

## 「計算機実験 I」 実習 4 (2023-07-12/19)

本日 13:00 までに ITC-LMS の「実習 4 (2023/07/12) 出席・アンケート」あるいは「実習 4 (2023/07/19) 出席・アンケート」に回答してください

### • 自習課題: 行列の対角化

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。<sup>\*1</sup>  
また、その中身を見て、LAPACK の `dsyev` 関数の使い方を理解せよ
2. 対称三重対角行列の全ての固有値・固有ベクトルは、LAPACK の `dsteve` 関数で求めることができる。`dsteve` の使い方を調べ、下のレポート課題 3 の行列の固有値を計算し、理論値と比較せよ
3. Lanczos 法 (講義資料 1-4, p.21) で生成されるベクトル  $v_1, v_2, \dots$  が (数学的には) 全て互いに直交することを数学的帰納法を用いて示せ
4. (補足資料あり) Box-Muller 法を用いて、標準正規分布に従う乱数を生成し、そのヒストグラムを作成してみよ
5. (最後の 5 分間) 授業評価アンケートに回答してください (URL は ITC-LMS のお知らせ「2023 年度 S セメスター 授業評価アンケート」にあります)

### • レポート課題

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` に、得られた固有ベクトルが互いに正規直交していることや得られた固有値の精度を確認するコードを追加し実行せよ。<sup>\*1</sup>  
また、適当なポテンシャルの形を仮定した一次元シュレディンガー方程式の固有エネルギーと固有関数の組を求めよ。同じ方程式を課題 2-3) の方法で解き、解を比較せよ
2. 1 次元ガウス分布に従う乱数は Box-Muller 法を使って生成できる。これを用いて、共分散行列  $\Sigma$  ( $n \times n$  の正定値対称行列) で与えられる  $n$  次元ガウス分布に従う乱数を生成する方法を考えよ。プログラムを作成して乱数を生成してその共分散を評価せよ。期待通りの分布が生成されているか確認せよ
3. 対角成分は  $(n, n)$  成分のみが 1 でそれ以外は全て 2、副対角成分  $(i, i \pm 1)$  は全て -1 の  $n \times n$  三重対角行列を考える。その固有値は、

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

で与えられる。<sup>\*2</sup>べき乗法を用いて、最大固有値と第 2 固有値を計算するプログラムを作成し、収束の様子を観察せよ。さらに、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、繰り返しに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。

4. ファイル `measurement1.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。さらに、同様の解析をファイル `measurement2.dat` に対して行ってみよ
5. `convert2matrix.py` は、JPEG や PNG などの形式の画像ファイルをグレースケールに変

<sup>\*1</sup> コンパイルには `cmatrix.h` と `dsyev.h` も必要である。また、実行には適当な行列入力ファイル (例: `matrix1.dat`) が必要である

<sup>\*2</sup> 式では添字は 1 から始まっているが、C 言語では 0 から始まることに注意

換し、行列の形で書き出す Python スクリプトである。<sup>\*3</sup> これを用いて画像ファイルを行列形式に変換した後、SVD で圧縮してみよ。残す特異値の数によりどの程度画像が劣化するか確かめよ

---

<sup>\*3</sup> 実行には、Pillow ライブラリが必要である。事前に、`pip3 install pillow` しておく必要がある