2008年度　応用数理工学特論　第1回レポート課題

- 2008年6月26日（木）までに提出してください。
- 提出は授業時か，あるいはメールで yamamoto@na.cse.nagoya-u.ac.jp までお願いします。
- レポートには氏名と学籍番号を記入してください。
- 問題1は全員解答してください。問題2と問題3は，どちらか一方を選んで解答してください

問題1

(1) n 次ベクトル $\mathbf{a} = [a_1, a_2, \ldots, a_n]^T$ が与えられたとき，

$$\begin{aligned} \sigma &= \| \mathbf{a} \|_2 \\ \mathbf{u} &= \mathbf{a} + \sigma \mathbf{e}_1 = (a_1 + \sigma, a_2, \ldots, a_n) \\ \alpha &= 2 / \| \mathbf{u} \|_2^2 \end{aligned}$$

（ただし $\| \mathbf{a} \|_2$ は $\mathbf{a}$ のノルム，$\mathbf{e}_1$ は第1要素だけが1で他が0の n 次ベクトル）として，$H = I - \alpha \mathbf{u}\mathbf{u}^T$（$I$ は単位行列）とおく。このとき，H は対称な直交行列であることを示せ。また，H はベクトル $\mathbf{a}$ を第1要素のみ非ゼロで他が0のベクトルに変換すること，すなわち，あるスカラー c に対して $H\mathbf{a} = c\,\mathbf{e}_1$ が成り立つことを示せ。

(2) $X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_p]$, $Y = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_p]$ を $n \times p$ 行列，A を $p \times p$ の正則行列とし，$Y = XA$ が成り立っているとする。X の列ベクトルの張る空間を $\mathrm{span}(X) = \mathrm{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_p\}$ とし，$\mathrm{span}(Y)$ も同様に定義するとき，$\mathrm{span}(X) = \mathrm{span}(Y)$ であることを示せ。
（ヒント： 任意の $\mathbf{y}_i$（$1 \le i \le p$）が $\{\mathbf{x}_j\}$ の線形結合として書け，逆に任意の $\mathbf{x}_i$（$1 \le i \le p$）が $\{\mathbf{y}_j\}$ の線形結合として書けることを示せばよい。）

問題2

任意の $n \times n$ 行列 A は，あるユニタリ行列 Q を用いて

$$Q^* A Q = R \tag{1}$$

（ただし上付き $*$ はエルミート共役を表す）のように上三角行列 R に相似変換でき，R の対角要素は A の固有値となる。このことを，次の手順で証明せよ。

(1) A の固有値の1つを α_1，対応する固有ベクトルを $\mathbf{u}_1$ とし，$n \times n$ 行列 $P_1 = [\mathbf{u}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_n]$ がユニタリ行列となるようにベクトル $\mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_n$ を定める（定め方は一意ではない）。このとき，P_1 を用いて A を相似変換すると，

$$P_1^* A P_1 = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \mathbf{b}^T \\ \mathbf{0} & B \end{bmatrix} \tag{2}$$

の形になることを示せ。ここで，B，$\mathbf{b}$ はそれぞれ適当な $(n-1) \times (n-1)$ 行列，$n-1$ 次元ベクトルである。

(2) 行列 B が，あるユニタリ行列 $\tilde{P}_2$ を用いて

$$\tilde{P}_2^* B \tilde{P}_2 = \tilde{R} \tag{3}$$

と上三角行列 $\tilde{R}$ に相似変換できると仮定する。このとき，

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{P}_2 \end{bmatrix} \tag{4}$$

とすると，A はユニタリ行列 $Q = P_1 P_2$ による相似変換で上三角行列に変換できることを示せ。

(3) 小問 (1)，(2) の結果を用い，数学的帰納法により，任意の $n \times n$ 行列 A は適当なユニタリ行列による相似変換で上三角行列に変換できることを示せ。

(4) 式 (1) が成り立つとき，R の対角要素は A の固有値となることを示せ。
（ヒント： 行列の固有値が相似変換により変わらないことと，上三角行列の固有値が対角要素に等しいことを示す。後者を示すには，上三角行列の行列式が対角成分の積であることを使う。）

問題 3

A を乱数を要素とする $n \times n$ 行列とし，その LU 分解の高速化を考える。次の 3 つの小問のうち，どれか一つを選んで実行せよ。解答の際には，プログラムと実行時間のデータを添付すること。また，使用した計算機環境（計算機の機種名，コンパイラ，BLAS ライブラリなど）を明記すること。なお，簡単のためピボット交換は行わなくてよい。

(1) ブロック化を行った LU 分解のプログラムを作成し，ブロックサイズを変えて性能の変化を調べよ。ただし，行列サイズを $n = 500$，1000，2000 と変え，それぞれについて実験を行うこと。また，行列乗算には最適化された BLAS を用いること。

(2) 基本的な LU 分解のプログラムを作成して OpenMP により共有メモリ向けに並列化し，プロセッサ数を変化させて性能の変化を調べよ。ただし，行列サイズを $n = 500$，1000，2000 と変え，それぞれについて実験を行うこと。

(3) 基本的な LU 分解のプログラムを作成して MPI により分散メモリ向けに並列化し，プロセッサ数を変化させて性能の変化を調べよ。ただし，行列サイズを $n = 1000$，2000，4000 と変え，それぞれについて実験を行うこと。データ分割は，自分で適当な分割方式を決めること。