

数值解析・最適化工学特論 課題 1

提出日：2024/07/09

M223303

井口実紅

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 をもとめ次の関数を導出しなさい。

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

\bar{x}_a : データの真値、 Δx_a : 真値との誤差、 x_a : データとすると \bar{x}_a は

$$\bar{x}_a = x_a - \Delta x_a \quad (1)$$

と書ける。

$J = \sum_{a=1}^N (x_a - \bar{x}_a, V[x_a]^{-1} (x_a - \bar{x}_a))$ に式(1)を代入すると、

$$\begin{aligned} J &= \sum_{a=1}^N \left(x_a - (x_a - \Delta x_a), V[x_a]^{-1} (x_a - (x_a - \Delta x_a)) \right) \\ &= \sum_{a=1}^N (\Delta x_a, V[x_a]^{-1} \Delta x_a) \end{aligned} \quad (2)$$

u をパラメータとしたときの制約条件は以下のようにになる。

$$(\bar{x}_a, u) = (x_a - \Delta x_a, u) = 0, a = 1, \dots, N$$

制約条件と式(2)を用いてラグランジュの未定乗数法を計算する。

$$F(x_a, \lambda) = f(x_a) - \lambda x_a = \sum_{a=1}^N (\Delta x_a, V[x_a]^{-1} \Delta x_a) - \sum_{a=1}^N \lambda (x_a - \Delta x_a, u) \quad (3)$$

式(3)を Δx_a で微分。

$$\frac{\partial}{\partial \Delta x_a} F(x_a, \lambda) = 2V[x_a]^{-1} \Delta x_a - \lambda_a u = 0 \quad (4)$$

$$\Delta x_a = \frac{\lambda_a}{2} V[x_a] u \quad (5)$$

式(5)を制約条件に代入する。

$$\left(x_a - \frac{\lambda_a}{2} V[x_a] u, u \right) = 0$$

$$(x_a, u) - \frac{\lambda_a}{2} (u, V[x_a] u) = 0$$

$$\frac{\lambda_a}{2} (u, V[x_a] u) = (x_a, u)$$

$$\lambda_a = \frac{2(u, x_a)}{(u, V[x_a] u)} \quad (6)$$

式(2)に式(5)(6)を代入。

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

よって、

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

2. $x=300\cos\theta$, $y=200\sin\theta$ で表される楕円上の点列 (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。

