電子計算機のブログラミングに関する研究 IV

永 原 茂
沢 井 喜 作

A Study of Programming in the Electronic Computer IV

Sigeru NAGAHARA
Kisaku SAWAI

We obtained the programs which are used in the calculatuin of all eigen-values and all eigen-vectors of unsymmetrical matrix by Jacobi's method and are used in the electronic computer of FACOM 202. (the Institute of Solid State Physics, Tokyo University).

われわれは電子計算機のプログラミングに関する研究Ⅰに於いて対称性をもつエルミット型のマトリックスのすべての固有値，固有ベクトルを出す計算のプログラミングを作った。今度は非対称性をもつ場合について考案した。

方法：回転法によった。

対称でない一般の形式の行列にまで Jacobi の回転法を押しひろめた。すなわち任意の行列がユニタリー変換によって三角行列に変えられるという Schurの定理を根拠にするものである。すなわち任意の n 元正方行列をAとするとき，n 元ユニタリー行列Tを適当にえらんで

$$T^*AT=\begin{pmatrix} \lambda_1 & b_{12} & b_{13}\dots & b_{1n} \\ 0 & \lambda_2 & b_{23}\dots & b_{2n} \\ 0 & 0 & \lambda_3\dots & b_{3n} \\ 0 & 0 & & 0\ \lambda_n \end{pmatrix}$$

のようになしうるのである。

ここにT^*はTの共役転置行列である。

Jacobiの回転法のように二つずつの座標軸の間でユニタリー変換を左下非対角線要素a_{mk}を0にするように行ない，これをくりかえして左下要素を全部0にするように持っていこうとするのである。

$S_{(km)}$をk行m行とk列m列との交点以外では対角要素＝1非対角要素＝0であり，上記交点では

$$\begin{pmatrix} S_{kk} & S_{km} \\ S_{mk} & S_{mm} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & -\bar{c} \\ e & a \end{pmatrix}$$

となる行列であるとする。（aは実数cは複素数で$a^2+c\bar{c}=1$である）

$$B=S^*_{(km)}A\ S_{(km)}$$

を作って，Bにおいてm行k列要素b_{mk}が0になるようにa，cをえらぶ。m，kをすべての番号にいきわたらせ，左下要素を全部0にするようにするのである。具体的に変換後にはb_{ij}は以下のようになる。

$$\left.\begin{aligned} b_{ik}&=a\,a_{ik}+c\,a_{im} \\ b_{im}&=-c\,a_{ik}+a\,a_{im} \end{aligned}\right\}\quad (i\neq k,\ m)$$

$$\left.\begin{aligned} b_{kj}&=a\,a_{kj}+c\,a_{mj} \\ b_{mj}&=-c\,a_{kj}+a\,a_{mj} \end{aligned}\right\}\quad (j\neq k,\ m)$$

$m>k$

$$b_{kk}=a_2a_{kk}+|c|^2a_{mm}+a\,c\,a_{km}+a\,c\,a_{mk}$$

$$b_{km}=a^2a_{km}-|c|^2a_{mk}+a\bar{c}(a_{mm}-a_{kk})$$

$$b_{k}=a^2a_{mk}-c^2a_{km}+a\,c\,(a_{mm}-a_{kk})$$

$$b_{mm}=a^2a_{mm}+|c|^2a_{kk}-a\,c\,a_{km}-a\,\bar{c}\,a_{mk}$$

そこで

$\mu=c/a$として

$b_{mk}\rightarrow 0$にするようにすると，

$a_{km}\mu^2-(a_{mm}-a_{kk})\mu-a_{mk}=0$を満足する$\mu$をとればよい。

すなわち
$$\mu=\frac{1}{2}\{(a_{mm}-a_{kk})\pm\sqrt{(a_{mm}-a_{kk})^2+4a_{km}a_{mk}}\}$$

