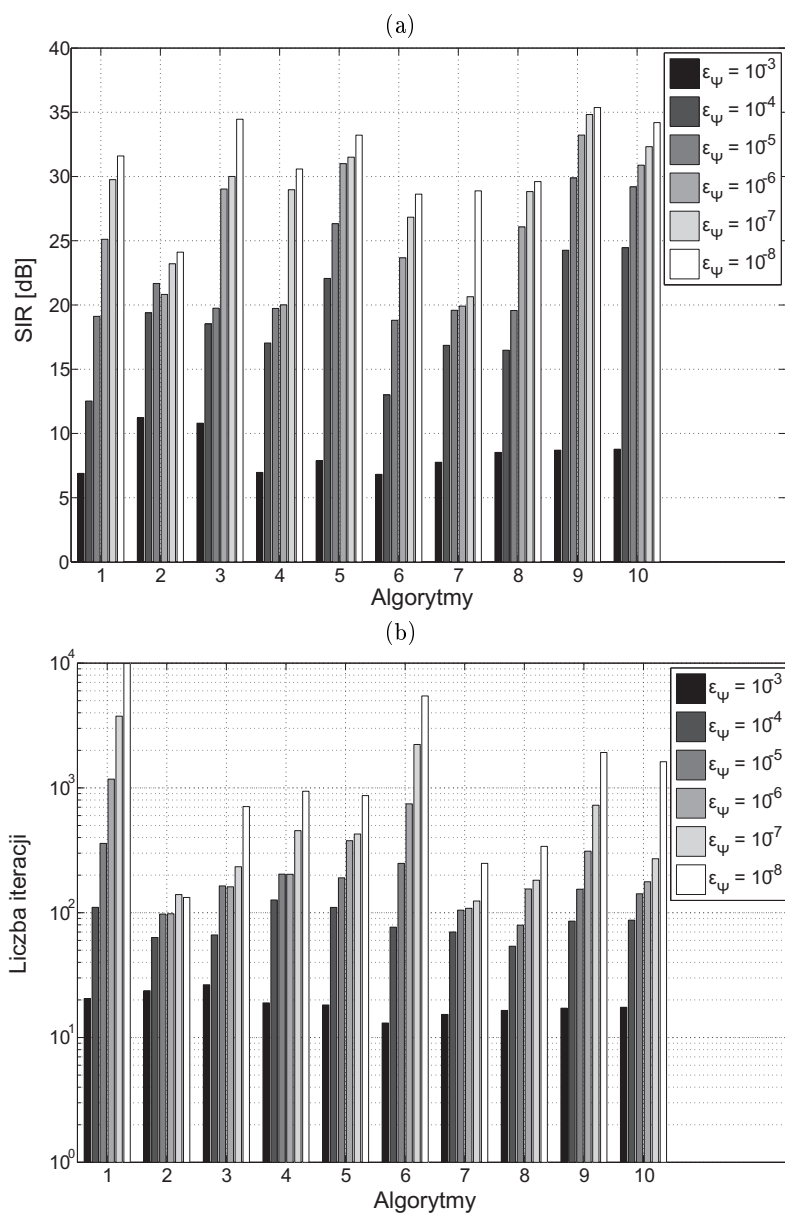
otrzymany w zadaniu A jest podobny do rankingu przedstawionego we wniosku 4.3. Jednak algorytmy NMF znacznie płycej minimalizują funkcję celu niż algorytmy w liniowym zadaniu najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. Efekt ten może również wynikać z ograniczenia eksploracji przez naprzemienne skalowanie estymowanych komponentów.

Zadanie B pokazuje, że jeśli dane obserwowane podlegają zaburzeniom, większość badanych algorytmów NMF zachowuje się podobnie. Z rysunku 4.7(a) można wnioskować, że już po kilkudziesięciu iteracjach procesy iteracyjne zbiegają się do tego samego punktu. Na rysunku 4.7(b) pokazano, że również i tym razem algorytm HALS charakteryzuje się największą efektywnością, jednak w tym przypadku różnice w efektywności algorytmów nie są znaczące. Po 500 krokach iteracyjnych, aż 7 algorytmów pozwala uzyskać jakość estymowanych czynników na porównywalnym poziomie. Nieznacznie gorsze wyniki (wartości  $SIR^{(X)}$ ) uzyskano algorytmami: MUE, ALS i IPG.

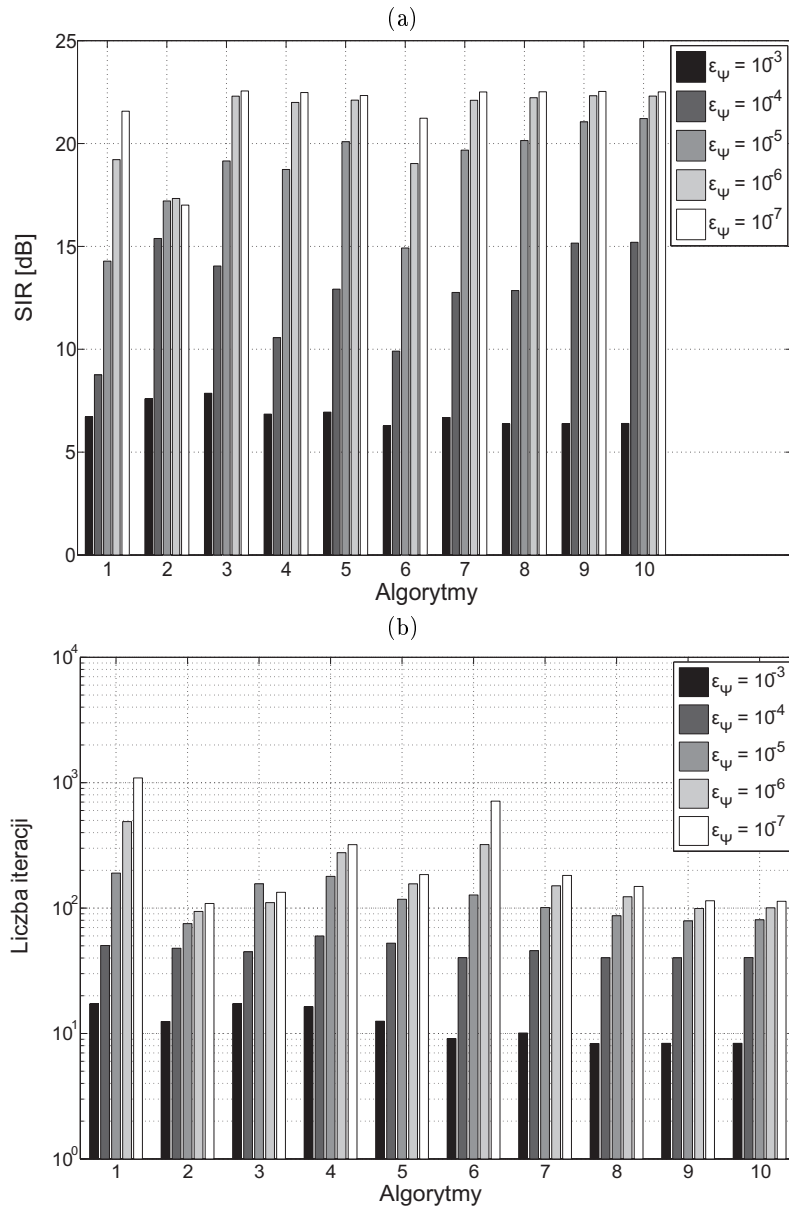
W zadaniu C algorytm HALS zbiega się do najgłębszego minimum w czasie najkrótszym ze wszystkich pozostałych algorytmów, co jest łatwo zauważalne na rysunku 4.8. Podobnie jak w poprzednich zadaniach, algorytm ALS zbiega się początkowo szybciej niż HALS, jednak po ok. 120 iteracjach zatrzymuje się w płytszym lokalnym minimum funkcji celu. Algorytm ALS generalnie charakteryzuje się niemonotoniczną zbieżnością. Zjawisko to jest delikatnie zauważalne na rysunku 4.6. Ponadto, z przeprowadzonych badań wynika, że pierwszy krok iteracyjny algorytmu ALS bardzo często zwiększa funkcję celu, a minimalizacja następuje dopiero w kolejnych krokach.

Z testów przeprowadzonych dla zadań A, B i C wynika, że algorytm HALS jest najefektywniejszy. Kolejne miejsca zajmują algorytmy OG, LPG i SPG. Algorytm FC-NNLS umożliwia uzyskanie najlepszej jakości estymowanych czynników, jednak przy większym koszcie obliczeniowym. Najslabiej w rankingu efektywności wypadły algorytmy MUE i IPG. Algorytm IIP estymuje czynniki z podobną jakością jak FC-NNLS, jednak jego koszt obliczeniowy jest znacząco większy od pozostałych algorytmów.

Na rysunku 4.9 przedstawiono odpowiednio uśrednione wartości współczynnika  $SIR^{(X)}$  oraz uśrednione liczby iteracji zewnętrznych jakie uzyskano poszczególnymi algorytmami, przy zmieniającej się wartości tolerancji stagnacji funkcji celu  $\varepsilon_\psi$  dla danych z zadania A. Analogicznie wyniki zilustrowano na rysunku 4.10 dla zadania B. Stosując dane z zadania A, zbadano też jaki jest wpływ tolerancji kryterium gradientów rzutowanych  $\varepsilon_{proj}$  w poszczególnych algorytmach na jakość estymowanych czynników oraz liczbę iteracji zewnętrznych. Wyniki pokazano na rysunku 4.11.

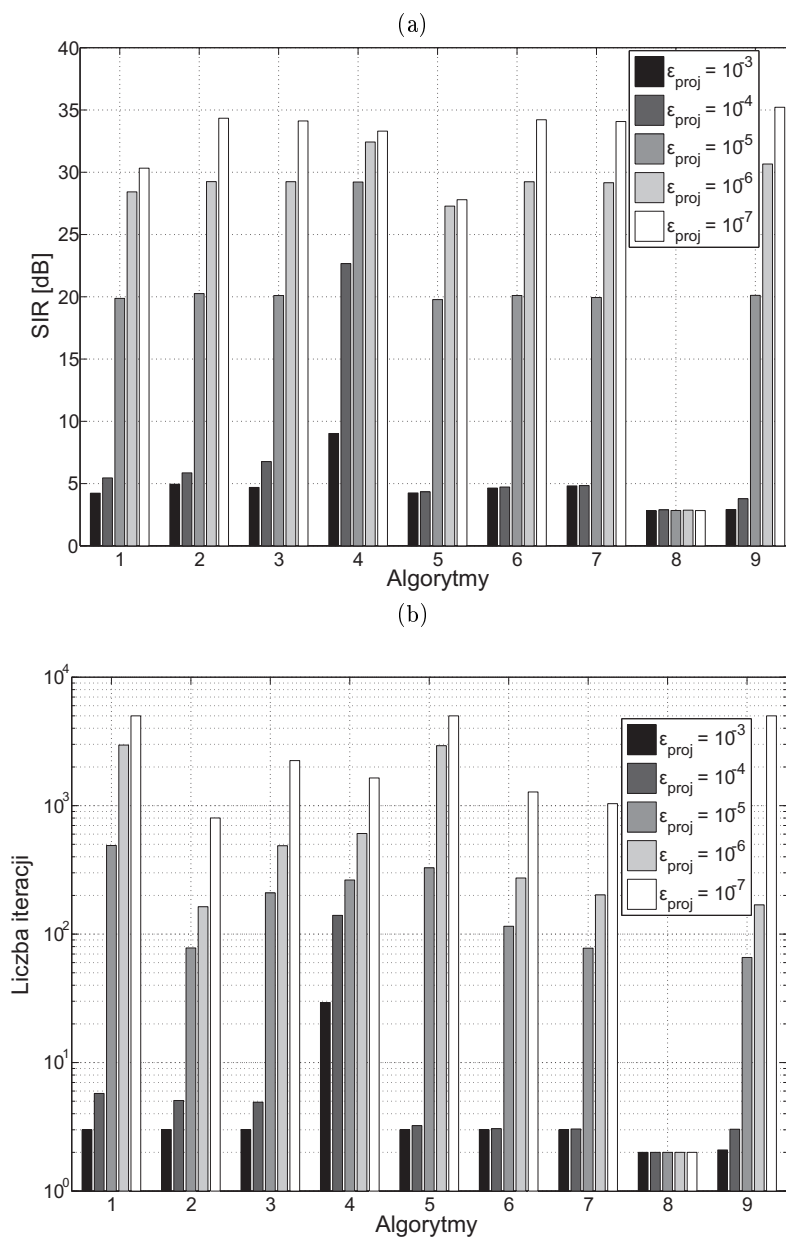


Rys. 4.9. Zadanie A – wpływ tolerancji stagnacji funkcji celu  $\epsilon_\psi$  na: (a) uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(X)}$ , (b) uśrednione liczby iteracji zewnętrznych. Algorytmy: 1 – MUE, 2 – ALS, 3 – HALS, 4 – OPL, 5 – LPG, 6 – IPG, 7 – OG, 8 – SPG, 9 – FC-NNLS, 10 – IIP



Rys. 4.10. Zadanie B – wpływ tolerancji stagnacji funkcji celu  $\epsilon_\psi$  na: (a) uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(X)}$ , (b) uśrednione liczby iteracji zewnętrznych. Algorytmy: 1 – MUE, 2 – ALS, 3 – HALS, 4 – OPL, 5 – LPG, 6 – IPG, 7 – OG, 8 – SPG, 9 – FC-NNLS, 10 – IIP



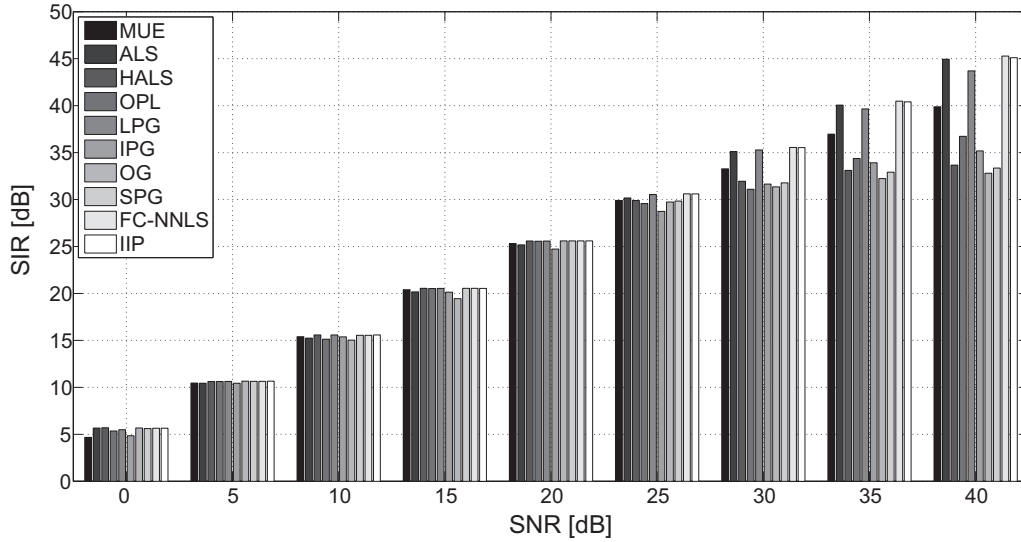


Rys. 4.11. Zadanie A – wpływ tolerancji kryterium gradientów rzutowanych  $\epsilon_{proj}$  na:  
 (a) uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(X)}$ , (b) uśrednione liczby iteracji zewnętrznych.  
 Algorytmy: 1 – MUE, 2 – HALS, 3 – OPL, 4 – LPG, 5 – IPG, 6 – OG, 7 – SPG,  
 8 – FC-NNLS, 9 – IIP

**Wniosek 4.5.** Z rysunku 4.9 wynika, że kryterium stagnacji funkcji celu przy ustalonej wartości tolerancji  $\varepsilon_\psi$  nie prowadzi do uzyskania tej samej jakości estymowanych czynników za pomocą różnych algorytmów. Poza algorytmem ALS zależność współczynnika  $SIR^{(X)}$  od parametru  $\varepsilon_\psi$  jest monotonicznie malejąca. Z rysunku 4.9(a) można wnioskować, że jeśli  $\varepsilon_\psi < 10^{-4}$  dla zadania A, to  $SIR^{(X)} > 15$  dB, co zwykle oznacza akceptowalną jakość estymacji. Jeśli obserwowane dane są dokładne (zadanie A), funkcja celu może osiągnąć bardzo głębokie minimum (co jest widoczne na rys. 4.6 i rys. 4.8), a zatem sensowne jest, aby parametr  $\varepsilon_\psi$  przyjmował małe wartości. Z rysunku 4.9(a) wynika, że zmiana wartości tolerancji  $\varepsilon_\psi$  z  $10^{-7}$  na  $10^{-8}$  w algorytmach HALS i OG spowodowała znaczny przyrost współczynnika  $SIR^{(X)}$ . Z kolei, na rysunku 4.9(b) pokazano, że zmiana ta odbyła się w wyniku prawie dwukrotnego wzrostu liczby iteracji w algorytmie OG i ponad trzykrotnego w algorytmie HALS. Uwzględniając jednak niski koszt obliczeniowy obu algorytmów, rozsądne wydaje się dobieranie małych wartości tolerancji  $\varepsilon_\psi$  w obu algorytmach. Rysunek 4.9 dowodzi również, że w zadaniu A zadowalającą jakość estymowanych czynników można uzyskać nawet algorytmami MUE i IPG, kosztem ogromnej liczby iteracji (ponad 5000).

Z rysunku 4.10(a) wynika, że dla danych zaburzonych (zadanie B) wszystkie algorytmy poza ALS umożliwiają uzyskanie podobnej jakości estymacji dla  $\varepsilon_\psi = 10^{-7}$ . Algorytm ALS nie radzi sobie z danymi zaburzonymi. Większość badanych algorytmów nie poprawia znacząco jakości estymowanych czynników przy zmianie tolerancji z  $10^{-6}$  na  $10^{-7}$ . Z rysunku 4.10(b) można wnioskować, że algorytmy ALS, HALS, LPG, OG, SPG, FC-NNLS i IIP wykonują poniżej 200 iteracji dla  $\varepsilon_\psi = 10^{-7}$ . Dla większości algorytmów zadowalającą jakość estymacji uzyskuje się już poniżej 100 iteracji.

Rysunek 4.11(a) potwierdza przypuszczenie, że kryterium gradientów rzutowanych w połączeniu z algorytmami projekcyjnymi najlepiej określa jakość estymowanych czynników. Dla  $\varepsilon_{\text{proj}} = 10^{-5}$ , wszystkie algorytmy poza LPG i FC-NNLS umożliwiają uzyskanie czynników o podobnej jakości. Parameter  $\varepsilon_{\text{proj}}$  nie może jednak mieć zbyt dużej wartości. Jeśli  $\varepsilon_{\text{proj}} \geq 10^{-4}$ , żaden z badanych algorytmów nie pozwala uzyskać akceptowalnej jakości estymacji. Ponadto, kryterium to nie działa poprawnie z algorytmem FC-NNLS dla żadnej z testowanej wartości tolerancji  $\varepsilon_{\text{proj}}$ . Jest to spowodowane zastosowaniem innego kryterium zatrzymania iteracji wewnętrznych w algorytmie FC-NNLS niż w algorytmie 22. W każdym kroku iteracji zewnętrznych kryterium stopu w FC-NNLS dość dokładnie spełnia warunki *KKT*. Dlatego też parameter  $\varepsilon_P^{(k)}$  w algorytmie 22 przyjmuje bardzo małe wartości już w początkowych krokach iteracji zewnętrznych. Jak pokazano



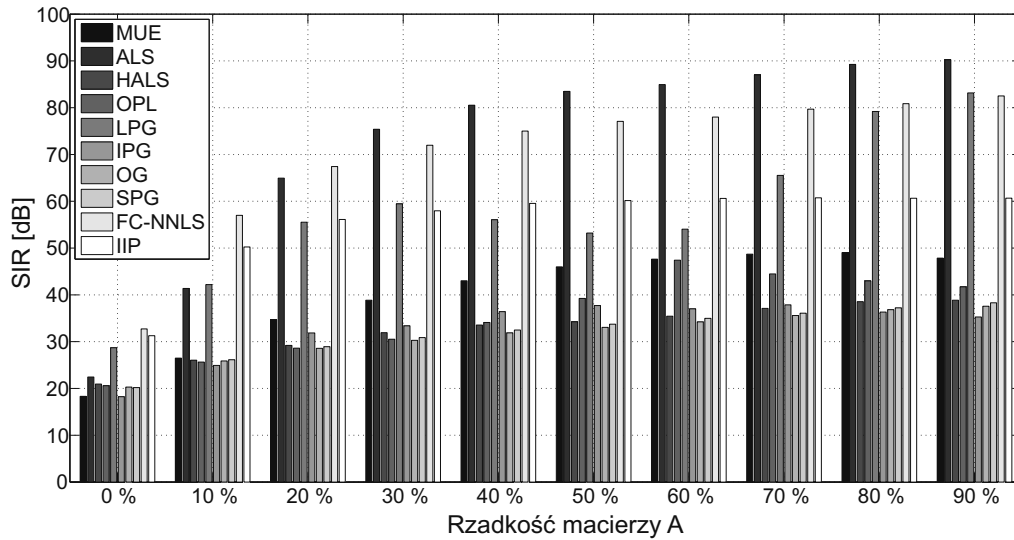
Rys. 4.12. Uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(X)}$  dla różnych wartości współczynnika  $SNR$  w zadaniu D

na rysunku. 4.11(b) prowadzi to do przerywania procesu aktualizacji faktorów już w drugim kroku iteracyjnym.

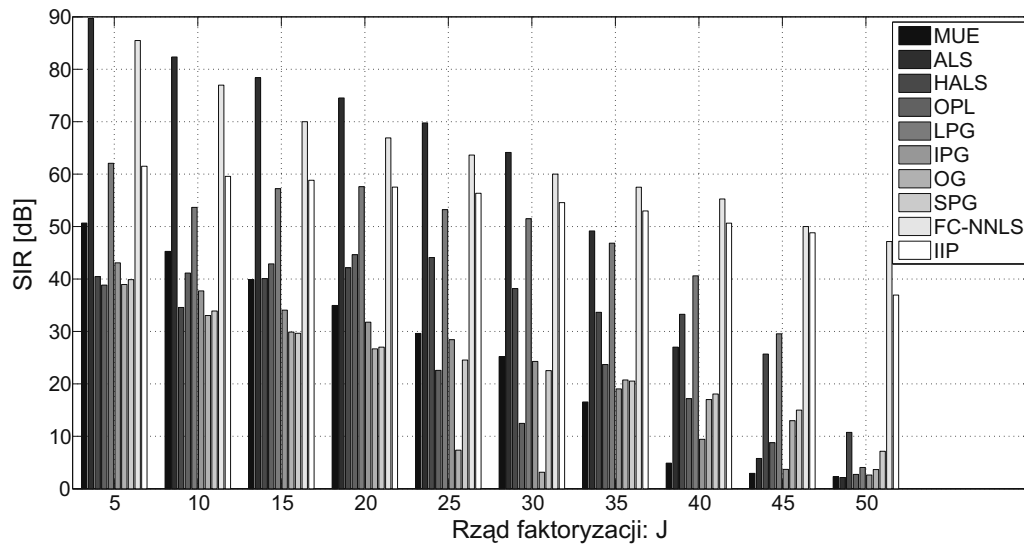
W zadaniach D, E i F iteracje zewnętrzne są przerywane, gdy spełnione jest kryterium stagnacji funkcji celu dla  $\varepsilon_\psi = 10^{-5}$ . Pozostałe parametry dobrano tak, aby nie powodowały wcześniejszego zatrzymania procesu iteracyjnego.

W zadaniu D badano wpływ mocy zakłóceń szumowych na jakość estymowanych faktorów. Jakość tę, wyrażoną miarą uśrednionego współczynnika  $SIR^{(X)}$ , zilustrowano na rysunku 4.12. W zadaniu E oceniano zależność współczynnika  $SIR^{(X)}$  od stopnia rzadkości macierzy  $\mathbf{A}$ . Wyniki badań przedstawiono na rysunku 4.13. Zadanie F pokazuje jaki jest wpływ rzędu faktoryzacji na jakość estymacji faktorów  $\mathbf{X}$ . Zależność uśrednionego współczynnika  $SIR^{(X)}$  od rzędu faktoryzacji  $J$  pokazano na rysunku 4.14.

**Wniosek 4.6.** Na rysunku 4.12 pokazano, że zależność jakości estymacji od współczynnika  $SNR$  w zadaniu D jest niemal liniowa dla  $SNR \in [5; 25]$  [dB]. W tym zakresie współczynnika  $SNR$ , wszystkie badane algorytmy wykazują się podobną jakością estymacji, a jedynie różną efektywnością, co wynika też z rysunku 4.7(a). Znaczące różnice w jakości estymowanych komponentów dla zadania D występują dopiero przy bardzo słabych zaburzeniach modelu, tzn. dla  $SNR \geq 30$  dB.



Rys. 4.13. Uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(x)}$  dla różnych wartości współczynnika rzadkości macierzy  $A$  w zadaniu E



Rys. 4.14. Uśrednione wartości współczynników  $SIR^{(x)}$  dla różnych wartości rzędu faktoryzacji  $J$  w zadaniu F

**Wniosek 4.7.** Przedstawiony rysunek 4.13 dowodzi, że wybór algorytmu do rozwiązania zadania E ma ogromne znaczenie. Dla zadań bardzo rzadkich najlepszą jakość estymacji otrzymano za pomocą algorytmów: ALS, LPG i FC-NNLS. Dość dobre rezultaty uzyskuje się algorytmem IIP. W tych algorytmach nawet 10-procentowa rzadkość macierzy  $\mathbf{A}$  przy 50-procentowej rzadkości macierzy  $\mathbf{X}$  ma istotne znaczenie. W pozostałych algorytmach wzrost rzadkości macierzy  $\mathbf{A}$  nie wpływa znacząco na poprawę jakości estymacji.

**Wniosek 4.8.** Z rysunku 4.14 wynika, że wszystkie algorytmy umożliwiają uzyskanie bardzo dobrej jakości estymacji w zadaniu F, jeśli nadmiarowość obserwacji jest znacząca (stosunek  $I/J$  ma dużą wartość dla  $T \gg \max\{I, J\}$ ). Jeśli jednak rząd faktoryzacji rośnie, przy niezmiennych się wymiarach macierzy obserwacji, jakość estymacji silnie zależy od zastosowanego algorytmu. Przy słabej nadmiarowości ( $\frac{I}{J} = 2$ ) tylko algorytmy FC-NNLS i IIP dają satysfakcjonujące rezultaty. Gdy jednak  $J = 45$ , akceptowalną jakość estymacji uzyskuje się już algorytmami HALS i LPG. Nie są to jednak duże wartości  $SIR^{(X)}$  tak jak otrzymane algorytmem FC-NNLS.

W tabeli 4.2 zamieszczono uśrednione współczynniki  $SIR$  oceny jakości estymacji faktora  $\mathbf{X}$  w zadaniach C, I, J, K i L. Ponieważ rzadkość( $\mathbf{A}$ ) = rzadkość( $\mathbf{X}$ ) = 50%, a więc z dużym prawdopodobieństwem zadania te mają jednoznaczną nieujemną faktoryzację. Rozmiary zadań K i L są duże (pod kątem modelu NMF), a zatem do estymacji faktorów wybrano tylko najszybsze i najefektywniejsze algorytmy: ALS i HALS. W każdym przypadku proces iteracyjny zatrzymywano po wykonaniu 500 iteracji zewnętrznych. Zgodnie z wcześniejszymi założeniami i algorytmem 22, HALS może wykonywać nawet 10 iteracji wewnętrznych w każdym kroku naprzemiennym. Tabela 4.2 zawiera również czas realizacji zadań.

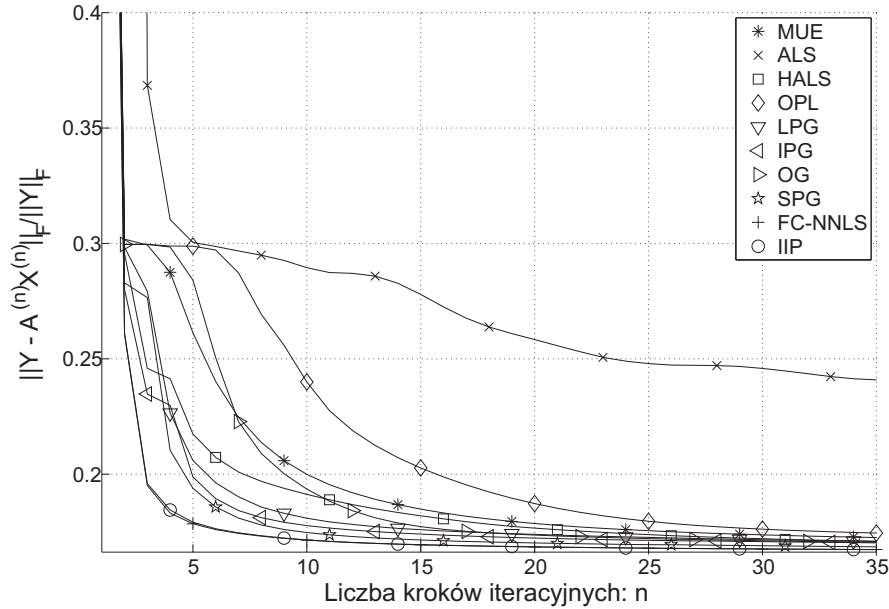
Tabela 4.2. Uśrednione współczynniki  $SIR$  do oceny jakości estymacji faktora  $\mathbf{X}$  i czas wykonywania się 500 iteracji algorytmami ALS i HALS dla zadań C, I, J, K i L

Zadanie		C	I	J	K	L
ALS	$SIR$ [dB]	195,2	180,2	20,35	162,3	16,8
	Czas [s]	2,27	84,51	86,8	13896	13904
HALS	$SIR$ [dB]	299,1	171,9	20,69	72,27	16,95
	Czas [s]	7,4	498,4	481,1	48672	48456

**Wniosek 4.9.** Z tabeli 4.2 wynika, że czas wykonywania się algorytmów rośnie wykładniczo z liczbą komponentów ukrytych  $J$ . Można także wnioskować, że jeśli zadania mają jednoznaczną nieujemną faktoryzację (faktory wystarczająco rzadkie), wówczas metodę NMF można stosować nawet do faktoryzacji bardzo dużych zadań i z dużą liczbą komponentów ukrytych ( $J = 500$  w zadaniach K i L). Jeśli w zadaniach tych dane są dokładne (bez zaburzeń), symulacje pokazują, że lepsze wyniki uzyskuje się algorytmem ALS, chociaż możliwa jest niemonotoniczna zbieżność. Taki charakter zbieżności nie jest jednak dużym utrudnieniem w praktyce. W badaniach zaobserwowano, że najczęściej wzrost funkcji celu następuje tylko po pierwszym kroku iteracyjnym algorytmu ALS, a następnie utrzymywany jest trend malejący. Dla danych zaburzonych, trochę lepsze wyniki uzyskuje się algorytmem HALS.

Badania algorytmów NMF stosowanych do aproksymacji czynników dla zadania niefaktoryzowalnego przeprowadzono na podstawie obrazów z bazy ORL. Wybrano po 8 obrazów z każdej klasy, co sumarycznie stanowi 320 obrazów, każdy o rozdzielczości 112 na 92 pikseli. Po zwektoryzowaniu każdego obrazu i zapisaniu go jako wektora kolumnowego, uzyskano macierz  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{10304 \times 320}$ . Do określenia rzędu faktoryzacji zastosowano metodę DIFFIT, omówioną w rozdziale 1.3. Stosując kryterium stagnacji funkcji celu oraz inicjalizację losową powtarzaną 100-krotnie, uzyskano następujące wyniki estymacji rzędu faktoryzacji:  $\hat{J} = 22, 28, 19, 34, 25, 37, 26, 36, 28$ , odpowiednio algorytmami: MUE, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP. Mediana próbek wskazuje na optymalny rząd faktoryzacji wynoszący 28. Tak więc, przyjmując  $J = 28$ , wyznaczono uśrednione krzywe znormalizowanego błędu residualnego, które przedstawiono na rysunku 4.15.

**Wniosek 4.10.** Krzywe błędu pokazane na rysunku 4.15 zachowują się bardzo podobnie jak te, które pokazano na rysunku 4.7. Można więc wnioskować, że zadania niefaktoryzowalne należy traktować podobnie, pod względem zachowania zbieżności algorytmów, jak zadania faktoryzowalne z dość silnymi zaburzeniami modelu. Zarówno w zadaniu niefaktoryzowalnym, jak i w zadaniu B, najgłębszą minimalizację funkcji celu uzyskuje się algorytmami FC-NNLS i IIP po kilkunastu iteracjach. Najgorzej wypada algorytm ALS. Zwiększając jednak liczbę iteracji do ok. 100, można zauważyć wyraźną stagnację błędu na podobnym poziomie we wszystkich algorytmach. Bez uwzględniania informacji apriorycznej, cechy estymowane badanymi algorytmami będą podobne, jeśli estymacja będzie wykonana z wystarczającą liczbą iteracji. Jeśli istotny jest czas faktoryzacji, wybór algorytmu do zadania niefaktoryzowalnego powinien uwzględniać efektywność estymacji oraz łatwość implementacji członów wymuszających określone cechy czynników.



Rys. 4.15. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  dla estymacji komponentów ukrytych z obrazów bazy ORL w funkcji liczby iteracji zewnętrznych, uzyskany za pomocą algorytmów: MUE, ALS, HALS, OPL, LPG, IPG, OG, SPG, FC-NNLS, IIP

#### 4.11.4. Testy zregularyzowanych algorytmów NMF

Zregularyzowanymi algorytmami NMF nazwano takie algorytmy, które minimalizują funkcję odległości euklidesowej, rozszerzoną o stałe lub zanikające człony kary. Badano człony wymuszające w estymowanych faktorach odpowiedni poziom rzadkości (rozd. 3.2.1) lub gładkości (rozd. 3.2.2). Wyniki badań przedstawiono dla następujących zadań faktoryzowalnych: A, B, G, H, I i J (rozd. 4.11.3). W zadaniach A, B, G i H macierz  $\mathbf{A}$  jest gęsta, a macierz  $\mathbf{X}$  jest rzadka w 50 procentach. Człony kary powinny wymuszać gładkość komponentów w macierzy  $\mathbf{A}$  i rzadkość fatora  $\mathbf{X}$ . W zadaniach I i J, rzadkość może być wymuszana w dowolnym fatorze. Uwzględniając cechy estymowanych faktorów, testy numeryczne wykonano następującymi algorytmami:

- RALS(L1) – zregularyzowany projekcyjny algorytm ALS, gdzie regułę aktualizacji fatora  $\mathbf{A}$  wyrażono przez (4.144), a regułę aktualizacji fatora  $\mathbf{X}$  przez (4.145). Przyjęto eksperymentalnie:  $\alpha_A = 10^{-12}$  oraz parameter  $\alpha_X$  zmieniający się według reguły (4.147), gdzie  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$  oraz  $\alpha^{(0)} = 10$ .

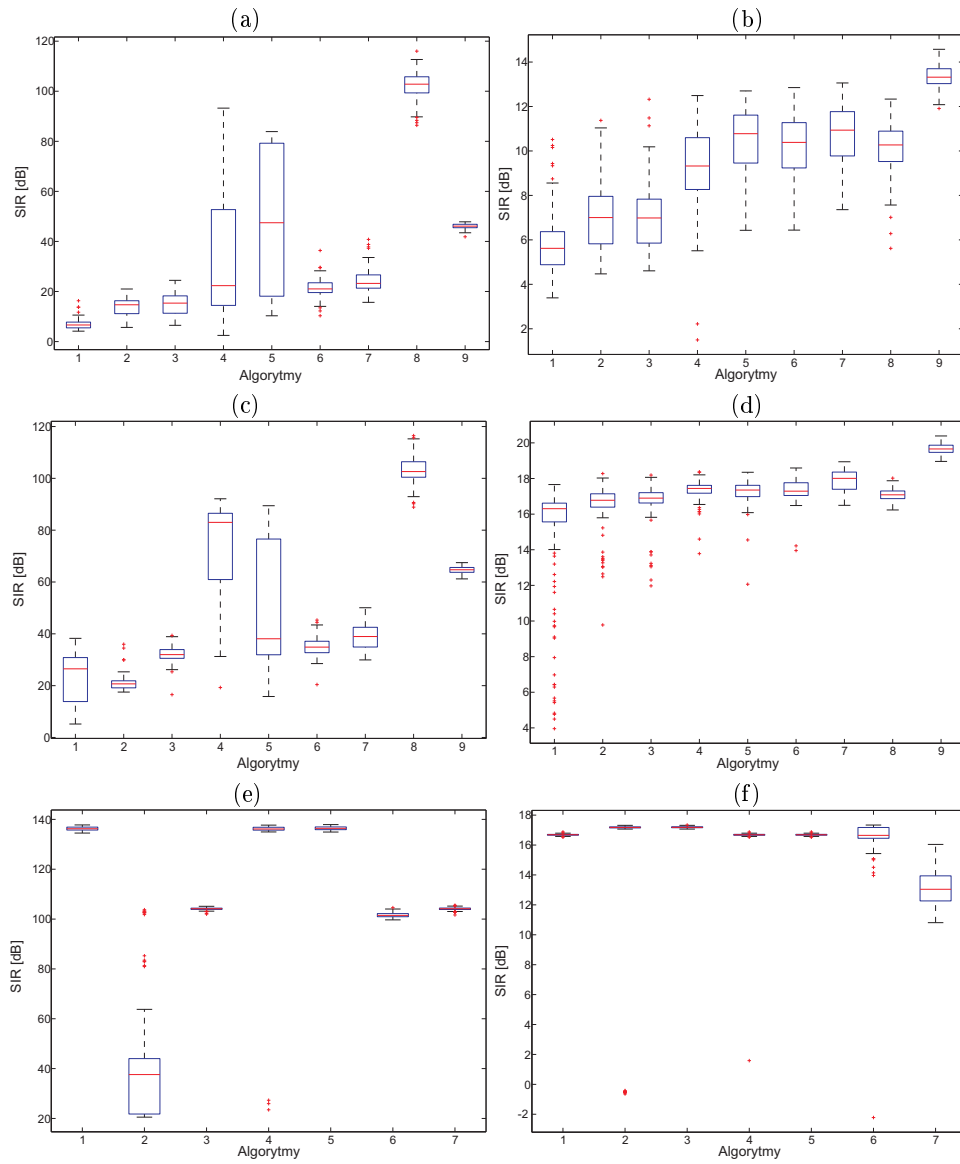
- RALS(L2) – zregularyzowany projekcyjny algorytm ALS, wyrażony przez regułę (4.144). Przyjęto eksperymentalnie:  $\alpha_X = 10^{-12}$  oraz parametr  $\alpha_A$  wyznaczany regułą (4.147) dla  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$  oraz  $\alpha^{(0)} = 1000$ .
- RNNLS(L1) – algorytm FC-NNLS (wyrażony przez algorytm 13), zastosowany do zadania (3.48), gdzie parametr  $\alpha_X$  dobierany jest według reguły (4.147) dla  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$  oraz  $\alpha^{(0)} = 10$ . Macierz  $\mathbf{A}$  aktualizowana jest algorytmem FC-NNLS, zastosowanym do zadania (3.64) dla  $\alpha_A = 10^{-12}$ .
- RNNLS(L2) – algorytm RNNLS (wyrażony przez algorytm 15), gdzie  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$  oraz  $\alpha^{(0)} = 1000$ .
- DN – algorytm 18 z parametrami  $n_1 = 3$ ,  $n_2 = 30$ ,  $n_{\max} = 1000$ ,  $\tau = 10^{-5}$ ,  $\lambda = 1000$ ,
- IPTR – algorytm 19 z parametrami  $\theta = 1000$ ,  $k_{\max} = 10$ ,  $\rho = 10^{-6}$ ,  $\eta = 10^{-4}$ ,  $\varepsilon_A = \varepsilon_X = 10^{-12}$ .

Podobnie jak w rozdziale 4.11.3 estymacje czynników przeprowadzono 100-krotnie dla różnych przybliżeń początkowych, generowanych z rozkładu  $\mathcal{U}[0, 1]$ . Statystykę rozkład próbek współczynnika  $SIR$  dla oceny jakości estymacji macierzy  $\mathbf{X}$  w zadaniach A, B, G, H, I, J pokazano na rysunku 4.16. Ponadto, w celu przeprowadzenia łatwej analizy porównawczej zamieszczono wyniki badań algorytmów ALS, HALS oraz FC-NNLS. Iteracje zewnętrzne w badanych algorytmach przerywano, gdy spełnione było kryterium stagnacji funkcji celu dla  $\varepsilon_{\text{obj}} = 10^{-5}$  w zadaniach A, B, G i H. W zadaniach I i J przyjęto  $\varepsilon_{\text{obj}} = 10^{-8}$ , ponieważ dla większych wartości tego parametru obserwowano lokalną stagnację funkcji celu w początkowych krokach iteracyjnych.

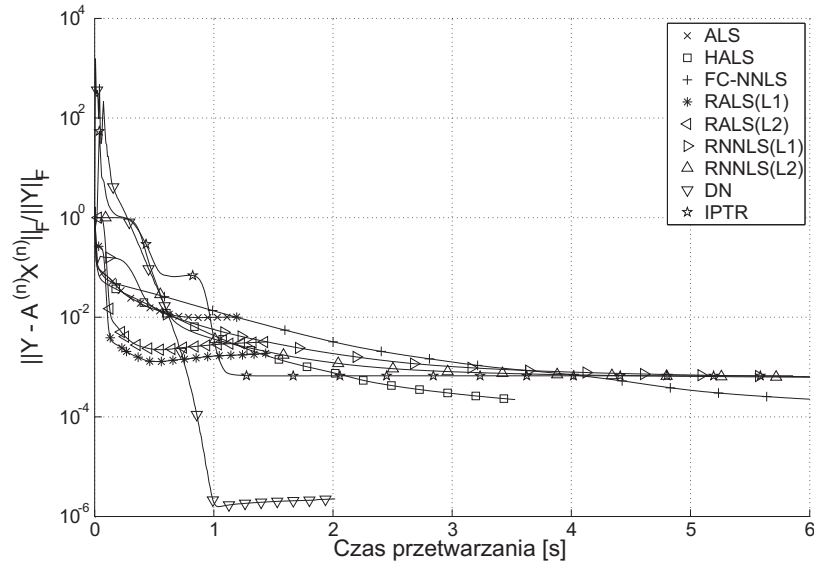
Przebieg znormalizowanego błędu residualnego  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w funkcji czasu wykonywania się algorytmów przedstawiono na rysunku 4.17.

**Wniosek 4.11.** Z rysunków 4.16 oraz 4.17 wynika, że człony regularyzujące poprawiają jakość estymacji, jeśli macierz  $\mathbf{A}$  jest gęsta, a zatem zadanie faktoryzacji jest niejednoznaczne. Jeśli model jest dokładny, poprawa może być znacząca, co jest szczególnie widoczne na rysunkach 4.16(a) i (c). Dla danych dokładnych algorytm DN pozwala uzyskać znacząco lepsze wyniki. Niestety, jest on efektywny tylko dla zadań o relatywnie małych wymiarach, ponieważ jego złożoność obliczeniowa jest duża. W każdym jego kroku iteracji zewnętrznych wyznaczana jest macierz hesjanu  $\mathbf{Q}_A \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ}$  dla aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$ . Podobną złożonością obliczeniową charakteryzuje się algorytm IPTR, który również jest dość efektywny dla danych dokładnych i najskuteczniejszy dla danych zaburzonych (rys. 4.16(b),(d)). Efektywność algorytmu DN dla danych zaburzonych zauważalnie słabnie, ale można ją poprawić w szerokim zakresie przez optymalny dobór





Rys. 4.16. Statystyka rozkładu próbek  $SIR$  do oceny jakości estymacji macierzy  $\mathbf{X}$  w zadaniach: (a) G, (b) H, (c) A, (d) B, (e) I, (f) J. Algorytmy: 1 – ALS, 2 – HALS, 3 – FC-NNLS, 4 – RALS(L1), 5 – RALS(L2), 6 – RNNLS(L1), 7 – RNNLS(L2), 8 – DN, 9 – IPTR



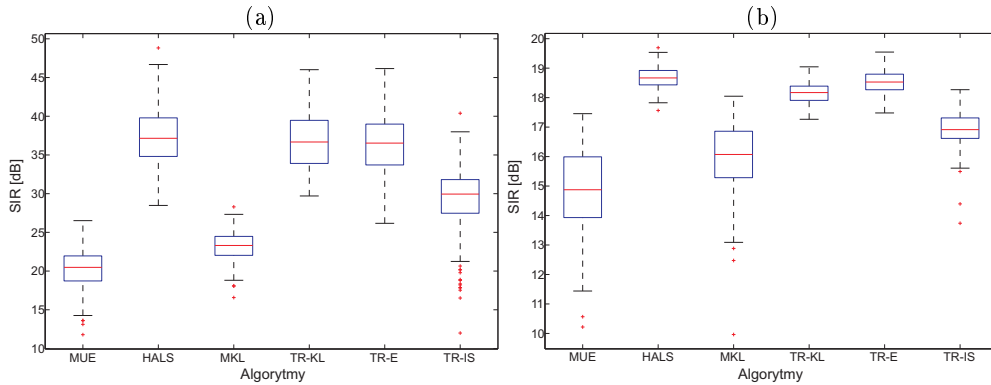
Rys. 4.17. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)}\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w funkcji czasu wykonywania się algorytmów, zastosowanych do rozwiązania zadania A

parametrów  $\lambda$  i  $\tau$ . Efektywność algorytmu IPTR jest również zależna od doboru parametrów, zwłaszcza  $\theta$  i  $\rho$ . Jeśli macierz  $\mathbf{A}$  jest gęsta, parametr  $\lambda$  powinien być dużej wartości (ok. 1000). Niestety, zbieżność algorytmu IPTR nie jest monotoniczna, co jest widoczne na rysunku 4.17. Zadania I i J najprawdopodobniej mają jednoznaczną faktoryzację ( $\text{rzadkość}(\mathbf{A}) = \text{rzadkość}(\mathbf{X}) = 50\%$ ). Z rysunku 4.16 wynika, że dla takich zadań nie ma potrzeby stosowania zregulowanych algorytmów NMF.

#### 4.11.5. Testy uogólnionych algorytmów NMF

Mianem uogólnionych algorytmów NMF nazwano algorytmy, które minimalizują uogólnione miary podobieństwa, takie jak np. dywergencja  $\alpha$  lub  $\beta$  (rozd. 2). Do badań wybrano algorytmy MKL (rozd. 4.4.2) oraz TR-NMF (algorytm 17) dla dywergencji  $\beta$ . Ten pierwszy jest multiplikatywnym algorytmem minimalizującym uogólnioną dywergencję Kullbacka–Leiblera, która jest szczególnym przypadkiem dywergencji  $\beta$  (dla  $\beta = 0$ ).

Podobnie jak w rozdziałach 4.11.3 i 4.11.4 faktory początkowe  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  generowane były z rozkładu  $\mathcal{U}[0, 1]$ . Estymację czynników powtarzano 100-krotnie



Rys. 4.18. Statystyka rozkładu próbek  $SIR$  do oceny jakości estymacji macierzy  $\mathbf{X}$  za pomocą wybranych algorytmów minimalizujących dywergencję  $\beta$ : (a) dane bez zakłóceń, (b) dane zaburzone ( $SNR = 20$  dB). Dla porównania zamieszczono również wyniki uzyskane algorytmami MUE i HALS

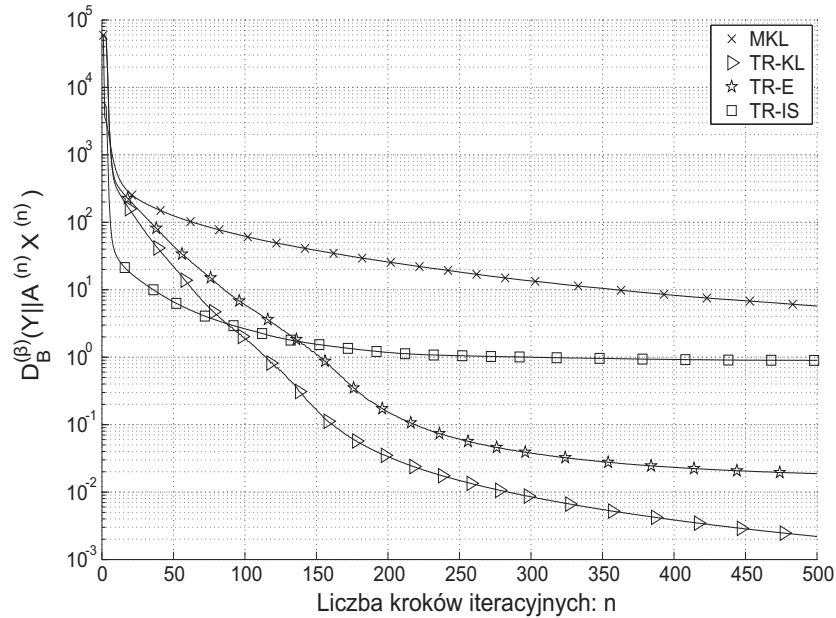
dla różnych przybliżeń początkowych. Proces aktualizacji faktorów zatrzymywany był po wykonaniu 500 iteracji zewnętrznych.

Algorytmy te zastosowano do zadania A. Następnie dane dokładne z zadania A zaburzone addytywnie szumem binarnym o mocy  $SNR = 20$  dB, w którym prawdopodobieństwo pojawienia się impulsu zakłócającego wynosiło 0,5. Takie zaburzenia nie mają rozkładu gaussowskiego.

Na rysunku 4.18 pokazano statystykę rozkładu próbek  $SIR$  w celu oceny jakości estymacji macierzy  $\mathbf{X}$ , stosując dane dokładne i zaburzone. Algorytm TR-NMF dla  $\beta = 0$  oznaczono skrótem TR-KL. Dla  $\beta = 1$  uzyskuje się funkcję odległości euklidesowej – stąd TR-E. Algorytm TR-IS minimalizuje dywergencję Itakura–Saito, a zatem uzyskuje się go z TR-NMF dla  $\beta = -1$ .

Wartości funkcji celu  $D_B^{(\beta)}(\mathbf{Y}||\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)})$  względem iteracji zewnętrznych pokazano na rysunku 4.19 dla zadania A.

**Wniosek 4.12.** Z rysunku 4.18 można wnioskować, że stosowanie innej miary rozbieżności niż odległość euklidesowa do estymacji faktorów w zadaniu A nie jest konieczne. Nawet jeśli dane obserwowane są zaburzone szumem niegaussowskim, najlepszą jakość estymacji faktorów uzyskano algorytmami HALS i TR-E, czyli takimi, które minimalizują odległość euklidesową. Takie rezultaty najprawdopodobniej wynikają z podejścia numerycznego do minimalizacji funkcji celu. Łatwiej bowiem minimalizować algorytmem TR funkcję kwadratową niż dywergencję  $\beta$ . Z kolei, wyniki uzyskane algorytmami MKL i MUE (rys. 4.18) sugerują



Rys. 4.19. Wykres funkcji  $D_B^{(\beta)}(\mathbf{Y}||\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{X}^{(n)})$  względem iteracji zewnętrznych w zadaniu A

raczej większą efektywność miary KL. Są to algorytmy o podobnej charakterystyce zbieżności. Rysunek 4.19 pokazuje, że głębsze minimum dywergencji  $\beta$  uzyskuje się algorytmem TR-KL niż algorytmem TR-E, co może mieć istotne znaczenie w aproksymacji zadań nieliniowych.

Należy jednak zauważyć, że w pewnych zastosowaniach statystyczne rozkłady zaburzeń modelu i elementów czynników mogą być dalekie od rozkładów gaussowskich. Dlatego też minimalizacja uogólnionych miar rozbieżności może prowadzić do uzyskania estymatorów komponentów ukrytych o lepszej jakości niż dla odległości euklidesowej. Jednak taka minimalizacja jest z reguły trudniejsza do realizacji. Tak więc, algorytmy minimalizujące uogólnione miary rozbieżności mogą być wolniejsze i numerycznie bardziej niestabilne.

## 5. Struktura modelu NMF

Nieujemna faktoryzacja macierzy nie zawsze oznacza faktoryzację według podstawowego modelu, wyrażonego w (1.1). W ogólnym znaczeniu model NMF może być bardziej złożony i wyrażony w postaci generycznej, z którego wynika model (1.1) lub być szczególnym przypadkiem tego modelu. Te różne postacie modelu NMF są motywowane różnymi zastosowaniami. Wspólną ich cechą jest dekompozycja macierzy nieujemnej i nieujemność wszystkich lub wybranych czynników. Dalej krótko scharakteryzowano najpopularniejsze struktury modelu NMF.

### 5.1. Struktura symetryczna

Struktura symetryczna modelu NMF jest szczególnym przypadkiem modelu (1.1). Zwykle bywa określana jako symetryczna i nieujemna faktoryzacja macierzy (ang. *Symmetric NMF*). Jej model ma postać:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T, \quad (5.1)$$

gdzie  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$  – macierz symetryczna i nieujemnie określona,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $J$  – rząd faktoryzacji.

Faktoryzacja macierzy (5.1) nie zawsze istnieje. Minimalna wartość rzędu  $J$ , dla której istnieje taka faktoryzacja nazywana jest rzędem całkowicie dodatnim lub rzędem *cp* (ang. *completely positive rank*). Generalnie spełniona jest zależność:  $0 \leq \text{rank}(\mathbf{Y}) \leq I - \text{rank}(\mathbf{Y}) \leq \text{rank}_{cp}(\mathbf{Y})$ . Jeśli faktoryzacja ta nie istnieje, to  $\text{rank}_{cp}(\mathbf{Y}) \rightarrow \infty$ . W takim przypadku symetryczny model NMF może opisywać dane obserwowane tylko w sposób przybliżony, czyli:  $\mathbf{Y} \cong \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ .

Niech  $\mathbf{P} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  jest macierzą permutacji, czyli  $\mathbf{P}\mathbf{P}^T = \mathbf{I}_J$ . Dla macierzy  $\mathbf{P}$  spełniona jest tożsamość:  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{P}^T\mathbf{A}^T = (\mathbf{A}\mathbf{P})(\mathbf{A}\mathbf{P})^T = \bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{A}}^T$ , gdzie  $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{P} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\bar{\mathbf{A}} \neq \mathbf{A}$ . Tak więc, faktoryzacja (5.1) nie jest jednoznaczna ze względu na permutację czynników. Ten rodzaj faktoryzacji nie

wykazuje jednak niejednoznaczności ze względu na skalę faktorów, ponieważ  $\mathbf{Y} = (\mathbf{A}\mathbf{D})(\mathbf{A}\mathbf{D})^T = \mathbf{A}\mathbf{D}^2\mathbf{A}^T \neq \mathbf{A}\mathbf{A}^T$  dla  $\mathbf{D} = \text{diag}([d_j]) \in \mathbb{R}_{++}^{J \times J}$  i  $\mathbf{D} \neq \mathbf{I}_J$ . Inne rodzaje niejednoznaczności w modelu (5.1) analizowane są w pracy [197].

Model faktoryzacji w (5.1) jest też szczególnym przypadkiem, tzw. strukturalnej nieujemnej faktoryzacji macierzy [190, 439], której model jest postaci:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{A}^T, \quad (5.2)$$

gdzie  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$  – macierz symetryczna i nieujemnie określona,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  – macierz symetryczna,  $J$  – rząd faktoryzacji.

Jeśli  $\mathbf{X} = \mathbf{I}_J$ , model (5.2) sprowadza się do modelu (5.1).

### 5.1.1. Algorytmy multiplikatywne

Estymacja faktora  $\mathbf{A}$  w modelu (5.1) nie wymaga stosowania algorytmu narzeczniejszej minimalizacji funkcji celu, czyli algorytmu 2. Zadanie to najczęściej realizowane jest za pomocą multiplikatywnych algorytmów iteracyjnych, minimalizujących sekwencyjnie przyjętą funkcję celu. Takie podejście zostało zapoczątkowane w pracach [109, 293, 475] w kontekście grupowania probabilistycznego. Obecnie tematyka ta jest omawiana w wielu innych pracach, np. [181, 269, 292, 410, 439, 447].

W tego rodzaju faktoryzacji funkcję celu najczęściej definiuje się przez odległość euklidesową, zatem:

$$\Psi(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{A}^T\|_F^2 = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^I \sum_{n=1}^I \left( y_{mn} - \sum_{r=1}^J a_{mr}a_{nr} \right)^2. \quad (5.3)$$

Z warunku stacjonarności funkcji celu wynika:

$$\begin{aligned} \nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}) &= \sum_{m=1}^I a_{mj} \sum_{r=1}^J a_{mr}a_{ir} - \sum_{m=1}^I y_{mi}a_{mj} \\ &+ \sum_{n=1}^I a_{nj} \sum_{r=1}^J a_{ir}a_{nr} - \sum_{n=1}^I y_{in}a_{nj} \triangleq 0. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Ponieważ  $\mathbf{Y}$  jest macierzą symetryczną, z (5.4) otrzymuje się:

$$\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}) = 2\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A} - 2\mathbf{Y}\mathbf{A} = \nabla_{\mathbf{A}}^+ \Psi(\mathbf{A}) - \nabla_{\mathbf{A}}^- \Psi(\mathbf{A}) \triangleq \mathbf{0}, \quad (5.5)$$

gdzie  $\nabla_{\mathbf{A}}^+ \Psi(\mathbf{A}) = 2\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A}$  oraz  $\nabla_{\mathbf{A}}^- \Psi(\mathbf{A}) = 2\mathbf{Y}\mathbf{A}$ . Stosując regułę aktualizacji (4.52), uzyskuje się:

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \circledast (\mathbf{Y}\mathbf{A}) \oslash (\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A}). \quad (5.6)$$

Regułę multiplikatywnych aktualizacji (5.6) można zaimplementować równoległe lub sekwencyjnie. Według implementacji równoległej reguła (5.6) ma postać iteracyjną:

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{A}^{(k)}]_{ij}}{[\mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T\mathbf{A}^{(k)}]_{ij}}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.7)$$

gdzie  $k$  – numer kroku iteracyjnego,  $\mathbf{A}^{(0)}$  – przybliżenie początkowe.

W pracy [181] pokazano, że formuła iteracyjna w (5.7) nie gwarantuje zbieżności do punktu stacjonarnego, a ponadto funkcja celu  $\Psi(\mathbf{A}^{(k)})$  względem  $k$  ma charakter oscylacyjny. Aby przybliżenia iteracyjne były zbieżne do punktu stacjonarnego, regułę (5.6) należy implementować w taki sposób, aby aktualizacje odbywały się chociaż częściowo sekwencyjnie. Macierz  $\mathbf{A}$  może być estymowana przez sekwencyjne przemiatanie jej wierszy, kolumn lub kolejnych elementów.

Seqwencyjna aktualizacja kolumn macierzy  $\mathbf{A}$  może być realizowana według zasady podanej w (4.148). Definiując  $\mathbf{A}_j^{(k+1)} = [\mathbf{a}_1^{(k+1)}, \dots, \mathbf{a}_{j-1}^{(k+1)}, \mathbf{a}_j^{(k)}, \dots, \mathbf{a}_J^{(k)}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ , reguła (5.6) w takiej implementacji ma postać:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_j^{(k+1)} &= \mathbf{a}_j^{(k)} \circledast (\mathbf{Y}\mathbf{a}_j^{(k)}) \oslash (\mathbf{A}_j^{(k+1)}(\mathbf{A}_j^{(k+1)})^T\mathbf{a}_j^{(k)}) \\ &= \mathbf{a}_j^{(k)} \circledast \frac{\mathbf{Y}\mathbf{a}_j^{(k)}}{\left[ \sum_{p<j} \mathbf{a}_p^{(k+1)}(\mathbf{a}_p^{(k+1)})^T + \sum_{p \geq j} \mathbf{a}_p^{(k)}(\mathbf{a}_p^{(k)})^T \right] \mathbf{a}_j^{(k)}}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

dla  $j = 1, \dots, J$ .

Niech  $(\underline{\mathbf{A}}_i^{(k+1)})^T = [(\mathbf{a}_1^{(k+1)})^T, \dots, (\mathbf{a}_{i-1}^{(k+1)})^T, (\mathbf{a}_i^{(k)})^T, \dots, (\mathbf{a}_J^{(k)})^T] \in \mathbb{R}_+^{J \times I}$ .

Wiersze macierzy  $\mathbf{A}$  mogą być również estymowane sekwencyjnie według reguły iteracyjnej:

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{a}}_i^{(k+1)} &= \underline{\mathbf{a}}_i^{(k)} \circledast \frac{\mathbf{y}_i \underline{\mathbf{A}}_i^{(k+1)}}{\underline{\mathbf{a}}_i^{(k)} (\underline{\mathbf{A}}_i^{(k+1)})^T \underline{\mathbf{A}}_i^{(k+1)}} \\ &= \underline{\mathbf{a}}_i^{(k)} \circledast \frac{\sum_{p<i} y_{ip} \underline{\mathbf{a}}_p^{(k+1)} + \sum_{p \geq i} y_{ip} \underline{\mathbf{a}}_p^{(k)}}{\underline{\mathbf{a}}_i^{(k)} \left[ \sum_{p<i} (\mathbf{a}_p^{(k+1)})^T \underline{\mathbf{a}}_p^{(k+1)} + \sum_{p \geq i} (\mathbf{a}_p^{(k)})^T \underline{\mathbf{a}}_p^{(k)} \right]}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

dla  $i = 1, \dots, I$ .

