

# 数理工学実験レポート

## 第 3 章（最小二乗法）

学籍番号 1029366161 中塚一瑛

2025 年 11 月 6 日

### 概要

## 目次

1	はじめに	3
2	最小二乗法とその評価方法	3
2.1	原理・方法	3
2.2	課題 1（重回帰）	4
2.3	課題 2（多項式回帰）	6
2.4	課題 3（分散の観測誤差：Cauchy）	8
2.5	課題 4（入力域の制約と設計）	9
3	重み付き最小二乗法	9
3.1	原理と方法	9
3.2	課題 5（2 次元出力：重み付き最小二乗法）	11
3.3	課題 6（2 次元出力・異分散 2 群に対する重み付き最小二乗）	13
4	推定値の合成と逐次最小二乗法	16
4.1	原理と方法	16
4.2	課題 7（推定値の合成の検証：2 分割データの統合）	17
4.3	課題 7（推定値の合成の検証：非線形基底・分割データ）	19
4.4	課題 9（逐次最小二乗法によるシステム同定）	21
4.5	課題 10（非定常時系列の追従：忘却係数付き RLS）	23
5	カルマンフィルタ、カルマン smoother	24
5.1	原理と方法	24
5.2	課題 11（カルマンフィルタ：フォワード）	26
5.3	課題 12（カルマン smoother）	28
6	交互最小二乗法と K-平均法	30

6.1	原理と方法 . . . . .	30
6.2	課題 13 (交互最小二乗法) . . . . .	32
6.3	課題 14 (K-平均法による 2 次元データの 3 クラスタ分類) . . . . .	35
7	結論	38
付録 A	使用コード一覧	38

# 1 はじめに

本実験第2回では、最小二乗法の基礎とその実装手法を学ぶことを目的とする。具体的には、観測データからのパラメータ推定、重み付き・逐次最小二乗法、データ分割・推定値の合成、カルマンフィルタ、交互最小二乗法などの手法を理解し、それぞれのアルゴリズムを実装・評価することで、最小二乗法の応用範囲とその性能を比較検討する。

## 2 最小二乗法とその評価方法

### 2.1 原理・方法

観測モデルを

$$y_i = f(\theta, x_i) + w_i \quad (1)$$

とする。加法雑音  $w_i$  は平均 0、観測ごとに独立、同一分布であり、共分散は有限と仮定する。ここでは  $f(\theta, x) = \phi(x)\theta$  としてパラメータに対して線形とし、最小二乗問題

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^N \|y_i - \phi(x_i)\theta\|^2 \quad (2)$$

を解く。解は

$$\hat{\theta}_N = \left( \sum_{i=1}^N \phi_i^\top \phi_i \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \phi_i^\top y_i, \quad \phi_i := \phi(x_i). \quad (3)$$

[1].

また雑音分散が未知の場合の推定量および推定誤差共分散は

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N - n} \sum_{i=1}^N \|y_i - \phi_i \hat{\theta}_N\|^2, \quad (4)$$

$$\widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = \hat{\sigma}^2 \left( \sum_{i=1}^N \phi_i^\top \phi_i \right)^{-1} \quad (5)$$

で与えられる。

当てはまりの評価には決定係数

$$C = \frac{\sum_{i=1}^N \|\phi_i \hat{\theta}_N - \bar{y}\|^2}{\sum_{i=1}^N \|y_i - \bar{y}\|^2}, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (6)$$

を用いる。以上は資料 3.2 の線形最小二乗および評価に対応する。

本実験では  $\phi(x)$  として設計した特徴量から行列

$$X = \begin{bmatrix} \phi(x_1)^\top \\ \vdots \\ \phi(x_N)^\top \end{bmatrix} \quad (7)$$

を構成し，観測データを

$$y = [y_1; \dots; y_N] \quad (8)$$

として用いる．パラメータ推定量は

$$\hat{\theta} = (X^\top X)^{-1} X^\top y \quad (9)$$

で与えられる．

残差は

$$r = y - X\hat{\theta} \quad (10)$$

とし，雑音分散推定量は

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\|r\|^2}{N-p} \quad (11)$$

( $p$  は列数) とする．

パラメータ推定の誤差共分散は

$$\hat{\sigma}^2 (X^\top X)^{-1} \quad (12)$$

で与えられる．

決定係数は

$$C = \frac{\|X\hat{\theta} - \bar{y}\mathbf{1}\|^2}{\|y - \bar{y}\mathbf{1}\|^2} \quad (13)$$

と定義する．

以下の R 関数が上記推定を実装している．

```
1 regression_simple <- function(x, y){
2   theta_hat <- solve(t(x) %*% x) %*% t(x) %*% y
3   sigma2_hat <- as.numeric(t(y - x %*% theta_hat) %*%
4                           (y - x %*% theta_hat) /
5                           (nrow(x) - ncol(x)))
6   err_cov_mat <- sigma2_hat * solve(t(x) %*% x)
7   det_coef <- sum((x %*% theta_hat - mean(y))^2) /
8               sum((y - mean(y))^2)
9   list(theta_hat=theta_hat, err_cov_mat=err_cov_mat,
10         sigma2_hat=sigma2_hat, det_coef=det_coef)
11 }
```

## 2.2 課題 1 (重回帰)

■モデル  $y_i = x_i^\top \theta + w_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ).  $x_i \in \mathbb{R}^2$ .  $w_i$  は独立，同分散  $\sigma^2$ ，平均 0.  $X = [x_1^\top; \dots; x_N^\top] \in \mathbb{R}^{N \times 2}$ ,  $y = [y_1; \dots; y_N] \in \mathbb{R}^N$ .

### ■推定量 最小二乗推定量

$$\hat{\theta}_N = (X^\top X)^{-1} X^\top y.$$

残差  $r = y - X\hat{\theta}_N$  により

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\|r\|_2^2}{N-p}, \quad p=2, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = \hat{\sigma}^2 (X^\top X)^{-1}.$$

決定係数

$$R^2 = \frac{\|X\hat{\theta}_N - \bar{y}\mathbf{1}\|_2^2}{\|y - \bar{y}\mathbf{1}\|_2^2}, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i.$$

■実装 データから設計行列  $X$  と観測ベクトル  $y$  を構成し,  $\hat{\theta} = (X^\top X)^{-1} X^\top y$  により推定量を計算する. 残差  $r = y - X\hat{\theta}$  から雑音分散推定量  $\hat{\sigma}^2 = \|r\|^2/(N-p)$  を求め, 推定誤差共分散  $\hat{\sigma}^2(X^\top X)^{-1}$  および決定係数  $R^2$  を算出する関数を実装した. 以下が R による実装例である.

```

1 # データの読み込み
2 data <- read.csv("datas/mmse_kadai1.csv", header=FALSE,
3                 col.names = c("x1", "x2", "y"))
4 x <- as.matrix(data[,c("x1", "x2")])
5 y <- as.matrix(data[, "y"])
6
7 # サンプルサイズ n で推定を実行する関数
8 exp1 <- function(x, y, n){
9   x_n <- x[1:n,]
10  y_n <- y[1:n,]
11  result <- regression_simple(x_n, y_n)
12  return(list(theta_hat = result$theta_hat,
13             err_cov_mat = result$err_cov_mat,
14             det_coef = result$det_coef))
15 }
16
17 N_max <- nrow(x)
18 print(exp1(x, y, N_max)$theta_hat)
19 print(exp1(x, y, N_max)$err_cov_mat)
20 print(exp1(x, y, N_max)$det_coef)
21
22 # 収束の可視化
23 plot_exp1 <- function(x, y){
24   ns <- c(2,4,8,16,32,64,128,256,512,1024,2048,4096,8192)
25   theta_hats <- matrix(0, nrow=length(ns), ncol=ncol(x))
26   for (i in 1:length(ns)){
27     result <- exp1(x, y, ns[i])
28     theta_hats[i, ] <- as.vector(result$theta_hat)
29   }
30   png("graphs/task1.png")
31   matplot(ns, theta_hats, type="b", log="x", xlab="n", ylab="theta_hat",
32           main="Convergence of theta_hat")
33   dev.off()
34 }
35 plot_exp1(x, y)

```

■収束確認  $N \in \{2, 4, 8, \dots, 2^{13} = 8192\}$  で  $\hat{\theta}_N$  を計算し,  $N$  を横軸とする片対数図で各成分を同一図に描く.

■結果（全データ  $N = 10000$ ）

$$\hat{\theta}_N = \begin{bmatrix} 1.507 \\ 1.998 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = \begin{bmatrix} 9.867 & -0.04081 \\ -0.04081 & 10.05 \end{bmatrix} \times 10^{-5}.$$

決定係数

$$R^2 = 0.8630.$$

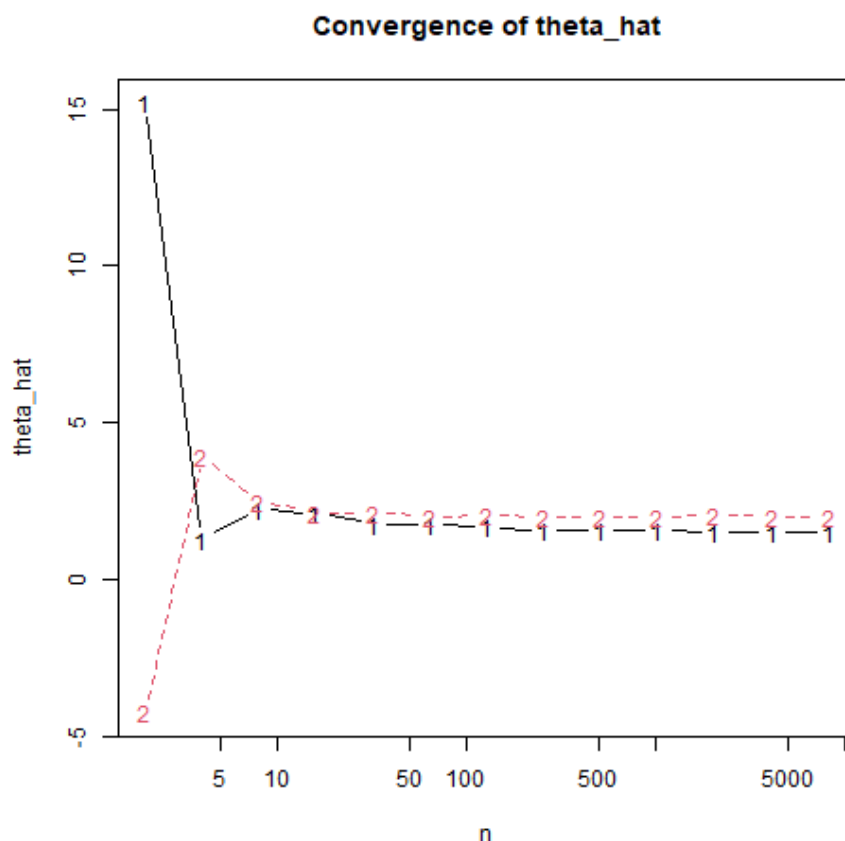


図 1:  $\hat{\theta}_N$  の収束（横軸  $N = 2, 4, \dots, 8192$  の片対数）

■考察 図 1 から,  $\hat{\theta}_N$  は  $N$  を増やすにつれて収束していることが確認できた. また, 共分散行列の非対角成分が対角成分に比べて非常に小さいことから, 確かに各成分の推定誤差が独立であることも示唆された.

## 2.3 課題 2（多項式回帰）

■モデル  $y_i = \varphi(x_i)\theta + w_i$ ,  $\varphi(x) = [1 \ x \ x^2 \ x^3]$ ,  $i = 1, \dots, N$ . 雑音  $w_i$  は独立, 同分散  $\sigma^2$ , 平均 0. 分散 9 の正規分布.  $X = [\varphi(x_1); \dots; \varphi(x_N)] \in \mathbb{R}^{N \times 4}$ .

■推定量 推定量・共分散・決定係数は課題 1 と同じ形式 ( $p = 4$ ) で計算する.

