

酒井稜平*, 宮田考史*

(*福岡工業大学)

1. はじめに

本稿では、トレース比最適化問題

$$\rho = \max_{V^T V = I_k} \frac{\text{tr}(V^T A V)}{\text{tr}(V^T B V)} \quad (1)$$

を扱う。ここで、 $A \in \mathbb{R}^{p \times p}$ は対称行列とし、 $B \in \mathbb{R}^{p \times p}$ は正定値対称行列とする。また、 $V \in \mathbb{R}^{p \times k}$ は正規直交列から成る行列とし、 I_k は k 次元単位行列とする。本問題は、次元削減や多群データ分類などの応用に現れる。

本研究では、部分空間を用いた反復アルゴリズム[1]を扱う。

2. 反復アルゴリズム

式(1)を解くためのアルゴリズム[1]は、次の3つのステップで構成される。

2.1 近似解の構築

j 次元の探索部分空間 U_j 内において、式(1)の近似解を求める。ここで、 $k \leq j \leq p$ とする。このとき、近似解 V は $V = U_j Z$ とする。ここで、 $U_j \in \mathbb{R}^{p \times j}$ は正規直交列から成る行列とし、 $(H_j, K_j) = (U_j^T A U_j, U_j^T B U_j)$ とする。また、 $Z \in \mathbb{R}^{j \times k}$ は、以下の射影されたトレース比問題の解であり、 ρ_j を ρ の近似値とする。

$$\rho_j = \max_{Z^T Z = I_k} \frac{\text{tr}(Z^T H_j Z)}{\text{tr}(Z^T K_j Z)} \quad (2)$$

また、残差行列

$$R = AV - \rho_j BV - V\Lambda$$

を用いることで近似解の精度を測る。ここで、 $\Lambda = V^T A V - \rho_j V^T B V$ は、 $H_j - \rho_j K_j$ の k 個の最大固有値から成る対角行列である。

2.2 部分空間の生成

探索部分空間の大きさを、最小次元 m_1 から最大次元 m_2 まで拡張することで、より良い近似解を求める。ここで、 $k \leq m_1 < m_2 \leq p$ とする。

現在の探索部分空間 U_j は、残差行列 R の特異値分解によって得られる m 個の最大特異値に対応する左特異ベクトル u_i ($i = j+1, \dots, j+m$)によって拡張される。ここで、 $1 \leq m \leq k$ とし、 m は一般的に m_1 と m_2 の除数とする。

残差行列 R はガレルキン条件 $R \perp U_j$ を満たすため、拡張された基底 U_m の列ベクトルは、 U_j の列ベクトルに対して直交する必要がある。そのため、基底の直交性を保つために、拡張された基底 U_m に対して再直交化を行う。

2.3 リスタート

探索部分空間の大きさが最大次元 m_2 に到達した場合、その大きさを最小次元 m_1 まで縮小する。これにより、 $m_2 \ll p$ としたとき、射影されたトレース比問題(2)を解くための計算量とメモリ使用量を一定以下に抑えることが可能である。

反復を通してトレース比の値が単調に増加するように、以下の方法を用いる。具体的には、 $H_{m_2} - \rho_{m_2} K_{m_2}$ の k 個の最大固有ベクトルから成る Z を、それに次ぐ $m_1 - k$ 個の固

有ベクトルから成る Z_{m_1-k} によって拡張し、再開後の新たな探索部分空間 U_{m_1} を $U_{m_1} = U_{m_2} Z_{m_1-k}$ とする。ここで、 $Z_{m_1-k} = [Z \ Z_{m_1-k}]$ とする。

3. 本研究

従来法では、拡張された基底 U_m に対してのみ再直交化を行っていたが、本研究では、より数値的な直交性を保つために、拡張後の基底 U_{j+m} に対して再直交化を行う。

4. 数値実験

本実験では、入力行列 A, B をランダムな正定値対称行列とし、初期基底 U_{m_1} を乱数によって与える。また、各パラメータ (p, k, m, m_1) の値をそれぞれ(100, 5, 5, 10)とする。最大次元 m_2 の値を20, 30, 40とした場合の残差 $\|R\|_F$ の収束履歴を図1, 2に示す。ここで、アルゴリズムの停止基準は、 $\|R\|_F < 10^{-10}$ とする。

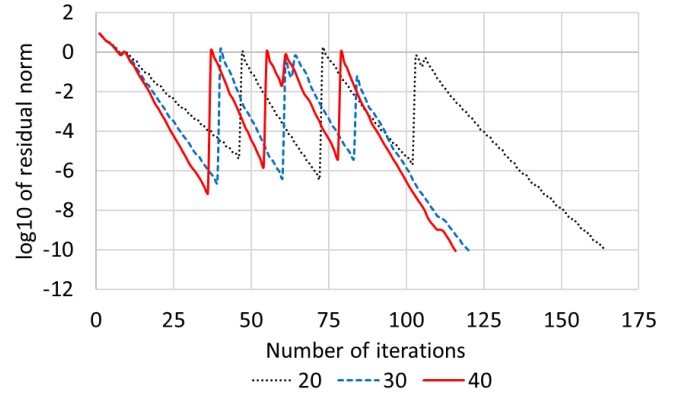
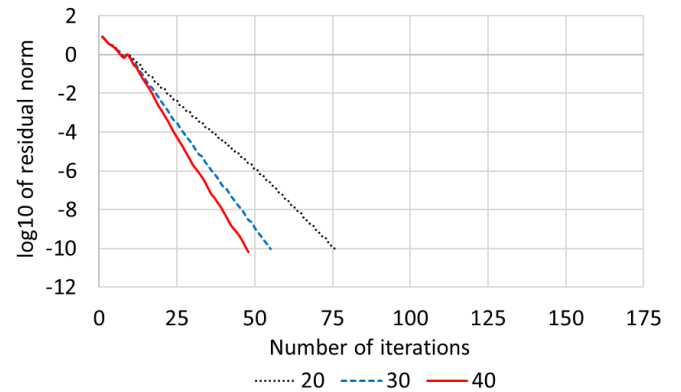
図1 従来法の残差 $\|R_F\|$ の収束履歴図2 提案法の残差 $\|R_F\|$ の収束履歴

図1, 2より、 m_2 の値を大きくするにつれて収束は速くなった。また、提案法では、 m_2 の値がいずれの場合においても、従来法より速く収束した。

参考文献

[1] G. Ferrandi et al., A subspace method for large-scale trace ratio problems, *Comput. Stat. Data An.*, 205 (2025) 108108.