プログラム・ライブラリィの移行登録

線形代数に関する次の２０個のサブプログラムが、NEACシリーズ 2200 モデル 700 から ACOS 800 のセンター・ライブラリィへ移行登録されました。

各サブプログラムの使用方法は、NEAC 2200 のときと同じですが、[1] すでに速報No.51、No.53 でお知らせしましたように、連立１次方程式のサブプログラムについてはエラーメッセージの出力に変更があり、またエラーメッセージを消去することができる機能を追加しました。なお、当センターの機種の変更に伴ない、得られた解の精度は１～２桁悪くなりますが、特異または擬特異状態に対する判定精度には従来の値を用いております。

移行登録されたサブプログラム一覧表

SUBROUTINE名		計算内容	変更・追加事項
単精度	倍精度		
INVERS	INVERD	ガウスの消去法による逆行列、行列式、連立１次方程式	エラーメッセージ
SWEEPS	SWEEPD	ガウスの消去法による連立１次方程式	エラーメッセージ
BSWEPS	BSWEPD	ガウスの消去法による連立１次方程式(帯行列)	エラーメッセージ
YSWEPS	YSWEPD	ガウスの消去法による連立１次方程式（対称帯行列）	エラーメッセージ
DETES	DETED	ガウスの消去法による行列式、連立１次方程式	エラーメッセージ
BDETES	BDETED	ガウスの消去法による行列式、連立１次方程式（帯行列）	エラーメッセージ
YDETES	YDETED	ガウスの消去法による行列式、連立１次方程式（対称帯行列）	エラーメッセージ
POWERS	POWERD	べき乗法による固有値と固有ベクトル（実対称行列）	なし
UPOWRS	UPOWRD	べき乗法による固有値と固有ベクトル（実非対称行列）	なし
GPOWRS	GPOWRD	べき乗法による $\mathbf{A}x=\lambda\mathbf{D}x$ 型の固有値と固有ベクトル	エラーメッセージ

（文責：大阪大学工学部　林　　正）

1) 大阪大学大型計算機センター・ライブラリープログラム仕様書, 1976

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式
F 4	単精度　CALL　SWEEPS(A, I, J, N,M, ILL) 倍精度　CALL　SWEEPD(A, I, J, N,M, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS BY GAUSS ELIMINATION METHOD

1. 目　　的

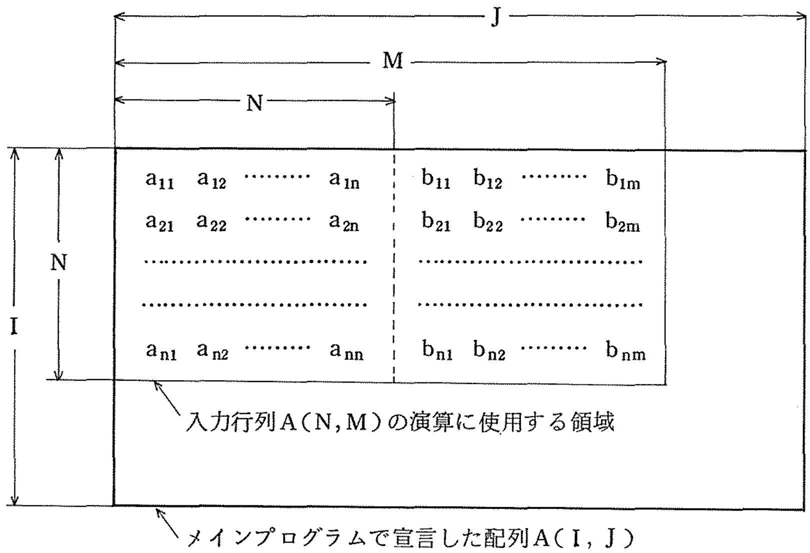
m組の連立一次方程式の解を一度に求める。

$$AX = B: \quad \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{bmatrix}$$