■実装 入力  $x_i$  から特徴ベクトル  $\varphi(x_i) = [1 \ x_i \ x_i^2 \ x_i^3]$  を構成し, 設計行列  $X$  を作成する. 課題 1 と同様の関数を用いてパラメータ推定量, 誤差共分散, 決定係数を算出する.  $N \in \{4, 8, 16, \dots, 8192\}$

の各点で推定量を計算し、片対数プロットで収束の様子を可視化した。

■収束確認  $N \in \{4, 8, 16, \dots, 8192\}$  で  $\hat{\theta}_N$  を計算し、 $N$  を横軸とする片対数図で各成分を同一図に描画する。

■結果 (全データ  $N = 10000$ )

$$\hat{\theta}_N = \begin{bmatrix} -0.5090 \\ 1.976 \\ 0.1977 \\ -0.09867 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = \begin{bmatrix} 2.023 & -0.01186 & -0.1348 & 0.0003971 \\ -0.01186 & 6.753 & -0.001899 & -37.95 \\ -0.1348 & -0.001899 & 16.04 & 0.06352 \\ 0.0003971 & -37.95 & 0.06352 & 2.529 \end{bmatrix} \times 10^{-3}.$$

決定係数：

$$R^2 = 0.4619.$$

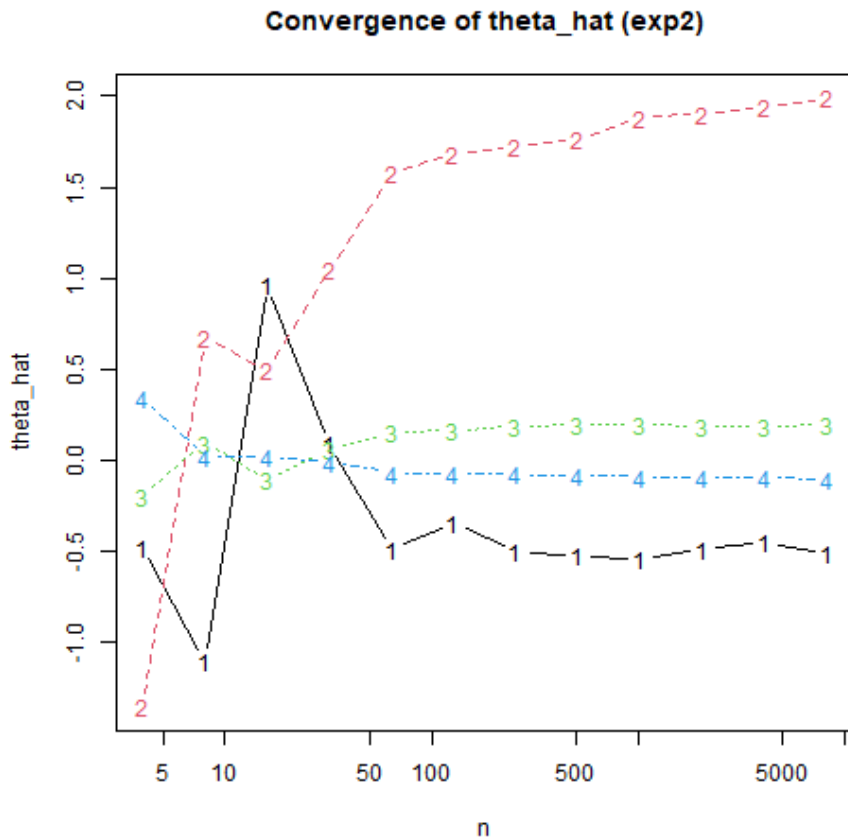


図 2:  $\hat{\theta}_N$  の収束 (横軸  $N = 4, 8, \dots, 8192$  の片対数)

■考察 図 2 から、課題 1 と同様に、 $\hat{\theta}_N$  は  $N$  を増やすにつれて収束し、対角成分に比べて非対角成分が小さいかったものの、課題 1 よりも収束が遅く、非対角成分の割合がやや大きいことが確認できた。なにより、モデルの精度を表す決定係数  $R^2$  が課題 1 に比べて大幅に低下しており、モデルの当てはまりが悪化していることが分かる。これについて、課題 2 では雑音分散が 9 と大きく設定されており、これは元データの  $x$  に対する影響が大きいため、モデルの当てはまりが悪化したと考えられる。特に定数項と 1 次項の収束が遅いことから、これらの成分が雑音よりも十分に大きくないのでその影響を受けやすいことが示唆される。

## 2.4 課題 3 (分散の観測誤差: Cauchy)

■モデルと注意  $y_i = x_i^\top \theta + w_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ),  $x_i \in \mathbb{R}^2$ . 観測誤差  $w_i \sim \text{Cauchy}(0, 1)$  独立同分布.

■推定量 推定量・共分散・決定係数は課題 1 と同じ形式 ( $p = 2$ ) で計算する.

■実装 課題 1 と同じ最小二乗推定の枠組みを用いて,  $N \in \{2, 4, \dots, 8192\}$  の各サンプルサイズで推定量を計算した.

■結果 (全データ  $N = 10000$ )

$$\hat{\theta}_N = \begin{bmatrix} 2.373 \\ 1.537 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = \begin{bmatrix} 9.235 & -0.003642 \\ -0.003642 & 9.264 \end{bmatrix}.$$

参考: 対角の平方根は  $\text{SE}(\hat{\theta}_1) \approx 3.039$ ,  $\text{SE}(\hat{\theta}_2) \approx 3.044$ . 決定係数 (参考値) は

$$R^2 = 0.0002841.$$

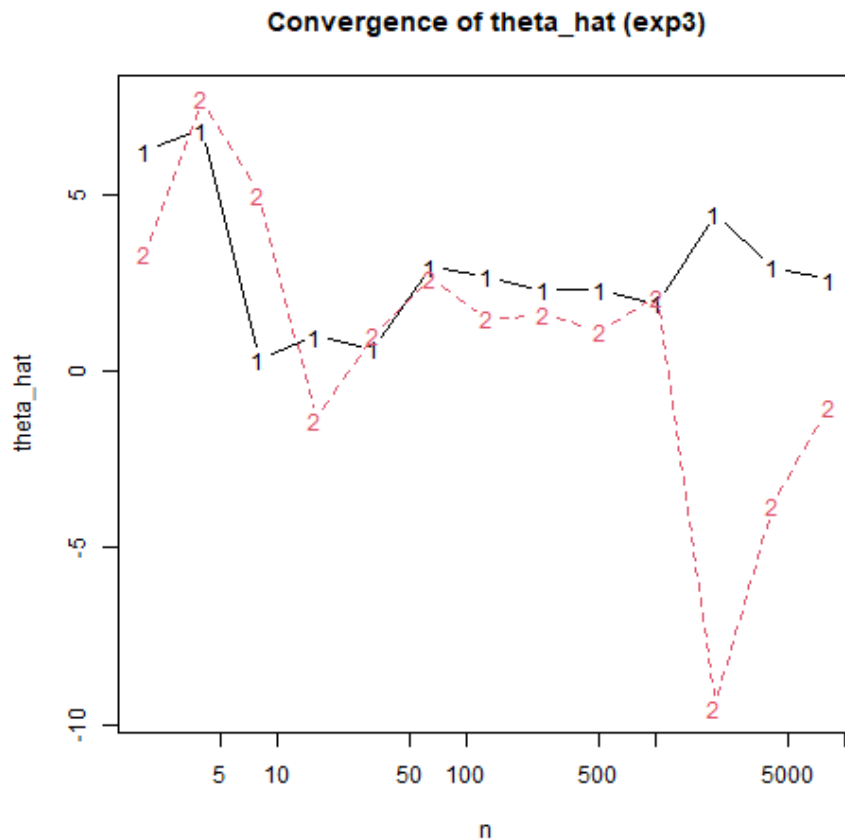


図 3:  $\hat{\theta}_N$  の非収束例 (横軸  $N = 2, 4, \dots, 8192$  の片対数)

■考察 図 3 より, 資料にあるように, Cauchy 誤差では外れ値の影響が支配的で,  $\hat{\theta}_N$  は  $N$  を増やしても収束せず、決定係数もほぼ 0 であることが確認できた。



## 2.5 課題 4 (入力域の制約と設計)

■**設定** 課題 2 と同じ  $\varphi(x) = [1 \ x \ x^2 \ x^3]$ , 真の  $\theta$ , 観測誤差  $w_i \sim \mathcal{N}(0, 9)$  とする. ただし入力  $x_i \in [0, 1]$ ,  $i = 1, \dots, 10000$ .  $X = [\varphi(x_1); \dots; \varphi(x_N)] \in \mathbb{R}^{N \times 4}$ ,  $y = [y_1; \dots; y_N]$ .

■**推定量** 推定量・共分散・決定係数は課題 1 と同じ形式 ( $p = 4$ ) で計算する.

■**実装** 課題 2 と同様に  $\varphi(x) = [1 \ x \ x^2 \ x^3]$  の特徴ベクトルを用いて設計行列を構成し, 全データ  $N = 10000$  に対して最小二乗推定を行った.

■**結果** ( $N = 10000$ )

$$\hat{\theta}_{(4)} = \begin{bmatrix} -0.5777 \\ 2.097 \\ -0.3950 \\ 0.5491 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_{(4)}) = \begin{bmatrix} 0.1532 & -1.149 & 2.296 & -1.339 \\ -1.149 & 11.46 & -25.75 & 16.01 \\ 2.296 & -25.75 & 61.72 & -39.97 \\ -1.339 & 16.01 & -39.97 & 26.62 \end{bmatrix}, \quad R^2 = 0.04084.$$

■**課題 2.1 との比較** ( $N = 10000$ ) 課題 2.1 の推定結果:

$$\hat{\theta}_{(2.1)} = \begin{bmatrix} -0.5090 \\ 1.976 \\ 0.1977 \\ -0.09867 \end{bmatrix}, \quad R^2 = 0.4619.$$

■**考察** 精度が大幅に低下していることが確認できた。これは、入力  $x$  が  $[0, 1]$  に制約されることで、特徴量  $\varphi(x)$  の値域が狭まり、設計行列  $X$  の列間の相関が高くなったことが原因と考えられる。また、 $x$  が  $[0, 1]$  に制約されることは、高次項も小さな値に限定されることを意味し、雑音の分散が 9 であることを考慮すると、モデルの当てはまりがさらに悪化したと考えられる。入力設計の工夫としては、

- $x$  の分散を十分に大きくすることで、雑音の影響が相対的に小さくなるようにする。
- $x$  の値を  $[0, 1]$  区間から大きく離すことで、特徴量同士の相関を低減させる。

が挙げられる。

## 3 重み付き最小二乗法

### 3.1 原理と方法

■**原理** 各観測  $i = 1, \dots, N$  で  $y_i \in \mathbb{R}^m$ ,  $X_i \in \mathbb{R}^{m \times p}$  とし

$$y_i = X_i \theta + w_i, \quad \mathbb{E}[w_i] = 0, \quad \text{Cov}(w_i) = V \text{ (既知)},$$

を仮定する。 $Q := V^{-1}$  とおく。WLS は重み付き残差平方和

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^N (y_i - X_i \theta)^\top Q (y_i - X_i \theta)$$

を最小化する推定で、正規方程式は

$$S\hat{\theta} = b, \quad S := \sum_{i=1}^N X_i^\top Q X_i, \quad b := \sum_{i=1}^N X_i^\top Q y_i.$$

したがって

$$\hat{\theta} = \left( \sum_{i=1}^N X_i^\top Q X_i \right)^{-1} \left( \sum_{i=1}^N X_i^\top Q y_i \right).$$

[1].  $V$  が既知のとき

$$\text{Cov}(\hat{\theta}) = S^{-1}.$$

$V = \sigma^2 \Sigma$  のようにスケール未知なら

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N r_i^\top \Sigma^{-1} r_i}{Nm - p}, \quad r_i := y_i - X_i \hat{\theta}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}) = \hat{\sigma}^2 \left( \sum_{i=1}^N X_i^\top \Sigma^{-1} X_i \right)^{-1}.$$

■方法 (1) 各  $i$  の設計行列  $X_i$  と観測  $y_i$  を用意 ( $X_i$  は  $m \times p$ )。 (2)  $Q = V^{-1}$  を決めて  $S = \sum X_i^\top Q X_i$ ,  $b = \sum X_i^\top Q y_i$  を計算。 (3)  $\hat{\theta} = S^{-1}b$ 。

■実装 R による実装例を以下に示す。

```

1 regression_multiple <- function(x, y, V = NULL, Q = NULL) {
2   if (is.null(ncol(y))) y <- as.matrix(y, ncol = 1)
3   if (length(dim(x)) != 3) stop("x must be 3D array")
4
5   n <- dim(x)[3]
6   m <- ncol(y)
7   p <- dim(x)[1]
8   S <- matrix(0, p, p)
9   b <- matrix(0, p, 1)
10
11  if (is.null(V)) V <- diag(m)
12  if (is.null(Q)) Q <- solve(V)
13
14  for (i in 1:n) {
15    xi <- as.matrix(x[, , i])
16    yi <- matrix(y[i, ], nrow = m)
17    S <- S + t(xi) %*% Q %*% xi
18    b <- b + t(xi) %*% Q %*% yi
19  }
20
21  theta_hat <- solve(S, b)
22
23  if (all(Q == diag(m))) {
24    T <- matrix(0, p, p)
25    for (i in 1:n) {
26      xi <- as.matrix(x[, , i])
27      T <- T + t(xi) %*% V %*% xi
28    }
29    err_cov_mat <- solve(S) %*% T %*% solve(S)
30  } else {
31    err_cov_mat <- solve(S)
32  }
33
34  list(theta_hat = theta_hat, err_cov_mat = err_cov_mat, S = S, b = b)
35 }

```

### 3.2 課題 5 (2 次元出力：重み付き最小二乗法)

■課題の内容 入力  $x_i \in \mathbb{R}$  ( $i = 1, \dots, 1000$ ) に対し,  $m = 2$  次元出力の線形モデル

$$y_i = \phi(x_i) \theta + w_i, \quad \phi(x) = \begin{bmatrix} 1 & x \\ 1 & x^2 \end{bmatrix}, \quad w_i \sim \mathcal{N}(0, V), \quad V = \begin{bmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

を考える. ここで  $\theta \in \mathbb{R}^2$  を推定対象とする.

■推定量 最小二乗 (OLS) の推定値は

$$\hat{\theta}_N = \left( \sum_{i=1}^N \phi_i^\top \phi_i \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \phi_i^\top y_i,$$

で与えられる ( $\phi_i = \phi(x_i)$ ). 観測雑音の共分散  $V$  が既知で, その影響を反映した重み付き最小二乗 (WLS) を用いると,  $V = W^{-2}$  を満たす  $W$  に対し

$$\hat{\theta}_N = \left( \sum_{i=1}^N \phi_i^\top W^{-2} \phi_i \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \phi_i^\top W^{-2} y_i = \left( \sum_{i=1}^N \phi_i^\top Q \phi_i \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \phi_i^\top Q y_i,$$

となる ( $Q = W^{-2} = V^{-1}$ ).

■実装 `datas/mmse_kadai5.csv` を読み込み,  $x$  から  $\phi(x) = \begin{bmatrix} 1 & x \\ 1 & x^2 \end{bmatrix}$  を構成して  $x \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times N}$  の 3 次元配列とし,  $y \in \mathbb{R}^{N \times 2}$  を観測行列とした. 推定は関数 `regression_multiple` を用い, **OLS** は無重み ( $Q = I$ ), **WLS** は  $V = \text{diag}(100, 1)$  を渡し内部で  $Q = V^{-1}$  を用いる設定とした. また,  $N \in \{4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1000\}$  に対する  $\hat{\theta}_N$  の収束の様子を片対数 ( $x$  軸のみ対数) で可視化した.

