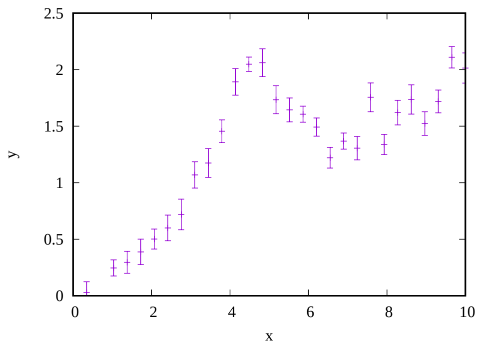
「計算機実験 II」実習 4 (2024-01-05)

本日 20:00 までに ITC-LMS の「実習 4 (2024/01/05) 出席・アンケート」に回答してください

- 自習課題
  1. 一次元の最適化 (ニュートン法、囲い込み法) の復習 (計算機実験 I 講義 1)
  2. 最急降下法のサンプルコード steepest_descent_2d.c, func_2d.h を確認。コンパイル・実行
  3. Rosenbrock 関数

     $$f(x, y) = (a-x)^2 + b(y-x^2)^2 \qquad (a=1, b=5)$$

     は、細長い曲がった谷の中に最小点 $(x, y) = (a, a^2)$ をもつ。Gnuplot 等の描画ソフトを用いて等高線を描き、全体の形を確認せよ。次に、Newton 法、最急降下法、勾配降下法により最小点を求めるプログラムを作成し、収束の様子 (xy 平面上での軌跡や真の最小点からの距離のステップ数依存性) を調べよ。初期位置は $(x, y) = (-1, -1)$ とする
- レポート課題[*1]
  1. 共役勾配法を用いて、Dirichlet 型の境界条件のもとでの二次元 Poisson 方程式 (あるいは Laplace 方程式) の解を求めるプログラムを作成せよ。実行時間のメッシュ数依存性を LU 分解を用いた場合と比較せよ (参考: 計算機実験 I 講義 3)。Poisson 方程式の行列生成の例は、poisson.h にある (参考: 密行列生成 poisson_dense.c、疎行列行列ベクトル積 poisson_sparse.c、LU 分解による求解 poisson_lu.c)
  2. 測定データ measurement3.dat を関数 $y = f(x) = ax + be^{-(x-c)^2}$ で最小二乗フィッティングしよう。パラメータ a, b, c を、Nelder-Mead 法を用いて残差を最小化することにより推定せよ

  3. d 次元 Rastrigin 関数

     $$f(x) = Ad + \sum_{i=1}^{d} [x_i^2 - A\cos(2\pi x_i)] \qquad (A=10, -5.12 \le x_i \le 5.12)$$

     は $x = 0$ に最小点をもつが、それ以外に多数の極小点が存在する。Gnuplot 等の描画ソフトを用いて $d = 2$ の場合の等高線を描き、極小の位置を確認せよ。次に、シミュレーテッドアニーリングにより、Rastrigin 関数の最小点を探索するプログラムを作成せよ。「温度」T は、アニーリング時間を τ とすると

     $$T(t) = T_0(1 - t/\tau)$$

[*1] レポート No.2 [2024/01/19 (金) 締切] では、実習 3 のレポート課題から 1 問、今回のレポート課題から 1 問、合計 2 問を選び解答

のように線形に減少させるとする。初期温度 T_0 は Rastrigin 関数の最大値よりも十分大きくとる。$d = 3$ の場合について、最小点 $x = 0$ を見出す確率の τ 依存性を調べよ

4. $n \times n$ マス目に $1 \sim n^2$ の自然数を並べた魔法陣をシミュレーテッドアニーリングにより生成しよう。正しい魔法陣では、行・列・対角線の和はすべて $M = n(n^2+1)/2$ とならなければならない。状態 (=数字の並べ方) C に対して、エネルギーを

$$E(C) = \sum_{\text{row}} (S_r - M)^2 + \sum_{\text{col}} (S_c - M)^2 + \sum_{\text{diag}} (S_d - M)^2$$

(ただし、S_r, S_c, S_d はそれぞれ、r 行目、c 列目、2 方向の対角線の数字の和) と定義すると、「基底状態」$E(C) = 0$ は正しい魔法陣 (の一つ) を与える。モンテカルロによる状態更新は、$1 \sim n^2$ の自然数の組 i, j をランダムに生成し、数字 i と j の位置を入れ替える操作を考えればよい。$n = 3, 4, 5, 6$ の場合について、正しい魔法陣を見出す確率のアニーリング時間依存性を調べよ。また、最急下降法の結果との比較も行え

5. 自分が興味を持っている問題を「最適化問題」として定式化し、最適化手法を用いて解を求めよ。物理の問題でなくてもよい。ただし最適化する変数の数 (次元) は 4 以上であること。使った最適化手法の詳細と、なぜその手法を使ったかについて説明せよ