2. 入力データ

A　……実数型2次元配列。A(I, J)。

　　○連立一次方程式の係数行列および右辺の定数行列Bを入れる。



I, J……メインプログラムで宣言した配列Aの行数および列数。

N　……連立一次方程式の次元数(係数行列の次数)。

M　……連立一次方程式の次元数と組数の和の数。

　　○上記、4つの入力パラメータは、いずれも整数型変数または整数型定数で、次の制

約条件がある。

$$N \leqq I, \ M \leqq J, \ N < M, \ N \geqq 2$$

ILL……整数型変数。

。エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL＝0 ： 4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL＞0 ： 4.の(1)〜(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL＜0 ： 4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A ……連立一次方程式の解が入力時の定数行列の位置に入れられる。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる(エラーメッセージ参照)。

ILL＝0 ：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データ I, J, N, M が制約条件に反したとき。

$N > I, \ M > J, \ N \geqq M, \ N \leqq 1$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されれている。

ILL＜0 ：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0 ：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき(ILL＝－90000)。

"＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊"

および I, J, N, Mの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき(ILL＜0)。

1行のすべての要素がゼロのとき演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行番号の値を印刷する。このとき ILL にはその行番号の負の値が入っている。

(3) 行列Aが擬特異なとき(ILL＜0)。

掃出し中、pivot の絶対値と最大のものとの比が、ゼロ判定値以下になると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS NEARLY SINGULAR＊＊＊"

および、その pivot の行番号の値を印刷する。このとき ILL には pivot の行番号の負の値が入れられる。

ゼロ判定値としてはつぎの値を用いている。

ゼロ判定値：$\left\{\begin{array}{l}\text{SWEEPS} \cdots\cdots\cdots\cdots \ 10^{-8} \\ \text{SWEEPD} \cdots\cdots\cdots\cdots \ 10^{-17}\end{array}\right.$

(4) Pivotの値がいちぢるしく桁落ちしているとき（ ILL＞0 ）。

掃出し中、 pivot の絶対値と最大のものとの比が精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、ILLとEPSの内容を印刷する。

このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数，

EPS には絶対値最小と最大のpivotの比の値，

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いが EPS の値によっては計算結果を用いることができる。本サブルーチンにおいては、つぎの値を精度判定値として用いている。

精度判定値：$\left\{\begin{array}{l}\text{SWEEPS} \cdots\cdots\cdots\cdots \ 10^{-5} \\ \text{SWEEPD} \cdots\cdots\cdots\cdots \ 10^{-10}\end{array}\right.$

5. 使用上の注意事項

(1) SWEEPDを用いるときには、実引数Aは倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を使用すること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL＝−90000以外のときにはAの内容はこわされている。

(4) 解の精度が悪いときには、サブルーチンDETES, DETEDを用いるとよい。

6. 備　　考

(1) 解　　法

◦ガウスの消去法（Gaussian elimination method）による。

◦ normalizationとpivotの交換（但しpartial pivoting）を行なっている。

(2) 使用組込み関数

$\left\{\begin{array}{l}\text{SWEEPS} \cdots\cdots\cdots \ \text{ABS} \\ \text{SWEEPD} \cdots\cdots\cdots \ \text{DABS}\end{array}\right.$

