

MINRES 法に基づくシフト線形方程式および一般化シフト線形方程式解法の性能評価

Performance Evaluation of Solvers for Shifted and Generalized Shifted Linear Systems Based on the MINRES Method

日高 俊太郎 (Shuntaro Hidaka)¹, 工藤 周平 (Shuhei Kudo)¹, 山本 有作 (Yusaku Yamamoto)¹

¹ 電気通信大学 (The University of Electro-Communications)

e-mail : h2431131@edu.cc.uec.ac.jp

1 概要

シフト線形方程式は、電子構造計算や周回積分型固有値解法において現れる重要な部分問題であり、近年では行列関数の計算における部分問題としても注目されている。いま、 I を単位行列とすると、標準シフト線形方程式（あるいは単にシフト線形方程式）、一般化シフト線形方程式はそれぞれ式 (1), (2) により定義される。

$$(A + \sigma^{(m)}I)\mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{b}, \quad (m = 1, \dots, M) \quad (1)$$

$$(A + \sigma^{(m)}B)\mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{b}, \quad (m = 1, \dots, M) \quad (2)$$

本発表では、係数行列 A が実対称またはエルミートである場合に適用可能な MINRES 法に基づく解法 (shifted MINRES 法; sMINRES) [1, 2] に着目し、他の Krylov 部分空間法に基づくシフト線形方程式解法と比較を行う。具体的には、複素対称行列向けの shifted COCG 法 (sCOCG) [3] および一般行列向けの shifted BiCG 法 (sBiCG) [4] と比較し、各手法の演算コストおよび数学的性質を理論的・数値的に評価する。また、分散メモリ型並列計算機上での sMINRES の並列化モデルを検討し、さらに一般化シフト線形方程式への拡張についても検討する。

2 shifted MINRES 法

本節では、係数行列 A が実対称またはエルミートである場合に適用可能な sMINRES について述べる。sMINRES は MINRES 法 [5] に基づいており、残差ノルムの単調減少性や、正確な演算の下での無破綻性といった性質を有する。一方、sCOCG や sBiCG は複素対称行列など sMINRES が適用できないクラスの行列にも適用できるものの、これらの性質を持たない。以下では sMINRES のアルゴリズムを概説し、sCOCG および sBiCG と演算コストの観点から比較を行う (表 1)。

1. A に対して Lanczos 過程を実行し、正規直交基底 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ および三重対角行列 \hat{T}_n を構成

$$AV_n = V_{n+1}\hat{T}_n, \quad V_n = [\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n], \quad T_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_n \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}, \quad \hat{T}_n = \begin{bmatrix} T_n \\ \beta_n \mathbf{e}_n^\top \end{bmatrix} \quad (3)$$

2. $m = 1, 2, \dots, M$: シフトループ

1. $\hat{T}_n^{(m)} = \hat{T}_n + \sigma^{(m)} \begin{bmatrix} I \\ \mathbf{0}^\top \end{bmatrix}$ とおく ($(A + \sigma^{(m)}I)V_n = V_{n+1}\hat{T}_n^{(m)}$ が成り立つ)

2. $\hat{T}_n^{(m)}$ の QR 分解を計算する ($T_n^{(m)} = Q_n R_n$)

3. $\mathbf{y}_n^{(m)} = \|\mathbf{b}\| R_n^{-1} Q_n^H \mathbf{e}_1$ を求める ($\|\mathbf{r}_n^{(m)}\| = \|\|\mathbf{b}\| \mathbf{e}_1 - \hat{T}_n^{(m)} \mathbf{y}_n^{(m)}\|$)

4. 最小残差解 $\mathbf{x}_n^{(m)} = V_n \mathbf{y}_n^{(m)}$ を求める

表 1. 各手法の 1 反復あたりの演算コスト (シフト数 M , ベクトルのサイズ N , 非ゼロ要素数 N_{NZ})

	sMINRES	sCOCG	sBiCG
行列ベクトル積 SpMV	$\mathcal{O}(N_{\text{NZ}})$	$\mathcal{O}(N_{\text{NZ}})$	$\mathcal{O}(2N_{\text{NZ}})$
ベクトルの加減算 axpy	$\mathcal{O}((3M+2)N)$	$\mathcal{O}((2M+2)N)$	$\mathcal{O}((3M+4)N)$
ベクトルのスカラー倍 scal	$\mathcal{O}((M+1)N)$	$\mathcal{O}((2M-1)N)$	$\mathcal{O}((3M-1)N)$
ベクトルのノルム nrm2	$\mathcal{O}(N)$	$\mathcal{O}(N)$	$\mathcal{O}(N)$
ベクトルの内積 dot	$\mathcal{O}(N)$	$\mathcal{O}(2N)$	$\mathcal{O}(2N)$
ベクトルのコピー copy	$\mathcal{O}((3M+2)N)$	$\mathcal{O}((M-1)N)$	$\mathcal{O}((M-1)N)$

