電子計算機のプログラミングに関する研究 III

永　原　　茂
沢　井　喜　作

A Study of Programming in the Electronic Computer III

Sigeru NAGAHARA
Kisaku SAWAI

We obtained the programs which are used in the calculation of Linear Combined Atomic Orbita SelfConsistent Field Molecular Orbital Method (LCAO SCF MO's Method) for molecular and atomic problems

1. LCAO SCF MO 法の概要
2. 行列要素の個数と番地の計算
3. 行列要素の個数と作業番地の関係
4. プログラミング
   1) 初期値
   2) 作業番地
   3) プリント
   4) 四行四列の指示
   5) Gpqrs×b×b
   6) H＋G→L
   7) 行列の変換
   8) S^{-I}×L
   9) 行列の変換
   10) 精度
   11) Jacobi 法
   12) 大小判別
   13) 規格化

分子原子の問題に対して LCAO SCF MO 法がよく用いられるのでこれについての電子計算機にかけるプログラムをつくった。

I LCAO SCF MO法の概要

LCAO SCF MO 法では　分子軌道函数 ϕi を次のように展開する。

$$\phi i = \Sigma Aip\ Xp \quad \cdots\cdots(1)$$

ここでは Xp は Slate 型の原子軌道函数で，i は分子軌道の種類分けを，Aip は係数を表わす。

分子軌道函数が相互に直交性を保つ条件は次のように守る。

$$\int \bar{\phi} i \phi j d\tau = \Sigma \bar{A}ipSpaAjq = Sij \quad \cdots\cdots(2)$$

ここに Spq は重なりの積分で次のように定義する。

$$Spq = \bar{S}pq = \int \bar{X}pXqd\tau \quad \cdots\cdots(3)$$

電子　2個づつで満たされた n 個の軌道函数で構成されている　閉殻配置の全波動函数は次のような形をもっているとする。

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2n!}} \begin{vmatrix} (\phi_1\alpha)^{1} & (\phi_1\beta)^{1} & (\phi_2\alpha)^{1} & \cdots & (\phi_N\beta)^{1} \\ (\phi_1\alpha)^{2} & (\phi_1\beta)^{2} & (\phi_2\alpha)^{2} & \cdots & (\phi_N\beta)^{2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\phi_1\alpha)^{2N} & (\phi_1\beta)^{2N} & (\phi_2\alpha)^{2N} & \cdots & (\phi_N\beta)^{2N} \end{vmatrix} \quad (4)$$

ここで $(\phi_1\alpha)$ は $(\phi_1(1)\alpha(1))$ のことである。

このとき　エネルギーは次式で決定される。

$$E = \int \bar{\Phi} æ \Phi d\tau \quad \cdots\cdots(5)$$

ここで　$$æ = \sum_{\mu} H^{\mu} + \frac{1}{2}e^2 \sum_{\mu \neq \nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}} \quad \cdots\cdots(6)$$

ただし　$H^{\mu} = -\frac{1}{2}\triangle\mu - \Sigma Za/r a\mu$.

で μ 番目の電子が核からクロンカをうけて運動するとしたときのハミルトン演算子で，$ra\mu$ は核 a と電子 μ との距離である。

最もよい LCAO　MOϕi をうるためには変分法の原理で基底状態のエネルギーが極小値をとるようにすることであろう。この結果は次のようになる。

$$(H+G)A_i = LA_i = \varepsilon_i A_i \quad \cdots\cdots(7)$$

ここでベクトル Ai は i 番目の分子軌道函数の係数を表わす。又

$$Hpq = \bar{H}pq = \int \bar{X}pHXqd\tau \quad \cdots\cdots(8)$$

$$G_{pq}=\overline{G}_{pq}=\overline{\Sigma}A_{ir}G_{prqt}A_{it} \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(9)$$

ここで　$G_{prqt}=2J_{prqt}-J_{prtq}$

$$J_{prqt}=e^2\int\frac{\overline{X}_p{}^{\mu}\overline{X}_r{}^{\upsilon}X_q{}^{\mu}X_t{}^{\upsilon}}{r_{\mu\upsilon}}d\tau_{\mu\upsilon}$$

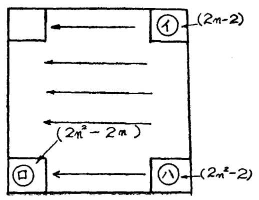
かくして(7)を解くことによって ε_i A_i を決定し固有値と波動函数を求めることができるが，Lの中にA^iがGを通してふくまれているから自己無撞着の手続が必要になる。つまり最初にA_iを仮定し，それよりGを求めてLを知る。それから(7)を解いてε_i A_iを求め，最初に仮定したA_iと比較してみる。この時一般的には一致しないのでここで得られたA_iを用いて再びLを求め(7)によりε_i A_iを計算する。そしてA_iが一致するまでくり返す。

2. 行列要素の個数と番地の計算

番地

0	2	4	6	8
10	12	14	16	18
20	22	24	26	28
30	……	……	……	38
40	……	……	……	48

〔正方行列〕



個数

1	2	3	4	5
6	7	8	9	10
11	12	13	14	15
16	17	18	19	20
21	22	23	24	25

$n=5$ として上記(イ)(ロ)(ハ)の番地計算

$2n-2=10-2=8$

$2n^2=2\times5\times5-2=50-2=48$

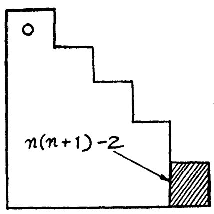
$2n^2-2n=50-10=40$

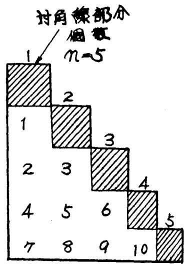
個数の計算

$n^2=5\times5=25$

番地

0				
2	4			
6	8	10		
12	14	16	18	
20	22	24	26	28





$n=5$ として最終番地の計算

$n(n+1)-2=5\times6-2=30-2=28$

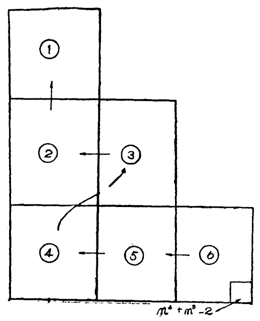
個数の計算$\frac{1}{2}(n+1)n=\frac{1}{2}\times b\times5=15$