■結果 全データ ( $N = 1000$ ) を用いた推定結果は次のとおりである.

**OLS**

$$\hat{\theta}_{\text{OLS}} = \begin{bmatrix} 2.995 \\ -2.069 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_{\text{OLS}}) = \begin{bmatrix} 3.515 & -1.252 \\ -1.252 & 1.086 \end{bmatrix} \times 10^{-2}.$$

**WLS**

$$\hat{\theta}_{\text{WLS}} = \begin{bmatrix} 2.939 \\ -1.986 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_{\text{WLS}}) = \begin{bmatrix} 1.477 & -0.5001 \\ -0.5001 & 0.5131 \end{bmatrix} \times 10^{-3}.$$

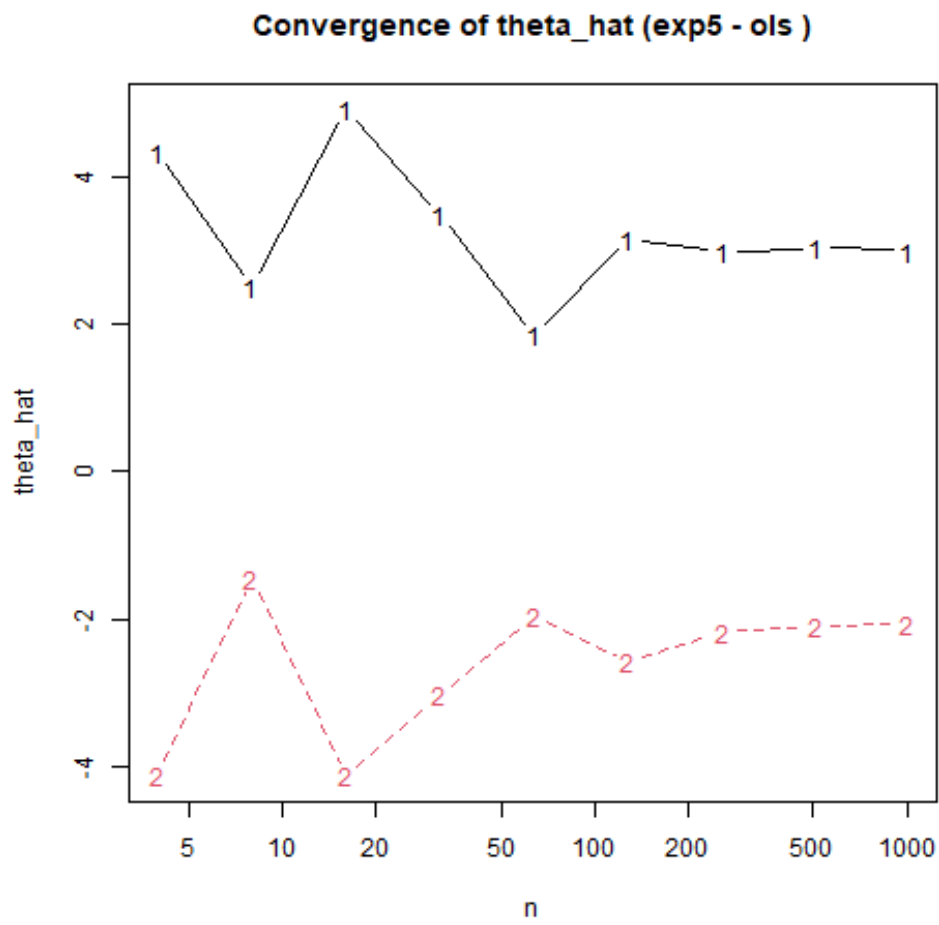


図 4:  $\hat{\theta}_N$  の収束 (OLS)

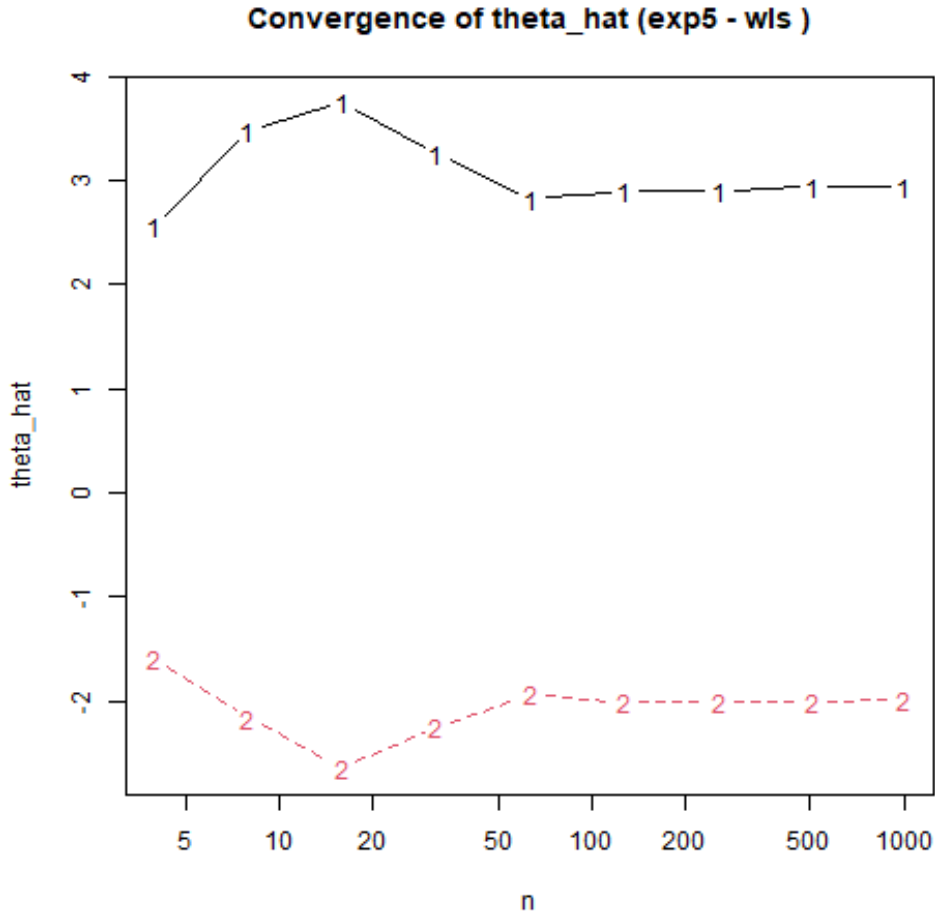


図 5:  $\hat{\theta}_N$  の収束 (WLS,  $V = \text{diag}(100, 1)$ )

■考察 出力された係数はほとんど同じなので最適化方法は違っても両者ともに同じ値に近づいていることがわかる。また図 4 と図 5 から、OLS と WLS の両方で、 $\hat{\theta}_N$  は  $N$  を増やすにつれて収束しており、中でも OLS よりも WLS の方が速く収束していることが確認できた。また、WLS の方が OLS よりも推定誤差共分散が小さいことから、WLS の方がより良い推定量であると言える。

### 3.3 課題 6 (2 次元出力・異分散 2 群に対する重み付き最小二乗)

■課題の内容 入力  $x_i \in \mathbb{R}$  に対し、

$$y_i = \phi(x_i)\theta + w_i, \quad \phi(x) = \begin{bmatrix} 1 & x \\ 1 & x^2 \end{bmatrix}, \quad \theta \in \mathbb{R}^2,$$

という  $m = 2$  次元出力の線形モデルを考える。雑音は  $N$  サンプルのうち前半  $i = 1, \dots, \text{num}$  が  $w_i \sim \mathcal{N}(0, V_1)$ 、後半  $i = \text{num} + 1, \dots, N$  が  $w_i \sim \mathcal{N}(0, V_2)$  に従うとする。本課題では  $V_1 = \text{diag}(100, 1)$ 、 $V_2 = \text{diag}(2, 1)$ 、 $\text{num} = 500$  を既知として推定を行う。

■推定法 (GLS/WLS)  $Q_k = V_k^{-1}$  ( $k = 1, 2$ ) とおくと, 一般化最小二乗 (WLS) の正規方程式は

$$S\hat{\theta}_N = b, \quad S = \sum_{i=1}^{\text{num}} \phi_i^\top Q_1 \phi_i + \sum_{i=\text{num}+1}^N \phi_i^\top Q_2 \phi_i, \quad b = \sum_{i=1}^{\text{num}} \phi_i^\top Q_1 y_i + \sum_{i=\text{num}+1}^N \phi_i^\top Q_2 y_i,$$

より

$$\hat{\theta}_N = S^{-1}b.$$

標本ベースの誤差共分散推定は (実装に合わせて)

$$\widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N) = S^{-1} T S^{-1}, \quad T = \sum_{i=1}^{\text{num}} \phi_i^\top V_1 \phi_i + \sum_{i=\text{num}+1}^N \phi_i^\top V_2 \phi_i.$$

なお OLS は  $Q_1 = Q_2 = I$  とした特別な場合である.

■実装 `datas/mmse_kadai6.csv` から  $x$  を読み,  $\phi(x)$  を用いて  $x \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times N}$ ,  $y \in \mathbb{R}^{N \times 2}$  を構成した. 推定は関数 `regression_multiple_different_distributions` により, 前半  $V_1$ , 後半  $V_2$  の重みで  $S, b, T$  を分割加算して  $\hat{\theta}_N$  と  $\widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_N)$  を得た. また  $N$  を `ns = seq(4, 1000, length.out=20)` で走らせ,  $\hat{\theta}_N$  の収束の様子を折れ線で可視化した ( $x$  軸は線形目盛).

■結果 全データ ( $N = 1000$ ,  $\text{num} = 500$ ) の推定結果は以下のとおりである.

OLS (比較)

$$\hat{\theta}_{\text{OLS}} = \begin{bmatrix} 3.188 \\ -2.092 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_{\text{OLS}}) = \begin{bmatrix} 1.740 & -0.5675 \\ -0.5675 & 0.4937 \end{bmatrix} \times 10^{-2}.$$

WLS ( $V_1 = \text{diag}(100, 1)$ ,  $V_2 = \text{diag}(2, 1)$ )

$$\hat{\theta}_{\text{WLS}} = \begin{bmatrix} 2.993 \\ -2.016 \end{bmatrix}, \quad \widehat{\text{Cov}}(\hat{\theta}_{\text{WLS}}) = \begin{bmatrix} 1.492 & -0.5020 \\ -0.5020 & 0.5018 \end{bmatrix} \times 10^{-3}.$$

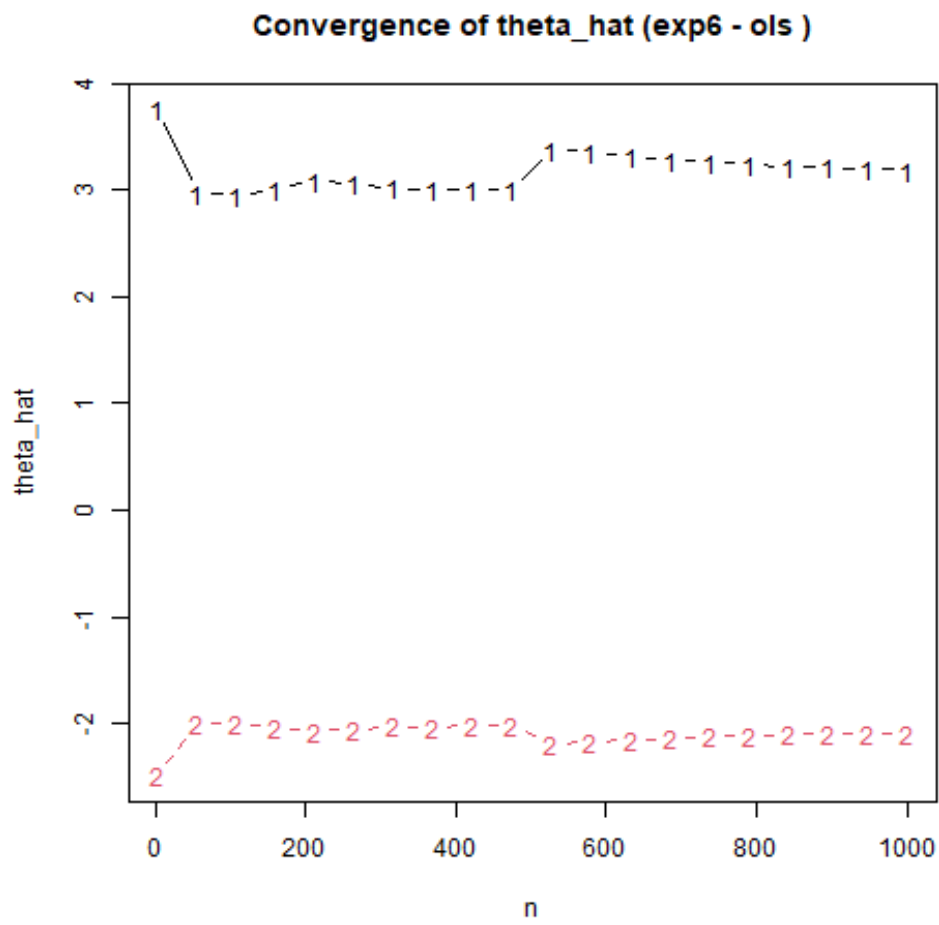


図 6:  $\hat{\theta}_N$  の収束 (OLS)