---

**Algorytm 23. Algorytm podwójnie sekwencyjny**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$  – macierz danych,  $J$  – rząd faktoryzacji,

**Wyjście:**  $\hat{\mathbf{A}}$  – estymowany czynnik

```

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  ;
2 repeat
3   for  $i = 1, \dots, I$  do
4     for  $j = 1, \dots, J$  do
5        $\mathbf{V} = \mathbf{Y} \mathbf{A}$ ;
6        $\mathbf{U} = \mathbf{A} \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \text{eps}$ ;
7        $a_{ij} \leftarrow a_{ij} \frac{[\mathbf{V}]_{ij}}{[\mathbf{U}]_{ij}}$ ;
8 until Kryterium stopu jest spełnione;
```

---

Sekwencyjna aktualizacja wszystkich elementów macierzy  $\mathbf{A}$  odbywa się przez użycie dwóch pętli **for** dla indeksów  $i$  i  $j$ . Zakładając, że pętla dla aktualizacji względem indeksu  $j$  jest zagnieżdżona w pętli inkrementacji indeksu  $i$ , reguła iteracyjna ma postać:

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} \frac{\sum_{n < i} y_{in} a_{nj}^{(k+1)} + \sum_{n \geq i} y_{in} a_{nj}^{(k)}}{\xi_{ij}^{(k+1)}}, \quad (5.10)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \xi_{ij}^{(k+1)} &= \sum_{n < i} a_{nj}^{(k+1)} \sum_{r < j} a_{ir}^{(k+1)} a_{nr}^{(k+1)} + \sum_{n < i} a_{nj}^{(k+1)} \sum_{r \geq j} a_{ir}^{(k)} a_{nr}^{(k+1)} \\ &+ \sum_{n > i} a_{nj}^{(k)} \sum_{r < j} a_{ir}^{(k+1)} a_{nr}^{(k)} + a_{ij}^{(k)} \sum_{r < j} (a_{ir}^{(k+1)})^2 + (a_{ij}^{(k)})^3 \\ &+ \sum_{n > i} a_{nj}^{(k)} \sum_{r \geq j} a_{ir}^{(k)} a_{nr}^{(k)}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Algorytm NMF wykorzystujący formułę iteracyjną podaną w (5.10) i (5.11) nazwano algorytmem podwójnie sekwencyjnym, który przedstawiono za pomocą algorytmu 23.

Koszt obliczeniowy reguły (5.7) w pojedynczym kroku iteracyjnym można oszacować jako  $O(I^2 J)$ . Stosując algorytm 23, koszt ten wynosi ok.  $O(I^3 J^2)$ . Jest to różnica znacząca, zwłaszcza gdy liczba  $I$  jest duża. Jeśli  $I \gg J$ , to najefektywniejsza wydaje się reguła aktualizacji w (5.8), której koszt obliczeniowy można oszacować jako  $O(I^2 J^2)$ .



Pomimo że reguła (5.7) nie gwarantuje zbieżności, możliwa jest taka modyfikacja reguły (5.6), która w implementacji równoległej prowadzi do zbieżności procesu aktualizacji faktora. W pracy [181] zaproponowano regułę iteracyjną dla implementacji równoległej i udowodniono, że takie podejście zapewnia monotoniczną zbieżność do punktu stacjonarnego, określonego warunkami optymalności *KKT*. Reguła ta minimalizuje funkcję odległości euklidesowej, którą po przekształceniach można zapisać w postaci:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{A}) &= \frac{1}{2}\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{A}^T\|_F^2 = \frac{1}{2}\operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}) - \operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T) + \frac{1}{2}\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T) \\ &= \Psi_1(\mathbf{A}) + \frac{1}{2}\Psi_2(\mathbf{A}) + \operatorname{const},\end{aligned}\quad (5.12)$$

gdzie  $\Psi_1(\mathbf{A}) = -\operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T)$  oraz  $\Psi_2(\mathbf{A}) = \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T)$ .

W celu zapewnienia monotoniczności iteracyjnego procesu aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ , zdefiniowano odpowiednie funkcje pomocnicze dla członów  $\Psi_1(\mathbf{A})$  i  $\Psi_2(\mathbf{A})$ . Jest to podejście podobne jak dla algorytmów multiplikatywnych, omówionych w rozdziale 4.4.

**Lemat 5.1.** *Funkcja*

$$G_1(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) = \operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}\mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T\right) - 2\operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{A}^T\right) \quad (5.13)$$

jest funkcją pomocniczą dla funkcji  $\Psi_1(\mathbf{A})$ , zgodnie z definicją 4.1.

**Dowód 5.1.** *Warunek  $\Psi_1(\mathbf{A}^{(k)}) = G_1(\mathbf{A}^{(k)}, \mathbf{A}^{(k)})$  jest oczywisty i nie wymaga dowodu. Z kolei, warunek  $G_1(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) \geq \Psi_1(\mathbf{A})$ , dla  $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^T$ , wynika z przekształcenia:*

$$\begin{aligned}G_1(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) - \Psi_1(\mathbf{A}) &= \operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}\mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T\right) - 2\operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{A}^T\right) \\ &\quad + \operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T\right) \\ &= \operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}(\mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T - 2\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{A}^T + \mathbf{A}\mathbf{A}^T)\right) \\ &= \operatorname{tr}\left(\mathbf{Y}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{(k)})(\mathbf{A} - \mathbf{A}^{(k)})^T\right) \geq 0\end{aligned}\quad (5.14)$$

**Lemat 5.2.** *Niech*

$$G_2(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{[\mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T\mathbf{A}^{(k)}]_{ij}}{(a_{ij}^{(k)})^3} a_{ij}^4. \quad (5.15)$$

Według definicji 4.1  $G_2(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)})$  jest funkcją pomocniczą dla funkcji  $\Psi_2(\mathbf{A})$ .

**Dowód 5.2.** Funkcję  $\Psi_2(\mathbf{A})$  można przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned}\Psi_2(\mathbf{A}) &= \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{A}^T) = \|\mathbf{A}\mathbf{A}^T\|_F^2 = \sum_{p=1}^I \sum_{q=1}^I \left( \sum_{j=1}^J a_{pj}a_{qj} \right)^2 \\ &\leq \sum_{p,q,j} \varsigma_{pqj} \left( \frac{a_{pj}a_{qj}}{\varsigma_{pqj}} \right)^2 = \sum_{p,q,j} \varsigma_{pqj}^{-1} a_{pj}^2 a_{qj}^2 \\ &= \sum_{j=1}^J [(\mathbf{A}^2)^T \boldsymbol{\Theta}_j \mathbf{A}^2]_{jj},\end{aligned}\tag{5.16}$$

gdzie  $\boldsymbol{\Theta}_j = [\varsigma_{pqj}^{-1}] \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$ ,  $\mathbf{A}^2 = [a_{ij}^2] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\varsigma_{pqj} = \frac{a_{pj}^{(k)} a_{qj}^{(k)}}{[\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T]_{pq}}$  oraz  $\forall p, q$ :  $\sum_j \varsigma_{pqj} = 1$ . Nierówność w (5.16) wynika z zastosowania nierówności Jensena do rzeczywistej i wypukłej funkcji kwadratowej. Korzystając z nierówności (4.111) z podstawieniami:  $\mathbf{S} = \mathbf{A}^2$ ,  $\mathbf{U} = \boldsymbol{\Theta}_j$ ,  $\mathbf{V} = \mathbf{I}_J$  oraz  $\tilde{s}_{pq} = (a_{ij}^{(k)})^2$ , uzyskuje się:

$$\begin{aligned}\Psi_2(\mathbf{A}) &\leq \sum_{j=1}^J [(\mathbf{A}^2)^T \boldsymbol{\Theta}_j \mathbf{A}^2]_{jj} \leq \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{[\boldsymbol{\Theta}_j (\mathbf{A}^{(k)})^2]_{ij} a_{ij}^4}{(a_{ij}^{(k)})^2} \\ &= \sum_{i,j} \frac{\sum_{q=1}^I \frac{[\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T]_{iq} (a_{qj}^{(k)})^2}{a_{ij}^{(k)} a_{qj}^{(k)}} a_{ij}^4}{(a_{ij}^{(k)})^2} = \sum_{i,j} \frac{[\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T \mathbf{A}^{(k)}]_{ij} a_{ij}^4}{(a_{ij}^{(k)})^3} \\ &= G_2(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}).\end{aligned}\tag{5.17}$$

Funkcję pomocniczą funkcji  $\Psi(\mathbf{A})$  w (5.12) można wyrazić jako:  $G(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) = G_1(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) + \frac{1}{2}G_2(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) + \text{const}$ . Z lematów 4.2, 5.1 i 5.2 oraz z warunku stacjonarności funkcji pomocniczej  $G(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)})$  wynika:

$$\nabla_{a_{ij}} G(\mathbf{A}, \mathbf{A}^{(k)}) = 2 \frac{[\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T \mathbf{A}^{(k)}]_{ij} a_{ij}^3}{(a_{ij}^{(k)})^3} - 2[\mathbf{Y} \mathbf{A}^{(k)}]_{ij} \triangleq 0.\tag{5.18}$$

Z zadania (4.62) oraz z (5.18) otrzymuje się regułę aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$ :

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} \sqrt[3]{\frac{[\mathbf{Y} \mathbf{A}^{(k)}]_{ij}}{[\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T \mathbf{A}^{(k)}]_{ij}}},\tag{5.19}$$

która dla  $\mathbf{A}^{(0)} > \mathbf{0}$  zapewnia monotoniczną zbieżność funkcji celu  $\Psi(\mathbf{A}^{(k)})$  i może być implementowana równoległe.

Reguła iteracyjna w (5.19) charakteryzuje się więc niskim kosztem obliczeniowym, ale jej zbieżność jest dość powolna. W celu przyspieszenia procesu zbieżności, regułę tę w pracy [181] połączono z regułą (5.7) w taki sposób, że jeśli w  $k$ -tym kroku iteracyjnym spełniony jest warunek:  $\Psi(\mathbf{A}^{(k+1)}) \leq \Psi(\mathbf{A}^{(k)})$ , to aktualizacja faktora realizowana jest według reguły (5.7). W przeciwnym przypadku aktualizacja w  $k$ -tym kroku wykonywana jest według reguły (5.19). Takie podejście gwarantuje monotoniczność procesu zbieżności oraz znacząco przyspiesza proces aktualizacji.

### 5.1.2. Algorytmy addytywne

Algorytmy multiplikatywne charakteryzują się zwykle bardzo powolną zbieżnością, zwłaszcza jeśli przybliżenia iteracyjne znajdują się blisko punktu stacjonarnego. Jeśli poszukiwane jest dość dokładne przybliżenie rozwiązania, czyli problem jest faktoryzowalny i zaburzenia modelu są znikome, to zdecydowanie lepszym podejściem do problemu estymacji faktora jest zastosowanie sekwencyjnych algorytmów addytywnych.

Dalej zaprezentowano algorytm sekwencyjny, oparty na algorytmie HALS (rozdz. 4.6.1) i algorytmie quasi-Newtona z regularyzacją hesjanu (rozdz. 4.10.1). Algorytm ten można przedstawiać w różnych wersjach, w zależności od sposobu estymacji parametru regularyzacji. Przeprowadzając przekształcenia podobne jak w rozdziale (4.6.1), funkcję celu (5.3) można wyrazić w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{A}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \sum_{j=1}^J \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T\|_F^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r \mathbf{a}_r^T - \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y}^{(j)} - \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T\|_F^2 = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left( (\mathbf{Y}^{(j)})^T \mathbf{Y}^{(j)} \right) - \operatorname{tr} \left( \mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T \right) \\ &+ \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left( \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T \right) = \frac{1}{2} \mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T \mathbf{a}_j - \mathbf{a}_j^T \mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{a}_j + \operatorname{const}, \quad (5.20) \end{aligned}$$

Następnie stosując metodę quasi-Newtona do funkcji (5.20), kierunek poprawy w  $k$ -tym kroku iteracyjnym aktualizacji wektora  $\mathbf{a}_j$  wyznaczany jest z następującego układu równań:

$$\left( \mathbf{H}(\mathbf{a}_j^{(k)}) + \alpha_A \mathbf{I}_I \right) \mathbf{p}_j^{(k)} = -\nabla_{\mathbf{a}_j} \Psi(\mathbf{a}_j^{(k)}), \quad (5.21)$$

gdzie

$$\nabla_{\mathbf{a}_j} \Psi(\mathbf{a}_j) = 2\|\mathbf{a}_j\|_2^2 \mathbf{a}_j - 2\mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{a}_j, \quad (5.22)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{a}_j) = \nabla_{\mathbf{a}_j}^2 \Psi(\mathbf{a}_j) = 2\left(2\mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T + \|\mathbf{a}_j\|_2^2 \mathbf{I}_I - \mathbf{Y}^{(j)}\right). \quad (5.23)$$

Parametr  $\alpha_A \geq 0$  w (5.21) spełnia zadanie regularyzacji hesjanu i powinien być tak dobrany, aby macierz  $\left(\mathbf{H}(\mathbf{a}_j^{(k)}) + \alpha_A \mathbf{I}_I\right)$  była dodatnio określona. Wówczas do rozwiązywania układu równań w (5.21) można wykorzystać metodę gradientów sprzężonych.

Jest wiele sposobów doboru parametru  $\alpha_A$ , które dalej krótko scharakteryzowano:

- *Reguła eksponencjalna*, wyrażona przez (4.146). Jest to najprostszy i najmniej kosztowny sposób, jednak jego skuteczność dość znacząco zależy od doboru wartości parametrów  $\alpha^{(0)}$ ,  $\bar{\alpha}$  i  $\tau$ . Zwykle złe uwarunkowanie macierzy hesjanu występuje w pierwszych kilkunastu iteracjach, gdy aproksymacje iteracyjne są jeszcze dość dalekie od punktu stacjonarnego. W tej fazie, parametr  $\alpha_A$  powinien przyjmować dość duże wartości, a następnie powinien być stopniowo zmniejszany do dodatniej wartości progowej  $\bar{\alpha}$ .
- *Poprawka względem minimalnej wartości własnej macierzy hesjanu*:

$$\alpha_A = (1 + \tau)|\lambda_{\min}(\mathbf{H}(\mathbf{a}_j))|, \quad (5.24)$$

gdzie  $\tau \gtrsim 0$  – dodatnia wartość progową.

Tak dobierany parametr zapewnia dodatnią określoność macierzy hesjanu w każdym kroku iteracyjnym. Jednak wyznaczenie minimalnej wartości własnej tej macierzy jest dość kosztowne. W implementacji praktycznej zadanie to można realizować metodą Powera z przesuniętą odwrotnością (ang. *Shifted-Inverse Power Method*).

- *Faktoryzacja Choleskiego*: Jeśli dla pewnej progowej wartości parametru  $\bar{\alpha}_A > 0$ ,  $\tilde{\mathbf{H}} = \left(\mathbf{H}(\mathbf{a}_j^{(k)}) + \bar{\alpha}_A \mathbf{I}_I\right)$  jest macierzą dodatnio określoną, to  $\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{R}^T \mathbf{R}$ , gdzie  $\mathbf{R}$  jest górną macierzą trójkątną pełnego rzędu. Następnie  $\mathbf{p}_j^{(k)} = -\mathbf{R} \setminus \left(\mathbf{R}^T \setminus \nabla_{\mathbf{a}_j} \Psi(\mathbf{a}_j^{(k)})\right)$ , gdzie operator  $\setminus$  realizuje podstawienie wsteczne. W przeciwnym razie wartość parametru  $\alpha_A$  jest zwiększana według reguły:  $\alpha_A \leftarrow 2\alpha_A$ .

Algorytm aktualizacji faktora  $\mathbf{A}$  według faktoryzacji Choleskiego przedstawiono za pomocą algorytmu 24. Funkcja  $[\mathbf{R}, \mathbf{p}] = \text{chol}(\mathbf{H})$  realizuje faktoryzację

**Algorytm 24. QN-HALS z faktoryzacją Choleskiego**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$  – macierz danych,  $J$  – rząd faktoryzacji,  
 $\bar{\alpha}_A \gtrsim 0$  – progowa wartość parametru regularyzacji  
**Wyjście:**  $\hat{\mathbf{A}}$  – estymowany faktor

```

1  Inicjalizacja:  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  ;
2  repeat
3      for  $j = 1, \dots, J$  do
4           $p = 1, \alpha_A = \bar{\alpha}_A, s = 1$ ;
5           $\mathbf{Y}^{(j)} = \mathbf{Y} - \sum_{r \neq j} \mathbf{a}_r \mathbf{a}_r^T$ ;
6           $\mathbf{H}_j = 2\mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T + \|\mathbf{a}_j\|_2^2 \mathbf{I}_I - \mathbf{Y}^{(j)}, \quad \mathbf{g}_j = \|\mathbf{a}_j\|_2^2 \mathbf{a}_j - \mathbf{Y}^{(j)} \mathbf{a}_j$ ;
7          while  $p > 0$  do
8               $[\mathbf{R}, p] = \text{chol}(\mathbf{H}_j + \alpha_A \mathbf{I}_J)$ ; // faktoryzacja Choleskiego
9              if  $p > 0$  then
10                  $\alpha_A = 2^s \bar{\alpha}_A$ ; // podwajanie parametru
11                  $s \leftarrow s + 1$ ;
12              $\mathbf{p}_j = -\mathbf{R} \setminus (\mathbf{R}^T \setminus \mathbf{g}_j)$ ; // kierunek poprawy
13              $\mathbf{a}_j \leftarrow [\mathbf{a}_j + \mathbf{p}_j]_+$ ; // aktualizacja faktora
14  until Kryterium stopu jest spełnione;
```

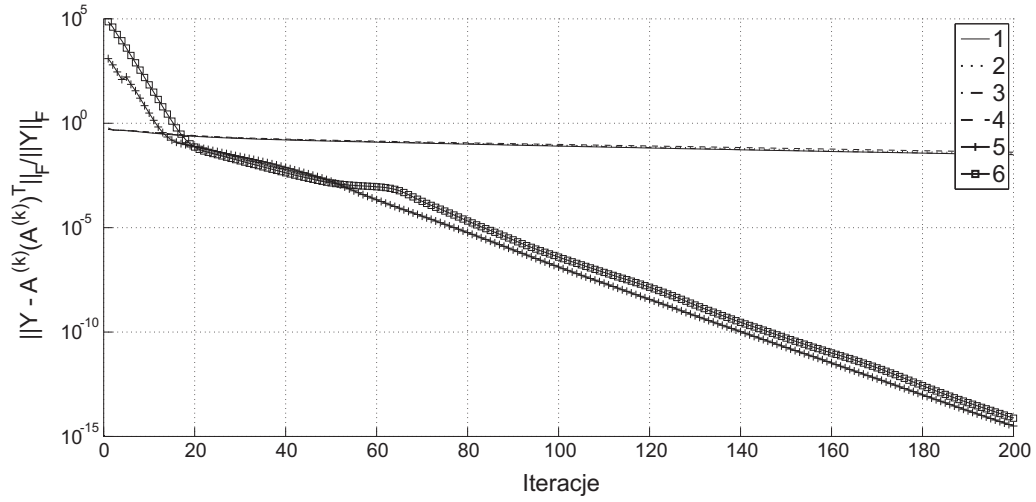
---

Choleskiego macierzy  $\mathbf{H}$ . Jeśli  $\mathbf{H}$  jest macierzą dodatnio określoną, to  $p = 0$  i zwracana macierz  $\mathbf{R}$  jest pełnego rzędu. W przeciwnym razie  $p > 0$  i wówczas wykonywana jest pętla **while**, w której zwiększany jest parameter regularyzacji do momentu spełnienia warunku dodatniej określoności zregularyzowanej macierzy hesjanu.

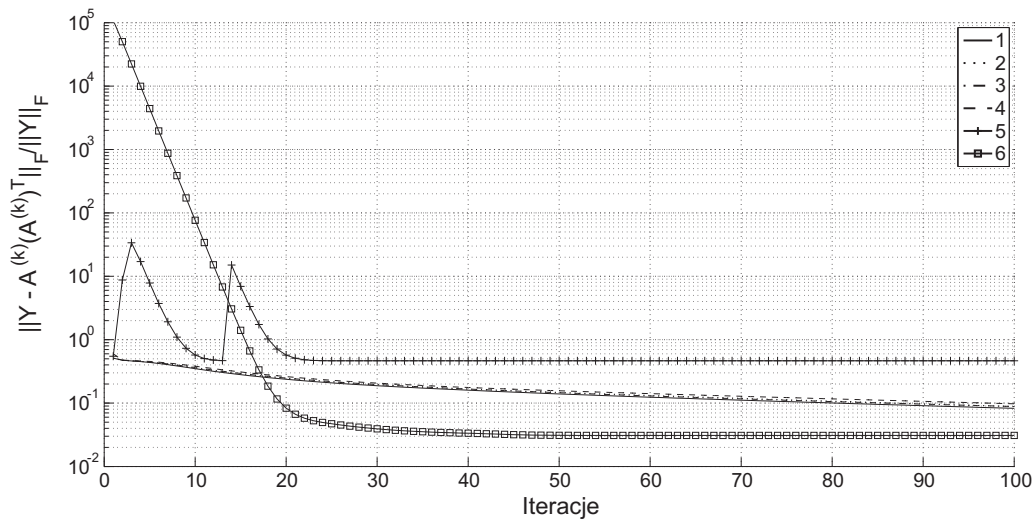
**5.1.3. Wyniki badań**

Niech  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$  dla  $I \geq J$  oraz  $\forall i, j : a_{ij} = \max\{0, \check{a}_{ij}\}$ , gdzie  $\check{a}_{ij} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . Zakładając,  $I = 100$  oraz  $J = 10$ , wygenerowano macierz obserwacji  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ .

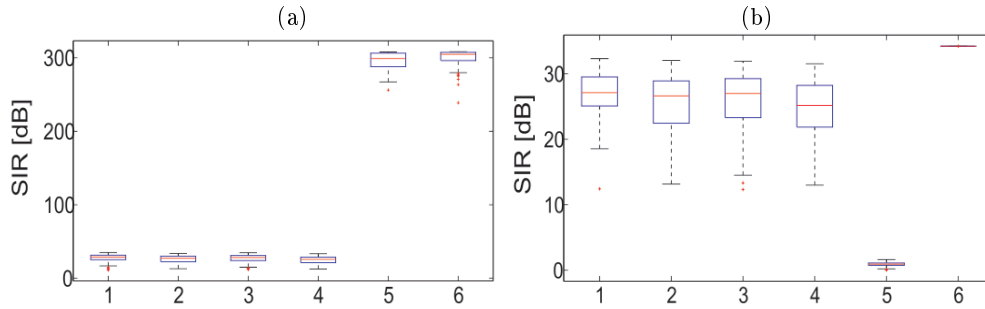
Macierz  $\mathbf{A}$  estymowano za pomocą następujących algorytmów: 1 – podwójnie sekwencyjny (algorytm 23); 2 – sekwencyjna aktualizacja wierszy, wyrażona przez (5.9); 3 – sekwencyjna aktualizacja kolumn, wyrażona przez (5.8); 4 – hybrydowa reguła równoległa łącząca formuły (5.7) i (5.19); 5 – QN-HALS



Rys. 5.1. Znormalizowany błąd residualny:  $\|Y - A^{(k)}(A^{(k)})^T\|_F / \|Y\|_F$  w funkcji liczby iteracji  $k$  dla danych niezaburzonych



Rys. 5.2. Znormalizowany błąd residualny:  $\|Y - A^{(k)}(A^{(k)})^T\|_F / \|Y\|_F$  w funkcji liczby iteracji  $k$  dla danych zaburzonych ( $SNR = 30$  dB)



Rys. 5.3. Statystyka rozkładu próbek  $SIR$  dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  po wykonaniu 200 iteracji algorytmami 1–6: (a) dane niezaburzone, (b) dane zaburzone

z regułą (5.24); 6 – QN-HALS z faktoryzacją Choleskiego (algorytm 24). Przybliżenia początkowe  $\mathbf{A}^{(0)}$  generowano z rozkładu równomiernego  $\mathcal{U}[0, 1]$ .

Badania przeprowadzono dla syntetycznych danych niezaburzonych (model dokładny) oraz z addytywnymi zaburzeniami gaussowskimi, dla których  $SNR = 30$  dB.

Jakość faktoryzacji oceniano na podstawie przebiegu błędu residualnego oraz statystyk rozkładu współczynników  $SIR$  estymowanej macierzy  $\hat{\mathbf{A}}$ . Uśrednione przebiegi znormalizowanego błędu residualnego  $\frac{\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(k)}(\mathbf{A}^{(k)})^T\|_F}{\|\mathbf{Y}\|_F}$  w funkcji liczby iteracji  $k$  pokazano na rysunku 5.1 dla danych niezaburzonych oraz na rysunku 5.2 dla danych zaburzonych ( $SNR = 30$  dB). Do wyznaczenia uśrednionego błędu wykorzystano wyniki badań uzyskane dla 100 losowych próbek przybliżeń początkowych. Statystyki rozkładu próbek  $SIR$  uzyskane po 200 krokach iteracyjnych zilustrowano na rysunku 5.3(a) dla danych niezaburzonych oraz na rysunku 5.3(b) dla danych zaburzonych.

Następnie, przeprowadzono kolejny eksperyment, w którym przerywanie iteracyjnego procesu aktualizacji faktora odbywało się według kryterium gradientów rzutowanych w (4.42). Oczywiście w tym przypadku funkcja celu  $\Psi(\mathbf{A}^{(k)})$  zależy tylko od jednego argumentu, tzn. macierzy  $\mathbf{A}^{(k)}$ . Tak więc, proces iteracyjny jest przerywany, gdy spełniony jest warunek:  $\|\mathbf{G}^P\|_F \leq \varepsilon \|\nabla_{\mathbf{A}} \Psi(\mathbf{A}^{(1)})\|_F$ , gdzie  $\mathbf{G}^P = [g_{ij}^P]$  oraz

$$g_{ij}^P = \begin{cases} \nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}), & \text{jeżeli } a_{ij} > 0, \\ \min(\nabla_{a_{ij}} \Psi(\mathbf{A}), 0), & \text{jeżeli } a_{ij} = 0. \end{cases} \quad (5.25)$$

Tabela 5.1. Średnie wartości współczynnika  $SIR$ , liczba iteracji i czas wykonywania algorytmów dla  $\varepsilon = 10^{-3}$  (dane dokładne) i  $\varepsilon = 10^{-2}$  (dane zaburzone z  $SNR = 30$  dB).

W nawiasach podano odchylenia standardowe. W przypadku algorytmu 5 dla danych zaburzonych, przerywanie procesu iteracyjnego następowało po wykonaniu maksymalnej liczby iteracji, czyli  $k_{\max} = 1000$

Algorytm	Dane dokładne			$SNR = 30$ dB		
	$SIR$ [dB]	Liczba iter.	Czas [s]	$SIR$ [dB]	Liczba iter.	Czas [s]
1	49,79 (1,12)	1261 (337)	137,4	27,79 (0,9)	229	25,04
2	49,91 (1,39)	1406 (452)	15,73	27,57 (0,81)	238	2,672
3	49,81 (1,09)	1291 (397)	1,829	27,72 (0,86)	244	0,3456
4	52,25 (2,1)	1765 (513)	1,244	29,25 (1,71)	299	0,21
5	44,84 (1,83)	38 (6)	0,6178	0,97 (0,366)	1000	61,42
6	45,05 (1,55)	34 (6)	0,1552	24,49 (1,88)	23	0,1173

W tabeli 5.1 przedstawiono uśrednione współczynniki  $SIR$ , liczbę iteracji oraz czas wykonywania algorytmów (mierzony w Matlabie 2008a) dla danych niezaburzonych ( $\varepsilon = 10^{-3}$ ) i danych zaburzonych ( $\varepsilon = 10^{-2}$ ).

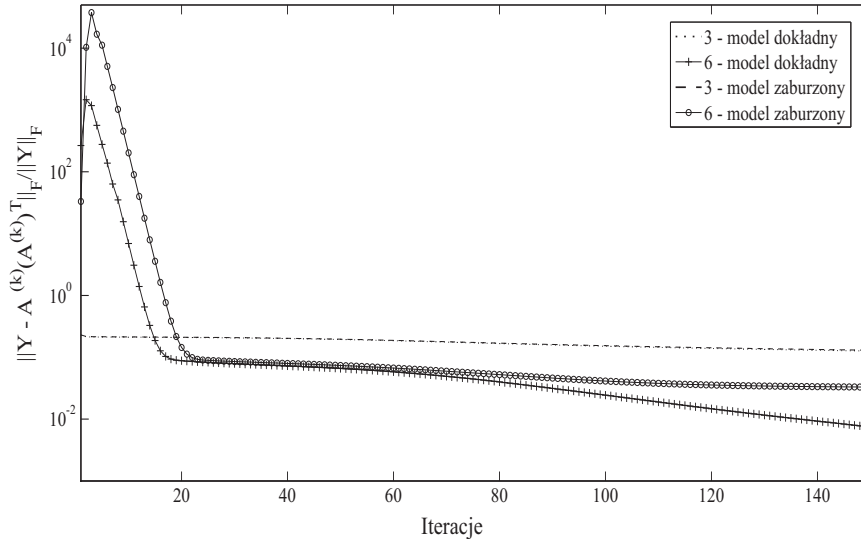
Kolejne badania przeprowadzono dla danych generowanych podobnie, ale o większym rozmiarze. Przyjęto:  $I = 1000$  oraz  $J = 100$ . Do estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  wybrano następujące algorytmy: 3 – sekwencyjna aktualizacja kolumn, wyrażona przez (5.8); 4 – hybrydowa reguła równoległa łącząca formuły (5.7) i (5.19); 6 – QN-HALS z faktoryzacją Choleskiego (algorytm 24). Badania przeprowadzono dla 100 inicjalizacji losowych, podobnie jak poprzednio. W tym przypadku badane algorytmy zatrzymywane były po wykonaniu 300 iteracji. Uśrednione wyniki badań przedstawiono w tabeli 5.2. Przebiegi znormalizowanego błędu residualnego w funkcji liczby iteracji pokazano na rysunku 5.4 dla danych dokładnych i zaburzonych ( $SNR = 30$  dB).

Tabela 5.2. Średnie wartości współczynnika  $SIR$  i czas wykonywania algorytmów dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  z danych dokładnych i zaburzonych ( $SNR = 30$  dB).

W nawiasach podano odchylenia standardowe

Algorytm	Dane dokładne		$SNR = 30$ dB	
	$SIR$ [dB]	Czas [s]	$SIR$ [dB]	Czas [s]
3	0,6468 (0,0712)	506,1 (11,2)	0,6267 (0,0744)	455,5 (11,1)
4	0,6238 (0,0635)	27,1 (0,0954)	0,6198 (0,0673)	26,1 (0,0971)
6	56,47 (2,37)	1831,6 (13,33)	25,9 (0,0327)	1635,7 (12,85)





Rys. 5.4. Znormalizowany błąd residualny:  $\|\mathbf{Y} - \mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{A}^{(k)})^T\|_F / \|\mathbf{Y}\|_F$  w funkcji liczby iteracji  $k$  dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  z danych dokładnych i zaburzonych ( $SNR = 30$  dB), gdzie  $I = 1000$  oraz  $J = 100$

## 5.2. Struktura wielowarstwowa

Koncepcja wielowarstwowej struktury modelu NMF (ang. *multilayer NMF*) pojawiła się po raz pierwszy w pracy [1]. Następnie, struktura ta była badana i modyfikowana w kolejnych pracach. Obszerne badania tej struktury, zwłaszcza w kontekście zastosowań do ślepej separacji sygnałów nieujemnych, można odnaleźć w pracach zespołu naukowego prof. Cichockiego [71, 78, 80, 86, 88, 89], a także w innych pracach, np. [237, 391, 414].

W takim podejściu do modelu NMF, czynniki  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  są estymowane w procesie sekwencyjnych dekompozycji. W pierwszym kroku, dla zadanego rzędu  $J$ , wykonywana jest faktoryzacja  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{X}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ , otrzymując czynniki:  $\mathbf{A}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . W drugim kroku, realizowana jest faktoryzacja:  $\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)} \mathbf{X}^{(2)}$ , gdzie  $\mathbf{A}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  oraz  $\mathbf{X}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . Do wykonania drugiego kroku stosuje się algorytm taki sam jak w kroku pierwszym, ale z innym przybliżeniem początkowym, zatem w  $l$ -tym kroku wykonywana jest faktoryzacja:  $\mathbf{X}^{(l-1)} = \mathbf{A}^{(l)} \mathbf{X}^{(l)}$ . Procedura sekwencyjnej dekompozycji zatrzymywana jest po

wykonaniu  $L$  kroków sekwencyjnych. W rezultacie, procedurę tę można opisać za pomocą następującego modelu:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{A}^{(2)} \dots \mathbf{A}^{(L)} \mathbf{X}^{(L)}. \quad (5.26)$$

Jeśli na faktory  $\{\mathbf{A}^{(l)}\}$  dla  $l = 1, 2, \dots, L$  nie jest narzucona dodatkowa informacja aprioryczna, to model ten sprowadza się do podstawowej postaci  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$ , gdzie  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{A}^{(2)} \dots \mathbf{A}^{(L)}$  oraz  $\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(L)}$ .

Takie podejście fizycznie oznacza, że macierz mieszająca  $\mathbf{A}$  reprezentuje system kaskadowego połączenia  $L$  podsystemów mieszających. Jest to wielowarstwowy system mieszający, składający się z  $L$  warstw. Kluczowe znaczenie w tym podejściu ma proces sekwencyjnego uczenia faktorów w kolejnych warstwach systemu, tzn. uczenia warstwa po warstwie. Inicjalizacja przybliżeń początkowych faktorów w każdej warstwie jest losowa. Należy też zauważyć, że jeśli  $J \ll I$ , proces uczenia w kolejnych warstwach jest szybszy niż dla warstwy pierwszej. Jest to spowodowane tym, że macierze  $\mathbf{X}^{(l)} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$  dla  $l = 1, \dots, L$  są mniejsze niż macierz  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ . Zwykle też kolejne faktory  $\mathbf{A}^{(l)}$  są rzadsze. Jeśli w  $l$ -tej warstwie otrzymuje się taką macierz  $\mathbf{X}^{(l)}$ , która nie może być już dalej faktoryzowana (np. jej wektory wierszowe są liniowo niezależne), wówczas faktory  $\mathbf{A}^{(s)}$  dla  $s > l$  powinny być zbieżne do macierzy jednostkowej  $\mathbf{I}_J$ .

W pracach [78, 80, 89] zauważono, że wielowarstwowy model NMF znacznie zmniejsza ryzyko stagnacji procesu aktualizacji faktorów w niepożądanym punkcie stacjonarnym, zwłaszcza jeśli każda warstwa inicjalizowana jest przez wielostartową inicjalizację losową (algorytm 3). Ponadto, faktory  $\mathbf{X}^{(l)}$  dla  $l = 2, 3, \dots, L$  zwykle lepiej aproksymują rozwiązanie dokładne niż faktor  $\mathbf{X}^{(1)}$ . Wielowarstwowy model NMF można teoretycznie realizować za pomocą dowolnego algorytmu. Jednak w pracach [80, 89] zaobserwowano, że najlepsze efekty w ślepej separacji sygnałów nieujemnych uzyskuje się, jeśli jego faktory estymuje się za pomocą gradientowych algorytmów kierunków poprawy (rozdz. 4.7). Zadania estymacji nie powinny zawierać faktorów zbyt dużych rozmiarów, w których występuje silna nadmiarowość, ale mogą być źle uwarunkowane. W pracy [78] pokazano, że model ten jest bardzo efektywny, gdy proces mieszania realizowany jest macierzą Hilberta. W badaniach wykorzystano macierz Hilberta  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{5 \times 4}$ , dla której  $\text{cond}(\mathbf{A}) = 8956$ . Dla grupy 5 sygnałów nieujemnych, pochodzących z pakietu narzędziowego NMFLAB [79], wielowarstwowy model NMF znacząco poprawił jakość estymowanych faktorów. Współczynniki *SIR* faktorów estymowanych w drugiej warstwie zwiększyły się o ponad 90 dB w stosunku do pierwszej warstwy.

### 5.3. Struktura spłotowa

Model (1.1) w zastosowaniu do ślepej separacji sygnałów nieujemnych opisuje proces jednoczesnego i liniowego mieszania nieujemnych sygnałów źródłowych. Takie modelowanie w wielu zastosowaniach jest jednak zbyt uproszczone. Przykładowo, jeśli sygnały źródłowe propagowane są wielodrogowo, wówczas sygnały obserwowane zawierają nie tylko prostą mieszaninę sygnałów źródłowych, ale również „echa” sygnałów bezpośrednich, czyli sygnały odbite, docierające do punktów obserwacji z opóźnieniem. W takim przypadku, model mieszania sygnałów powinien uwzględniać sygnały zmieszane, rejestrowane bezpośrednio oraz z opóźnieniem. Podejście to prowadzi do spłotowego modelu mieszania sygnałów źródłowych, który można wyrazić następująco:

$$y_{it} = \sum_{j=1}^J \sum_{l=0}^{L-1} a_{ijl} x_{j,t-l}, \quad (5.27)$$

gdzie  $L$  – długość filtru mieszającego.

W reprezentacji macierzowej model (5.27) można zapisać jako:

$$\mathbf{Y} = \sum_{l=0}^{L-1} \mathbf{A}^{(l)} \overset{l \rightarrow}{\mathbf{X}}, \quad (5.28)$$

gdzie  $\overset{l \rightarrow}{\mathbf{X}}$  jest macierzą przesuniętą względem macierzy  $\mathbf{X}$  o  $l$  kolumn w prawo. Niech  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ . Tak więc:  $\overset{1 \rightarrow}{\mathbf{X}} = [\mathbf{0}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-1}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ ,  $\overset{2 \rightarrow}{\mathbf{X}} = [\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-2}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ ,  $\overset{1 \leftarrow}{\mathbf{X}} = [\mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T, \mathbf{0}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$  oraz  $\overset{2 \leftarrow}{\mathbf{X}} = [\mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_T, \mathbf{0}, \mathbf{0}] \in \mathbb{R}^{J \times T}$ .

Model (5.28) jest powszechnie stosowany w technikach ślepej separacji sygnałów źródłowych propagowanych wielodrogowo. Stosuje się go też do ekstrakcji niestacjonarnych profili częstotliwościowych ze spektrogramów sygnałów akustycznych. Niech  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  reprezentuje rozkład amplitudy dyskretnej i krótko-czasowej transformaty Fouriera (amplituda spektrogramu) sygnału  $y(t)$ . Liczba  $I$  oznacza liczbę próbek w dziedzinie częstotliwości, a  $T$  liczbę ramek czasowych. Stosując model (1.1), kolumny macierzy  $\mathbf{A}$  zawierają profile częstotliwościowe, wiersze macierzy  $\mathbf{X}$  są profilami czasowymi. W tym modelu, profile częstotliwościowe są niezmiennie w funkcji czasu. Jeśli jednak zastosuje się model (5.28), profile częstotliwościowe reprezentowane macierzami  $\mathbf{A}^{(j)} = [a_{ijl}] \in \mathbb{R}_+^{I \times L}$  zależą

od czasu (indeks  $l$  odpowiada ramkom czasowym). Takie podejście zwykle dokładniej reprezentuje sygnały obserwowane (zwłaszcza sygnały akustyczne), ale jest trudniejsze w podejściu numerycznym.

Do estymacji czynników  $\{\mathbf{A}^{(l)}\}$  oraz  $\mathbf{X}$  można zastosować wiele różnych metod, w zależności od przyjętej informacji apriorycznej o cechach estymowanych czynników. Zakładając, że czynniki te zawierają tylko nieujemne elementy, ich estymację można realizować za pomocą algorytmów nieujemnej faktoryzacji macierzy.

Smaragdīs jest pionierem w rozwoju spłotowego modelu NMF (ang. *convolutive NMF*). W pracy [405] zaproponował algorytm multiplikatywny, minimalizujący uogólnioną dywergencję  $KL$  między macierzą obserwacji a modelem (5.28). Koncepcja ta została wykorzystana w wielu innych pracach, np. [89, 332, 354, 406, 446, 455]. W pracy [332] można odnaleźć algorytmy multiplikatywne minimalizujące dywergencję  $\beta$ , a w pracy [446] omówiono algorytmy multiplikatywne minimalizujące odległość euklidesową. Algorytmy projekcyjne najmniejszych kwadratów przedstawiono w pracy [354].

Poniżej przedstawiono algorytm multiplikatywny minimalizujący dywergencję  $\alpha$ . Jest to zmodyfikowana wersja formuł iteracyjnych w (4.85) i (4.86), w których uwzględniono podobne założenia jak we wspomnianych algorytmach dla spłotowego modelu NMF. Reguły aktualizacji czynników w  $n$ -tym kroku iteracyjnym mają więc postać:

$$a_{ijl}^{(n+1)} = a_{ijl}^{(n)} \left( \frac{\sum_{t=1}^T x_{jt} \left[ \left( \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ipl} x_{pt}^{(n)}} \right)^{\alpha} \right]}{\sum_{t=1}^T x_{jt}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}, \quad (5.29)$$

$$x_{jt}^{(n+1)} = \left\langle x_{jt}^{(n)} \left( \frac{\sum_{i=1}^I a_{ijl} \left[ \left( \frac{y_{it}}{\sum_{p=1}^J a_{ipl} x_{pt}^{(n)}} \right)^{\alpha} \right]}{\sum_{i=1}^I a_{ijl}} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \right\rangle, \quad (5.30)$$

dla  $l = 1, \dots, L$  oraz  $\alpha \neq 0$ . Operator  $\langle \cdot \rangle$  oznacza uśrednianie po indeksie  $l$ .

## 5.4. Struktura trójczłonowa

Strukturę trójczłonowego modelu NMF można przedstawić w następującej postaci generycznej:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}, \quad (5.31)$$

gdzie  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{J \times R}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{R \times T}$ . Ograniczenia nieujemności mogą być narzucone na wszystkie lub wybrane faktory. Zakłada się, że macierze  $\{\mathbf{A}, \mathbf{S}, \mathbf{X}\}$  są pełnego rzędu.

Jeśli macierz  $\mathbf{S}$  w modelu (5.31) jest wyrażona przez (3.51),  $J = R < \min\{I, T\}$ , a macierze  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  zawierają nieujemne elementy, to otrzymuje się tzw. model nsNMF, opisany w rozdziale 3.2.1.

### 5.4.1. Struktura dwuortogonalna

Gdy na faktory w modelu (5.31) nie są narzucone dodatkowe ograniczenia (oprócz nieujemności), model ten można łatwo sprowadzić do standardowego (dwuczłonowego) modelu przez przekształcenia:  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{S}$  oraz  $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{S}\mathbf{X}$ .

Jeśli faktory w modelu (5.31) mają dodatkowe ograniczenia aprioryczne, podane przekształcenie nie zawsze jest możliwe. Przykładem takiej struktury modelu NMF może być model *tri*-NMF, wprowadzony przez Dinga i pozostałych autorów pracy [113]. W modelu tym  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}_+^{J \times R}$ ,  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{R \times T}$ ,  $J \ll I$ ,  $R \ll T$  oraz dodatkowo  $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J$  i  $\mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{I}_R$ . Taka struktura modelu NMF nazwana jest *dwuortogonalnym modelem NMF*.

Dwuortogonalny model NMF stosowany jest przede wszystkim do dwustronnego lub dwumodalnego grupowania danych (ang. *co-clustering*). Jeśli  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  jest macierzą danych, to macierz  $\mathbf{A}$  zawiera informacje o grupowaniu wierszy,  $\mathbf{X}$  o grupowaniu kolumn, a  $\mathbf{S}$  o relacjach pomiędzy grupami. Parametry  $J$  i  $R$  określają odpowiednio liczbę grup wierszy oraz kolumn.

Zakładając, że funkcja celu wyrażona jest przez odległość euklidesową, zadanie estymacji faktorów w dwuortogonalnym modelu NMF można wyrazić następująco:

$$\min_{\mathbf{A} \geq \mathbf{0}, \mathbf{S} \geq \mathbf{0}, \mathbf{X} \geq \mathbf{0}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}\|_F^2, \quad \text{p.o.} \quad \mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}_J, \quad \mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{I}_R. \quad (5.32)$$

Do rozwiązania zadania (5.32) stosuje się algorytm naprzemiennej minimalizacji funkcji celu, podobnie jak dla dwuczłonowego modelu NMF. Jednak w tym

przypadku, przełączenie odbywa się między trzema grupami argumentów. Zadanie optymalizacji jest więc trudniejsze niż w przypadku typowego modelu NMF. Bez dodatkowych informacji o ortogonalności czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , naprzemienna minimalizacja funkcji celu byłaby zbyt wrażliwa na stagnację w nieoptymalnych punktach stacjonarnych. Jednak silna informacja aprioryczna, wymuszająca ortogonalność skrajnych czynników znacząco poprawia problem niejednoznaczności faktoryzacji. Należy zauważyć, że bez ograniczeń nieujemności czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , model dwu-ortogonalnej faktoryzacji sprowadza się do dekompozycji macierzy względem jej wartości osobliwych (SVD). Taka faktoryzacja jest jednoznaczna.

Nieujemne czynniki  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$ , w których wymusza się dodatkowo ortogonalność, można estymować za pomocą algorytmów ortogonalnego modelu NMF. Przykładowo, mogą to być formuły iteracyjne (4.117) i (4.116), które dla zadania (5.32) mają postać:

$$a_{ij}^{(n+1)} = a_{ij}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{Y}\mathbf{X}^T\mathbf{S}^T]_{ij}}{[\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{A}^{(n)})^T\mathbf{Y}\mathbf{X}^T\mathbf{S}^T]_{ij}}}, \quad (5.33)$$

$$x_{rt}^{(n+1)} = x_{rt}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{S}^T\mathbf{A}^T\mathbf{Y}]_{rt}}{[\mathbf{S}^T\mathbf{A}^T\mathbf{Y}(\mathbf{X}^{(n)})^T\mathbf{X}^{(n)}]_{rt}}}, \quad (5.34)$$

gdzie  $j = 1, \dots, J$ ,  $r = 1, \dots, R$  oraz  $n$  jest numerem kroku iteracji naprzemiennych.

Aby wyznaczyć czynnik  $\mathbf{S}$ , funkcję celu przekształcono do postaci:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{S}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}\|_F^2 = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}) - \operatorname{tr}(\mathbf{Y}^T\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}) \\ &+ \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{X}^T\mathbf{S}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\mathbf{S}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T) \\ &- \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{Y}^T\mathbf{A}\mathbf{S}) + \text{const.} \end{aligned} \quad (5.35)$$

Stosując nierówność (4.111) do członu  $\operatorname{tr}(\mathbf{S}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T)$  z podstawieniami  $\mathbf{U} = \mathbf{A}^T\mathbf{A}$  i  $\mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T$ , a także wykorzystując nierówność  $\xi \geq 1 + \ln(\xi)$  dla  $\xi > 0$ , zdefiniowano następującą funkcję pomocniczą  $G(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)})$  dla minimalizacji funkcji (5.35) ze względu na  $\mathbf{S}$ :

$$G(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) = - \sum_{j,r} [\mathbf{A}^T\mathbf{Y}\mathbf{X}^T]_{jr} s_{jr}^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{s_{jr}}{s_{jr}^{(n)}} \right)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{j,r} \frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{jr} s_{jr}^2}{s_{jr}^{(n)}} + \text{const.} \quad (5.36)$$

Rozważając podobne zadanie jak w (4.62) oraz z warunku stacjonarności  $\nabla_{\mathbf{S}} \Psi(\mathbf{S}) \triangleq \mathbf{0}$ , otrzymuje się regułę iteracyjną:

$$s_{jr}^{(n+1)} = s_{jr}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{A}^T \mathbf{Y} \mathbf{X}^T]_{jr}}{[\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{jr}}}. \quad (5.37)$$

Usprawnioną wersję algorytmu dla dwuortogonalnego modelu NMF zaproponowano w pracy [451]. Algorytm ten oprócz wspomnianych ograniczeń zakłada też lokalną niezmienniczość czynników, co prowadzi do uczenia na pewnej różnorodności zanurzonej w przestrzeni obserwacji, podobnie jak w rozdziale 3.2.5. Inne algorytmy dla dwuortogonalnego modelu NMF można odnaleźć w pracach [59, 270, 470].

#### 5.4.2. Liniowa kombinacja funkcji bazowych

W wielu zastosowaniach modelu NMF wektory bazowe lub wektory cech mogą być aproksymowane przez liniową kombinację jednomodalnych funkcji bazowych. W pracy [488] zaproponowano, aby do modelowania wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{A}$  wykorzystać radialne funkcje bazowe, wyrażone przez funkcje gaussowskie (ang. *Gaussian Radial Basis Functions*). Funkcje te są nieujemne, ograniczone, gładkie i jednomodalne. Założono, że ich liniowa kombinacja dobrze aproksymuje daną klasę sygnałów spektralnych. Narzucenie jednomodalności może osłabić problem niejednoznaczności czynników, ponieważ ograniczenie to jest postrzegane jako wiedza aprioryczna o cechach estymowanych czynników. Takie podejście może być szczególnie przydatne w chromatografii gazowej ze spektrometrią mas (ang. *Gas Chromatography-Mass Spectrometry*) [278], analizie danych fluorescencyjnych [152, 167] oraz spektroskopii Ramana [264, 310, 385].

W tej strukturze modelu NMF zakłada się, że w modelu (1.1)  $j$ -ty wektor kolumnowy macierzy  $\mathbf{A}$ , dla  $j = 1, \dots, J$ , reprezentowany jest przez liniową kombinację pewnych wektorów bazowych  $\{\phi_1, \dots, \phi_M\} \subset \mathbb{R}^I$ , zatem:

$$\mathbf{a}_j = \sum_{m=1}^M s_{mj} \phi_m \quad (5.38)$$

gdzie  $\{s_{mj}\} \in \mathbb{R}$  są współczynnikami skalującymi. Wektory bazowe generowane są za pomocą funkcji bazowych  $\phi(\theta)$  w taki sposób, że  $\forall m, i : \phi_m = [\phi_m(\theta_i)] \in \mathbb{R}^I$

oraz  $\phi_m : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Definiując macierze  $\Phi = [\phi_1, \dots, \phi_M] \in \mathbb{R}^{I \times M}$  oraz  $\mathbf{S} = [s_{mj}] \in \mathbb{R}^{M \times J}$ , uzyskuje się następujący model NMF:

$$\mathbf{Y} = \Phi \mathbf{S} \mathbf{X}, \quad \text{p.o. } \Phi \mathbf{S} \geq \mathbf{0} \quad \text{oraz} \quad \mathbf{X} \geq \mathbf{0}, \quad (5.39)$$

gdzie  $\mathbf{A} = \Phi \mathbf{S} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ .

Funkcje bazowe  $\{\phi_m(\theta_i)\}$  mogą mieć różne postaci. Można je wyrazić przez funkcje gaussowskie:

$$\phi_m(\theta_i) = \exp \left\{ -\frac{(\theta_i - \Delta a m)^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (5.40)$$

gdzie  $\theta_i = \Delta a i$  dla  $i = 1, \dots, I$ ,  $\Delta a > 0$  – ustalony krok,  $\sigma^2 > 0$  – założona wariancja. Gdy  $M = I$ , wówczas  $\Delta a = 1$  oraz  $\sigma^2 = 1$ . Jeśli estymowane wektory cech (wektory  $\mathbf{a}_j$ ) modelowane są superpozycją funkcji gaussowskich o dużej wariancji, to jest możliwy przypadek:  $M < I$ .

Zakładając, że błąd residualny modelu (5.39) ma rozkład gaussowski, zadania estymacji czynników  $\mathbf{S}$  i  $\mathbf{X}$  mają następujące postaci:

$$\min_{\mathbf{X}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \Phi \mathbf{S} \mathbf{X}\|_F^2, \quad \text{p.o. } \mathbf{X} \geq \mathbf{0}, \quad (5.41)$$

$$\min_{\mathbf{S}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \Phi \mathbf{S} \mathbf{X}\|_F^2, \quad \text{p.o. } \Phi \mathbf{S} \geq \mathbf{0}. \quad (5.42)$$

Zadanie (5.41) można rozwiązać za pomocą dowolnego algorytmu numerycznego dla liniowego zadania najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. W pracy [488] zadanie to rozwiązano, stosując algorytm FC-NNLS (algorytm 13 w rozdziale 4.9.2).

W celu rozwiązania zadania (5.42), funkcję celu przekształcono do postaci zwektoryzowanej:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{S}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \Phi \mathbf{S} \mathbf{X}\|_F^2 = \frac{1}{2} \|\bar{\mathbf{y}} - (\mathbf{X}^T \otimes \Phi) \bar{\mathbf{s}}\|_2^2 \\ &= \frac{1}{2} \bar{\mathbf{y}}^T \bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^T (\mathbf{X}^T \otimes \Phi) \bar{\mathbf{s}} + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{s}}^T (\mathbf{X} \mathbf{X}^T \otimes \Phi^T \Phi) \bar{\mathbf{s}}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{s}} = \text{vec}(\mathbf{S}) \in \mathbb{R}^{JM}$  oraz  $\bar{\mathbf{y}} = \text{vec}(\mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^{IT}$  są odpowiednio zwektoryzowanymi macierzami  $\mathbf{S}$  oraz  $\mathbf{Y}$ . Z zależności (5.43) wynika, że zadanie estymacji



faktora  $\mathbf{S}$  można wyrazić przez zadanie programowania kwadratowego przy ograniczeniach nierównościowych:

$$\min_{\bar{\mathbf{s}}} \frac{1}{2} \bar{\mathbf{s}}^T \mathbf{Q} \bar{\mathbf{s}} + \mathbf{c}^T \bar{\mathbf{s}}, \quad \text{p.o.} \quad (\mathbf{I}_J \otimes \Phi) \bar{\mathbf{s}} \geq \mathbf{0}, \quad (5.44)$$

gdzie  $\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T \otimes \Phi^T \Phi \in \mathbb{R}^{JM \times JM}$  oraz  $\mathbf{c} = -(\mathbf{X} \otimes \Phi^T) \bar{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{JM}$ . Zadanie (5.44) wymaga poniesienia dużego kosztu obliczeniowego ale może być usprawnione, ponieważ obie macierze  $\mathbf{Q}$  i  $\mathbf{I}_J \otimes \Phi$  są symetryczne, a ta druga jest dodatkowo bardzo rzadka. Jeśli  $T \gg J$  oraz  $I \gg J$ , wektor  $\mathbf{c}$  powinien być obliczany przez wektoryzację macierzy  $\Phi^T \mathbf{Y} \mathbf{X}^T$ , czyli:

$$\mathbf{c} = -(\mathbf{X} \otimes \Phi^T) \bar{\mathbf{y}} = -\text{vec} \{ \Phi^T \mathbf{Y} \mathbf{X}^T \}. \quad (5.45)$$

Dla  $M = I$ ,  $\Delta a = 1$  oraz  $\sigma^2 = 1$ :  $\lambda_{\min}(\Phi^T \Phi) > 0$ , gdzie  $\lambda_{\min}(\cdot)$  jest minimalną wartością własną macierzy. Ponieważ dla innych parametrów możliwy jest przypadek  $\lambda_{\min}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T) = 0$ , zatem macierz  $\mathbf{Q}$  może być nieujemnie określona. Małe wartości własne macierzy  $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$  mogą pojawić się, gdy wiersze macierzy  $\mathbf{Y}$  są silnie skorelowane lub źle skalowane. Taki przypadek może wystąpić, zwłaszcza w początkowych iteracjach. Aby uniknąć złego uwarunkowania macierzy  $\mathbf{Q}$ , należy zastosować odpowiednią regularyzację zadania estymacji. W pracy [488] zaproponowano standardową regularyzacji Tichonowa z malejącym parametrem regularyzacji. To podejście motywowane jest zregularyzowanym algorytmem NNLS (rozdz. 4.9.3). W początkowym etapie aktualizacji, parametr ten przyjmuje duże wartości, a następnie szybko maleje z iteracjami do pewnej małej wartości progowej. Uwzględniając ten typ regularyzacji, zadanie (5.44) jest wypukłe i w rezultacie każdy algorytm do rozwiązywania wypukłych zadań programowania kwadratowego może być tutaj zastosowany. W pracy [488] zastosowano algorytm zmiennych aktywnych [329], ponieważ założono, że macierz  $\mathbf{S}$  może być rzadka. Algorytm punktów wewnętrznych (rozdz. 4.8) może być również zastosowany do rozwiązania tego problemu, jednakże z trochę większym kosztem obliczeniowym.

Kompletną wersję algorytmu tej struktury modelu NMF przedstawiono za pomocą algorytmu 25, którego nazwano algorytmem GRBF. Badania eksperymentalne przeprowadzone w pracy [488] pokazują, że zbieżność tego algorytmu jest monotoniczna. Dowolne zatem kryterium stopu z rozdziału 4.3 może być tutaj zastosowane.

Podobną strukturę modelu NMF zaproponowano w pracy [503], w której macierz funkcji bazowych  $\Phi$  generowana była przez krzywe B-sklejane oraz  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}_+^{M \times J}$

**Algorytm 25. GRBF**


---

**Wejście:**  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$ ,  $J$  – rząd faktoryzacji,  $M$  – liczba funkcji bazowych,  
 $\Delta a$  – predefiniowany krok,  $\sigma^2$  – wariancja wstępna,  
 $\alpha_0$  – początkowa wartość parametru regularyzacji,  
 $\bar{\alpha}$  – progowa wartość parametru regularyzacji

**Wyjście:** Faktory  $\hat{\mathbf{A}}$  oraz  $\hat{\mathbf{X}}$

- 1 Inicjalizacja:  $\mathbf{A}^{(0)}$  oraz  $\mathbf{X}^{(0)}$ ,  $n = 0$ ;
- 2 Wyznacz macierz  $\Phi \in \mathbb{R}^{I \times M}$  według (5.40);
- 3 **repeat**
- 4      $\alpha^{(n+1)} = \max \{ \bar{\alpha}, 2^{-n} \alpha_0 \}$ ;     // Reguła parametru regularyzacji
- 5      $\mathbf{X}^{(n+1)} \leftarrow \text{fcnnls}(\mathbf{A}^{(n)}, \mathbf{Y}, \alpha^{(n+1)})$ ;     // Aktualizacja macierzy  $\mathbf{X}$
- 6      $\mathbf{Q}^{(n+1)} = \mathbf{X}^{(n+1)}(\mathbf{X}^{(n+1)})^T \otimes \Phi^T \Phi + \alpha^{(n+1)} \mathbf{I}_{JM} \in \mathbb{R}^{JM \times JM}$ ;
- 7      $\mathbf{c}^{(n+1)} = -\text{vec} \{ \Phi^T \mathbf{Y} (\mathbf{X}^{(n+1)})^T \} \in \mathbb{R}^{JM}$ ;
- 8     Rozwiąż zadanie (5.44);
- 9     Wyznacz  $\mathbf{S}^{(n+1)} = \text{mtx}(\bar{\mathbf{s}}^{(n+1)}, M, J)$ ;     // Aktualizacja macierzy  $\mathbf{S}$
- 10     $\mathbf{A}^{(n+1)} = \Phi \mathbf{S}^{(n+1)} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ ;     // Aktualizacja macierzy  $\mathbf{A}$
- 11     $n \leftarrow n + 1$ ;
- 11 **until** Kryterium zatrzymania jest spełnione;

---

**5.4.3. Struktura wypukła**

W wypukłej strukturze modelu NMF (ang. *convex NMF*) zakłada się, że wektory bazowe macierzy  $\mathbf{A}$  są wypukłą kombinacją wektorów obserwacji  $\{\mathbf{y}_t\}$ , zatem:

$$\forall j : \mathbf{a}_j = \sum_{t=1}^T s_{tj} \mathbf{y}_t, \quad \text{p.o.} \quad \sum_{t=1}^T s_{tj} = 1 \quad \text{oraz} \quad \forall j, t : s_{jt} \geq 0. \quad (5.46)$$

Po podstawieniu zależności (5.46) do modelu (1.1) uzyskuje się model wypukły NMF:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y} \mathbf{S} \mathbf{X}, \quad (5.47)$$

gdzie  $\mathbf{S} = [s_{tj}] \in \mathbb{R}_+^{T \times J}$ ,  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ,  $\mathbf{1}_T^T \mathbf{S} = \mathbf{1}_J^T$ ,  $\mathbf{1}_J^T \mathbf{X} = \mathbf{1}_T^T$ , a  $J$  jest rzędem faktoryzacji. Model (5.47) nie ogranicza elementów macierzy  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{I \times T}$  do wartości nieujemnych. Jest on więc w jakimś sensie podobny do modelu (5.39),

jednak w tym przypadku wektorami bazowymi są wypukłe kombinacje wektorów obserwacji i macierz  $\mathbf{Y}$  może mieć elementy ujemne.

Wypukła struktura modelu NMF została zaproponowana przez Dinga i pozostały autorów pracy [110] do grupowania danych o wartościach bez ograniczeń znaku. Jest on również analizowany i geometrycznie interpretowany w pracach [429, 430], a także w [124] w kontekście jego zastosowania do obrazowania hiperspektralnego.

Jeśli wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}$  są próbkami danych, które należy pogrupować, a  $J$  jest liczbą oczekiwanych grup, to wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{Y}\mathbf{S}$  wyznaczają punkty środkowe skupień, a wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{X}$  określają prawdopodobieństwo przynależności danych próbek do określonych skupień. Założenie, że punkty środkowe skupień wyznaczone są przez kombinację wypukłą wszystkich wektorów danych, należy traktować jako informację aprioryczną o faktorach modelu, co w rezultacie znacząco poprawia efekt grupowania.