非対称線部分

個数の計算

$\frac{1}{2}(n-1)n=10$

0 2 4 0 8 10 12 14 16		
18 20 22 24 26 28 30 32 34	36 38 40 42 44 46 48 50 52	
54 56 58 60 62 64 66 68 70	72 74 76 78 80 82 84 86 88	90 92 94 96 98 100 102 104 106



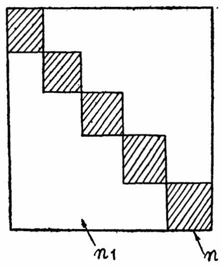
$n=3$ として最終番地の計算

$2n^2\times\frac{1}{2}n(n+1)-2=n^4+n^3-2$

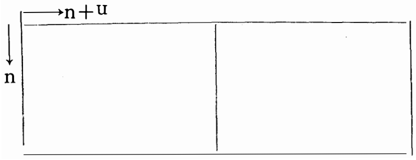
$=81+27-2=106$

これから　番地　n^4+n^3-2 を ℓ で表わす。

3. 行列要素の個数と作業番地の関係

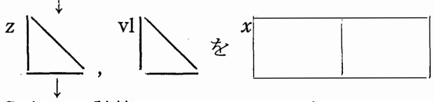


正方行列において
対角線部分の個数を n 個とし
非対角線部分の個数は $\frac{1}{2}(n-1)\times n\rightarrow nl$ とおく。
このとき
行列要素の個数は nl+nl+n となり
作業番地は nl+nl+nl+nl+n+n となる。
それで
三角行列における作業番地は対角線部分の
n+n と非対角線部分の nl+nl の和となる。



上記の行列のときは
作業番地は nl+nl+nl+nl+n+n+nl+nl+nl+nl+n+nとなる。
以上の作業番地より 2を引いた数を最終番地とする。

4. programming の手順

1) 初期値の計算　(n=　　　)
↓
2) 作業番地の確保（解説）(vl,
↓
3) プリントの subroutine　(p,
↓
4) プリントを四行四列にする subroutine　(q,
↓
5) 磁気テープ利用プログラム　(m,
↓
6) →Gpqrs×b×bの計算　(ml,
↓
7) H+G→Lの計算　(m2,
↓
8) 

に配列　(m3,
↓
9) $S^{-1}\times L$の計算　(m4,
↓
10) 正方行列を三角行列に変換　(m5,
↓
11) 精度　(m9,
↓
12) Jacobi 法による計算　(m6,
↓
13) 固有ベクトルの大小判別　(m7,
↓
14) 固有ベクトルの規格化　(m8,
←

1) 初期値の計算

(n　　　=)	行列の次数を決定する	
rm.　r4+130*)	n	
anm.　r7*)	n+1	
vm.　r4+130*)	n(n+1)	
clmn.　1*)	$\frac{1}{2}$n(n+1)	

umn. r4+131*)	$\frac{1}{2}$n(n+1)をn1とする。
(n2=n1+n1+n+n−2)	n2の内容をきめる。
(n3=n1+n1+n1+n1+n+n−2)	n3の内容をきめる。
rm. r4+130*)	
am. r7*)	n(n+1)
vm. r4+130*)	
clm. 48*)	
vm. r4+130*)	
clm. 48*)	n^2×n(n+1)
vm. r4+130*)	ℓ の計算
clm. 48*)	
amn. r7*)	
amn. r7*)	e.*)n^2×n(n+1)−2
tm. r4+110*)	
e *)	n^2×(n+1)n−2 を ℓ とする

2) 作業番地の確保

(rl;	
(d, . n+n!)	d を先頭とする作業番地の確保
(a, . nl+nl !)	a 〃
(b, . nl+nl+nl+nl+n+n !)	b 〃
(c, # 0.7071067811865) 1)	c=0.70710678……c+2=1 の内容を与える。
(vl, . nl+nl+n+n !)	vl を先頭とする作業番地の確保
(f, . nl+nl+nl+nl+n+n!)	f 〃
(h, . nl+nl+n+n !)	h 〃
(x, . nl+nl+nl+nl+n+n+nl+nl+nl+nl+n+n !)	x 〃
(z, , nl+nl+nl+nl+n+n !)	z 〃
(w, 2!)	
(w1, 2!)	
(w2, 2!)	
(w3, 2!)	
(w4, 2!)	
(w5, n!)	
(w6, 2!)	working として番地の確保
(W8, 1!)	
?(w9,256!)	
(t1, 2!)	
(g, 2!)	
(u, 2!)	
(v, 4!)	
(e *)	

解 説

① 最初に b+nl+nl+nl+nl+n+n ！ の内容として単位行列をとる。変化する。

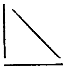
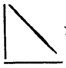
② f+ℓ+2! の内容は Gpqrs である。不変

③ G=Gpqrs×b×b の計算を行い，結果を vl+nl+nl+n+n! に入れる。

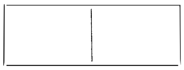
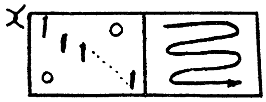
④ Hの内容は h+nl+nl+n+n ！ として不変である。