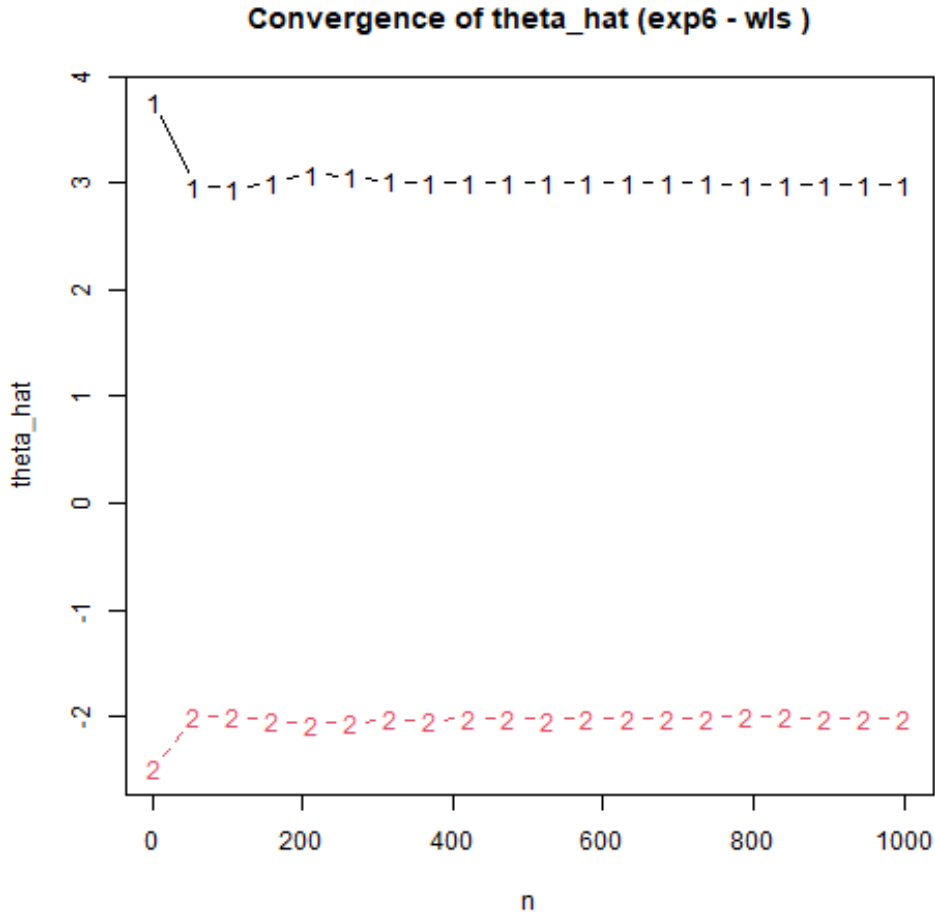


図 7:  $\hat{\theta}_N$  の収束 (WLS,  $V_1/V_2$  異分散)

■考察 課題 5 と同様に、出力された係数はほとんど同じなので最適化方法は違っても両者ともに同じ値に近づいていることがわかる。また図 6 と図 7 から、OLS と WLS の両方で、 $\hat{\theta}_N$  は  $N$  を増やすにつれて収束しており、中でも OLS よりも WLS の方が速く収束していることが確認できた。興味深いのは、OLS の場合  $n = 500$  の時点で雑音の分散が変化するため、 $\hat{\theta}_N$  の収束が一時的に遅くなっているのに対し、WLS ではその影響が少なく、よりスムーズに収束している点である。これは WLS が異分散を考慮しているためであり、より適切な推定が行われていることを示している。推定誤差共分散についても課題 5 同様に、WLS の方が OLS よりも小さく、より良い推定量であると言える。

## 4 推定値の合成と逐次最小二乗法

### 4.1 原理と方法

■推定値の合成 (Estimator Fusion)  $f(\theta, x) = \phi(x)\theta$  の線形回帰で、 $D_N$  と  $D'_M$  から得た推定  $\hat{\theta}_N = \Phi_N \sum_{i=1}^N \phi_i^\top y_i$ ,  $\hat{\theta}'_M = \Phi'_M \sum_{j=1}^M \phi'_j{}^\top y'_j$  ( $\Phi_N = (\sum \phi_i^\top \phi_i)^{-1}$ ) を持つとき、結合推定は

$$\hat{\theta}_{N+M} = (\Phi_N^{-1} + \Phi'_M{}^{-1})^{-1} (\Phi_N^{-1} \hat{\theta}_N + \Phi'_M{}^{-1} \hat{\theta}'_M)$$



で与えられる [1].

以下が R による実装例である。

```
1 # 既存バッチN=6000とM=4000の合成 (S = Φ-1) を情報行列とする)
2 # S_6000, S_4000 はそれぞれ Φ6000-1, Φ4000-1
3 # theta_6000, theta_4000 は各バッチの推定ベクトル
4 theta_6000_4000 <- solve(S_6000 + S_4000) %*%
5 (S_6000 %*% theta_6000 + S_4000 %*% theta_4000)
```

■逐次最小二乗法 (RLS) 逆行列補題を用いると、バッチ解は次の再帰で更新できる：

$$\begin{aligned}\hat{\theta}_{N+1} &= \hat{\theta}_N + K_{N+1}(y_{N+1} - \phi_{N+1}\hat{\theta}_N), \\ K_{N+1} &= \Phi_N \phi_{N+1}^\top (I_m + \phi_{N+1} \Phi_N \phi_{N+1}^\top)^{-1}, \\ \Phi_{N+1} &= \Phi_N - K_{N+1} \phi_{N+1} \Phi_N.\end{aligned}$$

忘却係数  $\gamma \in (0, 1]$  を導入すると

$$\begin{aligned}K_{\gamma, N+1} &= \Phi_{\gamma, N} \phi_{N+1}^\top (\gamma I_m + \phi_{N+1} \Phi_{\gamma, N} \phi_{N+1}^\top)^{-1}, \\ \Phi_{\gamma, N+1} &= \gamma^{-1} (\Phi_{\gamma, N} - K_{\gamma, N+1} \phi_{N+1} \Phi_{\gamma, N}), \\ \hat{\theta}_{\gamma, N+1} &= \hat{\theta}_{\gamma, N} + K_{\gamma, N+1} (y_{N+1} - \phi_{N+1} \hat{\theta}_{\gamma, N}).\end{aligned}$$

[1]

以下が R による実装例である。

```
1 update_regression_mat <- function(Phi_N, phi_N_plus_1, theta_N, y_N_plus_1, gamma =
2   1){
3   I_m <- diag(1) # m=1想定。m>1なら diag(nrow(phi_N_plus_1 %*% Phi_N %*% t(phi_N_plus_1))) に置換
4   # 中間計算
5   phi_T_Phi_phi <- phi_N_plus_1 %*% Phi_N %*% t(phi_N_plus_1)
6   inv_term <- solve( (gamma * I_m) + phi_T_Phi_phi )
7   K <- gamma * (Phi_N %*% t(phi_N_plus_1) %*% inv_term)
8   # 更新
9   Phi_N_plus_1 <- (Phi_N - K %*% phi_N_plus_1 %*% Phi_N) / gamma
10  theta_N_plus_1 <- theta_N + K %*% (y_N_plus_1 - phi_N_plus_1 %*% theta_N)
11  list(Phi_N_plus_1 = Phi_N_plus_1, theta_N_plus_1 = theta_N_plus_1)
12 }
```

$\Phi_0 = \varepsilon^{-1} I$  ( $\varepsilon$  は小さい正の実数) で初期化し、逐次更新する。各ステップの計算は  $\dim(\theta) = p$  に対して  $O(p^2)$  程度で済む。[1]

## 4.2 課題 7 (推定値の合成の検証：2 分割データの統合)

■課題の内容  $N = 10000$  のデータを前半 6000 と後半 4000 に分割し、各ブロックで OLS 推定を行ったのち、情報行列の加法的性

$$S_N = \sum_{i=1}^N \varphi_i \varphi_i^\top$$

を用いた合成推定

$$\hat{\theta}_{\text{fuse}} = (S_{6000} + S_{4000})^{-1} (S_{6000} \hat{\theta}_{6000} + S_{4000} \hat{\theta}_{4000})$$

が、全データ一括推定  $\hat{\theta}_{10000}$  と一致することを確認する。ここでモデルは

$$y_i = \varphi(x_i)^\top \theta + w_i, \quad \varphi(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ \exp(-\frac{(x-1)^2}{2}) \\ \exp(-(x+1)^2) \end{bmatrix}, \quad \theta \in \mathbb{R}^3.$$

理論上、独立同分布で  $V = \sigma^2$  のとき  $\hat{\theta}_{\text{fuse}} = \hat{\theta}_{10000}$  となる。[1]

■実装 分割データから  $S_{6000}, \hat{\theta}_{6000}, S_{4000}, \hat{\theta}_{4000}$  を得て、合成推定値を計算し、全データ一括推定と比較する。

```

1 # 事前に x, y, x_6000, y_6000, x_4000, y_4000 を用意済み
2
3 exp7 <- function(){
4   res6000 <- regression_multiple(x_6000, y_6000)
5   res4000 <- regression_multiple(x_4000, y_4000)
6   res10000 <- regression_multiple(x, y)
7
8   S_6000 <- res6000$S
9   S_4000 <- res4000$S
10  theta_6000 <- res6000$theta_hat
11  theta_4000 <- res4000$theta_hat
12
13  # 推定値の合成 (情報行列の和)
14  theta_6000_4000 <- solve(S_6000 + S_4000) %*%
15    (S_6000 %*% theta_6000 + S_4000 %*% theta_4000)
16
17  cat("S6000:\n"); print(S_6000)
18  cat("S4000:\n"); print(S_4000)
19  cat("theta6000:\n"); print(theta_6000)
20  cat("theta4000:\n"); print(theta_4000)
21  cat("theta_fuse:\n"); print(theta_6000_4000)
22
23  theta_10000 <- res10000$theta_hat
24  cat("theta10000:\n"); print(theta_10000)
25
26  # 一致性の確認 (数値誤差内)
27  cat("all.equal(theta_fuse, theta10000): ",
28      all.equal(drop(theta_6000_4000), drop(theta_10000),
29                tolerance = 1e-10), "\n")
30 }
31
32 exp7()

```

## ■結果

$$S_{6000} = \begin{bmatrix} 6000 & 1505 & 1033 \\ 1505 & 1063 & 226.4 \\ 1033 & 226.4 & 720.6 \end{bmatrix}, \quad S_{4000} = \begin{bmatrix} 4000 & 971.2 & 716.3 \\ 971.2 & 679.5 & 149.7 \\ 716.3 & 149.7 & 510.2 \end{bmatrix},$$

$$\hat{\theta}_{6000} = \begin{bmatrix} -0.003879 \\ 3.011 \\ -1.989 \end{bmatrix}, \quad \hat{\theta}_{4000} = \begin{bmatrix} -0.02538 \\ 3.035 \\ -1.978 \end{bmatrix}, \quad \hat{\theta}_{\text{fuse}} = \begin{bmatrix} -0.01250 \\ 3.020 \\ -1.985 \end{bmatrix}.$$

$$\hat{\theta}_{10000} = \begin{bmatrix} -0.01250 \\ 3.020 \\ -1.985 \end{bmatrix}$$

■考察 上の結果から、たしかに  $\hat{\theta}_{\text{fuse}}$  と  $\hat{\theta}_{10000}$  が一致することが確認できた。

### 4.3 課題 7 (推定値の合成の検証：非線形基底・分割データ)

■課題の内容 基底

$$\varphi(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2}\right) \\ \exp(-(x+1)^2) \end{bmatrix}, \quad y_i = \varphi(x_i)^\top \theta + w_i, \quad \theta \in \mathbb{R}^3$$

で  $N = 10000$  個のデータを前半 6000 と後半 4000 に分割する。各ブロックの推定値 ( $\hat{\theta}_{6000}, \hat{\theta}_{4000}$ ) と情報行列  $S_k = \sum_{i \in \text{block } k} \varphi_i \varphi_i^\top$  を用いて

$$\hat{\theta}_{\text{fuse}} = (S_{6000} + S_{4000})^{-1} (S_{6000} \hat{\theta}_{6000} + S_{4000} \hat{\theta}_{4000})$$

を計算し、全データ一括推定  $\hat{\theta}_{10000}$  と照合する。[1]

■実装 (OLS 版)

```
1 data <- read.csv("datas/mmse_kadai7.csv", header=FALSE, col.names=c("x", "y"))
2 x0 <- rep(1, nrow(data))
3 x1 <- exp(-(data$x - 1)^2 / 2)
4 x2 <- exp(-(data$x + 1)^2)
5 n <- nrow(data)
6 x <- array(0, dim=c(3,1,n))
7 for(i in 1:n){ x[,i] <- matrix(c(x0[i], x1[i], x2[i]), 3, 1) }
8 y <- as.matrix(data[, "y"])
9
10 x_6000 <- x[, , 1:6000, drop=FALSE]; y_6000 <- y[1:6000, , drop=FALSE]
11 x_4000 <- x[, , 6001:10000, drop=FALSE]; y_4000 <- y[6001:10000, , drop=FALSE]
12
13 exp7 <- function(){
14   r6 <- regression_multiple(x_6000, y_6000) # returns $$ and $theta_hat$
15   r4 <- regression_multiple(x_4000, y_4000)
16   rall <- regression_multiple(x, y)
17
18   S_6000 <- r6$$; S_4000 <- r4$$
19   th6 <- r6$theta_hat; th4 <- r4$theta_hat; th_all <- rall$theta_hat
20
21   th_fuse <- solve(S_6000 + S_4000) %*% (S_6000 %*% th6 + S_4000 %*% th4)
22
23   print(th6); print(th4); print(th_fuse); print(th_all)
24   # 一致検証
25   print(all.equal(drop(th_fuse), drop(th_all), tolerance=1e-12))
26 }
27 exp7()
```

