

「計算機実験 I」 実習 1 (2023-04-19)

本日 13:00 までに ITC-LMS の「実習 1 (2023/04/19) 出席・アンケート」に回答してください

- 必修課題: 計算機実習のための環境整備 <https://utphys-comp.github.io/>
 1. 「計算機実験のための環境整備」に従い、実習環境を整備する*¹
 2. プログラミング: エディタ、コンパイラ (C, C++, BLAS/LAPACK, MPI/OpenMP など)
 3. 計算結果のプロット: gnuplot (python/matplotlib, MATLAB でも可)
 4. 文書 (レポート、論文) の作成: L^AT_EX (TeX Live あるいは Overleaf)
 5. (任意) ネットワークの利用 (ECCS などの大学の計算機にリモートアクセス できる環境): ターミナル、SSH
 6. (任意) インタプリタ環境: MATLAB、Python
- 自習課題: C プログラミング
 1. ハンドブック 1.1.1~1.1.2 節に従い、UNIX のコマンド操作の基本を学ぶ
 2. エディタ (Emacs, vi, VSCode 他) を使ってハンドブック例 2.1.1 のファイルを作成する。C コンパイラでコンパイル・実行 (ハンドブック 2.1.1 節)
 3. ハンドブック 2.1.2~3.1.3 節、2.2.1~2.2.2 節 (制御文)、2.7.1~2.7.3 節 (関数) の例題
 4. フィボナッチ数列 ($a_{n+2} = a_{n+1} + a_n$ ($n \geq 0$), $a_0 = 0$, $a_1 = 1$) を計算するプログラムを作成し、 a_{20} , a_{30} , a_{40} を求めよ。また、MATLAB を使って答え合わせをせよ
 5. C 言語における倍精度実数 (double)、単精度実数 (float) の有効桁数、最大値、(正の) 最小値を確認するプログラムを作成せよ。また、IEEE 規格において、零や無限大がどのように表現されるか調べよ
- レポート課題*²*³
 1. $f(x) = \sin x$ について、 $x = 0.3\pi$ における $f'(x)$ の値を数値微分により計算するプログラムを作成せよ。数値微分の刻みを $h = 1, 1/2, 1/4, 1/8, \dots$ と減少させていった時、誤差がどのように振る舞うか図示せよ。 h の最小値は 10^{-16} 程度まで計算すること。一次近似 (前進差分) と二次近似 (中心差分) における誤差の振る舞いの違いを調べよ。同様に、 $x = 0.3\pi$ における $f''(x)$ の値を数値微分により計算し、その誤差を評価せよ。特に数値微分の刻み幅に対する誤差の振る舞いについての理論的な性質を論じ、それと実際の実験結果の整合性を検証せよ*⁴。一致しない場合はその理由を議論せよ
 2. $f(x) = \tanh x + 0.2x + 0.3 = 0$ の解を Newton 法により求めよ。反復にしたがって、値がどのように真値 ($x = -0.2544612950513368\dots$) に近づいていくか図示せよ。また、初期値による収束の違いを調べ、その理由について考察せよ
 3. 上と同様の計算を $f(x) = x^5 - 7x^4 + 16x^3 - 8x^2 - 16x + 16 = 0$ に対して行ってみよ。残差 $|x_{t+1} - x_t|$ と誤差 $f(x_t)$ はどのように異なると考えられるか? 単根と多重根の収束の速度の違いを調査・考察せよ
 4. C (あるいは C++) 言語を用いてフィボナッチ数列を $n = 95$ まで正しく計算するプログラムを作成せよ。($a_{95} = 31\,940\,434\,634\,990\,099\,905$ となるはずである)

*¹ VirtualBox インストーラと ceenv の入った USB スティックメモリを準備しているので、必要な人は申し出ること

*² 5/31 締切のレポート No.1 では、ここから 2 問と次回実習 2 のレポート課題から 1 問を選んで回答

*³ 言語の指定がない課題については、Python や Julia などでもプログラムを作成してもよい。ただし、その場合でも収束の様子などの解析はきちんと行うこと

*⁴ 誤差と h の関係を両対数プロットにすると見やすい

5. 非線形連立方程式

$$f(x, y) = x^2 + y^2 - 1 = 0$$

$$g(x, y) = x^2(2 + x) - y^2(2 - x) = 0$$

を多次元のニュートン法を用いて解け。ニュートン法の初期値 (x_0, y_0) によって収束先がどのように変わるか図示せよ。2次元平面上の各点を、その点を初期点として解いた際の収束先で色分けするとどのような図形になるか? (この課題に限り、公式を使って 2×2 ヤコビ行列の逆行列を計算してよい)

6. 代数方程式の解をすべてもとめる方法について調べよ。Durand-Kerner-Aberth 法を用いて、6 次方程式

$$z^6 - 12z^5 + 63z^4 - 190z^3 + 358z^2 - 400z + 200 = 0$$

の全ての解を求めるプログラムを作成せよ。また、解の収束の様子を観察し、解ごとの収束性を論じよ (解のうちいくつかは複素数となることに注意)