

九州大学 大型計算機センターニュース

No.
1

1971. 1. 20

福岡市大字箱崎
九州大学大型計算機センター
共同利用掛(TEL 092-64-1101)
内線 5337

◇ 共同利用掛からのお知らせ

1. 課題番号の有効期限と年度更新の手続について

(1) 現在ご使用中の課題番号はその有効期限は3月末日となつていますが、年度を越えてなおその課題に関してセンターを利用される場合は、課題登録の年度更新をすることになつておりますので、連絡所、地区協を通じて2月末日までにセンターに届くように提出してください。(詳細は利用の手引参照)

なお、有効期限(3月末日)が終りましたら直ちに計算機利用報告書をご提出ください。報告書を提出されていない場合は原則として新課題番号の承認を行なわないことになつておりますのでご留意ください。

(2) 科学研究費補助金および公私立学校、校費の経費により課題申請を行なつてある方については、事務処理上その計算依頼の受付を2月15日で〆切りますのでご了承ください。

2. 計算機利用報告書の提出について

昭和45年度中に課題番号の交付を受けた方は、利用の有無にかかわらず「計算機利用報告書」を昭和46年4月20日までに必ずご提出ください。なお「計算機利用報告書」は連絡所または地区協に備え付けの用紙をご使用ください。

3. 共同利用掛、操作係からのお願ひ

最近、コントロールカード・エラーが非常に多いので各自注意してください。特に郵送分デックについては、ターンアラウンドタイムを考慮して、センターでチェック修正しておりましたが、このコントロールカードについては、種々問題が起り得るので、すべて、ユーザーの責任によつてデックの構成をお願いしたいと思います。よつて、センターでは、チェックシステムは取れませんので、各自コントロールカード及びデックの構成については、充分ご注意くださいよう通知します。

◇ ライブラリプログラムの紹介

・ライブラリプログラムの利用方法について

広報およびセンターニュース等で紹介している、新しく登録されたライブラリプログラムは、一定期間(原則として6ヶ月)を試用期間としてテスト用ファイルに登録されています(現在、登録番号№251~254、№257~264)ので、プログラムを呼び出す場合はコントロールカード `▯LIEDRUN` のかわりに `▯RBLINKGO FLNAME=P.LIB.TEST` を入れて使用してください。なお、詳しくは「広報Vol.3、№4 ライブラリプログラムのサービス方法について」を参照ください。

№.261 F2/QU/F/SQRS

登録年月日 昭和45年11月1日

№.262 F2/QU/F/SQRD

"

EIGEN PROBLEM OF A REAL SYMMETRIC MATRIX WITH QR METHOD

実対称行列の固有値、固有ベクトル QR法

作成	作成者 塩川浩三	作成年月日 昭和45年6月6日
形式	a. コンプリートプログラム	<input checked="" type="radio"/> サブルーチン c. 関数 d. 手続き e. 関数手続き
使用言語	<input checked="" type="radio"/> FORTRAN d. PL/I	b. ALGOL c. FASP e. その他()
使用機種	FACOM 230-60	
使用メモリ数	a. コア()K語 c. その他	b. ディスクパック()K語
使用機器構成	a. カードリーダー b. ラインプリンタ c. カードパンチ d. 紙テープリーダー e. 紙テープパンチ f. 磁気テープ()ユニット g. ディスクパック h. その他()	
利用者の義務	<input checked="" type="radio"/> プログラム名と作成者名を明記する b. 明記する必要はない	
公表	<input checked="" type="radio"/> ソースプログラムを公表する b. ソースプログラムの公表は一定期間保留する(年 月 日まで)	

§ 1. 概要

1.1 目的

実対称行列Aの固有値および固有ベクトルを求める。

1.2 計算方法

実対称行列をHouseholder法によりTridiagonal形に変形し、更にQR法を用いて

対角化する。

① 主対角項を含む左下の部分 ((1)では $a_{11}, a_{21}, a_{22}, a_{31}, \dots, a_{n1}, \dots, a_{nn}$)
だけが意味をもつ。

② Householder's tridiagonalization (文献 1, 2)

$$A_n = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \dots \dots (1)$$

$$\sigma_n^2 = a_{n1}^2 + a_{n2}^2 + \dots + a_{nn-1}^2$$

$$U_n^T = [a_{n1}, a_{n2}, \dots, a_{n, n-2}, a_{n, n-1} \pm \sigma_n, 0]$$

$$P_n = I - 2UU^T / (U^TU)$$

とすると、

$$P_n A_n P_n = \begin{pmatrix} \boxed{A_{n-1}} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \underbrace{0, \dots, 0}_{n-2}, C_{n-1} & b_n \end{pmatrix}$$