ゆえに
$$a=\left[1+|\mu|^2\right]^{-\frac{1}{2}}$$

$$c=\mu a\qquad [a^2+c\bar{c}=1\text{ 条件}]$$

とればよい。

cがrealの場合には，回転法は

$$b_{kk}=a^2a_{kk}+c^2a_{mm}+a\,c\,(a_{km}+a_{mk})$$

$$=a_{kk}+c^2\left[(a_{mm}-a_{kk})+\frac{1}{\mu}(a_{km}+a_{mk})\right]$$

$$b_{km}=a^2a_{km}-c^2a_{mk}+a\,c\,(a_{mm}-a_{kk})$$

$$= a_{km} + c^2 \left[-(a_{km} + a_{mk}) + \frac{1}{\mu}(a_{mm} - a_{kk}) \right]$$

$$b_{mk} = 0$$

$$b_{mm} = a^2 a_{mm} + c^2 a_{mk} - a\,c\,(a_{km} + a_{mk})$$

$$= a_{mm} - c^2 \left[(a_{mm} - a_{kk}) + \frac{1}{\mu}(a_{km} + a_{mk}) \right]$$

k.mをかえながらこれをつぎつぎにくりかえして目的に近づこうとするのである。

固有ベクトルは

$B_1 \cdot B_2 \cdot B_3 \ldots.$

によって得られる。

以下 flow diagraph をかく。

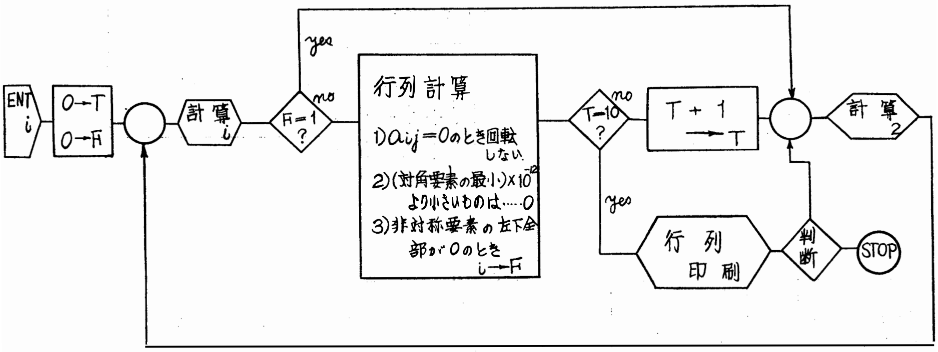

Fig. 2. Flow Diagraph 1.

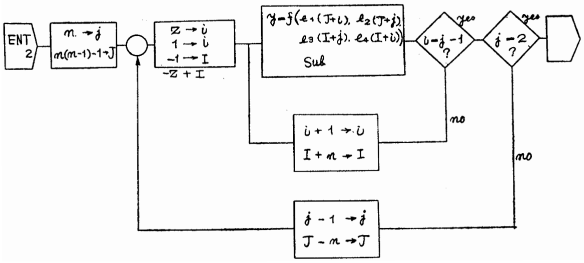

Fig. 2. Flow Diagraph 2.

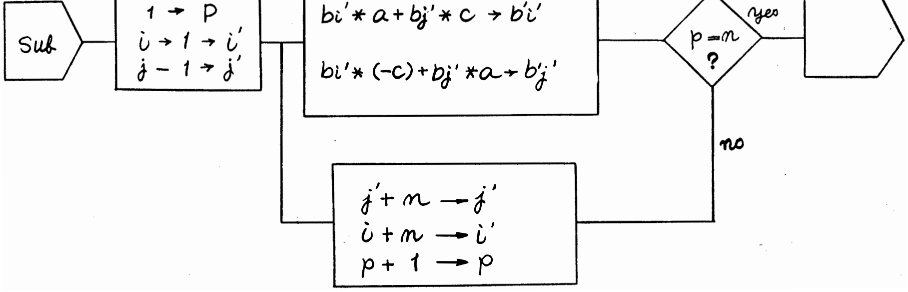

Fig. 3. Flow Diagraph 3.