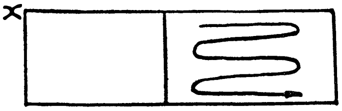
⑤ H+G→h 行列と vl 行列の和を v1+n1+n1+n+n ！ にいれる。

⑥ Spq のデータを Z+n1+n1+n1+n1+n+n ！ に入れておく。不変

⑦ 三角行列 Z  と vl  を x  の形に置きかえる。

このとき行列は x+n1+n1+n1+n1+n+n+n1+n1+n1+n1+n+n ！ である。

⑧ x  よりS^{-1}×v1 を計算して結果を  に配列する。

⑨  の右正方形行列を三角行列に配置し対角線部分を d+n+n! へ

非対角線部分を a+n1+n1 ！ とする。

⑩ 固有値と固有ベクトルを同時に求めるために Jacobi 法を用いる。

⑪ 固有ベクトルの大小を判別する。

⑫ 固有ベクトルの規格化を行なう。

3) プリントの subroutine

```
(p,
(09=r4—4)
(S;   0mn.      2)
      0mn.      2)
      0mn.      8)
      kn.    s+16)
      0mn.      4)
      jl.    s+16)
(08;  0mn.     56)
      0mn.     57)
      0mn.     48)
      0mn.     33)
      0mn.     53)
      0mn.     60)
      0mn.     44)
      0mn·     35)
      0mn.     45)
      +2048)+10)+100)
      0mn.     34)
      yn.      08)
      0mn.     39)
      bk.    2048)
      slmn.    12)
      km.    r+77)
      slm.     12)
      t.       09)
      an.      07)
      kn.    s+16)
r.         06)
t.       09+2)
r.         09)
an.      09+2)
kn.       s+5)
r.       09+2)
v.         05)
yl.          )
zk.       s—7)
r.         09)
d.       09+2)
jl.       s+9)
t.         09)
an.        07)
k.        s+5)
r.         09)
v.         05)
yl.          )
znk.      s−6)
r.         09)
tn.       s+1)
sln.         )
Rln.     r+29)
amn.    08+10)
tn.       s+1)
cmn.         )
tlm.       09)
xk.      s+12)
jmni.        )
```

	rm.	$\overline{08}$+11)
	jl.	s+3)
	rm.	$\overline{05}$)
	slm.	28)
	znk.	s−2)
	tlm.	$\overline{09}$+2)
	rm.	$\overline{08}$+11)
	slmn.	1)
	dlm.	$\overline{09}$+2)
	am.	r7)
	bk.	)
	alm.	$\overline{09}$)
	klm.	s+2)
	jl.	s+6)
	blk.	1)
	pmn.	r6)
	rm.	$\overline{08}$+11)
	dm.	$\overline{08}$+12)
	am.	r7)
	blenk.	2048)
	xk.	s+10)
	jmni.	)
	jl.	s+7)
	vm.	$\overline{08}$+11)
	am.	r+20)
	tmn.	s+2)
	ulmn	$\overline{0}$.9)
	jmn.	)
	rlm.	$\overline{09}$)
	znk.	s−6)
	bk.	)
	zmnk.	s+3)
	$\overline{0}$mn.	40)
	jl.	s+4)
	$\overline{0}$mn.	34)
	xk.	s+1)
	bnk.	)
	rm.	r6)
	qlnk.	)
	bk.	2)
	xi.	s+11)
	bni.	9)
	amn.	$\overline{08}$+12)
	kn.	s+2)
	zi.	s−2)
	am.	$\overline{08}$+12)
	jmni.	$\overline{08}$+9)
	vm.	$\overline{05}$)
	slm.	28)
	znk.	s−8)
	$\overline{0}$mn.	4)
	bi.	)
	jli.	1)

? ($\overline{07}$, +6710886)+6715389)
($\overline{06}$ˇ g)+2049)
($\overline{05}$, i)+2052)
[$\overline{05}$〜$\overline{09}$]
e・*)

4) プリントを四行四列にする subroutine

(q,	xi.	s+14)
	bnj.	)
	je.	s+6)
	rj.	)
	ji.	p+3)
	bk.	10)
	bi.	)
	zni.	s+5)
	bi.	3)
	$\overline{0}$mn.	2)
	$\overline{0}$mn.	2)
	$\overline{0}$mn.	8)
	xi.	s—6)
	zlj.	s−10)
	jl.	)
	e.	*)

5) 磁気テープ利用プログラム

	ema.	0)
(m,	bk.	0)
	bnj.	n−1)
	xnj.	w5+n−1)
	xk.	)
	blk.	n+n)
	zj.	s−3)
	bk.	z)
	xk.	p6)
	xk.	p8)
	bk.	0)
	xk.	p5)
	xk.	p10)
(p3,	bk.	0)

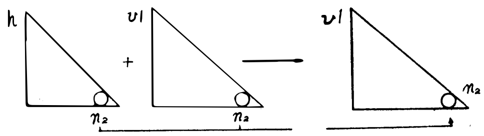
```
        xk.       p7)
(p4,    ji.       r2)
        bk.       p11)
        bk.       p11)
        r.        p11)
(p5,    bk.          )
(p6,    tk.          )
        zlk.      s+2)
        jl.       p9)
        xk.       p5)
(p7,    bk.          )
(p8,    tk.          )
        blk.      n+n)
        xk.       p7)
        jl.       p4)
(p9,    bmk.      p6)
        blk.   n+n+2)
        xk.       p6)
(p10,   bk.          )
        blnk.      2)
        xk.       p5)
        xk.       p10)
        bmk.      p8)
        blk.       2)
        xk.       p8)
        blnk.  z+n+n)
        zlmnk.    p3)
        xm.       p22)
        xm.       w8)
        bj.       ℓ+2)
(p21,   blnj.     256)
        xj.       p23)
        zmnj.     p24)
        ji.       r2)
        bk.       w9)
        bk.   w9+254)
        jmn.     t1+1)
        ji.       p160)
(p22,   bj.       w8)
        bnj.      254)
        olnj. w9+254)
        i.         0)
        jmn.      t1)
        bmj.      p22)
        blj.       2)
        xi.       p22)
(p23,   bj.          )
        jl.       p21)
(p24,   blj.  w9-2+256)
        xj.       p25)
        ji.       r2)
        bk.       w9)
(p25,   bk.          )
        bmj.      p22)
        xj.       p26)
        jmn.     t1+1)
        ji.       p160)
(p26,   bj.       w8)
        bnj.      254)
        olnj. w9+254)
        qln.       0)
        bj.       w8)
        jn.       p161)
        i.         0)
        jmn.      t1)
        jl.       m1)
?(p11,            2!)
   〔p1~p26〕
      e *)
```

