数値解析・最適化工学特論 課題 1

M1 田川幸汰

1 課題 1

$J=\sum_{a=1}^{N}(x_a-\bar{x_a},V[x_a]=^{-1}(x_a-\bar{x_a}))$ からラグランジュの未定乗数法を用いて $\bar{x_a}$ を求め、次の関数を導出しなさい。

$$J=\sum_{a=1}^{N}\frac{(x_a,u)^2}{(u,V[x_a]u)} \tag{1}$$

1.1 解答

真の値のデータを $\bar{x_a}$、誤差を含むデータを x_a とすると、その誤差 Δx_a は $x_a-\bar{x_a}$ で表される。u をパラメータベクトルとして含む際の制約条件 $g(x_a)$ は式 (2) で表される。

$$g(x_a)=(\bar{x_a},u)=(x_a-\Delta x_a,u)=0,a=1,...,N \tag{2}$$

与式に $\bar{x_a}=x_a-\Delta x_a$ を代入すると式 (3) が得られる。

$$J=\sum_{a=1}^{N}(x_a-(x_a-\Delta x_a),V[x_a]^{-1}x_a-(x_a-\Delta x_a))=\sum_{a=1}^{N}(\Delta x_a,V[x_a]^{-1}\Delta x_a) \tag{3}$$

式 (2) で求めた制約条件 $g(x_a)$ と式 (3)=$f(x_a)$ を用いて、ラグランジュの未定乗数法を計算すると式 (4) が得られる。

$$F(x_a,\lambda)=f(x_a)-\lambda g(x_a)=\sum_{a=1}^{N}(\Delta x_a,V[x_a]^{-1}\Delta x_a)-\sum_{a=1}^{N}\lambda_a(x_a-\Delta x_a,u) \tag{4}$$

式 (4) の Δx_a に関する偏微分は式 (5) で表される。ここで、式 (4) の第一項は二次形式、第二項は内積の偏微分を計算する。また、式 (4) の λ_a に関する偏微分は式 (6) で表される。第一項は λ_a を含まないため 0 となる。

$$\frac{\delta}{\delta\Delta x_a}F(x_a,\lambda)=2V[x_a]--1\Delta x_a-\lambda_a u=0 \tag{5}$$

$$\frac{\delta}{\delta\lambda_a}F(x_a,\lambda)=(x_a-\Delta x_a,u)=0 \tag{6}$$

式 (5) から Δx_a は式 (7) で表される。

$$\Delta x_a=\frac{\lambda_a}{2}V[x_a]u \tag{7}$$

式 (6) と式 (7) を用いて、λ_a は式 (8) で表される。

$$\begin{aligned}(x_a-\frac{\lambda_a}{2}V[x_a]u,u)&=0\\ \lambda_a&=\frac{2(u,x_a)}{u,V[x_a]u}\end{aligned} \tag{8}$$

式 (3) に、式 (7) で求めた Δx_a と式 (8) で求めた λ_a を代入すると、式 (9) が得られる。

$$
\begin{aligned}
J &= \sum_{a=1}^{N}(\frac{\lambda_a}{2}V[x_a]u, V[x_a]^{-1}\frac{\lambda_a}{2}V[x_a]u) \\
&= \frac{1}{4}\sum_{a=1}^{N}\lambda_a^2(V[x_a]u, u) \\
&= \frac{1}{4}\sum_{a=1}^{N}(\frac{2(u, x_a)}{(u, V[x_a]u)})^2(V[x_a]u, u) \\
&= \frac{1}{4}\sum_{a=1}^{N}\frac{4(u, x_a)^2}{(u, V[x_a]u)^2}(V[x_a]u, u) \\
&= \sum_{a=1}^{N}\frac{(u, x_a)^2}{(u, V[x_a]u)}
\end{aligned}
\tag{9}
$$

式 (9) より、$J = \sum_{a=1}^{N}\frac{(x_a, u)^2}{(u, V[x_a]u)}$ となる。

2 課題 2

$x = 300\cos\theta$, $y = 200\sin\theta$ で表される楕円状の点列 (x_i, y_i) を次のように生成しなさい。また、生成した点列を描画してその分布を確認しなさい。

$$
(x_i, y_i) = (300\cos\theta_i, 200\sin\theta_i), \quad \theta_i = -\frac{\pi}{4} + \frac{11\pi}{12N}i, \quad i = 0, ..., N-1 \tag{10}
$$