これをくり返してゆくと、 A_n は tridiagonal matrix することができる。また、主対角項を B に、副対角項を C に格納すれば、すでに交換された部分は、固有ベクトルを作るための交換行列を格納することができる。

$$P_i^{(S)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & G_i - S_i & \dots \dots i \\ & & & S_i C_i & \dots \dots i+1 \\ & & & & 1 \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} b_1 C_1 & & & & \\ C_1 b_2 C_2 & & & & \\ & C_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & b_{n-1} C_{n-1} & \\ & & & C_{n-1} b_n & \end{pmatrix}$$

$$Q_S = P_1^{(S)} P_2^{(S)} \dots P_{n-1}^{(S)}$$

とすると

$$Q_s = (A_s - k_s I) = L_s A_{s+1} = L_s Q_s^T, A_1 = A \quad \dots (2)$$

(2)の漸化式をくり返すと、 A_s は対角化される。 k_s は収束を速くするための shift factor である。

[参考文献]

(1) F. L. Bauer and A. S. Householder

On Certain Method for Expanding The Characteristic Polynomial.
Numer. Math. 1 29 (1959)

(2) R. S. Martin, C. Reinsch and J. H. Wilkinson

Householder's Tridiagonalization of a Symmetric Matrix.
Numer. Math. 11 181 (1968)

(3) J. G. F. Francis

The QR Transformation. Part I and Part II
Computer J. 4 265, 332 (1961, 1962)

(4) H. Bowdler, R. S. Martin, C. Reinsch and J. H. Wilkinson

The QR and QL Algorithms for Symmetric Matrices.
Numer. Math. 11 293 (1968)

※ (2)(4)はHouseholder Series Linear Algebraの一部で、このプログラムは(2)(4)を少し変えたものです。

§ 2. 使用法

2.1 呼び出し方法

単精度 CALL SQRS(ND, N, A, B, C, O, OM, ILL)

倍精度 CALL SQRD(ND, N, A, B, C, O, OM, ILL)

2.2 パラメータ

ND 整数型変数名または整数。配列A, B, Cの大きさを示す。

N 整数型変数名または整数。実際に演算の対象となる配列の大きさを示す。

($N \leq ND$)

A 実数型配列名。A(ND, M)なる2次元配列。($M \geq N$)

Input Matrixを与える。

実行後には、I番目の固有値B(I)に対する固有ベクトルが

$A(I, J), J = 1, 2, \dots, N$

に入る。

- B 実数型配列名。大きさはNDなる1次元配列。
実行後、固有値が小さい順序に入る。
$$B(I) \leq B(J) \quad (\text{for } I < J)$$
- C 実数型配列名。大きさはNDなる1次元配列。
演算の際の作業領域として使う。
- O 実数型変数名または実定数。相対的0を示す。
- OM 実数型変数名または実定数。1+OM \times 1である最小の正の実数を示す。
- ILL 整数型変数名。QR法での最大反復回数を与えておく。
実行後は、エラー処理のパラメータとなる。