W celu wyznaczenia faktorów  $\mathbf{S}$  i  $\mathbf{X}$  założono, że funkcja celu wyrażona jest przez odległość euklidesową. Niech  $[\mathbf{B}]^+ = [\max\{0, b_{mn}\}]$  oraz  $[\mathbf{B}]^- = [\max\{0, -b_{mn}\}]$  dla dowolnej macierzy  $\mathbf{B} = [b_{mn}] \in \mathbb{R}^{M \times N}$ . Uwzględniając podane operatory, funkcja celu po przekształceniach sprowadza się do postaci:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{S}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{X}\|_F^2 = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}) - \text{tr}(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{X}) \\ &+ \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T \mathbf{Y}^T \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T) = -\text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^+ \mathbf{S}) + \text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^- \mathbf{S}) \\ &+ \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^+ \mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T) - \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^- \mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T) \\ &+ \text{const.} \end{aligned} \quad (5.48)$$

W pracy [110] zaproponowano aby każdy ze składników funkcji celu w (5.48) aproksymować odpowiednią funkcją pomocniczą. Wykorzystując nierówność  $\xi \geq 1 + \ln(\xi)$  dla  $\xi > 0$ , składnik  $\text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^+ \mathbf{S})$  można ograniczyć z dołu przez nierówność:

$$\text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^+ \mathbf{S}) \geq \sum_{t,j} [\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]]_{jt}^+ s_{tj}^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{s_{tj}}{s_{tj}^{(n)}} \right) = G_1(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}). \quad (5.49)$$

Analogicznie, składnik:  $\tilde{\Psi} = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^- \mathbf{S}\mathbf{X}\mathbf{X}^T)$  może być ograniczony poprzez nierówność:

$$\tilde{\Psi} \geq \frac{1}{2} \sum_{j,t,p,r} [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]_{pt}^- [\mathbf{X}\mathbf{X}^T]_{rj} s_{tr}^{(n)} s_{pj}^{(n)} \left( 1 + \ln \frac{s_{tr} s_{pj}}{s_{tr}^{(n)} s_{pj}^{(n)}} \right) = G_2(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}). \quad (5.50)$$

Stosując nierówność  $\alpha \leq \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\beta}$  dla dowolnych  $\alpha, \beta > 0$ , składnik  $\text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^{-1} \mathbf{S})$  może być ograniczony z góry przez nierówność:

$$\text{tr}(\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^{-1} \mathbf{S}) \leq \sum_{t,j} [\mathbf{X}[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}]^{-1}]_{jt} \frac{s_{tj}^2 + (s_{tj}^{(n)})^2}{2s_{tj}^{(n)}} = G_3(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}). \quad (5.51)$$

Z kolei, korzystając z nierówności (4.111) składnik  $\frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S} \mathbf{X} \mathbf{X}^T)$  można ograniczyć następująco:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S} \mathbf{X} \mathbf{X}^T) &\leq \sum_{t,j} \frac{[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{tj} s_{tj}^2}{s_{tj}^{(n)}} \\ &= G_4(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}). \end{aligned} \quad (5.52)$$

Z zależności (5.49)–(5.52) wynika, że funkcja pomocnicza  $G(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)})$  dla funkcji (5.48) względem argumentu  $\mathbf{S}$  jest wypukła i ma postać:  $G(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) = G_4(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) + G_3(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) - G_2(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) - G_1(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) + \text{const}$ . Z warunku stacjonarności  $\nabla_{\mathbf{S}} G(\mathbf{S}, \mathbf{S}^{(n)}) \triangleq \mathbf{0}$  otrzymuje się minimum globalne, które zgodnie z zadaniem (4.62) prowadzi do następującej reguły iteracyjnej dla aktualizacji faktora  $\mathbf{S}$ :

$$s_{tj}^{(n+1)} = s_{tj}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{X}^T + [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] - \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{tj}}{[\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] - \mathbf{X}^T + [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{X} \mathbf{X}^T]_{tj}}}. \quad (5.53)$$

Przeprowadzając analogiczne przekształcenia uzyskuje się następującą regułę iteracyjną dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$ :

$$x_{jt}^{(n+1)} = x_{jt}^{(n)} \sqrt{\frac{[\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] - \mathbf{S} \mathbf{X}^{(n)}]_{jt}}{[\mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] - \mathbf{S}^T [\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}] + \mathbf{S} \mathbf{X}^{(n)}]_{jt}}}. \quad (5.54)$$

Aby reguły iteracyjne (5.53) i (5.54) prowadziły do estymacji czynników w modelu (5.47), należy po każdym kroku iteracyjnym normalizować wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{S}$  i  $\mathbf{X}$  do jednostkowej normy  $l_1$ .

Szczególnym przypadkiem wypukłej struktury modelu NMF jest tzw. projekcyjna (ang. *Projective NMF*) [467] lub grupowa (ang. *Cluster-NMF*) [110] struktura modelu NMF. W strukturach tych zakłada się symetryczność czynników. Wprowadzając  $\mathbf{X} \triangleq \mathbf{S}^T$  do modelu (5.47), uzyskuje się grupową strukturę modelu

NMF, która jest blisko związana z metodą grupowania  $k$ -średnich. Projekcyjną strukturę modelu NMF [467] wyraża się następującym modelem:  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T\mathbf{Y}$ , gdzie  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$ , a  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  jest nieujemną macierzą projekcyjną, której kolumny są w przybliżeniu ortogonalne. Macierz  $\mathbf{A}$  w tym modelu zawiera informację o wskaźnikach grup. Jeśli grupy wektorów wierszowych w macierzy  $\mathbf{Y}$  są rozłączne, to  $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}_J$ . W takim przypadku, jeśli  $a_{ij} = 1$  oraz  $\forall m \neq i : a_{mj} = 0$ , to  $i$ -ty wiersz macierzy  $\mathbf{Y}$  należy do  $j$ -tej grupy.

## 5.5. Struktura afiniczna

Jeśli macierze  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  w modelu (1.1) nie zawierają elementów o zerowej wartości, nieujemna faktoryzacja macierzy  $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X}$  jest niejednoznaczna. Jeśli tylko jeden z czynników zawiera elementy pozytywne, możliwe jest przekształcenie afiniczne wektorów wierszowych lub kolumnowych macierzy  $\mathbf{A}\mathbf{X}$ , które łagodzi problem niejednoznaczności faktoryzacji. To przekształcenie prowadzi do struktury afinicznego modelu NMF (ang. *Affine NMF*), która została zaproponowana w pracy [254]. Zakładając, że macierz  $\mathbf{A}$  zawiera tylko elementy dodatnie, model tej struktury można przedstawić następująco:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_0\mathbf{1}_T^T, \quad (5.55)$$

gdzie  $\mathbf{a}_0 \in \mathbb{R}_+^I$  – wektor przesunięcia względem składowej stałej. Należy go dobrać w taki sposób, aby estymowana macierz  $\hat{\mathbf{A}}$  zawierała możliwie dużo elementów zerowych lub o względnie małej wartości.

Stosując funkcję odległości euklidesowej dla modelu (5.55), reguła aktualizacji wektora  $\mathbf{a}_0$  jest postaci:

$$\mathbf{a}_0 \leftarrow \mathbf{a}_0 \circledast \frac{\mathbf{Y}\mathbf{1}_T}{(\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_0\mathbf{1}_T^T)\mathbf{1}_T}. \quad (5.56)$$

Konsekwentnie, stosując algorytm multiplikatywny, reguły aktualizacji dla czynników  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  wyrażają się następująco:

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} \frac{[\mathbf{Y}\mathbf{X}^T]_{ij}}{[(\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_0\mathbf{1}_T^T)\mathbf{X}^T]_{ij}}, \quad x_{jt} \leftarrow x_{jt} \frac{[\mathbf{A}^T\mathbf{Y}]_{jt}}{[\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{a}_0\mathbf{1}_T^T)]_{jt}}. \quad (5.57)$$

Ponieważ oczekuje się, że estymowana macierz  $\mathbf{A}$  jest możliwie rzadka, efektywniejsze rozwiązanie uzyskuje się, jeśli dla estymacji czynnika  $\mathbf{A}$  zastosuje się zregularyzowany algorytm, zwłaszcza z wymuszaniem rzadkości (rozdz. 4.4.5).

Z kolei, jeśli macierz  $\mathbf{X}$  zawiera tylko elementy dodatnie, a  $\mathbf{A}$  jest macierzą rzadką, to model afiniczny NMF ma postać:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{1}_I \underline{\mathbf{x}}_0, \quad (5.58)$$

gdzie  $\underline{\mathbf{x}}_0 \in \mathbb{R}_+^{1 \times T}$ .

Po wykonaniu podobnych przekształceń, reguła aktualizacji dla  $\underline{\mathbf{x}}_0$  wyraża się następująco:

$$\underline{\mathbf{x}}_0 \leftarrow \underline{\mathbf{x}}_0 \circledast \frac{\mathbf{1}_I^T \mathbf{Y}}{\mathbf{1}_I^T (\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{1}_I \underline{\mathbf{x}}_0)}. \quad (5.59)$$

## 5.6. Struktura nieliniowa

Struktura nieliniowa modelu NMF, nazywana też strukturą jądrową modelu NMF (ang. *Kernel NMF*), została zaproponowana w pracy [40]. Bazuje na koncepcji transformacji danych obserwowanych z przestrzeni  $\mathbb{R}^I$  do przestrzeni  $\mathbb{R}^P$  o zwykle dużo większym wymiarze ( $P \gg I$ ), w której związki korelacyjne między wektorami danych są łatwiejsze do interpretacji. Takie podejście stosowane jest w wielu metodach jądrowych, np. w jądrowej analizie komponentów głównych [399].

Niech  $\phi : \mathbf{y}_t \rightarrow \phi(\mathbf{y}_t) \in \mathbb{R}_+^P$ , zatem  $\mathbf{Y} \rightarrow \phi(\mathbf{Y}) = [\phi(\mathbf{y}_1), \dots, \phi(\mathbf{y}_T)] \in \mathbb{R}_+^{P \times T}$ . Strukturę nieliniową modelu NMF można wyrazić następująco:

$$\phi(\mathbf{Y}) = \phi(\mathbf{A})\mathbf{X} = \mathbf{Z}\mathbf{X}, \quad (5.60)$$

gdzie  $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}_+^{P \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . Jeśli funkcja transformująca  $\phi$  jest odpowiednio dobrana, to nieliniowe zależności korelacyjne między próbkami zbioru  $\{\mathbf{y}_t\}$  w przestrzeni  $\mathbb{R}^I$  mogą stać się liniowe w przestrzeni  $\mathbb{R}^P$ , co ułatwia ich przetwarzanie i interpretację.

Przyjmując, że funkcja celu dla estymacji czynników modelu (5.60) wyrażona jest przez odległość euklidesową, wówczas:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{Z}, \mathbf{X}) &= \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{Y}) - \mathbf{Z}\mathbf{X}\|_F^2 = \frac{1}{2} \text{tr}((\phi(\mathbf{Y}))^T \phi(\mathbf{Y})) - \text{tr}((\phi(\mathbf{Y}))^T \mathbf{Z}\mathbf{X}) \\ &+ \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{Z}^T \mathbf{Z}\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{K}_Z \mathbf{X}) - \text{tr}(\mathbf{K}_{ZY} \mathbf{X}) \\ &+ \text{const}, \end{aligned} \quad (5.61)$$

gdzie  $\mathbf{K}_Z = (\phi(\mathbf{A}))^T \phi(\mathbf{A}) \in \mathbb{R}_+^{J \times J}$  oraz  $\mathbf{K}_{ZY} = (\phi(\mathbf{Y}))^T \phi(\mathbf{A}) \in \mathbb{R}_+^{T \times J}$  są macierzami jądra. Ich elementy wyznaczone są przez funkcje jądra:  $\forall i, j \in \{1, \dots, J\}$ :  $[\mathbf{K}_Z]_{ij} = \langle \phi(\mathbf{a}_i), \phi(\mathbf{a}_j) \rangle = \kappa_Z(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j)$  oraz  $[\mathbf{K}_{ZY}]_{tj} = \langle \phi(\mathbf{y}_t), \phi(\mathbf{a}_j) \rangle = \kappa_{ZY}(\mathbf{y}_t, \mathbf{a}_j)$ . Funkcje te najczęściej definiowane są przez funkcję wielomianową:  $\kappa(\boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\xi}_j) = \langle \boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\xi}_j \rangle^d$  dla  $d > 0$  lub funkcję gaussowską  $\kappa(\boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\xi}_j) = \exp \left\{ -\frac{\|\boldsymbol{\xi}_i - \boldsymbol{\xi}_j\|_2^2}{2\sigma^2} \right\}$  z wariancją  $\sigma^2$  dla dowolnych wektorów rzeczywistych  $\boldsymbol{\xi}_i$  i  $\boldsymbol{\xi}_j$ .

Łatwo zauważyć, że chociaż przekształcenie  $\phi$  transformuje dane z  $\mathbb{R}^J$  do  $\mathbb{R}^P$ , gdzie  $P$  ma bardzo dużą wartość, w implementacji praktycznej nie ma potrzeby wykonywania tej transformacji. Należy tylko wyznaczyć macierze jądra  $\mathbf{K}_Z$  i  $\mathbf{K}_{ZY}$ , które nie są zbyt duże.

Gradient funkcji celu (5.61) ze względu na  $\mathbf{X}$  można przedstawić w postaci:

$$\nabla_{\mathbf{X}} \Psi(\mathbf{Z}, \mathbf{X}) = \mathbf{K}_Z \mathbf{X} - \mathbf{K}_{ZY} = \nabla_{\mathbf{X}}^+ \Psi(\mathbf{Z}, \mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{X}}^- \Psi(\mathbf{Z}, \mathbf{X}). \quad (5.62)$$

Stosując formułę (4.52), uzyskuje się regułę aktualizacji dla faktora  $\mathbf{X}$ :

$$\mathbf{X}^{(n+1)} = \mathbf{X}^{(n)} \circledast \mathbf{K}_{ZY}^{(n)} \oslash (\mathbf{K}_Z^{(n)} \mathbf{X}^{(n)}). \quad (5.63)$$

Niech  $\Psi(\mathbf{Z}, \mathbf{X}) = \sum_{t=1}^T \Psi_t(\mathbf{a}_j, \mathbf{x}_t)$ , gdzie  $\Psi_t(\mathbf{a}_j, \mathbf{x}_t) = \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{y}_t) - \sum_{j=1}^J \phi(\mathbf{a}_j) x_{jt}\|_2^2$ . Gradient funkcji  $\Psi_t(\mathbf{a}_j, \mathbf{x}_t)$  ze względu na  $\mathbf{a}_j$  ma postać:

$$\nabla_{\mathbf{a}_j} \Psi_t(\mathbf{a}_j, \mathbf{x}_t) = \sum_{i=1}^J x_{it} x_{jt} \dot{\kappa}_Z(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) \mathbf{a}_i - \sum_{t=1}^T x_{jt} \dot{\kappa}_{ZY}(\mathbf{y}_t, \mathbf{a}_j) \mathbf{y}_t, \quad (5.64)$$

gdzie  $\dot{\kappa}$  – pochodna elementów odpowiedniej macierzy jądra.

Przykładowo, dla funkcji gaussowskiej:

$$\dot{\kappa}(\boldsymbol{\xi}_i, \boldsymbol{\xi}_j) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} \kappa = \left( \frac{\boldsymbol{\xi}_i - \boldsymbol{\xi}_j}{\sigma^2} \right) \exp \left\{ -\frac{\|\boldsymbol{\xi}_i - \boldsymbol{\xi}_j\|_2^2}{2\sigma^2} \right\}.$$

Na podstawie ogólnej formuły iteracyjnej (4.52), reguła aktualizacji dla faktora  $\mathbf{A}$  wyraża się następująco:

$$\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{A}^{(n)} \circledast (\mathbf{Y} \dot{\mathbf{K}}_{ZY}^{(n)}) \oslash (\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{D}^{(n)} \dot{\mathbf{K}}_Z^{(n)}), \quad (5.65)$$

gdzie  $\dot{\mathbf{K}}_{ZY}^{(n)} = [\dot{\kappa}_{ZY}(\mathbf{y}_t, \mathbf{a}_j)]$ ,  $\dot{\mathbf{K}}_Z^{(n)} = [\dot{\kappa}_Z(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j)]$  oraz  $\mathbf{D}^{(n)} = \text{diag} \left( \sum_{t=1}^T x_{jt} \right)$ .

Buciu i pozostali autorzy pracy [40] udowodnili, że multiplikatywne reguły aktualizacji (5.63) i (5.65) zapewniają monotoniczną zbieżność do punktu stacjonarnego.

Wyniki badań struktury nieliniowej modelu NMF można odnaleźć też w innych pracach. Przykładowo, w pracy [275] faktoryzacja ta w połączeniu z dyskryminacyjną funkcją kary została zrealizowana za pomocą algorytmu rzutowania gradientu, a następnie wykorzystana do klasyfikacji obrazów twarzy. Metoda ta znalazła również inne zastosowania, np. w analizie sygnałów encefalografii elektrycznej [259]. Struktura nieliniowa modelu NMF z jądrem Mercera analizowana jest w pracy [342]. Inne zastosowania tego typu faktoryzacji można odnaleźć, np. w literaturze [6, 273].



## 6. Modele dekompozycji tensorów

W wielu metodach ekstrakcji cech, reprezentacji danych ukrytych lub redukcji wymiarowości modelu, dane obserwowane zapisywane są w postaci tabeli wielowymiarowej, która zgodnie z definicją 1.2 nazywana jest *tensorom*. Tak zapisane dane z reguły mogą być przekształcone do tablicy dwuwymiarowej (macierzy) i w takiej formie reprezentowane odpowiednim modelem dekompozycji macierzy. Możliwe jest też inne podejście, polegające na reprezentacji obserwowanych danych bezpośrednio za pomocą odpowiedniego modelu dekompozycji tensora.

W niniejszym rozdziale omówiono kilka wybranych modeli dekompozycji tensora, zwłaszcza tensora o elementach nieujemnych. Przedstawiono modele fundamentalne, takie jak model CP lub model dekompozycji Tuckera oraz związki między nimi. Następnie rozważano różne modyfikacje modeli podstawowych, struktury uproszczone i rozszerzenia.

Podobnie jak w modelu NMF, estymacja czynników w modelach dekompozycji tensorów zwykle realizowana jest za pomocą algorytmu naprzemiennej minimalizacji funkcji celu. Dla wybranych modeli omówiono podejście algorytmiczne oraz ich potencjalne zastosowania.

### 6.1. Wybrane działania na tensorach

Przedstawiono wybrane działania na tensorach, które są istotne do zrozumienia dalszych rozważań. Przyjęto oznaczenia podobnie jak w pracach [89, 235]. Niech  $\mathcal{Y} = [y_{i_1, i_2, \dots, i_N}] \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  będzie tensorem  $N$ -tego stopnia, nazywanym również tensorem  $N$ -modalnym.

- *Rozwinięcie tensora (matrycyzacja) względem  $n$ -tego modu*: Tensor  $\mathcal{Y}$  można przekształcić do macierzy względem dowolnego modu  $n$ , gdzie  $n = 1, \dots, N$ . Niech  $\mathbf{Y}_{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times \prod_{p \neq n} I_p}$  będzie macierzą otrzymaną z tensora  $\mathcal{Y}$  przez jego rozwinięcie względem  $n$ -tego modu. W wyniku takiego rozwinięcia, element

tensora  $y_{i_1, i_2, \dots, i_N}$  znajduje się w macierzy  $\mathbf{Y}_{(n)}$  na pozycji  $(i_n, j)$ , gdzie

$$j = 1 + \sum_{m \neq n}^N (i_m - 1) J_m \text{ dla } J_m = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } m = 1, \\ 1, & \text{jeżeli } m = 2 \text{ i } n = 1, \\ \sum_{l \neq n}^{m-1} I_l, & \text{w przeciwnym razie.} \end{cases} \quad (6.1)$$

Przykładowo, rozwijając tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  względem modu pierwszego uzyskuje się macierz  $\mathbf{Y}_{(1)} = [y_{i_1, j}] \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 I_3}$ , gdzie  $j = i_2 + (i_3 - 1)I_2$ . Dla modu drugiego:  $\mathbf{Y}_{(2)} = [y_{i_2, j}] \in \mathbb{R}^{I_2 \times I_1 I_3}$  oraz  $j = i_1 + (i_3 - 1)I_1$ . Z kolei, rozwinięcie tego tensora względem modu trzeciego prowadzi do macierzy:  $\mathbf{Y}_{(3)} = [y_{i_3, j}] \in \mathbb{R}^{I_3 \times I_1 I_2}$  oraz  $j = i_1 + (i_2 - 1)I_1$ .

- *Iloczyn tensor-macierz względem  $n$ -tego modu:* Iloczyn tensora  $\mathcal{Y} = [y_{i_1, i_2, \dots, i_N}] \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  i macierzy  $\mathbf{U} = [u_{j, i_n}] \in \mathbb{R}^{J \times I_n}$  względem  $n$ -tego modu jest tensorem:

$$\mathcal{Z} = [z_{i_1, \dots, i_{n-1}, j, i_{n+1}, \dots, i_N}] = \mathcal{Y} \times_n \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_{n-1} \times J \times I_{n+1} \times \dots \times I_N}, \quad (6.2)$$

który wyraża się następująco:

$$z_{i_1, \dots, i_{n-1}, j, i_{n+1}, \dots, i_N} = \sum_{i_n=1}^{I_n} y_{i_1, \dots, i_n, \dots, i_N} u_{j, i_n}. \quad (6.3)$$

Dla różnych modów mnożenie tensor-macierz jest przemienne tylko ze względu na kolejność faktorów, tzn.  $\mathcal{Y} \times_n \mathbf{U} \times_m \mathbf{V} = \mathcal{Y} \times_m \mathbf{V} \times_n \mathbf{U}$  dla dowolnych modów takich, że  $m \neq n$ . Jeżeli mody są takie same, to  $\mathcal{Y} \times_n \mathbf{U} \times_n \mathbf{V} = \mathcal{Y} \times_n (\mathbf{V}\mathbf{U})$ .

- *Iloczyn tensor-wektor względem  $n$ -tego modu:* Iloczyn tensora  $\mathcal{Y} = [y_{i_1, i_2, \dots, i_N}] \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  i wektora  $\mathbf{u} = [u_{i_n}] \in \mathbb{R}^{I_n}$  względem  $n$ -tego modu jest tensorem  $\mathcal{Z} = \mathcal{Y} \bar{\times}_n \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{I_1 \times \dots \times I_{n-1} \times I_{n+1} \times \dots \times I_N}$  o stopniu  $(N - 1)$ .
- *Iloczyn skalarny (wewnętrzny) tensorów:* Iloczyn wewnętrzny tensorów  $\mathcal{X}, \mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  ma postać:

$$\langle \mathcal{X}, \mathcal{Y} \rangle = \sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \cdots \sum_{i_N=1}^{I_N} x_{i_1, i_2, \dots, i_N} y_{i_1, i_2, \dots, i_N}. \quad (6.4)$$

- *Norma Frobeniusa tensora:*

$$\|\mathcal{Y}\|_F = \sqrt{\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \cdots \sum_{i_N=1}^{I_N} y_{i_1, i_2, \dots, i_N}^2}, \quad (6.5)$$

zatem  $\|\mathcal{Y}\|_F^2 = \langle \mathcal{Y}, \mathcal{Y} \rangle$ .

Rozwijając tensor  $\mathcal{Z}$  w (6.2) względem  $n$ -tego modu, uzyskuje się:

$$\mathbf{Z}_{(n)} = \mathbf{U}\mathbf{Y}_{(n)} \in \mathbb{R}^{J \times \prod_{p \neq n} I_p}. \quad (6.6)$$

Niech  $\{\mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}^{J_1 \times I_1}, \mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}^{J_2 \times I_2}, \dots, \mathbf{U}^{(N)} \in \mathbb{R}^{J_N \times I_N}\}$  jest zbiorem  $N$  macierzy oraz  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$ . Wykonując mnożenia tensor-macierz względem wszystkich modów, otrzymuje się tensor:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Y} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}. \quad (6.7)$$

Podobnie jak w zależności (6.6), w wyniku rozwinięcia tensora  $\mathcal{Z}$  względem  $n$ -tego modu, uzyskuje się macierz:

$$\begin{aligned} \forall n: \mathbf{Z}_{(n)} &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{Y}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)} \right)^T \\ &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{Y}_{(n)} (\mathbf{U}^{\otimes -n})^T, \end{aligned} \quad (6.8)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{\otimes -n} = \mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}^{(\prod_{p \neq n} J_p \times \prod_{p \neq n} I_p)}$ , a symbol  $\otimes$  oznacza iloczyn Kroneckera.

Niech  $\mathcal{I}_N \in \mathbb{R}^{J \times \dots \times J}$  będzie superdiagonalnym tensorem jednostkowym o stopniu  $N$ . Tensor ten jest odpowiednikiem macierzy jednostkowej w przestrzeni  $\mathbb{R}^{J \times J}$ , zatem  $i_{j_1, j_2, \dots, j_N} = 1$  wtedy i tylko wtedy, gdy  $j_1 = j_2 = \dots = j_N$  oraz  $i_{j_1, j_2, \dots, j_N} = 0$  w pozostałych przypadkach. Niech

$$\mathfrak{U} = \left\{ \mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}^{I_1 \times J}, \mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}^{I_2 \times J}, \dots, \mathbf{U}^{(N)} \in \mathbb{R}^{I_N \times J} \right\}. \quad (6.9)$$

Mnożąc tensor  $\mathcal{I}_N$  przez macierze zbioru  $\mathfrak{U}$  względem wszystkich modów, uzyskuje się tensor:

$$\mathcal{Y} = \mathcal{I}_N \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}. \quad (6.10)$$

Rozwijając tensor  $\mathcal{Y}$  w (6.10) względem  $n$ -tego modu, uzyskuje się macierz:

$$\begin{aligned} \forall n: \mathbf{Y}_{(n)} &= \mathbf{U}^{(n)} \left( \mathbf{U}^{(N)} \odot \dots \odot \mathbf{U}^{(n+1)} \odot \mathbf{U}^{(n-1)} \odot \dots \odot \mathbf{U}^{(1)} \right)^T \\ &= \mathbf{U}^{(n)} (\mathbf{U}^{\odot -n})^T, \end{aligned} \quad (6.11)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{\odot -n} = \mathbf{U}^{(N)} \odot \dots \odot \mathbf{U}^{(n+1)} \odot \mathbf{U}^{(n-1)} \odot \dots \odot \mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}^{(\prod_{p \neq n} I_p \times J)}$ .

Symbol  $\odot$  oznacza iloczyn Khatri–Rao i dla macierzy  $\mathbf{U}^{(v)} = [\mathbf{u}_1^{(v)}, \dots, \mathbf{u}_J^{(v)}] \in \mathbb{R}^{I_v \times J}$  oraz  $\mathbf{U}^{(w)} = [\mathbf{u}_1^{(w)}, \dots, \mathbf{u}_J^{(w)}] \in \mathbb{R}^{I_w \times J}$ , gdzie  $v, w \in \{1, \dots, N\}$ , wyraża się postacią:

$$\mathbf{U}^{(v)} \odot \mathbf{U}^{(w)} = [\mathbf{u}_1^{(v)} \otimes \mathbf{u}_1^{(w)}, \dots, \mathbf{u}_J^{(v)} \otimes \mathbf{u}_J^{(w)}] \in \mathbb{R}^{I_v I_w \times J}. \quad (6.12)$$

Iloczyn Khatri–Rao nie jest przemienny. Dla podanych macierzy  $\mathbf{U}^{(v)}$  i  $\mathbf{U}^{(w)}$  zachodzi tożsamość:

$$\left(\mathbf{U}^{(v)} \odot \mathbf{U}^{(w)}\right)^T \left(\mathbf{U}^{(v)} \odot \mathbf{U}^{(w)}\right) = \left(\mathbf{U}^{(v)}\right)^T \mathbf{U}^{(v)} \otimes \left(\mathbf{U}^{(w)}\right)^T \mathbf{U}^{(w)}, \quad (6.13)$$

gdzie symbol  $\otimes$  oznacza iloczyn Hadamarda.

## 6.2. Nieujemna faktoryzacja tensora

Model nieujemnej faktoryzacji tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  można wyrazić w postaci (1.5). Jak już wspomniano, pomijając ograniczenia nieujemności w faktorach  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  dla  $n = 1, \dots, N$ , model ten sprowadza się do modeli CANDECOMP (ang. *Canonical Decomposition*) i PARAFAC (ang. *Parallel Factors*). Są to identyczne modele, które ukazały się w literaturze niezależnie w 1970 roku. Model CANDECOMP został opracowany przez Carrolla i Changa [53], a model PARAFAC został zaproponowany przez Harshmana [173]. Obecnie modele te często występują pod wspólną nazwą modelu CP [89, 235].

Model CP znalazł zastosowanie w wielu dziedzinach nauki [89, 408]. W zależności od zastosowania, estymowane faktory mają różne znaczenia i interpretację. Dekomponując obserwowany tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  według modelu CP, uzyskuje się zbiór macierzy  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$ , gdzie  $\mathbf{U}^{(n)}$  odpowiada  $n$ -temu modowi tensora  $\mathcal{Y}$ . Z kolei, wektory kolumnowe każdej macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$  reprezentują estymowane komponenty ukryte. Przykładowo, niech tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  składa się z  $I_3$  spektrogramów o  $I_1$  próbkach częstotliwości i  $I_2$  ramkach czasowych, ułożonych warstwowo względem trzeciego modu. Wówczas wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{U}^{(1)}$  określają profile częstotliwości, wektory kolumnowe z  $\mathbf{U}^{(2)}$  są komponentami czasowymi, wektory z  $\mathbf{U}^{(3)}$  zaś zawierają informacje o komponentach ukrytych względem trzeciego modu. Estymowane faktory mogą mieć też inną interpretację. Niech  $\mathbf{U}_j^{(1,2)} = \mathbf{u}_j^{(1)}(\mathbf{u}_j^{(2)})^T \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2}$  dla  $j = 1, \dots, J$ . Ponieważ  $\forall j : \text{rank}(\mathbf{U}_j^{(1,2)}) = 1$ , więc macierze te można interpretować jako spektrogramy cech ukrytych. Z kolei,

elementy wektorów  $\{\mathbf{u}_j^{(3)}\}$  są współczynnikami ich liniowej kombinacji. Wynika stąd, że  $i$ -ty spektrogram obserwowany można wyrazić za pomocą modelu:

$$\mathbf{Y}^{(i)} = \mathbf{U}^{(1)} \text{diag}(\mathbf{u}_i^{(3)}) (\mathbf{U}^{(2)})^T, \quad (6.14)$$

gdzie  $i = 1, \dots, I_3$ ,  $\mathbf{u}_i^{(3)} \in \mathbb{R}^{1 \times J}$  jest  $i$ -tym wektorem wierszowym macierzy  $\mathbf{U}^{(3)}$ , a  $\mathbf{Y}^{(i)} = [\mathcal{Y}]_{*,*,i} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2}$ . Faktory  $\mathbf{U}^{(1)}$  i  $\mathbf{U}^{(2)}$  są wspólne dla wszystkich spektrogramów w tensorze  $\mathcal{Y}$ . Tak więc, model CP umożliwia ekstrakcję wspólnych cech zbioru macierzy oraz odpowiednich współczynników skalujących.

Wymuszając nieujemność wszystkich estymowanych czynników, zarówno ekstrahowane cechy, jak i współczynniki ich liniowej kombinacji są nieujemne. Jest to sytuacja podobna jak w modelu NMF, jednak w tym przypadku estymowane cechy są dwuwymiarowe (macierze). Zakładając nieujemność czynników w modelu (6.14) oraz wykonując podstawienia  $\mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{A}$  oraz  $\mathbf{U}^{(2)} = \mathbf{X}^T$ , łatwo zauważyć, że nieujemna faktoryzacja tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  może być interpretowana w kontekście nieujemnej faktoryzacji macierzy warstwowych, uporządkowanych względem jednego z modów – w tym przypadku modu trzeciego. Tak więc, model CP z nieujemnymi czynnikami można postrzegać jako rozszerzenie koncepcji modelu NMF do reprezentacji nieujemnego tensora wielowymiarowego. Taka interpretacja pojawiła się po raz pierwszy w pracach Shashua, Hanzana i Polaka [176, 397], a zaproponowany model został nazwany modelem NTF. W pracach tych zaproponowano też algorytmy multiplikatywne do estymacji czynników w nieujemnej dekompozycji tensora, które są prostymi rozszerzeniami algorytmu MUE (rozdz. 4.4.1).

W wielu zastosowaniach nieujemność estymowanych czynników jest motywowana właściwościami ekstrahowanych cech i ich fizyczną interpretacją. Dlatego też ograniczenia nieujemności są szczególnie istotne w przypadku przybliżonej dekompozycji tensora, tzn. gdy dane obserwowane podlegają zaburzeniom, zgodnie z modelem (1.6). W takim przypadku, pominięcie tych ograniczeń może prowadzić do znacznych zaburzeń estymowanych czynników, co w efekcie może uniemożliwić ich właściwą interpretację.

Dokładny model NTF, tzn. model wyrażony przez (1.4) lub (1.5), można też interpretować jako rozszerzenie pojęcia nieujemnej faktoryzacji rzędu dla reprezentacji tensora. Koncepcja reprezentacji dowolnego tensora przez skończoną sumę tensorów rzędu pierwszego pojawiła się już w pracach Hitchcocka [187] w 1927 roku. Tak więc, liczbę  $J$  w modelu (1.4) można interpretować jako nieujemny rząd tensora  $\mathcal{Y}$ , natomiast w modelu CP jako rząd faktoryzacji. W przypadku modelu

(1.6), liczba  $J$  ma jednak inne znaczenie, określa bowiem liczbę estymowanych komponentów lub cech, podobnie jak dla modelu NMF.

W odróżnieniu od modelu NMF, dekompozycja tensora według modelu CP jest jednoznaczna w znacznie szerszym sensie. Oczywiście pojęcie jednoznaczności rozumiane jest w sposób podobny jak dla modelu NMF (def. 3.1), czyli z wyłączeniem niejednoznaczności co do permutacji i skalowania wektorów kolumnowych w faktorach. Zagadnienie jednoznaczności w tego rodzaju faktoryzacji analizowane jest w wielu pracach, począwszy od prac Harshmana [173, 174]. Dla tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  o stopniu  $N = 3$ , Kruskal [242, 243] udowodnił, że dekompozycja według modelu CP jest jednoznaczna, gdy spełniony jest warunek:

$$\text{rank}_k(\mathbf{U}^{(1)}) + \text{rank}_k(\mathbf{U}^{(2)}) + \text{rank}_k(\mathbf{U}^{(3)}) \geq 2J + 2, \quad (6.15)$$

gdzie  $\text{rank}_k(\mathbf{U})$  jest największą naturalną liczbą  $k$ , dla której każdy podzbiór  $k$  wybranych kolumn macierzy  $\mathbf{U}$  jest zbiorem wektorów liniowo niezależnych. Sidiropoulos oraz Bro [403] rozszerzyli nierówność (6.15) do tensorów stopnia  $N$ , uzyskując następujący warunek wystarczający:

$$\sum_{n=1}^N \text{rank}_k(\mathbf{U}^{(n)}) \geq 2J + N - 1. \quad (6.16)$$

Warunek ten jest także warunkiem koniecznym dla  $J \leq 3$  [425]. De Lathauwer [102] podał proste i użyteczne w praktycznych zastosowaniach zależności dla oceny jednoznaczności dekompozycji tensora stopnia trzeciego i czwartego w modelu CP. Dla  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  dekompozycja jest jednoznaczna, jeśli  $J < I_3$  oraz  $J(J-1) \leq \frac{1}{2}I_1(I_1-1)I_2(I_2-1)$ . Z kolei, dla  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3 \times I_4}$  konieczny warunek jednoznaczności ma postać:  $J(J-1) \leq \frac{1}{2}I_1I_2I_3(3I_1I_2I_3 - I_1I_2 - I_1I_3 - I_2I_3 - I_1 - I_2 - I_3 + 3)$  oraz  $J < I_4$ . Wyniki badań nad jednoznacznością dekompozycji według modelu CP można odnaleźć też w innych pracach, np. [272, 415, 416].

Ograniczenie nieujemności narzucone na faktory w modelu CP można interpretować jako informację aprioryczną o estymowanych faktorach. Taka informacja prowadzi do zmniejszenia stopni swobody w wyborze optymalnego rozwiązania. Intuicyjnie można więc przypuszczać, że ograniczanie to powinno jeszcze bardziej rozszerzać warunki jednoznaczności modelu NTF w stosunku do modelu CP. Badania jednoznaczności modelu NTF dla tensorów stopnia trzeciego można odnaleźć w pracy [420].

### 6.2.1. Estymacja czynników

Estymację czynników w nieujemnej faktoryzacji tensora realizuje się iteracyjnie i sekwencyjnie względem kolejnych modów. W celu estymacji czynnika  $\mathbf{U}^{(n)}$  w modelu (1.5), tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  rozwijany jest względem  $n$ -tego modu według zależności (6.11). W rezultacie uzyskuje się nadokreślony układ równań liniowych:

$$\mathbf{Y}_{(n)} = \mathbf{U}^{(n)} (\mathbf{U}^{\odot -n})^T, \quad (6.17)$$

gdzie  $\mathbf{Y}_{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times \prod_{p \neq n} I_p}$ ,  $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times J}$  oraz  $\mathbf{U}^{\odot -n} \in \mathbb{R}_+^{\prod_{p \neq n} I_p \times J}$ .

Podobnie jak dla modelu NMF, dopasowanie modelu do danych obserwowanych można wyrazić za pomocą różnych funkcji celu. Wymuszanie odpowiednich cech czynników można realizować przez odpowiednie funkcje kary. Niech

$$\Psi(\mathbf{U}^{(n)}) = D\left(\mathbf{Y}_{(n)} \parallel \left[\mathbf{U}^{(n)} (\mathbf{U}^{\odot -n})^T\right]\right) + \alpha_n \Phi_n(\mathbf{U}^{(n)}) \quad (6.18)$$

jest zregularyzowaną funkcją celu, gdzie człon  $D(\cdot, \cdot)$  określa miarę rozbieżności pomiędzy argumentami,  $\Phi_n(\mathbf{U}^{(n)})$  jest funkcją kary, a  $\alpha_n \geq 0$  jest parametrem regularyzującym. Estymacja macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$  w układzie równań (6.17) sprowadza się więc do rozwiązania następującego zadania optymalizacji nieliniowej z ograniczeniami:

$$\mathbf{U}_*^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{U}^{(n)}} \Psi(\mathbf{U}^{(n)}), \quad \text{p.o. } \mathbf{U}^{(n)} \geq \mathbf{0}. \quad (6.19)$$

Zakładając, że funkcja  $D\left(\mathbf{Y}_{(n)} \parallel \left[\mathbf{U}^{(n)} (\mathbf{U}^{\odot -n})^T\right]\right)$  w (6.18) wyrażona jest przez odległość euklidesową, a człon regularyzujący nie jest uwzględniany ( $\alpha_n = 0$ ), wówczas zadanie estymacji czynnika  $\mathbf{U}^{(n)}$  sprowadza się do liniowego zadania najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności, zatem:

$$\mathbf{U}_*^{(n)} = \arg \min_{\mathbf{U}^{(n)}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y}_{(n)} - \mathbf{U}^{(n)} (\mathbf{U}^{\odot -n})^T\|_F^2, \quad \text{p.o. } \mathbf{U}^{(n)} \geq \mathbf{0}. \quad (6.20)$$

Do estymacji macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$  w zadaniu (6.20) można zastosować różne algorytmy numeryczne, zwłaszcza algorytm zbioru aktywnego, który przedstawiono w rozdziale 4.9. Stosując algorytm FC-NNLS (algorytm 13), zadanie (6.20) sprowadza się do poszukiwania nieujemnego rozwiązania układu równań normalnych:

$$(\mathbf{U}^{\odot -n})^T \mathbf{U}^{\odot -n} (\mathbf{U}^{(n)})^T = (\mathbf{Y}_{(n)} \mathbf{U}^{\odot -n})^T, \quad (6.21)$$

---

**Algorytm 26. Algorytm sekwencyjny dla modelu NTF**


---

**Wejście:**  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  – tensor danych,  $J$  – rząd faktoryzacji,  
 $p$  – parametr metryki skalującej

**Wyjście:**  $\{\hat{\mathbf{U}}^{(n)}\}$  – zbiór estymowanych czynników

- 1 **Inicjalizacja:**  $\forall n : \mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times J}$  ;
- 2 **repeat**
- 3     **for**  $n = 1, \dots, N$  **do**
- 4          $\mathbf{Y}_{(n)} = \text{matrycyzacja}(\mathcal{Y}, n) \in \mathbb{R}_+^{I_n \times \prod_{p \neq n} I_p}$ ;     // rozwinięcie  
        tensora względem  $n$ -tego modu
- 5         Wyznacz macierz  $\mathbf{U}_*^{(n)}$  przez rozwiązanie zadania (6.19);
- 6         **if**  $n \neq N$  **then**
- 7              $\mathbf{U}^{(n)} = \mathbf{U}_*^{(n)} \text{diag}\{\|\mathbf{u}_1^{(n)}\|_p^{-1}, \dots, \|\mathbf{u}_J^{(n)}\|_p^{-1}\}$ ;     // skalowanie
- 8 **until** Kryterium stopu jest spełnione;

---

gdzie

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{U}^{\odot -n})^T \mathbf{U}^{\odot -n} &= (\mathbf{U}^{(N)})^T \mathbf{U}^{(N)} \circledast \dots \circledast (\mathbf{U}^{(n+1)})^T \mathbf{U}^{(n+1)} \\
 &\circledast (\mathbf{U}^{(n-1)})^T \mathbf{U}^{(n-1)} \circledast \dots \circledast (\mathbf{U}^{(1)})^T \mathbf{U}^{(1)}. \quad (6.22)
 \end{aligned}$$

Należy zauważyć, że stosując tożsamość w (6.22) uzyskuje się redukcję kosztu obliczeniowego oraz zmniejsza zapotrzebowanie na zasoby pamięci.

Z podobnych względów jak w modelu NMF, wektory kolumnowe czynników należy skalować w procesie aktualizacji do jednostkowych norm  $l_p$ . Aby jednak normalizacja ta nie zwiększała wartości funkcji celu, należy ją przeprowadzać dla kolejnych estymowanych czynników z wyjątkiem jednego. Zwykle przyjmuje się, że normalizowane są wektory kolumnowe macierzy  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  dla  $n = 1, \dots, N - 1$ .

Finalna wersja algorytmu sekwencyjnej estymacji czynników w modelu NTF wyrażona jest za pomocą algorytmu 26.

### 6.2.2. Model NTF1

Model NTF1 został zaproponowany w pracy [88]. Jest on rozszerzeniem modelu NTF i dla tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times I_3}$  można go sformułować w następującej



postaci:

$$\mathbf{Y}^{(i)} = \mathbf{U}^{(1)} \text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_i^{(3)})(\mathbf{U}_i^{(2)})^T, \quad \text{dla } i = 1, \dots, I_3, \quad (6.23)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J}$ ,  $\underline{\mathbf{u}}_i^{(3)} \in \mathbb{R}^{1 \times J}$  jest  $i$ -tym wektorem wierszowym macierzy  $\mathbf{U}^{(3)} \in \mathbb{R}_+^{I_3 \times J}$ ,  $\mathbf{Y}^{(i)} = [\mathcal{Y}]_{*,*,i} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2}$  jest  $i$ -tą macierzą warstwową tensora  $\mathcal{Y}$  względem trzeciego modu, a  $\{\mathbf{U}_i^{(2)}\} \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J}$  jest zbiorem  $I_3$  macierzy cech ukrytych modu drugiego. Porównując model (6.23) z modelem CP w (6.14), łatwo zauważyć, że zasadnicza różnica między modelami NTF i NTF1 polega na tym, że w modelu NTF faktor  $\mathbf{U}^{(2)}$  jest wspólnych dla wszystkich warstw  $\mathbf{Y}^{(i)}$ . Zbiór macierzy transponowanych  $\{(\mathbf{U}_i^{(2)})^T\}$  tworzy tensor  $\mathcal{U}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{J \times I_2 \times I_3}$ , który różni się od  $\mathcal{Y}$  wymiarem względem modu pierwszego. Jeśli  $J \ll I_1$ , NTF1 może być interpretowany jako model redukcji nadmiarowości tylko względem modu pierwszego.

Z powodu niejednoznaczności skali w modelu (6.23), wektory kolumnowe w macierzach  $\mathbf{U}^{(1)}$  i  $\{\mathbf{U}_i^{(2)}\}$  powinny być jednocześnie normalizowane do jednostkowej normy  $l_p$ , aby można było estymować macierz  $\mathbf{U}^{(3)}$ . W przeciwnym razie macierz  $\mathbf{U}^{(3)}$  będzie absorbowana przez pozostałe faktory.

W celu estymacji macierzy  $\mathbf{U}^{(1)}$ , tensor  $\mathcal{Y}$  należy rozwinąć względem modu pierwszego, zatem:  $\mathbf{Y}_{(1)} = [\mathbf{Y}^{(1)}, \mathbf{Y}^{(2)}, \dots, \mathbf{Y}^{(I_3)}] \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 I_3}$ . Z modelu (6.23) wynika:

$$\mathbf{Y}_{(1)} = \mathbf{U}^{(1)} \mathbf{U}_{(1)}^{(2)}, \quad (6.24)$$

gdzie

$$\mathbf{U}_{(1)}^{(2)} = [\text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_1^{(3)})(\mathbf{U}_1^{(2)})^T, \dots, \text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_{I_3}^{(3)})(\mathbf{U}_{I_3}^{(2)})^T] \in \mathbb{R}_+^{J \times I_2 I_3} \quad (6.25)$$

jest macierzą rozwinięcia tensora  $\mathcal{U}^{(2)}$  względem pierwszego modu. Ponieważ macierze  $\mathbf{U}^{(1)}$  i  $\mathbf{U}_{(1)}^{(2)}$  w (6.24) są nieujemne,  $I_1 > J$  oraz  $I_2 I_3 \gg J$ , można je estymować za pomocą metody NMF. W każdym kroku naprzemiennej optymalizacji funkcji celu  $D(\mathbf{Y}_{(1)} || \mathbf{U}^{(1)} \mathbf{U}_{(1)}^{(2)})$ , kolumny estymowanej macierzy  $\hat{\mathbf{U}}^{(1)}$  powinny być skalowane do jednostkowej normy  $l_p$ , gdzie zwykle  $p = 1$  lub  $p = 2$ . Estymowana macierz  $\hat{\mathbf{U}}_{(1)}^{(2)}$  przekształcana jest do tensora  $\hat{\mathcal{U}}^{(2)}$  za pomocą przekształcenia odwrotnego do rozwinięcia. Tensor  $\hat{\mathcal{U}}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{J \times I_2 \times I_3}$  składa się z macierzy warstwowych  $\hat{\mathbf{W}}_i \in \mathbb{R}_+^{J \times I_2}$  uporządkowanych wzdłuż modu trzeciego. Wynika z tego, że  $i$ -ty wektor wierszowy macierzy  $\mathbf{U}^{(3)}$  można zapisać w postaci:

$\underline{\mathbf{u}}_i^{(3)} = \left[ \|\hat{\underline{\mathbf{w}}}_1^{(i)}\|_p, \|\hat{\underline{\mathbf{w}}}_2^{(i)}\|_p, \dots, \|\hat{\underline{\mathbf{w}}}_J^{(i)}\|_p \right]$ , gdzie  $\hat{\underline{\mathbf{w}}}_j^{(i)}$  jest  $j$ -tym wektorem wierszowym macierzy  $\hat{\mathbf{W}}_i$ . Z kolei, macierze  $\{\mathbf{U}_i^{(2)}\}$  wyznaczone są przez normalizację:  $\mathbf{U}_i^{(2)} = \text{diag} \left( (\underline{\mathbf{u}}_i^{(3)})^{-1} \right) \hat{\mathbf{W}}_i^T$ .

Należy zauważyć, że estymacja czynników według modelu (6.24) może być również przeprowadzona, jeśli obserwowane macierze  $\{\mathbf{Y}^{(i)}\}$  mają różne liczby kolumn lub są niekompletne.

### 6.2.3. Model NTF2

Model NTF2 [87] bazuje na podobnej koncepcji jak model NTF1, jednak w tym przypadku redukcja wymiarowości odbywa się względem modu drugiego. Model ten można przedstawić w następującej postaci:

$$\mathbf{Y}^{(i)} = \mathbf{U}_i^{(1)} \text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_i^{(3)}) (\mathbf{U}^{(2)})^T \quad \text{dla } i = 1, \dots, I_3, \quad (6.26)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J}$ , a  $\{\mathbf{U}_i^{(1)}\} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J}$  jest zbiorem  $I_3$  macierzy cech ukrytych względem modu pierwszego. Pozostałe oznaczenia są takie same jak w modelu NTF1. W tym przypadku czynnik  $\mathbf{U}^{(2)}$  jest wspólny dla wszystkich warstw tensora  $\mathcal{Y}$  względem modu trzeciego, zbiór macierzy  $\{\mathbf{U}_i^{(1)}\}$  tworzy tensor  $\mathcal{U}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J \times I_3}$ . Jeśli  $J \ll I_2$ , to tensor  $\mathcal{U}^{(1)}$  można interpretować jako zredukowany tensor  $\mathcal{Y}$  względem modu drugiego.

Po rozwinięciu tensora  $\mathcal{Y}$  względem modu drugiego uzyskuje się:

$$\mathbf{Y}_{(2)} = \mathbf{U}^{(2)} \mathbf{U}_{(2)}^{(1)}, \quad (6.27)$$

gdzie

$$\mathbf{U}_{(2)}^{(1)} = \left[ \text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_1^{(3)}) (\mathbf{U}_1^{(1)})^T, \dots, \text{diag}(\underline{\mathbf{u}}_{I_3}^{(3)}) (\mathbf{U}_{I_3}^{(1)})^T \right] \in \mathbb{R}_+^{J \times I_1 I_3} \quad (6.28)$$

jest macierzą rozwinięcia tensora  $\mathcal{U}^{(1)}$  względem modu drugiego.

Ponieważ model (6.27) wyraża się w sposób podobny jak model (6.24), estymacja jego czynników realizowana jest w taki sposób jak w NTF1.

### 6.2.4. Modele hybrydowe

Istotnym problemem w realizacji dekompozycji NTF lub CP może być złe uwarunkowanie estymowanych czynników  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$ . Najczęściej wynika to z dużej korela-

cji między estymowanymi zmiennymi lub współliniowości niektórych komponentów. W ujęciu geometrycznym, jeśli kąt zawarty między dowolną parą wektorów jest mały w stosunku do kątów innych par wektorów, to macierz utworzona przez zbiór takich wektorów jest źle uwarunkowana. Estymacja zadań najmniejszych kwadratów z macierzami źle uwarunkowanymi jest generalnie trudna do realizacji pod względem numerycznym. Niestety, taki przypadek następuje w przypadku estymacji czynników w dekompozycjach tensorów.

Problem złego uwarunkowania czynników w dekompozycji tensorów badany był w wielu pracach. Krótko scharakteryzowano wybrane metody stosowane do rozwiązywania wspomnianego problemu.

W pracy [524] zaproponowano hybrydową metodę estymacji czynników w modelu CP, łączącą ślepe separacje sygnałów z sekwencyjną dekompozycją macierzy względem jej wartości osobliwych. W metodzie tej, oznaczonej jako CP-SMBSS, zakłada się, że znane są cechy jednego z estymowanych czynników i mogą one być łatwo wyrażone za pomocą wiedzy apriorycznej. Może to być informacja dotycząca nieujemności estymowanych czynników, ale najlepsze efekty uzyskuje się, jeśli estymowane komponenty w tym czynniku są liniowo niezależne.

Zakładając, że wektory kolumnowe w  $\mathbf{U}^{(n)}$  są liniowo niezależne, a  $\mathbf{U}^{\ominus-n}$  w modelu (6.17) jest macierzą mieszającą, wówczas czynnik  $\mathbf{U}^{(n)}$  może być estymowany z  $\mathbf{Y}_{(n)}$  za pomocą odpowiedniego algorytmu estymacji komponentów niezależnych – tzw. algorytmu ICA. Przegląd takich algorytmów można odnaleźć, np. w [69]. Stosując metodę estymacji komponentów głównych, a następnie odpowiedni algorytm ICA do  $\mathbf{Y}_{(n)}^T$  uzyskuje się:  $\mathbf{Y}_{(n)}^T = \hat{\mathbf{A}}^{(n)} \hat{\mathbf{S}}^{(n)}$ . Zgodnie z modelem (6.17),  $\hat{\mathbf{A}}^{(n)} = \mathbf{U}^{\ominus-n} \mathbf{Q}$  oraz  $\hat{\mathbf{S}}^{(n)} = (\mathbf{U}^{(n)} \mathbf{Q}^{-T})^T$ , gdzie  $\mathbf{Q}$  jest uogólnioną macierzą permutacyjną. Sygnały reprezentowane wektorami wierszowymi w  $\hat{\mathbf{S}}^{(n)}$  są statystycznie niezależne. Macierz  $\hat{\mathbf{S}}^{(n)}$  można też estymować innymi metodami, np. przez bayesowskie wnioskowanie statystyczne, a następnie  $\hat{\mathbf{A}}^{(n)} = \mathbf{Y}_{(n)}^T (\hat{\mathbf{S}}^{(n)})^\dagger$ . Znając estymator  $\hat{\mathbf{U}}^{(n)} = (\mathbf{Q} \hat{\mathbf{S}}^{(n)})^T$ , pozostałe czynniki  $\mathbf{U}^{(p)}$  dla  $p \neq n$  mogą być jednoznacznie estymowane z wykorzystaniem dekompozycji macierzy względem jej wartości osobliwych. Niech  $\hat{\mathbf{a}}_j^{(n)} = \hat{\mathbf{u}}_j^{\ominus p \neq n} \in \mathbb{R}^{\prod_{p \neq n} I_p}$  jest  $j$ -tym wektorem kolumnowym macierzy  $\hat{\mathbf{A}}^{(n)}$ , który można przekształcić do macierzy według zależności:

$$\hat{\mathbf{A}}_j^{(N)} = \text{mtx} \left( \hat{\mathbf{a}}_j^{(n)}, I_N, \prod_{p \neq \{n, N\}} I_p \right) = \hat{\mathbf{u}}_j^{(N)} (\hat{\mathbf{a}}_j^{(N-1)})^T \in \mathbb{R}^{I_N \times I_r}, \quad (6.29)$$

gdzie  $I_r = \prod_{p \neq \{n, N\}} I_p$ . Macierz  $\hat{\mathbf{A}}_j^{(N)}$  jest rzędu pierwszego, a zatem wektory  $\hat{\mathbf{u}}_j^{(N)}$  oraz  $\hat{\mathbf{a}}_j^{(N-1)}$  odpowiadają lewemu i prawemu wektorowi osobliwemu i mogą

być łatwo estymowane na podstawie rozkładu macierzy  $\hat{\mathbf{A}}_j^{(N)}$  względem jej jedynej wartości osobliwej. Aby zrealizować to zadanie, można wykorzystać metodę potęgową (ang. *Power iteration*) do wyznaczania dominującej wartości własnej i odpowiadającego wektora własnego. W celu obliczenia wektora  $\hat{\mathbf{u}}_j^{(N-1)}$ ,  $\hat{\mathbf{a}}_j^{(N-1)}$  przekształcany jest do macierzy w sposób podobny jak w (6.29), zatem:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}}_j^{(N-1)} &= \text{mtx} \left( \hat{\mathbf{a}}_j^{(N-1)}, I_{N-1}, \prod_{p \neq \{n, N, N-1\}} I_p \right) \\ &= \hat{\mathbf{u}}_j^{(N-1)} (\hat{\mathbf{a}}_j^{(N-2)})^T \in \mathbb{R}^{I_{N-1} \times I_r},\end{aligned}\quad (6.30)$$

gdzie  $I_r = \prod_{p \neq \{n, N-1, N\}} I_p$ . Podobnie jak w (6.29), wektor  $\hat{\mathbf{u}}_j^{(N-1)}$  jest lewym wektorem osobliwym macierzy  $\hat{\mathbf{A}}_j^{(N-1)}$  rzędu pierwszego. Tak więc, kolejne wektory  $\{\hat{\mathbf{u}}_j^{(N-1)}, \dots, \hat{\mathbf{u}}_j^{(1)}\}$  obliczane są w podobny sposób. Powtarzając podaną procedurę wyznaczania wektorów  $\{\hat{\mathbf{u}}_j^{(n)}\}$  dla  $j = 1, \dots, J$  otrzymuje się zbiór estymowanych czynników  $\{\hat{\mathbf{U}}^{(n)}\}$ .

Problem złego uwarunkowania estymowanych czynników można też skutecznie osłabiać przez tzw. metodę redukcji modów (ang. *mode reduction*), zaproponowaną w pracy [526] i przeznaczoną dla tensorów o dużej liczbie modów. Metoda ta składa się zasadniczo z trzech kroków: redukcji liczby modów, dekompozycji tensora zredukowanego oraz estymacji czynników tensora oryginalnego. Redukcja liczby modów ma na celu przekształcenie tensora obserwacji  $\mathcal{Y}$  o stopniu  $N$  do tensora  $\mathcal{Y}^{\{K\}}$  o stopniu  $K < N$  i wymiarze  $I_1^{\{K\}} \times I_2^{\{K\}} \times \dots \times I_K^{\{K\}}$ , przy podziale zbioru indeksów modów  $\{1, \dots, N\}$  na  $K$  podzbiorów, zgodnie z sekwencją  $\{n_0, n_1, \dots, n_K\}$ , gdzie  $n_0 = 1$  i  $n_K = N$ . Zadanie to realizowane jest przez wektoryzację tensora  $\mathcal{Y}$ , a następnie tensoryzację do postaci  $\mathcal{Y}^{\{K\}}$  lub przez funkcję *reshape* w Matlabie. W wyniku takiego grupowania, model CP w (1.4) można zapisać w następującej postaci:

$$\mathcal{Y}^{\{K\}} = \sum_{j=1}^J \mathbf{w}_j^{(1)} \circ \mathbf{w}_j^{(2)} \circ \dots \circ \mathbf{w}_j^{(K)} \in \mathbb{R}^{I_1^{\{K\}} \times I_2^{\{K\}} \times \dots \times I_K^{\{K\}}}, \quad (6.31)$$

gdzie  $\mathbf{w}_j^{(k)} = \odot_{p=n_{k-1}+1}^{n_k} \mathbf{u}_j^{(p)} = \left[ \mathbf{u}_j^{(n_{k-1}+1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{u}_j^{(n_k)} \right] \in \mathbb{R}^{\prod_{p=n_{k-1}+1}^{n_k} I_p}$ . Niech  $\forall k : \mathbf{W}^{(k)} = [\mathbf{w}_1^{(k)}, \dots, \mathbf{w}_J^{(k)}]$ , wówczas  $\mathbf{W}^{(k)} = \odot_{p=n_{k-1}+1}^{n_k} \mathbf{U}^{(p)}$ . Znając zbiór fak-

torów  $\{\mathbf{W}^{(k)}\}$ , faktory  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  można otrzymać rozwiązując sekwencyjnie liniowe zadanie najmniejszych kwadratów:

$$\min_{\mathbf{u}_j^{(p)}} \|\mathbf{w}_j^{(k)} - \odot_{p=n_{k-1}+1}^{n_k} \mathbf{u}_j^{(p)}\|_F^2, \quad \forall j, k. \quad (6.32)$$

Zadanie to można zrealizować tak samo jak w metodzie CP-SMBSS, czyli przez kolejne przekształcenia (6.29) i (6.30), a następnie rozkład odpowiednich macierzy względem wartości osobliwych.

### 6.3. Dekompozycja Tuckera

Podstawowy model dekompozycji Tuckera pojawił się w literaturze [436] po raz pierwszy w 1966 roku. Obecnie różne wersje tego modelu stosowane są w wielu obszarach przetwarzania informacji, m.in. w analizie obrazów twarzy [440, 445, 450], rozpoznawaniu cyfr ręcznie pisanych [390], grupowaniu i segmentacji obrazów [350, 356] oraz ekstrakcji cech ukrytych [231]. Przegląd typowych zastosowań tego modelu można odnaleźć w pracach: [89, 235, 319].

Dla tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  o  $N$ -tym stopniu model dekompozycji Tuckera można przedstawić w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} &= \mathcal{G} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)} \\ &= \sum_{j_1=1}^{J_1} \sum_{j_2=1}^{J_2} \dots \sum_{j_N=1}^{J_N} g_{j_1, j_2, \dots, j_N} \mathbf{u}_{j_1}^{(1)} \circ \mathbf{u}_{j_2}^{(2)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_{j_N}^{(N)}, \end{aligned} \quad (6.33)$$

gdzie  $\mathcal{G} = [g_{j_1, j_2, \dots, j_N}] \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}$ , dla  $J_n \leq I_n$  i  $n = 1, \dots, N$ , jest tensorem rdzeniowym, a  $\mathbf{U}^{(n)} = [\mathbf{u}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{u}_{J_n}^{(n)}] = [u_{i_n, j_n}] \in \mathbb{R}^{I_n \times J_n}$  jest faktorem, zawierającym cechy  $n$ -tego modu tensora  $\mathcal{Y}$ . Tensor  $\mathcal{G}$  jest rzędu  $(J_1, J_2, \dots, J_N)$ , tzn.  $\forall n : \text{rank}(\mathbf{G}_{(n)}) = J_n$ , gdzie  $\mathbf{G}_{(n)}$  jest macierzą rozwinięcia tensora  $\mathcal{G}$  względem  $n$ -tego modu.