6) **Gpqrs b×b の計算**

```
(m1,    bk.       254)
        xk.       p21)
        xm.       p23)
        bk.   n1+n-1)
        bj.    n-t-1)
        xj.       p13)
        bj.   n1+n1+n+n-2+v1)
        xj.       p14.)
(p8,    xk.       p7)
        jn.       p20)
(p1,    bj.        n)
        xj.       p2)
(p14,   bj.          )
        xlmj.        )
        xj.       p9)
        xj.       p10)
        xj.       p11)
        blnj.      2)
        xj.      p1+2)
(p2,    bj.        0)
        xnj.    W5-1)
        bmi.         )
```

```
        bli.          b)
        blnj.         1)
        xj.          p2)
(p13,   blnj.         0)
        zlmj.       p11)
        xi.          p4)
        xi.          p5)
        bi.     n+n-2)
(p12,   bk.n1+n1+n1+n1+n+n-2)
(p3,    bj.     n+n-2)
        xlm.          w)
(p5,    rj.           0)
(p6,    vk.           f)
        a.            w)
        t.            w)
        blnk.         2)
        zlnj.        p5)
(p4,    vi.           0)
(p9,    a.             )
(p10,   t.             )
        zlni.        p3)
        jl.          p2)
(p11,   r.             )
        ela.         p7)
        ji.           p)
        bk.          10)
(p7,    bk.            )
        znk.         p8)
        jmn.       t1+1)
        qln.          0)
        bj.          w8)
        jn.        p161)
        i.            0)
        jmn.         t1)
        jl.          m2)
(p20,   jl.            )
(p21,   bk.            )
        bnj.  n1+n1+n1+n1+n+n-2)
(p22,   blnk.       254)
        zmnk.       p25)
        xj.         p24)
        imn.       t1+1)
        ji.        p160)
(p23.                  )
        bj.          w8)
        bnj.        254)
        ilnj.   w9+254)
        bmj.        p23)
        blj.          2)
        xj.         p23)
        i.            0)
        jmn.         t1)
(p24,   bj.            )
        bnk.        256)
(p25,   blk.        256)
        blk.        256)
        rk.          w9)
        tj.   f+n1+n1+n1+n1+n+n-2)
        zlj.        p22)
        xk.         p21)
        jl.         p20)
```

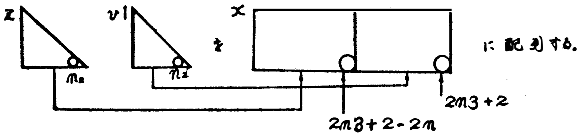
(7　**H＋G ⟶ L**の計算図




```
(m2,    bk.            )
        xk.         p16)
        xk.         p17)
        bk.           2)
        xk.         p18)
        bnj.         n2)
(p15,   rj.        h+n2)  ┐
        aj.       v1+n2)  │ 主演算
        tj.       v1+n2)  │
        ela.        p20)  ┘
(p16,   bk.            )
        znk.        s+5)
        0̄mn.        p21)
        rj.       v1+n2)
        bk.           3)
        xk.         p16)
        ji.         p+3)
        bk.           9)
(p17,   bk.            )
        zlnk.       p19)
        0̄mn.          8)
        bk.            )
        xk.         p16)
(p18,   bk.            )
```

```
        xk.         p17)
        blk.          2)
        xk'         p18)
        jl.         s+2)
(p19,   xk.         p17)
(p20,   zlj.        p15)
        jl.          m3)
?(p21,              2 !)
        im.        p21*)
        m2
        〔p15～p21〕
        e.     *)
```

)8




```
(m3.  bj.  x+n3+n3+4−n−n−n−n)
      xj.                 p9)
      bi.                 n3)     x 行列の右半分へもってくる準備
(p14, bj.             n+n−2)
      ri.                  2)
(p9,  tj.                   )
      blni.                2)
      zlnj.              s−3)
      bnj.                p9)     x 行列の左半分へもってくる準備
      blnj.         n+n+n+n)
      xj.                 p9)
      zmi.               p14)
      bi.                 n2)
(p8,  bk.           n3+n3+2)
      xk.                 p1)
      bk.                n+n)
      xk.                 p2)
(p1,  bj.                   )
      xj.                 p6)
      xj.                 p3)     x 行列の対角線要素の準備
      blnj.       n+n+n+n+2)
      xj.                 p1)
(p2,  bk.                   )
      blnk.                2)     回転数の set
      xk.                 p2)
(p11,  ri.                v1)
(p3,   bj.                  )
       tj.                 x)
```

```
        zlnk,          p4)
        jl.          p156)
 (p4,   blni.            2)
 (p12,  ri.             v1)
        blnj.            2)
 (p5,   tj.              x)
        xj.             p7)
 (p6,   bj.               )
        blnj.   n+n+n+n)      列要素の準備
        xj.             p6)
        jt.              x)
 (p7,   bj.               )
        zlnk.           p4)
        blni.            2)
        jl.             p1)
 (p156, ela.            m4)
        om.            p13)
        bk.       n3+n3+4)
        xk.            q+1)
        bk.   x+n3+n3+2)     印 刷
        xk.            q+3)
        ji.              q)
        jl.             m4)
?(p13,        2 !         )
        im.           p13*)
        m3
        〔p1～p14〕
        e.      *)
```