■実装 (推定分散による重み付き合成) 各ブロックの誤差分散を

$$\hat{\sigma}_k^2 = \frac{\text{RSS}_k}{N_k - p}, \quad p = 3$$

で推定し、 $Q_k = \hat{\sigma}_k^{-2}$  を用いた WLS 情報行列  $S_k = \sum_{i \in k} \varphi_i Q_k \varphi_i^\top = Q_k \sum_{i \in k} \varphi_i \varphi_i^\top$  で合成する ( $k \in \{6000, 4000\}$ )。コードは次のとおり。

```

1 x_mat      <- t(matrix(x,      nrow=3, ncol=n))
2 x_6000_mat <- t(matrix(x_6000, nrow=3, ncol=6000))
3 x_4000_mat <- t(matrix(x_4000, nrow=3, ncol=4000))
4
5 exp8 <- function(){
6   # OLS 推定
7   th_all <- regression_multiple(x,      y)$theta_hat
8   th_6000 <- regression_multiple(x_6000, y_6000)$theta_hat
9   th_4000 <- regression_multiple(x_4000, y_4000)$theta_hat
10
11  # 分散推定 (MSE)
12  V_hat_full <- sum((y      - x_mat      %*% th_all )^2) /(nrow(x_mat)      - ncol(
13    x_mat))
14  V_hat_6000 <- sum((y_6000 - x_6000_mat %*% th_6000)^2) /(nrow(x_6000_mat) - ncol(
15    x_6000_mat))
16  V_hat_4000 <- sum((y_4000 - x_4000_mat %*% th_4000)^2) /(nrow(x_4000_mat) - ncol(
17    x_4000_mat))
18
19  # 各ブロックの WLS 情報行列と推定
20  r6 <- regression_multiple(x_6000, y_6000, V=V_hat_6000)
21  r4 <- regression_multiple(x_4000, y_4000, V=V_hat_4000)
22  S_6000 <- r6$S; S_4000 <- r4$S
23  th6 <- r6$theta_hat; th4 <- r4$theta_hat
24
25  # 合成推定 (WLS 版)
26  th_fuse <- solve(S_6000 + S_4000) %*% (S_6000 %*% th6 + S_4000 %*% th4)
27
28  # 参考：全データにスカラー重み V_hat_full をかけた WLS (OLS と同値)
29  th_full_wls <- regression_multiple(x, y, V=V_hat_full)$theta_hat
30
31  print(th6); print(th4); print(th_fuse); print(th_full_wls)
32 }
33 exp8()

```

■結果 実行例（あなたの出力）：

$$\hat{\theta}_{6000} = \begin{bmatrix} -0.003879 \\ 3.011 \\ -1.989 \end{bmatrix}, \quad \hat{\theta}_{4000} = \begin{bmatrix} -0.02538 \\ 3.035 \\ -1.978 \end{bmatrix}.$$

WLS 合成推定と全データ一括 WLS（スカラー重み）：

$$\hat{\theta}_{\text{fuse}} = \begin{bmatrix} -0.01245 \\ 3.020 \\ -1.985 \end{bmatrix}, \quad \hat{\theta}_{10000} = \begin{bmatrix} -0.01250 \\ 3.020 \\ -1.985 \end{bmatrix}.$$

差分は  $\Delta\theta \approx (4.17 \times 10^{-5}, -4.70 \times 10^{-5}, -2.25 \times 10^{-5})^\top$ 。

■考察 ブロックごとに異なる重み ( $Q_{6000} \neq Q_{4000}$ ) を用いた合成と、全体に単一重みをかけた WLS は厳密には一致しないが、差は十分小さい。微小な差が生じる原因として、各ブロックでの分散推定  $V$  のばらつきが考えられる。

#### 4.4 課題 9 (逐次最小二乗法によるシステム同定)

■モデル 離散化されたバネ・マス・ダンパ系 ( $M = 2$ ,  $D = 1$ ,  $K = 3$ ,  $\Delta t = 0.01$ )

$$y_k = a_1 y_{k-1} + a_2 y_{k-2} + b F_{k-2} + w_k, \quad \phi_k = [y_{k-1} \quad y_{k-2} \quad F_{k-2}]^T,$$

$$a_1 = 2 - \frac{D}{M} \Delta t = 1.995, \quad a_2 = -(1 - \frac{D}{M} \Delta t + \frac{K}{M} \Delta t^2) = -0.99515, \quad b = \frac{\Delta t^2}{M} = 5.0 \times 10^{-5}.$$

$w_k \sim \text{Uniform}[-1, 1]$ 。RLS 更新は資料の式 (3.26) (3.28) に従う (忘却なし  $\gamma = 1$ ) [1]。

■使用コード (共通)

```
1 w <- function(){ runif(1, min = -1, max = 1) }
2
3 update_tick <- function(y_k_1, y_k_2, F_k_2,
4                           M=2, D=1, K=3, delta_t=0.01){
5   (2 - (D/M)*delta_t) * y_k_1 -
6   (1 - (D/M)*delta_t + (K/M)*delta_t^2) * y_k_2 +
7   (delta_t^2/M) * F_k_2 + w()
8 }
9
10 # RLS (§3.3 の式に一致)
11 update_regression_mat <- function(Phi_N, phi_N_plus_1, theta_N, y_N_plus_1, gamma=1){
12   I_m <- diag(1)
13   phi_T_Phi_phi <- phi_N_plus_1 %*% Phi_N %*% t(phi_N_plus_1)
14   inv_term <- solve((gamma * I_m) + phi_T_Phi_phi)
15   K <- gamma * (Phi_N %*% t(phi_N_plus_1) %*% inv_term)
16   Phi_N_plus_1 <- (Phi_N - K %*% phi_N_plus_1 %*% Phi_N) / gamma
17   theta_N_plus_1 <- theta_N + K %*% (y_N_plus_1 - phi_N_plus_1 %*% theta_N)
18   list(Phi_N_plus_1=Phi_N_plus_1, theta_N_plus_1=theta_N_plus_1)
19 }
```

(1) 入力  $F_k \equiv 1$  (定数入力)

■内容  $F_k = 1$  を一定とし,  $k = 1, \dots, 10000$  で RLS により  $\theta = [a_1, a_2, b]^T$  を推定する。[1]

■コード

```
1 exp9_1 <- function(){
2   y_k <- y_k_1 <- y_k_2 <- 0; F_k_2 <- 1
3   Phi <- diag(3) * 1000; theta <- matrix(0, nrow=3)
4   for(i in 1:10000){
5     y_k_2 <- y_k_1; y_k_1 <- y_k
6     y_k <- update_tick(y_k_1, y_k_2, F_k_2)
7     xi <- matrix(c(y_k_1, y_k_2, F_k_2), nrow=1)
8     upd <- update_regression_mat(Phi, xi, theta, y_k)
9     Phi <- upd$Phi_N_plus_1; theta <- upd$theta_N_plus_1
10  }
11  print(theta)
12 }
```

■結果 実行出力：

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 1.995 \\ -0.9953 \\ 2.151 \times 10^{-3} \end{bmatrix}.$$

■考察  $a_1, a_2$  は真値に近い。  $b$  は真値  $5 \times 10^{-5}$  に対して過大。定数入力で効果が極小かつ雑音が大きく、  $b$  の寄与は雑音に埋もれる。。

## (2) 入力 $F_k = \sin(\pi k/5)$ (小振幅正弦)

■内容  $F$  を低振幅の正弦波にして同様に推定。[1]

### ■コード

```
1 exp9_2 <- function(){
2   y_k <- y_k_1 <- y_k_2 <- 0
3   Phi <- diag(3) * 1000; theta <- matrix(0, nrow=3)
4   for(i in 1:10000){
5     F_k_2 <- sin(pi * i / 5)
6     y_k_2 <- y_k_1; y_k_1 <- y_k
7     y_k <- update_tick(y_k_1, y_k_2, F_k_2)
8     xi <- matrix(c(y_k_1, y_k_2, F_k_2), nrow=1)
9     upd <- update_regression_mat(Phi, xi, theta, y_k)
10    Phi <- upd$Phi_N_plus_1; theta <- upd$theta_N_plus_1
11  }
12  print(theta)
13 }
```

■結果 実行出力：

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 1.996 \\ -0.9959 \\ 2.637 \times 10^{-3} \end{bmatrix}.$$

■考察  $F$  は時間変化するが振幅が小さく、 $b$  は依然として真値より二桁以上大きい。

## (3) 入力 $F_k = 1000000 \sin(\pi k/5)$ (大振幅正弦)

■内容 入力振幅を  $10^6$  倍して強い励起を与える。[1]

### ■コード

```
1 exp9_3 <- function(){
2   y_k <- y_k_1 <- y_k_2 <- 0
3   Phi <- diag(3) * 1000; theta <- matrix(0, nrow=3)
4   for(i in 1:10000){
5     F_k_2 <- 1000000 * sin(pi * i / 5)
6     y_k_2 <- y_k_1; y_k_1 <- y_k
7     y_k <- update_tick(y_k_1, y_k_2, F_k_2)
8     xi <- matrix(c(y_k_1, y_k_2, F_k_2), nrow=1)
9     upd <- update_regression_mat(Phi, xi, theta, y_k)
10    Phi <- upd$Phi_N_plus_1; theta <- upd$theta_N_plus_1
11  }
12  print(theta)
13 }
```

■結果 実行出力：

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 1.995 \\ -0.9953 \\ 5.000 \times 10^{-5} \end{bmatrix}.$$

■考察  $b$  が真値  $5.0 \times 10^{-5}$  に一致。十分な振幅で雑音が相対的に非常に小さくなり、 $F$  の係数が正しく同定できる。 $a_1, a_2$  も誤差が小さい。

## 4.5 課題 10 (非定常時系列の追従：忘却係数付き RLS)

### ■内容 非定常信号

$$y_k = \theta_k + w_k, \quad \theta_k = \sin(10^{-4}k), \quad w_k \in \{-1, +1\}$$

を 1 次元回帰  $\phi_k \equiv [1]$  で逐次推定する。忘却係数  $\gamma = 0.99$  を用いる。[1]

### ■方法 忘却付き RLS の更新 ( $m = 1$ ) :

$$\begin{aligned} K_k &= \Phi_{k-1}(\gamma + \phi_k \Phi_{k-1} \phi_k^\top)^{-1} \phi_k^\top, \\ \theta_k^{\text{hat}} &= \theta_{k-1}^{\text{hat}} + K_k(y_k - \phi_k \theta_{k-1}^{\text{hat}}), \\ \Phi_k &= \gamma^{-1}(\Phi_{k-1} - K_k \phi_k \Phi_{k-1}), \end{aligned}$$

初期化は  $\theta_0^{\text{hat}} = 0$ ,  $\Phi_0 = 1000$ 。  $\gamma = 0.99$  は有効窓長の目安  $1/(1 - \gamma) \approx 100$  に相当。[1]

### ■実装

```
1 exp10 <- function(){
2   y_k <- 0
3   Phi <- matrix(1000, 1, 1)
4   theta_hat <- matrix(0, 1, 1)
5   theta_hats <- c()
6   for(k in 1:10000){
7     w_k <- sample(c(-1, 1), 1)           # ノイズ
8     y_k <- sin(0.0001 * k) + w_k        # 観測
9     xi <- matrix(1, 1, 1)               #  $\phi_k = 1$ 
10    upd <- update_regression_mat(Phi, xi, theta_hat, y_k, gamma=0.99)
11    Phi <- upd$Phi_N_plus_1
12    theta_hat <- upd$theta_N_plus_1
13    theta_hats <- rbind(theta_hats, theta_hat)
14  }
15  dir.create("graphs", showWarnings=FALSE)
16  png("graphs/task10.png")
17  plot(1:10000, theta_hats, type="l", ylim=c(-1.5, 1.5),
18       xlab="k", ylab="theta_hat",
19       main="Estimation of non-stationary time series (exp10)")
20  lines(1:10000, sin(0.0001 * (1:10000)))
21  legend("topright", legend=c("Estimated theta_hat", "True theta"), lty=1)
22  dev.off()
23 }
24 exp10()
```

■結果 図 8。推定  $\theta_k^{\text{hat}}$  は真値  $\sin(10^{-4}k)$  を平滑追従。ノイズ  $\pm 1$  のため短周期の揺れが残る。

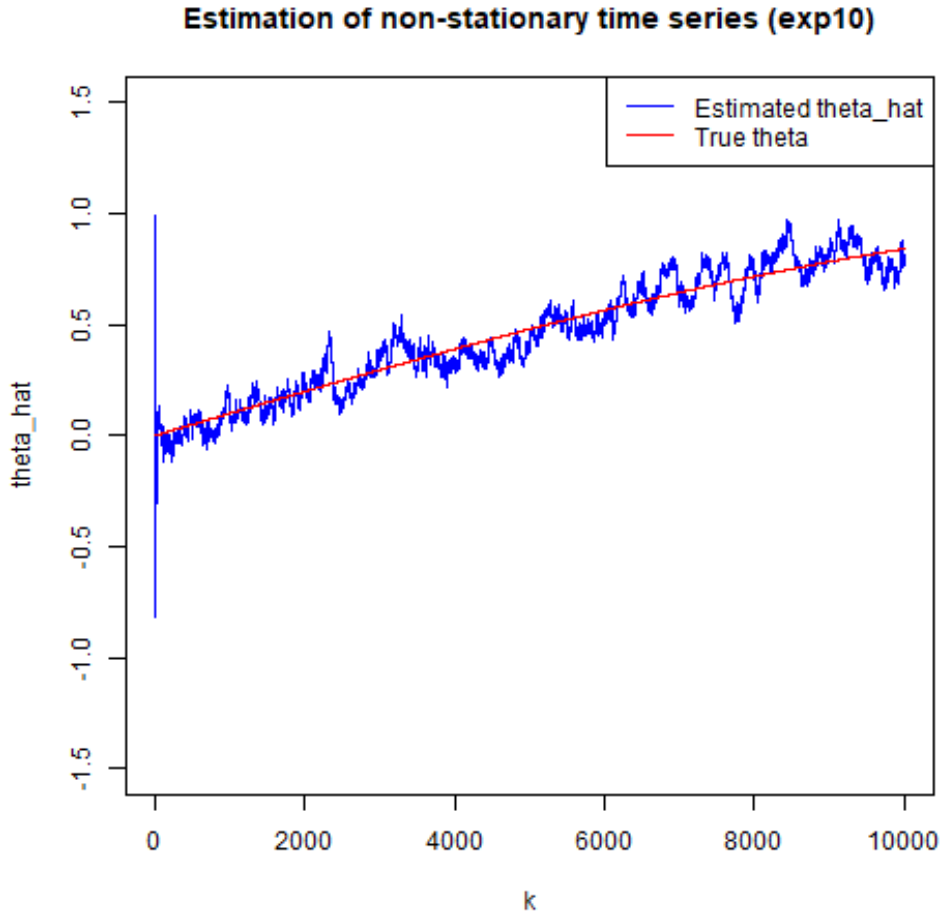


図 8: 忘却係数付き RLS による非定常平均の追従 ( $\gamma = 0.99$ )

■考察 図 8 から確かに、 $\theta$  の推定が真の値に追従していることが分かる。忘却係数を導入することで、過去のデータの影響を減少させ、最新のデータに基づく推定が可能となっている。

## 5 カルマンフィルタ、カルマン smoother

### 5.1 原理と方法

■モデル 一次元の線形状態空間モデルを用いる：

$$\theta_k = a_k \theta_{k-1} + v_k, \quad (3.40)$$

$$y_k = c_k \theta_k + w_k, \quad (3.41)$$

ここで  $v_k \sim \mathcal{N}(0, \sigma_v^2)$ ,  $w_k \sim \mathcal{N}(0, \sigma_w^2)$  は互いに独立で白色,  $a_k, c_k$  は既知とする。目的は「時刻  $k$  までの観測  $\{y_\ell\}_{\ell=1}^k$  に基づく  $\theta_k$  の最小平均二乗誤差 (MMSE) 推定」を行うこと [1].