#### 6.3.1. Ortogonalność faktorów

W oryginalnej wersji modelu Tuckera [436], faktory  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  są kolumnowo ortogonalne, tzn.  $\forall n : (\mathbf{U}^{(n)})^T \mathbf{U}^{(n)} = \mathbf{I}_{J_n} \in \mathbb{R}^{J_n \times J_n}$ . De Lathauwer [103] udowodnił, że jakkolwiek zespolony tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{C}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  może być przedstawiony za pomocą modelu (6.33), gdzie  $\forall n : \mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{C}^{I_n \times I_n}$  jest macierzą unitarną,

a  $\mathcal{G} \in \mathbb{C}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  jest tensorem zespolonym o następujących właściwościach:  $\langle \mathcal{G}_{i_n=p}, \mathcal{G}_{i_n=r} \rangle = 0$ , jeśli  $p \neq r$  oraz  $\langle \mathcal{G}_{i_n=p}, \mathcal{G}_{i_n=r} \rangle > 0$ , gdy  $p = r$ , a także  $\|\mathcal{G}_{i_n=1}\|_F \geq \|\mathcal{G}_{i_n=2}\|_F \geq \dots \geq \|\mathcal{G}_{i_n=N}\|_F$ . Tensor  $\mathcal{G}_{i_n=p} \in \mathbb{C}^{I_1 \times \dots \times I_{n-1} \times I_{n+1} \times \dots \times I_N}$  jest podtensorem otrzymanym z  $\mathcal{G}$ , gdy jego indeks  $i_n = p$  (wzdłuż  $n$ -tego modu). Tak zdefiniowany model został nazwany modelem HOSVD (ang. *Higher-Order Singular Value Decomposition*) i może być interpretowany jako dekompozycja tensora  $\mathcal{Y}$  względem jego wartości osobliwych. W odróżnieniu od rozkładu SVD macierzy, tensor rdzeniowy  $\mathcal{G}$  w tym modelu nie jest superdiagonalny, jak intuicyjnie można byłoby oczekiwać, a tensorem gęstym o zespolonych elementach.

Rozwijając tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{C}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  względem  $n$ -tego modu oraz uwzględniając zależność (6.8), uzyskuje się:

$$\begin{aligned} \forall n : \mathbf{Y}_{(n)} &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)} \right)^H \\ &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{\otimes -n} \right)^H. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Ponieważ  $\left( \mathbf{U}^{\otimes -n} \right)^H \mathbf{U}^{\otimes -n} = \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{\prod_{p \neq n} I_p \times \prod_{p \neq n} I_p}$  oraz  $\mathbf{G}_{(n)}$  ma wiersze wzajemnie ortogonalne, więc zależność (6.34) można zapisać w postaci:  $\mathbf{Y}_{(n)} = \mathbf{U}^{(n)} \boldsymbol{\Sigma}^{(n)} \left( \mathbf{V}^{(n)} \right)^H$ , gdzie  $\boldsymbol{\Sigma}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times I_n}$  jest macierzą diagonalną, zawierającą wartości osobliwe, posortowane w kierunku malejącym, a  $\left( \mathbf{V}^{(n)} \right)^H \mathbf{V}^{(n)} = \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{I_n \times I_n}$ . Tak więc, faktor  $\mathbf{U}^{(n)}$  można łatwo estymować przez dekompozycję macierzy  $\mathbf{Y}_{(n)}$  względem jej wartości osobliwych. Można też zamiast rozkładu SVD wykorzystać rozkład EVD, co z reguły prowadzi do zmniejszenia kosztu obliczeniowego. W takim przypadku, kolumny macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$  są wektorami własnymi hermitowskiej macierzy  $\mathbf{Y}_{(n)} \left( \mathbf{Y}_{(n)} \right)^H \in \mathbb{C}^{I_n \times I_n}$ . Mając estymowane faktory  $\{ \mathbf{U}^{(n)} \}$ , tensor rdzeniowy otrzymuje się według zasady:  $\mathcal{G} \leftarrow \mathcal{Y} \times_1 \left( \mathbf{U}^{(1)} \right)^H \times_2 \left( \mathbf{U}^{(2)} \right)^H \times_3 \dots \times_N \left( \mathbf{U}^{(N)} \right)^H$ . Łatwo zauważyć, że w modelu HOSVD estymacja faktorów odbywa się sekwencyjnie, ale nie są wykonywane aktualizacje według iteracji naprzemiennych. Tak więc, proces sekwencyjnych estymacji nie jest powtarzany.

### 6.3.2. Nieujemność faktorów

Usuując ograniczenia ortogonalności faktorów, model (6.33) można przekształcić do innych znanych modeli. Jeśli  $\mathcal{G} = \mathcal{I}_N \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times \dots \times J_N}$ , gdzie  $\mathcal{I}_N$  jest tensorem jednostkowym  $N$ -tego stopnia, to model dekompozycji Tuckera sprowadza się do modelu CP. Gdy dodatkowo  $\forall n : \mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times J_n}$ , model ten sprowadza się do modelu NTF. Jeśli tensor rdzeniowy nie jest superdiagonalny, a jego elementy jak i elementy faktorów  $\{ \mathbf{U}^{(n)} \}$  są nieujemne, to jest to tzw. model

NTD (ang. *Nonnegative Tucker Decomposition*) [231]. Z kolei, w modelach SNTD (ang. *Semi-NTD*) [89], ograniczenia nieujemności narzucone są tylko na wybrane faktory.

W modelu NTD estymacja czynników realizowana jest w procesie naprzemiennych optymalizacji funkcji celu, podobnie jak w metodzie NMF. Rozwijając tensor  $\mathcal{Y}$  względem  $n$ -tego modu, uzyskuje się:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{(n)} &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{(N)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(n+1)} \otimes \mathbf{U}^{(n-1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{U}^{(1)} \right)^T \\ &= \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{\otimes -n} \right)^T, \end{aligned} \quad (6.35)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{\otimes -n} \in \mathbb{R}_+^{\prod_{p \neq n} I_p \times \prod_{p \neq n} J_p}$  jest macierzą nieujemną. Przyjmując podobne oznaczenia jak w (6.18), zregularyzowana funkcja celu ma postać:

$$\begin{aligned} \psi \left( \mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{G}_{(n)} \right) &= D \left( \mathbf{Y}_{(n)} \parallel \left[ \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{\otimes -n} \right)^T \right] \right) \\ &+ \alpha_n \Phi_n \left( \mathbf{U}^{(n)} \right) + \gamma_n \Gamma \left( \mathbf{G}_{(n)} \right), \end{aligned} \quad (6.36)$$

gdzie  $\alpha_n \Phi_n \left( \mathbf{U}^{(n)} \right)$  i  $\gamma_n \Gamma \left( \mathbf{G}_{(n)} \right)$  są odpowiednimi członami regularyzującymi. Zadanie estymacji czynników  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  można wyrazić w postaci (6.19). Do rozwiązania tak postawionego zadania można zastosować różne algorytmy numeryczne, np. te, które omówiono w rozdziale 4. Estymację macierzy  $\mathbf{G}_{(n)}$  można zrealizować w analogiczny sposób.

Definiując funkcję celu jako odległość euklidesową oraz pomijając człony regularyzacji, estymacja czynników i tensora rdzeniowego sprowadza się do rozwiązania liniowych zadań najmniejszych kwadratów z ograniczeniami nieujemności. Ponieważ zadania te mają silną nadmiarowość, metody najmniejszych kwadratów są tutaj szczególnie przydatne. W wielu zastosowaniach użyteczny może okazać się projekcyjny algorytm ALS (rozdz. 4.5.1), który dla aktualizacji czynników  $\{\mathbf{U}^{(n)}\}$  jest postaci:

$$\mathbf{U}^{(n)} = \left[ \mathbf{Y}_{(n)} \mathbf{U}^{\otimes -n} \mathbf{G}_{(n)}^T \left( \mathbf{G}_{(n)} \left( \mathbf{U}^{\otimes -n} \right)^T \mathbf{U}^{\otimes -n} \mathbf{G}_{(n)}^T \right)^{-1} \right]_+, \quad (6.37)$$

dla  $n = 1, \dots, N$ . Stosując analogiczne podejście, tensor rdzeniowy  $\mathcal{G}$  może być estymowany według reguły:

$$\mathcal{G} \leftarrow \left[ \mathcal{Y} \times_1 \left( \mathbf{U}^{(1)} \right)^\dagger \times_2 \left( \mathbf{U}^{(2)} \right)^\dagger \times_3 \dots \times_N \left( \mathbf{U}^{(N)} \right)^\dagger \right]_+, \quad (6.38)$$

gdzie  $(\mathbf{U}^{(n)})^\dagger = \left( (\mathbf{U}^{(n)})^T (\mathbf{U}^{(n)}) \right)^{-1} (\mathbf{U}^{(n)})^T \in \mathbb{R}^{J_n \times I_n}$  jest pseudoodwrotnością Moore'a–Penrose'a macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$ . Kolumny macierzy  $\mathbf{U}^{(n)}$  dla  $n = 1, \dots, N - 1$  powinny być normalizowane do jednostkowej normy  $l_p$ , czyli  $\mathbf{u}_l^{(n)} \leftarrow \frac{\mathbf{u}_l^{(n)}}{\|\mathbf{u}_l^{(n)}\|_p}$ , gdzie  $l = 1, \dots, J_n$  oraz  $p = 1$  lub  $p = 2$ .

### 6.3.3. Cechy mieszane

Cechy mieszane faktorów można uzyskać w modelach typu SNTD. Przykładem tego typu modeli może być model UO-NTD (ang. *Uni-orthogonal NTD*), który zaproponowano w pracy [487]. W modelu tym jeden z faktorów jest macierzą ortogonalną, pozostałe faktory są macierzami nieujemnymi, a tensor rdzeniowy jest bez ograniczeń znaku. Tak więc, model ten ekstrahuje mieszane cechy dekomponowanego tensora. Takie podejście łączy w sobie modele NTD i HOSVD.

Model UO-NTD został opracowany w celu klasyfikacji obrazów. Niech obrazy uczące o rozdzielczości  $I_1 \times I_2$  pikseli, ułożone warstwowo, tworzą tensor  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times I_3}$ , gdzie  $I_3$  jest liczbą obrazów. Model UO-NTD tensora  $\mathcal{Y}$  jest postaci:

$$\mathcal{Y} = \mathcal{G} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \mathbf{U}^{(3)}, \quad (6.39)$$

gdzie  $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times J_3}$  jest tensorem rdzeniowym,  $\mathbf{U}^{(1)} = [u_{i_1, j_1}^{(1)}] \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J_1}$  oraz  $\mathbf{U}^{(2)} = [u_{i_2, j_2}^{(2)}] \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J_2}$  są macierzami nieujemnymi, a  $\mathbf{U}^{(3)} \in \mathbb{R}^{I_3 \times J_3}$  jest macierzą o ortogonalnych kolumnach, tzn.  $(\mathbf{U}^{(3)})^T \mathbf{U}^{(3)} = \mathbf{I}_{J_3}$ . Przyjmuje się, że liczba  $J_3$  jest równa liczbie klas, do których należą obrazy uczące, a liczby  $J_1$  oraz  $J_2$  powinny spełniać warunki:  $1 \leq J_1 \ll I_1$  oraz  $1 \leq J_2 \ll I_2$ . Estymacja faktorów i tensora rdzeniowego w modelu UO-NTD realizowana jest według algorytmu 27. Funkcja  $\mathbf{U}^{(n)} \leftarrow \text{npls}(\mathbf{Y}_{(n)}, \mathbf{Z}^{(n)}, \mathbf{U}_0^{(n)}, k_{\max})$  zwraca rozwiązanie przybliżone dla zadania:  $\min_{\mathbf{U}} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y}_{(n)} - \mathbf{U} \mathbf{Z}^{(n)}\|_F^2$ , p.o.  $\mathbf{U} \geq \mathbf{0}$ , gdzie  $\mathbf{U}_0^{(n)} \in \mathbb{R}_+^{I_n \times J_n}$  jest przybliżeniem początkowym, a  $k_{\max}$  jest maksymalną liczbą iteracji.

Każda warstwa tensora  $\mathcal{G} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times J_3}$  wzdłuż trzeciego modu może być postrzegana jako obraz bazowy albo obraz cechy o naturze holistycznej (podobnie jak w metodzie analizy komponentów głównych). Przykładowo, dla klasyfikacji obrazów cyfr, każdy bazowy obraz powinien reprezentować pojedynczą cyfrę. Wynika stąd, że każda warstwa (obraz) tensora  $\mathcal{Y}$  wzdłuż trzeciego modu jest liniową kombinacją obrazów bazowych. Współczynniki kombinacji są wyrażone przez wektory wierszowe macierzy  $\mathbf{U}^{(3)}$ , które nazwano wektorami kodującymi.



**Algorytm 27. UO-NTD**


---

**Wejście:**  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times I_3}$ ,  $J_1, J_2, J_3$  – rzędy dekompozycji,  
 $k_{\max}$  – maksymalna liczba iteracji

**Wyjście:** Faktory:  $\mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J_1}$ ,  $\mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J_2}$  oraz  $\mathbf{U}^{(3)} \in \mathbb{R}^{I_3 \times J_3}$ ,  
 $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times J_3}$  – tensor rdzeniowy

1 Inicjalizacja:  $\mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J_1}$ ,  $\mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J_2}$ ,  $\mathbf{U}^{(3)} \in \mathbb{R}^{I_3 \times J_3}$ ,  $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times J_3}$  ;  
2 **repeat**  
3      $\mathbf{Z}^{(1)} = \mathbf{G}_{(1)}(\mathbf{U}^{(3)} \otimes \mathbf{U}^{(2)})^T$  ;  
4      $\mathbf{U}^{(1)} \leftarrow \text{nnls}(\mathbf{Y}_{(1)}, \mathbf{Z}^{(1)}, \mathbf{U}^{(1)}, k_{\max})$  ;     // Aktualizacja dla  $\mathbf{U}^{(1)}$   
5      $\mathbf{u}_l^{(1)} \leftarrow \frac{\mathbf{u}_l^{(1)}}{\|\mathbf{u}_l^{(1)}\|_2}$ , gdzie  $l = 1, \dots, J_1$  ;     // Normalizacja dla  $\mathbf{U}^{(1)}$   
6      $\mathbf{Z}^{(2)} = \mathbf{G}_{(2)}(\mathbf{U}^{(3)} \otimes \mathbf{U}^{(1)})^T$  ;  
7      $\mathbf{U}^{(2)} \leftarrow \text{nnls}(\mathbf{Y}_{(2)}, \mathbf{Z}^{(2)}, \mathbf{U}^{(2)}, k_{\max})$  ;     // Aktualizacja dla  $\mathbf{U}^{(2)}$   
8      $\mathbf{u}_l^{(2)} \leftarrow \frac{\mathbf{u}_l^{(2)}}{\|\mathbf{u}_l^{(2)}\|_2}$ , gdzie  $l = 1, \dots, J_2$  ;     // Normalizacja  $\mathbf{U}^{(2)}$   
9      $\mathbf{Z}^{(3)} = \mathbf{G}_{(3)}(\mathbf{U}^{(2)} \otimes \mathbf{U}^{(1)})^T$  ;  
10      $\mathbf{U}^{(3)} = \mathbf{Y}_{(3)}(\mathbf{Z}^{(3)})^T(\mathbf{Z}^{(3)}(\mathbf{Z}^{(3)})^T)^{-1}$  ;     // Aktualizacja dla  $\mathbf{U}^{(3)}$   
11      $\mathbf{u}_l^{(3)} \leftarrow \frac{\mathbf{u}_l^{(3)}}{\|\mathbf{u}_l^{(3)}\|_2}$ , gdzie  $l = 1, \dots, J_3$  ;     // Normalizacja dla  $\mathbf{U}^{(3)}$   
12      $\mathbf{U}^{(3)} \leftarrow \mathbf{U}^{(3)} \left( (\mathbf{U}^{(3)})^T \mathbf{U}^{(3)} \right)^{-1/2}$  ;     // Ortogonalizacja kolumn  
13      $\mathcal{G} \leftarrow \mathcal{Y} \times_1 (\mathbf{U}^{(1)})^\dagger \times_2 (\mathbf{U}^{(2)})^\dagger \times_3 (\mathbf{U}^{(3)})^T$  ;     // Aktualizacja dla  $\mathcal{G}$   
14 **until** Kryterium stopu jest spełnione;

---

Klasyfikacja nienadzorowana może być realizowana przez grupowanie wektorów kodujących. W klasyfikacji nadzorowanej wyznaczane są testowe wektory kodujące przez rzutowanie obrazów testowych na podprzestrzeń rozpinającą obrazy bazowe. Następnie, każdy obraz testowy klasyfikowany jest na podstawie przyjętej miary podobieństwa między odpowiadającym wektorem kodującym a wektorami kodującymi obrazów uczących.

Niech  $\mathcal{T} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times R}$  zawiera obrazy testowe, ułożone wzdłuż trzeciego modu, podobnie jak obrazy uczące w  $\mathcal{Y}$ , gdzie  $R$  jest liczbą obrazów testowych. Po rozwinięciu tensora  $\mathcal{T}$  wzdłuż trzeciego modu uzyskuje się macierz  $\mathbf{T}_{(3)} \in \mathbb{R}_+^{R \times I_1 I_2}$ . Niech indeksy klas obrazów uczących zawarte są w wektorze  $\mathbf{c}^{(u)} \in \mathbb{Z}^{I_3}$ . Algorytm 28 estymuje wektor  $\mathbf{c}^{(t)} \in \mathbb{Z}^R$  zawierający indeksy klas obrazów testowych.

---

**Algorytm 28. Klasyfikacja nadzorowana**


---

**Wejście:**  $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{J_1 \times J_2 \times J_3}$ ,  $\mathbf{U}^{(1)} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times J_1}$ ,  $\mathbf{U}^{(2)} \in \mathbb{R}_+^{I_2 \times J_2}$ ,  $\mathbf{U}^{(3)} \in \mathbb{R}^{I_3 \times J_3}$ ,  
 $\mathbf{c}^{(u)} \in \mathbb{Z}^{I_3}$  – indeksy klas obrazów uczących,  
 $\mathcal{T} \in \mathbb{R}_+^{I_1 \times I_2 \times R}$  – obrazy testowe

**Wyjście:**  $\mathbf{c}^{(t)} \in \mathbb{Z}^R$  – indeksy klas obrazów testowych

- 1  $\mathbf{Z}^{(3)} = \mathbf{G}_{(3)}(\mathbf{U}^{(2)} \otimes \mathbf{U}^{(1)})^T$  ;
- 2  $\mathbf{U}^{(test)} = \mathbf{T}_{(3)}(\mathbf{Z}^{(3)})^T(\mathbf{Z}^{(3)}(\mathbf{Z}^{(3)})^T)^{-1}$  ; // Testowe wektory kodujące
- 3  $\mathbf{u}_l^{(t)} \leftarrow \frac{\mathbf{u}_l^{(t)}}{\|\mathbf{u}_l^{(t)}\|_2}$ , gdzie  $l = 1, \dots, J_3$  ; // Normalizacja dla  $\mathbf{U}^{(t)}$
- 4  $\mathbf{c}^{(t)} \leftarrow \text{knnclassify}(\mathbf{U}^{(test)}, \mathbf{U}^{(3)}, \mathbf{c}^{(u)}, 1, 'correlation')$  ; // Klasyfikacja NN

---

Funkcja `knnclassify` w czwartym kroku algorytmu 28 pochodzi z pakietu narzędziowego *Bioinformatics* w programie Matlab. Funkcja ta klasyfikuje każdy wiersz macierzy  $\mathbf{U}^{(test)}$  do jednej z grup wierszy macierzy  $\mathbf{U}^{(3)}$  według metody  $k$  najbliższych sąsiadów. W algorytmie 28 przyjęto  $k = 1$  oraz korelacyjną miarę określania podobieństwa wektorów.

## 6.4. Dekompozycja dużych zbiorów danych

Intensywny rozwój technik pozyskiwania i przetwarzania danych cyfrowych oraz zapotrzebowanie na gromadzenie dużej ilości informacji znacząco przyczyniły się do powstania ogromnych zbiorów danych, o rozmiarze często przekraczającym setki terabajtów, a nawet czasami petabajtów. Ekstrakcja cech oraz redukcja wymiarowości modelu z tak ogromnych zbiorów danych jest zadaniem bardzo trudnym, nawet dla obecnych superszybkich komputerów i wyspecjalizowanych technik obliczeniowych. Oprócz ogromnych zasobów sprzętowych i dużej mocy obliczeniowej, konieczna jest optymalizacja procesu obliczeniowego. W takim przypadku istotne znaczenie mają zarówno własności numeryczne użytego algorytmu, jak i optymalny podział zadania obliczeniowego w celu realizacji obliczeń współbieżnych.

Algorytmy sekwencyjne, które stosowane są we wszystkich wspomnianych metodach dekompozycji tensorów (np. algorytm 26), realizują estymację faktorów przez sekwencyjne rozwinięcia tensora obserwacji wzdłuż kolejnych modów. Łatwo zauważyć, że jeśli  $\mathcal{Y}$  jest tensorem o bardzo dużych wymiarach,

$\forall n : \mathbf{Y}_{(n)}$  jest macierzą zawierającą ogromną liczbę kolumn. Przykładowo, niech  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{100 \times 1000 \times 1000}$ , wówczas  $\mathbf{Y}_{(1)} \in \mathbb{R}^{100 \times 10^6}$ . Dekomponując  $\mathcal{Y}$  według modelu NTF, zadanie (6.20) dla  $n = 1$  jest bardzo silnie nadokreślone, a realizacja iloczynu Khatri–Rao w  $\mathbf{U}^{\odot -1} \in \mathbb{R}^{10^6 \times J}$  wymaga ogromnego kosztu obliczeniowego oraz dużej ilości pamięci operacyjnej. Takie podejście znacząco ogranicza użyteczność omawianych metod w przetwarzaniu dużych zbiorów danych.

Aby dekomponować tensory o dużych rozmiarach lub o dużej liczbie modów, należy zastosować różne usprawnienia w implementacji algorytmów obliczeniowych. W literaturze można odnaleźć wiele propozycji takich usprawnień. W najprostszym podejściu macierz  $\mathbf{Y}_{(n)} \in \mathbb{R}^{I_n \times \prod_{p \neq n} I_p}$  można zredukować do znacznie mniejszej przez wybranie niewielkiej liczby najbardziej znaczących kolumn. Nie są jednak znane jasne kryteria takiego wyboru. Problem ten był dyskutowany w wielu pracach, np. [75, 89, 352]. Wybór ten może też być motywowany metodą faktoryzacji CUR [117, 297].

Innym, efektywniejszym podejściem jest tzw. siatkowy model NTF lub siatkowa wersja modelu CP, którą zaproponowano w [349], a następnie rozszerzono w [352] z wykorzystaniem innych reguł aktualizacji faktorów. W siatkowym modelu NTF, oznaczonym w dalszej części pracy skrótowcem gNTF (ang. *Grid NTF*), tensor obserwacji  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$  dzieli się przestrzennie na bloki  $\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})} \in \mathbb{R}^{I_{k_1} \times I_{k_2} \times \dots \times I_{k_N}}$  o mniejszym wymiarze, gdzie  $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_N]$ ,  $1 \leq k_n \leq K_n$ , a  $K_n$  jest liczbą bloków tensora wzdłuż  $n$ -tego modu. Podział ten wyznaczony jest przez równomierną siatkę podziału, a każdy blok jest pewnym fragmentem tensora  $\mathcal{Y}$  o takim samym stopniu, ale mniejszym wymiarze. Tak więc:  $\forall n : \sum_{k_n} I_{k_n} = I_n$ . Każdy z bloków może być więc reprezentowany modelem dekompozycji tensora, np. modelem CP, który spełnia warunki jednoznaczności, przy pewnych słabych założeniach, zatem:

$$\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})} = \mathcal{I}_N \times_1 \mathbf{U}_{(k_1)}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}_{(k_2)}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{U}_{(k_N)}^{(N)} \in \mathbb{R}^{I_{k_1} \times I_{k_2} \times \dots \times I_{k_N}}, \quad (6.40)$$

gdzie  $\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_{k_n} \times J}$ . Z kolei,  $\mathbf{U}^{(n)} = \left[ (\mathbf{U}_{(1)}^{(n)})^T, (\mathbf{U}_{(2)}^{(n)})^T, \dots, (\mathbf{U}_{(K_n)}^{(n)})^T \right]^T \in \mathbb{R}^{I_n \times J}$ , zgodnie z modelem (6.10). Po rozwinięciu tensora  $\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})}$  względem  $n$ -tego modu uzyskuje się:

$$\mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} = \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \left( \mathbf{U}^{(\mathbf{k}) \odot -n} \right)^T, \quad (6.41)$$

gdzie  $\mathbf{U}^{(\mathbf{k}) \odot -n} = \mathbf{U}_{(k_N)}^{(N)} \odot \dots \odot \mathbf{U}_{(k_{n+1})}^{(n+1)} \odot \mathbf{U}_{(k_{n-1})}^{(n-1)} \odot \dots \odot \mathbf{U}_{(k_1)}^{(1)} \in \mathbb{R}^{\prod_{p \neq n} I_{k_p} \times J}$ .

Stosując funkcję odległości euklidesowej w celu estymacji czynników  $\{\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}\}$ , funkcja celu ma postać:

$$\Psi(\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} (\mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n})^T\|_F^2. \quad (6.42)$$

Z warunku stacjonarności:  $\nabla_{\mathbf{U}_{k_n}^{(n)}} \Psi(\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}) = \mathbf{0}$  otrzymuje się regułę aktualizacji dla  $\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}$  według kryterium najmniejszych kwadratów:

$$\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \leftarrow \left( \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} \mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n} \right) \left( \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} (\mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^T \mathbf{U}_{(\mathbf{k})})^{\otimes -n} \right)^{-1}. \quad (6.43)$$

Ponieważ z założenia blok  $\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})}$  w (6.43) nie ma zbyt dużych rozmiarów, zatem macierz  $\mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} \mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n}$  jest już możliwa do wyznaczenia. Ponadto, macierze te mogą być obliczane równoległe na wielu procesorach.

Reguła aktualizacji w (6.43) może być jeszcze dodatkowo usprawniona w celu przetwarzania dużych zbiorów danych. Phan i Cichocki [349, 352] zaproponowali aby faktoryzacje bloków  $\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})}$  realizować niezależnie, w podejściu równoległym, a następnie otrzymane wyniki zintegrować. Stosując dekompozycję CP do każdego z bloków  $\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})}$ , uzyskuje się czynniki  $\{\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)}\}$  według modelu:

$$\mathcal{Y}^{(\mathbf{k})} = \mathcal{I}_N \times_1 \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(1)} \times_2 \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(2)} \times_3 \dots \times_N \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(N)}, \quad (6.44)$$

gdzie  $\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)} \in \mathbb{R}^{I_{k_n} \times J_k}$ . Uwzględniając model (6.44) w obliczeniach macierzy  $\mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} \mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n}$ , otrzymuje się:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{(n)}^{(\mathbf{k})} \mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n} &\cong \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)} (\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n})^T \mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^{\odot -n} = \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)} (\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^T \mathbf{U}_{(\mathbf{k})})^{\otimes -n} \\ &= \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)} \left( \mathbf{A}_{(\mathbf{k})} \oslash \left( (\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)})^T \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \right) \right), \end{aligned} \quad (6.45)$$

gdzie  $\mathbf{A}(\mathbf{k}) = (\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^T \mathbf{U}(\mathbf{k}))^{\otimes} \in \mathbb{R}^{J_k \times J}$ . Przyjmując  $\mathbf{B}(\mathbf{k}) = (\mathbf{U}_{(\mathbf{k})}^T \mathbf{U}(\mathbf{k}))^{\otimes} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ , reguła aktualizacji algorytmu ALS ma postać:

$$\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} = \mathbf{T} \mathbf{S}^{-1}, \quad (6.46)$$

gdzie

$$\mathbf{T} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)} \left( \mathbf{A}(\mathbf{k}) \oslash \left( (\mathbf{W}_{(\mathbf{k})}^{(n)})^T \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \right) \right), \quad (6.47)$$

$$\mathbf{S} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \left( \mathbf{B}(\mathbf{k}) \oslash \left( (\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)})^T \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \right) \right). \quad (6.48)$$

Stosując podejście multiplikatywne w celu minimalizacji funkcji (6.42), uzyskuje się siatkową wersję algorytmu MUE:

$$\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \leftarrow \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \otimes [\mathbf{T}]_+ \oslash \left( \mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)} \mathbf{S} \right), \quad (6.49)$$

gdzie  $[\xi]_+ = \max\{0, \xi\}$ .

Podobnie jak w rozdziale 4.6.1, funkcję celu w (6.42) można także przedstawić w postaci:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}) &= \frac{1}{2} \left\| \mathcal{Y}^{(\mathbf{k})} - \sum_{r \neq j} \mathbf{u}_r^{(k_1)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_r^{(k_N)} - \left( \mathbf{u}_j^{(k_1)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_j^{(k_N)} \right) \right\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\| \mathcal{Y}_{(+j)}^{(\mathbf{k})} - \left( \mathbf{u}_j^{(k_1)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_j^{(k_N)} \right) \right\|_F^2, \end{aligned} \quad (6.50)$$

gdzie  $\mathcal{Y}_{(+j)}^{(\mathbf{k})} = \mathcal{Y}^{(\mathbf{k})} - \sum_{r \neq j} \mathbf{u}_r^{(k_1)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_r^{(k_N)} \in \mathbb{R}^{I_{k_1} \times I_{k_2} \times \dots \times I_{k_N}}$  dla  $j = 1, \dots, J$ . Z warunku stacjonarności:  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_j^{(k_n)}} \Psi(\mathbf{U}_{(k_n)}^{(n)}) = \mathbf{0}$  wynika reguła aktualizacji algorytmu HALS, która jest analogiczna do reguł (4.153):

$$\mathbf{u}_j^{(k_n)} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \frac{\mathcal{Y}_{(+j)}^{(\mathbf{k})} \bar{\times}_{-n} \left( \mathbf{u}_j^{(k_1)} \circ \dots \circ \mathbf{u}_j^{(k_N)} \right)}{\sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \left( (\mathbf{u}_j^{(\mathbf{k})})^T \mathbf{u}_j^{(\mathbf{k})} \right)^{\otimes -n}}. \quad (6.51)$$

Bazując na podobnych przekształceniach jak w (4.157) i (4.158), Phan i Cichocki [352] uzyskali prostą regułę aktualizacji dla faktora  $\mathbf{u}_j^{(k_n)}$ :

$$\mathbf{u}_j^{(k_n)} \leftarrow \mathbf{u}_j^{(k_n)} + \frac{1}{c_j^{(k_n)}} \left( \mathbf{t}_j - \mathbf{U}^{(n)} \mathbf{s}_j \right), \quad (6.52)$$

gdzie:

$$c_j^{(k_n)} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ k_{n+1}, \dots, k_N}} \left( (\mathbf{u}_j^{(\mathbf{k})})^T \mathbf{u}_j^{(\mathbf{k})} \right)^{\otimes -n}. \quad (6.53)$$

Wektory  $\mathbf{t}_j$  i  $\mathbf{s}_j$  są  $j$ -tymi kolumnami odpowiednich macierzy  $\mathbf{T}$  i  $\mathbf{S}$  w (6.47) i (6.48). W pracy [351] algorytm HALS został również zastosowany do obliczeń faktorów w siatkowych wersjach różnych modeli dekompozycji Tuckera.

Omawiane algorytmy można dość łatwo zaimplementować w programie Matlab na maszynie wieloprocesorowej z wykorzystaniem pętli **parfor** i pakietu narzędziowego **Parallel Computing Toolbox**. Takie implementacje przedstawiono w pracach [349, 351, 352].

## 7. Przykładowe zastosowania modeli NMF i NTF

W niniejszym rozdziale omówiono wybrane zastosowania modelu NMF i NTF, zwłaszcza w kontekście ślepej separacji sygnałów źródłowych, grupowania danych oraz nadzorowanej klasyfikacji obrazów. Przedstawione przykłady ukazują jedynie potencjalne obszary zastosowań i nie stanowią ich kompleksowego przeglądu. Metody nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów są narzędziami wykorzystywanymi w przetwarzaniu danych, sygnałów czy obrazów, a ich zastosowania są różnorodne. Oprócz omówionych, przykładowych zastosowań należy wspomnieć, że są to metody, które wykorzystuje się również w wielu innych dziedzinach nauki i przemysłu, takich jak np. bioinformatyka [38, 52, 106, 139, 198, 222, 228, 229, 288, 300, 333, 374, 414], astronomia [201], telekomunikacja [101, 250, 402] itd.

### 7.1. Ślepa separacja źródeł

Zadaniem ślepej separacji źródeł jest estymowanie sygnałów źródłowych oraz współczynników ich mieszania na podstawie obserwacji sygnałów zmieszanych i apriorycznej wiedzy na temat estymowanych wielkości. Zakładając liniowy model jednoczesnego mieszania  $J$  sygnałów źródłowych  $x_j(t)$  dla  $j = 1, \dots, J$ ,  $i$ -ty obserwowany sygnał zmieszany  $y_i(t)$  jest postaci:

$$y_i(t) = \sum_{j=1}^J a_{ij}x_j(t) + n_i(t), \quad (7.1)$$

gdzie  $a_{ij}$  – współczynnik wagowy mieszania (wkład  $j$ -tego sygnału źródłowego do  $i$ -tej obserwacji),  $n_i(t)$  – addytywny szum zakłócający obserwowany sygnał.

Zadaniem ślepej separacji źródeł jest estymowanie sygnałów  $x_j(t)$  i współczynników  $\{a_{ij}\}$  na podstawie obserwowanych sygnałów  $y_i(t)$  i wiedzy apriorycznej,

zarówno na temat charakteru estymowanych wielkości, jak i rozkładu szumu zakłócającego.

Wiedza aprioryczna może także dotyczyć ograniczeń estymowanych wielkości lub innych pomocniczych obserwacji modelowanych zjawisk. Wiedza ta jest następnie reprezentowana wybranym modelem apriorycznym. W zależności od zastosowań, w modelu tym najczęściej zakłada się statystyczną niezależność sygnałów źródłowych albo odpowiednią rzadkość lub nieujemność pewnych parametrów związanych z estymowanymi wielkościami.

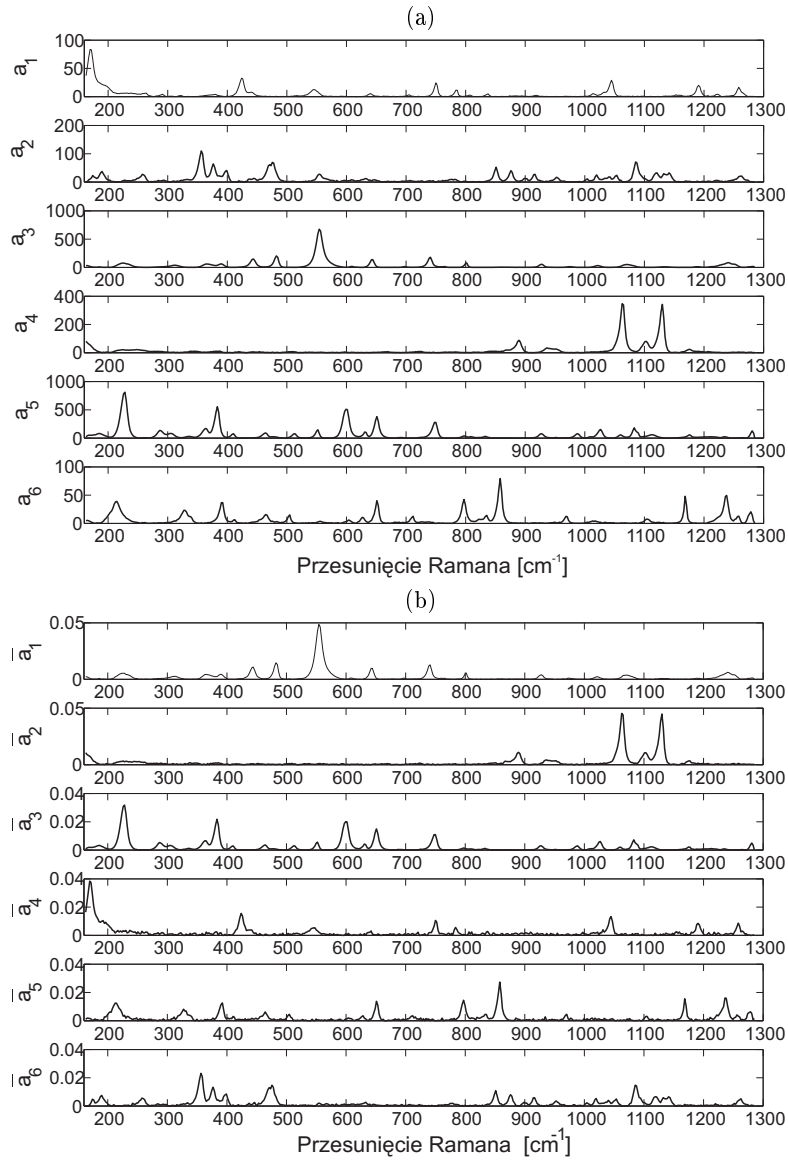
Zakładając, że zarówno współczynniki mieszające, jak i sygnały źródłowe są rzeczywiste i nieujemne oraz obserwując  $I$  sygnałów zmieszanych w oknie czasowym zawierającym  $T$  próbek, model (7.1) sprowadza się do postaci (1.3), gdzie  $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X} = [x_j(t)] \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ ,  $\mathbf{Y} = [y_i(t)] \in \mathbb{R}^{I \times T}$  oraz  $\mathbf{N} = [n_i(t)] \in \mathbb{R}^{I \times T}$ . Tak więc, zadanie estymacji parametrów modelu (7.1) może być wyrażone w kontekście nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$ .

### 7.1.1. Separacja sygnałów spektralnych

Przykłady zastosowań modelu NMF w analizie sygnałów spektralnych można odnaleźć w wielu pracach. Są to głównie metody służące do ślepej separacji lub ekstrakcji sygnałów widmowych w spektroskopii Ramana [264, 310, 320, 385], spektroskopii fluorescencyjnej [151, 152, 167], spektroskopii refleksyjnej [169, 345], rozplataniu obrazów mikroskopowych [348], obrazowaniu przesunięcia chemicznego [386], rozplataniu widm lodu astrofizycznego [201, 202, 290, 291], chromatograficznej spektroskopii masy gazu [278], a przede wszystkim w obrazowaniu hiperspektralnym [27, 58, 118, 156, 168, 186, 199, 203, 204, 209, 210, 303, 322, 360, 370, 433, 489, 533].

We wspomnianych technikach separacji sygnałów spektralnych zakłada się, że obserwowane widma stanowią mieszaninę liniową widm różnych związków składowych. Są to tzw. endmembersy (ang. *endmembers*), czyli związki czyste spektralnie. Zakładając, że kolumny macierzy  $\mathbf{Y}$  reprezentują zmierzone widma zmieszane, wówczas według modelu faktoryzacji (1.1), kolumny macierzy  $\mathbf{A}$  powinny zawierać widma związków czystych spektralnie, a macierz  $\mathbf{X}^T$  powinna reprezentować macierz mieszającą. Wynika stąd, że element  $x_{jt}$  w macierzy  $\mathbf{X}$  określa rozkład koncentracji lub abundancję (ang. *abundance*) widma  $j$ -tego endmembera w  $t$ -tym widmie zmierzonym. Rząd faktoryzacji  $J$  jest zakładaną liczbą endmemberów.



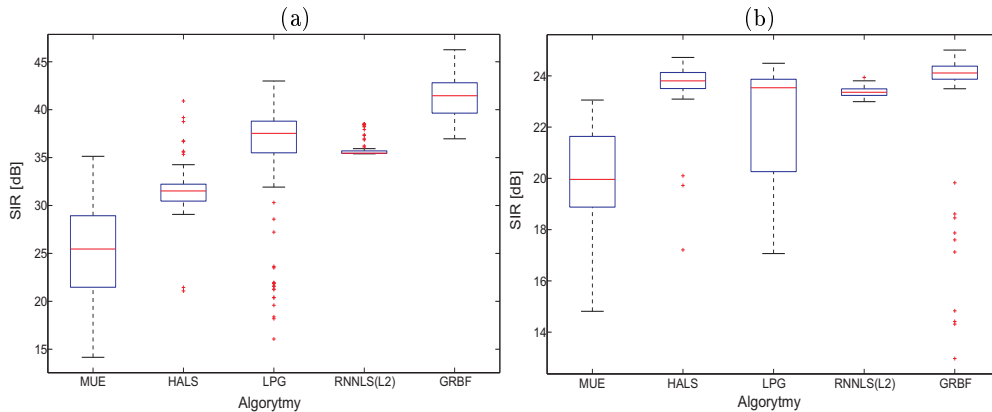


Rys. 7.1. Widma Ramana: (a) oryginalne; (b) estymowane algorytmem HALS z zaburzonych sygnałów zmieszanych o współczynniku  $SNR = 20$  dB.

Dla sygnałów estymowanych:  $SIR = 23,81$  dB

W dalszej części przedstawiono przykład zastosowania modelu NMF do ślepej separacji widm Ramana. W badaniach wykorzystano *benchmark* sześciu widm Ramana, pochodzących z bazy danych projektu RRUFF<sup>TM1</sup>. Na rysunku 7.1(a) zilustrowano wyselekcjonowane widma następujących związków chemicznych (od góry): aspiryna ( $C_9H_8O_4$ ),  $\alpha$ -D laktoza jednowodna ( $C_{12}H_{24}O_{12}$ ), kofeina ( $C_8H_{10}N_4O_2$ ), stearynian magnezu ( $Mg(C_{18}H_{35}O_2)_2$ ), pirymetamina ( $C_{12}H_{13}ClN_4$ ) oraz paracetamol ( $C_8H_9NO_2$ ). Są to widma wzbudzone laserem o długości fali 780 nm. Źródłowe sygnały widmowe próbkowano ponownie, tak aby każdy sygnał składał się z 500 próbek, zatem  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{500 \times 6}$ . Obserwowano 100 sygnałów zmieszanych. Elementy macierzy  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{6 \times 100}$  generowano według zasady:  $\forall j, t : x_{jt} = \max\{0, \tilde{x}_{jt}\}$ , gdzie  $\tilde{x}_{jt} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ .

Do estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{X}$  wybrano następujące algorytmy: MUE (rozd. 4.4.1), HALS (rozd. 4.6.1), LPG (rozd. 4.7), RNNLS(L2) (algorytm 15) oraz GRBF (algorytm 25). Ocenę efektywności algorytmów przeprowadzono na podstawie analizy statystycznej rozkładu 100 próbek współczynnika *SIR* dla estymatora  $\hat{\mathbf{A}}$ . W każdej próbie statystycznej macierze  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  generowane były losowo z rozkładu równomiernego. W algorytmie GRBF przyjęto następujące parametry:  $M = I = 500$ ,  $\Delta a = 1$ ,  $\sigma^2 = 1$ ,  $\alpha_0 = 10$ ,  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$ . Parametr  $\alpha_0$  był również taki sam w algorytmie RNNLS(L2). Algorytmy zatrzymywano, jeśli spełnione było kryterium stagnacji funkcji celu dla  $\varepsilon_{obj} = 10^{-5}$ .



Rys. 7.2. Statystyka rozkładu próbek *SIR* dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  z danych: (a) bez zaburzeń modelu; (b) z addytywnymi zaburzeniami modelu o  $SNR = 20$  dB

<sup>1</sup> <http://rruff.info>

Tabela 7.1. Współczynniki  $SIR$  i czas estymacji uzyskane za pomocą wybranych algorytmów z danych zaburzonych i przy inicjalizacji metodą CHV. Dla danych dokładnych metoda CHV estymuje macierz  $\mathbf{A}$  z jakością, dla której  $SIR > 250$  dB.

Algorytm	MUE	HALS	LPG	RNNLS(L2)	GRBF
$SIR$ [dB]	21,99	23,81	23,98	23	23,45
Czas [s]	0,691	0,134	1,361	0,906	879,8

Na rysunku 7.2 przedstawiono statystykę rozkładu próbek współczynnika  $SIR$  dla estymacji macierzy  $\mathbf{A}$  z danych dokładnych oraz z danych zakłóconych szumem o takiej mocy widmowej, dla której  $SNR = 20$  dB. Następnie, estymację przeprowadzono z tych samych danych zaburzonych, ale dla macierzy  $\mathbf{A}^{(0)}$  wyznaczonej za pomocą algorytmu CHV (algorytm 9). W tabeli 7.1 zamieszczono wartości współczynników  $SIR$  dla estymacji faktora  $\mathbf{A}$  oraz czas estymacji, uzyskane wybranymi algorytmami. Ponadto, sygnały estymowane algorytmem HALS pokazano na rysunku 7.1(b).

**Wniosek 7.1.** Z rysunku 7.2 wynika, że algorytm GRBF pozwala uzyskać najlepszą jakość estymacji, gdy separowane sygnały są lokalnie gładkie, a sygnały zmieszane nie są zakłócone silnym szumem. Dla  $SNR = 20$  dB, algorytm GRBF nadal przewyższa jakością estymacji inne badane algorytmy, ale różnica nie jest znacząca. Niestety, lepsza jakość estymacji algorytmem GRBF odbywa się kosztem ogromnej złożoności obliczeniowej. Porównanie czasu estymacji znajduje się w tabeli 7.1. Należy też zauważyć, że w tych badaniach oba estymowane faktory są rzadkie. Dlatego też adaptacyjna zmiana parametru regularyzacji w obu algorytmach GRBF i RNNLS(L2) nie wpływa znacząco na poprawę jakości estymacji. Niemniej jednak, zastosowanie zmiennej regularyzacji stabilizuje estymacje. Z rysunku 7.2 wynika, że wariancja rozkładu próbek  $SIR$  uzyskanych algorytmem RNNLS(L2) jest mała w obu przypadkach testowych. Jeśli dane obserwowane są dokładne i problem jest dobrze uwarunkowany, metoda inicjalizacji CHV wystarczająco dobrze estymuje sygnały źródłowe i nie są potrzebne żadne algorytmy NMF do dalszej poprawy jakości estymacji. Gdy jednak występują zaburzenia modelu, jakość estymacji za pomocą metody CHV szybko maleje ze wzrostem mocy zaburzeń. Dla  $SNR \leq 20$  dB, metoda CHV powinna być łączona z algorytmami NMF.

### 7.1.2. Separacja sygnałów akustycznych

Model (7.1), opisujący proces jednoczesnego mieszania sygnałów źródłowych, jest zbyt uproszczony w praktycznych zastosowaniach ślepej separacji sygnałów

akustycznych. Zakładając, że sygnały te docierają do mikrofonów wielodrogowo, model mieszania sygnałów źródłowych powinien mieć postać splotową. Sygnał rejestrowany  $i$ -tym mikrofonem można więc opisać następującą formułą:

$$\tilde{y}_i(t) = \sum_{j=1}^J \sum_{l=0}^{L-1} \tilde{a}_{ijl} \tilde{x}_j(t-l) + \tilde{n}_i(t), \quad (7.2)$$

gdzie  $\tilde{a}_{ijl}$  – współczynnik filtru (mieszającego) o skończonej odpowiedzi impulsowej,  $\tilde{x}_j(t)$  –  $j$ -ty sygnał źródłowy ( $j = 1, \dots, J$ ),  $\tilde{n}_i(t)$  – addytywny szum zakłócający,  $L$  – rząd filtru.

Model (7.2) w reprezentacji czasowo-częstotliwościowej można wyrazić następująco:

$$y_{ift} = \sum_{j=1}^J a_{ijf} x_{jft} + n_{ift}, \quad (7.3)$$

lub równoważnie w postaci macierzowej:

$$\mathbf{Y}_f = \mathbf{A}_f \mathbf{X}_f + \mathbf{N}_f, \quad (7.4)$$

gdzie  $\mathbf{Y}_f = [y_{ift}]_f \in \mathbb{C}^{I \times T}$ ,  $\mathbf{A}_f = [a_{ijf}]_f \in \mathbb{C}^{I \times J}$ ,  $\mathbf{X}_f = [x_{jft}]_f \in \mathbb{C}^{J \times T}$ ,  $\mathbf{N}_f = [n_{ift}]_f \in \mathbb{C}^{I \times T}$ , oraz  $f = 1, \dots, F$  jest indeksem próbki częstotliwości.

Macierze  $\{\mathbf{Y}_f\}$  ułożone warstwowo tworzą tensor obserwacji  $\mathcal{Y} = [y_{ift}] \in \mathbb{C}^{I \times F \times T}$ . Analogicznie, uzyskuje się  $\mathcal{A} = [a_{ijf}] \in \mathbb{C}^{I \times J \times F}$  oraz  $\mathcal{X} = [x_{jft}] \in \mathbb{C}^{J \times F \times T}$ . Zakłada się, że szum  $n_{ift}$  jest stacjonarny i przestrzennie nieskorelowany. Stąd

$$n_{ift} \sim \mathcal{N}_c(0, \sigma_i^2), \quad (7.5)$$

gdzie  $\mathcal{N}_c(0, \sigma_i^2)$  – rozkład gaussowski liczb zespolonych o średniej równej zero i wariancji  $\sigma_i^2$ .

Dla założonego rozkładu zmiennych losowych  $n_{ift}$  w (7.5) estymacja faktorów  $\{\mathbf{A}_f\}$  i  $\{\mathbf{X}_f\}$  w modelu (7.4) może być zrealizowana algorytmem naprzemiennej minimalizacji funkcji celu, wynikającej z przyjętego rozkładu. Jednak w tym przypadku ograniczenia nieujemności nie mogą być bezpośrednio zastosowane do elementów estymowanych faktorów. Można jednak opisać elementy macierzy  $\{\mathbf{X}_f\}$  za pomocą modelu, którego pewne parametry są nieujemne i mogą być estymowane przez NMF.

Benaroya i pozostali autorzy pracy [14] zaproponowali, aby źródłowy sygnał akustyczny  $\tilde{x}(t)$  modelować za pomocą superpozycji procesów gaussowskich modulowanych amplitudowo:

$$\tilde{x}(t) = \sum_{r=1}^R h_r(t) \tilde{w}_r(t), \quad (7.6)$$

gdzie  $h_r(t)$  jest sygnałem modulującym w  $r$ -tym komponencie ( $r = 1, \dots, R$ ), a  $\tilde{w}_r(t)$  jest stacjonarnym procesem gaussowskim o średniej zero i widmowej gęstości mocy  $\sigma_r^2(f)$ . Po zastosowaniu krótkoczasowej transformaty Fouriera (STFT) do sygnału (7.6), uzyskuje się reprezentację czasowo-częstotliwościową:

$$x_{ft} \sim \mathcal{N}_c \left( 0, \sum_{r=1}^R h_r(t) \sigma_r^2(f) \right). \quad (7.7)$$

Spektrogram lub widmowa gęstość energii w oknie czasowym sygnału (7.7) ma postać:  $|x_{ft}|^2 = \sum_{r=1}^R w_{fr} h_{rt}$ , gdzie  $w_{fr} = \sigma_r^2(f)$  oraz  $h_{rt} = h_r(t)$ .

Model (7.7) można też wyrazić w postaci równoważnej [14, 128, 336]:

$$x_{ft} = \sum_{r=1}^R c_{rft} \quad (7.8)$$

gdzie  $c_{rft} \sim \mathcal{N}_c(0, h_r(t) \sigma_r^2(f)) = \mathcal{N}_c(0, w_{fr} h_{rt})$ . Współczynnik  $c_{rft}$  jest  $r$ -tym komponentem ukrytym zmiennej losowej  $x_{ft}$ . Macierz kowariancji takich komponentów ma postać:

$$\Sigma_{ft}^{(c)} = \text{diag}([w_{fr} h_{rt}]_r) = \text{diag}([|c_{rft}|^2]_r). \quad (7.9)$$

W rezultacie,  $|x_{ft}|^2 = \sum_{r=1}^R w_{fr} h_{rt} = \sum_{r=1}^R |c_{rft}|^2$ .

Stosując model (7.7) do reprezentacji sygnałów źródłowych, spektrogram  $j$ -tego sygnału źródłowego  $\tilde{x}_j(t)$  można wyrazić zależnością:  $|x_{jft}|^2 = \sum_{r_j=1}^{R_j} |c_{r_jft}^{(j)}|^2 = \sum_{r_j=1}^{R_j} w_{fr_j}^{(j)} h_{r_jt}^{(j)}$ , gdzie  $c_{r_jft}^{(j)}$  jest  $r_j$ -tym komponentem ukrytym  $j$ -tego sygnału źródłowego, a  $R_j$  jest liczbą komponentów ukrytych w tym sygnale. Spektrogram sygnału  $\tilde{x}_j(t)$  zatem można modelować przez nieujemną faktoryzację macierzy:

$$|\mathbf{X}_j|^2 = \mathbf{W}_j \mathbf{H}_j, \quad (7.10)$$

gdzie  $\mathbf{X}_j \in \mathbb{C}^{F \times T}$ ,  $\mathbf{W}_j \in \mathbb{R}_+^{F \times R_j}$  oraz  $\mathbf{H}_j \in \mathbb{R}_+^{R_j \times T}$ . Wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{W}_j$  reprezentują profile częstotliwości, a wektory wierszowe macierzy  $\mathbf{H}_j$  wyrażają profile czasowe w  $j$ -tym sygnale źródłowym.

Niech

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{ft} &= [c_r]_{ft} = [c_{1ft}^{(1)}, \dots, c_{R_1ft}^{(1)}, c_{1ft}^{(2)}, \dots, c_{R_2ft}^{(2)}, \dots, c_{1ft}^{(J)}, \dots, c_{R_Jft}^{(J)}] \\ &\in \mathbb{C}^R \end{aligned} \quad (7.11)$$

jest wektorem zawierającym wszystkie komponenty ukryte, które występują w  $ft$ -tym pikselu spektrogramów w  $J$  sygnałach źródłowych. Liczba tych komponentów wynosi  $R$ , gdzie  $r = 1, \dots, R$ . Niech  $\mathfrak{R}_j$  jest zbiorem indeksów elementów wektora  $\mathbf{c}_{ft}$ , które związane są z  $j$ -tym sygnałem źródłowym. Zbiory  $\{\mathfrak{R}_j\}$  spełniają warunki:  $\mathfrak{R}_j \cap \mathfrak{R}_i = \emptyset$  dla  $i \neq j$  oraz  $\bigcup_{j=1}^J \mathfrak{R}_j = \{1, \dots, R\}$ . Niech  $\mathbf{W} = [w_{fr}] = [w_{fr}^{(j)}] \in \mathbb{R}_+^{F \times R}$  oraz  $\mathbf{H} = [h_{rt}] = [h_{rt}^{(j)}] \in \mathbb{R}_+^{R \times T}$ , gdzie  $j = 1, \dots, J$  oraz  $r_j = 1, \dots, R_j$ , są macierzami utworzonymi w podobny sposób jak wektor  $\mathbf{c}_{ft}$ . Tak więc, model faktoryzacji spektrogramu  $j$ -tego sygnału źródłowego można zapisać w postaci:  $|x_{jft}|^2 = \sum_{r \in \mathfrak{R}_j} |c_{rft}|^2 = \sum_{r \in \mathfrak{R}_j} w_{fr} h_{rt}$ . Definiując  $|\bar{c}_{ft}|^2 = \sum_{r=1}^R |c_{rft}|^2$ , macierz  $\bar{\mathbf{C}} = [|\bar{c}_{ft}|^2] \in \mathbb{R}_+^{F \times T}$  można wyrazić za pomocą nieujemnej faktoryzacji:  $\bar{\mathbf{C}} = \mathbf{W}\mathbf{H}$ .

Zakładając, że liczba komponentów ukrytych dla każdego sygnału źródłowego jest taka sama, tzn.  $R_1 = R_2 = \dots = R_J \triangleq \bar{R}$ , wówczas  $R = J\bar{R}$ . Niech  $\bar{\mathbf{A}}_f = [\mathbf{A}_f, \dots, \mathbf{A}_f] \in \mathbb{C}^{I \times R}$  jest mieszającą macierzą rozszerzoną [336], utworzoną z  $\bar{R}$  macierzy  $\mathbf{A}_f$ . Ponieważ  $x_{jft} = \sum_{r \in \mathfrak{R}_j} c_{rft}$ , model (7.3) można przekształcić do postaci:

$$y_{ift} = \sum_{j=1}^J a_{ijf} \sum_{r \in \mathfrak{R}_j} c_{rft} + n_{ift} = \sum_{r=1}^R \bar{a}_{irf} c_{rft} + n_{ift}, \quad (7.12)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{A}}_f = [\bar{a}_{irf}]$ .

Dla tak sformułowanego modelu, zadanie ślepej separacji sygnałów źródłowych sprowadza się do naprzemiennej estymacji następujących zbiorów argumentów:  $\mathcal{A} = [a_{ijf}] \in \mathbb{C}^{I \times J \times F}$ ,  $\mathcal{C} = [c_{rft}] \in \mathbb{C}^{R \times F \times T}$ ,  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^{F \times R}$ ,  $\mathbf{H} \in \mathbb{R}_+^{R \times T}$ , oraz  $\boldsymbol{\Sigma}_n = \text{diag}([\sigma_i^2]) \in \mathbb{R}_+^{I \times I}$ . Wykorzystując wiedzę aprioryczną o charakterze estymowanych czynników, zadanie estymacji wspomnianych argumentów sprowadza się do maksymalizacji prawdopodobieństwa *a posteriori*:

$$P(\mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{Y}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) = \frac{P(\mathcal{Y} | \mathcal{C}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) P(\mathcal{C} | \mathbf{W}, \mathbf{H}) P(\mathbf{W}) P(\mathbf{H})}{P(\mathcal{Y} | \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n)}. \quad (7.13)$$

Zasadę Bayesa w zależności (7.13) można również wyrazić w postaci:

$$\begin{aligned} \ln P(\mathcal{Y}, \mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) &= \ln P(\mathcal{Y} | \mathcal{C}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) + \ln P(\mathcal{C} | \mathbf{W}, \mathbf{H}) \\ &+ \ln P(\mathbf{W}) + \ln P(\mathbf{H}). \end{aligned} \quad (7.14)$$

Z założenia (7.5) oraz z modelu (7.12) wynika, że łączny warunkowy rozkład gęstości prawdopodobieństwa dla zmiennych obserwowanych w  $\mathcal{Y}$  ma postać:

$$P(\mathcal{Y} | \mathcal{C}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) = \prod_{i,f,t} \mathcal{N}_c \left( \sum_{r=1}^R \bar{a}_{irf} c_{rft}, \sigma_i^2 \right) = \prod_{f,t} \mathcal{N}_c(\mathbf{A}_f \mathbf{x}_{ft}, \boldsymbol{\Sigma}_n). \quad (7.15)$$

Uwzględniając (7.15), zlogarytmowana funkcja wiarygodności (ang. *log-likelihood*), wyrażona pierwszym członem zależności (7.14), ma postać:

$$\begin{aligned} \ln P(\mathcal{Y} | \mathcal{C}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) &= - \sum_{f,t} (\mathbf{y}_{ft} - \bar{\mathbf{A}}_f \mathbf{c}_{ft})^H \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} (\mathbf{y}_{ft} - \bar{\mathbf{A}}_f \mathbf{c}_{ft}) - \sum_{f,t} \ln \det \boldsymbol{\Sigma}_n \\ &= - \sum_{f,t} (\mathbf{y}_{ft} - \mathbf{A}_f \mathbf{x}_{ft})^H \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} (\mathbf{y}_{ft} - \mathbf{A}_f \mathbf{x}_{ft}) \\ &\quad - \sum_{f,t} \ln \det \boldsymbol{\Sigma}_n + \text{const}, \end{aligned} \quad (7.16)$$

gdzie  $\mathbf{c}_{ft} = [c_{1ft}, \dots, c_{Rft}]^T \in \mathbb{C}^R$ ,  $\mathbf{x}_{ft} = [x_{1ft}, \dots, x_{Jft}]^T \in \mathbb{C}^J$  oraz  $\mathbf{y}_{ft} = [y_{1ft}, \dots, y_{Ift}]^T \in \mathbb{C}^I$ .

Łączny i warunkowy rozkład gęstości prawdopodobieństwa dla zmiennych losowych w  $\mathcal{C}$  wynika z modeli (7.7) i (7.8):

$$\begin{aligned} P(\mathcal{C} | \mathbf{W}, \mathbf{H}) &= \prod_{r=1}^R \prod_{f=1}^F \prod_{t=1}^T \mathcal{N}_c(0, w_{fr} h_{rt}) \\ &= \prod_{r=1}^R \prod_{f=1}^F \prod_{t=1}^T |\pi w_{fr} h_{rt}|^{-1} \exp \left\{ - \frac{|c_{rft}|^2}{w_{fr} h_{rt}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Zlogarytmowana funkcja wiarygodności modelująca tensor  $\mathcal{C}$  ma postać:

$$\ln P(\mathcal{C} | \mathbf{W}, \mathbf{H}) = - \sum_{r,f,t} \left( \ln(w_{fr} h_{rt}) + \frac{|c_{rft}|^2}{w_{fr} h_{rt}} \right) + \text{const}. \quad (7.18)$$

Łatwo zauważyć, że wartość bezwzględna z funkcji (7.18) sprowadza się do dywergencji Itakura–Saito (IS), którą podano w tabeli 2.3. Ten rodzaj dywergencji jest

szczególnie przydatny do oceny wiarygodności dopasowania spektrogramów [205]. Z kolei, dywergencja IS jest szczególnym przypadkiem dywergencji  $\beta$  dla  $\beta \rightarrow -1$  – zależność (2.27).

