数理アルゴリズムとシミュレーション 演習課題 7

提出期限: 2020/12/3 23:59

以下の課題を行い，レポートを提出すること．レポートの作成に関しては，manaba の「演習課題」ページ内の項目をしっかりと確認すること．また，レポートの作成にあたって参考にした文献や Web ページはその出典を明示すること．

課題 1

実対称行列 A，正定値実対称行列 B からなる一般化固有値問題を

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}$$

とする．このとき，以下の問いに答えよ．

(1-1) 以下の空欄 (1)〜(3) に当てはまる式をそれぞれ選べ．

B のコレスキー分解を $B = R^{\mathrm{T}}R$ とする．このとき，一般化固有値問題を $\boxed{\quad(1)\quad}$ のような標準固有値問題に帰着させることができる．このとき，標準固有値問題における固有値はもとの一般化固有値問題の固有値と一致しており，標準固有値問題の固有ベクトル $\boldsymbol{y}$ ともとの一般化固有値問題の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ との間には，$\boxed{\quad(2)\quad}$ のような関係が成り立つ．また，各固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i (i = 1, 2, ..., n)$ を並べた行列 $X = [x_1, x_2, ..., x_n]$ に関して，$\boxed{\quad(3)\quad} = I$ (I は単位行列) が成り立つ．

(1)

(a) $R^{\mathrm{T}}AR\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{y}$　(b) $(R^{\mathrm{T}})^{-1}AR\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{y}$

(c) $R^{\mathrm{T}}AR^{-1}\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{y}$　(d) $(R^{\mathrm{T}})^{-1}AR^{-1}\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{y}$

(2)

(a) $\boldsymbol{x} = R\boldsymbol{y}$　(b) $\boldsymbol{x} = R^{-1}\boldsymbol{y}$　(c) $\boldsymbol{x} = R^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$　(d) $\boldsymbol{x} = (R^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{y}$

(3)

(a) $X^{\mathrm{T}}AX$　(b) $X^{\mathrm{T}}A^{-1}X$　(c) $X^{\mathrm{T}}BX$　(d) $X^{\mathrm{T}}B^{-1}X$

(1-2) 行列 A，B をそれぞれ以下の通りとする．

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix},\ B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

このとき，2 つの一般化固有値問題 $A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}, B\boldsymbol{y} = \mu A\boldsymbol{y}$ の固有値として正しいものをそれぞれ選べ．ただし, MATLAB の関数 **`eig`** を用いても良い．

(1) 固有値 λ

(a) $0.5, 1, \infty$ (b) $0, 0.5, 1$ (c) $0, 1, 2$ (d) $1, 2, \infty$

(2) 固有値 μ

(a) $0.5, 1, \infty$ (b) $0, 0.5, 1$ (c) $0, 1, 2$ (d) $1, 2, \infty$

課題 2

一般化固有値問題の固有値・固有ベクトルをコレスキー分解と逆反復法によって求める．

(2-1) 行列 A, B を

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

とし， シフト量を 2 と設定して，一般化固有値問題 $A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}$ の 2 付近の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める MATLAB プログラムを作成せよ．ここで，初期ベクトルの要素は全て 1 とする．また，k 回目の反復で求めた近似固有値 $\lambda^{(k)}$ とそれに対応する近似固有ベクトル $\boldsymbol{x}^{(k)}$ による残差

$$r = \left\| A\boldsymbol{x}^{(k)} - \lambda^{(k)} B\boldsymbol{x}^{(k)} \right\|_2$$

が 10^{-10} 以下となったときに反復を停止せよ．なお，一般化固有値問題に対する逆反復法のアルゴリズムは manaba の「一般化固有値問題に対する逆反復法のアルゴリズム」を参照すること．

(2-2) (2-1) のプログラムを用いて，シフト量を区間 $[0.005, 1.995]$ 内で 0.01 刻みとしたとき，各シフト量で得られる固有値の変化および反復回数の変化をそれぞれグラフに描画せよ．なお，初期ベクトルや停止条件は (2-1) と同様とする．

課題 3

図 1 のように表されるデータを考える．このデータを距離によって分類することでスペクトラルクラスタリングによるクラスタリングを行う．なお，データの座標は manaba にアップロードされている **data.mat** で与えられるため，ダウンロードして用いること．**data.mat** は $2 \times n$ 行列 $U = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n]$ が格納されており，1 行目が x 座標を，2 行目が y 座標を表す．

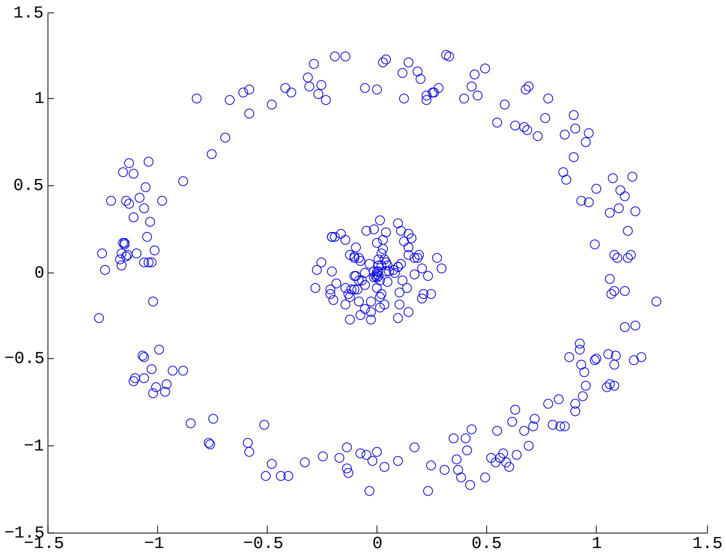

図 1　データの分布

データの x 座標，y 座標からスペクトラルクラスタリングを行うための距離行列 W，D は以下の通りに与えられる．

$$W = \{w_{ij}\},\ w_{ij} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{u}_i - \boldsymbol{u}_j\|_2^2}{\sigma^2}\right), & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases}$$

$$D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \ldots, d_n),\ d_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}.$$

ここで，$\sigma = 0.4$ とする．manaba にアップロードされている make_WD.m を用いることで，行列 W, D を生成することができる．これを用いて以下の問いに答えよ．

(3-1) スペクトラルクラスタリングでは $L\boldsymbol{x} = \lambda D\boldsymbol{x}$, $L = D - W$ となる一般化固有値問題の非ゼロの最小固有値に対応する固有ベクトルの要素を用いてクラスタリングを行う．ここで，逆反復法を用いてスペクトラルクラスタリングで現れる一般化固有値問題の非ゼロ最小固有値に対応する固有ベクトルを求め，固有ベクトルの要素をグラフに描画せよ．なお，非ゼロの最小固有値を求める際はシフト量を 0.006 と設定せよ．逆反復法の初期ベクトルは要素が全て 1 のベクトルとせよ．また，k 回目の反復で求めた近似固有値 $\lambda^{(k)}$ とそれに対応する近似固有ベクトル $\boldsymbol{x}^{(k)}$ による残差

$$r = \left\| L\boldsymbol{x}^{(k)} - \lambda^{(k)} D\boldsymbol{x}^{(k)} \right\|_2$$

が 10^{-2} 以下となったときに反復を停止せよ．

(3-2) (3-1) で求めた固有ベクトルを用いて固有ベクトルの要素の値が閾値 δ より大きいか小さいかで 2 つのグループに分類し，各グループの座標点をグラフに描画せよ．なお，クラスタリングの閾値 δ は固有ベクトルの要素の平均値とすること．