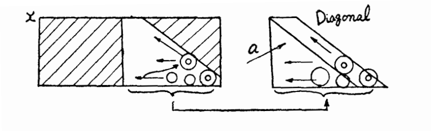
9) $S^{-1}\times L$の計算

```
 (m4,
        s; bk.  n3+n3+4-n-n-n-n)
        blk.            x)
        xk.         r+45)
        xk.          s+2)
        bi.  n+n+n+n-2)
        ri.              )
        ti.           04)
        zlni.        s-2
        xlm.        r4-4)
        bi.       n+n-2)
        ri.           04)
        yn.              )
        an.         r4-4)
        kn.          s+4)
        a.          r4-4)
        t.          r4-4)
        xi.         r+18)
        zlni.        s-7)
        bi.              )
        r.           p17)
        di.           04)
        t.          r4-4)
        bi.  n+n+n+n-2)
        r.          r4-4)
        vi.           04)
        ti.           04)
        zlni.        s-2)
        xlm.        r4-4)
        bi.       n+n-2)
        ri.           04)
        yn.              )
        an.         r4-4)
        kn.          s+4)
```

a. r4−4)
t. r4−4)
xi. r+18)
zlni. s−7)
bi.)
r. p17)
di. $\overline{0}$4)
t. r4−4)
bi. n+n+n+n−2)
r. r4−4)
vi. $\overline{0}$4)
ti. $\overline{0}$4)
zlni. s—3)
bi. n3+n3+4−n−n−n−n)
bli. x)
xi. s+4)
xi. s+5)
xi. s+6)
bmj. r+18)
plmj.)
bj. n+n+n+n−2)
rj.)
wnj. $\overline{0}$4)
tj.)
zj. s—3)
blni. x)
zlmi. s+3)
blni. n+n+n+n)
jl. r+28)
bj. n+n+n+n−2)
rj. $\overline{0}$4)
tj.)
zlnj. s−2)
blnk. x)
zlmk. r+51)
blnk. n+n+n+n)
jl. r+1)
bi. x)
bj. x+n+n+n+n−2)
(p8, bk. x+n+n+n+n−2)
xi. s+3)
xj. p11)
bj. n3+n3+4−n−n−n−n)
(p9, rj.)

10) 正方行列を三角行列に変換

(m5, bi. n3+n3+n+n+n+n+4)
kl. s+3)
blnj. n+n+n+n)
jl. s−3)
xj. s+1)
blk.)
sk. p10)
xk. p12)
blmnk. p11)
zlmk. p13)
bnj. n+n+n+n−2)
(p10, rj.
(p11, tlnj.)
(p12, tj.)
zlj. p10)
(p13, bmi. p9)
blni. x+n+n−2)
zlmi. p14)
bli. x+n+n)
bmj. p11)
blj. n+n+n+n)
jl. p8)
(p14, ela. m5)
$\overline{0}$m. p$\overline{18}$)
bk. x+n+n+n+n−2)
xk. p16)
(p15, bnj. n+n−2)
(p16, rj.)
ji. p)
bk. 11)
zlj. s−3)
bmk. p16)
blk. n+n+n+n)
xk. p16)
blnk. x+n3+n3+4+n+n+n+n−2)
zlmnk. p15)
jl. m5)
?(p17, g.)
2049)
(p18, 2 !)
im. p18*)
m4
($\overline{0}$4, . n+n+n+n!)
〔p1〜p18/$\overline{0}$4〕
e. *)




```
        xi,             p2)
        bi.            n+n)
        xi.             p3)
        bi.        n2−n−n)
(p2,    bj.               )
        blnj.  n+n+n+n+2)
        xj.             p2)
(p3,    bk.               )
```

行の準備

```
        blnk.            2)
        xk.             p3)
(p6,    rj.              x)
        tk.              d)
        zlnk.           p7)
        jl.             p8)
```

対角線部分へもっていく。

```
(p7,    blnj.            2)
        rj.              x)
        ti.              a)
        blni.            2)
        zlnk.           p7)
        jl.             p2)
```

非対角線部分へもっていく。

```
(p8,    ela.            m9)
        0m.             p9)
        bk.           n2+2)
        xk.            q+1)
        bk.           d+n2)
        xk.            q+3)
        ji.              q)
        jl.             m9)
```

印　刷

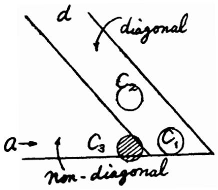
```
?(p9,         2 !         )
        im.            p9*)
        m5
        〔p2−p9〕
        e.     *)
```

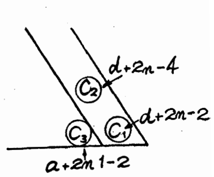
11）精　度

```
(m9,    qln.          2048)
        tm.             w6)
        bi.         n+n−2)
(p1,    ri.              d)
        km.             p2)
        amn.            w6)
        kln.            p2)
        am.             w6)
        tn.             w6)
(p2,    zlni.           p1)
        bi.          n1+n1)
(p3,    ri.              a)
        km.             p4)
        amn.            w6)
        kln.            p4)
        am.             w6)
        tn.             w6)
(p4,    zlni.           p3)
        rm.             w6)
        sn.        2048+36)
        tn.             w6)
        〔p1〜p4〕
```