数値実験では、エルミート行列に対し、sMINRES が sBiCG より高速であるという結果が得られた。

3 並列化モデル

sMINRES は、共通の Lanczos 過程の結果を用いて各方程式の解の更新を独立に行う構造を有しており、前者における **SpMV**, **dot**, **axpy** などのベクトル演算の並列性と、シフトに関する大粒度並列性の 2 つの並列性を持つ。この性質を活かし、本研究では以下の 2 種類の並列化モデルを検討した。

モデル 1: 行方向分割によるベクトル演算の MPI 並列化 + シフトループの OpenMP 並列化

モデル 2: Lanczos 過程を各プロセスで重複実行 + シフトループを MPI+OpenMP で並列化

モデル 1 では Lanczos 過程を並列化できるが、**SpMV**, **nrm2**, **dot** で通信が必要となる。一方、モデル 2 は各プロセスで独立に計算を行うため通信が不要だが、Lanczos 過程を全プロセスで重複実行する点で無駄があり、また、担当する方程式の収束までの反復回数の違いにより負荷不均衡が生じる。

数値実験では、大規模行列ではモデル 1 が、小規模行列ではモデル 2 が高速であるという結果が得られた。なお、ここで述べた並列化モデルは sMINRES に限らず、他の手法にも適用可能である。

4 終わりに

アルゴリズムの詳細や一般化シフト線形方程式への拡張、数値実験の結果は講演時に報告する。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP22K19772, 25H00449, 25K03124 の助成を受けている。

参考文献

- [1] R. Freund, On conjugate gradient type methods and polynomial preconditioners for a class of complex non-hermitian matrices, Numer. Math., 57 (1990), 285–312.
- [2] S. Hidaka, S. Kudo, T. Hoshi, Y. Yamamoto, Performance of the shifted minimal residual method for multiply shifted linear systems with real symmetric or complex Hermitian coefficient matrices, Comput. Phys. Comm., 314 (2025), 109679.
- [3] S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara, Shifted Conjugate-Orthogonal-Conjugate-Gradient Method and Its Application to Double Orbital Extended Hubbard Model, J. Phys. Soc. Jpn., 77 (2008), 114713.
- [4] A. Frommer, BiCGStab(ℓ) for Families of Shifted Linear Systems, Comput., 70 (2003), 87–109.
- [5] C. C. Paige, M. A. Saunders, Solution of sparse indefinite systems of linear equations, SIAM J. Numer. Anal., 12 (1975), 617–629.

特異値と片側の特異ベクトルを利用した最小二乗法による特異ベクトル計算について

Singular vector computation adopting least squares method based on singular values and one-sided singular vectors

千代延 未帆 (Miho Chiyonobu)¹, 高田 雅美 (Masami Takata)²,
 木村 欣司 (Kinji Kimura)³, 中村 佳正 (Yoshimasa Nakamura)⁴,
¹ 滋賀大学 (Shiga University), ² 奈良女子大学 (Nara Women's University),
³ 福井大学 (UNIVERSITY OF FUKUI), ⁴ 大阪成蹊大学 (OSAKA SEIKEI UNIVERSITY)
 e-mail : miho-chiyonobu@biwako.shiga-u.ac.jp

1 概要

$n \times n$ の上 2 重対角行列 B に対する陽的シフトつき Orthogonal QD (OQDS) 法 [1] は, 特異値を相対誤差の意味で高精度に計算でき, 左特異ベクトルの直交性も高く, 小さいほうから順に特異値と特異ベクトルを計算できるという利点を持つ. 大きいほうから順に特異値と特異ベクトルを計算する問題は簡単な操作で小さいほうから順に特異値と特異ベクトルを計算する問題に変換できるので, OQDS 法は大きいほうから順に特異値と特異ベクトルを計算できる解法とも言える. これは, データサイエンスには必須の機能である. しかし, 行列の次元が増大するにつれ, QR 法に比べて, 単位行列との差をフロベニウスノルムで評価した場合, 右特異ベクトルの直交性が悪化するスピードが速いという欠点も存在する. その欠点を克服するために, 特異値と左特異ベクトルの計算結果を利用した最小二乗法により, 右特異ベクトルを計算する手法を提案する.