2.1 解答

$N = 100$ として生成した楕円を図 1 に示す。

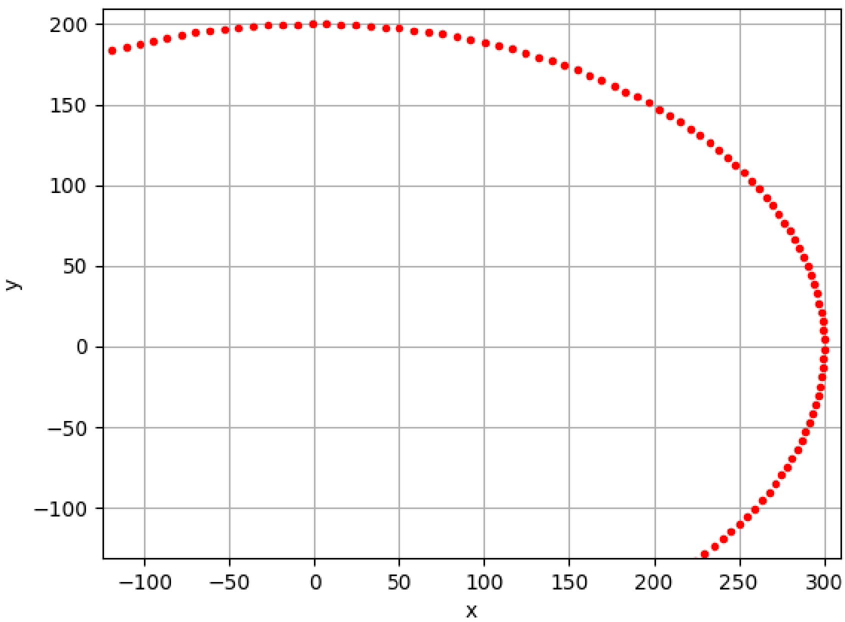

図 1: 楕円

中心が $(x, y) = (0, 0)$、X 軸方向に 300、Y 軸方向に 200、傾き 0 の楕円上の 100 点が描画されている。

3 課題 3

課題 2 で生成した点列の x 座標、y 座標にそれぞれ独立に、平均 $\mu = 0$、標準偏差 $\sigma = 3.0$ の正規分布に従う誤差を加えたデータを作成しなさい。それを確認するために課題 2 の描画結果と重ねて描画しなさい。

3.1 解答

$N = 100$ として誤差を加えた点と真値の点を重ねた楕円を図 2 に示す。

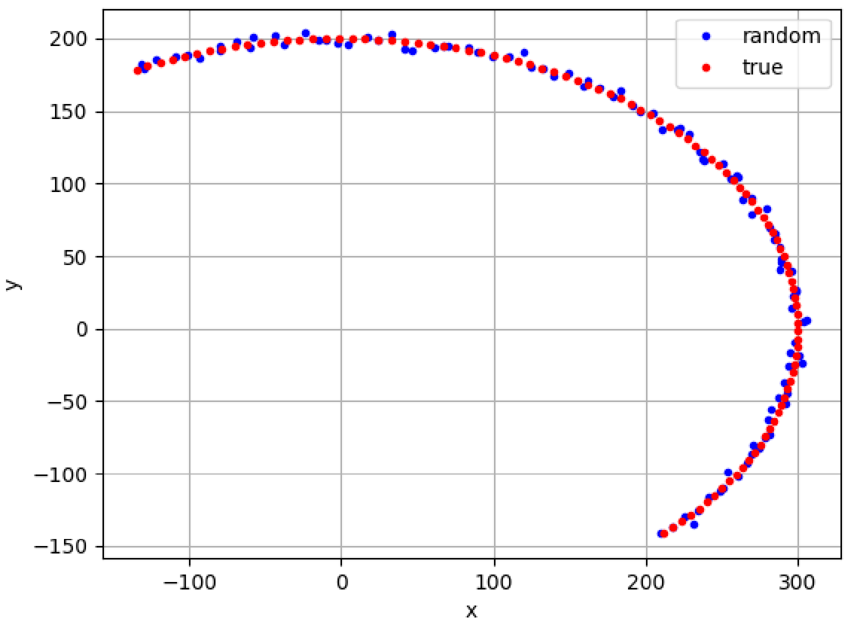

図 2: 誤差を加えた楕円

赤色の点が真値の点、青色の点が x 座標、y 座標にそれぞれ独立に、平均 $\mu = 0$、標準偏差 $\sigma = 3.0$ の正規分布に従う誤差を加えた点である。