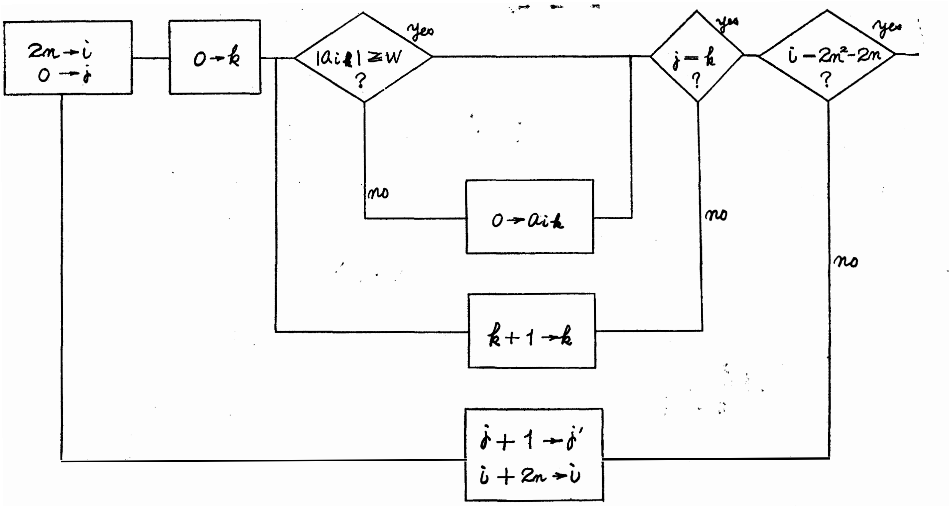

Fig. 4. Flow Diagraph 4.

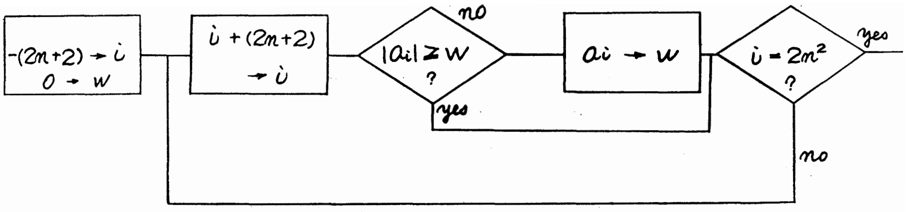

Fig. 5. Flow Diagraph 5.

次にそのプログラムをかく。

プログラム

```
(j,    je.          )
(p8,   bi.        10)
       bk.   v+n1-2)
       bj.       n+2)
(p4,   blnk.        n)
       xk.       p20)
       xk.       p21)
       xk.       p22)
       xk.       p23)
       xk.       p24)
       xk.       p25)
       bnj.          2)
       bk.     v-2-n)
       bi.           0)
(p5,   bi.           2)
       blk.          n)
(p20,  rj.           )
       xnk.         0)
       ani.          )
       t.            w)
       v.            w)
       t.           w1)
(p21,  ri.           )
       km.         p10)
       xnk.          0)
       vj.            )
       v.          p34)
       a.           w1)
       y.             )
       t.           w1)
       r.            w)
       k.          s+3)
       a.           w1)
       jl.         s+2)
       an.          w1)
       d.          p32)
```

	t.	u)
	yn.	)
	t.	w)
	v.	w)
	a.	p31)
	y.	)
	t.	w1)
	r.	p31)
	d.	w1)
	t.	a)
	v.	u)
	t.	c)
	v.	c)
	t.	c^2)
	xi.	s+4)
	xj.	s+4)
	xk.	s+4)
	jn.	p40)
	bi.	)
(p6,	blj.	)
	bk.	)
(p22,	ri.	)
	xnk.	0)
	aj.	)
	t.	w4)
	d.	u)
	a.	w)
	v.	c2)
	t.	w5)
	xnk.	0)
	ai.	)
	t.	e1)
(p23,	rj.	)
	an.	w5)
	t.	e2)
	r.	w)
	d.	u)
	an.	w4)
	v.	c2)
	xnk.	0)
	ai.	)
	t.	e3)
	xi.	s+4)
	xj.	s+4)
	xk.	s+4)