2 提案法

値の大きいほうから w 個の計算によって得られた特異値, それに付随する左特異ベクトル, 右特異ベクトルを $\hat{\Sigma}_w, \hat{U}_w, \hat{V}_w$ とすれば, $\left\| \hat{U}_w^\top \hat{U}_w - I \right\|_F, \left\| \hat{V}_w^\top \hat{V}_w - I \right\|_F, \left\| B \hat{V}_w - \hat{U}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F, \left\| B^\top \hat{U}_w - \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F$ が, 特異値分解の計算誤差を測定する基準である. しかし, 4 つの基準には冗長性がある. $\hat{\Sigma}_w$ が微小特異値を含まないとする. $\left\| \hat{U}_w^\top \hat{U}_w - I \right\|_F, \left\| B \hat{V}_w - \hat{U}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F, \left\| B^\top \hat{U}_w - \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F$ の 3 つの基準において, その値が小さいのであれば, $B \hat{V}_w \approx \hat{U}_w \hat{\Sigma}_w$ より

$$\hat{U}_w \approx B \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w^{-1}. \quad (1)$$

$B^\top \hat{U}_w \approx \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w$ より $\hat{U}_w \approx B^{-\top} \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w$, すなわち,

$$\hat{U}_w^\top \approx \hat{\Sigma}_w \hat{V}_w^\top B^{-1}. \quad (2)$$

式 (1) と式 (2) より, $I \approx \hat{U}_w^\top \hat{U}_w \approx \hat{\Sigma}_w \hat{V}_w^\top B^{-1} B \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w^{-1} \approx \hat{\Sigma}_w \hat{V}_w^\top \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w^{-1}$ であるため, $\hat{V}_w^\top \hat{V}_w \approx \hat{\Sigma}_w^{-1} \hat{\Sigma}_w = I$ が言える. OQDS 法は, $\left\| \hat{U}_w^\top \hat{U}_w - I \right\|_F$ が小さい値になることは達成しているため, $\left\| B \hat{V}_w - \hat{U}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F$ と $\left\| B^\top \hat{U}_w - \hat{V}_w \hat{\Sigma}_w \right\|_F$ が小さな値になればよい. 計算によって得られた特異値を $\hat{\sigma}$, 計算によって得られた左特異ベクトルを \hat{u} とすると, 最適な右特異ベクトル \hat{v} とは,

$$\hat{v} = \operatorname{argmin}_v \left\| \begin{bmatrix} B \\ \hat{\sigma} I \end{bmatrix} v - \begin{bmatrix} \hat{u} \hat{\sigma} \\ B^\top \hat{u} \end{bmatrix} \right\| \quad (3)$$

である. 最小二乗問題の正規方程式は, $(B^\top B + \hat{\sigma}^2 I) \hat{v} = 2 \hat{\sigma} B^\top \hat{u}$ である.

計算された左特異ベクトル \hat{u} が真の左特異ベクトル $u_k (k = 1, \dots, n)$ で、右特異ベクトル \hat{v} が真の右特異ベクトル $v_k (k = 1, \dots, n)$ で、それぞれ展開されたとする。 $\hat{u} = \sum_{k=1}^n c_k u_k$, $\hat{v} = \sum_{k=1}^n \alpha_k v_k$. $B^\top = \sum_{k=1}^n v_k \sigma_k u_k^\top$, $B^\top B = \sum_{k=1}^n v_k \sigma_k^2 v_k^\top$ より, $\alpha_k = \frac{2\hat{\sigma}\sigma_k}{\sigma_k^2 + \hat{\sigma}^2} c_k$ が成立するため, $\hat{v} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{2\hat{\sigma}\sigma_k}{\sigma_k^2 + \hat{\sigma}^2} \right) c_k v_k$ を得る. ここで, $a > 0, x > 0$ として, 関数 $f(x) = \frac{2ax}{x^2 + a^2}$ について考える. $x = a$ のとき最大値 $f(a) = 1$ をとる. $f(x) = \frac{4}{5}$ となるのは, $x = \frac{1}{2}a, 2a$ のときである.