(3) 計算精度（ ILL＝0 のとき ）

SWEEPS ……… 5〜7桁

SWEEPD ……… 10〜15桁

7. 使用例（ SWEEPD ）

```
DOUBLE PRECISION A(100, 150)
```

```
      READ(5,1)N, M
    1 FORMAT(……)
      READ(5, 10)((A(I, J), J=1, M), I=1, N)
   10 FORMAT(……)
      ILL=0
      CALL SWEEPD(A, 100, 150, N, M, ILL)
      IF(ILL.NE.0)STOP
      DO 20 I=1, N
   20 WRITE(6, 30)(A(I, J), J=41, 50)
   30 FORMAT(……)
      …………
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式・行列式
F3, F4	単精度　CALL DETES(A, I, J, N, M, DET, IEX, ILL) 倍精度　CALL DETED(A, I, J, N, M, DET, IEX, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS AND DETERMINANT
BY GAUSS ELIMINATION METHOD

1. 目　　的

m組の連立一次方程式の解と、係数行列の行列式を同時に求める。

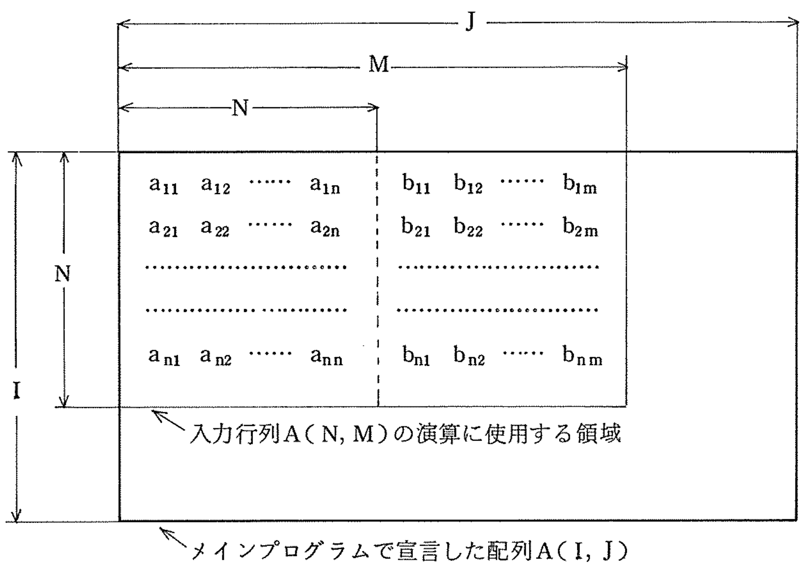
$$
AX=B\ :\quad \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{bmatrix}
$$

また、行列式のみを求めることもできる。

2. 入力データ

A　……実数型2次元配列。A(I，J)。

　　○連立一次方程式の係数行列Aおよび定数行列Bを入れる。



I, J……メインプログラムで宣言した配列Aの行数および列数。

N　……連立一次方程式の次元数（係数行列の次数）。

M　……連立一次方程式の次元数と組数の和の数。

。上記4つの入力パラメータはいずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

$N \leqq I$， $M \leqq J$， $N \leqq M$， $2 \leqq N \leqq 200$

。行列式のみを求めるときには、M＝N とする。

ILL……整数型変数。

。エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL＝0　：4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL＞0　：4.の(1)〜(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL＜0　：4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A　……連立一次方程式の解が入力時の定数行列の位置に入れられる。

DET …実数型変数。

。係数行列Aの行列式が与えられる。このとき overfrow または under flow 防止のため、DETはつぎのような桁数に調整されている。

$$1.0 > |DET| \geqq 0.1$$

IEX……整数型変数。

。DETの指数部（桁数）が与えられる。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる（エラーメッセージ参照）。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝−90000：入力データ I, J, N, Mが制約条件に反したとき。

$N > I$， $M > J$， $N > M$， $N \leqq 1$， $N > 200$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ ILL＝−90000 ）。

“ * * * INPUT DETA ERROR * * * ”

および、I, J, N, Mの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき（ ILL＜0 ）。

一行（または一列）のすべての要素がゼロであると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行（または列）番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行（または列）番号の負の値が入っている。

(3) 行列Aが擬特異なとき（ ILL＜0 ）。

掃出し中、pivotの絶対値がゼロ判定値以下になると演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS NEARLY SINGULAR＊＊＊"

および、行列Aの rankを印刷する。このときILLには rankの負の値が入れられる。

ゼロ判定値：{ DETES ………… 10^{-8} / DETED ………… 10^{-17}

(4) Pivotの値がいちぢるしく桁落ちしているとき（ ILL＞0 ）。

掃出し中、pivotの絶対値が精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数、

EPS には絶対値最小のpivotの値、

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いが、EPSの値によっては計算結果を用いることができる。精度判定値としては、つぎの値を用いている。

精度判定値：{ DETES ……… 10^{-5} / DETED ……… 10^{-10}

5. 使用上の注意事項

(1) DETEDを用いるときには、実引数A，DET は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(3) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を使用すること。

(4) サブルーチンから戻ったとき、ILL＝－90000以外のときはAの内容はこわされている。

(5) 行列式の出力には、DETをF型で、IEXをI型で印刷するとよい（使用例参照）。

(6) 擬特異の行列に対しては、サブルーチンSWEEPS，SWEEPDよりは計算精度は良くなるが計算時間は多少長くなる。

6. 備　　考

(1) 解　　法

○ガウスの消去法（ Gaussian elimination method ）による。

○ normalization と complete pivoting を行っている。

(2) 使用組込み関数

DETES	………	ABS
DETED	………	DABS

(3) 計算精度（ ILL = 0 のとき ）

DETES	………	5〜7桁
DETED	………	10〜15桁

(4) 本サブルーチンでは次の作業領域を使用している。

DETES ……	整数型1次元配列	：MM(200)
	単精度実数型1次元配列	：P(200)，R(200)
DETED ……	整数型1次元配列	：MM(200)
	倍精度実数型1次元配列	：P(200)，R(200)

7. 使用例（ DETED ）