Rozkłady aprioryczne  $P(\mathbf{W})$  oraz  $P(\mathbf{H})$  w (7.13) mogą być zdefiniowane na różne sposoby. Févotte i pozostali autorzy pracy [128] zaproponowali, aby modelować je za pomocą łańcuchów Markowa i odwrotnego rozkładu Gamma. W pracy [483] wyrażone są przez rozkład Gibbsa, w którym funkcja potencjału przyjmuje postać funkcji Greena. Takie podejście zostało zaczerpnięte z tematyki rekonstrukcji obrazów tomograficznych i prowadzi do estymacji spektrogramów lokalnie gładkich. Przegląd typowych funkcji potencjału wykorzystywanych w rozkładach Gibbsa pokazano w tabeli 3.1. Zagadnienie wygładzania spektrogramów profili czasowych i częstotliwości w modelu (7.10) zostało szczegółowo omówione w pracy [493], gdzie zbadano efektywność stosowania różnych funkcji potencjału w ślepej separacji sygnałów akustycznych, zmieszanych jednocześnie i splotowo.

Maksymalizację prawdopodobieństwa *a posteriori* w (7.13) zrealizowano algorytmem EM (ang. *Expectation-Maximization*). Jest to iteracyjny algorytm zaproponowany przez Dempstera [105] do znajdowania estymatorów maksymalnej wiarygodności parametrów zadanego modelu statystycznego. Jest stosowany do takich modeli statystycznych, w których występują zmienne ukryte, a parametry estymowane nie mogą być wyznaczone w postaci analitycznej. Każda iteracja składa się z dwóch etapów: kroku E i kroku M. W kroku E wyznaczana jest wartość oczekiwana zlogarytmowanej funkcji wiarygodności względem rozkładu warunkowego zmiennych ukrytych, przy zadanych zmiennych obserwowanych i estymatorach parametrów z poprzedniej iteracji. Z kolei, w kroku M realizowana jest maksymalizacja wyznaczonej wartości oczekiwanej względem parametrów modelu.

Aby zrealizować krok E, zlogarytmowaną funkcję wiarygodności w (7.16) przekształcono do postaci:

$$\begin{aligned}
 \ln P(\mathcal{Y}|\mathcal{C}, \mathcal{A}, \boldsymbol{\Sigma}_n) &= -T \sum_f \text{tr} \left\{ \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} \mathbf{R}_f^{(yy)} \right\} + T \sum_f \text{tr} \left\{ \mathbf{A}_f^H \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} \mathbf{R}_f^{(yx)} \right\} \\
 &+ T \sum_f \text{tr} \left\{ \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} \mathbf{A}_f (\mathbf{R}_f^{(yx)})^H \right\} - T \sum_f \text{tr} \left\{ \mathbf{A}_f^H \boldsymbol{\Sigma}_n^{-1} \mathbf{A}_f \mathbf{R}_f^{(xx)} \right\} \\
 &- \sum_{f,t} \ln \det \boldsymbol{\Sigma}_n, \tag{7.19}
 \end{aligned}$$



gdzie  $\mathbf{R}_f^{(yy)} = \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{y}_{ft} \mathbf{y}_{ft}^H$  oraz  $\mathbf{R}_f^{(xx)} = \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{x}_{ft} \mathbf{x}_{ft}^H$  – macierze korelacji własnych,  $\mathbf{R}_f^{(yx)} = \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{y}_{ft} \mathbf{x}_{ft}^H$  – macierz korelacji wzajemnych.

Ozerov i pozostali autorzy pracy [336] zauważyli, że rozkład  $P(\mathcal{Y}, \mathcal{C} | \mathcal{A}, \Sigma_n)$  może być wyrażony poprzez rodzinę wykładniczych funkcji gęstości prawdopodobieństwa [105]. Wynika stąd, że zbiór macierzy korelacyjnych i tensora spektrogramów komponentów ukrytych  $\{\mathbf{R}_f^{(yy)}, \mathbf{R}_f^{(yx)}, \mathbf{R}_f^{(xx)}, |c_{rft}|^2\}$  tworzy tzw. statystykę wystarczającą. Sygnały źródłowe  $\mathbf{x}_{ft}$  oraz komponenty ukryte  $\mathbf{c}_{ft}$  mogą być estymowane poprzez wyznaczenie warunkowych wartości oczekiwanych z rozkładów aposteriorycznych  $P(\mathbf{x}_{ft} | \mathbf{y}_{ft})$  oraz  $P(\mathbf{c}_{ft} | \mathbf{y}_{ft})$ , zatem

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}_{ft} | \mathbf{y}_{ft}) &= \frac{P(\mathbf{y}_{ft}, \mathbf{x}_{ft})}{P(\mathbf{y}_{ft})} \\ &= \frac{(\pi^{I+J} \det \Sigma_{ft})^{-1} \exp \left\{ - \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \\ \bar{\mathbf{x}}_{ft} \end{bmatrix}^H (\Sigma_{ft})^{-1} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \\ \bar{\mathbf{x}}_{ft} \end{bmatrix} \right\}}{(\pi^I \det \Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \exp \left\{ - (\bar{\mathbf{y}}_{ft})^H (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \right\}} \\ &= (\pi^J \det \Gamma_{ft})^{-1} \exp \{ - \Psi_{ft} \}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{y}}_{ft} = \mathbf{y}_{ft} - \mathcal{E}(\mathbf{y}_{ft})$ ,  $\bar{\mathbf{x}}_{ft} = \mathbf{x}_{ft} - \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft})$ ,  $\Gamma_{ft} = \Sigma_{ft}^{(x)} - \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(yx)}$ ,

$$\Sigma_{ft} = \begin{bmatrix} \Sigma_{ft}^{(y)} & \Sigma_{ft}^{(yx)} \\ \Sigma_{ft}^{(xy)} & \Sigma_{ft}^{(x)} \end{bmatrix}, \quad \Psi_{ft} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \\ \bar{\mathbf{x}}_{ft} \end{bmatrix}^H (\Sigma_{ft})^{-1} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \\ \bar{\mathbf{x}}_{ft} \end{bmatrix} - (\bar{\mathbf{y}}_{ft})^H (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{ft}.$$

Macierz  $\Sigma_{ft}^{-1}$  w (7.20) może być wyrażona w postaci:

$$\Sigma_{ft}^{-1} = \begin{bmatrix} \left( \Sigma_{ft}^{(y)} - \Sigma_{ft}^{(yx)} (\Sigma_{ft}^{(x)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(xy)} \right)^{-1} & -(\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(yx)} \Gamma_{ft}^{-1} \\ -\Gamma_{ft}^{-1} \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} & \Gamma_{ft}^{-1} \end{bmatrix}.$$

Stosując wzór Shermana–Morrisona–Woodbury’ego, uzyskuje się:

$$\left( \Sigma_{ft}^{(y)} - \Sigma_{ft}^{(yx)} (\Sigma_{ft}^{(x)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(xy)} \right)^{-1} = (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} + (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(yx)} \Gamma_{ft}^{-1} \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1}.$$

Stąd

$$\begin{aligned}\Psi_{ft} &= \left( \bar{\mathbf{x}}_{ft} - \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \right)^H \mathbf{\Gamma}_{ft}^{-1} \left( \bar{\mathbf{x}}_{ft} - \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \bar{\mathbf{y}}_{ft} \right) \\ &= (\mathbf{x}_{ft} - \hat{\mathbf{x}}_{ft})^H (\hat{\Sigma}_{ft}^{(x)})^{-1} (\mathbf{x}_{ft} - \hat{\mathbf{x}}_{ft}),\end{aligned}\quad (7.21)$$

gdzie

$$\hat{\mathbf{x}}_{ft} = \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}) + \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} (\mathbf{y}_{ft} - \mathcal{E}(\mathbf{y}_{ft})), \quad (7.22)$$

$$\hat{\Sigma}_{ft}^{(x)} = \mathbf{\Gamma}_{ft} = \Sigma_{ft}^{(x)} - \Sigma_{ft}^{(xy)} (\Sigma_{ft}^{(y)})^{-1} \Sigma_{ft}^{(yx)}. \quad (7.23)$$

W rezultacie:  $P(\mathbf{x}_{ft}|\mathbf{y}_{ft}) = \mathcal{N}_c(\mathbf{x}_{ft}; \hat{\mathbf{x}}_{ft}, \hat{\Sigma}_{ft}^{(x)})$ . Z modelu (7.7) wynika  $\mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}) = 0$  i w konsekwencji  $\mathcal{E}(\mathbf{y}_{ft}) = 0$ . Ponieważ szum  $\mathbf{n}_{ft}$ , modelowany przez (7.5), jest o zerowej średniej i nieskorelowany z  $\mathbf{x}_{ft}$ , więc

$$\begin{aligned}\Sigma_{ft}^{(yx)} &= \mathcal{E}((\mathbf{y}_{ft} - \mathcal{E}(\mathbf{y}_{ft}))(\mathbf{x}_{ft} - \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}))^H) \\ &= \mathcal{E}((\mathbf{A}_f \mathbf{x}_{ft} + \mathbf{n}_{ft})\mathbf{x}_{ft}^H) = \mathbf{A}_f \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}\mathbf{x}_{ft}^H) + \mathcal{E}(\mathbf{n}_{ft}\mathbf{x}_{ft}^H) \\ &= \mathbf{A}_f \Sigma_{ft}^{(x)}.\end{aligned}\quad (7.24)$$

Po wstawieniu (7.24) oraz  $\Sigma_{ft}^{(xy)} = (\Sigma_{ft}^{(yx)})^H = \Sigma_{ft}^{(x)} \mathbf{A}_f^H$  do (7.22) i (7.23) uzyskuje się odpowiednie estymatory aposterioryczne:

$$\hat{\mathbf{x}}_{ft} = \Sigma_{ft}^{(x)} \mathbf{A}_f^H (\mathbf{A}_f \Sigma_{ft}^{(x)} \mathbf{A}_f^H + \Sigma_n)^{-1} \mathbf{y}_{ft}, \quad (7.25)$$

$$\hat{\Sigma}_{ft}^{(x)} = \Sigma_{ft}^{(x)} - \Sigma_{ft}^{(x)} \mathbf{A}_f^H (\mathbf{A}_f \Sigma_{ft}^{(x)} \mathbf{A}_f^H + \Sigma_n)^{-1} \mathbf{A}_f \Sigma_{ft}^{(x)}. \quad (7.26)$$

Analizując w podobny sposób rozkład  $P(\mathbf{c}_{ft}|\mathbf{y}_{ft})$ , uzyskuje się:  $P(\mathbf{c}_{ft}|\mathbf{y}_{ft}) = \mathcal{N}_c(\mathbf{c}_{ft}; \hat{\mathbf{c}}_{ft}, \hat{\Sigma}_{ft}^{(c)})$ . W rezultacie, formuła aktualizacji dla komponentów ukrytych ma postać:

$$\hat{\mathbf{c}}_{ft} = \Sigma_{ft}^{(c)} \bar{\mathbf{A}}_f^H (\bar{\mathbf{A}}_f \Sigma_{ft}^{(c)} \bar{\mathbf{A}}_f^H + \Sigma_n)^{-1} \mathbf{y}_{ft}, \quad (7.27)$$

$$\hat{\Sigma}_{ft}^{(c)} = \Sigma_{ft}^{(c)} - \Sigma_{ft}^{(c)} \bar{\mathbf{A}}_f^H (\bar{\mathbf{A}}_f \Sigma_{ft}^{(c)} \bar{\mathbf{A}}_f^H + \Sigma_n)^{-1} \bar{\mathbf{A}}_f \Sigma_{ft}^{(c)}. \quad (7.28)$$

Z kolei, z warunkowych wartości oczekiwanych statystyki wystarczającej wynikają estymatory macierzy korelacji w (7.19):

$$\hat{\mathbf{R}}_f^{(yy)} = \mathbf{R}_f^{(yy)}, \quad \hat{\mathbf{R}}_f^{(yx)} = \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{y}_{ft} \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}^H) = \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{y}_{ft} \hat{\mathbf{x}}_{ft}^H, \quad (7.29)$$

$$\hat{\mathbf{R}}_f^{(xx)} = \frac{1}{T} \sum_t \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}) \mathcal{E}(\mathbf{x}_{ft}^H) + \hat{\Sigma}_{ft}^{(x)} = \frac{1}{T} \sum_t \hat{\mathbf{x}}_{ft} \hat{\mathbf{x}}_{ft}^H + \hat{\Sigma}_{ft}^{(x)}, \quad (7.30)$$

$$|c_{rft}|^2 \leftarrow \mathcal{E}(c_{rft}) \mathcal{E}(c_{rft}^H) + (\hat{\Sigma}_{ft}^{(c)})_{rr} = |\hat{c}_{rft}|^2 + (\hat{\Sigma}_{ft}^{(c)})_{rr}. \quad (7.31)$$

W kroku M estymowane są parametry, które maksymalizują prawdopodobieństwo *a posteriori* w (7.13). Z warunku stacjonarności  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}_f} \ln P(\mathcal{Y}, \mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{A}, \Sigma_n) = 2T(-\Sigma_n^{-1} \mathbf{R}_f^{(yx)} + \Sigma_n^{-1} \mathbf{A}_f \mathbf{R}_f^{(xx)}) = \mathbf{0}$  uzyskuje się:  $\mathbf{A}_f = \hat{\mathbf{R}}_f^{(yx)} (\hat{\mathbf{R}}_f^{(xx)})^{-1}$ . Z kolei warunek

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma_n^{-1}} \ln P(\mathcal{Y}, \mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{A}, \Sigma_n) = \mathbf{0},$$

prowadzi do estymatora

$$\Sigma_n = \text{diag} \left\{ \mathbf{R}_f^{(yy)} - \mathbf{A}_f (\hat{\mathbf{R}}_f^{(yx)})^H - \hat{\mathbf{R}}_f^{(yx)} \mathbf{A}_f^H + \mathbf{A}_f \hat{\mathbf{R}}_f^{(xx)} \mathbf{A}_f^H \right\}.$$

Następnie, z warunku  $\frac{\partial}{\partial w_{fr}} \ln P(\mathcal{Y}, \mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{A}, \Sigma_n) = 0$ , otrzymuje się:

$$w_{fr} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \frac{|c_{rft}|^2}{h_{rt}} - \alpha_W \nabla_{w_{fr}} U(\mathbf{W}). \quad (7.32)$$

Analogicznie, warunek  $\frac{\partial}{\partial h_{rt}} \ln P(\mathcal{Y}, \mathcal{C}, \mathbf{W}, \mathbf{H} | \mathcal{A}, \Sigma_n) = 0$  prowadzi do reguły aktualizacji:

$$h_{rt} = \frac{1}{F} \sum_{f=1}^F \frac{|c_{rft}|^2}{w_{fr}} - \alpha_H \nabla_{h_{rt}} U(\mathbf{H}), \quad (7.33)$$

gdzie  $U(\mathbf{W})$  i  $U(\mathbf{H})$  są odpowiednio funkcjami  $U_A(\mathbf{W})$  i  $U_X(\mathbf{H})$  w (3.67) i (3.68).

Podany algorytm badany był w różnych pracach [331, 483, 493] w kontekście ślepej separacji sygnałów akustycznych rejestrowanych stereofonicznie. Do badań wykorzystano dane testowe pochodzące z kampanii SiSEC2008<sup>2</sup>. Są to stereofoniczne sygnały akustyczne, zmieszane syntetycznie i wygenerowane zarówno dla modelu mieszania jednoczesnego, jak i splotowego. Badano cztery grupy sygnałów źródłowych: mowa trzech mężczyzn (grupa **male3**), mowa trzech kobiet (grupa **female3**), muzyka generowana przez trzy nieperkusyjne instrumenty muzyczne (grupa **nodrums**), muzyka generowana przez dwie gitary i jeden instrument perkusyjny (grupa **wdrums**). Analizowano nagrania dziesięciosekundowe, próbkowane z częstotliwością 16 kHz. Ponieważ w każdym testowanym przypadku liczba sygnałów źródłowych jest większa niż liczba sygnałów rejestrowanych, model mieszania sygnałów źródłowych jest podokreślony. Macierz mieszająca generowana była z rozkładu równomiernego. Dla modelu splotowego przyjęto, że czas pogłosu w pomieszczeniu rejestrującym dźwięk wynosi 250 ms, a odstęp pomiędzy mikrofonami dookólnymi wynosi jeden metr.

Przekształcenie sygnałów obserwowanych z dziedziny czasu do dziedziny czasowo-częstotliwościowej zrealizowano za pomocą krótkoczasowej dyskretnej transformaty Fouriera. Długość okna czasowego wynosiła 1024 i 2048 próbek, odpowiednio dla sygnałów zmieszanych jednocześnie i splotowo. Macierze  $\{\mathbf{W}, \mathbf{H}, \boldsymbol{\Sigma}_n\}$  oraz tensor  $\mathcal{A}$  inicjalizowano zgodnie z zasadami podanymi w pracy [336]. Każdy eksperyment powtarzano 100-krotnie dla różnych przybliżeń początkowych. Proces iteracyjnych aktualizacji zatrzymywany był po wykonaniu 1500 iteracji.

Parametry regularyzacji  $\alpha_W$  i  $\alpha_H$  dobierano według zasady:

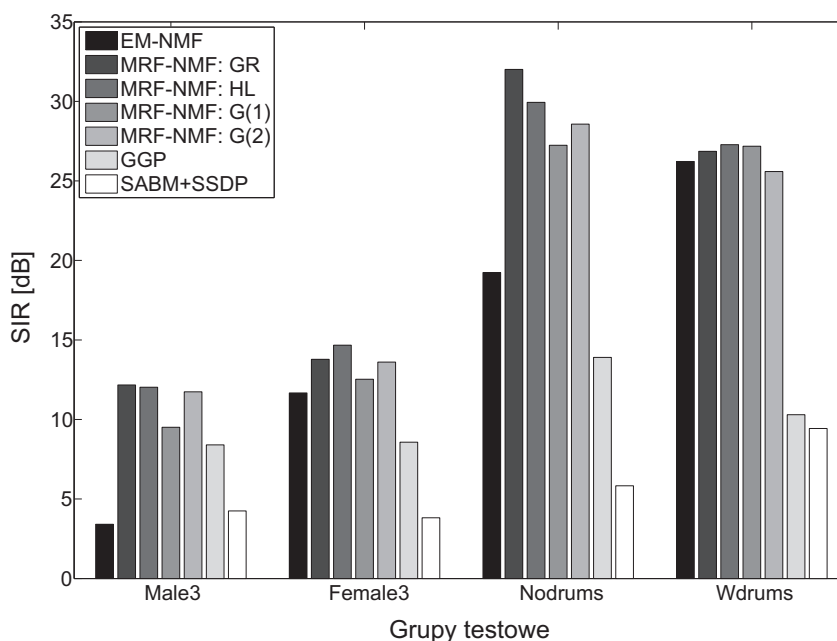
$$\alpha_k = \begin{cases} \alpha, & \text{jeżeli } k > k_1, \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (7.34)$$

gdzie  $k$  – numer kroku iteracyjnego.

Zgodnie z [493],  $k_1 = \frac{k_{\max}}{2}$ , gdzie  $k_{\max}$  jest maksymalną liczbą iteracji, czyli  $k_1 = 750$ . Parametr  $\alpha$  szacowano eksperymentalnie.

Na rysunku 7.3 przedstawiono uśrednione wartości współczynników *SIR* w badanych grupach dla oceny jakości estymacji sygnałów źródłowych w modelu mieszania jednoczesnego. Estymacji dokonano następującymi algorytmami: GGP [442], SABM+SSDP [459], EM-NMF [336] oraz MRF-NMF [493] z funkcjami potencjału: Greena (GR) [157], Heberta i Leahiego (HL) [182] oraz gaussowskimi G(1) i G(2). Funkcja G(1) oznacza, że model MRF uwzględniał tylko interak-

<sup>2</sup> <http://sisec2008.wiki.irisa.fr>



Rys. 7.3. Uśrednione wartości współczynników  $SIR$  sygnałów źródłowych, estymowanych następującymi algorytmami: EM-NMF [336], MRF-NMF [493] z różnymi funkcjami potencjału (GR, HL, G(1) i G(2)), GGP [442] i SABM+SSDP [459]

cje pierwszego rzędu. Dla funkcji G(2) interakcje między pikselami były zarówno pierwszego, jak i drugiego rzędu.

Stosując algorytmy GGP i SABM+SSDP, czas estymacji wynosił odpowiednio 5 i 2 sekundy. Algorytm EM-NMF jest znacznie wolniejszy, wykonanie bowiem 1500 iteracji trwało aż 2456 sekund dla modelu mieszania jednoczesnego. Zastosowanie funkcji wygładzających do algorytmu EM-NMF nieznacznie zwiększyło czas obliczeniowy.

W pracy [493] pokazano efekty estymacji sygnałów źródłowych w modelu mieszania splotowego. Niestety algorytmami MRF-NMF nie udało się uzyskać zadowalającego wyniku dla tego modelu. Dla wszystkich przypadków testowych  $SIR < 2,5$  dB. Spośród testowanych algorytmów splotowych, tylko splotowy NMF, zaproponowany przez Smaragdisa [406], umożliwia uzyskanie dla grupy *wdrums* estymacji o współczynniku  $SIR > 8$  [dB].

**Wniosek 7.2.** Zastosowanie funkcji wygładzających do algorytmu EM-NMF poprawia jakość estymowanych sygnałów, jeśli ich spektrogramy zawierają profile lo-

kalnie gładkie. Tak jest w przypadku zbioru testowego `nodrums`. Jeśli w sygnałach akustycznych pojawiają się dźwięki instrumentów perkusyjnych lub szarpanych (grupa `wdrums`), to stosowanie tych funkcji nieznacznie poprawia estymowane sygnały, a nawet może pogorszyć wyniki estymacji, gdy najbliższe sąsiedztwo próbek wygładzanych jest zbyt duże.

## 7.2. Grupowanie danych

Grupowanie danych (ang. *clustering*) ma na celu przyporządkowanie wektorów danych, obiektów lub wzorców do grup o podobnych cechach. Grupowanie może być zasadniczo podzielone na hierarchiczne i podziałowe [206]. W hierarchicznym grupowaniu wykonywana jest zagnieżdżona seria podziałów o zmiennym poziomie podobieństwa cech. Grupowanie podziałowe jednocześnie dzieli zbiór danych na grupy według założonego kryterium optymalizacji. Jest stosowane w grupowaniu dużych zbiorów danych ze względu na niski koszt obliczeniowy w porównaniu do grupowania hierarchicznego.

Wiele jest algorytmów grupowania podziałowego. Metoda  $k$ -średnich (ang. *k-means*) jest prawdopodobnie najpopularniejsza [238, 244]. Niemniej jednak, w ostatnich kilku latach można zauważyć rosnącą popularność metody NMF w tego rodzaju grupowaniu [18, 19, 45–47, 49, 113, 181, 198, 268, 346, 395, 447, 461].

Niech kolumny macierzy  $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T] \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  są wektorami danych, które należy podzielić na  $J$  grup. Stosując NMF do macierzy  $\mathbf{Y}$  uzyskuje się nieujemne macierze  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  i  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . Kolumny macierzy  $\mathbf{A}$  są wektorami centroidów (centralne punkty skupień), a macierz  $\mathbf{X}$  zawiera informacje o przynależności wektorów obserwacji do poszczególnych skupień. Jeśli kolumny macierzy  $\mathbf{Y}$  i  $\mathbf{X}$  przeskalowane są do jednostkowych norm  $l_1$ , wówczas  $x_{jt}$  określa prawdopodobieństwo przynależności  $t$ -tego wektora danych do  $j$ -tej grupy. Jeśli każdy element zbioru obserwacji przyporządkowany jest tylko do jednego skupienia,  $\mathbf{X}$  jest macierzą binarną.

### 7.2.1. Grupowanie twarde

W grupowaniu twardym zakłada się, że każdy element zbioru danych przyporządkowany jest tylko do jednej grupy. Ten rodzaj grupowania najczęściej stosuje

się do analizy skupień rozłącznych. Podany przykład nawiązuje do takiego rodzaju grupowania.

**Przykład 7.1.** Niech

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 3,1 & 2,7 & 3,3 & 2,9 & 1,1 & 0,7 & 1,2 \\ 0,8 & 1,2 & 0,9 & 1,1 & 1,7 & 2,1 & 2,2 \end{bmatrix}. \quad (7.35)$$

Łatwo zauważyć, że pierwsze 4 kolumny należą do jednej grupy, a pozostałe kolumny do drugiej grupy, zatem  $\mathbf{X}$  przybiera następującą postać:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (7.36)$$

Obliczając macierz  $\mathbf{A}$  z zależności  $\mathbf{A} = \mathbf{Y}\mathbf{X}^+$ , gdzie  $\mathbf{X}^+$  jest macierzą pseudoodwrotną do macierzy  $\mathbf{X}$ , uzyskuje się:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (7.37)$$

Wektor kolumnowy  $\mathbf{a}_1$  jest zatem średnią algebraiczną pierwszych czterech kolumn macierzy  $\mathbf{Y}$ , a  $\mathbf{a}_2$  – średnią algebraiczną pozostałych kolumn tej macierzy. Dlatego też, kolumny macierzy  $\mathbf{A}$  mogą być interpretowane jako wektory centralnych punktów skupień.

Grupowanie twarde można realizować różnymi algorytmami NMF. W pracy [478] zaproponowano tzw. półbinarny NMF (ang. *Semi-binary NMF*), w którym zakłada się binarność macierzy  $\mathbf{X}$ . W dalszych rozważaniach metoda ta będzie oznaczana skrótowcem SB-NMF. W tym podejściu zdefiniowano następującą funkcję celu:

$$\Psi(\mathbf{x}_t) = \sum_{i=1}^I \psi([\mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t]_i, \delta), \quad (7.38)$$

gdzie  $\psi(\xi, \delta) = \delta^2 \ln \cosh\left(\frac{\xi}{\delta}\right)$  jest funkcją logistyczną, znaną też jako funkcja potencjału Greena (tabela 3.1) [157]. W bayesowskiej rekonstrukcji obrazów wykorzystywana jest do oceny lokalnej gładkości obrazów zawierających obiekty o wyrazistych krawędziach. Dla  $\delta \geq 1$ ,  $\psi(\xi, \delta)$  modeluje funkcję kwadratową,

a dla  $\delta < 1$ , aproksymuje normę  $l_1$ . Ma jednak tę istotną zaletę w stosunku do normy  $l_1$ , że jest to funkcja wypukła klasy  $C^\infty$ .

Generalnie  $\psi(\xi, \delta)$  może mieć różne formy, w zależności od rozkładu elementów wektorów błędu residualnego:  $\mathbf{r}_t = \mathbf{y}_t - \mathbf{A}\mathbf{x}_t$  (rozd. 2). W celu estymacji rozwiązania binarnego  $\mathbf{x}_t$ , przyjęto podejście statystyczne, oparte na maksymalizacji statystyki Gibbsa–Boltzmana:

$$P_\Psi(\mathbf{x}_t) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{x}_t)\right\}}{\sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \exp\left\{-\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{x}_t)\right\}}, \quad (7.39)$$

skojarzonej z funkcją celu  $\Psi(\mathbf{x}_t)$  w (7.38). Maksymalizacja tej statystyki realizowana jest w procesie iteracyjnych aktualizacji, gdzie szybkość zbieżności do globalnego maksimum funkcji  $P_\Psi(\mathbf{x}_t)$  regulowana jest parametrem temperatury  $T_n$ . Takie podejście zaczerpnięto z metod rekonstrukcji obrazu w tomografii dyskretnej [358, 480, 482, 516] i bazuje na następującym twierdzeniu:

**Twierdzenie 7.1.** *Jeśli  $\mathbf{x}_t^*$  jest punktem globalnego maksimum rozkładu Gibbsa–Boltzmana w (7.39), to*

$$\lim_{T_n \rightarrow 0} \langle \mathbf{x}_t \rangle_{P_\Psi} \rightarrow \mathbf{x}_t^*, \quad (7.40)$$

gdzie  $\langle \cdot \rangle_{P_\Psi}$  oznacza wartość oczekiwaną względem funkcji gęstości prawdopodobieństwa rozkładu  $P_\Psi$ .

**Dowód 7.1.** *Jeśli  $\forall \mathbf{x}_t \neq \mathbf{x}_t^* : \Psi(\mathbf{x}_t) \geq \Psi(\mathbf{x}_t^*)$ , to:*

$$\begin{aligned} \lim_{T_n \rightarrow 0} \langle \mathbf{x}_t \rangle_{P_\Psi} &= \lim_{T_n \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \mathbf{x}_t \frac{\exp\left\{-\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{x}_t)\right\}}{\sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \exp\left\{-\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{x}_t)\right\}} \\ &= \lim_{T_n \rightarrow 0} \frac{\sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \mathbf{x}_t \exp\left\{\frac{1}{T_n} (\Psi(\mathbf{x}_t^*) - \Psi(\mathbf{x}_t))\right\}}{\sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \exp\left\{\frac{1}{T_n} (\Psi(\mathbf{x}_t^*) - \Psi(\mathbf{x}_t))\right\}} \\ &= \lim_{T_n \rightarrow 0} \frac{\sum_{\mathbf{x}_t \neq \mathbf{x}_t^*} \mathbf{x}_t \exp\left\{\frac{1}{T_n} (\Psi(\mathbf{x}_t^*) - \Psi(\mathbf{x}_t))\right\} + \mathbf{x}_t^*}{\sum_{\mathbf{x}_t \neq \mathbf{x}_t^*} \exp\left\{\frac{1}{T_n} (\Psi(\mathbf{x}_t^*) - \Psi(\mathbf{x}_t))\right\} + 1} \rightarrow \mathbf{x}_t^*. \end{aligned}$$

Ponieważ każdy wektor  $\mathbf{x}_t$  jest w postaci kanonicznej (zawiera tylko jeden element niezerowy o jednostkowej wartości), mianownik funkcji (7.39) dla każdego  $\mathbf{y}_t$  można uprościć do postaci:



$$\begin{aligned}
D_t^\Psi &= \sum_{\mathbf{x}_t \in \{0,1\}^J} \exp \left\{ -\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{x}_t) \right\} = \left[ \exp \left\{ -\frac{1}{T_n} \Psi(\mathbf{I}_J) \right\} \right] \mathbf{1}_J \\
&= \left[ \exp \left\{ -\frac{1}{T_n} \sum_{i=1}^I \psi([\mathbf{y}_t \mathbf{1}_J^T - \mathbf{A}]_i, \delta) \right\} \right] \mathbf{1}_J, \tag{7.41}
\end{aligned}$$

gdzie  $\mathbf{I}_J \in \mathbb{R}^{J \times J}$  – macierz jednostkowa.

Znając dzielniki  $\{D_t^\Psi\}$ , rozkład Gibbsa–Boltzmana można łatwo obliczyć. Dla  $P_\Psi(\mathbf{I}_J)$  uzyskuje się  $J$  liczb rzeczywistych w przedziale  $[0, 1]$ . Zgodnie z twierdzeniem 7.1:

$$\lim_{T_n \rightarrow 0} P_\Psi(\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_t^*) \rightarrow 1 \quad \text{oraz} \quad \lim_{T_n \rightarrow 0} P_\Psi(\mathbf{x}_t \neq \mathbf{x}_t^*) \rightarrow 0,$$

a zatem dokładnie jeden wektor kolumnowy macierzy  $\mathbf{I}_J$  prowadzi do rozwiązania  $\mathbf{x}_t^*$ .

Ponieważ macierz  $\mathbf{A}$  aktualizowana jest iteracyjnie w procesie naprzemiennych optymalizacji, więc aktualizacja macierzy  $\mathbf{X}$  powinna również podążać stopniowo w kierunku rozwiązania binarnego. Szybkość zbieżności zależy od parametru  $T_n$ . Aby jednak unikać zatrzymywania procesu aktualizacji czynników w nieoptymalnych lokalnych minimach funkcji celu (niewypukłej względem minimalizacji naprzemiennych), temperatura  $T_n$  powinna mieć dość duże wartości początkowe. Następnie, powinna się stopniowo i dość łagodnie zmniejszać w procesie naprzemiennych iteracji. Zgodnie z twierdzeniem 7.1, rozwiązanie binarne uzyskuje się dla  $T_n \rightarrow 0$ . Przyjmując aktualizację według reguły  $\mathbf{X} \leftarrow \langle \mathbf{X} \rangle_{P_\Psi}$ , zerowe wartości w aktualizowanej macierzy  $\mathbf{X}$  mogłyby się pojawić już w pierwszych iteracjach naprzemiennych. Aby jednak unikać takiego przypadku, w pracy [478] przyjęto następującą regułę aktualizacji:

$$\forall t : \mathbf{x}_t \leftarrow (D_t^\Psi)^{-1} \exp \left\{ -\frac{1}{T_n} \sum_{i=1}^I \psi([\mathbf{y}_t \mathbf{1}_J^T - \mathbf{A}]_i, \delta) \right\}. \tag{7.42}$$

Takie podejście uzasadnione jest obserwacją:  $P_\Psi(\mathbf{I}_J) \in [0, 1]^J$  oraz  $\lim_{T_n \rightarrow 0} P_\Psi(\mathbf{I}_J) \in \{0, 1\}^J$ .

Dla równoległego przetwarzania wszystkich wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{Y}$ , wyrażenie  $\psi(\cdot, \delta)$  w (7.42) można zapisać następująco:

$$\Psi = \psi(\mathbf{Y} \otimes \mathbf{1}_J^T - \mathbf{1}_J^T \otimes \mathbf{A}) \in \mathbb{R}^{J \times JT}. \tag{7.43}$$

Po uwzględnieniu macierzy (7.43) finalna reguła aktualizacji macierzy  $\mathbf{X}$  ma postać:

$$\mathbf{X} \leftarrow \tilde{\mathbf{R}} \otimes (\mathbf{1}_J \otimes \mathbf{1}_J^T \tilde{\mathbf{R}}), \quad (7.44)$$

gdzie

$$\tilde{\mathbf{R}} = \text{mtx} \left( \exp \left\{ -\frac{\mathbf{1}_J^T \Psi}{T_n} \right\}, J, T \right).$$

Aby aktualizacje (7.44) prowadziły do aproksymacji binarnej, temperaturę  $T_n$  dobierano zgodnie z zasadą symulowanego wyżarzania. Podobnie jak w (4.146) przyjęto następującą regułę eksponencjalną:

$$T_n = \bar{T} + T_0 \exp \{-\tau n\}, \quad (7.45)$$

gdzie  $\bar{T} > 0$  – minimalna temperatura progowa,  $T_0 > 0$  – temperatura początkowa,  $0 < \tau < 1$  – parametr szybkości zmiany temperatury,  $n$  – numer kroku iteracji naprzemiennych.

W pracy [478] aktualizacje macierzy  $\mathbf{A}$  są realizowane projekcyjnym algorytmem Newtona.

W celu oszacowania efektywności grupowania zamieszczono wyniki wybranych testów numerycznych. Grupowaniu poddano zbiór próbek, wygenerowanych z mieszaniny trzech rozkładów gaussowskich, zatem  $\mathbf{Y} = [\mathbf{Y}^{(1)} \quad \mathbf{Y}^{(2)} \quad \mathbf{Y}^{(3)}]$ , gdzie  $\mathbf{Y}^{(r)} = [\mathbf{y}_t^{(r)}] \in \mathbb{R}_+^{I \times T_r}$  oraz  $\mathbf{y}_t^{(r)} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_r, \boldsymbol{\Sigma}_r)$  dla  $r = 1, \dots, R$ . Przyjęto:  $I = R = 3$  oraz

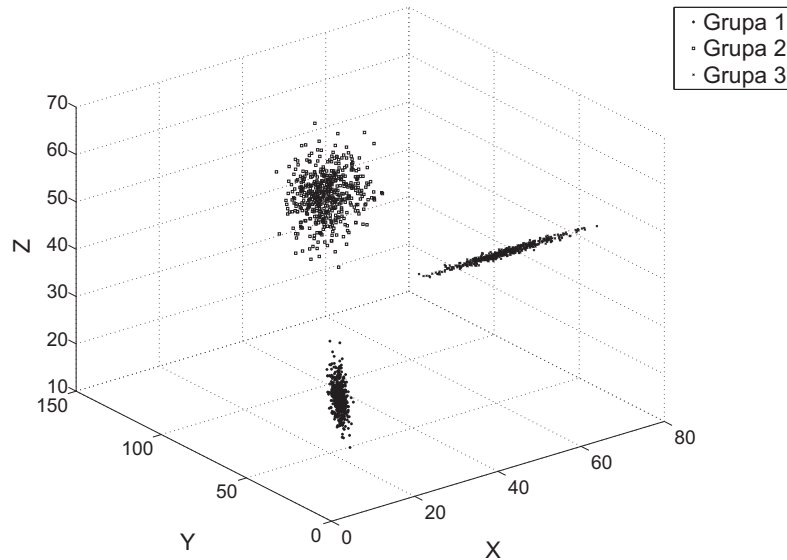
$$\boldsymbol{\mu}_1 = [10 \quad 20 \quad 30]^T, \quad \boldsymbol{\mu}_2 = [40 \quad 100 \quad 50]^T, \quad \boldsymbol{\mu}_3 = [50 \quad 20 \quad 50]^T,$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1 & 0,3 \\ 0 & 0,3 & 10 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_2 = \sigma_2^2 \mathbf{I}_3, \quad \boldsymbol{\Sigma}_3 = \text{diag}([50 \quad 1 \quad 0,1]).$$

Łatwo zauważyć, że każda z macierzy  $\boldsymbol{\Sigma}_r$  jest dodatnio określona. Przeprowadzono cztery testy z następującymi parametrami:

- *test 1*:  $T_1 = T_2 = T_3 = 5$ ,  $\sigma_2^2 = 20$ ,
- *test 2*:  $T_1 = T_2 = T_3 = 500$ ,  $\sigma_2^2 = 20$ ,
- *test 3*:  $T_1 = 5$ ,  $T_2 = 500$ ,  $T_3 = 10$ ,  $\sigma_2^2 = 20$ ,
- *test 4*:  $T_1 = 50$ ,  $T_2 = 500$ ,  $T_3 = 50$ ,  $\sigma_2^2 = 40$ .

Rozkład próbek w przestrzeni  $\mathbb{R}_+^3$  z testu 2 zilustrowano na rysunku 7.4. Badania przeprowadzono następującymi metodami: SB-NMF, HALS (algorytm 10), UO-NMF (półortogonalny NMF [113]),  $k$ -średnich dla odległości



Rys. 7.4. Przestrzenny rozkład próbek z Testu 2

euklidesowej (E) oraz miary kosinusowej (C). Jakość grupowania oceniano za pomocą miary *Purity*, wyrażonej przez współczynnik  $P$ :

$$P = \frac{100}{T} \sum_{j=1}^J \max_{1 \leq n \leq J} l_{jn}, \quad (7.46)$$

gdzie  $l_{jn}$  – liczba elementów, które jednocześnie należą do  $n$ -tej oryginalnej kategorii i  $j$ -tej grupy. Jest to miara określająca tzw. czystość grupowania lub dokładność grupowania. Jeśli  $P = 100$ , grupowanie jest idealne.

W tabeli 7.2 zamieszczono uśrednione współczynniki  $P$  uzyskane do oceny jakości grupowania ze 100 prób. W każdej próbie początkowa macierz  $\mathbf{A}^{(0)}$  w metodach NMF generowana była z rozkładu równomiernego.

**Wniosek 7.3.** Z tabeli 7.2 wynika, że algorytm SB-NMF pozwala uzyskać najlepsze efekty grupowania, jeśli obserwowane dane zawierają skupienia rozłączne. Metodę tę można stosować do grupowania zarówno rzadkich, jak i bardzo gęstych skupień oraz gdy występuje duża różnica w liczebności skupień. Niestety, metoda ta ma też wiele ograniczeń. Mianowicie, dane obserwowane muszą być nieujemne, liczba skupień nie może być większa niż wymiar wektorów  $\{\mathbf{y}_t\}$ , tzn.  $J \leq I$ , a także skupienia muszą być rozłączne. Ten ostatni warunek oznacza,

Tabela 7.2. Uśrednione wartości współczynnika  $P$  dla różnych testów i algorytmów.  
W nawiasach podano liczbę prób, w których uzyskano  $P = 100$

Algorytm	Test 1	Test 2	Test 3	Test 4
SB-NMF	100 (100)	100 (100)	99,80 (99)	99,51 (96)
HALS	96,67 (71)	95,17 (14)	95,92 (42)	95,37 (33)
UO-NMF	95,67 (65)	92,47 (4)	61,93 (0)	69,85 (0)
$k$ -średnich (C)	95,76 (58)	95,09 (67)	53,72 (1)	77,93 (44)
$k$ -średnich (E)	98,98 (72)	96,1 (75)	53,59 (0)	66,77 (16)

że skupienia danych obserwowanych w otoczce wypukłej  $\mathcal{H}(\mathfrak{V})$  nie mogą mieć części wspólnych. W przypadku skupień mających części wspólne, efektywność grupowania tą metodą zmniejsza się znacząco. W takim przypadku, lepiej jest zastosować algorytm HALS bez dodatkowych członów kary. Ogólnie, jeśli grupowane dane są nieujemne, metody NMF pozwalają uzyskać lepsze wyniki grupowania niż powszechnie stosowane metody  $k$ -średnich.

### 7.2.2. Grupowanie probabilistyczne

Zass i Shashua [475] wykazali, że jądrowa metoda  $k$ -średnich (ang. *kernel  $k$ -means*), metoda znormalizowanych ciec (ang. *normalized cuts*) oraz spektralna analiza skupień (ang. *spectral clustering*) mogą być wyrażone w kontekście zadania symetrycznej i nieujemnej faktoryzacji macierzy podwójnie stochastycznej. Jednak ze względu na inne podejście numeryczne wyniki stosowania wspomnianych technik grupowania danych mogą nie być równoważne. Niezależnie, Ding i pozostali współautorzy prac [109, 112] doszli do podobnych wniosków. Grupowanie za pomocą metody NMF można też interpretować jako metodę rozmytego grupowania  $k$ -średnich (ang. *fuzzy  $k$ -means*).

Takie podejście do zagadnienia grupowania danych może być wykorzystane zarówno w grupowaniu twardym, jak i miękkim. W tym ostatnim, poszukiwana jest macierz prawdopodobieństwa przynależności elementów zbioru obserwacji do poszczególnych skupień, a zatem dopuszcza się, że skupienia częściowo nachodzą na siebie. Taki rodzaj grupowania nazwano grupowaniem probabilistycznym [475].

Niech  $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T] \in \mathbb{R}^{I \times T}$  jest macierzą wektorów obserwacji (niekoniecznie nieujemnych), które należy przyporządkować do  $J$  grup (niekoniecznie rozłącznych). W grupowaniu probabilistycznym poszukuje się macierzy prawdopodobieństwa  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ , gdzie  $x_{jt}$  jest prawdopodobieństwem przynależności wektora  $\mathbf{y}_t$  do  $j$ -tej grupy, gdzie  $t = 1, \dots, T$  oraz  $j = 1, \dots, J$ . Jeśli każda próbka  $\mathbf{y}_t$

należy do co najmniej jednej grupy, to  $\mathbf{X}^T \mathbf{1}_J = \mathbf{1}_T$ . Ponieważ  $\forall j, t: 0 \leq x_{jt} \leq 1$ , więc  $\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$  jest nieujemną macierzą symetryczną i podwójnie stochastyczną, tzn.  $\tilde{\mathbf{V}} \mathbf{1}_T = \mathbf{1}_T$  oraz  $\mathbf{1}_T^T \tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{1}_T^T$ . Wynika stąd, że nieznaną macierz  $\mathbf{X}$  może być estymowana na podstawie macierzy  $\tilde{\mathbf{V}}$ , stosując symetryczny model NMF (omawiany w rozdz. 5.1). Z kolei, podwójnie stochastyczną macierz  $\tilde{\mathbf{V}}$  można otrzymać z macierzy podobieństw  $\mathbf{V} = [v_{st}] \in \mathbb{R}_+^{T \times T}$ , generowanej podobnie jak w spektralnej analizie skupień. Elementy tej macierzy wyznaczone są przez pewną funkcję jądra, która modeluje relacje geometryczne między dowolnymi parami obserwowanych elementów. Jądro przekształcenia może być wyrażone przez różne funkcje. Przykładowo, dla jądra gaussowskiego (rozdz. 3.2.5):

$$v_{st} = \kappa(\mathbf{y}_s, \mathbf{y}_t) = \exp \left\{ -\frac{d_{st}^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (7.47)$$

gdzie  $d_{st} = \|\mathbf{y}_s - \mathbf{y}_t\|_2$ , a  $\sigma^2$  jest wariancją odległości elementów, dobieraną parametrycznie.

Przekształcenie  $\mathcal{V}: \mathbf{V} \rightarrow \tilde{\mathbf{V}}$  można realizować przez, np. iteracyjną normalizację [475, 476]. Zass i Shashua [475, 476] pokazali, że następujący proces iteracyjny jest zbieżny do macierzy podwójnie stochastycznej. Przyjmując  $\tilde{\mathbf{V}}^{(0)} = \mathbf{V}$ , dla  $k = 0, 1, 2, \dots$ :

$$\tilde{\mathbf{V}}^{(k+1)} = (\mathbf{D}^{(k)})^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{V}}^{(k)} (\mathbf{D}^{(k)})^{-\frac{1}{2}}, \quad \text{gdzie } \mathbf{D}^{(k)} = \text{diag} \left( \tilde{\mathbf{V}}^{(k)} \mathbf{1}_T \right). \quad (7.48)$$

Jeśli grupowaniu podlegają obrazy, współczynniki  $d_{st}$  w (7.47) mogą być wyznaczone przez odległości euklidesowe między zwektoryzowanymi obrazami  $\mathbf{y}_s = \text{vec}(\mathbf{Y}^{(s)})$  i  $\mathbf{y}_t = \text{vec}(\mathbf{Y}^{(t)})$  lub między obrazami odpowiednio przefiltrowanymi. Niech  $\mathcal{F}(\mathbf{Y})$  oznacza obraz poddany filtracji (przekształceniu)  $\mathcal{F}$ , zatem:  $\mathbf{y}_s = \text{vec}(\mathcal{F}(\mathbf{Y}^{(s)}))$  oraz  $\mathbf{y}_t = \text{vec}(\mathcal{F}(\mathbf{Y}^{(t)}))$ . Do filtracji można zastosować różne filtry (lub transformacje), w zależności od przetwarzanych obrazów. Przykładowo, w celu ekstrakcji cech konturów analizowanych obiektów można zastosować filtry górnoprzepustowe, np.  $\mathcal{F}(\mathbf{Y}) = \nabla \mathbf{Y}$ . Do ekstrakcji pewnych cech obrazów twarzy użyteczne mogą okazać się filtr Gabora, transformata falkowa lub inne narzędzia przetwarzania obrazów [372].

### 7.2.3. Grupowanie dokumentów tekstowych

Model NMF może być stosowany zarówno do grupowania twardego (gdy skupienia są rozłączne), jak i miękkiego (gdy skupienia częściowo nachodzą na siebie).

Istotnym jednak warunkiem stosowania modelu NMF jest nieujemność macierzy obserwacji i jej odpowiednia rzadkość. W związku z tym, najczęściej bywa on stosowany w grupowaniu dokumentów tekstowych ze względu na charakter ich cech semantycznych.

Xu i pozostali współautorzy pracy [461] pokazali, że nieujemna faktoryzacja macierzy może realizować ekstrakcję cech semantycznych dokumentów tekstowych, a następnie pogrupować je ze względu na podobieństwo tych cech. Praca ta zaowocowała znacznym rozwojem tej tematyki. Obecnie wiele jest różnych podejść do zagadnienia grupowania dokumentów tekstowych za pomocą metody NMF.

W odróżnieniu od metody ukrytego indeksowania semantycznego (ang. LSI – *Latent Semantic Indexing*), wektory cech semantycznych z modelu NMF są nieujemne, rzadkie i mogą być częściowo skorelowane. Współczynniki liniowej kombinacji tych wektorów są również nieujemne, co oznacza addytywność kombinacji. Takie cechy semantyczne są łatwiejsze do interpretowania. Zakładając rząd faktoryzacji równy liczbie tematów, każdy wektor cechy semantycznej powinien reprezentować jeden z tematów. Dokument zatem może być reprezentowany przez addytywną kombinację wektorów cech semantycznych.

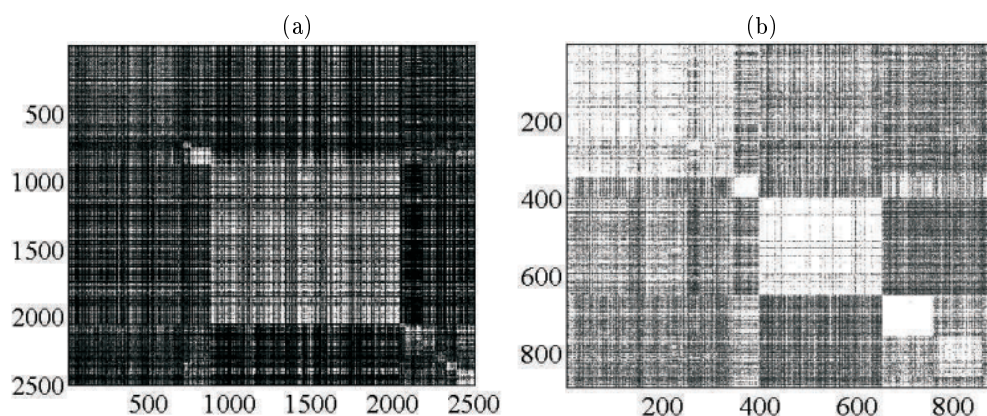
Stosując podejście zaproponowane w [461], dokumenty tekstowe, przeznaczone do grupowania, należy najpierw poddać odpowiedniemu przetwarzaniu przez analizator składniowy, tzw. parser. Usuwane są znaki przestankowe (kropki, przecinki itp.) oraz tekst zamieniany jest na strumień słów. Następnie kolekcja dokumentów reprezentowana jest przez tzw. macierz wyrażenie-dokument, którą oznaczono symbolem  $\mathbf{Y}$ . Każdy jej wiersz reprezentuje pojedyncze i znaczeniowe słowo występujące w analizowanej kolekcji dokumentów, zaś kolumny modelują profile słów w analizowanych dokumentach. Element  $y_{it}$  macierzy  $\mathbf{Y}$  jest definiowany według zależności:

$$y_{it} = t_{it} \log \left( \frac{T}{d_i} \right), \quad (7.49)$$

gdzie  $t_{it}$  – częstotliwość wystąpienia  $i$ -tego słowa w  $t$ -tym dokumencie,  $d_i$  – liczba dokumentów zawierających  $i$ -te słowo.

Następnie,  $\forall t : \mathbf{y}_t$  normalizowany jest do jednostkowej normy  $l_1$  lub  $l_2$ . Macierz  $\mathbf{Y}$  charakteryzuje się, oprócz nieujemności jej elementów, również dużą rzadkością, ponieważ każdy dokument zawiera jedynie niewielki podzbiór słów z tych, które występują w całej kolekcji dokumentów.

Ze względu na tak specyficzne właściwości macierzy  $\mathbf{Y}$ , algorytmy NMF znajdują liczne zastosowania w analizie dokumentów tekstowych. W niniejszej pracy przedstawiono przykładowe wyniki grupowania dokumentów tekstowych za po-

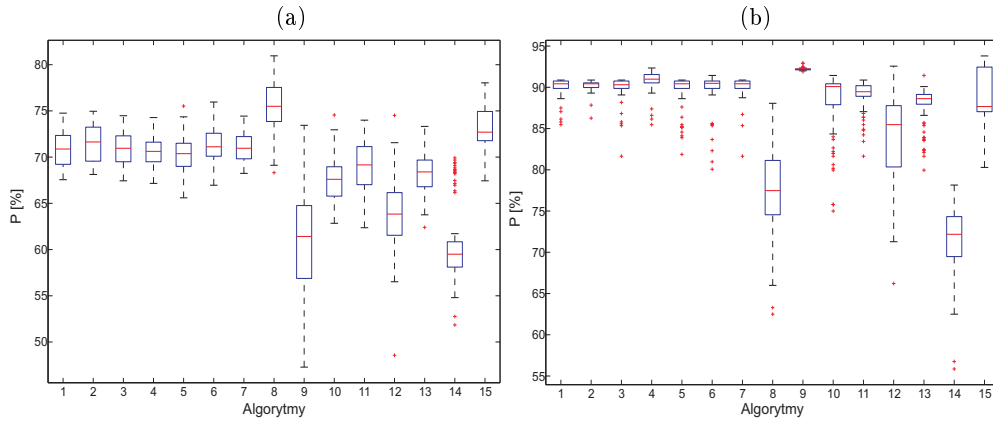


Rys. 7.5. Macierze korelacji dokumentów z bazy danych: (a) Reuters, (b) TopicPlanet

mocą algorytmów NMF. Wybrano kolekcje dokumentów z dwóch ogólnodostępnych baz danych: Reuters i TopicPlanet. Z pierwszej bazy danych wylosowano 2500 dokumentów o następujących tematach: *acq*, *coffee*, *crude*, *eran*, *gold*, *interest*, *money-fx*, *ship*, *sugar*, *trade*, zatem  $J = 10$ . Po przetworzeniu przez analizator składniowy uzyskano macierz  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{6191 \times 2500}$ . Z kolei, z bazy TopicPlanet wybrano 888 dokumentów, które przynależą do 6 tematów: *air-travel*, *broadband*, *cruises*, *domain-names*, *investments*, *technologies*. Dokumenty te po przetworzeniu dają 8190 słów znaczeniowych i w efekcie  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{8190 \times 888}$  oraz  $J = 6$ . Na rysunku 7.5 zilustrowano macierze korelacji dokumentów uporządkowanych według przynależności klasowej.

Do grupowania wykorzystano następujące algorytmy: MUE (rozdz. 4.4.1), projekcyjny ALS (rozdz. 4.5), HALS (algorytm 10), LPG (rozdz. 4.7.2) [280], OG (rozdz. 4.7.4), SPG (rozdz. 4.10.5), FC-NNLS (algorytm 13), TR-KL (algorytm 17 dla  $\beta = 0$ ), SB-NMF (rozdz. 7.2.1), UO-NMF(A) (półortogonalny NMF z ortogonalną macierzą  $\mathbf{A}$  [113]), UO-NMF(X) (półortogonalny NMF z ortogonalną macierzą  $\mathbf{X}$  [113]), BiO-NMF (dwuortogonalny NMF – Rozdz. 5.4.1), Cx-NMF (wypukły NMF – rozdz. 5.4.3),  $k$ -średnich (E) (metoda  $k$ -średnich dla funkcji odległości euklidesowej) oraz  $k$ -średnich (C) (metoda  $k$ -średnich dla miary kosinusowej).

Algorytm UO-NMF(A) zakłada ortogonalność cech semantycznych. Estymuje macierz  $\mathbf{A}$  według reguły (4.117), a macierz  $\mathbf{X}$  według odpowiedniej reguły w (4.68). Jeśli macierz  $\mathbf{A}$  estymowana jest według (4.68), a macierz  $\mathbf{X}$  za pomocą (4.116), uzyskuje się algorytm UO-NMF(X). Taki algorytm wymusza ortogonalne i nieujemne wektory liniowej kombinacji wektorów cech semantycznych.



Rys. 7.6. Statystyka rozkładu miary  $P$  dla baz danych: (a) *Reuters*, (b) *TopicPlanet*. Grupowanie dokumentów tekstowych przeprowadzono algorytmami: 1 – MUE, 2 – ALS, 3 – HALS, 4 – LPG, 5 – OG, 6 – SPG, 7 – FC-NNLS, 8 – TR-KL, 9 – SB-NMF, 10 – UO-NMF(A), 11 – UO-NMF(X), 12 – BiO-NMF, 13 – Cx-NMF, 14 –  $k$ -średnich (E), 15 –  $k$ -średnich (C)

Dla badanych algorytmów przyjęto, że liczba iteracji zewnętrznych zawarta jest w przedziale [10–30]. Wewnątrz tego przedziału iteracje przerywano, gdy spełnione było kryterium stagnacji funkcji celu dla  $\varepsilon_\psi = 10^{-6}$ . Pozostałe parametry algorytmów przyjęto podobnie jak w poprzednich badaniach.

Dla każdego algorytmu wykonano 100 prób Monte Carlo, dobierając losowe przybliżenia początkowe z rozkładu równomiernego. Dla każdej próby wyznaczano dokładność grupowania, stosując miarę *Purity* w (7.46). Statystykę rozkładu wyników zilustrowano na rysunku 7.6.

**Wniosek 7.4.** Z rysunku 7.5 wynika, że dokumenty bazy *Reuters* charakteryzują się silniejszą korelacją międzyklasową i słabszą wewnątrzklasową niż dokumenty w bazie *TopicPlanet*. Na rysunku tym trudno nawet zauważyć podział dokumentów na 10 skupień. Stąd też o wiele trudniej grupować dokumenty w bazie *Reuters*, co potwierdzają wyniki badań pokazane na rysunku 7.6. Badania pokazują również, że proste algorytmy NMF (MUE, ALS, HALS, LPG, OG, SPG, FC-NNLS) pozwalają uzyskać podobną dokładność grupowania. Istotne zmiany w rozkładzie współczynnika  $P$  występują dla algorytmów NMF silnie regularyzowanych. Tak jest w przypadku algorytmu SB-NMF, który daje najlepsze wyniki grupowania dokumentów w bazie *TopicPlanet*. Z drugiej strony bardzo słabo funkcjonuje dla skupisk częściowo nachodzących na siebie, tak jak np. w bazie



**Reuters.** Dla dokumentów z bazy **Reuters** najlepszą dokładność grupowania uzyskano algorytmem TR-KL. Badania te nie pokazują jednoznacznie dlaczego uzyskano tak dobry wynik tylko dla bazy **Reuters**, ale można przypuszczać, że częstotliwość występowania słów w dokumentach bazy **Reuters** najlepiej opisać statystyką Poissona. Najprawdopodobniej miara odległości euklidesowej nie jest zbyt efektywna dla grupowania takich zbiorów danych. Widać bowiem wyraźną różnicę między wynikami uzyskanymi metodą  $k$ -średnich z odległością euklidesową i miarą kosinusową.

### 7.3. Klasyfikacja nadzorowana

Zadaniem klasyfikacji statystycznej jest określenie przynależności obserwowanego obiektu do danej klasy lub grupy. Klasyfikację nienadzorowaną można interpretować jako grupowanie danych. W przypadku klasyfikacji nadzorowanej przynależność obserwowanego obiektu do określonej klasy jest realizowana według reguły decyzyjnej lub dyskryminacyjnej, która tworzona jest na podstawie zbioru obiektów uczących. Klasyfikacja taka składa się zatem z dwóch etapów: uczenia i testowania. W procesie uczenia określana jest reguła decyzyjna:  $\mathcal{F}_K : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{K}$  opisująca odwzorowanie zbioru obiektów uczących  $\mathbf{y}_t \in \mathcal{Y}$  w zbiór klas  $\mathcal{K}$ . W procesie testowania, reguła ucząca  $\mathcal{F}_K$  wykorzystana jest do określenia przyporządkowania obiektu testowego  $\tilde{\mathbf{y}}$  o właściwościach takich jak obiekty w zbiorze  $\mathcal{Y}$ , do odpowiedniej klasy ze zbioru  $\mathcal{K}$ . Realizowana jest zatem funkcja  $\tilde{k} = \mathcal{F}_K(\tilde{\mathbf{y}})$ , gdzie  $\tilde{k} \in \mathcal{K}$ .

Przyjmując oznaczenia z rozdziału 3.2.4, niech  $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_T] \in \mathbb{R}_+^{I \times T}$  jest macierzą obiektów uczących,  $\mathcal{K} = \{1, \dots, K\}$  zbiorem indeksów  $K$  klas, a  $\mathcal{Z}^{(Y)} = \{z_1^{(Y)}, \dots, z_T^{(Y)}\}$  zbiorem indeksów klas, do których przyporządkowane są próbki  $\{\mathbf{y}_t\}$ . Zakłada się, że  $T \gg K$  oraz  $\forall \mathbf{y}_t : z_t^{(Y)} \in \mathcal{K}$ . Stosując NMF do macierzy  $\mathbf{Y}$  uzyskuje się macierze  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_+^{I \times J}$  oraz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{J \times T}$ . Niech  $\mathbf{A}^\dagger$  jest odwrotnością Moore'a–Penrose'a macierzy  $\mathbf{A}$ , zatem  $\mathbf{A}^\dagger$  określa przekształcenie  $\mathcal{F}_K : \mathbf{y}_t \rightarrow \mathbf{x}_t$ . Ponieważ  $\text{rank}(\mathbf{A}) = J$  i  $J \leq I$ , przekształcenie  $\mathcal{F}_K$  jest jednoznaczne i izomorficzne. Niech  $\mathcal{Z}^{(X)} = \{z_1^{(X)}, \dots, z_T^{(X)}\}$  jest zbiorem indeksów klas, do których przyporządkowane są próbki  $\{\mathbf{x}_t\}$ . Zbiór  $\mathcal{Z}^{(X)}$  powinien być tożsamy ze zbiorem  $\mathcal{Z}^{(Y)}$ . Wektory kolumnowe macierzy  $\mathbf{A}$  określają w pewnym sensie regułę decyzyjną. Nie jest to jednak odwzorowanie  $\mathcal{F}_K : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{K}$ , a jedynie  $\mathcal{F}_X : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X}$ , gdzie zbiór  $\mathcal{X}$  zawiera obiekty o przynależności klasowej takiej samej jak obiekty

w zbiorze  $\mathcal{Y}$ , ale reprezentowane w przestrzeni o mniejszej liczbie wymiarów niż obiekty  $\mathbf{Y}$ . Metoda NMF realizuje więc redukcję wymiarowości modelu.