- 1) $\hat{\sigma}$ に最も近いのは k 番目の σ_k とする. OQDS 法のように特異値を相対誤差の意味で高精度に計算できる計算法であるならば, $\frac{2\hat{\sigma}\sigma_k}{\sigma_k^2 + \hat{\sigma}^2} \approx 1$
- 2) それ以外にも, 領域 $\frac{1}{2}\hat{\sigma} \leq x \leq 2\hat{\sigma}$ の中にある $\sigma_{k'}$ については, 相加平均と相乗平均の比は 1 に近い値を取れたため, \hat{u} が $\sigma_{k'}$ に対する真の特異ベクトル $u_{k'}$ の成分を含むならば, \hat{v} も $\sigma_{k'}$ に対する真の特異ベクトル $v_{k'}$ の成分を含むことができる. $\hat{\sigma}$ が小さい値の場合, 領域は狭くなり, 上の仮定は成立し難くなる.
- 3) $\hat{\sigma}$ が微小特異値に対する計算値でないならば, \hat{v} は \hat{u} を構成する主要な真の左特異ベクトルの結合定数と同じ結合定数をもつ, 真の右特異ベクトルの線形結合によって構成されていると期待できる. すなわち, 微小特異値に付随する特異ベクトルを計算しない場合, \hat{V}_w の直交性の評価指標の値 $\left\| \hat{V}_w^\top \hat{V}_w - I \right\|_F$ は, \hat{U}_w の直交性の評価指標の値 $\left\| \hat{U}_w^\top \hat{U}_w - I \right\|_F$ に一致することが期待できる.

式 (3) を解く. ギブンス回転のみを利用することで, $P_1 \begin{bmatrix} B \\ \hat{\sigma} I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L \\ O \end{bmatrix}$ を満たす $2n \times 2n$ の直交行列 P_1 を計算できる. L は下 2 重対角行列である.

$$\hat{v} = \operatorname{argmin}_v \left\| \begin{bmatrix} L \\ O \end{bmatrix} v - P_1^\top \begin{bmatrix} \hat{u}\hat{\sigma} \\ B^\top \hat{u} \end{bmatrix} \right\|$$

上の問題に対して, 前進消去を利用して解く. つぎに, OQDS 法の概要を紹介する. $\hat{L}^{(0)} \equiv L$ として, $\hat{L}^{(i)}$ は $n \times n$ の下 2 重対角行列, $r^{(i)}$ は, $r^{(i)} \leq \sigma_{\min}(\hat{L}^{(i)})$ を満たす. $\tilde{G}^{(i)}$ は $2n \times 2n$ の一般化ギブンス回転とギブンス回転の積, $\hat{G}^{(i)}$ は $n \times n$ のギブンス回転の積とする. $z^{(0)} = 0$, $z^{(i+1)} = \sqrt{(z^{(i)})^2 + (r^{(i)})^2}$ として,

$$(\text{LU step}) \quad \tilde{G}^{(i)} \begin{bmatrix} \hat{L}^{(i)} \\ z^{(i)} I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{B}^{(i)} \\ z^{(i+1)} I \end{bmatrix}, \quad (\text{UL step}) \quad \begin{bmatrix} I & O \\ O & (\hat{G}^{(i)})^\top \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{B}^{(i)} \\ z^{(i+1)} I \end{bmatrix} \hat{G}^{(i)} = \begin{bmatrix} \hat{L}^{(i+1)} \\ z^{(i+1)} I \end{bmatrix}$$

の計算式に従って反復を行う計算法である. LU step は, $r^{(i)}$ を $\hat{L}^{(i)}$ から減算する. 一方で, P_1 は, $\hat{\sigma}$ を B に足し込むため, P_1 は OQDS 法の計算を逆向きに行うことで得られる. その帰結として, 提案法の計算量は $O(n)$ である. しかし, $\hat{\sigma}$ を B に足し込む演算においては情報落ちが発生するため, $\hat{\sigma} \leq (\text{計算機イプシロン})^2 \sigma_{\max}$ を満たす $\hat{\sigma}$ については提案手法を適用できない. ここで, σ_{\max} は最大特異値を表す. 提案法の計算速度と計算精度の指標の値 $\left\| \hat{U}_w^\top \hat{U}_w - I \right\|_F$, $\left\| \hat{V}_w^\top \hat{V}_w - I \right\|_F$, $\left\| B\hat{V}_w - \hat{U}_w\hat{\Sigma}_w \right\|_F$, $\left\| B^\top \hat{U}_w - \hat{V}_w\hat{\Sigma}_w \right\|_F$ については, 当日報告する.