```
      DOUBLE PRECISION A(200, 200), DET
      K = 200
      READ(5, 10)N
   10 FORMAT(I5)
      READ(5, 20)((A(I, J), J=1, N), I=1,N)
   20 FORMAT(……)
      ILL = 0
      CALL DETED(A, K, K, N, N, DET, IEX, ILL)
      IF(ILL. NE. 0)STOP
      WRITE(6, 30)DET, IEX
   30 FORMAT(1H1, 10X, 4HDET=, F15.10, 1HD, I5)
      ……………
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正

分類コード	ガウスの消去法による逆行列（及び行列式・連立一次方程式）
F 1，	単精度　CALL　INVERS(A, I, J, N, M, DET, IEX, ILL)
F 3，　F 4	倍精度　CALL　INVERD(A, I, J, N, M, DET, IEX, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS, DETERMINANT AND
INVERSE MATRIX BY GAUSS ELIMINATION METHOD

1. 目　　的

正方行列Aの逆行列とその行列式を求める。また、正方行列Aを係数行列とするm組の連立一次方程式の解も同時に求められる。

$$A^{-1},\quad |A| \quad \text{および} \quad X = A^{-1}\cdot B$$

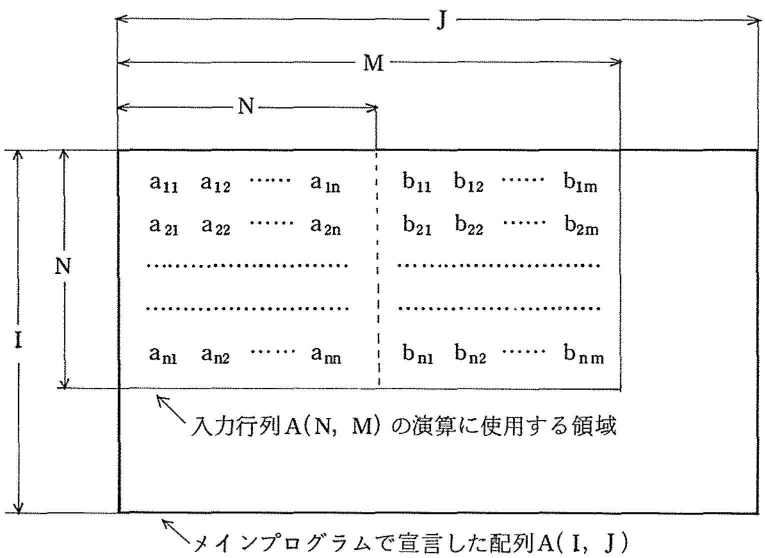
ここに,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots\cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots\cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots\cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots\cdots & b_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots\cdots & b_{nm} \end{bmatrix}$$

2. 入力データ

A　……実数型２次元配列。A(I, J)。

　　。正方行列Aと、連立方程式をとくときには、さらに定数行列Bを入れる。



I, J……メインプログラムで宣言した配列Aの行数及び列数。

N ……正方行列Aの次数（または、連立一次方程式の次元数）。

M ……行列Aの次数と定数行列Bの列数の和の数。

。上記、4つの入力データは、いずれも整数型変数または整数型定数で、次の制約条件がある。

$N \leqq I$, $M \leqq J$, $N \leqq M$ かつ $2 \leqq N \leqq 200$

。連立一次方程式をとく必要のないときには、M＝Nとする。

ILL……整数型変数。

。エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL＝0：4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL＞0：4.の(1)～(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL＜0：4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A………逆行列A^{-1}が配列A(N, N)に入る。