W procesie testowania, dla obiektu testowego  $\tilde{\mathbf{y}}$  realizowane jest przekształcenie:  $\mathcal{F}_X : \tilde{\mathbf{y}} \rightarrow \tilde{\mathbf{x}}$ . Klasa, do której przynależy obiekt  $\tilde{\mathbf{x}}$ , określana jest na podstawie zadania:

$$k = \arg \min_{1 \leq t \leq T} D(\tilde{\mathbf{x}} || \mathbf{x}_t), \quad (7.50)$$

gdzie  $D(\tilde{\mathbf{x}} || \mathbf{x}_t)$  może być dowolną funkcją celu z rozdziału 2.

Klasyfikacja nadzorowana jest ważnym zagadnieniem w wielu dziedzinach nauki. W niniejszej pracy przedstawiono jedynie wyniki prac [486, 487, 502, 504] z zakresu wykorzystania modelu NMF i NTF do klasyfikacji obrazów twarzy, tekstur, cyfr ręcznie pisanych i dźwięków instrumentów muzycznych.

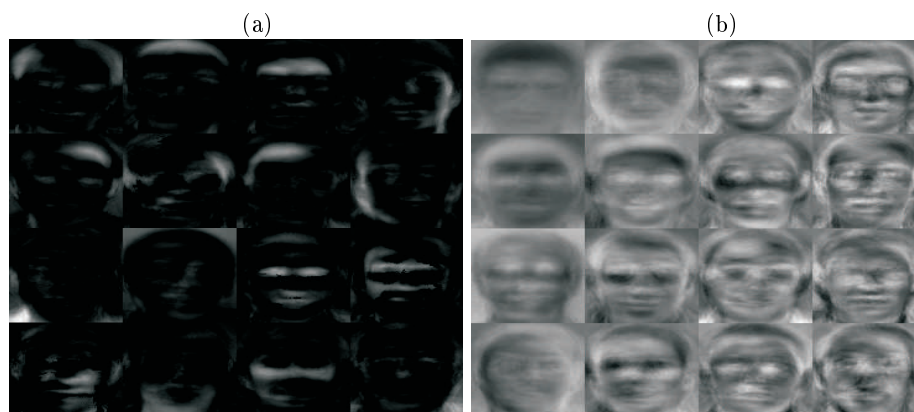
### 7.3.1. Klasyfikacja obrazów twarzy

Do klasyfikacji wykorzystano obrazy twarzy z bazy ORL<sup>3</sup>. W bazie jest 400 frontowych zdjęć twarzy czterdziestu osób (po dziesięć na osobę). Zdjęcia wykonano w laboratorium: *AT & T Laboratories Cambridge*, w okresie od kwietnia 1992 roku do kwietnia 1994 roku, o różnych gradientach oświetlenia, w różnych pozach (oczy otwarte/zamknięte, różne miny) i dla różnych efektów okluzji (np. okulary). Zdjęcia wykonano na ciemnym tle.

Testy przeprowadzono zgodnie z zasadą stosowaną w pracach [165, 267]. Obrazy z bazy danych „zwektoryzowano”, tzn. z  $t$ -tego obrazu  $\mathbf{Y}_t \in \mathbb{R}_+^{N \times M}$  utworzono wektor kolumnowy  $\mathbf{y}_t = \text{vec}(\mathbf{Y}_t) \in \mathbb{R}_+^{NM}$ . Zbiór  $T$  obrazów uczących można więc zapisać w postaci macierzy  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_+^{NM \times T}$ , a  $\tilde{T}$  obrazów testowych jako macierz  $\tilde{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}_+^{NM \times \tilde{T}}$ . Stosując NMF lub inny algorytm redukcji wymiarowości modelu do macierzy  $\mathbf{Y}$ , uzyskuje się macierz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{NM \times J}$  zawierającą  $J$  wektorów cech oraz macierz  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{J \times T}$  zawierającą  $T$  wektorów kodujących. W procesie testowania do estymacji wektorów  $\tilde{\mathbf{x}}_t$  należy zastosować taki sam algorytm jak w procesie uczenia dla macierzy  $\mathbf{X}$ . Klasyfikację wektorów  $\{\tilde{\mathbf{x}}_t\}$  zrealizowano według reguły (7.50), gdzie  $D(\tilde{\mathbf{x}} || \mathbf{x}_t)$  jest funkcją tzw. metryki Manhattanu [419].

Przykładowe wektory cech ekstrahowane za pomocą metody NMF (algorytm MKL), a następnie przekształcone do postaci macierzowej przez operator  $\text{mtx}(\cdot, N, M)$ , pokazano na rysunku 7.7 (a), dla  $J = 16$ . Obrazy te ilustrują cechy rzadkie, reprezentujące pewne wspólne fragmenty obrazów trenujących. Na ry-

<sup>3</sup> <http://people.cs.uchicago.edu/~dinoj/vis/orl/>



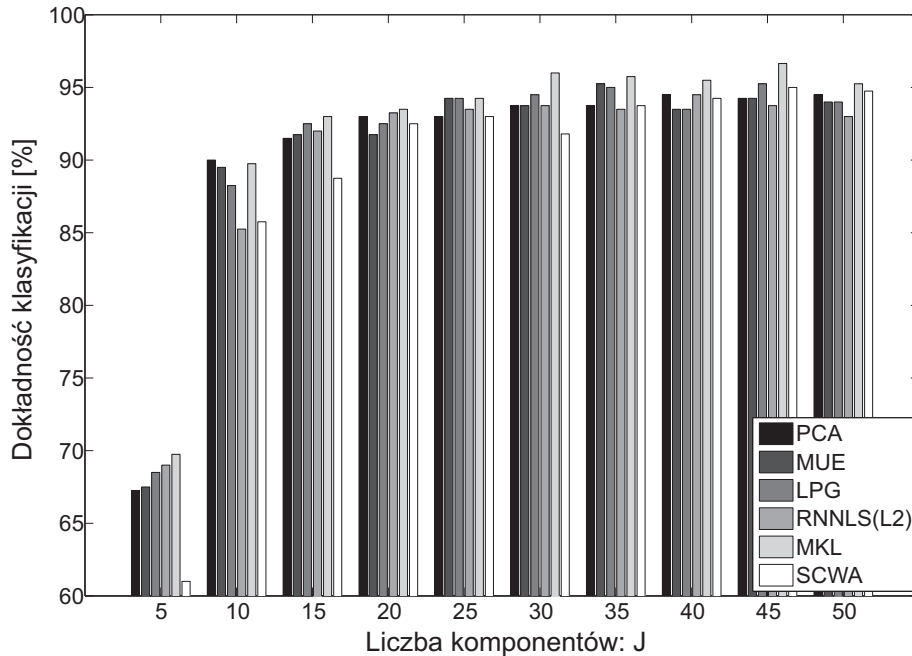
Rys. 7.7. Przykładowe obrazy cech estymowanych metodami: (a) NMF; (b) PCA

sunku 7.7 (b) pokazano obrazy cech ekstrahowane z tych samych obrazów, ale za pomocą metody PCA (metoda komponentów głównych). Są to cechy holistyczne, które nie są rzadkie, ale wzajemnie ortogonalne.

Do badań wykorzystano następujące algorytmy: PCA (metoda komponentów głównych) [214, 238, 347], MUE (rozdz. 4.4.1), LPG (rozdz. 4.7.2), RNNLS(L2) (algorytm 15), MKL (rozdz. 4.4.2) oraz SCWA (rozdz. 4.6.2). W algorytmie SCWA zastosowano regułę (4.144) do aktualizacji macierzy  $\mathbf{A}$  oraz regułę (4.164) dla macierzy  $\mathbf{X}$ . Parameter regularyzacji  $\alpha_A$  w (4.144) wyznaczano regułą (4.146) dla  $\alpha_A^{(0)} = 10^8$ ,  $\tau = 1$  i  $\bar{\alpha} = 10^{-12}$ . Dla macierzy  $\mathbf{W}$  w (4.164) przyjęto:  $\gamma = 10^{-3}$ ,  $\delta = 10^{-6}$ . Liczba iteracji wewnętrznych w SCWA dla aktualizacji faktora  $\mathbf{X}$  wynosiła aż 100. Dla mniejszej liczby iteracji nie udawało się uzyskać zadowalających wyników. Eksperymentalnie stwierdzono, że liczba iteracji zewnętrznych powinna wynosić ok. 50. W tym przypadku iteracje zewnętrzne mają charakter regularyzacji, ponieważ dla większej liczby iteracji następuje tzw. przeuczenie i wyniki klasyfikacji są gorsze. Zatrzymanie procesu aktualizacji może jednak nastąpić wcześniej, jeśli spełnione jest kryterium stagnacji funkcji celu dla  $\varepsilon_\psi = 10^{-6}$ .

Klasyfikację obrazów twarzy z bazy ORL realizowano również w innych pracach. Porównanie efektywności algorytmów MUE, LNMF (rozdz. 4.4.5), DNMF (rozdz. 4.4.5), SCWA, GNMF (rozdz. 3.2.5), MD-NMF (rozdz. 3.2.5) oraz SPG można odnaleźć w pracach [502, 512].

Algorytmy NMF inicjalizowano metodą CHV (algorytm 9). Do oceny efektywności klasyfikacji zastosowano 5-krotną walidację krzyżową [238]. Dokładność klasyfikacji zdefiniowano jako stosunek procentowy liczby poprawnie sklasyfiko-



Rys. 7.8. Dokładność klasyfikacji obrazów testowych w funkcji rzędu  $J$

wanych obrazów testowych do liczby wszystkich obrazów testowych. Uśrednione wyniki współczynnika rozpoznania pokazano na rysunku 7.8.

**Wniosek 7.5.** Zadanie klasyfikacji obrazów twarzy jest zwykle bardzo trudne, ponieważ (fisherowska) miara zróżnicowania grup [244] takich obrazów przyjmuje relatywnie małe wartości. Badania pokazują, że pewne algorytmy NMF wykazują się większą efektywnością w realizacji tego zadania niż metoda komponentów głównych (zwłaszcza jeśli rząd faktoryzacji jest duży). Największą efektywność klasyfikacji uzyskano algorytmem MKL, co potwierdza większą przydatność miary  $KL$  dla oceny podobieństwa obrazów niż funkcji odległości euklidesowej. Włączenie informacji o uśrednionych odległościach międzyklasowych i wewnątrzklasowych do funkcji celu w metodzie NMF ma na celu zwiększenie efektywności klasyfikacji. Jednak badania pokazują, że to podejście wymaga dość precyzyjnej oceny wartości parametrów regularyzacji. Z rysunku 7.8 wynika, że jeśli rząd faktoryzacji jest wystarczająco duży (np.  $J > 15$ ), to nie wpływa on istotnie na wynik klasyfikacji.

### 7.3.2. Klasyfikacja obrazów tekstury

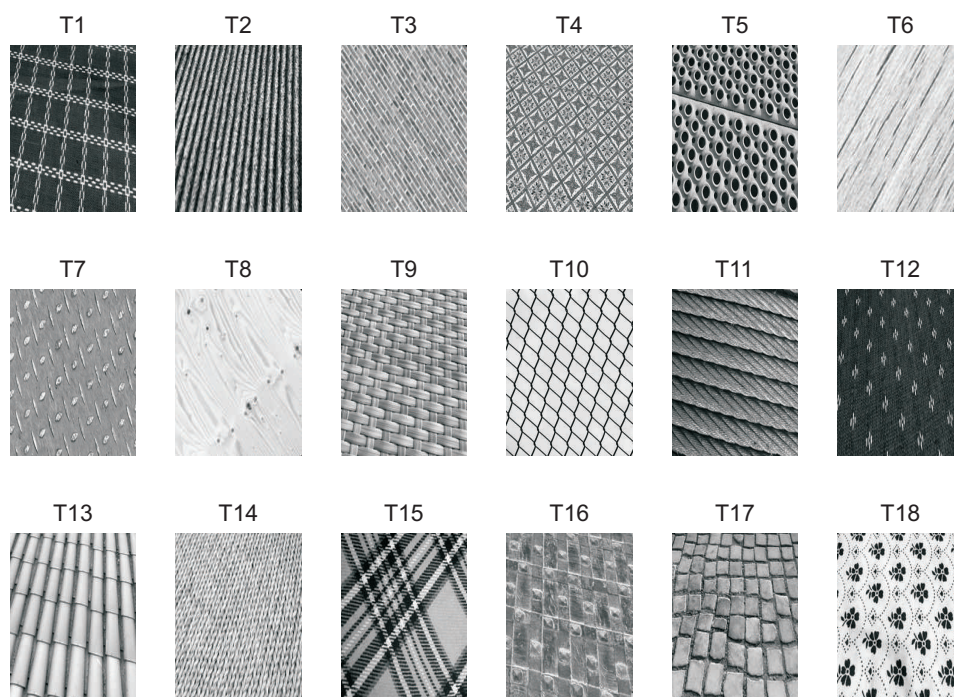
Klasyfikacja obrazów tekstury jest zadaniem dość trudnym i wymaga realizacji pewnego procesu przetwarzania wstępnego. Tekstura w obrazie ma często strukturę nieregularną, zdeformowaną, obróconą i przeskalowaną. Dlatego też, proces ten składa się z kilku etapów: ekstrakcji charakterystycznych obszarów lokalnych, ich selekcji oraz transformacji niezmienniczych.

Do ekstrakcji charakterystycznych obszarów lokalnych stosuje się różne detektory niezmiennicze względem transformacji afinicznych. Należą do nich afiniczne detektory Harrisa–Laplace’a [282], Harrisa [304] oraz hesjanu [305]. Detektory te znajdują w obrazie obszary, które są podobne przez geometryczne transformacje, takie jak skalowanie, rotacja oraz powinowactwo osiowe. Obszary te mogą różnić się znacząco w zależności od zastosowanych detektorów. Przykładowo, detektor Harrisa wyszukuje obszary eliptyczne o jednorodnej luminancji, podczas gdy pozostałe detektory znajdują obszary o dużej dynamice gradientu luminancji.

Liczba lokalnych obszarów dla każdego obrazu uczącego i testowego powinna być duża, aby maksymalizować ilość globalnej informacji ekstrahowanej. Takie podejście prowadzi jednak do znacznego zwiększenia kosztu obliczeniowego procesu uczenia, ze względu na mnogość próbek uczących. Aby zredukować nadmiarowość informacji, wybierane są tylko te obszary lokalne, które są najmniej skorelowane ze sobą (różnią się między sobą znacząco). Celem takiego wyboru jest utworzenie znacząco zróżnicowanego zbioru uczącego i o małej nadmiarowości, uczenie bowiem maszyn na próbkach o niewielkim zróżnicowaniu cech jest mało efektywne.

Tak wyselekcjonowane obszary lokalne są następnie przetwarzane przez deskryptor SIFT (ang. *Scale-Invariant Feature Transform*)<sup>4</sup> [294] w celu selekcji cech niezmienniczych ze względu na skalę, a przede wszystkim rotację oraz częściowo na zmiany luminancji. Cechy te tworzą tzw. wektory punktów kluczowych. Dla każdego wybranego obszaru lokalnego generowana jest grupa  $K$  wektorów w  $\mathbb{R}^{128}$ . Zakładając  $P$  obrazów uczących oraz ekstrakcję  $R_p$  obszarów lokalnych dla  $p$ -tego obrazu uczącego, całkowita liczba wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{Y}$  wynosi:  $T = \sum_{p=1}^P \sum_{r=1}^{R_p} K_r$ , gdzie  $K_r$  jest liczbą punktów kluczowych dla  $r$ -tego obszaru lokalnego, zatem  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{128 \times T}$ . W wyniku nieujemnej faktoryzacji macierzy  $\mathbf{Y}$  otrzymuje się macierze  $\mathbf{A}$  oraz  $\mathbf{X}$ . Klasyfikacja realizowana jest w  $J$ -wymiarowej przestrzeni wektorów kolumnowych macierzy  $\mathbf{X}$ . Dla każdego obrazu testowego znajdowany jest zbiór  $R$  wektorów punktów kluczowych, stosując procedurę po-

<sup>4</sup> W badaniach wykorzystano kod Matlaba dla deskryptora SIFT, pochodzący ze strony: <http://www.cs.ubc.ca/~lowe/keypoints/>

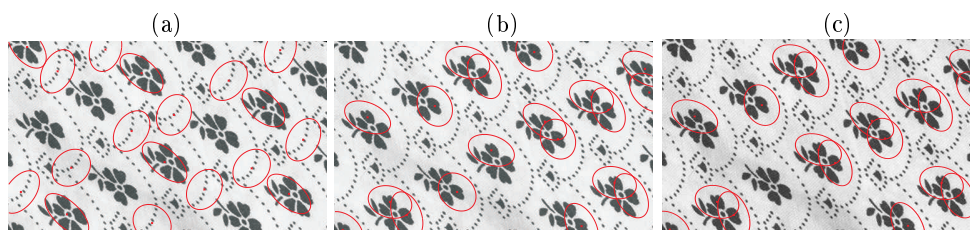


Rys. 7.9. Przykładowe obrazy tekstury dla każdej klasy

dobną jak w procesie uczenia. Rzutując te wektory na  $\text{span}(\mathbf{A})$  uzyskuje się zbiór wektorów  $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_R\} \subset \mathbb{R}_+^J$ . Następnie dla wszystkich wektorów punktów kluczowych w obrazie testowym znajduje się zbiór ich przynależności klasowej  $\{k_r\}$ , gdzie  $k_r = \arg \min_{1 \leq t \leq T} D(\tilde{\mathbf{x}}_r | | \mathbf{x}_t)$  dla  $r = 1, \dots, R$ . Indeks klasy, do której należy obraz testowy wyznaczany jest na podstawie funkcji  $k = \text{mode}\{k_r\}$ , gdzie  $\text{mode}\{\cdot\}$  jest wartością modalną (dominantą) zbioru.

Badania omawiane w tej pracy przeprowadzono na obrazach tekstur, pochodzących z bazy UIUC<sup>5</sup>. Wybrano obrazy należące do 18 kategorii tekstur, których przykłady pokazano na rysunku 7.9. W każdej grupie znajduje się 16 obrazów. Są to obrazy o niejednorodnych i znacznie zdeformowanych teksturach. Ocenę jakości klasyfikacji przeprowadzono, stosując 4-krotną walidację krzyżową. Każda próba liczy 12 obrazów uczących i 4 obrazy walidacyjne. Dla każdego obrazu wygenerowano 40 obszarów lokalnych za pomocą odpowiedniego detektora afinicznego. Przykładowe obszary lokalne identyfikowane przez detektory Harrisa,

<sup>5</sup> <http://perso.telecom-paristech.fr/~xia/text ure.html>

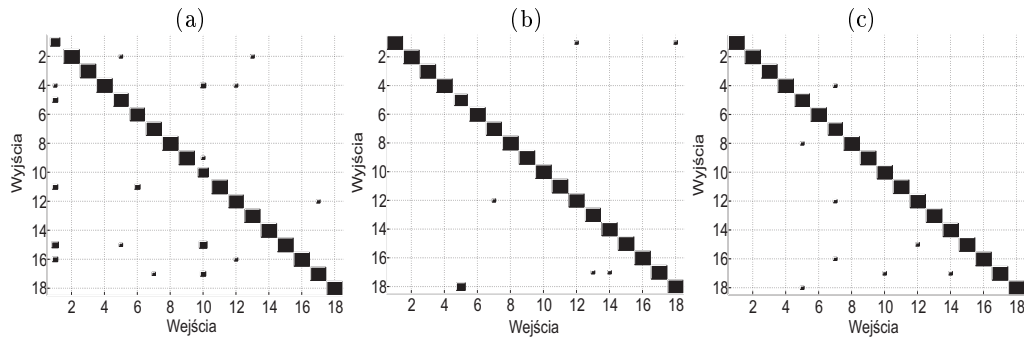


Rys. 7.10. Obszary lokalne (zaznaczone w elipsach) w przykładowym obrazie z klasy T18, wyszukiwane za pomocą afinicznych detektorów: (a) Harrisa; (b) Harrisa–Laplace’a; (c) hesjanu

Harrisa–Laplace’a i hesjanu w wybranym obrazie z kategorii T18 (rys. 7.9) zilustrowano na rysunku 7.10. W kolejnym etapie dokonano selekcji 20 obszarów o najmniejszej korelacji z każdej grupy obszarów lokalnych, a następnie wyznaczane są punkty kluczowe. Ich liczba dobierana jest adaptacyjnie (od kilku do kilkudziesięciu) przez deskryptor SIFT w zależności od danego obrazu. Macierz  $\mathbf{Y}$ , zawierającą wektory punktów kluczowych dla obrazów uczących, poddano nieujemnej faktoryzacji. Różne algorytmy NMF mogą być zastosowane do realizacji tej faktoryzacji. Przykłady można odnaleźć w pracach [371, 486, 504]. Z przeprowadzonego badania wynika, że jeśli proces aktualizacji faktorów przerywany jest według kryterium stagnacji funkcji celu dla małej wartości tolerancji błędów aktualizacji, to liczba błędów klasyfikacji nie zależy istotnie od wyboru algorytmu NMF. Dlatego też rezultaty klasyfikacji pokazano poniżej tylko dla algorytmu HALS (algorytm 10). W kryterium stagnacji funkcji celu przyjęto  $\varepsilon_\psi = 10^{-6}$ . Obie macierze początkowe  $\mathbf{A}^{(0)}$  i  $\mathbf{X}^{(0)}$  estymowano za pomocą metody CHV (algorytm 9). Ponieważ macierz  $\mathbf{Y}$  nie należy do klasy macierzy faktoryzowalnych, więc rząd faktoryzacji ustalono eksperymentalnie. Wybrano  $J = 20$ . Funkcje  $D(\mathbf{Y}||\mathbf{A}\mathbf{X})$  oraz  $D(\tilde{\mathbf{x}}_r||\mathbf{x}_t)$  wyrażono przez odległość euklidesową.

Dla każdej próby walidacyjnej i każdego badanego algorytmu wygenerowano macierz konfuzji [234, 444]. Na rysunku 7.11 przedstawiono diagramy Hintona macierzy konfuzji uśrednionych po wszystkich próbach. W badaniach tych obszary lokalne wyszukiwano za pomocą afinicznych detektorów: Harrisa, Harrisa–Laplace’a oraz hesjanu.

**Wniosek 7.6.** Omawiany proces klasyfikacji tekstury składa się z wielu etapów. Metoda NMF stosowana jest tylko do redukcji wymiarowości modelu i tym samym ekstrakcji cech rzadkich z macierzy punktów kluczowych. Efektywność klasyfikacji zależy więc od wielu czynników. Z przeprowadzonych badań wynika, że najlep-



Rys. 7.11. Diagramy Hintona macierzy konfuzji z zastosowaniem afinicznych detektorów:  
 (a) Harrisa (85,76%); (b) Harrisa–Laplace’a (96,53%); (c) hesjanu (97,22%).  
 W nawiasach podano średnią dokładność klasyfikacji

szere efekty klasyfikacji obrazów tekstury pokazanych na rysunku 7.9 uzyskuje się wtedy, gdy obszary lokalne wyszukiwane są za pomocą afinicznego detektora hesjanu. Detektor Harrisa–Laplace’a również umożliwia uzyskanie wysokiej jakości klasyfikacji, chociaż najczęściej nie radzi sobie z obrazami z klasy T5. Najslabiej wypadają detektor Harrisa, zwłaszcza dla obrazów z klasy T1 i T10. Są to obrazy zawierające duże obszary lokalne o jednorodnej strukturze. Dlatego zbiór uczący nie jest wystarczająco zróżnicowany. Wybór algorytmu NMF nie jest bardzo istotny. Jednak uwzględniając wyniki badań przedstawionych w rozdziale 4.11.3, rozsądny wydaje się wybór algorytmu HALS.

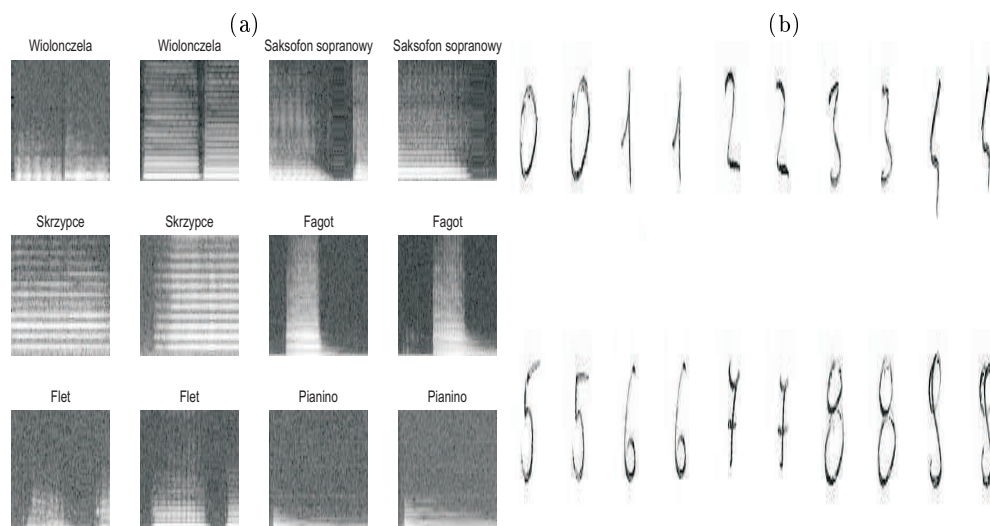
### 7.3.3. Klasyfikacja obrazów algorytmem UO-NTF

Algorytm UO-NTD omówiono w rozdziale 6.3.3. Bazuje on na nieujemnej dekompozycji Tuckera (ang. NTD – *Nonnegative Tucker Decomposition*), w którym jedna z estymowanych macierzy jest ortogonalna. Do estymacji nieujemnych czynników wykorzystano algorytm SPG, omówiony w rozdziale 4.10.5. Nieujemna dekompozycja Tuckera jest uogólnieniem modelu NTF. Algorytm UO-NTD został zbadany dla różnych zadań klasyfikacji obiektów: (A) instrumentów muzycznych, (B) cyfr ręcznie pisanych, (C) obrazów twarzy.

W zadaniu (A) wybrano nagrania dźwięków 6 instrumentów muzycznych (wielonczela, saksofon sopranowy, skrzypce, fagot, flet i pianino). Nagrania pochodzą z bazy MIS<sup>6</sup> Uniwersytetu Iowa. Do testów wyselekcjonowano 4 sekundowe frag-

<sup>6</sup> <http://theremin.music.uiowa.edu>

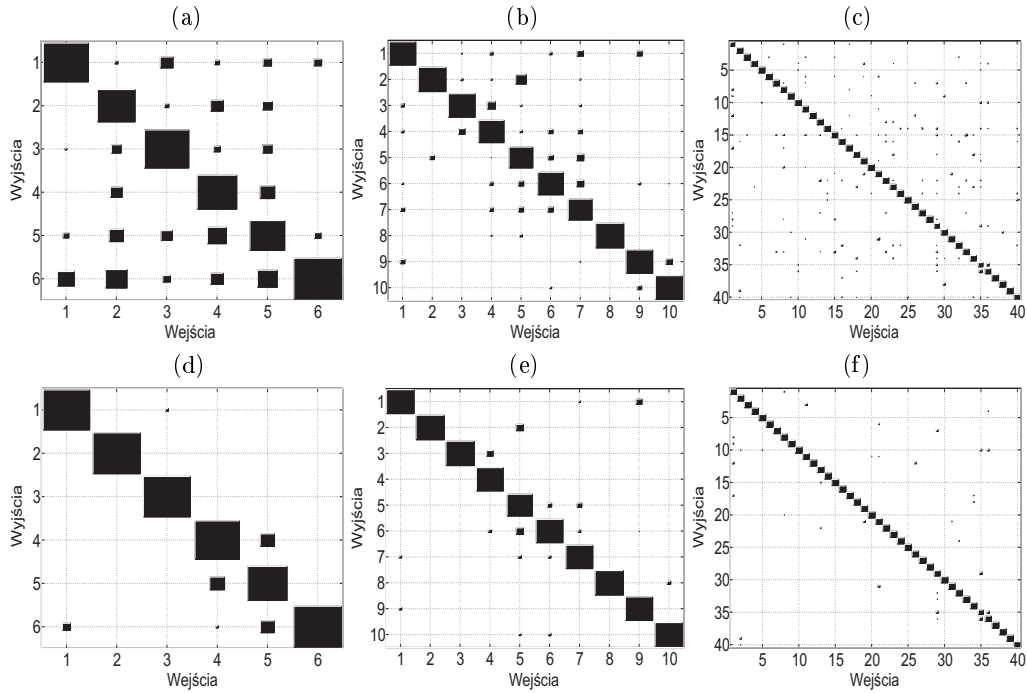




Rys. 7.12. Przykładowe próbki testowe: (a) spektrogramy nagrań muzycznych w zadaniu (A); (b) cyfry ręcznie pisane w zadaniu (B)

menty, zawierające istotne informacje. Każdy fragment rejestrowany jest z częstotliwością próbkowania 44,1 kHz. Testy przeprowadzono według zasady 5-krotnej walidacji krzyżowej. W każdej próbie zbiór uczący utworzony jest z 56 fragmentów nagrań (próbek), a zbiór testowy z 12 próbek. Fragmenty nagrań przekształcono do spektrogramów za pomocą krótkoczasowej dyskretnej transformaty Fouriera. Z każdego spektrogramu wyselekcjonowano komponenty widmowe z zakresu od 86 Hz do 10,9 kHz. Następnie fragmenty zlogarytmowanych spektrogramów (widma amplitudowego) poddano decymacji do 64 próbek częstotliwości i 128 próbek czasu. W konsekwencji, zbiór próbek uczących wyrażono za pomocą tensora  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{64 \times 128 \times 56}$ , a zbiór próbek testowych tworzy tensor  $\mathcal{T} \in \mathbb{R}^{64 \times 128 \times 12}$ . Zlogarytmowane widma amplitudowe spektrogramów przykładowych próbek testowych pokazano na rysunku 7.12(a).

W zadaniu (B) do klasyfikacji wykorzystano obrazy cyfr ręcznie pisanych. Są to cyfry od 0 do 9, utworzone w celu realizacji pracy [474]. Każda klasa zawiera 10 wariantów tej samej cyfry. Są to obrazy o rozdzielczości  $64 \times 64$  piksele. Stosując 5-krotną walidację krzyżową, zbiór uczący zawiera 80 obrazów, a zatem  $\mathcal{Y} \in \mathbb{R}^{64 \times 64 \times 80}$ . W każdej próbie walidacyjnej zbiór testowy składa się z 20 obrazów (2 na każdą klasę) – czyli  $\mathcal{T} \in \mathbb{R}^{64 \times 64 \times 20}$ . Przykładowe obrazy testowe pokazano na rysunku 7.12(b).



Rys. 7.13. Diagramy Hintona macierzy konfuzji: (a) NTD: 6 instrumentów muzycznych; (b) NTD: 10 cyfr ręcznie pisanych; (c) NTD: 40 obrazów twarzy; (d) UO-NTD: 6 instrumentów muzycznych; (e) UO-NTD: 10 cyfr ręcznie pisanych; (f) UO-NTD: 40 obrazów twarzy

W zadaniu (C) wykorzystano ponownie obrazy z bazy ORL. Przyjęto podobny podział obrazów jak w rozdziale 7.3.1, czyli w każdej próbie 5-krotnej walidacji krzyżowej 80 obrazów tworzy zbiór testowy, a pozostałe 320 obrazów wykorzystane jest w procesie uczenia.

W badaniach porównano algorytmy UO-NTD oraz NTD bez wymuszania ortogonalności macierzy  $U^{(3)}$ . Każdy z algorytmów inicjalizowano losowo 100 razy oraz przerywano proces aktualizacji czynników po 10 iteracjach zewnętrznych. W algorytmie SPG przyjęto następujące parametry:  $k_{\max} = 3$ ,  $\alpha_{\min} = 10^{-8}$ ,  $\alpha_{\max} = 10^4$ .

Wyniki klasyfikacji w postaci diagramów Hintona macierzy konfuzji uśrednionych po próbach walidacyjnych pokazano na rysunku 7.13. Uśredniona dokładność klasyfikacji  $\delta$  oraz czas obliczeniowy zawarte są w tabeli 7.3.

Tabela 7.3. Uśredniona dokładność klasyfikacji ( $\delta$ ), standardowe odchylenie (Std.) oraz czas wykonania 10 iteracji zewnętrznych w zadaniach: (A), (B) i (C)

Zadanie	NTD			UO-NTD		
	$\delta$ [%]	Std. [%]	Czas [s]	$\delta$ [%]	Std. [%]	Czas [s]
(A)	73,12	9,01	0,989	93,04	8,32	1,001
(B)	84,85	2,34	0,686	93,38	3,56	0,697
(C)	84,03	2,72	5,05	94,96	1,88	5,13

**Wniosek 7.7.** Badania pokazują, że ortogonalizacja macierzy  $\mathbf{U}^{(3)}$  w algorytmie UO-NTD znacząco poprawia efekty klasyfikacji. Uzyskano również trochę większą dokładność klasyfikacji obrazów twarzy algorytmem UO-NTD niż zwykłą metodą NMF dla  $J = 20$  (rys. 7.8). W zadaniu (C) rozrzut wyników dokładności klasyfikacji w próbach walidacyjnych jest mniejszy niż dla pozostałych zadań. W tym aspekcie najgorsze wyniki uzyskano w zadaniu (A). Sugeruje to konieczność stosowania pewnych technik przetwarzania wstępnego w celu ekstrakcji cech, niezmienniczych względem czasu. Podobnie, w zadaniu (B) lepsze wyniki uzyskuje się, gdy obrazy cyfr są scentralizowane i odpowiednio przeskalowane.



## 8. Podsumowanie

W niniejszej pracy przedstawiono podstawy nieujemnej faktoryzacji macierzy, a także najważniejsze kierunki rozwoju tej metody. Omówiono zarówno fundamentalne modele NMF, jak i jego złożone struktury, szczególne przypadki oraz rozszerzenia do modeli tensorowych. Pokazano związki między modelami, rozważano ich właściwości charakterystyczne i zastosowanie w analizie danych wielowymiarowych. Znaczna część pracy dotyczy algorytmów numerycznych stosowanych w estymacji nieujemnych czynników, łącznie z metodami ich inicjalizacji i kryteriami zatrzymania procesów iteracyjnych. Scharakteryzowano typowe funkcje celu stosowane w metodzie NMF oraz związki między nimi i odpowiadającymi rozkładami prawdopodobieństwa. Rozważano problem niejednoznaczności czynników w modelu NMF. Przedstawiono warunki jednoznaczności oraz interpretację geometryczną czynników popartą licznymi przykładami. Zaprezentowano niezwykłą adaptacyjność metody NMF do charakteru poszukiwanego rozwiązania. Cechy estymowane tą metodą mogą znacząco zależeć od modelu, wprowadzanej informacji apriorycznej i algorytmu numerycznego aktualizującego czynniki. Taka elastyczność tej metody może być postrzegana jako jej wada przez niedoświadczonych użytkowników, natomiast daje ogromne możliwości tym, którzy poszukują specjalistycznego narzędzia do przetwarzania lub analizy specyficznych danych. Dzięki wspomnianym możliwościom i zwykle małej złożoności obliczeniowej, metoda NMF ma ogromny potencjał aplikacyjny. W pracy omówiono jedynie typowe zastosowania, skupiając się przede wszystkim na ślepej separacji sygnałów nieujemnych, grupowaniu danych i klasyfikacji nadzorowanej.

Praca zawiera zarówno materiał dobrze ugruntowany, przeglądowy, jak i nowe wyniki badań, częściowe wnioski, komentarze autorskie i uwagi. Powstała na bazie wielu prac autorskich i współautorskich, związanych bezpośrednio z omawianą tematyką i opublikowanych w różnych formach: artykuły periodyczne czasopism z listy filadelfijskiej [78, 80, 85, 181, 493, 494, 497, 501, 502] i innych czasopism

zagranicznych [384, 499, 511], książka monograficzna [89], rozdziały w książkach [481, 485], materiały znanych konferencji międzynarodowych [71, 73, 77, 81–84, 87, 88, 355, 357, 478, 483, 484, 486–492, 495, 496, 498, 503, 504, 512, 517] oraz patent [86]. Do prac autorskich i współautorskich, które są pośrednio związane z tą tematyką, ale stały się inspiracją do powstania omawianych metod, należy zaliczyć następujące pozycje: artykuły z listy filadelfijskiej [180, 362, 369, 480, 500, 506], inne artykuły [477, 479, 509, 516], rozdziały w książkach [140, 482] oraz materiały konferencyjne [179, 363–367, 505, 507, 508, 510, 513–515]. Poniżej przedstawiono uwagi końcowe, które mogą ułatwić wybór odpowiedniego modelu i algorytmu do przetwarzania lub analizy obserwowanych danych.

Istotny kierunek badań w rozwoju metody NMF jest związany z zagadnieniem wyboru odpowiedniego algorytmu numerycznego do aktualizacji faktorów. W pionierskich pracach nad modelem NMF dominowały dwa podejścia algorytmiczne: multiplikatywne lub projekcyjne najmniejszych kwadratów, tzw. algorytm ALS. Obecnie prawie nie spotyka się algorytmu ALS w aktualizacji faktorów modelu NMF ponieważ jego zbieżność nie jest monotoniczna, co utrudnia kontrolę procesu zbieżności. Natomiast algorytmy multiplikatywne zwykle charakteryzują się bardzo powolną zbieżnością i stąd nie nadają się do głębokiej eksploracji punktów stacjonarnych funkcji celu. Niemniej jednak, jeśli obserwowane dane są zaburzone lub zadanie faktoryzacji należy do klasy zadań nefaktoryzowalnych, to głęboka eksploracja funkcji celu jest bezcelowa. W pracy badano różne algorytmy numeryczne w kontekście wielu zastosowań. Badania te prowadzą do konkluzji, że nie istnieje taki algorytm („złoty środek” lub super-algorytm), który byłby bezkonkurencyjny we wszystkich zastosowaniach modelu NMF. W wielu przypadkach algorytmem pierwszego wyboru może być HALS lub RNNLS. Duży potencjał aplikacyjny mają też algorytmy OG i SPG, zwłaszcza dlatego, że dość łatwo w nich zaimplementować różne funkcje kary lub regularyzujące. Dla minimalizacji uogólnionych funkcji celu, innych niż funkcja odległości euklidesowej, obiecujące właściwości ma algorytm obszarów zaufania (TR). Jednak precyzyjny wybór algorytmu powinien być zależny od wielu czynników, zwłaszcza właściwości obserwowanych danych i charakteru poszukiwanych faktorów. Jeśli dane są dokładne, opisane modelem faktoryzowalnym, a funkcja celu należy do klasy  $C^{1,1}$ , z pewnością najlepszym wyborem będą algorytmy quasi-Newtona. Jeśli jednak model faktoryzacji jest tylko przybliżony lub silnie zaburzony, szybkość zbieżności danego algorytmu nie jest aż tak istotna. W takim przypadku, należy brać pod uwagę inne czynniki, takie jak charakter zbieżności, stabilność numeryczną algorytmu oraz łatwość przystosowania go do włączenia informacji apriorycznej.

Do estymacji czynników w metodzie NMF można stosować różne funkcje celu. Funkcja odległości euklidesowej jest prawdopodobnie najczęściej stosowana, ponieważ zwykle zakłada się, że błąd residualny ma rozkład gaussowski. Ponadto, minimalizacja funkcji kwadratowej algorytmami numerycznymi jest łatwiejsza niż jakiegokolwiek innej nieliniowej funkcji. Badania przeprowadzone w niniejszej pracy pokazują jednak, że nie we wszystkich zastosowaniach funkcja odległości euklidesowej jest najlepszym wyborem. Przykładowo, w klasyfikacji obrazów twarzy (rozdz. 7.3.1) lepsze rezultaty uzyskano, stosując uogólnioną dywergencję  $KL$ . Podobnie jest w grupowaniu dokumentów tekstowych z bazy **Reuters** (rozdz. 7.2.2). W separacji sygnałów akustycznych (rozdz. 7.1.2) efektywniej jest modelować podobieństwo między zbiorem komponentów ukrytych a modelem NMF przez dywergencję  $IS$ . Również liczne przykłady z literatury potwierdzają, że w wielu zastosowaniach modelu NMF lepsze wyniki uzyskuje się innymi miarami podobieństwa niż odległość euklidesowa.

W wielu zastosowaniach modelu NMF estymowane czynniki powinny też charakteryzować się innymi cechami, poza nieujemnością. Wymuszanie określonych cech jest zwykle realizowane przez odpowiednie człony regularyzujące w funkcji celu. Niestety, zadanie estymacji parametrów regularyzacji nie jest łatwe, a koszt ich estymacji może wielokrotnie przekraczać koszt estymacji poszukiwanych czynników. W pracy zaproponowano, aby wybrane parametry regularyzacji zmieniać według „z góry” narzuconej reguły. Badania pokazują, że takie podejście jest bardzo efektywne w pewnych zastosowaniach. Przykładowo, jeśli jeden z estymowanych czynników jest rzadki, a drugi gęsty, wymuszanie gładkości w czynniku gęstym, według reguły bisekcyjnej lub eksponencjalnej prowadzi do większej stabilności algorytmu i dokładniejszej estymacji czynników. Takie podejście jest jednak mało efektywne w takich zastosowaniach, w których wszystkie estymowane czynniki są rzadkie. Należy też wspomnieć, że ilość wprowadzanej informacji apriorycznej powinna być dobierana bardzo uważnie. Jeśli regularyzacja jest za silna, to nie tylko estymowane czynniki mogą być przeregularyzowane, ale też mogą wystąpić problemy ze stabilizacją numeryczną algorytmu i utratą jego monotonicznego charakteru zbieżności. Przykładowo, tak jest w algorytmach LNMF i DNMF, które pomimo podejścia multiplikatywnego, nie wykazują się monotoniczną zbieżnością dla dużych wartości parametrów regularyzacji.

Najczęściej przez pojęcie NMF rozumiana jest dekompozycja macierzy na dwa czynniki o nieujemnych elementach. W rozdziale 5 pokazano, że istnieją jeszcze inne struktury modelu NMF, przeznaczone do specyficznych zastosowań. W pewnych sytuacjach struktury te są blisko związane z zagadnieniem wymuszania okre-

ślonych cech faktorów w modelu podstawowym. Tak jest w przypadku struktur trójczłonowych. W strukturze dwuortogonalnej (rozd. 5.4.1) ortogonalność wymusza się w dwóch spośród trzech estymowanych faktorów. Takie podejście motywowane jest dekompozycją macierzy względem jej wartości osobliwych. Jest to jednak pseudoortogonalność, ponieważ niełatwo jest znaleźć takie nieujemne i ortogonalne wektory kolumnowe faktorów, które nie stanowiłyby bazy kanonicznej. Z drugiej strony, nawet przy braku perfekcyjnej ortogonalności, faktory takie powinny być bardzo rzadkie. Wymuszanie ortogonalności z jednoczesnym warunkiem nieujemności faktorów prowadzi do rzadkości w faktorach. Z kolei, duża rzadkość faktorów zwiększa szansę na ich jednoznaczność. Struktury modelu NMF omówione w rozdziale 5 umożliwiają też skuteczniejsze wprowadzanie informacji apriorycznej do estymowanego modelu. Przykładowo, jeśli estymowane sygnały są lokalnie gładkie, a zwłaszcza unimodalne, dobrym rozwiązaniem wydaje się zastosowanie struktury liniowej kombinacji funkcji bazowych (rozd. 5.4.2). Potwierdzają to również wyniki badań przedstawionych w rozdziale 7.1.1. Szczególnym przypadkiem trójczłonowej struktury modelu NMF jest tzw. NMF wypukły (rozd. 5.4.3). Jest to struktura przeznaczona do grupowania danych bez ograniczeń nieujemności. Tego typu struktura wykazuje się również lepszymi właściwościami jednoznaczności faktoryzacji, jeśli poszukiwane wektory bazowe znajdują się w zbiorze wektorów obserwowanych. Model NMF nie zawsze oznacza postać liniową. W pewnym zastosowaniu związki między cechami danych obserwowanych mogą być nieliniowe. Do ekstrakcji takich cech stosuje się nieliniową strukturę NMF (rozd. 5.6). W innym zastosowaniu obserwowane sygnały wyrażone są przez splot sygnałów źródłowych z funkcją jądrową. Modelowanie takiego przypadku można realizować splotową strukturą modelu NMF (rozd. 5.3). Niestety takie podejście jest związane ze znacznym wzrostem liczby stopni swobody w estymacji faktorów, co zwykle oznacza większą liczbę lokalnych minimów funkcji celu. Pojawia się więc kompromis między dokładnością modelowania danych obserwowanych a trudnością estymacji parametrów modelu.

W pracy scharakteryzowano najbardziej znane metody badania jednoznaczności faktorów w modelu NMF. Są to raczej metody przydatne w rozważaniach teoretycznych, zastosowanie bowiem ich do oceny faktorów w przestrzeniach wielowymiarowych sprowadza się do zadania klasy NP. Co więcej, metody te umożliwiają raczej ocenę jednoznaczności już istniejących faktorów, a nie dają odpowiedzi na pytanie czy dana macierz obserwacji ma jednoznaczną nieujemną faktoryzację. Można przypuszczać, że ten aspekt modelu NMF będzie jeszcze silnie rozwijany w przyszłości. Należy jednak zaznaczyć, że niejednoznaczność faktorów w wielu



zastosowaniach modelu NMF nie jest istotnym problemem. Jest to takie zastosowanie, jak np. nadzorowana klasyfikacja, w której model NMF najczęściej stosuje się do ekstrakcji cech o określonym charakterze. Nie jest więc szczególnie istotne czy cechy te są jednoznaczne czy nie, a jedynie to czy prowadzą do właściwej reguły dyskryminacyjnej. Inaczej jest jednak w grupowaniu danych czy ślepej separacji obrazów. W tych zastosowaniach, niejednoznaczności inne niż skalowanie lub permutacja czynników mogą prowadzić do błędnej interpretacji estymowanych czynników. Problem niejednoznaczności czynników można też łagodzić przez odpowiedni dobór informacji apriorycznej. Jak już wspomniano zadanie to nie jest łatwe, ale pokazuje ogromną elastyczność modelu NMF w dostosowaniu do danych obserwowanych. Przykładowo, jeśli model NMF jest stosowany do grupowania twardego, to wymuszanie binarności w jednym z estymowanych czynników jest celowe i prowadzi do znacznie większej stabilizacji estymacji.

Odpowiednikiem metody NMF w reprezentacji danych przedstawionych w postaci tensorów wielomodalnych jest metoda NTF. Estymacja czynników w tej metodzie jest zwykle realizowana przez cykliczne stosowanie metody NMF do macierzy, otrzymanych w wyniku rozwinięcia (matrycyzacji) tensora obserwacji względem kolejnych modów. Tak więc, NTF realizowany jest za pomocą metody NMF, ale nie są to jednak metody równoważne pod kątem właściwości estymowanych cech. Przykładowo, cechy estymowane metodą NMF z macierzy zwektoryzowanych obrazów twarzy mogą charakteryzować się odmienną lokalnością niż cechy estymowane podstawową metodą NTF z tensora obrazów uporządkowanych wzdłuż jednego z modów. Komponenty ukryte otrzymane za pomocą modelu NTF wzdłuż modu uporządkowania obrazów mogą mieć lepsze właściwości dyskryminacyjne niż wektory macierzy kodującej w NMF. Badania przedstawione w pracy (rozdz. 7) pokazują, że algorytm UO-NTD pozwala uzyskać trochę większą dokładność klasyfikacji obrazów twarzy z bazy ORL niż metody NMF. Można więc przypuszczać, że metody nieujemnej dekompozycji tensorów są bardziej odpowiednie do klasyfikacji obrazów wielowymiarowych. Metodami tymi można też ekstrahować cechy multiliniowe z danych wielomodalnych. Przykładowo, stosując metodę NTF do wielomodalnego tensora zbioru spektrogramów, każda estymowana cecha reprezentowana jest wielomodalnym tensorem rzędu pierwszego, gdzie każdy mod odpowiada jednej dziedzinie obserwacji. Przy odpowiedniej informacji apriorycznej o właściwościach cech względem dowolnego modu, łatwiej realizować ich selekcję oraz interpretację. Takie podejście stosowane jest m.in. do ekstrakcji cech multiliniowych w analizie sygnałów EEG [93, 94, 287].

Metoda NMF, pomimo niewątpliwych zalet i szerokiego obszaru zastosowania, ma też pewne ograniczenia. Wiele z nich to pozorne wady, które wynikają raczej z rozpowszechnianych błędnych opinii i generalizowanych wniosków z badań empirycznych. Uważa się bowiem, że metoda NMF nie nadaje się do ekstrakcji dużej liczby komponentów ukrytych, nawet jeśli nadmiarowość obserwacji jest znacząca. Ten powszechnie przyjęty pogląd nie jest w pełni prawdziwy, ponieważ liczba ekstrahowanych komponentów jest silnie zależna od liczby promieni ekstremalnych „widocznych” w stożku wielościanowym, który jest generowany przez dane obserwowane. Jeśli więc zadanie nieujemnej faktoryzacji macierzy jest jednoznaczne i dobrze uwarunkowane (nie ma kolinearnych promieni ekstremalnych), nie ma trudności z ekstrakcją komponentów ukrytych, nawet jeśli ich liczba jest duża. Potwierdzają to badania przeprowadzone w rozdziale 4.11.3, gdzie udało się poprawnie estymować nawet 500 komponentów. Oczywiście im większa jest ta liczba, tym silniejsza musi być nadmiarowość, a to prowadzi do znacznego zwiększenia kosztu obliczeniowego. Jeśli jednak zadanie faktoryzacji jest niejednoznaczne, a dane zaburzone silnym szumem, to nawet przy silnej nadmiarowości obserwacji mogą wystąpić problemy z estymacją kilku komponentów. W takim przypadku informacje aprioryczne o charakterze poszukiwanych czynników mają istotne znaczenie.

W rozdziale 7 zaprezentowano wybrane zastosowania metod nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów. Przyjęto podział zastosowania na trzy podstawowe obszary: ślepa separacja źródeł, grupowanie danych oraz nadzorowaną klasyfikację. Nie oznacza to jednak, że zastosowanie tych metod ogranicza się tylko do tych obszarów. Obecnie metody te stosowane są w tak różnych dziedzinach, jak biochemia, biomedycyna, elektronika, telekomunikacja, geologia, astronomia itp. Jak już wspomniano, skuteczność metody NMF zależy przede wszystkim od danych faktoryzowanych. Jeśli dane te są nieujemne, rzadkie i występuje silna nadmiarowość obserwacji, można przypuszczać, że komponenty ukryte estymowane metodą NMF będą użyteczne i zgodne z oczekiwaniami. Nie można jednak zakładać, że w danym obszarze zastosowań, NMF jest definitywnie efektywniejszy niż inne metody redukcji wymiarowości modelu lub ekstrakcji cech. Wspomniane obszary badań są intensywnie rozwijane od wielu dziesięcioleci i w literaturze można odnaleźć wiele różnych kierunków ich rozwoju. Metody NMF i NTF to tylko jedne z narzędzi, które mogą być wykorzystane do rozwiązania specyficznych zadań. Liczne wyniki badań przedstawione w literaturze oraz w rozdziale 7 sugerują, że metoda NMF jest efektywniejsza w zadaniach klasyfikacji obrazów (np. obrazów twarzy), dokumentów tekstowych i wyrażeń genów niż metoda komponentów głównych. Są to

jednak badania eksperymentalne, a zatem wnioski odnoszą się jedynie do pewnej, dość wąskiej klasy danych obserwowanych. Wynika z tego, że metody NMF i NTF mają duży potencjał aplikacyjny, ale ich skuteczność w rozwiązywaniu danego zadania zależy od wielu czynników.

Prace z zakresu metod nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów, publikowane w ciągu ostatnich kilkunastu lat, pokazują zdumiewające tempo rozwoju tych metod. W niniejszej pracy przedstawiono gruntowny przegląd metod z pierwszej dekady XXI wieku. Kierunki rozwoju z ostatnich kilku lat zostały potraktowane w tej pracy selektywnie, skupiając się przede wszystkim na osiągnięciach autorskich.

W obszarze najnowszych badań dotyczących omawianych zagadnień należy wyróżnić następujące kierunki, które nie zostały omówione w niniejszej pracy. Kierunki te mogą istotnie wpływać na rozwój metod nieujemnej faktoryzacji macierzy i tensorów w najbliższej przyszłości.

- *Podejście probabilistyczne.* Jak już wspomniano, zadanie minimalizacji zreregularyzowanej funkcji celu równoważne jest zadaniu maksymalizacji funkcji wiarygodności lub prawdopodobieństwa *a posteriori*. Obecnie coraz częściej spotyka się modelowanie estymowanych czynników rozkładami *a priori* sprzężonymi ze względu na rodzinę rozkładów opisujących dane obserwowane, co w rezultacie prowadzi do rozkładów *a posteriori* z tej samej rodziny co rozkład *a priori*. Z kolei, hiperparametry rozkładów *a priori* modeluje się rozkładami hierarchicznymi. W wyniku takiego podejścia estymacja parametrów może być realizowana przez pełne wnioskowanie bayesowskie, co znacznie ułatwia zadanie estymacji hiperparametrów (czyli odpowiedników parametrów regularyzujących). Do wyznaczenia estymatorów o największej wiarygodności stosuje się różne metody, takie jak maksymalizacja wartości oczekiwanej algorytmem EM (ang. *expectation-maximization*), próbkowanie Gibbsa (ang. *Gibbs sampler*) lub bayesowska zasada wariacyjna (ang. *Variational Bayes*). Takie podejście do estymacji czynników w modelu NMF można odnaleźć w wielu pracach, np. [57, 108, 129, 191, 392, 393, 471, 523].

W obszarze rozwoju metody NMF zarysowuje się również kolejny kierunek związany z podejściem probabilistycznym. Jest to nieparametryczna estymacja bayesowska, która oprócz estymacji czynników umożliwia również estymację liczby komponentów ukrytych [191, 192, 392, 471]. Do grupy bayesowskich metod estymacji rzędu faktoryzacji należy również metoda ARD (ang. *Automatic Relevance Determination*) [422], blisko związana z tzw. rzadkim uczeniem bayesowskim (ang. SBL – *Sparse Bayesian Learning*).

- *Dynamiczny model NMF.* Źródłowe sygnały estymowane metodą NMF często mają pewną strukturę czasową, która z kolei może być opisana innym modelem, np. łańcuchem Markowa. W najnowszych publikacjach nt. modelu NMF można również odnaleźć modele hybrydowe, łączące NMF z ukrytymi modelami Markowa (ang. HMM – *Hidden Markov Model*) [312, 313, 315, 323, 325, 337]. Takie podejście użyteczne jest w opisie sygnałów, które zawierają ukryte profile czasowe. Przykładowo, sygnał mowy w każdej ramce czasowej jest częścią pewnego fonemu (jednostki mowy), a więc może być modelowany zmienną dyskretną o skończonej liczbie stanów. W innym zastosowaniu dyskretna zmienna stanu może określać profil aktywacji elementów tzw. słownika, czyli bazy wektorów składowych. Dynamiczny model NMF może też oznaczać połączenie nieujemnego systemu dynamicznego z modelem NMF lub predykcję zmiennych ukrytych za pomocą filtru Kalmana [137, 314]. Takie podejście jest bardzo skuteczne w wygładzaniu lub filtracji profilu czasowego sygnałów źródłowych.
- *Separowalny model NMF.* W obszarze badań dotyczących nieujemnej faktoryzacji macierzy zarysowuje się nowy kierunek rozwoju algorytmów geometrycznych, które nie bazują na niewypukłej minimalizacji zadanej funkcji celu. Jest to podejście blisko związane z wypukłą strukturą modelu NMF. Algorytmy separowalnego modelu NMF poszukują w zbiorze wektorów obserwowanych takich  $J$  wektorów, które tworzą promienie ekstremalne stożka wielościanowego, generowanego wektorami obserwacji. Arora i pozostali autorzy pracy [8] udowodnili, że istnieje taki algorytm dla separowalnego modelu NMF, który znajduje dokładne rozwiązanie w czasie wielomianowym ze względu na  $I$ ,  $T$  oraz  $J$ . W pracy [377] zadanie separowalnego modelu NMF wyrażono przez zadanie programowania liniowego i pokazano, że takie rozwiązanie jest bardziej odporne na zakłócenia szumowe niż algorytm w pracy [8]. W kolejnych pracach [124, 146, 150, 246, 286] pojawiają się jeszcze doskonalsze algorytmy do rozwiązania omawianego zadania, które wykazują się większą odpornością na zaburzenia szumowe (porównywalną z typowymi algorytmami NMF) oraz automatycznie określają rząd faktoryzacji.
- *Model minimalizacji rzędu.* Zadanie estymacji faktora niskiego rzędu w modelu NMF można również wyrazić przez zadanie minimalizacji normy nuklearnej:  $\min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{X}\|_*$ , p.o.  $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{Y}$  oraz  $\mathbf{X} \geq \mathbf{0}$ , gdzie  $\|\mathbf{X}\|_* = \sum_{j=1}^J \sigma_j(\mathbf{X})$  jest normą nuklearną, a  $\sigma_i(\mathbf{X})$  jest  $i$ -tą wartością osobliwą macierzy  $\mathbf{X}$ . Norma nuklearna jest szczególnie użyteczna w poszukiwaniu rzadkich fakto-

rów o minimalnym rzędzie. Obecnie zagadnienia związane z minimalizacją normy nuklearnej są intensywnie badane. Pojawiły się też pierwsze algorytmy dla NMF, które bazują na takim podejściu [263, 460, 464].

- *Podejście algorytmiczne*: Zagadnienie wyboru algorytmu numerycznego zarówno dla standardowego modelu NMF, jak i jego różnych wariantów i struktur nadal znajduje się w obszarze zainteresowań wielu badaczy. Obszerny przegląd algorytmów przedstawiono w rozdziale 4. Pośród ostatnio zaproponowanych strategii numerycznych do rozwiązywania zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensora na szczególne wyróżnienie zasługują: iteracje Bregmana [212, 401], metoda naprzemiennych kierunków (ang. ADMM – *Alternating Direction Method of Multipliers*) [50, 124, 285, 464], algorytmy prymalno-dualne [65, 460], algorytmy gradientów proksymalnych i proksymalno-liniowych [462, 463], a także metoda podziału proksymalnego (ang. *proximal splitting*) [412].
- *Inne strategie obliczeniowe*. Nieujemna faktoryzacja macierzy może być również realizowana za pomocą elementarnych operacji na jej wierszach i kolumnach, jeśli macierz ta spełnia określone warunki. Kaczorek [218] zaproponował prostą metodę nieujemnej faktoryzacji macierzy z cykliczną strukturą. Do najnowszych kierunków rozwoju metod faktoryzacji macierzy (łącznie z modelem NMF) należy również zaliczyć strukturyzowaną faktoryzację macierzy, którą obszernie omówiono w pracy [9]. W takich metodach faktoryzacji zakłada się, że estymowane faktory mają specyficzną strukturę.
- *Modele dekompozycji tensorów*. Ostatnie lata rozwoju omawianych zagadnień zaowocowały również wieloma nowymi modelami dekompozycji tensorów, zwłaszcza strukturalnymi lub blokowymi. Są to modele, takie jak BTM (ang. *Block Term Decomposition*), KPD (ang. *Kronecker Product Decomposition*) oraz strukturalne modele CPD [353, 355, 411]. Modele te stosowane są w ekstrakcji cech multiliniowych oraz strukturalnych wzorców z tensorów wielomodalnych.
- *Model NMF „on-line”*. Jest to taka wersja modelu NMF, która zakłada aktualizację wektorów bazowych na podstawie obserwacji zbieranych sekwencyjnie i często przetwarzanych w czasie rzeczywistym. W rezultacie złożoność obliczeniowa takiego podejścia zmniejsza się z  $O(IJT)$  do  $O(IJ)$ , gdy stosuje się algorytmy multiplikatywne. Taki model jest również intensywnie rozwijany, zwłaszcza w kontekście zastosowań do analizy długich nagrań akustycznych [51, 262, 528].