参考文献

- [1] Urs von Matt, The Orthogonal qd-Algorithm, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 18, Iss. 4 (1997).

前進誤差に焦点を当てた固有値分解の反復改良法

Forward Error-Oriented Iterative Refinement for Eigenvalue Decomposition of a Real Symmetric Matrix

寺尾 剛史 (Takeshi Terao)¹, 尾崎 克久 (Katsuhisa Ozaki)²,

¹ 九州大学 (Kyushu University), ² 芝浦工業大学 (Shibaura Institute of Technology)

e-mail : terao.takeshi.412@m.kyushu-u.ac.jp

1 概要

実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対する固有値分解

$$AX = XD, \quad X^T X = I, \quad X, D \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad (1)$$

を考える。ただし、 λ_i を A の固有値、 $x^{(i)}$ を λ_i に対する固有ベクトルとしたとき、

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n, \quad D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \quad X = (x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) \quad (2)$$

とする。また、 I は単位行列である。

行列 $\hat{X}, \hat{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ をそれぞれ X, D の近似とする。ただし、 $\hat{D} = \text{diag}(\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_n)$ とする。固有値分解に対する精度は、後退誤差 $\|\hat{X}^T \hat{X} - I\|$ や $\|\hat{X}^T A \hat{X} - \hat{D}\|$ の大きさによって評価され、多くのアルゴリズムで十分に小さい値が得られることが多い。

一方で、前進誤差 $\delta := \|X - \hat{X}\|$ の大きさに焦点を当てたアルゴリズムは少なく、多くの場合で不透明である。精度保証付き数値計算は、前進誤差の上限を定量的に評価できる一方で、追加の計算コストが必要である。提案手法の目的は、 δ を入力として十分に反復改良を行った近似固有ベクトル行列 \hat{X} に対して $\delta \approx \|X - \hat{X}\|_2$ を達成する高速なアルゴリズムを開発することである。

2 主結果

固有ベクトル行列 X とその近似 \hat{X} に対して、修正行列 E を $X = \hat{X} + \hat{X}E$ によって定義する。ここで、 E の近似 \tilde{E} を効率的に計算する方法が知られている [1]。我々は、 \tilde{E} の計算に対して、行列積のエラーフリー変換 [2, 3] を活用する効率的な計算法を提案する。

近似固有ベクトル行列 \hat{X} の (i, j) 成分 \hat{x}_{ij} に対して以下の以下の計算

$$\hat{x}_{ij} \leftarrow (\hat{x}_{ij} + \tau_j) - \tau_j \quad (3)$$

を浮動小数点演算を用いて行う。ただし、

$$\tau_j := \begin{cases} 0, & w_j = 0, \\ 0.75 \cdot 2^{\lceil \log_2 w_j \rceil} \cdot 2^\beta, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (4)$$

$$\beta := \left\lceil \log_2 \left(\frac{1}{0.75 \cdot u} \cdot \sqrt{\frac{\delta \cdot n \cdot \min_{i \neq j} |\hat{\lambda}_j - \hat{\lambda}_i|}{\max_k |\hat{\lambda}_k| \cdot \sum_{j=1}^n 2^{2 \lceil \log_2 w_j \rceil}}} \right) \right\rceil, \quad (5)$$

$$w_j := \max_i |\hat{x}_{ij}| \quad (6)$$

であり、 δ は指定可能な前進誤差 $\|X - \hat{X}\|_2$ の近似、 u は単位相対丸めである。また、 $\beta \in \mathbb{N}$ を仮定する。

このとき、 $\alpha := -\log_2 u + \lceil \log_2 n \rceil - \beta$ として、行列 A のエラーフリー変換 [3] を行い

