

「計算機実験 I」 実習課題 (EX4)

- 講義のページ: <http://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja/lectures/2017S-computer1>

- サンプルプログラム:

<https://github.com/todo-group/computer-experiments/tree/master/exercise/ex4>

- 準備練習

1. ハウスホルダー法による対角化のサンプルプログラム (diag.c) をコンパイル・実行せよ

```
$ cc diag.c -o diag -llapack -lm
$ ./diag matrix1.dat
```

2. diag.c で得られた固有ベクトルが互いに正規直交していることを確認するコードを作成し実行せよ。(それぞれの固有ベクトルを行とする行列とその転置行列をかけて、単位行列になることを確認すればよい)

- 基本課題

1. 成分が $v_{ij} = \min(i, j)$ ($1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n$) の $n \times n$ 対称行列の固有値は、

$$\lambda_k = \frac{1}{2(1 - \cos(\pi(2k-1)/(2n+1)))} \quad (k = 1, \dots, n)$$

で与えられることが知られている。べき乗法を用いて、最大固有値を計算するプログラムを作成し、その結果を理論式と比較せよ。(上の式では添字は 1 から始まるが、C 言語では 0 から始まることに注意)

また、 n を変えた時、最大固有値の収束の速さがどのように変わるか調べよ。

2. ファイル measurement.dat に、ある実験で得られたデータが収められている。1 カラム目は x 、2 カラム目は y 、3 カラム目は y の誤差の値である。最小二乗法によりデータを多項式でフィッティングするプログラムを作成せよ。

多項式の最大次数を大きくしていくとフィッティング結果はどのように変化するか？何次の多項式を使うのが最も良いと考えられるか考察せよ。

- 応用課題

1. Lanczos 法により固有値を計算するプログラムを作成せよ。Ritz 値が、繰り返しの従ってどのように振る舞うか図示してみよ。収束の速さをべき乗法と比較せよ。

2. 特異値分解のサンプルプログラム (svd.c) をコンパイル・実行せよ。入力 matrix2.dat を用いて、講義 L4 の例が再現されるかどうか確認せよ

```
$ cc svd.c -o svd -llapack -lm
$ ./svd matrix2.dat
```

3. svd.c 中の LAPACK の特異値分解 dgesvd の呼び出し (54 行目) では、行列の次元 (m と n)、左特異ベクトル (u) と右特異ベクトル (vt) の順番が、もともとの dgesvd のドキュメント¹とは逆になっている。このプログラムが期待通り正しく SVD を行うなぜか？ (ヒント: 講義 L3 p.11 「C で作成した行列を Fortran に渡すと転置されてしまう」)

4. 画像ファイルを行列形式に変換²し、SVD で圧縮してみよ。どの程度まで圧縮可能か？

¹http://www.netlib.org/lapack/explore-html/d8/d2d/dgesvd_8f.html

²<https://github.com/todo-group/computer-experiments/tree/master/misc>に、JPEG や PNG などの形式の画像ファイルをグレイスケールに変換し、行列の形で書き出す Python スクリプトがある