- *Hybrydowy model NMF*. Każda z metod ekstrakcji cech lub redukcji wymiarowości modelu ma specyficzną charakterystykę i ograniczenia. Aby rozszerzyć zakres możliwości danej metody, możliwe jest łączenie dwóch lub więcej metod w taki sposób, aby powstała hybryda łączyła zalety metod składowych. Przykładem takiego podejścia może być narzędzie do klasyfikacji nadzorowanej, łączące NMF z klasyfikatorem SVM [99, 531] (rozdz. 3.2.4) lub algorytm GNMF [47, 49], który zintegrowano z mapami Laplace'a. W metodach tych uzyskuje się zwiększoną dokładność klasyfikacji i odporność na zaburzenia modelu. Istnieją również metody hybrydowe, które np. pozwalają znacząco zredukować koszt obliczeniowy przy niezmięnionej lub nawet lepszej jakości estymacji czynników. Do metod takich należy zaliczyć metodę lraNMF [525], która łączy NMF z LRA (ang. *Low-Rank Approximation*). Metoda ta składa się z dwóch zasadniczych kroków; w pierwszym następuje silna redukcja wymiarowości modelu otrzymywana metodą LRA, a następnie nieujemne czynniki uzyskiwane są metodą NMF. Takie podejście nie tylko zwiększa efektywność obliczeniową, ale także znacząco poprawia odporność metody hybrydowej na zaburzenia szumowe. Do innych przykładowych metod hybrydowych należy zaliczyć: PLSI-NMF [111], a także wspomniany model HMM-NMF [312, 313, 315, 323, 325, 337].
- *Skalowalne modele faktoryzacji*. Skalowalność systemu informatycznego to jego zdolność do przetwarzania bardzo dużych danych w rozsądnym czasie. W takim kontekście należy rozumieć skalowalny model NMF. Obecnie metody faktoryzacji macierzy lub tensorów coraz częściej stosowane są do przetwarzania lub analizy bardzo dużych zbiorów danych, wynikających z dużej skali problemów. Są to macierze lub tensory o liczbie niezerowych elementów, często przekraczającej  $10^{12}$ . Do przetwarzania tak ogromnych danych, nie tylko istotne są zasoby sprzętowe i właściwości numeryczne algorytmu obliczeniowego, ale także sposób jego implementacji w danym środowisku obliczeniowym. Skalowalność algorytmu wynika więc z jego zdolności do implementowania go w różnych architekturach komputerowych, zwłaszcza realizujących obliczenia równoległe lub rozproszone. Zrównoleglanie procesów obliczeniowych w celu współbieżnego przetwarzania danych na maszynach wielordzeniowych jest już powszechnie stosowane w rozwiązywaniu zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy lub tensorów. Efektywna implementacja algorytmów obliczeniowych w środowisku obliczeń równoległych nie jest jednak zadaniem łatwym. Należy uwzględnić nie tylko charakterystykę zadań obliczeniowych, ale też strukturę przetwarzanych danych, np. rozkład

---

elementów niezerowych. Obecnie istnieją różnorakie implementacje algorytmów NMF [114, 219, 452] oraz metod dekompozycji tensorów [349, 352] w środowiskach obliczeń równoległych. Porównanie efektywności obliczeń równoległych, implementowanych w standardach MPI i CUDA dla modelu NMF pokazano w pracy [301].

Skalowalność algorytmów NMF może być również realizowana przez obliczenia rozproszone, wykonywane na wielu i często geograficznie rozproszonych klastrach. Przykładowo, takie podejście oparte na platformie **MapReduce** pokazano w pracach [144, 284]. Platforma ta została również wykorzystana w tzw. **CloudNMF** [276], czyli metodzie NMF realizowanej w chmurze obliczeniowej. Jest to bardzo efektywne narzędzie do rozwiązywania bardzo dużych zadań nieujemnej faktoryzacji macierzy, ponieważ „ciężar” obliczeń przeniesiony jest na serwery o dużej mocy obliczeniowej i dużych zasobach pamięci, a użytkownicy mają dostęp do udostępnianych usług przez terminale klienckie. Ponadto jest to narzędzie bardzo elastyczne dla użytkowników, ze względu na implementacje typu **Open Source**.





## Bibliografia

- [1] AHN J.-H., KIM S., OH J.-H., CHOI S., *Multiple nonnegative-matrix factorization of dynamic PET images*, [In:] *Proceedings of Asian Conference on Computer Vision (ACCV)*, Jeju Island, Korea, January 2004, Vol. 1, 1009–1013.
- [2] AKAIKE H., *A new look at the statistical model identification*, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1974, Vol. 19, No. 6, 716–723.
- [3] ALI S.M., SILVEY S.D., *A general class of coefficients of divergence of one distribution from another*, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 1966, Vol. 28, No. 1, 131–142.
- [4] AMARI S.-I., *Differential-Geometrical Methods in Statistics*, [In:] *Lecture Notes in Statistics*, Vol. 28, J. Berger et al. (Eds.), Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg 1985.
- [5] AN S., YOO J., CHOI S., *Manifold-respecting discriminant nonnegative matrix factorization*, *Pattern Recognition Letters*, 2011, Vol. 32, No. 6, 832–837.
- [6] AN S., YUN J.-M., CHOI S., *Multiple kernel nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2011)*, Prague, Czech Republic, May 22–27, 2011, 1976–1979.
- [7] ANS B., HERAULT J., JUTTEN C., *Adaptive neural architectures: detection of primitives*, [In:] *Proceedings of COGNITIVA '85*, Paris, France, 1985, 593–597.
- [8] ARORA S., GE R., KANNAN R., MOITRA A., *Computing a nonnegative matrix factorization – provably*, [In:] *Proceedings of the 44-th Symposium on Theory of Computing (STOC '12)*, New York, USA, May 19–22, 2012, ACM Press, New York, NY, 145–162.
- [9] BACH F., *Convex relaxations of structured matrix factorizations*, [Online] CoRR, 2013, Vol. abs/1309.3117, <http://xxx.tau.ac.il/abs/1309.3117>.
- [10] BARZILAI J., BORWEIN J.M., *Two-point step size gradient methods*, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 1988, Vol. 8, No. 1, 141–148.
- [11] BECK A., TEBoulLE M., *A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems*, *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 2009, Vol. 2, No. 1, 183–202.
- [12] BEHNKE S., *Discovering hierarchical speech features using convolutional nonnegative matrix factorization*, [In:] *International Joint Conference on Neural Networks*, Portland, 2003, Vol. 4, 2758–2763.
- [13] BELKIN M., NIYOGI P., *Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, T.G. Dietterich, S. Becker, Z. Ghahramani (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2001, Vol. 14, 585–591.

- 
- [14] BENAROYA L., GRIBONVAL R., BIMBOT F., *Non-negative sparse representation for wiener based source separation with a single sensor*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2003)*, Hong Kong, April 6–10, 2003, 613–616.
- [15] BENTHEM M.H.V., KEENAN M.R., *Fast algorithm for the solution of large-scale non-negativity-constrained least squares problems*, *Journal of Chemometrics*, 2004, Vol. 18, 441–450.
- [16] BERMAN A., *Rank factorization of nonnegative matrices*, *SIAM Review*, 1973, Vol. 15, No. 3, 655–655.
- [17] BERMAN A., PLEMMONS, R.J., *Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences*, SIAM Press Classics Series, Philadelphia, 1994.
- [18] BERRY M., BROWNE M., *Email surveillance using non-negative matrix factorization*, *Computational and Mathematical Organization Theory*, 2005, Vol. 11, No. 3, 249–264.
- [19] BERRY M., BROWNE M., LANGVILLE A.N., PAUCA P., PLEMMONS R.J., *Algorithms and applications for approximate nonnegative matrix factorization*, *Computational Statistics and Data Analysis*, 2007, Vol. 52, No. 1, 155–173.
- [20] BERTERO M., BOCCACCI P., *Introduction to Inverse Problems in Imaging*, Institute of Physics Publishing, Bristol, UK, 1998.
- [21] BERTIN N., BADEAU R., VINCENT E., *Enforcing harmonicity and smoothness in Bayesian non-negative matrix factorization applied to polyphonic music transcription*, *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, 2010, Vol. 18, No. 3, 538–549.
- [22] BERTSEKAS D.P., *On the Goldstein-Levitin-Polyak gradient projection method*, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1976, Vol. 21, No. 2, 174–184.
- [23] BERTSEKAS D.P., *Nonlinear Programming*, Athena Scientific, Belmont, MA, 1999.
- [24] BESAG J., *Spatial interactions and the statistical analysis of lattice systems*, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 1974, Vol. 36, 192–236.
- [25] BESAG J., *Toward Bayesian image analysis*, *Journal of Applied Statistics*, 1989, Vol. 16, 395–407.
- [26] BIGGS M., GHODSI A., VAVASIS S., *Nonnegative matrix factorization via rank-one downdate*, [In:] *Proceedings of the 25-th International Conference on Machine Learning (ICML-2008)*, Helsinki, Finland, July 2008, ACM Press, New York 2008, 64–71.
- [27] BIOUCAS-DIAS J.M., PLAZA A., DOBIGEON N., PARENTE M., DU Q., GADER P., CHANUSSOT J., *Hyperspectral unmixing overview: Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches*, *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2012, Vol. 5, No. 2, 354–379.
- [28] BIRGIN E.G., MARTÍNEZ J.M., RAYDAN M., *Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets*, *SIAM Journal on Control and Optimization*, 2000, Vol. 10, 1196–1211.
- [29] BISHOP C.M., *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer, Singapore 2007.
- [30] BJÖRCK A., *Numerical Methods for Least-Squares Problems*, SIAM, Philadelphia 1996.
- [31] BONETTINI S., *Inexact block coordinate descent methods with application to non-negative matrix factorization*, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 2011, Vol. 31, No. 4, 1431–1452.
- [32] BONETTINI S., SERAFINI T., *Non-negatively constrained image deblurring with an inexact interior point method*, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2009, Vol. 231, 236–248.

- 
- [33] BOUMAN C.A., SAUER K., *A generalized Gaussian image model for edge-preserving MAP estimation*, IEEE Transactions on Image Processing, 1993, Vol. 2, 296–310.
- [34] BOUTSIDIS C., GALLOPOULOS E., *SVD based initialization: A head start for nonnegative matrix factorization*, Pattern Recognition, 2008, Vol. 41, 1350–1362.
- [35] BREGMAN L., *The relaxation method of finding a common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming*, USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1967, Vol. 7, 200–217.
- [36] BRO R., JONG S.D., *A fast non-negativity-constrained least squares algorithm*, Journal of Chemometrics, 1997, Vol. 11, 393–401.
- [37] BRO R., KIERS H.A.L., *A new efficient method for determining the number of components in PARAFAC models*, Journal of Chemometrics, 2003, Vol. 17, No. 5, 274–286.
- [38] BRUNET J.P., TAMAYO P., GOLUB T.R., MESIROV J.P., *Metagenes and molecular pattern discovery using matrix factorization*, Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS), USA, 2004, Vol. 101, No. 12, 4164–4169.
- [39] BUCIU I., NIKOLAIDIS N., PITAS I., *On the initialization of the DNMF algorithm*, [In:] *Proceedings of International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS)*, IEEE Press, Island of Kos, Greece, 2006.
- [40] BUCIU I., NIKOLAIDIS N., PITAS I., *Nonnegative matrix factorization in polynomial feature space*, IEEE Transactions on Neural Networks, 2008, Vol. 19, No. 6, 1090–1100.
- [41] BUCIU I., PITAS I., *Application of non-negative and local nonnegative matrix factorization to facial expression recognition*, [In:] *Proceedings of 17th International Conference on Pattern Recognition (ICPR)*, Cambridge, UK, August 23–26, 2004, 288–291.
- [42] BUCIU I., PITAS I., *NMF, LNMF, and DNMF modeling of neural receptive fields involved in human facial expression perception*, Journal of Visual Communication and Image Representation, 2006, Vol. 17, No. 5, 958–969.
- [43] BYRNE C.L., *Accelerating the EMMML algorithm and related iterative algorithms by re-scaled block-iterative (RBI) methods*, IEEE Transactions on Image Processing, 1998, Vol. IP-7, 100–109.
- [44] BYRNE C.L., *Alternating minimization and alternating projection algorithms: A tutorial*, Technical report, Department of Mathematical Sciences, University of Massachusetts, Lowell, March 2011.
- [45] CAI D., HE X., HAN J., *Document clustering using locality preserving indexing*, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2005, Vol. 17, No. 12, 1624–1637.
- [46] CAI D., HE X., HAN J., *Locally consistent concept factorization for document clustering*, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2011, Vol. 23, No. 6, 902–913.
- [47] CAI D., HE X., HAN J., HUANG T., *Graph regularized nonnegative matrix factorization for data representation*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2011, Vol. 33, No. 8, 1548–1560.
- [48] CAI D., HE X., WU X., BAO H., HAN J., *Locality preserving nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 21-st International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI 2009)*, Morgan Kaufmann Publishers Inc., Pasadena, California, 2009, 1010–1015.
- [49] CAI D., HE X., WU X., HAN J., *Nonnegative matrix factorization on manifold*, [In:] *Proceedings of 8-th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM)*, Pisa, Italy, December 15–19, 2008, 63–72.

- [50] CAI X., CHEN Y., HAN D., *Nonnegative tensor factorizations using an alternating direction method*, *Frontiers of Mathematics in China*, 2013, Vol. 8, No. 1, 3–18.
- [51] CAO B., SHEN D., SUN J.-T., WANG X., YANG Q., CHEN Z., *Detect and track latent factors with online nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI)*, Hyderabad, India, January 6–12, 2007, 2689–2694.
- [52] CARMONA-SAEZ P., PASCUAL-MARQUI R.D., TIRADO F., CARAZO J.M., PASCUAL-MONTANO A., *Biclustering of gene expression data by non-smooth non-negative matrix factorization*, *BMC Bioinformatics*, 2006, Vol. 7, No. 78, 1–18.
- [53] CARROLL J.D., CHANG J.J., *Analysis of individual differences in multidimensional scaling via an  $n$ -way generalization of Eckart–Young decomposition*, *Psychometrika*, 1970, Vol. 35, 283–319.
- [54] CARROLL J.D., DE SOETE G., PRUZANSKY S., *Fitting of the latent class model via iteratively reweighted least squares CANDECOMP with nonnegativity constraints*, [In:] *Multiway data analysis*, R. Coppi, S. Bolasco (Eds.), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1989, 463–472.
- [55] CATRAL M., HAN L., NEUMANN M., PLEMMONS R.J., *On reduced rank nonnegative matrix factorization for symmetric nonnegative matrices*, *Linear Algebra and its Applications*, Special Issue on Positivity in Linear Algebra, 2004, Vol. 393, 107–126.
- [56] CATTELL R.B., *Factor analysis*, Wiley, New York, 1952.
- [57] CEMGIL A.T., *Bayesian inference in non-negative matrix factorisation models*, *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2009, No. 785152.
- [58] CHAN T.-H., MA W.-K., AMBIKAPATHI A.-M., CHI C.-Y., *A simplex volume maximization framework for hyperspectral endmember extraction*, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2011, Vol. 49, No. 11, 4177–4193.
- [59] CHEN G., WANG F., ZHANG C., *Collaborative filtering using orthogonal nonnegative matrix tri-factorization*, *Information Processing and Management*, 2009, Vol. 45, No. 3, 368–379.
- [60] CHEN S.S., DONOHO D.L., *Basis pursuit*, [In:] *28-th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, Pacific Grove, CA, USA, October 1994, Vol. 1, 41–44.
- [61] CHEN W., GUILLAUME M., *HALS-based NMF with flexible constraints for hyperspectral unmixing*, *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*, 2012, Vol. 54, 1–14.
- [62] CHEN Z., CICHOCKI A., RUTKOWSKI T.M., *Constrained non-negative matrix factorization method for EEG analysis in early detection of Alzheimer’s disease*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, ICASSP 2006*, Toulouse, France, May 14–19, 2006, Vol. 5, 893–896.
- [63] CHERNOFF H., *A measure of asymptotic efficiency for tests of a hypothesis based on a sum of observations*, *Annals of Mathematical Statistics*, 1952, Vol. 23, 493–507.
- [64] CHOI S., *Algorithms for orthogonal nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, Hong Kong, June 1–8, 2008, 1828–1832.
- [65] CHOUZENOUX E., LEGENDRE M., MOUSSAOUI S., IDIER J., *Fast constrained least squares spectral unmixing using primal-dual interior point optimization*, *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2014, Vol. 7, No. 1, 59–69.

- 
- [66] CHU M.T., LIN M.M., *Low dimensional polytope approximation and its applications to nonnegative matrix factorization*, SIAM Journal of Scientific Computing, 2008, Vol. 30, 1131–1151.
- [67] CHU M.T., FUNDERLIC R.E., *The centroid decomposition: Relationships between discrete variational decompositions and SVDs*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2002, Vol. 23, 1025–1044.
- [68] CHUNG F.R.K., *Spectral graph theory*, [In:] *Proceedings of CBMS Regional Conference Series in Mathematics*, AMS Press, February 1997, No. 92.
- [69] CICHOCKI A., AMARI S.-I., *Adaptive Blind Signal and Image Processing (New revised and improved edition)*, John Wiley, New York 2003.
- [70] CICHOCKI A., AMARI S.-I., *Families of alpha-beta-and gamma-divergences: Flexible and robust measures of similarities*, Entropy, 2010, Vol. 12, 1532–1568.
- [71] CICHOCKI A., AMARI S.-I., ZDUNEK R., KOMPASS R., HORI G., HE Z., *Extended SMART algorithms for non-negative matrix factorization*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, L. Zadeh, J. Zurada (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 4029, Berlin–Heidelberg 2006, 548–562, 8-th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2006), Zakopane, Poland, June 25–29, 2010.
- [72] CICHOCKI A., CRUCES S., AMARI S.-I., *Generalized alpha-beta divergences and their application to robust nonnegative matrix factorization*, Entropy, 2011, Vol. 13, 134–170.
- [73] CICHOCKI A., JANKOVIC M., ZDUNEK R., AMARI S.-I., *Sparse super symmetric tensor factorization*, [In:] *Neural Information Processing*, M. Ishikawa, K. Doya, H. Miyamoto, T. Yamakawa (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4984, Berlin–Heidelberg 2008, 781–790, 14-th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2007), Kitakyushu, Japan, November 13–16, 2007.
- [74] CICHOCKI A., LEE H., KIM Y.-D., CHOI S., *Non-negative matrix factorization with alpha-divergence*, Pattern Recognition Letters, 2008, Vol. 29, No. 9, 1433–1440.
- [75] CICHOCKI A., PHAN A.H., *Fast local algorithms for large scale nonnegative matrix and tensor factorizations*, IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences, 2009, Vol. E92-A, No. 3, 708–721.
- [76] CICHOCKI A., PHAN A.H., CAIAFA C., *Flexible HALS algorithms for sparse non-negative matrix/tensor factorization*, [In:] *Proceedings of 18-th IEEE Workshops on Machine Learning for Signal Processing*, Cancun, Mexico, October 16–19, 2008.
- [77] CICHOCKI A., PHAN A.H., ZDUNEK R., ZHANG L.-Q., *Flexible component analysis for sparse, smooth, nonnegative coding or representation*, [In:] *Neural Information Processing*, M. Ishikawa, K. Doya, H. Miyamoto, T. Yamakawa (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4984, Berlin–Heidelberg 2008, 811–820, 14-th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2007), Kitakyushu, Japan, November 13–16, 2007.
- [78] CICHOCKI A., ZDUNEK R., *Multilayer nonnegative matrix factorization*, Electronics Letters, 2006, Vol. 42, No. 16, 947–948.
- [79] CICHOCKI A., ZDUNEK R., *NMFLAB for Signal and Image Processing*, Technical report, Laboratory for Advanced Brain Signal Processing, BSI, RIKEN, Saitama, Japan 2006.
- [80] CICHOCKI A., ZDUNEK R., *Multilayer nonnegative matrix factorization using projected gradient approaches*, International Journal of Neural Systems, 2007, Vol. 17, No. 6, 431–446.

- [81] CICHOCKI A., ZDUNEK R., *Regularized alternating least squares algorithms for non-negative matrix/tensor factorization*, [In:] *Advances in Neural Networks*, D. Liu, S. Fei, Z. Hou, H. Zhang, C. Sun (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4493, Berlin–Heidelberg 2007, 793–802, 4-th International Symposium on Neural Networks (ISNN 2007), Nanjing, China, June 3–7, 2007.
- [82] CICHOCKI A., ZDUNEK R., AMARI S.-I., *Csiszar’s divergences for non-negative matrix factorization: Family of new algorithms*, [In:] *Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, J. Rosca, D. Erdogmus, J. Principe, S. Haykin (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 3889, Berlin–Heidelberg 2006, 32–39, 6-th International Conference (ICA 2006), Charleston, USA, March 5–8, 2006.
- [83] CICHOCKI A., ZDUNEK R., AMARI S.-I., *New algorithms for non-negative matrix factorization in applications to blind source separation*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, (ICASSP 2006)*, Toulouse, France, May 14–19, 2006, Vol. 5, 621–624.
- [84] CICHOCKI A., ZDUNEK R., AMARI S.-I., *Hierarchical ALS algorithms for nonnegative matrix and 3D tensor factorization*, [In:] *Independent Component Analysis and Signal Separation*, M. Davies, C. James, S. Abdallah, M. Plumbley (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4666, Berlin–Heidelberg 2007, 169–176, 7-th International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2007), London, UK, September 2007.
- [85] CICHOCKI A., ZDUNEK R., AMARI S.-I., *Nonnegative matrix and tensor factorization*, *IEEE Signal Processing Magazine*, 2008, Vol. 25, No. 1, 142–145.
- [86] CICHOCKI A., ZDUNEK R., AMARI S.-I., HORI G., UMENO K., *Signal separating device, signal separating method, information recording medium, and program*, US Patent, October 9, 2012. No. US 8 285 773 B2.
- [87] CICHOCKI A., ZDUNEK R., CHOI S., PLEMMONS R.J., AMARI S.-I., *Nonnegative tensor factorization using Alpha and Beta divergencies*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2007)*, Honolulu, Hawaii, April 15–20, 2007, Vol. III, 1393–1396.
- [88] CICHOCKI A., ZDUNEK R., CHOI S., PLEMMONS R.J., AMARI S.-I., *Novel multi-layer non-negative tensor factorization with sparsity constraints*, [In:] *Adaptive and Natural Computing Algorithms*, B. Beliczynski, A. Dzielinski, M. Iwanowski, B. Ribeiro (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4432, Berlin–Heidelberg 2007, 271–280, 8-th International Conference Adaptive and Natural Computing Algorithms (ICANNGA 2007) Warsaw, April 11–14, 2007.
- [89] CICHOCKI A., ZDUNEK R., PHAN A.H., AMARI S.-I., *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations: Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation*, Wiley and Sons, Chichester, UK, 2009.
- [90] COHEN J.E., ROTHBLUM U.G., *Nonnegative ranks, decompositions, and factorizations of nonnegative matrices*, *Linear Algebra and its Applications*, 1993, Vol. 190, 149–168.
- [91] COČ M., BURRED J.J., *Bayesian non-negative matrix factorization with learned temporal smoothness priors*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, F. Theis *et al.* (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7191, Berlin–Heidelberg 2012, 280–287, 10-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2012), Tel Aviv, Israel, March 12–15, 2012.

- 
- [92] COMBETTES P.L., WAJS V.R., *Signal recovery by proximal forward-backward splitting*, Multiscale Modeling and Simulation, 2005, Vol. 4, No. 4, 1168–1200.
- [93] CONG F., PHAN A.H., ASTIKAINEN P., ZHAO Q., WU Q., HIETANEN J.K., RISTANIEMI T., CICHOCKI A., *Multi-domain feature extraction for small event-related potentials through nonnegative multi-way array decomposition from low dense array EEG*, International Journal of Neural Systems, 2013, Vol. 23, No. 2.
- [94] CONG F., PHAN A.H., ZHAO Q., HUTTUNEN-SCOTT T., KAARTINEN J., RISTANIEMI T., LYTYNEN H., CICHOCKI A., *Benefits of multi-domain feature of mismatch negativity extracted by non-negative tensor factorization from EEG collected by low-density array*, International Journal of Neural Systems, 2012, Vol. 22, No. 6.
- [95] COTTER S.F., RAO B.D., ENGAN K., KREUTZ-DELGADO K., *Sparse solutions to linear inverse problems with multiple measurement vectors*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2005, Vol. 53, No. 7, 2477–2488.
- [96] CSISZÁR I., *Eine Informations Theoretische Ungleichung und ihre Anwendung auf den Beweis der Ergodizität von Markoffschen Ketten*, Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl., 1963, Vol. 8, 85–108.
- [97] CSISZÁR I., *Information measures: A critical survey*, [In:] *Transaction of the 7-th Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions, Random Processes*, Prague, August 18–23, 1974, 73–86.
- [98] CSISZÁR I., TUSNÁDY G., *Information geometry and alternating minimization procedures*, Statistics and Decisions, 1984, Vol. 1, 205–237.
- [99] DAS GUPTA M., XIAO J., *Non-negative matrix factorization as a feature selection tool for maximum margin classifiers*, [In:] *Proceedings of the 2011 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR 2011)*, Washington, DC, USA, 2011, 2841–2848.
- [100] DAUBE-WITHERSPOON M., MUEHLEHNER G., *An iterative image space reconstruction algorithm suitable for volume ECT*, IEEE Transaction on Medical Imaging, 1986, Vol. 5, 61–66.
- [101] DE ALMEIDA A.L.F., FAVIER G., MOTA J.C.M., *PARAFAC-based unified tensor modeling for wireless communication systems with application to blind multiuser equalization*, Signal Processing, 2007, Vol. 87, No. 2, 337–351.
- [102] DE LATHAUWER L., *A link between the canonical decomposition in multilinear algebra and simultaneous matrix diagonalization*, SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications, 2006, Vol. 28, No. 3, 642–666.
- [103] DE LATHAUWER L., DE MOOR B., VANDEWALLE J., *A multilinear singular value decomposition*, SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications, 2000, Vol. 21, 1253–1278.
- [104] DE LEEUW J., YOUNG F., TAKANE Y., *Additive structure in qualitative data: An alternating least squares method with optimal scaling features*, Psychometrika, 1976, Vol. 41, No. 4, 471–503.
- [105] DEMPSTER A.P., LAIRD N.M., RUBIN D.B., *Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm*, Journal of the Royal Statistical Society, 1977, Vol. 39, No. 1, 1–38.
- [106] DEVARAJAN K., *Nonnegative matrix factorization: An analytical and interpretive tool in computational biology*, PLoS Computational Biology, 2008, Vol. 4, No. 7, 1–12.
- [107] DHILLON I.S., SRA S., *Generalized nonnegative matrix approximations with Bregman divergences*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, Y. Weiss, B. Schölkopf, J. Platt (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2006, Vol. 18, 283–290.

- 
- [108] DIKMEN O., FÉVOTTE C., *Maximum marginal likelihood estimation for nonnegative dictionary learning in the gamma-poisson model*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2012, Vol. 60, No. 10, 5163–5175.
- [109] DING C., HE X., SIMON H.D., *On the equivalence of nonnegative matrix factorization and spectral clustering*, [In:] *Proceedings of SIAM International Conference on Data Mining (SDM '05)*, Newport Beach, CA, USA, April 21–23, 2005, 606–610.
- [110] DING C., LI T., JORDAN M.I., *Convex and semi-nonnegative matrix factorizations*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2010, Vol. 32, No. 1, 45–55.
- [111] DING C., LI T., PENG W., *Nonnegative matrix factorization and probabilistic latent semantic indexing: Equivalence, chi-square statistic, and a hybrid method*, [In:] *Proceedings of AAAI National Conf. on Artificial Intelligence (AAAI-06)*, AAAI Press, Boston, Massachusetts, 2006, Vol. 21, 342–347.
- [112] DING C., LI T., PENG W., *On the equivalence between non-negative matrix factorization and probabilistic latent semantic indexing*, Computational Statistics and Data Analysis, 2008, Vol. 52, No. 8, 3913–3927.
- [113] DING C., LI T., PENG W., PARK H., *Orthogonal nonnegative matrix tri-factorizations for clustering*, [In:] *Proceedings of the 12-th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD06)*, ACM Press, New York, NY, USA, 2006, 126–135.
- [114] DONG C., ZHAO H., WANG W., *Parallel nonnegative matrix factorization algorithm on the distributed memory platform*, International Journal of Parallel Programming, 2010, Vol. 38, 117–137.
- [115] DONOHO D., STODDEN V., *When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts?*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, S. Thrun, L. Saul, B. Schölkopf (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2004, Vol. 16, 1141–1148.
- [116] DONOHO D.L., *For most large underdetermined systems of linear equations the minimal  $l_1$ -norm solution is also the sparsest solution*, Communications on Pure and Applied Mathematics, 2004, Vol. 59, 797–829.
- [117] DRINEAS P., MAHONEY M., MUTHUKRISHNAN S., *Relative-error CUR matrix decompositions*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 2008, Vol. 30, 844–881.
- [118] DU Q., KOPRIVA I., SZU H., *Independent-component analysis for hyperspectral remote sensing imagery classification*, Optical Engineering, 2006, Vol. 45, No. 1, 017008.
- [119] DUNN P.K., SMYTH G.K., *Series evaluation of Tweedie exponential dispersion model densities*, Statistics and Computing, 2005, Vol. 15, 267–280.
- [120] EDELMAN A., ARIAS T.A., SMITH S.T., *The geometry of algorithms with orthogonality constraints*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 1998, Vol. 20, No. 2, 303–353.
- [121] EGGERT J., KORNER E., *Sparse coding and NMF*, [In:] *Proceedings of 2004 IEEE International Joint Conference on Neural Networks*, Vol. 4, Budapest, Hungary, July 25–29, 2004, 2529–2533.
- [122] EGUCHI S., KANO Y., *Robustifying maximum likelihood estimation*, Research Memorandum 802, Institute of Statistical Mathematics, Tokyo 2001.
- [123] ELDEN L., *Algorithms for the regularization of ill-conditioned least squares problems*, BIT, 1977, Vol. 17, 134–145.



- 
- [124] ESSER E., MÖLLER M., OSHER S., SAPIRO G., XIN J., *A convex model for nonnegative matrix factorization and dimensionality reduction on physical space*, IEEE Transactions on Image Processing, 2012, Vol. 21, No. 7, 3239–3252.
- [125] FARAJIKHAH S., AMIRSHAHI S.H., *Initialization of nonnegative matrix factorization by gaussian primaries for reconstruction of spectral data*, Optical Review, 2012, Vol. 19, No. 5, 294–305.
- [126] FENG T., LI S.Z., SHUM H.-Y. ZHANG H., *Local nonnegative matrix factorization as a visual representation*, [In:] *Proceedings of the 2-nd International Conference on Development and Learning*, Cambridge, MA, June 2002, 178–193.
- [127] FESSLER J., HERO A.O., *Space-alternating generalized expectation maximization algorithm*, IEEE Transaction on Signal Processing, 1994, Vol. 42, No. 10, 166–175.
- [128] FÉVOTTE C., BERTIN N., DURRIEU J.-L., *Nonnegative matrix factorization with the Itakura-Saito divergence: With application to music analysis*, Neural Computation, 2009, Vol. 21, No. 3, 793–830.
- [129] FÉVOTTE C., CEMGIL A.T., *Nonnegative matrix factorizations as probabilistic inference in composite models*, [In:] *17-th European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2009)*, Glasgow, Scotland, August 24–28, 2009.
- [130] FÉVOTTE C., IDIER J., *Algorithms for nonnegative matrix factorization with the beta-divergence*, Neural Computation, 2010, Vol. 13, No. 3, 1–24.
- [131] FIGUEIREDO M.A.T., NOWAK R.D., WRIGHT S.J., *Gradient projection for sparse reconstruction: Application to compressed sensing and other inverse problems*, IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing, 2007, Vol. 1, No. 4, 586–597.
- [132] FISHER R.A., *The use of multiple measurements in taxonomic problems*, Annals of Eugenics, 1936, Vol. 7, No. 2, 179–188.
- [133] FITZGERALD D., CRANITCH M., COYLE E., *Extended nonnegative tensor factorisation models for musical sound source separation*, Computational Intelligence and Neuroscience, 2008, No. 872425, 1–15.
- [134] FITZGERALD D., CRANITCH M., COYLE E., *On the use of the beta divergence for musical source separation*, [In:] *IET Irish Signals and Systems Conference (ISSC 2009)*, Dublin, June 10–11, 2009, 1–6.
- [135] FRANC V., HLAVÁČ V., NAVARA M., *Sequential coordinate-wise algorithm for the non-negative least squares problem*, [In:] *Computer Analysis of Images and Patterns*, A. Gagalowicz, W. Philips (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 1, Berlin–Heidelberg 2005, 407–414, 11-th International Conference on Computer Analysis of Images and Patterns (CAIP 2005), Versailles, France, September 5–8, 2005.
- [136] FRIEDLANDER M.P., HATZ K., *Computing nonnegative tensor factorizations*, Computational Optimization and Applications, 2008, Vol. 23, No. 4, 631–647.
- [137] FÉVOTTE C., ROUX J.L., HERSHEY J.R., *Non-negative dynamical system with application to speech and audio*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2013)*, Vancouver, Canada, May 26–31, 2013.
- [138] GALATSANOS N., MESAROVIC V., MOLINA R., KATSAGGELOS A., *Hierarchical Bayesian image restoration for partially-known blurs*, IEEE Transactions on Image Processing, 2000, Vol. 9, No. 10, 1784–1797.
- [139] GAUJOUX R., SEOIGHE C., *Semi-supervised nonnegative matrix factorization for gene expression deconvolution: A case study*, Infection, Genetics and Evolution, 2012, Vol. 12, No. 5, 913–921.

- [140] GEERDES H.-F., EISENBLATTER A., SLOBODZIAN P.M., IWAMURA M., DOHLER M., ZDUNEK R., GOULD P., NAWROCKI M.J., *Theoretical models for UMTS radio networks*, [In:] *Understanding UMTS Radio Network – Modelling, Planning and Automated Optimisation: Theory and Practice*, M.J. Nawrocki, M. Dohler, A. Aghvami (Eds.), J. Wiley and Sons, Chichester, UK, 2006.
- [141] GEISSER S., *Predictive Inference*, Chapman and Hall, New York 1993.
- [142] GEMAN S., MCCLURE D., *Statistical methods for tomographic image reconstruction*, Bulletin of the International Statistical Institute, 1987, Vol. LII-4, 5–21.
- [143] GEMAN S., REYNOLDS G., *Constrained parameters and the recovery of discontinuities*, IEEE Transaction on Pattern Analysis Machine Intelligence, 1992, Vol. 14, 367–383.
- [144] GEMULLA R., NIJKAMP E., HAAS P.J., SISMANIS Y., *Large-scale matrix factorization with distributed stochastic gradient descent*, [In:] *Proceedings of the 17-th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD 2011)*, ACM Press, New York, NY, USA, 2011, 69–77.
- [145] GILLIS N., *Sparse and unique nonnegative matrix factorization through data processing*, Journal of Machine Learning Research, 2012, Vol. 13, 3349–3386.
- [146] GILLIS N., *Robustness analysis of hottopixx, a linear programming model for factoring nonnegative matrices*, SIAM Journal on Matrix Analysis Applications, 2013, Vol. 34, No. 3, 1189–1212.
- [147] GILLIS N., GLINEUR F., *Nonnegative Factorization and the Maximum Edge Biclique Problem*, CORE discussion paper, CORE, 2008.
- [148] GILLIS N., GLINEUR F., *Using underapproximations for sparse nonnegative matrix factorization*, Pattern Recognition, 2010, Vol. 43, No. 4, 1676–1687.
- [149] GILLIS N., GLINEUR F., *A multilevel approach for nonnegative matrix factorization*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 2012, Vol. 236, 1708–1723.
- [150] GILLIS N., LUCE R., *Robust near-separable nonnegative matrix factorization using linear optimization* [Online] CoRR, 2013, Vol. arXiv/1302.4385, <http://arxiv.org/abs/1302.4385>.
- [151] GOBINET C., ELHAFID A., VRABIE V., HUEZ R., NUZILLARD D., *About importance of positivity constraint for source separation in fluorescence spectroscopy*, [In:] *Proceedings of European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2005)*, Antalya, Turkey, September 4–8, 2005.
- [152] GOBINET C., PERRIN E., HUEZ R., *Application of nonnegative matrix factorization to fluorescence spectroscopy*, [In:] *Proceedings of European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2004)*, Vienna, Austria, September 6–10, 2004, 1095–1098.
- [153] GOLDSTEIN A.A., *Convex programming in Hilbert space*, Bulletin of the American Mathematical Society, 1964, Vol. 70, No. 5, 709–710.
- [154] GOLUB G.H., LOAN C.F.V., *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, London 1996.
- [155] GONDZIO J., *Interior point methods 25 years later*, European Journal of Operational Research, 2012, Vol. 218, 587–601.
- [156] GRAHN H.F., GELADI P. (Eds.), *Techniques and Applications of Hyperspectral Image Analysis*. John Wiley and Sons, Ltd., Chichester, England, 2007.
- [157] GREEN P.J., *Bayesian reconstruction from emission tomography data using a modified EM algorithm*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 1990, Vol. 9, 84–93.

- 
- [158] GU Q., ZHOU J., *Neighborhood preserving nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of 20-th British Machine Vision Conference (BMVC 2009)*, London, UK, September 7–10, 2009.
- [159] GUAN N., TAO D., LUO Z., SHAW-ETAYLOR J., *MahNMF: Manhattan non-negative matrix factorization* [Online] CoRR, 2012, Vol. abs/1207.3438, <http://arxiv.org/abs/1207.3438>.
- [160] GUAN N., TAO D., LUO Z., YUAN B., *Manifold regularized discriminative nonnegative matrix factorization with fast gradient descent*, *IEEE Transactions on Image Processing*, 2011, Vol. 20, No. 7, 2030–2048.
- [161] GUAN N., TAO D., LUO Z., YUAN B., *Non-negative patch alignment framework*, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2011, Vol. 22, No. 8, 1218–1230.
- [162] GUAN N., TAO D., LUO Z., YUAN B., *NeNMF: An optimal gradient method for non-negative matrix factorization*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2012, Vol. 60, No. 6, 2882–2898.
- [163] GUILLAMET D., BRESSAN M., VITRIÀ J., *A weighted nonnegative matrix factorization for local representations*, [In:] *Proceedings of the 2001 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, (CVPR 2001)*, 2001, Vol. 1, 942–947.
- [164] GUILLAMET D., SCHIELE B., VITRIÀ J., *Analyzing non-negative matrix factorization for image classification*, [In:] *16-th International Conference on Pattern Recognition (ICPR '02)*, Quebec City, Canada, August 2002, Vol. 2, 116–119.
- [165] GUILLAMET D., VITRIÀ J., *Classifying faces with nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of 5-th Catalan Conference for Artificial Intelligence*, Castello de la Plana, Spain, 2002, 24–31.
- [166] GUILLAMET D., VITRIÀ J., SCHIELE B., *Introducing a weighted nonnegative matrix factorization for image classification*, *Pattern Recognition Letters*, 2003, Vol. 24, No. 14, 2447–2454.
- [167] GUIMET F., BOQUE R., FERRE J., *Application of non-negative matrix factorization combined with Fisher's linear discriminant analysis for classification of olive oil excitation-emission fluorescence*, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2006, Vol. 81, No. 1, 94–106.
- [168] GUO Z., WITTMAN T., OSHER S., *L1 unmixing and its application to hyperspectral image enhancement*, [In:] *Defense, Security, and Sensing, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, The International Society for Optical Engineering, Vol. 7334, April 2009, DOI: 10.1117/12.818245.
- [169] HAMZA A., BRADY D., *Reconstruction of reflectance spectra using robust nonnegative matrix factorization*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2006, Vol. 54, No. 9, 3637–3642.
- [170] HAN J., HAN L., NEUMANN M., PRASAD U., *On the rate of convergence of the image space reconstruction algorithm*, *Operators and Matrices*, 2009, Vol. 3, No. 1, 41–58.
- [171] HAN L., NEUMANN M., PRASAD U., *Alternating projected Barzilai-Borwein methods for nonnegative matrix factorization*, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 2009–2010, Vol. 36, 54–82.
- [172] HANSEN P.C., *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia, 1998.

- [173] HARSHMAN R.A., *Foundations of the PARAFAC procedure: Models and conditions for an "explanatory" multimodal factor analysis*, UCLA Working Papers in Phonetics, 1970, Vol. 16, 1–84.
- [174] HARSHMAN R.A., *Determination and proof of minimum uniqueness conditions for PARAFAC*, UCLA Working Papers in Phonetics, 1972, Vol. 22, 111–117.
- [175] HARSHMAN R.A., *PARAFAC2: Mathematical and technical notes*, UCLA Working Papers in Phonetics, 1972, Vol. 22, 30–44.
- [176] HAZAN T., POLAK S., SHASHUA A., *Sparse image coding using a 3D non-negative tensor factorization*, [In:] *International Conference of Computer Vision (ICCV)*, Beijing, China, October 17–20, 2005, 50–57.
- [177] HE X., NIYOGI P., *Locality preserving projections*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, S. Thrun, L. Saul, B. Schölkopf (Eds.) MIT Press, Cambridge, MA, 2004, Vol. 16, 153–160.
- [178] HE Z., CICHOCKI A., XIE S., CHOI K., *Detecting the number of clusters in n-way probabilistic clustering*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2010, Vol. 32, 2006–2021.
- [179] HE Z., CICHOCKI A., ZDUNEK R., CAO J., *CG-M-FOCUSS and its application to distributed compressed sensing*, [In:] *Advances in Neural Networks*, F. Sun, J. Zhang, Y. Tan, J. Cao, W. Yu (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 5263, Berlin–Heidelberg 2008, 237–245, 5-th International Symposium on Neural Networks (ISNN 2008), Beijing, China, September 24–28, 2008.
- [180] HE Z., CICHOCKI A., ZDUNEK R., XIE S., *Improved FOCUSS method with conjugate gradient iterations*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2009, Vol. 57, No. 1, 399–404.
- [181] HE Z., XIE S., ZDUNEK R., ZHOU G., CICHOCKI A., *Symmetric nonnegative matrix factorization (SNMF): Algorithms and application to probabilistic clustering*, IEEE Transactions on Neural Networks, 2011, Vol. 22, No. 12, 2117–2131.
- [182] HEBERT T., LEAHY R., *A generalized EM algorithm for 3-D Bayesian reconstruction from Poisson data using Gibbs priors*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 1989, Vol. 8, No. 2, 194–202.
- [183] HEILER M., SCHNOERR C., *Controlling sparseness in non-negative tensor factorization*, [In:] *Computer Vision – ECCV 2006*, A. Leonardis, H. Bischof, A. Pinz (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 3951, Berlin–Heidelberg 2006, 56–67, 9-th European Conference on Computer Vision, Graz, Austria, May 7–13, 2006.
- [184] HENNEQUIN R., DAVID B., BADEAU R., *Beta-divergence as a subclass of Bregman divergence*, IEEE Signal Processing Letters, 2011, Vol. 18, No. 2, 83–86.
- [185] HESTENES M.R., STIEFEL E., *Method of conjugate gradients for solving linear systems*, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1952, Vol. 49, No. 6, 409–436.
- [186] HEYLEN R., BURAZEROVIC D., SCHEUNDERS P., *Fully constrained least squares spectral unmixing by simplex projection*, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2011, Vol. 49, No. 11, 4112–4122.
- [187] HITCHCOCK F.L., *Multiple invariants and generalized rank of a p-way matrix or tensor*, Journal of Mathematics and Physics, 1927, Vol. 7, 39–79.
- [188] HO N.-D., *Nonnegative Matrix Factorization – Algorithms and Applications*. Thesis/dissertation, FSA/INMA – Département d'ingénierie mathématique, 2008.

- 
- [189] HO N.-D., DOOREN P.V., BLONDEL V., *Descent methods for nonnegative matrix factorization*, [In:] *Numerical Linear Algebra in Signals, Systems and Control*, P.V. Dooren, S. Bhattacharyya, R. Chan, V. Olshevsky, A. Routray (Eds.), Lecture Notes in Electrical Engineering, Springer, Vol. 80, Berlin–Heidelberg 2008, Chapter 13.
- [190] HO N.-D., VAN DOOREN P., *Nonnegative matrix factorization with fixed row and column sums*, *Linear Algebra and Its Applications*, 2007, Vol. 429, No. 5–6, 1020–1025.
- [191] HOFFMAN M.D., *Poisson-uniform nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2012)*, Kyoto, Japan, March 25–30, 2012, 5361–5364.
- [192] HOFFMAN M.D., BLEI D.M., COOK P.R., *Bayesian nonparametric matrix factorization for recorded music*, [In:] *Proceedings of the 27-th International Conference on Machine Learning (ICML)*, Haifa, Israel, June 21–24, 2010, 439–446.
- [193] HOFFMAN T., *Probabilistic latent semantic analysis*, [In:] *Proceedings of the 15-th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, Stockholm, Sweden, 1999, 289–296.
- [194] HOYER P.O., *Non-negative sparse coding*, [In:] *Proceedings of IEEE Workshop on Neural Networks for Signal Processing*, Martigny, Switzerland, 2002, Vol. 2, 557–565.
- [195] HOYER P.O., *Non-negative matrix factorization with sparseness constraints*, *Journal of Machine Learning Research*, 2004, Vol. 5, 1457–1469.
- [196] HUANG K., SIDIROPOULOS N.D., SWAMI A., *NMF revised: New uniqueness results and algorithms*, [In:] *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2013)*, Vancouver, Canada, May 26–31, 2013.
- [197] HUANG K., SIDIROPOULOS N.D., SWAM, A., *Nonnegative matrix factorization revised: Uniqueness and algorithm for symmetric decomposition*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2014, Vol. 62, No. 1, 211–224.
- [198] HUANG X., ZHENG X., YUAN W., WANG F., ZHU S., *Enhanced clustering of biomedical documents using ensemble non-negative matrix factorization*, *Information Sciences*, 2011, Vol. 181, No. 11, 2293–2302.
- [199] HUCK A., GUILLAUME M., BLANC-TALON J., *Minimum dispersion constrained nonnegative matrix factorization to unmix hyperspectral data*, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2010, Vol. 48, No. 6, 2590–2602.
- [200] HYVRINEN A., KARHUNEN J., OJA E., *Independent Component Analysis*. John Wiley, New York 2001.
- [201] IGUAL J., LLINARES R., *Nonnegative matrix factorization of laboratory astrophysical ice mixtures*, *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 2008, Vol. 2, No. 5, 697–706.
- [202] IGUAL J., LLINARES R., SALAZAR A., *Source separation of astrophysical ice mixtures*, [In:] *Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, J. Rosca, D. Erdogmus, J. Principe, S. Haykin (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 3889, Berlin–Heidelberg 2006, 368–375, 6-th International Conference (ICA 2006), Charleston, USA, March 5–8, 2006.
- [203] IORDACHE M., DIAS J., PLAZA A., *Sparse unmixing of hyperspectral data*, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2011, Vol. 49, No. 2, 2014–2039.
- [204] IORDACHE M., DIAS J., PLAZA A., *Total variation spatial regularization for sparse hyperspectral unmixing*, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2012, Vol. 50, No. 11, 4484–4502.

- [205] ITAKURA F., SAITO S., *An analysis-synthesis telephony based on the maximum likelihood method*, [In:] *Proceedings of International Congress on Acoustics*, 1968, Vol. c-5-5, 17–20.
- [206] JAIN A.K., MURTY M.N., FLYNN P.J., *Data clustering: a review*, *ACM Computing Surveys*, 1999, Vol. 31, No. 3, 264–323.
- [207] JANECEK A., TAN Y., *Using population based algorithms for initializing nonnegative matrix factorization*, [In:] *Advances in Swarm Intelligence*, Y. Tan et al. (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 6729, Berlin–Heidelberg 2011, 307–316, 2-nd International Conference on Advances in Swarm Intelligence (ICSI), Chongqing, China, June 12–15, 2011.
- [208] JETER M.W., PYE W.C., *A note on nonnegative rank factorizations*, *Linear Algebra and its Applications*, 1981, Vol. 38, 171–173.
- [209] JIA S., QIAN Y., *A complexity constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing*, [In:] *Independent Component Analysis and Signal Separation*, M. Davies, C. James, S. Abdallah, M. Plumbley (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 4666, Berlin–Heidelberg 2007, 268–276, 7-th International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2007), London, UK, September 2007.
- [210] JIA S., QIAN Y., *Constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing*, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2009, Vol. 47, No. 1, 161–173.
- [211] JIANG J.J., ZHANG H.B., YU S., *An interior point trust region method for nonnegative matrix factorization*, *Neurocomputing*, 2012, Vol. 97, 309–316.
- [212] JIANG L., YIN H., *Bregman iteration algorithm for sparse nonnegative matrix factorizations via alternating  $l_1$ -norm minimization*, *Multidimensional Systems and Signal Processing*, 2012, Vol. 23, No. 3, 315–328.
- [213] JOHANSSON B., ELFVING T., KOZLOV V., CENSOR T., FORSSÉNA P.-E., GRANLUND G., *The application of an oblique-projected landweber method to a model of supervised learning*, *Mathematical and Computer Modelling*, 2006, Vol. 43, No. 7–8, 892–909.
- [214] JOLLIFFE I.T., *Principal Component Analysis*, 2-nd ed., *Springer Series in Statistics*, Springer, 2002.
- [215] JORGENSEN B., *Exponential dispersion models*, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B*, 1987, Vol. 49, No. 2, 127–162.
- [216] JU T., SCHAEFER S., WARREN J., DESBRUN M., *A geometric construction of coordinates for convex polyhedra using polar duals*, [In:] *Proceedings of the 3-rd Eurographics Symposium on Geometry Processing*, Aire-la-Ville, Switzerland, 2005.
- [217] KACZMARZ S., *Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichungen*, *Bulletin de l'Académie Polonaise des Sciences et Lettres*, 1937, Vol. A35, 355–357.
- [218] KACZOREK T., *Factorization of nonnegative matrices by the use of elementary operation*, *Acta Mechanica et Automatica*, 2012, Vol. 6, No. 4, 15–18.
- [219] KANJANI K., *Parallel non negative matrix factorization for document clustering*, Master's thesis, Texas Agricultural and Mechanical University, Texas, USA, May 2007.
- [220] KIM D., SRA S., DHILLON I.S., *Fast Newton-type methods for the least squares nonnegative matrix approximation problem*, [In:] *Proceedings of 6-th SIAM International Conference on Data Mining*, Minneapolis, Minnesota, USA, April 2007, 343–354.

- 
- [221] KIM D., SRA S., DHILLON I.S., *Fast projection-based methods for the least squares nonnegative matrix approximation problem*, [In:] *Statistical Analysis and Data Mining*, Vol. 1. Wiley InterScience, 2008, 38–51.
- [222] KIM H., PARK H., *Sparse non-negative matrix factorizations via alternating non-negativity-constrained least squares for microarray data analysis*, *Bioinformatics*, 2007, Vol. 23, No. 12, 1495–1502.
- [223] KIM H., PARK H., *Non-negative matrix factorization based on alternating non-negativity constrained least squares and active set method*, *SIAM Journal in Matrix Analysis and Applications*, 2008, Vol. 30, No. 2, 713–730.
- [224] KIM H., PARK H., ELDEN L., *Non-negative tensor factorization based on alternating large-scale non-negativity-constrained least squares*, [In:] *7th IEEE International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE 2007)*, Harvard Medical School, Boston, October 14–17, 2007, 1147–1151.
- [225] KIM J., PARK H., *Toward faster nonnegative matrix factorization: A new algorithm and comparisons*, [In:] *Proceedings of 8-th IEEE International Conference on Data Mining*, 2008, 353–362.
- [226] KIM J., PARK H., *Fast nonnegative matrix factorization: An active-set-like method and comparisons*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2011, Vol. 33, No. 6, 3261–3281.
- [227] KIM J., PARK H., *Fast nonnegative tensor factorization with an active-set-like method*, [In:] *High-Performance Scientific Computing: Algorithms and Applications*, Springer, 2012, 311–326.
- [228] KIM P.M., TIDOR B., *Subsystem identification through dimensionality reduction of large-scale gene expression data*, *Genome Research*, 2003, Vol. 13, 1706–1718.
- [229] KIM W., CHEN B., KIM J., PAN Y., PARK H., *Sparse nonnegative matrix factorization for protein sequence motif discovery*, *Expert Systems with Applications*, 2011, Vol. 38, No. 10, 13198–13207.
- [230] KIM Y.-D., CHOI S., *A method of initialization for nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2007)*, Honolulu, Hawaii, April 15–20, 2007, Vol. II, 537–540.
- [231] KIM Y.-D., CHOI S., *Nonnegative tucker decomposition*, [In:] *Proceedings of IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR07)*, Minneapolis, MN, 2007, 1–8.
- [232] KIM Y.-D., CHOI S., *Weighted nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2009)*, Taipei, April 19–24, 2009, 1541–1544.
- [233] KLINGENBERG B., CURRY J., DOUGHERTY A., *Non-negative matrix factorization: Ill-posedness and a geometric algorithm*, *Pattern Recognition*, 2009, Vol. 42, 918–928.
- [234] KOHAVI R., PROVOST F., *On applied research in machine learning*, [In:] *Editorial for the Special Issue on Applications of Machine Learning and the Knowledge Discovery Process*, Vol. 30, Columbia University, New York 1998.
- [235] KOLDA T.G., BADER B.W., *Tensor decompositions and applications*, *SIAM Review*, 2009, Vol. 51, No. 3, 455–500.
- [236] KOMPASS R., *A generalized divergence measure for nonnegative matrix factorization*, *Neural Computation*, 2006, Vol. 19, No. 3, 780–791.

- [237] KOPRIVA I., JERIC I., *Multi-component analysis: blind extraction of pure components mass spectra using sparse component analysis*, Journal of Mass Spectrometry, 2009, Vol. 44, 1378–1388.
- [238] KORONACKI J., ĆWIK J., *Statystyczne systemy uczące się*, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2008.
- [239] KOTSIA I., ZAFEIRIOU S., PITAS I., *Discriminant non-negative matrix factorization and projected gradients for frontal face verification*, [In:] *Biometrics and Identity Management*, B. Schouten, N. Juul, A. Drygajlo, M. Tistarelli (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 5372, Berlin–Heidelberg 2008, 82–90.
- [240] KRIJNEN W.P., *The Analysis of Three-Way Arrays by Constrained PARAFAC Methods*, University of Groningen, The Netherlands, 1993.
- [241] KROONENBERG P., *Applied Multway Data Analysis*, John Wiley and Sons, New York 2008.
- [242] KRUSKAL J.B., *Three-way arrays: Rank and uniqueness of trilinear decompositions, with application to arithmetic complexity and statistics*, Linear Algebra and its Applications, 1977, Vol. 18, 95–138.
- [243] KRUSKAL J.B., *Rank, decomposition, and uniqueness for 3-way and N-way arrays*, [In:] *Multway data analysis*, R. Coppi and S. Bolasco (Eds.), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1989, 8–18.
- [244] KRZYŚKO M., WOŁYŃSKI W., GÓRECKI T., SKORZYBUT M., *Systemy uczące się: rozpoznawanie wzorców, analiza skupień i redukcja wymiarowości*, WNT, Warszawa 2009.
- [245] KULLBACK S., LEIBLER R., *On information and sufficiency*, Annals of Mathematical Statistics, 1951, Vol. 22, 79–86.
- [246] KUMAR A., SINDHWANI V., KAMBADUR P., *Fast conical hull algorithms for near-separable non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 30-th International Conference on Machine Learning (ICML-13)*, S. Dasgupta, D. Mcallester (Eds.), 2013, Vol. 28, 231–239.
- [247] LANGE K., *Convergence of EM image reconstruction algorithms with Gibbs smoothing*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 1990, Vol. 9, No. 4, 439–446.
- [248] LANGE K., CARSON R., *EM reconstruction algorithms for emission and transmission tomography*, Journal of Computer Assisted Tomography, 1984, Vol. 8, No. 2, 306–316.
- [249] LANGVILLE A.N., MEYER C.D., ALBRIGHT R., *Initializations for the nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 12-th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, Philadelphia, USA, August 20–23, 2006.
- [250] LATHAUWER L.D., CASTAING J., *Tensor-based techniques for the blind separation of DS-CDMA signals*, Signal Processing, 2007, Vol. 87, No. 2, 322–336.
- [251] LAURBERG H., *Uniqueness of non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 2007 IEEE/SP 14-th Workshop on Statistical Signal Processing*, Washington, DC, USA, 2007, 44–48.
- [252] LAURBERG H., *Non-negative Matrix Factorization: Theory and Methods*, PhD thesis, Aalborg University, Aalborg, Denmark, 2008.
- [253] LAURBERG H., CHRISTENSEN M.G., PLUMBLEY M.D., HANSEN L.K., JENSEN S.H., *Theorems on positive data: On the uniqueness of NMF*, Computational Intelligence and Neuroscience, 2008, No. 764206, 1–9.



- 
- [254] LAURBERG H., HANSEN L.K., *On affine non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the IEEE Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2007)*, Honolulu, April 15–20, 2007, Vol. 2, 653–656.
- [255] LAWSON C.L., HANSON R.J., *Solving Least Squares Problems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1974.
- [256] LAWTON W.H., SYLVESTRE E.A., *Self modeling curve resolution*, *Technometrics*, 1971, Vol. 13, No. 3, 617–633.
- [257] LEE D.D., SEUNG H.S., *Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization*, *Nature*, 1999, Vol. 401, 788–791.
- [258] LEE D.D., SEUNG H.S., *Algorithms for nonnegative matrix factorization*, [In:] *Advances in Neural Information Processing (NIPS)*, T.K. Leen, T.G. Dietterich, V. Tresp (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2000, Vol. 13, 556–562.
- [259] LEE H., CICHOCKI A., CHOI S., *Kernel nonnegative matrix factorization for spectral EEG feature extraction*, *Neurocomputing*, 2009, Vol. 72, No. 13–15, 3182–3190.
- [260] LEE J.A., VERLEYSEN M., *Nonlinear Dimensionality Reduction*, [In:] *Information Science and Statistics*, M. Jordan, J. Kleinberg, B. Schölkopf (Eds.), Springer, New York 2007.
- [261] LEE J.S., LEE D.D., CHOI S., LEE D.S., *Application of nonnegative matrix factorization to dynamic positron emission tomography*, [In:] *3rd International Conference on Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, San Diego, CA, December 2001, 556–562.
- [262] LEFEVRE A., BACH F., FÉVOTTE C., *Online algorithms for nonnegative matrix factorization with the Itakura-Saito divergence*, [In:] *2011 IEEE Workshop on Applications of Signal Processing to Audio and Acoustics (WASPAA)*, New Paltz, NY, USA, October 16–19, 2011, 313–316.
- [263] LEFEVRE A., GLINEUR F., ABSIL P.-A., *A nuclear-norm based convex formulation for informed source separation* [Online:] CoRR, 2012, Vol. abs/1212.3119, <http://arxiv.org/abs/1212.3119>.
- [264] LI H., ADALI T., WANG W., EMGE D., CICHOCKI A., *Non-negative matrix factorization with orthogonality constraints and its application to Raman spectroscopy*, *Journal of VLSI Signal Processing*, 2007, Vol. 48, No. 1–2, 83–97.
- [265] LI L., LEBANON G., PARK H., *Fast bregman divergence NMF using Taylor expansion and coordinate descent*, [In:] *Proceedings of the 18-th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD '12)*, New York, NY, USA, 2012, ACM Press, New York 2012, 307–315.
- [266] LI L., ZHANG Y.-J., *FastNMF: highly efficient monotonic fixed-point nonnegative matrix factorization algorithm with good applicability*, *Journal of Electronic Imaging*, 2009, Vol. 18, No. 3, DOI: 10.1117/1.318477/.
- [267] LI S.Z., HOU X.W., ZHANG H.J., CHENG Q.S., *Learning spatially localized, parts-based representation*, [In:] *Proceedings of the IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR 2001)*, Kauai, USA, 2001, Vol. 1, 207–212.
- [268] LI T., DING C., *The relationships among various nonnegative matrix factorization methods for clustering*, [In:] *Proceedings of 6-th International Conference on Data Mining (ICDM06)*, Washington, DC, USA, 2006, 362–371.
- [269] LI T., DING C., JORDAN M.I., *Solving consensus and semi-supervised clustering problems using nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of 7-th IEEE Internatio-*

- nal Conference on Data Mining (ICDM 2007)*, Omaha NE, USA, October 28–31, 2007, 577–582.
- [270] LI T., ZHANG Y., SINDHWANI V., *A non-negative matrix tri-factorization approach to sentiment classification with lexical prior knowledge*, [In:] *Proceedings of the Joint Conference of the 47th Annual Meeting of the ACL'09 and the 4th International Joint Conference on Natural Language Processing of the AFNLP*, Association for Computational Linguistics, Stroudsburg, PA, USA, 2009, Vol. 1, 244–252.
- [271] LI X., LIU H., ZHENG X., *Non-monotone projection gradient method for non-negative matrix factorization*, *Computational Optimization and Applications*, 2012, Vol. 51, No. 3, 1163–1171.
- [272] LI X.Q., SIDIROPOULOS N.D., *Cramer–Rao lower bounds for low-rank decomposition of multidimensional arrays*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2001, Vol. 49, No. 9, 2074–2086.
- [273] LI Y., NGOM A., *A new kernel non-negative matrix factorization and its application in microarray data analysis*, [In:] *Proceedings of Symposium on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology (CIBCB)*, San Diego, CA, 9–12 May 2012, 371–378.
- [274] LI Z., WU X., PENG H., *Nonnegative matrix factorization on orthogonal subspace*, *Pattern Recognition Letters*, 2010, Vol. 31, No. 9, 905–911.
- [275] LIANG Z., LI Y., ZHAO T., *Projected gradient method for kernel discriminant nonnegative matrix factorization and the applications*, *Signal Processing*, 2010, Vol. 90, No. 7, 2150–2163.
- [276] LIAO R., ZHANG Y., GUAN J., ZHOU S., *CloudNMF: A mapreduce implementation of nonnegative matrix factorization for large-scale biological datasets*, *Genomics, Proteomics and Bioinformatics*, 2014, Vol. 12, No. 1, 48–51.
- [277] LIESE F., VAJDA I., *Convex statistical distances*, Vol. 95 of *Teubner-Texte zur Mathematik*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig 1987.
- [278] LIKIC V., *Extraction of pure components from overlapped signals in gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS)*, *BioData Mining*, 2009, Vol. 2, No. 6, 1–11.
- [279] LIN C.-J., *On the convergence of multiplicative update algorithms for non-negative matrix factorization*, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2007, Vol. 18, No. 6, 1589–1596.
- [280] LIN C.-J., *Projected gradient methods for non-negative matrix factorization*, *Neural Computation*, 2007, Vol. 19, No. 10, 2756–2779.
- [281] LIN C.-J., MORÉ J.J., *Newton's method for large bound-constrained optimization problems*, *SIAM Journal on Optimization*, 1999, Vol. 9, No. 4, 1100–1127.
- [282] LINDBERG T., GARDING J., *Shape-adapted smoothing in estimation of 3-D depth cues from affine distortions of local 2-D brightness structure*, *Image and Vision Computing*, 1997, Vol. 15, 415–434.
- [283] LIU C., HE K., ZHOU J., ZHANG J., *Generalized discriminant orthogonal non-negative matrix factorization*, *Journal of Computational Information Systems*, 2010, Vol. 6, No. 6, 1743–1750.
- [284] LIU C., YANG H.-C., FAN J., HE L.-W., WANG Y.-M., *Distributed nonnegative matrix factorization for web-scale dyadic data analysis on mapreduce*, [In:] *Proceedings of 19-th International Conference on World Wide Web (WWW '10)*, ACM Press, New York, USA, 2010, 681–690.