$$A = \sum_{p=1}^{n_A} A^{(p)} \quad (7)$$

と分解する。ここで、 $1 \leq p \leq n_A - 1$ のとき、 $A^{(p)} \hat{X}$ に対する数値計算で丸め誤差が発生しない。

3 数値実験

行列 A を MATLAB 2024b を用いて

$$A = \text{gallery}('randsvd', 100, -\text{cnd});$$

と生成した。このとき行列 A は、サイズが 100、条件数の近似が cnd の対称行列である。

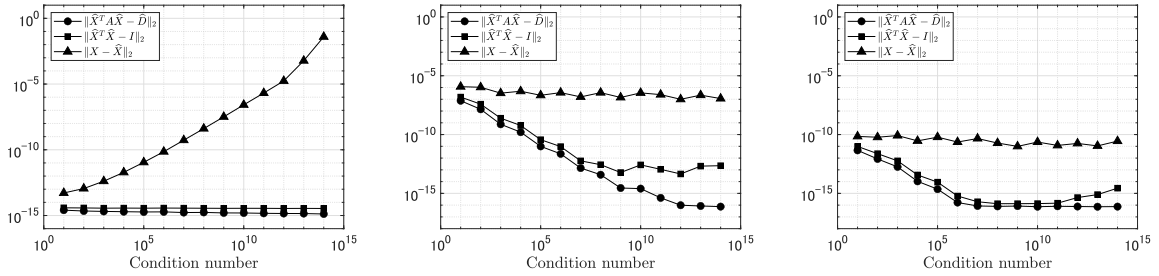


図 1: 提案手法の誤差. (左): $[\hat{X}, \hat{D}] = \text{eig}(A)$. (中): $\delta = 10^{-6}$. (右): $\delta = 10^{-10}$.

図 1 では、MATLAB の倍精度固有値ソルバ `eig` の計算結果と $\delta = 10^{-6}, 10^{-10}$ を用いた提案手法の数値実験結果を示す。MATLAB の計算結果は、小さい後退誤差を達成している一方で、条件数の増加に伴う前進誤差の悪化が確認できる。一方で、提案手法は前進誤差を δ を用いて近似的に指定が可能であることを示している。

提案手法は、行列積に対するエラーフリー変換を用いた固有値分解の反復改良法であり、混合精度計算を用いた効率的な固有値ソルバの開発や前進誤差を近似的に把握ができる高信頼計算の基礎研究である。本発表では、提案手法が有効な条件を述べ、数値実験を用いて提案手法の有効性を示す。

参考文献

- [1] T. Ogita and K. Aishima. Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 35, pp. 1007–1035, 2018.
- [2] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, and S.M. Rump. Error-free transformations of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications. *Numerical Algorithms*, Vol. 59, pp. 95–118, 2012.
- [3] Katsuhisa Ozaki, Takeshi Ogita, Shin'ichi Oishi, and Siegfried M Rump. Generalization of error-free transformation for matrix multiplication and its application. *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, Vol. 4, No. 1, pp. 2–11, 2013.

シングルセル遺伝子発現データに対するクラスタリングのための差分進化に基づく特徴選択法

Feature Selection Method Based on Differential Evolution for Clustering of scRNA-seq data

市原 数馬 (Kazuma Ichihara)¹, 今倉 暁 (Akira Imakura)¹, 櫻井 鉄也 (Tetsuya Sakurai)¹

¹ 筑波大学 (University of Tsukuba)

e-mail : s2520582@u.tsukuba.ac.jp

1 概要

シングルセル遺伝子発現データは、個々の細胞についての mRNA 全体を網羅的に表現したデータであり、現在の生物学及び医学分野研究に有用な知見をもたらすことが知られている [1]. シングルセル遺伝子発現データはサンプル数 (細胞数) に対して特徴数 (遺伝子数) が多く、またデータを取得する過程で発生するノイズが多く含まれる傾向にあるため、これらがクラスタリングによる細胞タイプの決定に悪影響を与える場合がある。これに対し、ノイズを含む特徴や下流の解析に不要な特徴をあらかじめ削除する特徴選択が行われてきた。特徴選択手法には、統計量などを用いてフィルタリングすることによって特徴選択を行うフィルター法や特徴の組み合わせをモデルで評価することによって特徴選択を行うラッパー法などが存在する。

既存の特徴選択手法として、シングルセル遺伝子発現データ解析ツールとして知られる Seurat や scmap などを用いられるフィルター法による手法が挙げられる。一方、ラッパー法によるシングルセル遺伝子発現データの特徴選択手法はフィルター法による手法に比べ広く利用されてない。これに対し近年、ラッパー法による特徴選択手法として、シングルセル遺伝子発現データを用いた細胞分類タスクに用いられる QDE-SVM[2] が提案された。QDE-SVM は、差分進化 (DE) の一手法である Quantum Inspired Differential Evolution(QDE) を用いて特徴選択を反復的に改良する手法であり、シングルセル遺伝子発現データの細胞分類タスクにおいて高い精度を示すことが報告されている。