4 課題 4

課題 3 の σ の値を 0.1 から σ_{max} まで 0.1 刻みで変化させたデータを作成し、そのデータに対して最小 2 乗法と最尤推定法によって楕円のパラメータを推定しなさい。このとき、同一の σ の値に対して異なる誤差を付加したデータを 1000 回生成してパラメータを推定し、RMS 誤差を計算して、横軸に σ の値、縦軸に RMS 誤差としたグラフを描画しなさい。ただし、σ_{max} の値は適切と思われる値を自分で設定しなさい。

4.1 解答

楕円の方程式のデータベクトル xi を $(x^2 2xy y^2 2x 2y 1)^\top$ と定義する。また、x 座標、y 座標にそれぞれ独立に、期待値 0、標準偏差 σ の誤差が加わるときの共分散行列を $V[\xi]$ とする。最小二乗法では式 (11) の最小固有値に対する固有ベクトルを求めることでパラメータを推定する。

$$M = \sum_{a=1}^{N} \xi_a \xi_a^\top \tag{11}$$

最尤推定法では目的関数 J をパラメータベクトル u で微分して得られた式 (12) で、u の初期値を与えて行列 M, N を計算することで固有値問題を解き、u を更新する反復解法によって解を計算する。なお、$\boldsymbol{u}$ の変化量が 10^{-6} になるまで計算した。

$$\begin{aligned}\frac{\sigma f}{\sigma \boldsymbol{u}} &= 2(\sum_{a=1}^{N} \frac{\xi_a \xi_a^\top}{(\boldsymbol{u}, V[\xi_a]\boldsymbol{u})} - \sum_{a=1}^{N} \frac{(\xi_a, \boldsymbol{u})^2 V[\xi_a]}{(\boldsymbol{u}, V[\xi_a]\boldsymbol{u})^2})\boldsymbol{u} \\ &= 2(\boldsymbol{M} - \boldsymbol{L})\boldsymbol{u} = 0\end{aligned} \tag{12}$$

RMS 誤差は式 (13) で求められる。ここで、$\bar{\boldsymbol{u}}$ は解の真値、$\boldsymbol{u}^{(i)}$ は i 回目の試行で得た解の推定値を表す。

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{a=1}^{N} ||(I - \bar{\boldsymbol{u}}\bar{\boldsymbol{u}}^\top)\boldsymbol{u}^{(i)}||^2} \tag{13}$$

$\sigma_{max} = 3.0$ として、最小 2 乗法と最尤推定法によって楕円のパラメータを推定した結果を図 3 に示す。

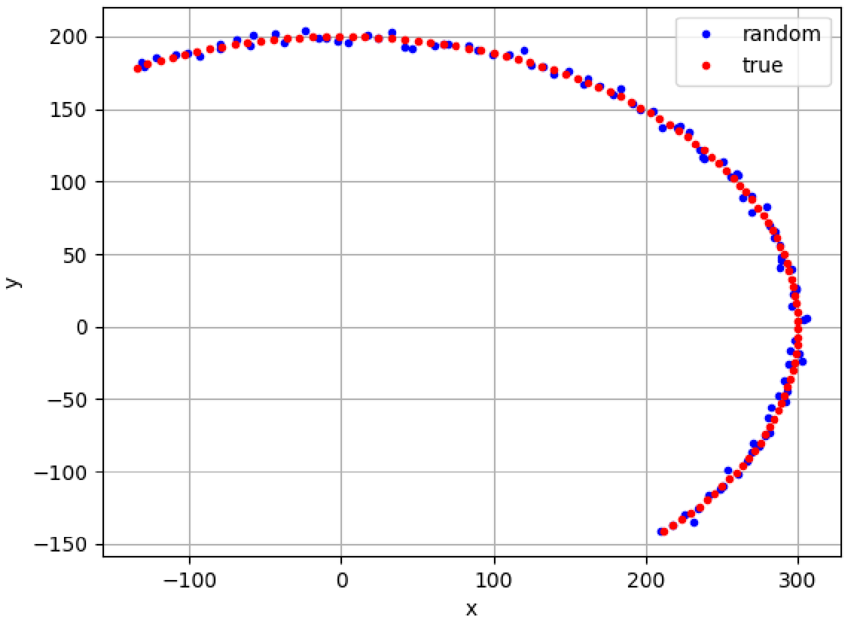

図 3: 誤差を加えた楕円