12）Jacobi 法による計算

```
(m6,  xm.     w4)
      bk.      )
      xk.    p50)
      bk.    p33)
      xk.    p34)
      bk.      )
      xk.    p41)
      bk.  n+n−2)
      xk.     c1)
      xk.    p31)
      blnk.    2)
      xk.    p37)
      xk.     c2)
      bi.  n1+n−2)
      xi.    p40)
      xi.     c3)
      xi.     p5)
      xi.     p6)
      blni. n+n−4)
      xi.    p26)
(p5,  bi.      )
      xi.    p20)
(p6,  bj.      )
      xj.    p21)
(c3,  bk.      )
      rk.      a)
      km.    p36)    if Acc=0 p36へとぶ
      amn.    w6)
      kl.    s+3)
      xmn.    w4)
      jl.     c2)
      xlmk.    a)
      jl.    p36)
(c2,  bj.   )   (2n−4)
      rj.   d)
      tmn.p50)
(cl,  bj.   )   (2n−2)
      anj.  d)
      km.  p7)
      dk.   a)
      Sn.2048+1)
      t.    w)         C1−C2/2C3──→w
      yn.      )
      t.     w1)   |w|──→w1
```





$C_1-C_2/2C_3 \longrightarrow w$

```
      r.      w)
      v.      w)
      a.    c+2)
      y.       )     √(1+w²)
      t.     w2)
      r.     w1)
      d.     w2)
      t.     w1)     w1/w2→w1=cos2ψ
      a.    c+2)
      sn. 2048+1)
      y.       )
      t.      u)     u=cosψ
      v.      w)
      s.  2048+1)
      t.     w2)
      r.     w1)
      d.     w2)
      je.   s+3)
(p7,  r.      c)
      t.      u)
      t.      v)     v=sinψ
      bnk.  n−1)
      bmj.   c2)     j=2n−4
      bmi.   c1)     i=2n−2
(p1,  ri.     b)     b+2n−2
      t.      w)     ──→w
      v.      u)
      t.      g)     wcosψ←g
      rj.     b)     b+(2n−4)
      t.     w1)     ──→w1
      vn.     v)
      a.      g)
      ti.     b)  −w1sinψ+wcosψ→b+2n−2
      r.     w1)
      v.      u)
      t.      g)
      r.      w)
      v.      v)
      a.      g)
      tj.     b)  w1cosψ+wsinψ→b+2n−4
      bli.  n+n)
      bli.  n+n)
      zk.    p1)
      bk. n+n−4)
      xk.   p22)
(p20, bi.      )
```

```
(p40,  blni.        )
       zlmi.     p25)
       blmi.     p40)
       ri.         a)
       t.          w)
       v.          u)
       t.          g)
(p21,  bj.          )
       rj.         a)
       t.         w1)
       vn.         v)
       a.          g)
       ti.         a)
       r.         w1)
       v.          u)
       t.          g)
       r.          w)
       v.          v)
       a.          g)
       tj.         a)
(p22,  blni.        )
       xi.       p20)
       blmnj.    p22)
       xj.       p21)
       bmj.      p22)
       blnj.       2)
       xj.       p22)
       zlnk.     p20)
       jl.       p35)
(p25,  blmi.  p20+1)
(p41,  blni.        )
       bmj.      p21)
       xj.       p29)
(p26,  blnj,        )
       zlmj.     p30)
       ri.         a)
       t.          w)
       v.          u)
       t.          g)  wcosψ→g
(p29,  bj.          )
       rj.         a)
       t.         w1)  a+n1+n1−2→w1
       vn.         v)
       a.          g)
       ti.         a)  wcosψ−w1sinψ→a+2n1−2
       r.         w1)
       v.          u)
       t.          g)
       r.          w)
       v.          v)
       a.          g)
       tj.         a)  w1cosφ+wsinφ→a+2n1−2
       blnj.       2)
       blmnj.    p22)
       xj.       p29)
       bmj.      p22)
       blnj.       2)
       xj.       p22)
       bmj.      p29)
       Zlnk.     p26)
       jl.       p35)
(p30,  blmj.     p26)
       zlmj.     s+2)
       blnj.       2)
       ri.         a)
       t.          w)
       v.          u)
       t.          g)
       rj.         a)
       t.         w1)
       vn.         v)
       a.          g)
       ti.         a)
       r.         w1)
       v.          u)
       t.          g)
       r.          w)
       v.          v)
       a.          g)
       tj.         a)
       blni.       2)
       blnj.       2)
       zlnk.   p30+3)
(p35,  bmi.       c1)
       ri.         d)
       t.         w1)
       v.          v)
       v.          v)
       t.          g)  c1sin²φ
       bmj.       c2)
       vj.         d)
       t.         w2)
```

v. u)
v. u) $c_2\cos^2\varphi$
a. g) $c_1\sin^2\varphi+c^2\cos^2\varphi\to g$
t. g)
r. w4)
v. v)
v. u)
S. 2048+1)
a. g)
tj. d) $c_1\sin^2\varphi+{}_2c\cos^2\varphi+c_3\sin 2\varphi\to C_2'$
r. w1)
a. w2)
anj. d)
ti. d) $c_1'=c_2+c_1-c_2'$
(p36, bmk. c3)
xlmk. a)
blnk. 2)
xk. c3) c_3-2
bmj. p36)
blnj. 2)
xj. p6)
bmj. p26)
(p37, blnj.)
xj. p26)
bmj. p37)
blnj. 2)
xj. p37)
bmj. c2)
blnj. 2)
xj. c2)
zmj. p5)
(p34, jl. p33)
bmi. p40)
(p31, blni.)
xi. p40)
bj.)
bmk. p5)
blnk. 2)
xk. p5)
(p32, bmi. p31)
blni. 2)
xi. p31)
blni. 2)
xi. p37)
blnk. 2)
xk. p6)
blmnj. p31)
xj. p26)