(注1) A, B, Cは、単精度サブルーチンSQRSでは単精度実数型、倍精度サブルーチンSQRDでは倍精度実数型とする。

(注2) O, OMはSQRS, SQRDいずれでも単精度実数型とする。

(注3) O, OMに正でない値が与えられた場合は、サブルーチン内では

$$\text{SQRSでは } O = 10^{-10}, \quad OM = 10^{-6}$$

$$\text{SQRDでは } O = 10^{-20}, \quad OM = 10^{-16}$$

を与えて実行する。

(注4) ILLに1より小さい値が与えられた場合は、サブルーチン内では最大反復回数として30を与えて実行する。

(注5) OPTION文でDOUBLEと指定する場合は、O, OMはREAL宣言をしておかないとエラーを起すおそれがある。

(注6) Input Matrixは

$$a_{11}$$

$$a_{21} \quad a_{22}$$

⋮

$$a_{n1} \quad a_{n2} \quad \cdots \quad a_{nn}$$

の部分だけ与えておいてもよい。

2.3 制限

根の大きさが著しく異なると、小さい根は正しい値が得られない。

2.5 エラー処理

- ・零割算は行なわないようチェックしているが、オーバーフローに対するチェックは行なっていない。

- QR法で収束しない時は、ILLに1000以上の数を与えて戻る。

2.6 使用ルーチン

このサブルーチンでは、以下の基本外部関数および組み込み関数を用いている。

SQRS SQRT , AMAX1 , ABS

SQRD DSQRT , DAMAX1 , DABS

2.7 備 考

ベクトルの直交性に関するチェックは充分でない。

§ 3 備 考

実対称行列の固有値および固有ベクトルをヤコビ法を用いて求めるサブルーチン

JACOBS (登録番号111)とSQRSとの簡単な比較チェックを行なった結果を一例として以下に述べる。

チェックした行列は、

$$A = \begin{pmatrix} n & n-1 & n-2 & \cdots & 2 & 1 \\ n-1 & n-1 & n-2 & & & \vdots \\ n-2 & n-2 & n-2 & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 2 & \cdots & \cdots & \cdots & 2 & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & \cdots & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

で、この行列の固有値は、

$$\lambda_i = \frac{1}{2 \left\{ 1 - \cos \frac{2i-1}{2n+1} \pi \right\}} \quad (i = 1, \dots, n)$$

λ_i に対する固有ベクトルは

$$V_j^{(i)} = \cos \left\{ \frac{(2i-1)(2j-1)}{2n+1} \cdot \frac{\pi}{2} \right\} \quad (j = 1, \dots, n)$$

である。

(ここでは $n = 3 \sim 10, 20, 30, 40$ の場合の比較を行なった。JACOBSの収束判定値 $EPS = 10^{-6}$)

n	S Q R S		JACOBS	
	精度桁	時間 (MS)	精度桁	時間 (MS)
3	6 ~ 7	8	6 ~ 8	13
4	5 ~ 7	14	6 ~ 8	28
5	6 ~ 7	22	7 ~ 8	54
6	6 ~ 8	33	6 ~ 8	79
7	7 ~ 8	46	6 ~ 8	129
8	6 ~ 8	62	7 ~ 8	191
9	6 ~ 7	89	6 ~ 8	265
10	5 ~ 7	112	6 ~ 8	342
20	5 ~ 8	658	5 ~ 8	2546
30	5 ~ 7	2001	6 ~ 8	8911
40	5 ~ 8	4290	5 ~ 8	19241

№ 263 F1/QU/F/MPTCS

登録年月日 昭和45年11月1日

№ 264 F1/QU/F/MXPTS

”

PRINT OF MATRIX(IN COMPLE FORM)

PRINT OF MATRIX(IN REAL FORM)

行列の印刷

作成	作成者 国 宗 真	作成年月日 昭和45年9月10日
形式	a. コンプリートプログラム	ⓑ サブルーチン c. 関数 d. 手続き e. 関数手続き
使用言語	ⓐ FORTRAN d. PL/I	b. ALGOL c. FASP e. その他()
使用機種	FACOM 230-60	
使用メモリ数	a. コア()K語 c. その他()	b. ディスクバック()K語
使用機器構成	a. カードリーダー d. 紙テープリーダー f. 磁気テープ()ユニット g. ディスクバック h. その他()	ⓑ ラインプリンタ c. カードパンチ e. 紙テープパンチ
利用者の義務	a. プログラム名と作成者名を明記する	ⓑ 明記する必要はない
公表	ⓐ ソースプログラムを公表する b. ソースプログラムの公表は一定期間保留する(年 月 日まで)	

§ 1. 概要

行列要素をラインプリンタ用紙に印刷する。

MXPTSは単精度実数行列の印刷を、MPTCSは単精度複素数行列の印刷を行なう。

- (1) 印刷の精度、形式は9通り用意されている。
- (2) 転置行列の印刷も可能である。
- (3) 8文字以内の行列名を与えることができる。

§ 2. 使用法

2.1 呼び出し方法

CALL MXPTS(A,K,M,N,M1,M2,ITP,IK) (単精度実数型)

CALL MPTCS(A,K,M,N,M1,M2,ITP,IK) (単精度複素数型)

2.2 パラメータ

A 単精度実数型配列名(単精度複素型配列名)。

A(K,L)なる2次元配列で印刷すべき行列を与える。(L ≥ N)

K 整数型変数名または整数。

配列Aの大きさを与える。

M } 整数型変数名または整数。

N } 行列Aのうち印刷したい小行列の行数と列数を与える。

M1 } 整数型変数名または文字定数(いずれも4文字以内)。

M2 } M1とM2で、行列の名前を与える。ここで与えられた行列名は印字される。

ITP 整数型変数名または整数。印刷形式を指定する。

ITP = 3 ~ 11のいずれかを与える。

ITP	3	4	5	6	7	8	9	10	11
印刷形式	E10.3	E11.4	E12.5	E13.6	E14.7	F 8.5	F 9.6	F10.7	F11.8
列数 (MXPTS)	12	10	9	9	8	14	13	12	10
列数 (MPTCS)	5	5	4	4	4	6	6	5	5