以下はこのモデルに基づくデータ生成の R による実装例である。

Listing 1: データ生成関数

```
1 # データ生成関数 (exp11 と exp12 で 共通 使用)
```



```

2 generate_kalman_data <- function(seed = 123, N = 100, a_k = 0.9, c_k = 2,
3                                   sigma2_v = 1, sigma2_w = 1) {
4   # 乱数シードを設定
5   set.seed(seed)
6
7   # 初期値
8   theta_0 <- rnorm(1, mean = 3, sd = sqrt(2)) #  $\theta_0 \sim N(3, 2)$ 
9   V_0 <- 2
10
11  # データ格納用
12  theta_true <- numeric(N)
13  y_obs <- numeric(N)
14
15  # 初期化
16  theta_k_1 <- theta_0
17
18  # データ生成
19  for (k in 1:N) {
20    # 真の状態遷移 (3.40):  $\theta_k = a_k * \theta_{k-1} + v_k$ 
21    v_k <- rnorm(1, mean = 0, sd = sqrt(sigma2_v))
22    theta_k <- a_k * theta_k_1 + v_k
23    theta_true[k] <- theta_k
24
25    # 観測 (3.41):  $y_k = c_k * \theta_k + w_k$ 
26    w_k <- rnorm(1, mean = 0, sd = sqrt(sigma2_w))
27    y_k <- c_k * theta_k + w_k
28    y_obs[k] <- y_k
29
30    # 次のステップへ
31    theta_k_1 <- theta_k
32  }
33
34  # データを返す
35  return(list(
36    theta_true = theta_true,
37    y_obs = y_obs,
38    theta_0 = theta_0,
39    V_0 = V_0,
40    a_k = a_k,
41    c_k = c_k,
42    sigma2_v = sigma2_v,
43    sigma2_w = sigma2_w,
44    N = N
45  ))
46 }

```

■Kalman フィルタ 平方完成による最適ゲイン  $F_k$  と分散更新を導くと、予測分散  $X_k$ , 事後分散  $V_k$ , 推定値  $\hat{\theta}_k$  は

$$\hat{\theta}_k = a_k \hat{\theta}_{k-1} + F_k (y_k - c_k a_k \hat{\theta}_{k-1}), \quad (3.36)$$

$$X_k = a_k^2 V_{k-1} + \sigma_v^2, \quad (3.37)$$

$$V_k = \frac{\sigma_w^2 X_k}{c_k^2 X_k + \sigma_w^2}, \quad (3.38)$$

$$F_k = \frac{c_k X_k}{c_k^2 X_k + \sigma_w^2}. \quad (3.39)$$

これが Kalman フィルタであり、推定誤差分散を最小にする [1]。初期条件は  $\hat{\theta}_0 = \bar{\theta}$ ,  $V_0 = P$  とする [1]。

以下は、Kalman フィルタの R による実装例である。

**Listing 2:** Kalman フィルタ更新 (式 (3.36) – (3.39))

```

1 update_kalman_filter <- function(theta_k_1, V_k_1, y_k, a_k, c_k, sigma2_v, sigma2_w)
2 {
3   # (3.37) 予測分散
4   X_k <- a_k^2 * V_k_1 + sigma2_v
5   # (3.39) カルマンゲイン
6   F_k <- (c_k * X_k) / (c_k^2 * X_k + sigma2_w)
7   # (3.36) 推定値更新
8   theta_k <- a_k * theta_k_1 + F_k * (y_k - c_k * a_k * theta_k_1)
9   # (3.38) 事後分散更新
10  V_k <- (sigma2_w * X_k) / (c_k^2 * X_k + sigma2_w)
11  list(theta_k = theta_k, V_k = V_k, X_k = X_k, F_k = F_k)
12 }
```

■Kalman スムーザ 全データ  $\{y_1, \dots, y_N\}$  を用いて各  $\theta_k$  を後処理で精密化する。Rauch – Tung – Striebel (RTS) 型の退行更新は

$$\hat{\theta}_k^s = \hat{\theta}_k + g_k(\hat{\theta}_{k+1}^s - a_k \hat{\theta}_k), \quad (3.42)$$

$$g_k = \frac{a_k V_k}{X_{k+1}}, \quad (3.43)$$

$$V_k^s = V_k + g_k^2(V_{k+1}^s - X_{k+1}), \quad (3.44)$$

終端条件は  $\hat{\theta}_N^s = \hat{\theta}_N$ ,  $V_N^s = V_N$ 。  $\{\hat{\theta}_k^s\}$  は時刻  $N$  までの全情報に基づく MMSE 推定となる [1]。

以下は、Kalman スムーザの R による実装例である。

**Listing 3:** Kalman スムーザ更新 (式 (3.42) – (3.44))

```

1 update_kalman_smoother <- function(theta_k, theta_k_plus_1_s, V_k, V_k_plus_1_s, X_k_
2   plus_1, a_k) {
3   # (3.43) 後向きゲイン
4   g_k <- a_k * V_k / X_k_plus_1
5   # (3.42) 推定値の後向き補正
6   theta_k_s <- theta_k + g_k * (theta_k_plus_1_s - a_k * theta_k)
7   # (3.44) 分散の後向き補正
8   V_k_s <- V_k + g_k^2 * (V_k_plus_1_s - X_k_plus_1)
9   list(theta_k_s = theta_k_s, V_k_s = V_k_s, g_k = g_k)
10 }
```

## 5.2 課題 11 (カルマンフィルタ：フォワード)

■内容 一次元状態空間モデルを対象とする。

$$\theta_k = a_k \theta_{k-1} + v_{k-1}, \quad v_{k-1} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_v^2), \quad (14)$$

$$y_k = c_k \theta_k + w_k, \quad w_k \sim \mathcal{N}(0, \sigma_w^2). \quad (15)$$

初期推定値は  $\hat{\theta}_0 = \theta_0$ , 分散  $V_0$  を与える. 評価は平均二乗誤差

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\theta_k^{\text{true}} - \hat{\theta}_k)^2 \quad (16)$$

で行う.

■方法 時刻  $k$  ごとに予測と更新を行う.

$$X_k = a_k^2 V_{k-1} + \sigma_v^2, \quad (17)$$

$$F_k = \frac{c_k X_k}{c_k^2 X_k + \sigma_w^2}, \quad (18)$$

$$\hat{\theta}_k = a_k \hat{\theta}_{k-1} + F_k (y_k - c_k a_k \hat{\theta}_{k-1}), \quad (19)$$

$$V_k = (1 - F_k c_k) X_k. \quad (20)$$

出力は  $\{\hat{\theta}_k\}_{k=1}^N$  と  $\{V_k\}_{k=1}^N$ .

■実装 関数 `exp11(data)` を用いる. 各  $k$  で `update_kalman_filter` を呼び,  $X_k, F_k, \hat{\theta}_k, V_k$  を更新する. 推定系列と真値を重ね描画し `graphs/task11.png` に保存する.

■結果 データ生成と実行条件は

```
1 kalman_data <- generate_kalman_data(seed = 42, N = 100,
2                                     a_k = 0.9, c_k = 2,
3                                     sigma2_v = 1, sigma2_w = 1)
4 result11 <- exp11(kalman_data)
```

である. MSE は 0.1936 となった. 図 9 に真値と推定の系列を示す.

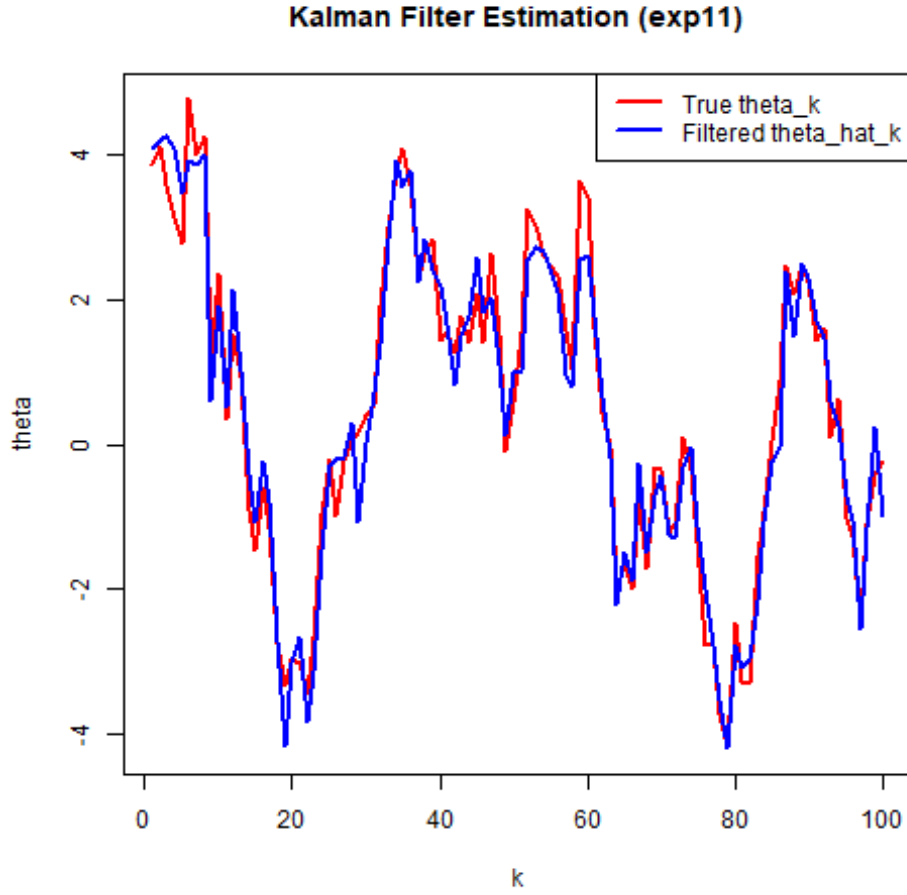


図 9: カルマンフィルタ（フォワード）による推定結果（赤：真値，青：推定）

### 5.3 課題 12（カルマン smoother）

■内容 一次元状態空間モデル

$$\theta_k = a_k \theta_{k-1} + v_{k-1}, \quad v_{k-1} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_v^2), \quad (21)$$

$$y_k = c_k \theta_k + w_k, \quad w_k \sim \mathcal{N}(0, \sigma_w^2) \quad (22)$$

に対し，時刻  $1:N$  の全観測を用いて各時刻の状態を後向きに精緻化する．

■方法 まず課題 11 と同じ前向きフィルタで

$$X_k = a_k^2 V_{k-1} + \sigma_v^2, \quad F_k = \frac{c_k X_k}{c_k^2 X_k + \sigma_w^2}, \quad (23)$$

$$\hat{\theta}_k = a_k \hat{\theta}_{k-1} + F_k (y_k - c_k a_k \hat{\theta}_{k-1}), \quad V_k = (1 - F_k c_k) X_k \quad (24)$$

を得る．後向きでは RTS smoother を用いる（スカラー）．平滑化ゲイン

$$J_k = \frac{V_k a_k}{X_{k+1}}, \quad (25)$$

更新式

$$\hat{\theta}_k^s = \hat{\theta}_k + J_k(\hat{\theta}_{k+1}^s - a_k \hat{\theta}_k), \quad (26)$$

$$V_k^s = V_k + J_k^2(V_{k+1}^s - X_{k+1}), \quad (27)$$

終端条件は  $\hat{\theta}_N^s = \hat{\theta}_N$ ,  $V_N^s = V_N$ .

■実装 `exp12(data)` を用いる. 前向きで `theta_hat`, `V_all`, `X_all` を保存し, 後向きで  $k = N - 1$  から  $1$  へ `update_kalman_smoother` を適用して `theta_smooth`, `V_smooth` を得る. 真値と平滑化推定を描画し `graphs/task12.png` に保存する. 評価は `mean((theta_true - theta_smooth)^2)`.

■結果 データ生成と実行

```
1 kalman_data <- generate_kalman_data(seed = 42, N = 100,  
2                                   a_k = 0.9, c_k = 2,  
3                                   sigma2_v = 1, sigma2_w = 1)  
4 result12 <- exp12(kalman_data)
```

出力は `mmse`: 0.1716 であった. 図 10 に真値と平滑化推定を示す.