xy. p31+2)
bmi. c1)
blni. 2)
xi. c1)
blni. 2)
xi. c2)
Zmi. p5)
bmk. w4)
zlmk. p50)
jl. m6)
(p33, bi. n1+n1−n−n+2)
xi. p40)
bi. 2)
xi. p41)
bi. p34+1)
xi. p34)
bk. n1+n1−2)
fj. n1+nl−n−n+2)
jl. p32)
〔p1～p41〕
(p51, $\overline{0}$m. p4)
$\overline{0}$m. p5)
bk. n+n)
xk. q+1)
bk. d+n+n−2)
xk. q+3)
ji. q)
$\overline{\text{o}}$mn. 2)
$\overline{0}$m. p4)
$\overline{0}$mn. 4)
$\overline{0}$m. p6)
bk. b−2)
xk. p2)
bk. n−1)
(p1, xk. p3)
bk.)
blk. n+n)
xk. p2)
xk. q+3)
bk. n+n)
xk. q+1)
ji. b)
0mn. 8)
(p3, bk.)
znk. p1)
jl. m7)
?(p4, !2)

```
(p5,          2 !)
      bni.    2*)
      ilni.   p5*)
      EIGEN. VALUE
?(p6,         2 !)
      im.     p6*)
      VECTOr=
      〔p1～p7〕
(p50, bk.        )
      Zlmnk.  m6)
      bi.     n+n)
      xi.     p10)
      bj.       2)
      xj.      p4)
(p4,  bj.        )
(p5,  ri.       b)
      t.        u)
      rj.       b)
      ti.       b)
```

```
      r.        u)
      tj.       b)
      blj.      2)
      bli.    n+n)
      blni.    n3)
      zmn.    S+2)
      jl.     S+3)
      bli.     n3)
      jl.      p5)
(p10, bi.        )
      blni. n+n+2)
      xi.     p10)
(p11, bmj.     p4)
      blj.  n+n+2)
      xmnj.    p4)
      blnj.    n3)
      zj.      p4)
      〔p1～p11〕
      e.   *)
```

13) 固有ベクトルの大小判別

```
(m7,  rm.          r6)
      bni.        n−1)      ┐
      tmi.     w5+n−1)      │
      qm.         n+n)      │ W5 にデータをならべる準備をする。
      am.            )      │
      zi.         s−3)      │
      bi.         n−1)      ┘
(p4,  xi.         s+1)
      bk.            )
      jl.          p3)
(p2,  xnk.          d)
      rk.            )      (d+n−2)の内容を Accへ
      xni.          d)
      ani.           )
      k.           p3)      Acc から (d+n−1) の内容をひく
      xni.          d)      Acc20 のとき p3へ no ならば次へ
      pi.            )
      xnk.          d)      (d+n−1) の内容を p resister へ
      rk.            )
      xni.          d)      (d+n−2) の内容を Acc へおく。
      ti.            )
      xnk.          d)      (d+n−1) の番地へ (d+n−2) の内容を入れる。
      uk.            )      (d+n−2) の番地へ (d+n−1) の内容をおく
      pmi.         w5)      (w5+n−1) を p rejister へ
      rmk.         w5)      (w5+n−2) の内容を Acc へ
      tmi.         w5)      Acc──→(W5+n−1) の番地へ
      umk.         w5)      (w5+n−2) へ (w5+n−1) の内容をもってくる。
(p3,  znk.         p2)      ifBR≒0(Bに−1)──→BKp2 へとぶ no のとき次へ
```

```
        zni.        p4)
        jl.       p159)
        〔p2～p4〕
        e.     *)
(p1,
(s;     0̅mm.         2)
        0̅mm.         2)
        kn.        s+3)
        0̅mn.         4)
        jl.        s+3)
        0̅mn.        34)
        ymn.          )
        jmni.         )
        blnk.        7)
        jl.        s+3)
        vm.         0̅6̅)
        slm.        28)
        zk.        s−2)
        jmni.         )
        xi.       r+35)
        jl.       s+19)
(0̅8,    0̅mn.        56)
        0̅mn.        57)
        0̅mn.        48)
        0̅mn.        42)
        0̅mn.        33)
        0̅mn.        53)
        0̅mn.        60)
        0̅mn.        44)
        0̅mn.        35)
```

```
        0̅mn.        45)
        bni.         9)
        amn.        0̅7̅)
        kn.        s+2)
        zi.        s−2)
        am.         0̅7̅)
        jmni.     08+9)
        vm          0̅6̅)
        slm.        28)
        znk.       s−8)
        0̅mn.         4)
        bi.           )
        jli.         1)
(0̅7,           +1000000)
(0̅6,    i.            )
〔0̅6～0̅8〕
(p159,  ela.        m8)
        bnj.   n+n−2)
        rj.  d+n+n−2)
        ji.          p)
        bk.          9)
        zlj.       s−3)
        bnj.       n−1)
        rmj.   w5+n−1)
        ji.         p1)
        bk.          5)
        zj.        s−3)
        jl.         m8)
〔p1〕
        e.     *)
```

14) 固有ベクトルの規格化

$\sum_{pq} \overline{A_{ip}} S_{pq} A_{iq} = \delta_{ij}$ 条件を満たす Aip を求める。

n=3 の場合について先づ次式の計算を行なう。

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} A_{11}S_{11}+A_{12}S_{21}+A_{13}S_{31}, & A_{11}S_{12}+A_{12}S_{22}+A_{13}S_{32}, & A_{11}S_{13}+A_{12}S_{23}+A_{13}S_{33} \\ A_{21}S_{11}+A_{22}S_{21}+A_{23}S_{31}, & A_{21}S_{12}+A_{22}S_{22}+A_{23}S_{32}, & A_{21}S_{13}+A_{22}S_{23}+A_{23}S_{33} \\ A_{31}S_{11}+A_{32}S_{21}+A_{33}S_{31}, & A_{31}S_{12}+A_{32}S_{22}+A_{33}S_{32}, & A_{31}S_{13}+A_{32}S_{23}+A_{33}S_{33} \end{pmatrix}$$