IK 整数型変数名または整数。

行列Aを印刷するか、Aの転置行列を印刷するかを指示する。

IK = { 1 行列Aを印刷する。
 2 転置行列を印刷する。

§ 3. その他

3.1 印刷例

呼び出しプログラム

```
C *** EXAMPLE OF MXPTS ***  
  DIMENSION A(10,20)  
  K=10  
  DO 10 I=1,K  
  DO 10 J=1,20  
  A(I,J)=I+J*100  
10 CONTINUE  
  M=5  
  N=15  
  M1='REAL'  
  M2='MTRX'  
  ITP=5  
  IK=1  
  CALL MXPTS(A,K, M,N,M1,M2,ITP,IK)  
  IK=2  
  CALL MXPTS(A,K, M,N,M1,M2,ITP,IK)  
  STOP  
  END
```

結 果

I-J ELEMENTS OF MATRIX REALMTRX

I	J= 1	J= 2	J= 3	J= 4	J= 5	J= 6	J= 7	J= 8	J= 9
1	0.10100E 03	0.20100E 03	0.30100E 03	0.40100E 03	0.50100E 03	0.60100E 03	0.70100E 03	0.80100E 03	0.90100E 03
2	0.10200E 03	0.20200E 03	0.30200E 03	0.40200E 03	0.50200E 03	0.60200E 03	0.70200E 03	0.80200E 03	0.90200E 03
3	0.10300E 03	0.20300E 03	0.30300E 03	0.40300E 03	0.50300E 03	0.60300E 03	0.70300E 03	0.80300E 03	0.90300E 03
4	0.10400E 03	0.20400E 03	0.30400E 03	0.40400E 03	0.50400E 03	0.60400E 03	0.70400E 03	0.80400E 03	0.90400E 03
5	0.10500E 03	0.20500E 03	0.30500E 03	0.40500E 03	0.50500E 03	0.60500E 03	0.70500E 03	0.80500E 03	0.90500E 03

I	J= 10	J= 11	J= 12	J= 13	J= 14	J= 15
1	0.10010E 04	0.11010E 04	0.12010E 04	0.13010E 04	0.14010E 04	0.15010E 04
2	0.10020E 04	0.11020E 04	0.12020E 04	0.13020E 04	0.14020E 04	0.15020E 04
3	0.10030E 04	0.11030E 04	0.12030E 04	0.13030E 04	0.14030E 04	0.15030E 04
4	0.10040E 04	0.11040E 04	0.12040E 04	0.13040E 04	0.14040E 04	0.15040E 04
5	0.10050E 04	0.11050E 04	0.12050E 04	0.13050E 04	0.14050E 04	0.15050E 04

I-J ELEMENTS OF MATRIX REALMTRX

J	I= 1	I= 2	I= 3	I= 4	I= 5
1	0.10100E 03	0.10200E 03	0.10300E 03	0.10400E 03	0.10500E 03
2	0.20100E 03	0.20200E 03	0.20300E 03	0.20400E 03	0.20500E 03
3	0.30100E 03	0.30200E 03	0.30300E 03	0.30400E 03	0.30500E 03
4	0.40100E 03	0.40200E 03	0.40300E 03	0.40400E 03	0.40500E 03
5	0.50100E 03	0.50200E 03	0.50300E 03	0.50400E 03	0.50500E 03
6	0.60100E 03	0.60200E 03	0.60300E 03	0.60400E 03	0.60500E 03
7	0.70100E 03	0.70200E 03	0.70300E 03	0.70400E 03	0.70500E 03
8	0.80100E 03	0.80200E 03	0.80300E 03	0.80400E 03	0.80500E 03
9	0.90100E 03	0.90200E 03	0.90300E 03	0.90400E 03	0.90500E 03
10	0.10010E 04	0.10020E 04	0.10030E 04	0.10040E 04	0.10050E 04
11	0.11010E 04	0.11020E 04	0.11030E 04	0.11040E 04	0.11050E 04
12	0.12010E 04	0.12020E 04	0.12030E 04	0.12040E 04	0.12050E 04
13	0.13010E 04	0.13020E 04	0.13030E 04	0.13040E 04	0.13050E 04
14	0.14010E 04	0.14020E 04	0.14030E 04	0.14040E 04	0.14050E 04
15	0.15010E 04	0.15020E 04	0.15030E 04	0.15040E 04	0.15050E 04