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

N=2 として表示した際の図を図 1 に示す。

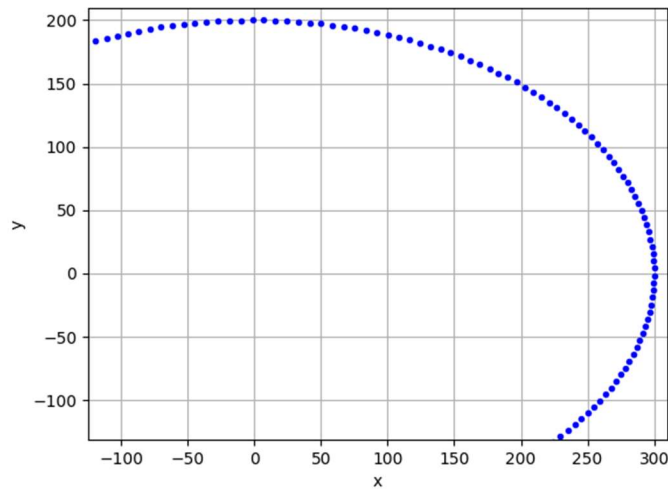


図 1 N=100 で生成した楕円

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。

真値と誤差を加えた点を重ねた際の結果を図2に示す。

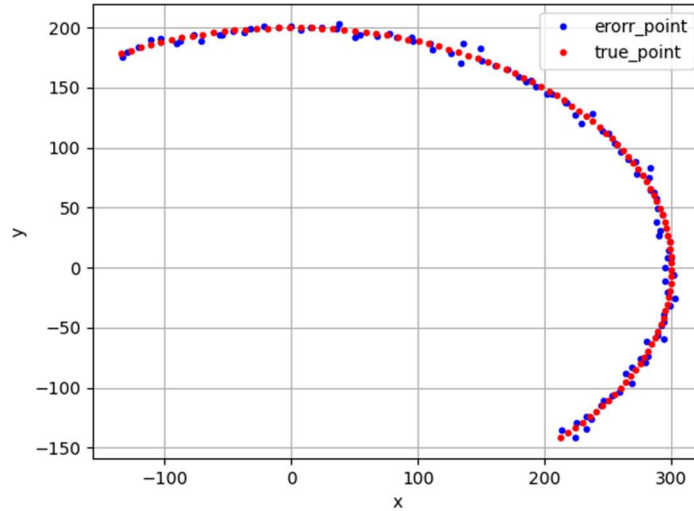


図2 2に誤差を加えた点を重ねた楕円

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。

$$\xi(x) = (x^2, 2xy, y^2, 2x, 2y, 1)^T \quad (7)$$

最小二乗法と最尤推定法でのパラメータ推定の方法を示す。

- ・最小二乗法

$M = \sum_{a=1}^N \xi_a \xi_a^T$ を計算し、計算した最小固有値に対する固有ベクトルから求めた。

- ・最尤推定法

$M = \sum_{a=1}^N \frac{\xi_a \xi_a^T}{(u, V[\xi_a]u)}, L = \sum_{a=1}^N \frac{(\theta_a \xi_a)^2 V[\xi_a]}{(u, V[\xi_a]u)^2}$ とし、 $(M-L)u=0$ となる u を反復法で計算する。 u の変化量が 10^{-6} 以下になるまで計算を行った。

- RMS 誤差

u : 真値、 $u^{(i)}$: 推定値としてのそれぞれの単位ベクトル

$u^{(i)}$ を用いて式(8)より、RMS 誤差を求められる。

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\Delta u^{(i)}\|^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|P_u u^{(i)}\|^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|I - \bar{u}\bar{u}^T u^{(i)}\|^2} \quad (8)$$

最小二乗法と最尤推定法を用いて楕円のパラメータを推定し、 $\sigma_{max} = 2.0$ としたときの結果を図 3 に示す。

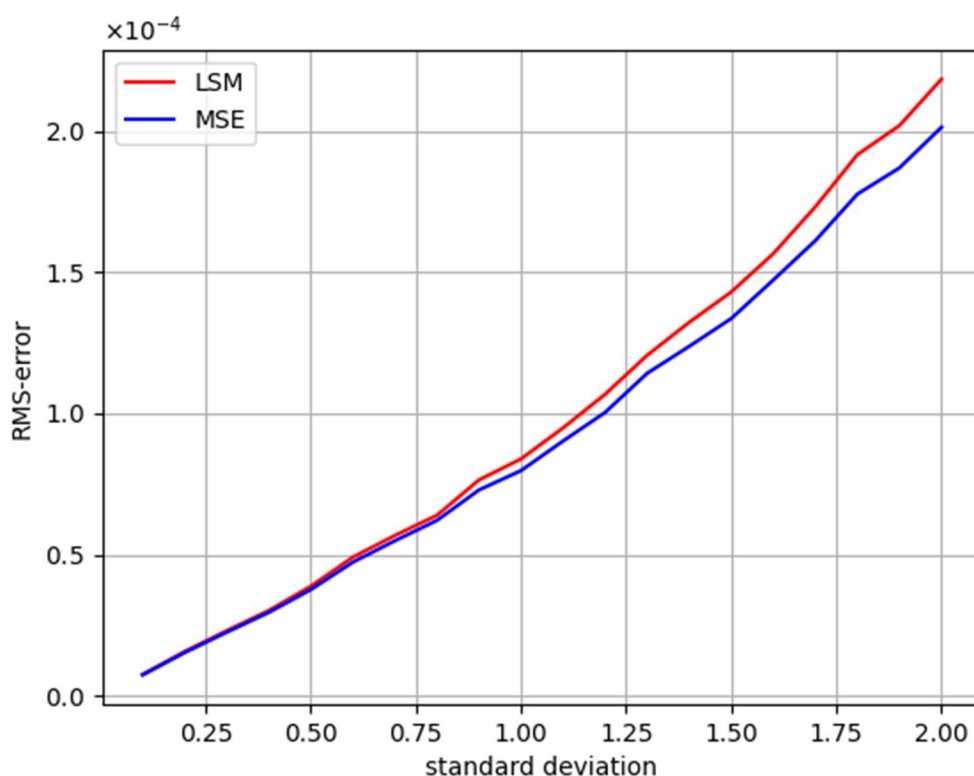


図 3 最小二乗法と最尤推定法の RMS 誤差

赤いラインが最小二乗法、青いラインが最尤推定法の RMS 誤差である。 σ が大きくなるにつれ最小二乗法の RMS 誤差が最尤推定法と比べ、大きくなっていることがわかる。このことから最尤推定法の方がより、誤差から受ける推定の影響が小さいといえる。