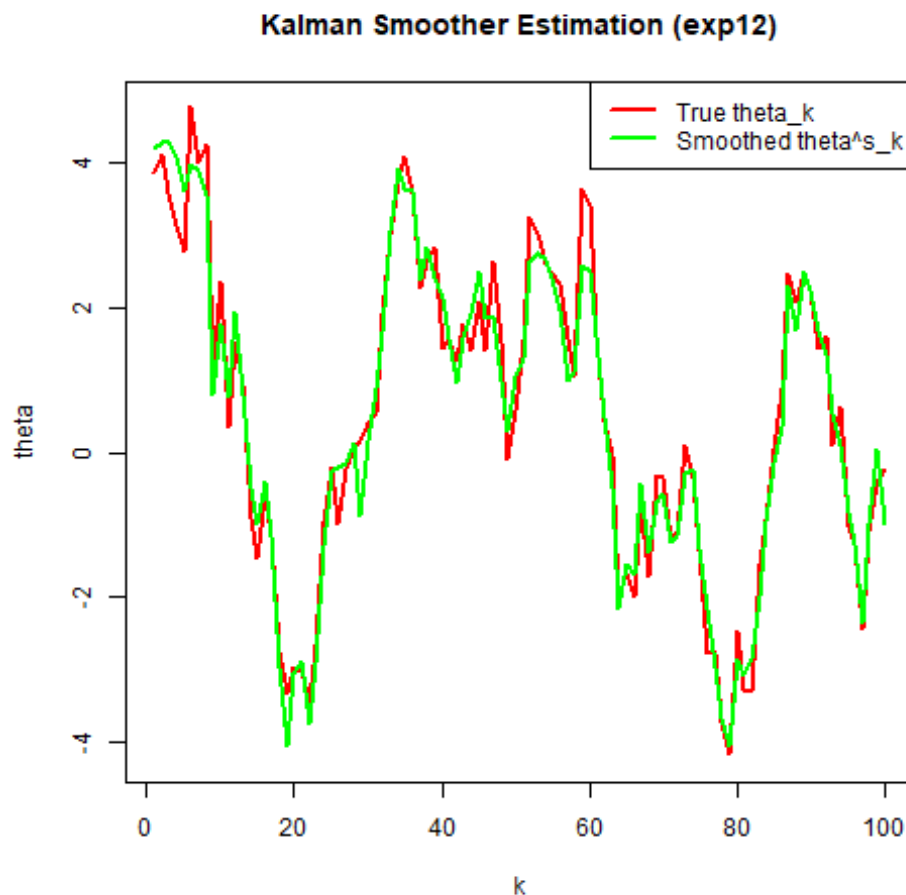


図 10: カルマン smoother の推定結果 (赤: 真値, 緑: 平滑化推定)

■考察 同じシード値でカルマンフィルタ, カルマン smoother を実行したが, 図 9 と図 10 を比較しても, `mmse` を比較しても, カルマン smoother の方が真値に近い推定ができていることがわかる. こ

れは、カルマン smoother は全データを用いて各時刻の状態を推定するため、より多くの情報を活用できることによると考えられる。

## 6 交互最小二乗法と K-平均法

### 6.1 原理と方法

■交互最小二乗法 非線形最小二乗問題のうち、パラメータを二分割すると片方ずつは線形になる場合に適用する。パラメータを  $\theta = (\alpha, \beta)^\top$  と分割し、 $g(\alpha, \beta, x)$  が  $\alpha, \beta$  に関してそれぞれ線形（双線形など）であるとする。観測  $(x_i, y_i)$  に対し、目的関数

$$J(\alpha, \beta) := \sum_{i=1}^N \|y_i - g(\alpha, \beta, x_i)\|^2 \quad (28)$$

を最小化する。片方のパラメータを固定すれば通常の線形最小二乗（式 (3.5) 型）で解ける。交互更新により  $J$  は単調非増加で、反復に伴い悪化しない。ただし一般には局所解に収束しうするため初期値が重要である [1]。

初期値  $\alpha^{(0)}, \beta^{(0)}$  を与え、 $j = 1, 2, \dots$  について次を繰り返す。

1. **Step A ( $\beta$  固定)** :  $\beta = \beta^{(j-1)}$  として

$$\alpha^{(j)} := \arg \min_{\alpha} \sum_{i=1}^N \|y_i - g(\alpha, \beta^{(j-1)}, x_i)\|^2. \quad (29)$$

これは線形最小二乗で解く。

2. **Step B ( $\alpha$  固定)** :  $\alpha = \alpha^{(j)}$  として

$$\beta^{(j)} := \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^N \|y_i - g(\alpha^{(j)}, \beta, x_i)\|^2. \quad (30)$$

これも線形最小二乗で解く。

収束判定は例えば  $\|\alpha^{(j)} - \alpha^{(j-1)}\|^2 + \|\beta^{(j)} - \beta^{(j-1)}\|^2 < \varepsilon$  などとする。更新ごとに  $J(\alpha^{(j)}, \beta^{(j)}) \leq J(\alpha^{(j-1)}, \beta^{(j-1)})$  が成り立つ性質を利用する。初期値の多点スタートや正則化の併用が実務上有効である。

以下は、交互最小二乗法の R による実装例である。

Listing 4: 交互最小二乗法更新

```
1 update_alpha_beta <- function(alpha, beta, x, x_T, y, n) {
2   # Step 1: alphaを固定してbetaを推定
3   x_alpha <- matrix(0, nrow = n, ncol = 3)
4   for (i in 1:n) {
5     x_alpha[i, ] <- t(alpha) %*% x[, , i]
6   }
7   result <- regression_simple(x_alpha, y)
8   beta_new <- result$theta_hat
9
10  # Step 2: betaを固定してalphaを推定
11  x_beta <- matrix(0, nrow = n, ncol = 2)
```

```

12   for (i in 1:n) {
13     x_beta[i, ] <- t(beta_new) %*% x_T[, i]
14   }
15   result2 <- regression_simple(x_beta, y)
16   alpha_new <- result2$theta_hat
17
18   return(list(alpha_new = alpha_new, beta_new = beta_new))
19 }

```

■K-平均法 データ  $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^p$  を  $K$  個のクラスタに分割する. クラスタ  $V_\ell$  の代表点 (重心) を

$$\mu(V_\ell) := \arg \min_{\mu \in \mathbb{R}^p} \sum_{i \in V_\ell} \|x_i - \mu\|^2 = \frac{1}{|V_\ell|} \sum_{i \in V_\ell} x_i \quad (31)$$

と定めると, 目的は

$$\min_{\{V_\ell\}} \sum_{\ell=1}^K \sum_{i \in V_\ell} \|x_i - \mu(V_\ell)\|^2 \quad (32)$$

の最小化である. 指示変数  $r_{i,\ell} \in \{0, 1\}$  ( $x_i$  がクラスタ  $\ell$  に属すれば 1) を用いると

$$\min_{\{\mu_\ell\}, \{r_{i,\ell}\}} \sum_{\ell=1}^K \sum_{i=1}^N r_{i,\ell} \|x_i - \mu_\ell\|^2 \quad (33)$$

と書ける. 行列表示では  $X = [x_1, \dots, x_N]$ ,  $U = [\mu_1, \dots, \mu_K]$ ,  $R = (r_{i,\ell})$  として

$$\|X - UR\|_F^2 \quad (34)$$

の最小化に等価である. 大域最適性は保証されず初期値依存性が強い.

初期重心  $\{\mu_\ell^{(0)}\}_{\ell=1}^K$  を与え,  $j = 1, 2, \dots$  について次を交互に実行する.

1. 割当て (Assignment): 各データを最も近い重心へ割り当てる.

$$r_{i,\ell}^{(j)} = \begin{cases} 1 & \text{if } \ell = \arg \min_{k=1, \dots, K} \|x_i - \mu_k^{(j-1)}\|^2, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (35)$$

2. 重心更新 (Update): 各クラスタの平均で重心を更新する.

$$\mu_\ell^{(j)} = \frac{\sum_{i=1}^N r_{i,\ell}^{(j)} x_i}{\sum_{i=1}^N r_{i,\ell}^{(j)}} \quad (\sum_i r_{i,\ell}^{(j)} > 0). \quad (36)$$

停止条件は  $\max_\ell \|\mu_\ell^{(j)} - \mu_\ell^{(j-1)}\|^2 < \varepsilon$  等とする. 目的関数は反復で非増加となるが, 局所解に収束するため初期化戦略 (例: 多点スタート,  $k$ -means++) が重要である.

以下は, K-平均法の R による実装例である.

Listing 5: K-平均法

```

1 k_means <- function(x, K, max_iters = 10000, tol = 1e-6) {
2   n <- nrow(x)
3   d <- ncol(x)
4
5   # ランダムに初期クラスタ中心を選択

```

```

6 centroids <- x[sample(1:n, K), ]
7
8 cluster_assignments <- rep(0, n)
9 for (iter in 1:max_iters) {
10   # 各データポイントを最も近いクラスタ中心に割り当て
11   for (i in 1:n) {
12     distances <- apply(centroids, 1, function(centroid) sum((x[i, ] - centroid
13       )^2))
14     cluster_assignments[i] <- which.min(distances)
15   }
16   # 新しいクラスタ中心を計算
17   new_centroids <- matrix(0, nrow = K, ncol = d)
18   for (k in 1:K) {
19     points_in_cluster <- x[cluster_assignments == k, , drop = FALSE]
20     if (nrow(points_in_cluster) > 0) {
21       new_centroids[k, ] <- colMeans(points_in_cluster)
22     } else {
23       new_centroids[k, ] <- centroids[k, ] # クラスタにポイントがない場合は
24         中心を維持
25     }
26   }
27   # 収束判定
28   if (max(sqrt(rowSums((new_centroids - centroids)^2))) < tol) {
29     # 各データポイントから割り当てられた中心までの距離の合計を計算
30     total_distance <- 0
31     for (i in 1:n) {
32       centroid_idx <- cluster_assignments[i]
33       distance <- sum((x[i, ] - centroids[centroid_idx, ])^2)
34       total_distance <- total_distance + distance
35     }
36     break
37   }
38   centroids <- new_centroids
39 }
40
41 return(list(
42   centroids = centroids,
43   cluster_assignments = cluster_assignments,
44   total_distance = total_distance
45 ))
46 }
47

```

## 6.2 課題 13 (交互最小二乗法)

■内容 パラメータ  $\alpha \in \mathbb{R}^2$ ,  $\beta \in \mathbb{R}^3$  を用いた双線形モデル

$$y_i \approx \alpha^\top X_i \beta$$

を最小二乗で推定する．特徴は  $\phi_i = (1, x_i, x_i^2, x_i^3)$  とし,

$$X_i = \begin{pmatrix} \phi_{i,1} & \phi_{i,2} & \phi_{i,3} \\ \phi_{i,2} & \phi_{i,3} & \phi_{i,4} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 3}$$

を用いる．目的は  $\min_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha^\top X_i \beta)^2$ .



■方法 交互最小二乗法（ALS）を用いる．反復  $j = 1, 2, \dots$  に対し

$$\beta^{(j)} := \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^n (y_i - (\alpha^{(j-1)})^\top X_i \beta)^2, \quad (37)$$

$$\alpha^{(j)} := \arg \min_{\alpha} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha^\top X_i \beta^{(j)})^2, \quad (38)$$

を交互に解く（いずれも線形最小二乗）．収束判定は

$$\max(\|\alpha^{(j)} - \alpha^{(j-1)}\|_2, \|\beta^{(j)} - \beta^{(j-1)}\|_2) < \varepsilon.$$

■実装 CSV `datas/mmse_kadai13.csv` を読み込み， $X_i$  を `x[, , i]`， $X_i^\top$  を `x_T[, , i]` に格納．`update_alpha_beta` で

$$\underbrace{(\alpha^\top X_i)_{i=1:n}}_{n \times 3 \text{ 設計行列}} \text{ から } \beta, \quad \underbrace{(X_i \beta)_{i=1:n}}_{n \times 2 \text{ 設計行列}} \text{ から } \alpha$$

を逐次推定する．多点初期化（乱数）で `num_trials=10` を走らせ最良解を採用．収束履歴と  $\alpha$  の軌跡を `graphs/task13_convergence.png`，`graphs/task13_trajectory.png` に保存する．

■結果 全試行 10 回の平均二乗誤差（MMSE）は

$$\text{MMSE} = 0.3329$$

であった（有効数字 4 桁）．最良試行での推定結果は

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0.6000 \\ -1.200 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0.8441 \\ -1.661 \\ 3.334 \end{pmatrix},$$

$$\theta = \alpha \beta^\top = \begin{pmatrix} 0.5065 & -0.9967 & 2.000 \\ -1.013 & 1.994 & -4.002 \end{pmatrix}.$$