	jn.	p39)
	bi.	)
	bj.	)
	bk.	)
	r.	e1)
	xnk.	0)
	ti.	)
	r.	e2)
(p24,	tj.	)
	r.	e3)
	xnk.	0)
	ti.	)
(p25.	xlmi.	)
(p10,	xni.	1)
	blnj.	)
	zlmj.	s+3)
	jmn.	p6)
	jl.	p5)
	jnm.	p6)
	blnj.	2)
	zlmj.	s+2)
	zlj.	p4)
	bi.	n)
	r.	p34)
	t.	w)
(p2,	bni.	n+2)
	r.	w)
	yn.	0)
	t.	w1)
	ri.	v)
	yn.	)
	an.	w1)
	k.	s+3)
	ri.	v)
	t.	w)
	zlmni.	p2)
	r.	w)
	km.	s+4)
	sn.	4096+36)
	yn.	)
	t.	w)
	bi.	j)
	xi	p9)
	bi.	n+n+n−n1)
	bnj.	)

```
(p1,  bli.        n1)
      blj.         2)
      xj.        s+3)
      xnj.         0)
      bnk.          )
(p3,  blk.          )
      xni.         v)
      rk.           )
      yn.           )
      an.          w)
      kn.        s+6)
      xi.        s+3)
      bi.       p8+1)
      xi.         p9)
      bi.           )
      jl.        s+3)
      xni.         v)
      xlmk.         )
      xnj.         0)
      blnk.         )
      zlk.        p3)
      blni.     nl－n)
      zlmni.      p1)
      bmi.        p8)
      zlmi.      s+4)
      blni.        1)
      xi.         p8)
(p9,  jl.       p8+1)
      ela.         q)
  ? (el,       2!)
  (e2,         2!)
  (e3,         2!)
  (w,          2!)
  (w1,         2!)
  (w4,         2!)
  (w5,         2!)
(p34,          #4)
(p32,          #2)
(p31,          #1)
(a,            2!)
(c,            2!)
(c2,           2!)
(u,            2!)
  〔e1～e3/w～w5/p1～p5/p7～p38/c2/u〕
(p40, jl.           )
      bmj.      p6+2)
      jmn.      p6+1)
      bi.        n－2)
(p2,  blj.         2)
      blk.         2)
      rk.          b)
      v.           a)
      t.          w6)
      rj.          b)
      v.           c)
      a.          w6)
      t.          w7)
      rk.          b)
      vn.          c)
      t.          w6)
      rj.          b)
      v.           a)
      a.          w6)
      tj.          b)
      r.          w7)
      tk.          b)
      zlni.       p2)
      jl.        p40)
      〔p2/p40〕
(p39, jl.           )
      bk.        n－2)
      blni.      n+2)
      blnj.      n+2)
(p1,  bli.         n)
      blj.         n)
      ri.          v)
      y.           a)
      t.          w6)
      rj.          v)
      v.           c)
      a.          w6)
      t.          w7)
      ri.          v)
      vn.          c)
      t.          w6)
      rj.          v)
      v.           a)
      j.           v)
      r.          w7)
      ti.          v)
      zlnk.       p1)
      bmj.      p6+2)
```

	jmn.	p6+1)
	bi.	n−2)
(p2,	blj.	2)
	blk.	2)
	rk.	)
	v.	a)
	t.	w6)
	rj,	)
	v.	c)
	a.	w6)
	t.	w7)
	rk.	)
	vn.	c)
	t.	w6)
	rj.	)
	v.	a)
	a.	w6)
	tj.	)

r.	w7)
tk.	)
zlni.	p2)
jl.	p39)

?(w6, 2!) (w7, 2!)

〔w6/w7/p1～p2〕〔p39/a/c/〕e.o*)

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）にはいろいろ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。

（昭和40.10.30受付）