本研究では、シングルセル遺伝子発現データに対するクラスタリング精度向上を目的とし、QDE に基づく特徴選択手法を提案する。

2 提案手法

本研究において、入力サンプル数 n 、特徴数 d の行列 $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ とする。また出力はクラスタ数 k であるとき、 $y \in \{m \in \mathbb{N}^n | 1 \leq m_i \leq k, \forall i\}$ と表現されるベクトルである。入力 X から出力 Y を得る処理を、クラスタリングと呼ぶ。また特徴選択は、行列 $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ を入力とし、特徴選択列 v を用いて $d' < d$ となる $X' \in \mathbb{R}^{n \times d'}$ を得る処理である。この際、 d' 個の 1 および $d - d'$ 個の 0 をもつ特徴選択列 $v = [v_1, v_2, \dots, v_d]$ を用いて、 v_i が 1 であるとき X の i 列を残し、 v_i が 0 であるとき X の i 列を削除することによって行う。

QDE は複数の候補解に対し、突然変異、交叉、選択のステップを反復して行うことで最適化を行うアルゴリズムである。本提案手法では、QDE による最適化ステップを指定された世代数に達するまで反復して実行し、得られた候補解の中から最も適合度の高い候補解を特徴選択列 v とする。最適化を行う第 t 世代目の j 番目の候補解を d 次元ベクトル $\theta_j^{(t)}$ とする。

突然変異ステップでは, 同世代の異なる候補解 $\theta_{j_1}^{(t)}, \theta_{j_2}^{(t)}, \theta_{j_3}^{(t)}$ を組み合わせてベクトル $m_j^{(t)}$ を

$$m_j^{(t)} = \theta_{j_1}^{(t)} + F \cdot (\theta_{j_2}^{(t)} - \theta_{j_3}^{(t)})$$

のように作成する. このとき F は 0 から 1 までの値を取るパラメータである.

交差ステップでは, トライアルベクトル $c_i^{(t)}$ を候補解 $\theta^{(t)}$ とベクトル $m_j^{(t)}$ の成分を乱数を用いて選択することで生成する.

選択ステップでは, 候補解 $\theta^{(t)}$ と得られたトライアルベクトル $c_i^{(t)}$ について適合度を計算し, より高い適合度をもつベクトルを次世代の候補解 $\theta^{(t+1)}$ に選択する. その際, 適合度としてクラスタ構造を捉えるために確率分布で表現したサンプルの類似度の KL ダイバージェンスを利用する. 特徴選択前後のサンプル a, b の類似度は確率分布 p_{ab}, q_{ab} を用いて

$$p_{b|a} = \frac{\exp(-\|X_a - X_b\|^2/2\sigma_a^2)}{\sum_{k \neq a} \exp(-\|X_a - X_k\|^2/2\sigma_a^2)}, \quad p_{ab} = \frac{p_{a|b} + p_{b|a}}{2n},$$

$$q_{ab} = \frac{(1 + \|X'_a - X'_b\|^2)^{-1}}{\sum_{k \neq a} (1 + \|X'_a - X'_k\|^2)^{-1}}$$

と表現することができる. これらを用いて特徴選択前後の KL ダイバージェンスは

$$\sum_a KL(P||Q) = \sum_a \sum_b p_{ba} \log \frac{p_{ba}}{q_{ba}}$$

として計算できる. KL ダイバージェンスの値および選択された特徴数の少なさをを用いて適合度を計算し, より高いものを選択する. 突然変異, 交叉, 選択のステップはあらかじめ指定された世代数に達するまで反復して行う. 反復終了後, 最も適合度の高い候補解を特徴選択列 v とする.

提案手法の詳細及び数値実験の結果については, 講演において説明する.

参考文献

- [1] Luke Zappia, Sabrina Richter, Ciro Ramírez-Suástegui, Raphael Kfuri-Rubens, Larsen Vornholz, Weixu Wang, Oliver Dietrich, Amit Frishberg, Malte D. Luecken and Fabian J. Theis, Feature selection methods affect the performance of scRNA-seq data integration and querying, Nat Methods, 22 (2025), 834–844
- [2] Grace Yee Lin Ng, Grace Yee Lin Ng, Chia Sui Ong, On the use of QDE-SVM for gene feature selection and cell type classification from scRNA-seq data, PLOS ONE, 18 (2023), 1–22