5. 課題4で作成したグラフ上に KCR 下界を描画しなさい。

KCR 下界

パラメータの真値を利用し、 $\bar{M} = \sum_{i=1}^N \|I - \bar{u}\bar{u}^T u^{(i)}\|^2 \frac{\overline{\xi_a \xi_a^T}}{(\bar{u}, V[\xi_a] \bar{u})}$ を計算する。

\bar{M} の固有値 $\lambda(1)_1 \geq \lambda(1)_2 \geq \dots > \lambda(1)_6 = 0$ を用いて式(9)より計算する。

$$D_{KCR} = \sqrt{\sum_{i=1}^5 \frac{1}{\lambda(1)_i}} \quad (9)$$

図4に、3の結果に KCR 下界を重ねたものを示す。

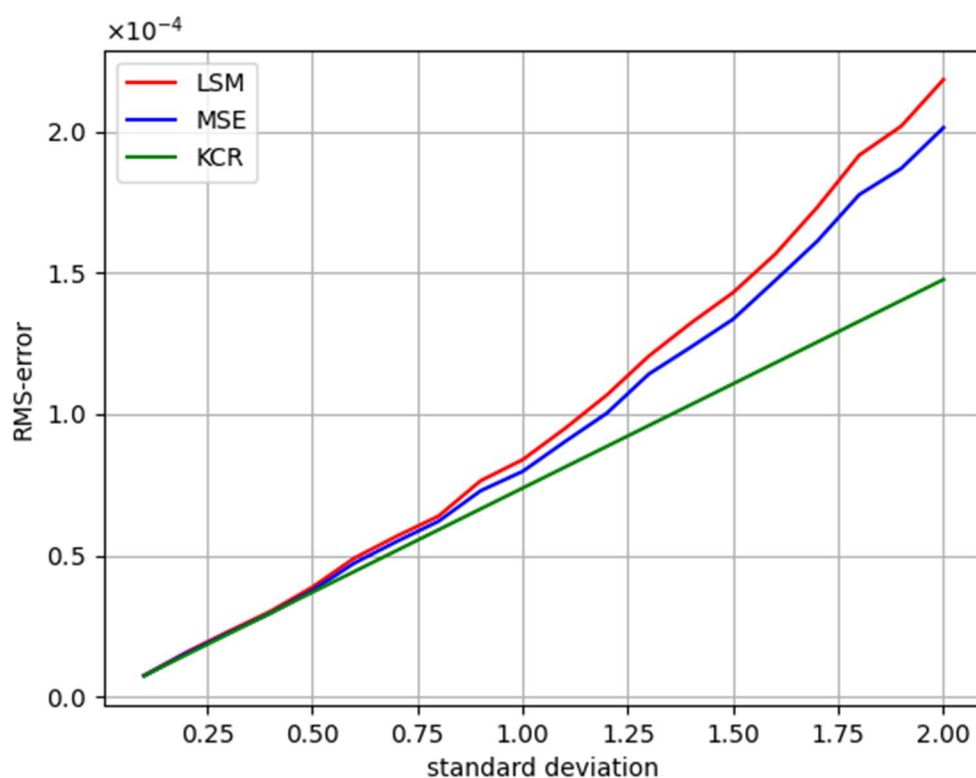


図4 3の結果に KCR 下界を加えた結果

緑のラインは KCR 下界を示すものである。図4から KCR 下界は最小二乗法及び、最尤推定法よりも、低い値を常に示している。これは、KCR 下界が精度限界を表す指標となるものだからである。RMS 誤差を KCR 下界に近づけるためにはできる限り σ の値を小さくする必要がある。