- 
- [285] LIU J., WU Z., WEI Z., XIAO L., SUN L., *A novel sparsity constrained nonnegative matrix factorization for hyperspectral unmixing*, [In:] *Proceedings of IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, Munich, Germany, July 22–27, 2012, 1389–1392.
- [286] LIU J.G., AERON S., *Robust large scale non-negative matrix factorization using proximal point algorithm*, [In:] *Proceedings of 2013 IEEE Global Conference on Signal and Information Processing (GlobalSIP)*, Austin, Texas, USA, December 3–5, 2013, 1127–1130.
- [287] LIU M., CHOWDHURY A.K.R., *Multilinear feature extraction and classification of multi-focal images, with applications in nematode taxonomy*, [In:] *Proceedings of the 23-rd IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, San Francisco, USA, June 13–18, 2010, 2823–2830.
- [288] LIU W., YUAN K., YE D., *On  $[\alpha]$ -divergence based nonnegative matrix factorization for clustering cancer gene expression data*, *Artificial Intelligence in Medicine*, 2008, Vol. 44, No. 1, 1–5.
- [289] LIU W., ZHENG N., LU X., *Non-negative matrix factorization for visual coding*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2003)*, Hong Kong, April 2003, Vol. 3, 293–296.
- [290] LLINARES R., IGUAL J., CAMACHO A., *Application of regularized alternating least squares to an astrophysical problem*, *Applied Mathematics and Computation*, 2012, Vol. 219, No. 3, 1367–1374.
- [291] LLINARES R., IGUAL J., MIRÓ-BORRÁS J., CAMACHO A., *Analysis of astrophysical ice analogs using regularized alternating least squares*, *Artificial Neural Networks*, K.I. Diamantaras, W. Duch, L.S. Iliadis (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 6352, Berlin–Heidelberg 2010, 199–204, 20-th International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN 2010), Thessaloniki, Greece, September 15–18, 2012.
- [292] LONG B., ZHANG Z.M., WU X., YU P.S., *Relational clustering by symmetric convex coding*, [In:] *Proceedings of the 24-th International Conference on Machine Learning (ICML)*, New York, USA, 2007, 569–576.
- [293] LONG B., ZHANG Z.M., YU P.S., *Co-clustering by block value decomposition*, [In:] *Proceedings of the 11-th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery in Data Mining (KDD)*, New York, USA, 2005, 635–640.
- [294] LOWE D., *Object recognition from local scale-invariant features*, [In:] *Proceedings of the International Conference on Computer Vision (ICCV)*, Corfu, Greece, September 21–22, 1999, 1150–1157.
- [295] LU H., PLATANIOTIS K.N., VENETSANOPOULOS A.N., *MPCA: Multilinear principal component analysis of tensor objects*, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2008, Vol. 19, No. 1, 18–39.
- [296] LUCY L., *An iterative technique for the rectification of observed distributions*, *The Astronomical Journal*, 1974, Vol. 79, No. 6, 745–754.
- [297] MAHONEY M.W., MAGGIONI M., DRINEAS P., *Tensor-CUR decompositions and data applications*, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 2008, Vol. 30, 957–987.
- [298] MAO Y., SAUL L.K., *Modeling distances in large-scale networks by matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 4-th ACM SIGCOMM Conference on Internet Measurement (IMC'04)*, ACM Press, New York, NY, USA, 2004, 278–287.
- [299] MARTINEZ A., KAK A., *PCA versus LDA*, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2001, Vol. 23, No. 2, 228–233.

- [300] MEJIA-ROA E., CARMONA-SAEZ P., NOGALES R., VICENTE C., VAZQUEZ M., YANG X.Y., GARCIA C., TIRADO F., PASCUAL-MONTANO A., *bioNMF: a web-based tool for nonnegative matrix factorization in biology*, Nucleic Acids Research, 2008, Vol. 36, W523–W528.
- [301] MEJIA-ROA E., GARCIA C., GOMEZ J., PRIETO M., TENLLADO C., PASCUAL-MONTANO A., TIRADO F., *Parallelism on the Non-negative Matrix Factorization*, [In:] *Advances in Parallel Computing*, IOS Press BV, Amsterdam, Netherlands, May 2012, Vol. 22, 421–428.
- [302] MERRITT M., ZHANG Y., *An interior-point gradient method for large-scale totally non-negative least squares problems*, Journal of Optimization Theory and Applications, 2005, Vol. 126, No. 1, 191–202.
- [303] MIAO L., QI H., *Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization*, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2007, Vol. 45, No. 3, 765–777.
- [304] MIKOLAJCZYK K., SCHMID C., *An affine invariant interest point detector*, [In:] *Computer Vision — ECCV 2002*, A. Heyden et al. (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 2350, Berlin–Heidelberg 2002, 128–142, 7-th European Conference on Computer Vision, Copenhagen, Denmark, May 28–31, 2002.
- [305] MIKOLAJCZYK K., TUYTELAARS T., SCHMID C., ZISSERMAN A., MATAS J., SCHAFFALITZKY F., KADIR T., GOOL L.V., *A comparison of affine region detectors*, International Journal of Computer Vision, 2005, Vol. 65, 43–72.
- [306] MINAMI M., EGUCHI S., *Robust blind source separation by Beta-divergence*, Neural Computation, 2002, Vol. 14, 1859–1886.
- [307] MINC H., *Nonnegative Matrices*, John Wiley and Sons, New York 1988.
- [308] MINKA T.P., *Divergence measures and message passing*, Technical Report, MSR-TR-2005-173, Microsoft Research, 2005.
- [309] MINKA T.P., *Automatic choice of dimensionality for PCA*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, T.K. Leen, T.G. Dietterich, V. Tresp (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2001, Vol. 13, 556–562.
- [310] MIRON S., DOSSOT M., CARTERET C., MARGUERON S., BRIE D., *Joint processing of the parallel and crossed polarized Raman spectra and uniqueness in blind nonnegative source separation*, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2011, Vol. 105, No. 1, 7–18.
- [311] MIRZAL A., *Converged algorithms for orthogonal nonnegative matrix factorizations* [Online], CoRR, 2010, Vol. abs/1010.5290, <http://arxiv.org/abs/1010.5290>.
- [312] MOHAMMADIHA N., KLEIJN W.B., LEIJON A., *Gamma hidden Markov model as a probabilistic nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, Marrakech, Maroko, September 7–9, 2013.
- [313] MOHAMMADIHA N., LEIJON A., *Nonnegative HMM for babble noise derived from speech HMM: Application to speech enhancement*, IEEE Transactions on Audio, Speech and Language Processing, 2013, Vol. 21, No. 5, 998–1011.
- [314] MOHAMMADIHA N., SMARAGDIS P., LEIJON A., *Prediction based filtering and smoothing to exploit temporal dependencies in NMF*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2013)*, Vancouver, Canada, May 26–31, 2013, 873–877.

- 
- [315] MOHAMMADIHA N., SMARAGDIS P., LEIJON A., *Supervised and unsupervised speech enhancement using nonnegative matrix factorization*, IEEE Transactions on Audio, Speech and Language Processing, 2013, Vol. 21, No. 10, 2140–2151.
- [316] MOLINA R., KATSAGGELOS A., MATEOS J., *Bayesian and regularization methods for hyperparameter estimation in image restoration*, IEEE Transactions on Image Processing, 1999, Vol. 8, No. 2, 231–246.
- [317] MORIMOTO T., *Markov processes and the H-theorem*, Journal of the Physical Society of Japan, 1963, Vol. 18, No. 3, 328–331.
- [318] MORRISON D.F., *Wielowymiarowa analiza statystyczna* (tłum. Wojciech Zieliński), Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1990.
- [319] MØRUP M., HANSEN L.K., ARNFRED S.M., *Algorithms for sparse nonnegative Tucker decompositions*, Neural Computation, 2008, Vol. 20, No. 8, 2112–2131.
- [320] MOUSSAOUI S., *Separation de sources non-negatives. Application au traitement des signaux de spectroscopie*, PhD thesis, Universite Henri Poincare, Nancy, France, December 2005.
- [321] MOUSSAOUI S., BRIE D., IDIER J., *Nonnegative source separation: range of admissible solutions and conditions for the uniqueness of the solution*, [In:] *Proceedings of the IEEE Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2005)*, Philadelphia, USA, March 18–23, 2005, Vol. 5, 289–292.
- [322] MOUSSAOUI S., BRIE D., CARTERET C., MOHAMMAD-DJAFARI A., *Application of Bayesian non-negative source separation to mixture analysis in spectroscopy*, [In:] *Proceedings of 24-th International Workshop on Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering*, Max-Planck Institute, Garching, Munich, Germany, July 2004, 25–30.
- [323] MYSORE G.J., SMARAGDIS P., RAJ B., *Non-negative hidden markov modeling of audio with application to source separation*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, V. Vigneron, V. Zarzoso, E. Moreau, R. Gribonval, E. Vincent (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 6365, Berlin–Heidelberg 2010, 140–148, 9-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2010), St. Malo, France, September 27–30, 2010.
- [324] NAANAA W., NUZILLARD J.-M., *A geometric approach to blind separation of nonnegative and dependent source signals*, Signal Processing, 2012, Vol. 92, No. 11, 2775–2784.
- [325] NAKANO M., ROUX J.L., KAMEOKA H., NAKAMURA T., ONO N., SAGAYAMA S., *Bayesian nonparametric spectrogram modeling based on infinite factorial infinite hidden Markov model*, [In:] *Proceedings of IEEE Workshop on Applications of Signal Processing to Audio and Acoustics (WASPAA)*, New Paltz, NY, October 16–19, 2011, 325–328.
- [326] NESTEROV Y., *A method of solving a convex programming problem with convergence rate  $o(1/k^2)$* , Soviet Mathematics Doklady, 1983, Vol. 27, No. 2, 372–376.
- [327] NIESEN U., SHAH D., WORNELL G., *Adaptive alternating minimization algorithms*, IEEE Transactions on Information Theory, 2009, Vol. 55, No. 3, 1423–1429.
- [328] NIESING J., *Simultaneous component and factor analysis methods for two or more groups: a comparative study*, DSWO Press, Leiden 1997.
- [329] NOCEDAL J., WRIGHT S.J., *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research, Springer, New York 1999.
- [330] NOVAK M., MAMMONE R., *Use of nonnegative matrix factorization for language model adaptation in a lecture transcription task*, [In:] *Proceedings of the IEEE Conference on*

- Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP 2001)*, Salt Lake City, UT, May 2001, Vol. 1, 541–544.
- [331] OCHAŁ P., *Zastosowanie splotowej nieujemnej faktoryzacji macierzy do separacji dźwięków instrumentów muzycznych z wielokanałowych zapisów muzyki polifonicznej*, Praca magisterska, Politechnika Wrocławska, Wrocław 2010.
- [332] O'GRADY P.D., PEARLMUTTE B.A., *Discovering speech phones using convolutive non-negative matrix factorisation with a sparseness constraint*, *Neurocomputing*, 2008, Vol. 72, 88–101.
- [333] ORTIZ-ESTEVEZ M., BENGTTSSON H., RUBIO A., *ACNE: a summarization method to estimate allele-specific copy numbers for affymetrix SNP arrays*, *Bioinformatics*, 2010, Vol. 26, No. 15, 1827–1833.
- [334] OSOWSKI S., *Metody i narzędzia eksploracji danych*, Wydawnictwo BTC, Warszawa 2013.
- [335] OUEDRAOGO W.S., SOULOUMIAC A., JAIDANE M., JUTTEN C., *Geometrical method using simplicial cones for overdetermined nonnegative blind source separation: Application to real PET images*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, F. Theis, A. Cichocki, A. Yeredor, M. Zibulevsky (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 7191, Berlin–Heidelberg 2012, 494–501, 10-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2012), Tel Aviv, Israel, March 12–15, 2012.
- [336] OZEROV A., FÉVOTTE C., *Multichannel nonnegative matrix factorization in convolutive mixtures for audio source separation*, *IEEE Transactions on Audio, Speech and Language Processing*, 2010, Vol. 18, No. 3, 550–563.
- [337] OZEROV A., FÉVOTTE C., CHARBIT M., *Factorial scaled hidden markov model for polyphonic audio representation and source separation*, [In:] *Proceedings of IEEE Workshop on Applications of Signal Processing to Audio and Acoustics (WASPAA)*, New Paltz, USA, October 18–21, 2009, 121–124.
- [338] PAATERO P., *Least-squares formulation of robust nonnegative factor analysis*, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1997, Vol. 37, 23–35.
- [339] PAATERO P., *A weighted non-negative least squares algorithm for three-way PARAFAC factor analysis*, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1997, Vol. 38, No. 2, 223–242.
- [340] PAATERO P., TAPPER U., *Analysis of different modes of factor analysis as least squares fit problems*, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1993, Vol. 18, No. 2, 183–194.
- [341] PAATERO P., TAPPER U., *Positive matrix factorization: A nonnegative factor model with optimal utilization of error estimates of data values*, *Environmetrics*, 1994, Vol. 5, 111–126.
- [342] PAN B., LAI J., CHEN W.-S., *Nonlinear nonnegative matrix factorization based on mercer kernel construction*, *Pattern Recognition*, 2011, Vol. 44, No. 10–11, 2800–2810.
- [343] PARK H., JEON M., ROSEN J.B., *Lower dimensional representation of text data in vector space based information retrieval*, [In:] *Computational Information Retrieval*, M. Berry (Ed.), SIAM Press, Philadelphia, PA, USA, 2001, 3–23.
- [344] PASCUAL-MONTANO A., CARAZO J.M., KOCHI K., LEHMEAN D., PACUAL-MARQUI R., *Nonsmooth nonnegative matrix factorization (nsNMF)*, *IEEE Transaction Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2006, Vol. 28, No. 3, 403–415.

- 
- [345] PAUCA V.P., PIPERA J., PLEMMONS R.J., *Nonnegative matrix factorization for spectral data analysis*, Linear Algebra and its Applications, 2006, Vol. 416, No. 1, 29–47.
- [346] PAUCA V.P., SHAHNAZ F., BERRY M.W., PLEMMONS R.J., *Text mining using non-negative matrix factorizations*, [In:] *Proceedings of SIAM International Conference on Data Mining*, Orlando, FL, April 2004, 452–456.
- [347] PEARSON K., *On lines and planes of closest fit to systems of points in space*, Philosophical Magazine, 1901, Vol. 2, No. 6, 559–572.
- [348] PENGO T., MUNOZ-BARRUTIA A., DE SOLORZANO C.O., *Spectral unmixing of multiply stained fluorescence samples*, [In:] *Microscopy: Science, Technology, Applications and Education*, A. Mendez-Vilas, J. Diaz (Eds.), No. 4 in Microscopy Book Series, Formatex Research Center, Badajoz, Spain, 2010, 2079–2087.
- [349] PHAN A.H., CICHOCKI A., *Block decomposition for very large-scale nonnegative tensor factorization*, [In:] *Proceedings of 3-rd IEEE International Workshop on Computational Advances in Multi-Sensor Adaptive Processing (CAMSAP)*, Aruba, Dutch Antilles, December 13–16, 2009, 316–319.
- [350] PHAN A.H., CICHOCKI A., *Tensor decompositions for feature extraction and classification of high dimensional datasets*, IEICE Nonlinear Theory and its Applications, 2010, Vol. 1, No. 1, 37–68.
- [351] PHAN A.H., CICHOCKI A., *Extended HALS algorithm for nonnegative Tucker decomposition and its applications for multiway analysis and classification*, Neurocomputing, 2011, Vol. 74, No. 11, 1956–1969. Adaptive Incremental Learning in Neural Networks; Learning Algorithm and Mathematic Modelling. Selected paper from the International Conference on Neural Information Processing 2009 (ICONIP 2009).
- [352] PHAN A.H., CICHOCKI A., *PARAFAC algorithms for large-scale problems*, Neurocomputing, 2011, Vol. 74, No. 11, 1970–1984.
- [353] PHAN A.H., CICHOCKI A., TICHAVSKÝ P., MANDIC D.P., MATSUOKA K., *On revealing replicating structures in multiway data: A novel tensor decomposition approach*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, F. Theis, A. Cichocki, A. Yeredor, M. Zibulevsky (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7191, Berlin–Heidelberg 2012, 297–305, 10-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2012), Tel Aviv, Israel, March 12–15, 2012.
- [354] PHAN A.H., CICHOCKI A., TICHAVSKÝ P., KOLDOVSKÝ Z., *On connection between the convolutive and ordinary nonnegative matrix factorizations*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, F. Theis, A. Cichocki, A. Yeredor, M. Zibulevsky (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7191, Berlin–Heidelberg 2012, 288–296, 10-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2012), Tel Aviv, Israel, March 12–15, 2012.
- [355] PHAN A.H., CICHOCKI A., TICHAVSKÝ P., ZDUNEK R., LEHKY S., *From basis components to complex structural patterns*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2013)*, Vancouver, Canada, May 14–19, 2013, Vol. 5, 3228–3232.
- [356] PHAN A.H., CICHOCKI A., VU-DINH T., *Classification of scenes based on multiway feature extraction*, [In:] *Proceedings of 2010 International Conference on Advanced Technologies for Communications*, Ho Chi Minh City, Vietnam, 2010, 142–145.
- [357] PHAN A.H., CICHOCKI A., ZDUNEK R., VU-DINH T., *Novel alternating least squares algorithm for nonnegative matrix and tensor factorizations*, [In:] *Neural Information Pro-*

- cessing. Theory and Algorithms*, K. Wong, B. Mendis, A. Bouzerdoum (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 6443, Berlin–Heidelberg 2010, 262–269, 17-th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2010), Sydney, Australia, November 22–25, 2010.
- [358] PHILIPS J.W., LEAHY R.M., MOSHER J.C., *MEG-based imaging of focal neuronal current sources*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 1997, Vol. 16, 338–248.
- [359] PIPER J., PAUCA V.P., PLEMMONS R.J., GIFFIN M., *Object characterization from spectral data using nonnegative matrix factorization and information theory*, [In:] *Proceedings of AMOS Technical Conference*, Maui, HI, September 2004.
- [360] PLAZA J., HENDRIX E.M.T., GARCÍA I., MARTIN G., PLAZA A., *On endmember identification in hyperspectral images without pure pixels: A comparison of algorithms*, Journal of Mathematical Imaging and Vision, 2012, Vol. 42, No. 2–3, 163–175.
- [361] POMPILI F., GILLIS N., ABSIL P.-A., GLINEUR F., *Two algorithms for orthogonal nonnegative matrix factorization with application to clustering* [Online], CoRR, 2012, Vol. abs/1201.0901, <http://arxiv.org/abs/1201.0901>.
- [362] POPA C., ZDUNEK R., *Kaczmarz extended algorithm for tomographic image reconstruction from limited-data*, Mathematics and Computers in Simulation, 2004, Vol. 65, No. 6, 579–598.
- [363] POPA C., ZDUNEK R., *New generalized oblique projections in DW algorithm with application to borehole tomography*, [In:] *Proceedings of 3-rd Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problems*, Constantza, Romania, May 27–30, 2004, Editura Academiei Romane, Bucharest, Romania, 2005, 233–243.
- [364] POPA C., ZDUNEK R., *Gibbs regularized tomographic image reconstruction with DW algorithm based on generalized oblique projections*, [In:] *Proceedings of 4-th Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problems*, Constantza, Romania, September 7–10, 2005, Editura Academiei Romane, Bucharest, Romania, 2006, 191–200.
- [365] POPA C., ZDUNEK R., *Penalized least-squares image reconstruction for borehole tomography*, [In:] *Proceedings of ALGORITMY'2005, 17-th Conference on Scientific Computing*, Vysoke Tatry – Podbanske, Slovakia, March 13–18, 2005, 260–269.
- [366] POPA C., ZDUNEK R., *Regularized ART with Gibbs priors for tomographic image reconstruction*, [In:] *Proceedings of 18-th Symposium Simulationstechnique (ASIM 2005)*, Erlangen, Germany, September 12–15, 2005, 656–661.
- [367] POPA C., ZDUNEK R., *On some constraining strategies in image reconstructions from projections*, [In:] *Proceedings of 5-th Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problems*, Constantza, Romania, September 2006, Editura Academiei Romane, Bucharest, Romania, 2007, 173–180.
- [368] PRALAT A., ZDUNEK R., *The electromagnetic geotomography – the comparison of various image reconstruction methods*, Acta Montana IRSM AS CR. Series A, 2000, Vol. 118, No. 16, 151–170.
- [369] PRALAT A., ZDUNEK R., *Electromagnetic geotomography – selection of measuring frequency*, IEEE Sensors Journal, 2005, Vol. 5, No. 2, 242–250.
- [370] QIAN Y., JIA S., ZHOU J., ROBLES-KELLY A., *Hyperspectral unmixing via  $l_{1/2}$  sparsity-constrained nonnegative matrix factorization*, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2011, Vol. 49, No. 11, 4282–4297.



- 
- [371] QIN L., ZHENG Q., JIANG S., HUANG Q., GAO W., *Unsupervised texture classification: Automatically discover and classify texture patterns*, Image and Vision Computing, 2008, Vol. 26, No. 5, 647–656.
- [372] RAFAJŁOWICZ E., RAFAJŁOWICZ W., *Wstęp do przetwarzania obrazów przemysłowych*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2010.
- [373] RAO C.R., *Linear Statistical Inference and its Applications*, Second Edition, [In:] Wiley Series in Probability and Statistics, John Wiley, New York 2001.
- [374] RAO N., SHEPHERD S.J., YAO D., *Extracting characteristic patterns from genome – wide expression data by non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 2004 IEEE Computational Systems Bioinformatics Conference (CSB 2004)*, Stanford, CA, August 2004, 570–571.
- [375] RAYDAN M., *The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem*, SIAM Journal on Optimization, 1997, Vol. 7, No. 1, 26–33.
- [376] READ T., CRESSIE N., *Goodness-of-Fit Statistics for Discrete Multivariate Data*, Springer Series in Statistics, Springer-Verlag, New York 1988.
- [377] RECHT B., RE C., TROPP J.A., BITTORF V., *Factoring nonnegative matrices with linear programs*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, F. Pereira, C.J.C. Burges, L. Bottou, K.Q. Weinberger (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2012, Vol. 25, 1223–1231.
- [378] REZAEI M., BOOSTANI R., REZAEI M., *An efficient initialization method for nonnegative matrix factorization*, Journal of Applied Sciences, 2011, Vol. 11, No. 2, 354–359.
- [379] RICHARDSON R., *Bayesian-based iterative method of image restoration*, Journal of the Optical Society of America, 1972, Vol. 62, No. 1, 55–59.
- [380] RIPLEY B.D., *Spatial Statistics*, [In:] Wiley Series in Probability and Statistics, Wiley, New Jersey, USA, 1981.
- [381] ROCKAFELLAR R.T., *Convex Analysis*, Princeton, 1997.
- [382] ROJAS M., STEIHAUG T., *An interior-point trust-region-based method for large-scale non-negative regularization*, Inverse Problems, 2002, Vol. 18, 1291–1307.
- [383] ROWEIS S.T., SAUL L.K., *Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding*, Science, 2000, Vol. 290, 2323–2326.
- [384] RUTKOWSKI T.M., ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Multichannel EEG brain activity pattern analysis in time-frequency domain with nonnegative matrix factorization support*, International Congress Series, 2007, Vol. 8611, 266–269.
- [385] SAJDA P., DU S., BROWN T., PARRA L., STOYANOVA R., *Recovery of constituent spectra in 3D chemical shift imaging using nonnegative matrix factorization*, [In:] *4-th International Symposium on Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, Nara, Japan, April 2003, 71–76.
- [386] SAJDA P., DU S., BROWN T.R., STOYANOVA R., SHUNGU D.C., MAO X., PARRA L.C., *Nonnegative matrix factorization for rapid recovery of constituent spectra in magnetic resonance chemical shift imaging of the brain*, IEEE Transactions on Medical Imaging, 2004, Vol. 23, No. 12, 1453–1465.
- [387] SAJDA P., DU S., PARRA L., *Recovery of constituent spectra using non-negative matrix factorization*, [In:] *Wavelets: Applications in Signal and Image Processing*, Proceedings of SPIE, 2003, Vol. 5207, 321–331, DOI: 10.1117/12.504676.

- [388] SANDLER R., LINDENBAUM M., *Nonnegative matrix factorization with Earth mover's distance metric*, [In:] *IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR 2009)*, Los Alamitos, CA, USA, 2009, 1873–1880.
- [389] SANDLER R., LINDENBAUM M., *Nonnegative matrix factorization with Earth mover's distance metric for image analysis*, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2011, Vol. 33, No. 8, 1590–1602.
- [390] SAVAS B., ELDÉN L., *Handwritten digit classification using higher order singular value decomposition*, *Pattern Recognition*, 2007, Vol. 40, No. 3, 993–1003.
- [391] SCHACHTNER R., PÖPPEL G., LANG E.W., *Towards unique solutions of non-negative matrix factorization problems by a determinant criterion*, *Digital Signal Processing*, 2011, Vol. 21, No. 4, 528–534.
- [392] SCHMIDT M.N., MØRUP M., *Infinite non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of 18-th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, Aalborg, Denmark, August 23–27, 2010.
- [393] SCHMIDT M.N., WINTHER O., HANSEN L.K., *Bayesian non-negative matrix factorization*, [In:] *Independent Component Analysis and Signal Separation*, T. Adali, C. Jutten, J. Marcos, T. Romano (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 5441, Berlin–Heidelberg 2009, 540–547, 8-th International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2009), Paraty, Brazil, March 15–18, 2009.
- [394] SHA F., LIN Y., SAUL L.K., LEE D.D., *Multiplicative updates for nonnegative quadratic programming*, *Neural Computation*, 2007, Vol. 19, No. 8, 2004–2031.
- [395] SHAHNAZ F., BERRY M., PAUCA P., PLEMMONS R.J., *Document clustering using non-negative matrix factorization*, *Journal on Information Processing and Management*, 2006, Vol. 42, 373–386.
- [396] SHANG F., JIAO L.C., WANG F., *Graph dual regularization non-negative matrix factorization for co-clustering*, *Pattern Recognition*, 2012, Vol. 45, No. 6, 2237–2250.
- [397] SHASHUA A., HAZAN T., *Non-negative tensor factorization with applications to statistics and computer vision*, [In:] *Proceedings of the 22-th International Conference on Machine Learning (ICML)*, Bonn, Germany, 2005, 792–799.
- [398] SHASHUA A., ZASS R., HAZAN T., *Multi-way clustering using super-symmetric non-negative tensor factorization*, [In:] *Computer Vision – ECCV2006*, A. Leonardis, H. Bischof, A. Pinz (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 3954, Berlin-Heidelberg 2006, 595–608, 9-th European Conference on Computer Vision (ECCV), Graz, Austria, May 7–13, 2006.
- [399] SHAWE-TAYLOR J., CRISTIANINI N., *Kernel Methods for Pattern Analysis*, Cambridge University Press, New York, NY, 2004.
- [400] SHEPP L., VARDI Y., *Maximum likelihood reconstruction for emission tomography*, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 1982, Vol. MI-1, 113–122.
- [401] SHI Z., ZHAI X., BORJIGEN D., JIANG Z., *Sparse unmixing analysis for hyperspectral imagery of space objects*, *Proceedings of SPIE*, 2011, Vol. 8196.
- [402] SIDIROPOULOS N.D., GIANNAKIS G., BRO R., *Blind parafac receivers for DS-CDMA systems*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2000, Vol. 48, No. 3, 810–823.
- [403] SIDIROPOULOS N.D., BRO R., *On the uniqueness of multilinear decomposition of N-way arrays*, *Journal of Chemometrics*, 2000, Vol. 14, No. 3, 229–239.
- [404] SKUBALSKA-RAFAJŁOWICZ E., *Losowe projekcje. Metody, algorytmy i wybrane zastosowania*, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2013.

- 
- [405] SMARAGDIS P., *Non-negative matrix factor deconvolution; Extraction of multiple sound sources from monophonic inputs*, [In:] *Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, C.G. Puntonet, A. Prieto (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 3195, Berlin–Heidelberg 2004, 494–499, 5-th International Conference on Independent Component Analysis (ICA 2004), Granada, Spain, September 22–24, 2004.
- [406] SMARAGDIS P., *Convulsive speech bases and their application to supervised speech separation*, *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, 2007, Vol. 15, No. 1, 1–12.
- [407] SMARAGDIS P., BROWN J.C., *Nonnegative matrix factorization for polyphonic music transcription*, [In:] *IEEE Workshop on Applications of Signal Processing to Audio and Acoustics*, New Paltz, NY, October 2003, 177–180.
- [408] SMILDE A., BRO R., GELADI P., *Multi-way Analysis: Applications in the Chemical Sciences*. John Wiley and Sons, New York 2004.
- [409] SONG P.X.-K., *Correlated Data Analysis: Modeling, Analytics, and Applications*, Springer Series in Statistics, Springer, 2007.
- [410] SONNEVELD P., VAN KAN J., HUANG X., OOSTERLEE C., *Nonnegative matrix factorization of a correlation matrix*, *Linear Algebra and its Applications*, 2009, Vol. 431, No. 3–4, 334–349.
- [411] SORBER L., VAN BAREL M., DE LATHAUWER L., *Optimization-based algorithms for tensor decompositions: canonical polyadic decomposition, decomposition in rank- $(L_r, L_r, 1)$  terms and a new generalization*, *SIAM Journal on Optimization*, 2013, Vol. 23, No. 2, 695–720.
- [412] SRA S., *Scalable nonconvex inexact proximal splitting*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, P. Bartlett, F. Pereira, C. Burges, L. Bottou, K. Weinberger (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2012, Vol. 25, 539–547.
- [413] SRA S., DHILLON I.S., *Nonnegative matrix approximation: Algorithms and Applications*, UTCS Technical Report TR-06-27, Austin, USA, 2006.
- [414] STADLTHANNER K., THEIS F.J., LANG E.W., TOME A.M., PUNTONET C.G., GORRIZ J.M., *Hybridizing sparse component analysis with genetic algorithms for microarray analysis*, *Neurocomputing*, 2007, Vol. 71, 2356–2376.
- [415] STEGEMAN A., SIDIROPOULOS N.D., *On kruskal's uniqueness condition for the Candecomp/Parafac decomposition*, *Linear Algebra and its Applications*, 2007, Vol. 420, 540–552.
- [416] STEGEMAN A., TEN BERGE J.M.F., *Kruskal's condition for uniqueness in Candecomp/Parafac when ranks and k-ranks coincide*, *Computational Statistics and Data Analysis*, 2006, Vol. 50, No. 1, 210–220.
- [417] STIEFEL E., *Richtungsfelder und fernparallelismus in n-dimensionalen mannigfaltigkeiten*, *Commentarii Mathematici Helvetici*, 1935–1936, Vol. 8, No. 4, 305–353.
- [418] STONE M., *Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions*, *Journal of the Royal Statistical Society*, 1974, Vol. 36, No. 2, 111–147.
- [419] STĄPOR K., *Metody klasyfikacji obiektów w wizji komputerowej*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2011.
- [420] SUMI T., SAKATA T., *A sufficient condition for the unique solution of non-negative tensor factorization*, [In:] *Independent Component Analysis and Signal Separation*, M. Davies, C. James, S. Abdallah, M. Plumbley (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 4666, Berlin–Heidelberg 2007, 113–120, 7-th International Conference on Independen-

- dent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2007), London, UK, September 2007.
- [421] TAN V.Y.F., FÉVOTTE C., *Automatic relevance determination in nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations (SPARS '09)*, Saint Malo, United Kingdom, 2009.
- [422] TAN V.Y.F., FÉVOTTE C., *Automatic relevance determination in nonnegative matrix factorization with the  $\beta$ -divergence*, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2013, Vol. 35, No. 7, 1592–1605.
- [423] TANABE K., *Projection method for solving a singular system of linear equations and its applications*, *Numerische Mathematik*, 1971, Vol. 17, 203–214.
- [424] TANEJA I.J., *On measures of information and inaccuracy*, *Journal of Statistical Physics*, 1976, Vol. 14, 203–270.
- [425] TEN BERGE J.M.F., SIDIRIOPOULOS N.D., *On uniqueness in CANDECOMP/PARAFAC*, *Psychometrika*, 2002, Vol. 67, 399–409.
- [426] TENENBAUM J.B., DE SILVA V., LANGFORD J.C., *A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction*, *Science*, 2000, Vol. 290, No. 5500, 2319–2323.
- [427] THEIS F.J., STADLTHANNER K., TANAKA T., *First results on uniqueness of sparse non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of 13-th European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2005)*, Antalya, Turkey, 2005, 1672–1675.
- [428] THOMAS L.B., *Problem 73-14, rank factorization of nonnegative matrices*, *SIAM Review*, 1974, Vol. 16, No. 3, 393–394.
- [429] THURAU C., KERSTING K., BAUCKHAGE C., *Convex non-negative matrix factorization in the wild*, [In:] *Proceedings of the 9-th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM '09)*, Washington, DC, USA, 2009, 523–532.
- [430] THURAU C., KERSTING K., WAHABZADA M., BAUCKHAGE C., *Convex non-negative matrix factorization for massive datasets*, *Knowledge and Information Systems*, 2011, Vol. 29, No. 2, 457–478.
- [431] TIBSHIRANI R., *Regression shrinkage and selection via the LASSO*, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 1994, Vol. 58, 267–288.
- [432] TIMMERMAN M.E., KIERS H.A.L., *Three mode principal components analysis: Choosing the numbers of components and sensitivity to local optima*, *British Journal of Mathematical and Statistical Psychology*, 2000, Vol. 53, No. 1, 1–16.
- [433] TORRES S.R., *Iterative algorithms for abundance estimation on unmixing of hyperspectral imagery*, Master's thesis, University of Puerto Rico, Mayaguez Campus, 2004.
- [434] TSAI C.-T., *Projected Barzilai-Borwein methods for non-negative matrix factorization*, Master's thesis, National Taiwan University, June 2011.
- [435] TUCKER L.R., *The extension of factor analysis to three-dimensional matrices*, [In:] *Contributions to mathematical psychology*, H. Gulliksen, N. Frederiksen (Eds.), Holt, Rinehart and Winston, New York 1964, 110–127.
- [436] TUCKER L.R., *Some mathematical notes on three-mode factor analysis*, *Psychometrika*, 1966, Vol. 31, 279–311.
- [437] TWEEDIE M.C.K., *An index which distinguishes between some important exponential families*, [In:] *Proceedings of the Indian Statistical Institute Golden Jubilee International Conference*, Calcutta, India, 1984, 579–604.

- 
- [438] ULFARSSON M.O., SOLO V., *Dimension estimation in noisy PCA with SURE and random matrix theory*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2008, Vol. 56, No. 12, 5804–5816.
- [439] VANLUYTEN B., WILLEMS J.C., MOOR B.D., *Structured nonnegative matrix factorization with applications to hidden Markov realization and clustering*, Linear Algebra and its Applications, 2008, Vol. 429, 1409–1424.
- [440] VASILESCU M.A.O., TERZOPOULOS D., *Multilinear analysis of image ensembles: Tensorfaces*, [In:] *Computer Vision – ECCV 2002*, A. Heyden et. al. (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 2350, Berlin-Heidelberg 2002, 447–460, 7-th European Conference on Computer Vision (ECCV 2002), Copenhagen, Denmark, May 27–June 2, 2002.
- [441] VAVASIS S.A., *On the complexity of nonnegative matrix factorization*, SIAM Journal on Optimization, 2009, Vol. 20, No. 3, 1364–1377.
- [442] VINCENT E., *Complex nonconvex lp norm minimization for underdetermined source separation*, [In:] *Independent Component Analysis and Signal Separation*, M. Davies, C. James, S. Abdallah, M. Plumbley (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, Vol. 4666, Berlin-Heidelberg 2007, 430–437, 7-th International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2007), London, UK, September 2007.
- [443] VIRTANEN T., *Monaural sound source separation by nonnegative matrix factorization with temporal continuity and sparseness criteria*, IEEE Transactions on Audio, Speech and Language Processing, 2007, Vol. 15, No. 3, 1066–1074.
- [444] VISA S., RAMSAY B., RALESCU A.L., VAN DER KNAAP E., *Confusion matrix-based feature selection*, [In:] *Proceedings of 22-nd Midwest Artificial Intelligence and Cognitive Science Conference (MAISC 2011)*, S. Visa, A. Inoue, A.L. Ralescu (Eds.), Cincinnati, Ohio, USA, April 16–17, 2011, 120–127.
- [445] VLASIC D., BRAND M., PHISTER H., POPOVIC J., *Face transfer with multilinear models*, ACM Transactions on Graphics, 2005, Vol. 24, 426–433.
- [446] WANG B.W., CICHOCKI A., CHAMBERS J.A., *A multiplicative algorithm for convolutive non-negative matrix factorization based on squared euclidean distance*, IEEE Transactions on Signal Processing, 2009, Vol. 57, No. 7, 2858–2864.
- [447] WANG D., LI T., ZHU S., DING C., *Multi-document summarization via sentence-level semantic analysis and symmetric matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 31st Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, Singapore, July 20–24, 2008, ACM Press, New York 2008, 307–314.
- [448] WANG D., LU H., *Incremental orthogonal projective non-negative matrix factorization and its applications*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Image Processing (ICIP 2011)*, Brussels, Belgium, September 11–14, 2011, 2077–2080.
- [449] WANG F.-Y., CHI C.-Y., CHAN T.-H., WANG Y., *Nonnegative least-correlated component analysis for separation of dependent sources by volume maximization*, IEEE Transactions Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2010, Vol. 32, No. 5, 875–888.
- [450] WANG H., AHUJA N., *Facial expression decomposition*, [In:] *Proceedings of 9-th IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV 2003)*, Nice, France, October 13–16, 2003, Vol. 2, 958–965.

- [451] WANG H., NIE F., HUANG H., MAKEDON F., *Fast nonnegative matrix tri-factorization for large-scale data co-clustering*, [In:] *Proceedings the 22-nd International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI '11)*, AAAI Press, 2011, Vol. 2, 1553–1558.
- [452] WANG Q., CAO Z., XU J., LI H., *Group matrix factorization for scalable topic modeling*, [In:] *Proceedings of the 35-th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval (SIGIR '12)*, ACM Press, New York, NY, USA, 2012, 375–384.
- [453] WANG X., XIE X., LU L., *An effective initialization for orthogonal nonnegative matrix factorization*, *Journal of Computational Mathematics*, 2012, Vol. 30, No. 1, 34–46.
- [454] WANG Y., JIA Y., HU C., TURK M., *Fisher nonnegative matrix factorization for learning local features*, [In:] *Proceedings of 6-th Asian Conference on Computer Vision*, Jeju Island, Korea, 2004, 27–30.
- [455] WEISS R.J., BELLO J.P., *Identifying repeated patterns in music using sparse convolutive non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of International Society for Music Information Retrieval Conference (ISMIR)*, Utrecht, Netherlands, August 2010, 123–128.
- [456] WHITTLE P., *On stationary processes in the plane*, *Biometrika*, 1954, Vol. 41, No. 3, 434–449.
- [457] WILD S., *Seeding non-negative matrix factorization with the spherical k-means clustering*, M.Sc. thesis, University of Colorado, 2003.
- [458] WILD S., CURRY J., DOUGHERTY A., *Improving non-negative matrix factorizations through structured initialization*, *Pattern Recognition*, 2004, Vol. 37, No. 11, 2217–2232.
- [459] XIAO M., XIE S., FU Y., *A statistically sparse decomposition principle for underdetermined blind source separation*, [In:] *Proceedings of 2005 International Symposium on Intelligent Signal Processing and Communication Systems (ISPACS 2005)*, Hong Kong, December 14–17, 2005, 165–168.
- [460] XIN Y., JAAKKOLA T., *Primal-dual methods for sparse constrained matrix completion*, *Journal of Machine Learning Research*, 2012, Vol. 22, 1323–1331.
- [461] XU W., LIU X., GONG Y., *Document clustering based on non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 26-th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Informaion Retrieval (SIGIR '03)*, ACM Press, New York, NY, USA, 2003, 267–273.
- [462] XU Y., *Alternating proximal gradient method for nonnegative matrix factorization*, [Online] CoRR, 2011, Vol. abs/1112.5407, <http://arxiv.org/abs/1112.5407>.
- [463] XU Y., YIN W., *A block coordinate descent method for regularized multiconvex optimization with applications to nonnegative tensor factorization and completion*, *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 2013, Vol. 6, No. 3, 1758–1789.
- [464] XU Y., YIN W., WEN Z., ZHANG Y., *An alternating direction algorithm for matrix completion with nonnegative factors*, *Frontiers of Mathematics in China*, 2012, Vol. 7, No. 2, 365–384.
- [465] XUE Y., TONG C.S., CHEN Y., CHEN W.-S., *Clustering-based initialization for non-negative matrix factorization*, *Applied Mathematics and Computation*, Special Issue on Advanced Intelligent Computing Theory and Methodology in Applied Mathematics and Computation, 2008, Vol. 205, No. 2, 525–536.
- [466] YANG J., YAN S., FU Y., LI X., HUANG T.S., *Non-negative graph embedding*, [In:] *Proceedings of 2008 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR 2008)*, 2008, 1–8.

- [467] YANG Z., OJA E., *Linear and nonlinear projective nonnegative matrix factorization*, IEEE Transactions on Neural Networks, 2010, Vol. 21, No. 5, 734–749.
- [468] YANG Z., ZHOU G., XIE S., DING S., YANG J.-M., ZHANG J., *Blind spectral unmixing based on sparse nonnegative matrix factorization*, IEEE Transactions on Image Processing, 2011, Vol. 20, No. 4, 1112–1125.
- [469] YOO J., CHOI S., *Orthogonal nonnegative matrix factorization: Multiplicative updates on Stiefel manifolds*, [In:] *Intelligent Data Engineering and Automated Learning*, C. Fyfe, D. Kim, S.-Y. Lee, H. Yin (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 5326, Berlin–Heidelberg 2008, 140–147, International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning (IDEAL 2008), Daejeon, South Korea, November 2–5, 2008.
- [470] YOO J., CHOI S., *Orthogonal nonnegative matrix tri-factorization for co-clustering: Multiplicative updates on Stiefel manifolds*, Information Processing & Management, 2010, Vol. 46, No. 5, 559–570.
- [471] YOSHII K., GOTO M., *Infinite composite autoregressive models for music signal analysis*, [In:] *Proceedings of the 13-th International Society for Music Information Retrieval Conference (ISMIR)*, F. Gouyon, P. Herrera, L. G. Martins, M. Müller (Eds.), FEUP Edições, 2012, 79–84.
- [472] YU S., ZHANG Y., LIU W., ZHAO N., XIAO X., YIN G., *A novel initialization method for nonnegative matrix factorization and its application in component recognition with three-dimensional fluorescence spectra*, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2012, Vol. 86, 315–319.
- [473] ZAFEIRIOU S., TEFAS A., BUCIU I., PITAS I., *Exploiting discriminant information in nonnegative matrix factorization with application to frontal face verification*, IEEE Transactions on Neural Networks, 2006, Vol. 17, No. 3, 683–695.
- [474] ŻAK M., *Rozpoznawanie ręcznie pisanych cyfr za pomocą nieujemnej faktoryzacji macierzy*, Praca magisterska, Politechnika Wroclawska, Wrocław 2011.
- [475] ZASS R., SHASHUA A., *A unifying approach to hard and probabilistic clustering*, [In:] *Proceedings of 10-th IEEE International Conference on Computer Vision, (ICCV 2005)*, Beijing, China, October 17–21, 2005, Vol. 1, 294–301.
- [476] ZASS R., SHASHUA A., *Doubly stochastic normalization for spectral clustering*, [In:] *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, B. Schölkopf, J. Platt, T. Hofmann (Eds.), MIT Press, Cambridge, MA, 2007, Vol. 19, 1569–1576.
- [477] ZDUNEK R., *Multigrid regularized image reconstruction for limited-data tomography*, Computational Methods in Science and Technology, 2007, Vol. 13, No. 1, 67–77.
- [478] ZDUNEK R., *Data clustering with semi-binary nonnegative matrix factorization*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, L. Zadeh, J. Zurada (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 5097, Berlin–Heidelberg 2008, 705–716, 9-th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2008), Zakopane, Poland, June 22–26, 2008.
- [479] ZDUNEK R., *Metody estymacji promienia spektralnego M-macierzy w celu identyfikacji rozwiązań nieujemnych problemu sterowania mocą w systemie WCDMA*, Referat z konf. KKRiIT, Wrocław, 9–11 kwietnia 2008. Przegląd Telekomunikacyjny, Wiadomości Telekomunikacyjne, 2008, vol. 81, nr 4, 705–716.

- [480] ZDUNEK R., *On image reconstruction algorithms for binary electromagnetic geotomography*, Special issue: Discrete Tomography and Digital Geometry: In memory of Prof. Attila Kuba. Theoretical Computer Science, 2008, Vol. 406, No. 1–2, 160–170.
- [481] ZDUNEK R., *Advances in nonnegative matrix factorization: Towards uniqueness*, [In:] *New Signal Processing Research*, T. Maeda (Ed.), Nova Science Publishers, Inc., Hauppauge, NY, 2008, 439–453.
- [482] ZDUNEK R., *Binary tomographic image reconstruction from limited-angle projections*, [In:] *Industrial and biological tomography : theoretical basis and applications*, J. Sikora, S. Wojtowicz (Eds.), Wydawnictwo Książkowe Instytutu Elektrotechniki, Warszawa 2010, 12–45.
- [483] ZDUNEK R., *Convolutive nonnegative matrix factorization with Markov random field smoothing for blind unmixing of multichannel speech recordings*, [In:] *Advances in Nonlinear Speech Processing*, C.M. Travieso-González, J.B. Alonso-Hernández (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 7015, Berlin–Heidelberg 2011, 25–32, 5-th International Conference on Nonlinear Speech Processing (NOLISP 2011), Las Palmas de Gran Canaria, Spain, November 7–9, 2011.
- [484] ZDUNEK R., *Regularized active set least squares algorithm for nonnegative matrix factorization in application to Raman spectra separation*, [In:] *Advances in Computational Intelligence*, J. Cabestany, I. Rojas, G. Joya (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 6692, Berlin–Heidelberg 2011, 492–499, 11-th International Work-Conference on Artificial Neural Networks (IWANN 2011), Torremolinos-Málaga, Spain, June 8–10, 2011.
- [485] ZDUNEK R., *Regularized NNLS algorithms for nonnegative matrix factorization with application to text document clustering*, [In:] *Computer Recognition Systems*, Robert Burduk *et al.* (Eds.), Advances in Intelligent and Soft Computing, Springer, Vol. 4, Berlin–Heidelberg 2011, 757–766, 7-th International Conference on Computer Recognition Systems (CORES 2011), Wrocław, May 23–25, 2011.
- [486] ZDUNEK R., *Supervised classification of texture patterns with nonnegative matrix factorization*, [In:] *2011 International Conference on Image Processing, Computer Vision, and Pattern Recognition (ICCV11)*, H.R. Arabnia, L. Deligiannidis, G. Schaefer (Eds.), CSREA Press, Vol. II, USA, 2011, 544–550, World Congress in Computer Science, Computer Engineering, and Applied Computing (WORLDCOMP 2011), Las Vegas, USA, July 18–21, 2011.
- [487] ZDUNEK R., *Uni-orthogonal nonnegative Tucker decomposition for supervised image classification*, [In:] *Image Analysis and Processing*, G. Maino, G.L. Foresti (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 6978, Berlin–Heidelberg 2011, 88–97, 16-th International Conference on Image Analysis and Processing, Ravenna, Italy, September 14–16, 2011.
- [488] ZDUNEK R., *Approximation of feature vectors in nonnegative matrix factorization with gaussian radial basis functions*, [In:] *Neural Information Processing*, T. Huang *et al.* (Eds.) Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7663, Berlin–Heidelberg 2012, 616–623, 9-th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2012), Doha, Qatar, November 12–15, 2012.
- [489] ZDUNEK R., *Hyperspectral image unmixing with nonnegative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Signals and Electronic Systems (ICSES 2012)*, Wrocław, September 18–21, 2012.



- 
- [490] ZDUNEK R., *Initialization of nonnegative matrix factorization with vertices of convex polytope*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, M. Korytkowski, R. Scherer, R. Tadeusiewicz, L.A. Zadeh, J.M. Zurada (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 7267, Berlin–Heidelberg 2012, 448–455, 11-th International Conference (ICAISC 2012), Zakopane, Poland, April 29–May 3, 2012.
- [491] ZDUNEK R., *Spectral signal unmixing with interior-point nonnegative matrix factorization*, [In:] *Artificial Neural Networks and Machine Learning*, A.E.P. Villa *et al.* (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7552, Berlin–Heidelberg 2012, 65–72, 22-nd International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN), Lausanne, Switzerland, September 11–14, 2012.
- [492] ZDUNEK R., *Trust-region algorithm for nonnegative matrix factorization with alpha and beta divergences*, [In:] *Pattern Recognition*, A. Pinz *et al.* (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7476, Berlin–Heidelberg 2012, 226–235, Joint 34-th DAGM and 36-th OAGM Symposium on Pattern Recognition (DAGM/OAGM 2012), Graz, Austria, August 28–31, 2012.
- [493] ZDUNEK R., *Improved convolutive and under-determined blind audio source separation with MRF smoothing*, *Cognitive Computation*, 2013, Vol. 5, No. 4, 493–503.
- [494] ZDUNEK R., *Regularized nonnegative matrix factorization: Geometrical interpretation and application to spectral unmixing*, *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 2014, Vol. 24, No. 2, 233–247.
- [495] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Nonnegative matrix factorization with quasi-Newton optimization*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, L. Zadeh, J. Zurada (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 4029, Berlin–Heidelberg 2006, 870–879, 8-th International Conference Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2006), Zakopane, Poland, June 25–29, 2006.
- [496] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Gibbs regularized nonnegative matrix factorization for blind separation of locally smooth signals*, [In:] *Proceedings of 15-th IEEE International Workshop on Nonlinear Dynamics of Electronic Systems (NDES 2007)*, Tokushima, Japan, July 23–26, 2007, 317–320.
- [497] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Nonnegative matrix factorization with constrained second-order optimization*, *Signal Processing*, 2007, Vol. 87, 1904–1916.
- [498] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Blind image separation using nonnegative matrix factorization with Gibbs smoothing*, [In:] *Neural Information Processing*, M. Ishikawa, K. Doya, H. Miyamoto, T. Yamakawa (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 4985, Berlin–Heidelberg 2008, 519–528, 14-th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP 2007), Kitakyushu, Japan, November 13–16, 2007.
- [499] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Fast nonnegative matrix factorization algorithms using projected gradient approaches for large-scale problems*, *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2008, No. 939567, 1–13.
- [500] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Improved M-FOCUSS algorithm with overlapping blocks for locally smooth sparse signals*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2008, Vol. 56, No. 10, 4752–4761.
- [501] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Nonnegative matrix factorization with quadratic programming*, *Neurocomputing*, 2008, Vol. 71, No. 10–12, 2309–2320.
- [502] ZDUNEK R., CICHOCKI A., *Sequential coordinate-wise DNMF for face recognition*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, R. Scherer, R. Tadeusiewicz,

- L. Zadeh, J. Zurada (Eds.), *Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI)*, Springer, Vol. 6113, Berlin–Heidelberg 2010, 563–570, 10-th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2010), Zakopane, Poland, June 13–17, 2010.
- [503] ZDUNEK R., CICHOCKI A., YOKOTA T., *B-spline smoothing of feature vectors in non-negative matrix factorization*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), L. Rutkowski *et al.* (Eds.), Vol. 8468, Springer International Publishing Switzerland, 2014, 72–81, 13-th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2014), Zakopane, Poland, June 1–5, 2014.
- [504] ZDUNEK R., HE Z., *Nesterov's iterations for NMF-based supervised classification of texture patterns*, [In:] *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, F. Theis *et al.* (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 7191, Berlin–Heidelberg 2012, 478–485, 10-th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2012), Tel Aviv, Israel, March 12–15, 2012.
- [505] ZDUNEK R., HE Z., CICHOCKI A., *Tomographic image reconstruction from limited-view projections with Wiener filtered FOCUSS algorithm*, [In:] *Proceedings of IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro (ISBI2008)*, Paris, France, May 14–17, 2008, 768–771.
- [506] ZDUNEK R., IGNOR T., *UMTS base station location planning with invasive weed optimization*, [In:] *Artificial Intelligence and Soft Computing*, L. Rutkowski, R. Scherer, R. Tadeusiewicz, L. Zadeh, J. Zurada (Eds.), Lecture Notes in Artificial Intelligence (LNAI), Springer, Vol. 6114, Berlin–Heidelberg 2010, 698–705, 10-th International Conference on Artificial Intelligence and Soft Computing (ICAISC 2010), Zakopane, Poland, June 13–17, 2010.
- [507] ZDUNEK R., NAWROCKI M.J., *On linear solvers in applications to WCDMA network optimization*, [w:] *Krajowa Konferencja Radiokomunikacji, Radiofonii i Telewizji (KKRRiT)*, Kraków, 15–17 czerwca 2005.
- [508] ZDUNEK R., NAWROCKI M.J., *Improved modeling of highly loaded UMTS network with nonnegative constraints*, [In:] *Proceedings of 17-th Annual IEEE International Symposium on Personal Indoor and Mobile Radio Communications*, Helsinki, Finland, September 11–14, 2006.
- [509] ZDUNEK R., NAWROCKI M.J., *Krylov subspace methods in application to WCDMA network optimization*, *Advances in Electronics and Telecommunications*, 2010, Vol. 1, No. 2, 22–25.
- [510] ZDUNEK R., NAWROCKI M.J., DOHLER M., AGHVAMI A.H., *Application of linear solvers to UMTS network optimization without and with smart antennas*, [In:] *Proceedings of 16-th Annual IEEE International Symposium on Personal Indoor and Mobile Radio Communications*, Vol. 4, Berlin, Germany, September 11–14, 2005, 2322–2326.
- [511] ZDUNEK R., PHAN A.H., CICHOCKI A., *Damped Newton iterations for nonnegative matrix factorization*, *Australian Journal of Intelligent Information Processing Systems*, 2010, Vol. 12, No. 1, 16–22.
- [512] ZDUNEK R., PHAN A.H., CICHOCKI A., *GNMF with Newton-based methods*, [In:] *Artificial Neural Networks and Machine Learning*, V. Mladenov *et al.* (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Vol. 8131, Berlin–Heidelberg 2013, 90–97, Proceedings of 23-rd International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN 2013), Sofia, Bulgaria, September 10–13, 2013.

- 
- [513] ZDUNEK R., PRAŁAT A., *Estimation of Tikhonov regularization parameter for image reconstruction in electromagnetic geotomography*, [In:] *Proceedings of 2-rd Symposium on Process Tomography in Poland*, Wrocław, wrzesień 2002, 107–114.
- [514] ZDUNEK R., PRAŁAT A., *Hyperparameter estimation in MAP image reconstruction*, [In:] *Proceedings of 3-rd Symposium on Process Tomography in Poland*, Łódź, 9–10 września 2004, 179–182.
- [515] ZDUNEK R., PRAŁAT A., *Analiza ograniczenia zakresu kąтового promieni sondujących w elektromagnetycznym profilowaniu ziemi*, [In:] *XI Krajowe Sympozjum Nauk Radiowych (URSI 2005)*, Poznań, 7–8 kwietnia 2005, 313–318.
- [516] ZDUNEK R., PRAŁAT A., *Detection of subsurface bubbles with discrete electromagnetic geotomography*, *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 2005, Vol. 20, 535–553, *Proceedings of the Workshop on Discrete Tomography and its Applications*, New York 2005.
- [517] ZDUNEK R., RUTKOWSKI T.M., *Nonnegative tensor factorization with smoothness constraints*, [In:] *Advanced Intelligent Computing Theories and Applications. With Aspects of Theoretical and Methodological Issues*, D.-S. Huang, D. Wunsch, D. Levine, K.-H. Jo (Eds.), *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 5226, Springer, Berlin–Heidelberg 2008, 300–307, *International Conference on Intelligent Computing (ICIC 2008)*, Shanghai, China, September 15–18, 2008.
- [518] ZHANG S., WANG W., FORD J., MAKEDON F., *Learning from incomplete ratings using non-negative matrix factorization*, [In:] *Proceedings of the 6-th SIAM Conference on Data Mining (SDM)*, 2006, 549–553.
- [519] ZHANG T., FANG B., TANG Y.Y., HE G., WEN J., *Topology preserving non-negative matrix factorization for face recognition*, *IEEE Transactions on Image Processing*, 2008, Vol. 17, No. 4, 574–584.
- [520] ZHANG T., TAO D., LI X., YANG J., *Patch alignment for dimensionality reduction*, *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2009, Vol. 21, No. 9, 1299–1313.
- [521] ZHENG Z., YANG J., ZHU Y., *Initialization enhancer for non-negative matrix factorization*, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2007, Vol. 20, No. 1, 101–110.
- [522] ZHI R., FLIERL M., RUAN Q., KLEIJN W., *Graph-preserving sparse nonnegative matrix factorization with application to facial expression recognition*, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics*, 2011, Vol. 41, No. 1, 38–52.
- [523] ZHONG M., GIROLAMI M., *Reversible jump MCMC for non-negative matrix factorization*, *Journal of Machine Learning Research*, 2009, Vol. 5, 663–670.
- [524] ZHOU G., CICHOCKI A., *Canonical polyadic decomposition based on a single mode blind source separation*, *IEEE Signal Processing Letters*, 2012, Vol. 19, 523–526.
- [525] ZHOU G., CICHOCKI A., XIE S., *Fast nonnegative matrix/tensor factorization based on low-rank approximation*, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2012, Vol. 60, 2928–2940.
- [526] ZHOU G., CICHOCKI A., XIE S., *Accelerated canonical polyadic decomposition by using mode reduction*, *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2013, Vol. 24, 2051–2062.
- [527] ZHOU G., XIE S., YANG Z., YANG J.-M., HE Z., *Minimum-volume-constrained non-negative matrix factorization: Enhanced ability of learning parts*, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2011, Vol. 22, No. 10, 1626–1637.

- [528] ZHOU G., YANG Z., XIE S., YANG J.-M., *Online blind source separation using incremental nonnegative matrix factorization with volume constraint*, IEEE Transactions on Neural Networks, 2011, Vol. 22, No. 4, 550–560.
- [529] ZHOU T., TAO D., WU X., *NESVM: A fast gradient method for support vector machines*, [In:] *Proceedings of IEEE International Conference on Data Mining (ICDM 2010)*, Sydney, Australia, December 14–17, 2010, 679–688.
- [530] ZHU H., ROHWER R., *Information geometric measurements of generalization*, Technical Report NCRG/4350, Neural Computing Research Group, Aston University, Birmingham, UK, August 31, 1995.
- [531] ZOIDI O., TEFAS A., PITAS I., *Multiplicative update rules for concurrent non-negative matrix factorization and maximum margin classification*, IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2013, Vol. 24, No. 3, 422–434.
- [532] ZWICK W.R., VELICER W.F., *Comparison of five rules for determining the number of components to retain*, Psychological Bulletin, 1986, Vol. 99, No. 3, 432–442.
- [533] ZYMNIS A., KIM S.-J., SKAF J., PARENTE M., BOYD S., *Hyperspectral image unmixing via alternating projected subgradients*, [In:] *Proceedings of the 41-st Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers (ACSSC 2007)*, Pacific Grove, CA, November 4–7, 2007, 1164–1168.

# Nonnegative Matrix and Tensor Factorization: Applications to Classification and Signal Processing

Nonnegative Matrix Factorization (NMF) and Nonnegative Tensor Factorization (NTF) are key tools for feature extraction and dimensionality reduction of nonnegative data. They have already found numerous applications in multi-discipline research areas, including artificial intelligence, pattern recognition and signal processing.

The book is a habilitation monograph that reflects a wide scope of original author achievements. The topic covers various aspects of NMF/NTF. The first chapter is more tutorial than the others. It introduces to the basic NMF and NTF models, explains the concept of alternating optimization, and discusses the selected methods for estimating a number of latent components. Chapter 2 provides an overview of objective functions, their relationships and motivation in the context of statistical inference. Chapter 3 presents a geometrical approach to NMF. It analyzes the problem of non-uniqueness in NMF geometrically, and shows possibilities of using *a priori* knowledge. Chapter 4 is concerned with various issues of the numerical algorithms used for updating nonnegative factors. It introduces several methods for initialization and termination of factor estimating processes. Then it gives a comprehensive description of the selected constrained optimization algorithms, such as the multiplicative, projected gradient descent, interior-point, active-set, and quasi-Newton ones. The chapter concludes with an empirical analysis of numerical properties of the discussed algorithms. Chapter 5 focuses on the advanced models and complex structures that are addressed for specific applications or the data with special structures. Chapter 6 covers a background material on multi-way array decompositions, in particular consid-

ring the models with nonnegativity constraints. Chapter 7 is application-oriented. We demonstrate the usefulness of the discussed methods only in three selected and very important areas of applications, including signal processing, partitional clustering and supervised classification. Finally, Chapter 8 contains concluding remarks, followed by a brief discussion on recent trends in development of the considered research areas.