この結果へ更に

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{12} & A_{22} & A_{23} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{pmatrix}$$ をかけて上記条件を代入すると，

$$(A_{11}S_{11}+A_{12}S_{21}+A_{13}S_{31})A_{11}+(A_{11}S_{12}+A_{12}S_{22}+A_{13}S_{32})A_{12}+(A_{11}S_{13}+A_{12}S_{23}+A_{13}S_{33})A_{13}=1$$

$$(A_{21}S_{11}+A_{22}S_{21}+A_{23}S_{31})A_{21}+(A_{21}S_{12}+A_{22}S_{22}+A_{23}S_{32})A_{22}+(A_{21}S_{13}+A_{22}S_{23}+A_{23}S_{33})A_{23}=1$$

$(A_{31}S_{11}+A_{23}S_{31}+A_{33}S_{31})A_{31}+(A_{31}S_{12}+A_{32}S_{22}+A_{33}S_{32})A_{32}+(A_{31}S_{13}+A_{32}S_{23}+A_{33}S_{33})A_{33}=1$

整理をして

$A_{11}{}^{2}S_{11}+A_{12}{}^{2}S_{22}+A_{13}{}^{2}S_{33}+2A_{12}A_{11}S_{21}+2A_{13}A_{11}S_{31}+2A_{13}A_{12}S_{32}=1$

$A^{2}{}_{21}S_{11}+A^{2}{}_{22}S_{22}+A^{2}{}_{23}S_{33}+2A_{22}A_{21}S_{21}+2A_{23}A_{21}S_{31}+2A_{23}A_{22}S_{32}=1$

$A^{2}{}_{31}S_{11}+A^{2}{}_{32}S_{22}+A^{2}{}_{33}S_{33}+2A_{32}A_{31}S_{21}+2A_{33}A_{31}S_{31}+2A_{33}A_{32}S_{32}=1$

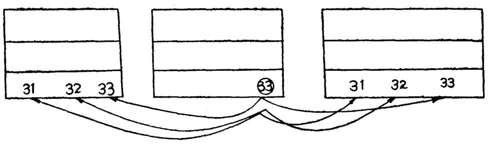
(m8, 12におけるプログラムでは

$A \to b$　　　$S \to Z$ に記号をおきかえて

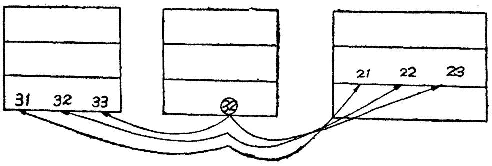
$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} & z_{13} \\ z_{21} & z_{22} & z_{23} \\ z_{31} & z_{32} & z_{33} \end{pmatrix}$を計算する。

故に　最初に

$b_{33}b_{33}z_{33}+b_{33}b_{32}z_{32}+b_{33}b_{31}z_{31}$



$+\quad b_{32}b_{33}z_{23}+b_{32}b_{32}z_{22}+b_{32}b_{31}z_{21}$



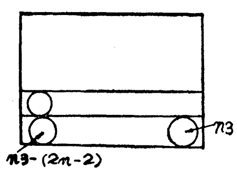
同様に

$+\quad b_{31}b_{33}z_{13}+b_{31}b_{32}z_{12}+b_{31}b_{31}z_{11}$

これらの和の平方根を求めてその逆数を元の b_{31} b_{32} b_{33} の各にかけることによって新らしく b_{31}' b_{32}' b_{33}' をうる。

全く同様にして b_{21}' b_{22}' b_{23}' 及び，b_{11}' b_{12}, b_{13}' を求める。

```
(m8,
(p1,   bi.   b+n3−n−n+2)
       xi.            p2)
(p2,   bi,              )
       xi.            p5)
       xi.            p )
       xi.            p6)
       xi.            p7)
       xi.            p8)
       blni.         n+n)
       xi.            p2)
(p3,   xlm.            w)
       bk.            n3)
       bi.         n+n−2)
(p4,   xlm.           w1)
       bj.         n+n−2)
(p4.   xlm.           w1)
```



```
        bj.     n+n-2)
(p5,    rj.          )   b×b×z の演算
        vk.         z)
        a.         w1)   累加して
        t.         w1)   st ore する。
        blnk.       2)
        zlnj.      p5)   b, z を加減して準備
(p6.    vi.          )
        a.          w)
        t.          w)
        zlni.      p4)   総和の平方根を求める。
        y.           )
        t.          w)
        r.        c+2)
        d.          w)   逆数を u へ working
        t.          w)
        bi.     n+n-2)
(p7,    ri.          )   元の b へ u をかけて b′ をもとめる。
        v.          w)
(p8,    ti.          )
        zlni.      p7)
(p9,    bmk.       p2)   b を 2n へらして
        blnk.       6)   上の方法をくりかえす
        zmk.       p2)
        elb.       m1)   四行四列の印刷の準備
        jl.        m1)
        e.     *)
```

本研究は東京大学物性研究所電子計算機室でFACOM-202 の電子計算機を使用した時の実際のプログラムである。
同計算機室長井上謙蔵氏，同室の高橋秀知氏清水公子氏中川雅子氏に大変に御世話になりこのプログラミングの大半はその指導によったものであることを記してその御厚情を深く感謝する次第である。
またこの機会を与えられた東大教授柿内賢信博士（物性研究所）には色々と御指導御厚情を頂きまして深く感謝を捧げる次第であります。