。連立一次方程式の解は、入力時の定数行列Bの位置に入る。

DET……実数型変数。

。正方行列Aの行列式が与えられる。このとき、overflowまたはunder flow 防止のため、DETはつぎのような桁数に調整されている。

$1.0 > |DET| \geqq 0.1$

IEX……整数型変数。

。DETの指数部（桁数）が与えられる。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる（エラーメッセージ参照）。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データ I, J, N, Mが制約条件に反したとき。

$N > I$, $M > J$, $N > M$, $N \leqq 1$, $N > 200$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ILL＝－90000）。

“＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊”

および、 I, J, N, Mの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき（ ILL＜0 ）。

一行（または一列）のすべての要素がゼロであると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行（または列）番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行（または列）番号の負の値が入っている。

(3) 行列Aが擬特異なとき（ ILL＜0 ）。

掃出し中、pivot の絶対値と最大のものとの比がゼロ判定値以下になると演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS NEARLY SINGULAR＊＊＊"

および、その pivot の行番号の値を印刷する。このとき、 ILL には pivotの行番号の負の値が入れられる。

ゼロ判定値としては、つぎの値を用いている。

ゼロ判定値：{ INVERS ……… 10^{-8}
INVERD ……… 10^{-17}

(4) Pivot の値がいちぢるしく桁落ちしているとき（ ILL＞0 ）。

掃出し中、 pivot の絶対値と最大のものとの比が、精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、 ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数、

EPS には絶対値最小と最大の pivot の比の値

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いが EPS の値によっては、計算結果を用いることができる。本サブルーチンでは、つぎの値を用いている。

精度判定値：{ INVERS ……… 10^{-5}
INVERD ……… 10^{-10}

5. 使用上の注意事項

(1) INVERDを用いるときには、実引数A, DET は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) 連立一次方程式または行列式を計算する場合には、サブルーチンSWEEPS, SWEEPD またはDETES, DETEDを用いる方が演算時間は短かくなる。

(3) 本サブルーチンの制限次数は 200 元までである。

(4) サブルーチンから戻ったときには、必ず ILLの値を判定してから計算結果を使用すること。

(5) サブルーチンから戻ったとき、 ILL＝－90000以外のときはAの内容はこわされている。

(6) 行列式の出力には、DETをFタイプで、IEXをIタイプでprintするとよい(使用例参照)。

6. 備　考

(1) 解　法

- ガウスの消去法(Gauss-Jordanの消去法)による。
- normalizationおよびpartial pivotingを行なっている。

(2) 使用組込み関数

INVERS ……… ABS
INVERD ……… DABS

(3) 計算精度(ILL＝0 のとき)

INVERS ……… 5〜7桁
INVERD ……… 10〜15桁

(4) 本サブルーチンでは次の作業領域を使用している。

INVERS
- 整数型1次元配列　　　：MM(200)
- 単精度実数型1次元配列：P(200), R(200)

INVERD
- 整数型1次元配列　　　：MM(200)
- 倍精度実数型1次元配列：P(200), R(200)