収束挙動とパラメータ軌跡を図 11 および図 12 に示す．

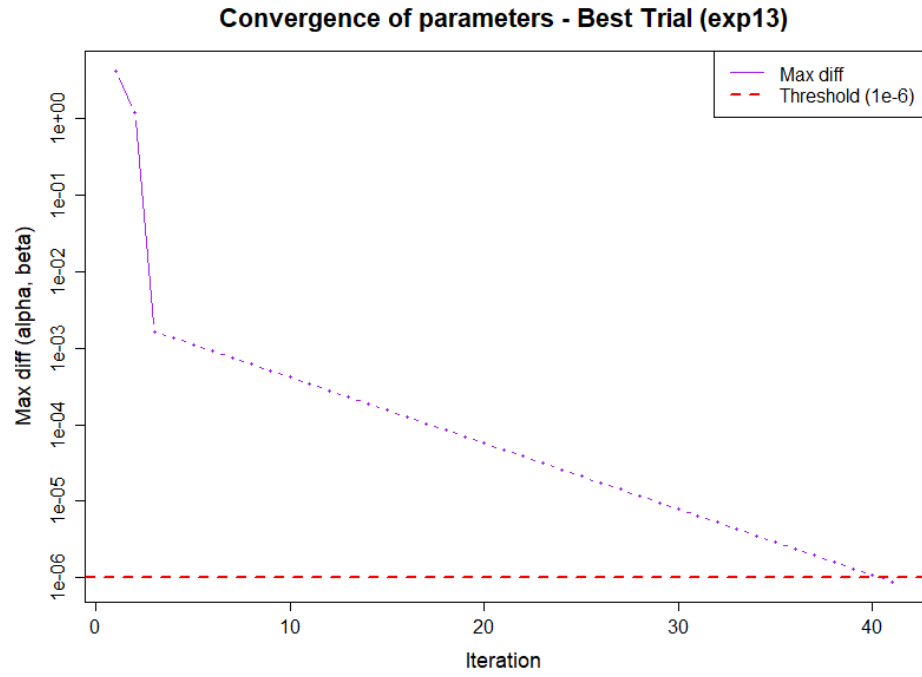


図 11: ALS による収束履歴（縦軸は  $\max(\|\Delta\alpha\|_2, \|\Delta\beta\|_2)$ , 対数目盛）

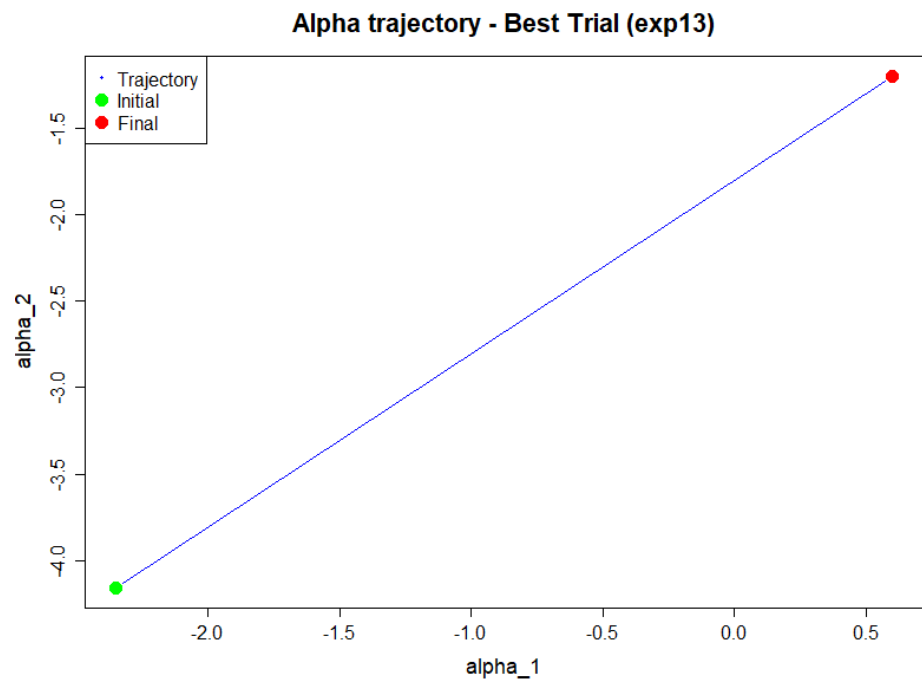


図 12:  $\alpha$  の推定軌跡（緑：初期，赤：収束点）

全試行の統計情報を表 1 に示す.

表 1: 全試行 10 回の統計情報

試行回数	10
MMSE - 平均	0.3329
MMSE - 標準偏差	0.0000
MMSE - 最小	0.3329
MMSE - 最大	0.3329

$\theta = \alpha\beta^\top$  の各要素の範囲を表 2 に示す.

表 2:  $\theta = \alpha\beta^\top$  の各要素の範囲

要素	最小値	最大値
$\theta_{1,1}$	0.5065	0.5065
$\theta_{1,2}$	-0.9967	-0.9967
$\theta_{1,3}$	2.0003	2.0003
$\theta_{2,1}$	-1.0132	-1.0132
$\theta_{2,2}$	1.9939	1.9939
$\theta_{2,3}$	-4.0017	-4.0017

■考察 図 11 と、図 12 より、ALS は数十回の反復で高速に収束することが分かる.

また、表 1 および表 2 から、全試行にわたって MMSE や  $\theta$  の各要素が非常に安定していることも分かる.

### 6.3 課題 14 (K-平均法による 2 次元データの 3 クラスタ分類)

■内容 与えられた点列  $x_i \in \mathbb{R}^2$  ( $i = 1, \dots, 1000$ ) を 3 クラスタに分割する. 初期値を 10 組以上試し、最良の分類と理由を示す.

■実装方法 1 (素朴な解法) K-平均法を  $K = 3$  で実行する. 初期重心はデータ点から一様無作為抽出. 試行回数は 100. 評価はクラスタ内平方和

$$\text{WCSS} = \sum_{k=1}^3 \sum_{i \in V_k} \|x_i - \mu_k\|_2^2$$

の最小値で選ぶ. 最良試行の割当と重心を図示する (graphs/task14\_kmeans.png).

■結果 図 13 に最良試行の分類を示す. 点色はクラスタ, 黒い  $\times$  は重心を表す.

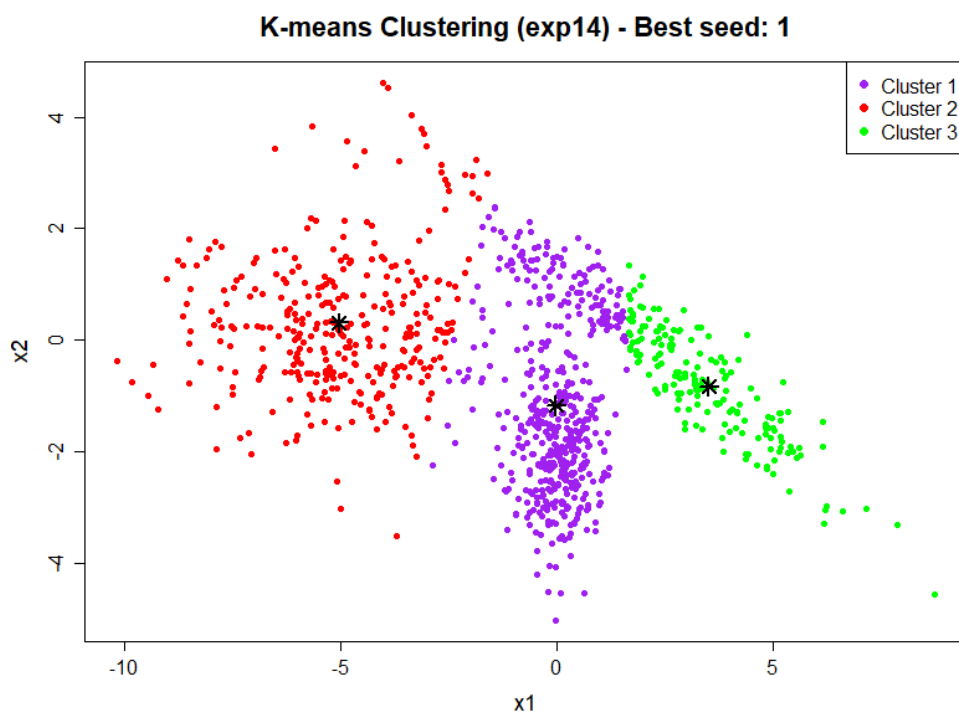


図 13: K-means ( $K = 3$ ) 最良試行の結果. 色はクラスタ,  $\times$  は重心

■考察 K-平均法はユークリッド距離と平均による更新のため球状かつ等方的なクラスタを仮定する. 細長いクラスタや曲線状の群では分割が不適切になりやすい.

■実装方法 2 ( $K = 6$  で分割後, 3 組にペアリング) まず  $K = 6$  の K-平均で細分割し重心  $\{\nu_j\}_{j=1}^6$  を得る (graphs/task14\_kmeans\_re.png). つぎに 6 重心から 3 組のペア  $\{(p_1, q_1), (p_2, q_2), (p_3, q_3)\}$  を選び

$$\sum_{r=1}^3 \|\nu_{p_r} - \nu_{q_r}\|_2$$

が最小となる組合せを全探索で決定する (find\_optimal\_cluster\_pairs). 各ペアの 2 クラスタを同一グループとして 3 クラスタに再結合し, 点群と重心, ペア線分を図示する (graphs/task14\_optimal\_pairs.png).

■結果 図 14 に  $K = 6$  の細分割結果, 図 15 に最適ペアリングによる 3 グループ化を示す.

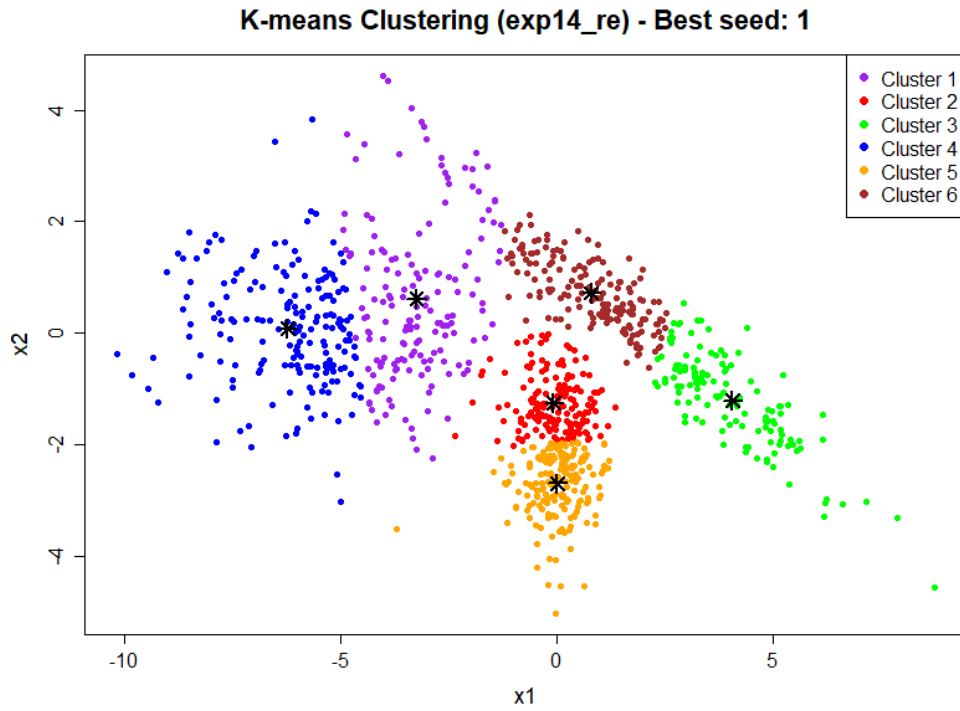


図 14:  $K = 6$  での細分割結果. 色は 6 クラス,  $\times$  は重心

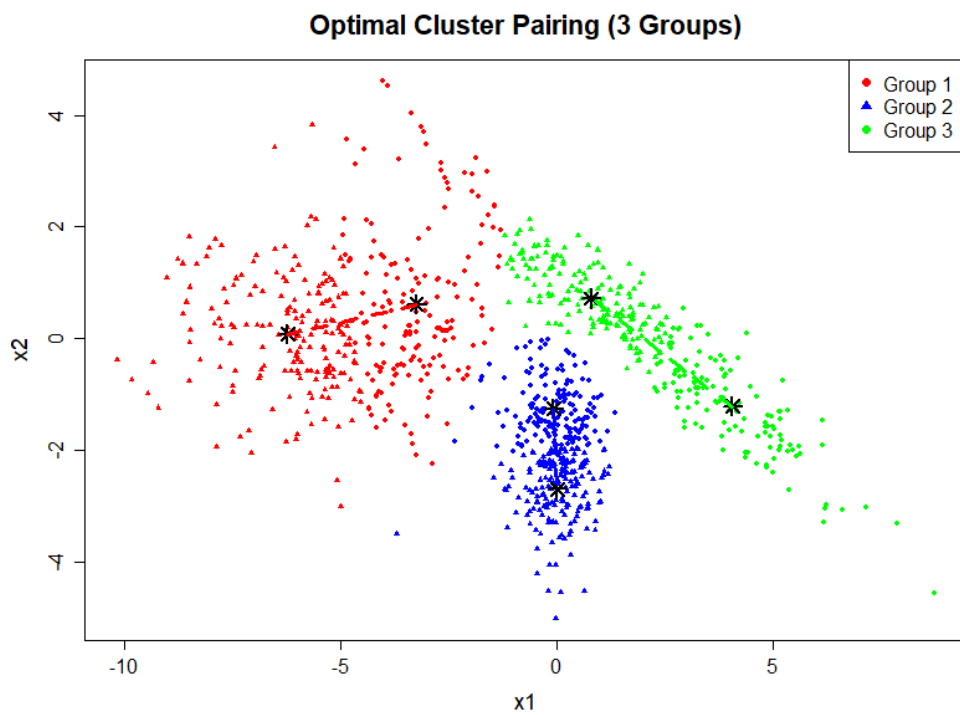


図 15: 重心間距離最小の 3 ペアで再結合した結果. 同色が同一グループ

■考察 細長い群は 2 つの近接クラスタとして先に抽出し, のちに結合する手法で生成されたクラスタの方が直感に合う. 実装 1 より境界が群の形状に適応しやすい.

## 7 結論

本実験では、最小二乗法とその応用手法について学んだ。各手法の理論的背景を理解し、実装を通じてその性能を評価することで、最小二乗法の多様な応用可能性を確認できた。特に、K 平均法などの交互最小二乗法などは、工夫次第で様々な問題に適用できることが分かった。

## 付録 A 使用コード一覧

主要スクリプトと入手先を列挙する。

- 実験コード (R) : <https://github.com/<your-repo>>
- レポート作成、R の実装の一部に GitHub Copilot の補完を使用

## 参考文献

## 参考文献

[1] 数理工学実験 (2025 年度配布資料) .