7. 使用例(INVERS)

```
      DIMENSION A(100, 150)
      READ(5, 10)N
   10 FORMAT(I5)
      READ(5, 20)((A(I,J), J=1, N), I=1, N)
   20 FORMAT(………)
      ILL=0
      CALL INVERS(A,100, 150, N, N, DET, IEX, ILL)
      IF(ILL.LT.0)STOP
      WRITE(6, 30)DET, IEX
   30 FORMAT(1H1, 10X, 4HDET=, F10.5, 1HE, I5)
      WRITE(6, 40)((A(I, J), J=1, N), I=1, N)
   40 FORMAT(………)
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式（帯行列）
F4	単精度　CALL　BSWEPS(A, I, J, N, M, K, ILL) 倍精度　CALL　BSWEPD(A, I, J, N, M, K, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS BY GAUSS ELIMINATION METHOD (FOR BANDED MATRIX)

1. 目　　的

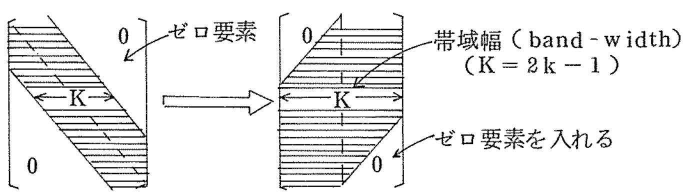
係数行列が帯行列をなすm組の連立一次方程式の解を一度に求める。

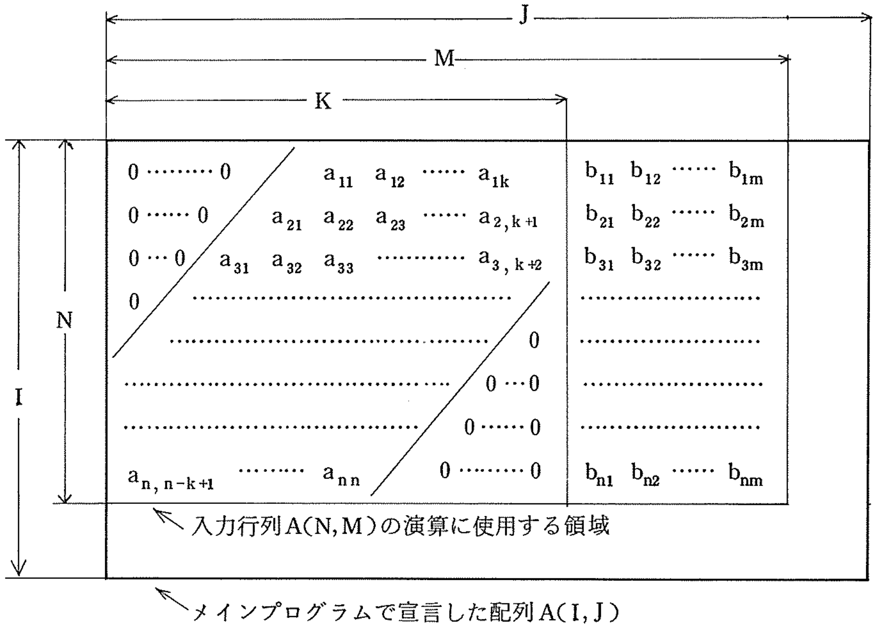
$$
AX = B : \quad
\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & & 0 & \cdots & 0 \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & a_{2,k+1} & & 0 \cdots & 0 \\
a_{31} & a_{32} & \cdots & \cdots & a_{3,k+1} & a_{3,k+2} & & 0 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 \cdots 0 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 \cdots\cdots 0 & & & a_{n,n-k+1} & \cdots & \cdots & & a_{nn}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\
b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\
b_{31} & b_{32} & \cdots & b_{3m} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm}
\end{bmatrix}
$$

2. 入力データ

A………実数型2次元配列。A(I, J)。

。帯行列の係数行列Aを下図のように長方形行列に組み替えたものに、右辺の定数行列Bを付け加える。このとき、長方形行列の左上と右下の三角形の領域にはゼロ要素を入れておくこと。





I, J……メインプログラムで宣言した配列Aの行数及び列数。

N………連立一次方程式の次元数（係数行列Aの次数）。

M………係数行列の帯域幅数と連立一次方程式の組数の和の数。

K………係数行列の帯域幅数（ただし奇数であること）。

◦上記の5つの入力パラメータは、いづれも整数型変数または整数型定数で、次の制約条件がある。

$N \leqq I$, $M \leqq J$, $K < M$, $N \geqq 2$

ILL……整数型変数。

◦エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL = 0 ： 4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL > 0 ： 4.の(1)〜(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL < 0 ： 4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A………連立一次方程式の解が、入力時の定数行列Bの位置に入る。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる（エラーメッセージ参照）。

ILL = 0 ：計算が正常に行なわれたとき。

ILL = − 90000：入力データ I, J, N, M, Kが制約条件に反したとき。

$N > I$, $M > J$, $K \geqq M$, $N \leqq 1$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ILL＝－90000）。

"＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊"

および、I, J, N, M, Kの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき（ILL＜0）。

1行のすべての要素がゼロのとき演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行番号の負の値が入っている。

(3) 対角要素の値がゼロに近いとき（ILL＜0）。

掃出し中、対角要素（pivot）の絶対値と最大のものとの比がゼロ判定値以下になると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS ILL CONDITIONED＊＊＊"

および、その対角要素の行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその対角要素の行番号の負の値が入っている。

ゼロ判定値としてはつぎの値を用いている。

ゼロ判定値 $\left\{ \begin{array}{l} \text{BSWEPS} \cdots\cdots\cdots\cdots 10^{-8} \\ \text{BSWEPD} \cdots\cdots\cdots\cdots 10^{-17} \end{array} \right.$

(4) 対角要素がいちぢるしく桁落ちしているとき（ILL＞0）。

掃出し中、対角要素の絶対値と最大のものとの比が精度判定値よりも小さくなったとき

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL　には精度判定値より小さくなったときの回数，

EPS　には絶対値最小と最大の対角要素の比の値

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いがEPSの値によっては計算結果を用いることができる。

精度判定値：$\left\{ \begin{array}{l} \text{BSWEPS} \cdots\cdots\cdots 10^{-5} \\ \text{BSWEPD} \cdots\cdots\cdots 10^{-10} \end{array} \right.$

5. 使用上の注意事項

(1) BSWEPDを用いるときには、実引数Aは倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を使用すること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL＝－90000以外のときにはAの内容はこわされている。

(4) 係数行列が正定値行列でない場合には、サブルーチンSWEEPS, SWEEPD または DETES, DETEDより計算精度は悪くなる。

6. 備　　考

(1) 解　　法

。ガウスの消去法（Gaussian elimination method）による。

。normalizationを行なっている。

(2) 使用組み込み関数

$$\begin{cases} \text{BSWEPS} \cdots\cdots\cdots \text{ABS} \\ \text{BSWEPD} \cdots\cdots\cdots \text{DABS} \end{cases}$$

(3) 計算精度（ ILL＝0 のとき ）

$$\begin{cases} \text{BSWEPS} \quad 5\sim7\text{桁} \\ \text{BSWEPD} \cdots\cdots\cdots 10\sim15\text{桁} \end{cases}$$

7. 使用例（ BSWEPS ）

```
      DIMENSION A(500, 50)
      READ(5, 10) N, M, K
      READ(5, 20)((A(I,J), J=1, M), I=1, N)
      ILL = 0
      CALL BSWEPS(A, 500, 50, N, M, K, ILL)
      IF(ILL. LT. 0)STOP
      L=K+1
      WRITE(6, 30)((A(I, J), J=L, M), I=1, N)
      ....................
   10 FORMAT(............)
   20 FORMAT(............)
   30 FORMAT(............)
      ....................
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式・行列式（帯行列）
F3, F4	単精度 BDETES(A, I, J, N, M, K, DET, IEX, P, R, ILL) 倍精度 BDETED(A, I, J, N, M, K, DET, IEX, P, R, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS AND DETERMINANT BY GAUSS ELIMINATION METHOD (FOR BANDED MATRIX)

1. 目　　的

係数行列が帯行列をなすm組の連立一次方程式の解と、係数行列の行列式を同時に求める。

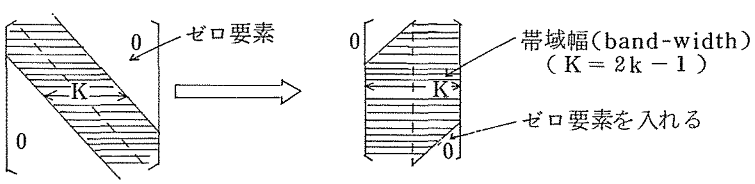
$$
AX=B:\ \begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1k} & & 0 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots 0 \\
a_{21} & a_{22} & \cdots\cdots & a_{2k} & a_{2,k+1} & 0 \cdots\cdots\cdots\cdots 0 \\
a_{31} & a_{32} & \cdots\cdots\cdots\cdots & & a_{3,k+1}\ a_{3,k+2} & 0 \cdots\cdots 0 \\
\cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & 0 \\
0 & & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \\
0 \cdots 0 & & & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \\
0 \cdots\cdots 0 & & a_{n,n-k+1} & \cdots\cdots & \cdots\cdots & a_{nn}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_{11} & b_{12} & \cdots\cdots & b_{1m} \\
b_{21} & b_{22} & \cdots\cdots & b_{2m} \\
b_{31} & b_{32} & \cdots\cdots & b_{3m} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
b_{n1} & b_{n2} & \cdots\cdots & b_{nm}
\end{bmatrix}
$$

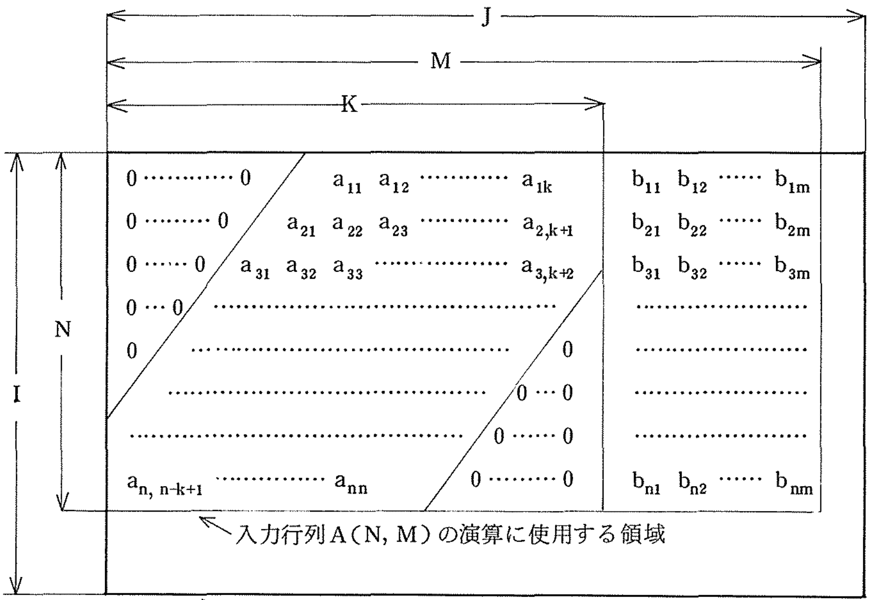
また、帯行列の行列式のみを求めることもできる。

2. 入力データ

A………実数型２次元配列。A(I, J)。

　。帯行列の係数行列Aを下図のように長方形行列に組み替えたものに、右辺の定数行列Bを付け加える。このとき、長方形行列の左上と右下の三角形の領域にはゼロ要素を入れておくこと。





P, R……実数型一次元配列。P(I), R(I)。

　。サブルーチン内で作業領域として使用するための配列であるので、データを与える必要はない。

I ………メインプログラムで宣言した配列Aの行数および配列P, Rの次数。

J ………メインプログラムで宣言した配列Aの列数。

N………連立一次方程式の次元数(係数行列Aの次数)。

M………係数行列の帯域幅数と連立一次方程式の組数の和の数。

K………係数行列の帯域幅数(ただし奇数であること)。

　。上記5つの入力パラメータは、いずれも整数型変数または整数型定数で、次の制約条件がある。

　　$N \leqq I$, $M \leqq J$, $K \leqq M$, $N \geqq 2$

　。行列式のみ求めるときには、K＝Mとする。

ILL……整数型変数。

　。エラーメッセージの印刷を指示する。

　ILL＝0 ： 4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

　ILL＞0 ： 4.の(1)～(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

　ILL＜0 ： 4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出 力 デ ー タ

A………連立一次方程式の解が、入力時の定数行列Bの位置に入る。

DET……実数型変数。

　。係数行列の行列式が与えられる。このとき、overflowまたはunder flow防止のために、DETは次のような桁数に調整されている。

$$1.0 > |DET| \geqq 0.1$$

IEX……整数型変数。

　。DETの指数部(桁数)が与えられる。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる(エラーメッセージ参照)。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データ I, J, N, M, Kが制約条件に反したとき。

$N > I,\ M > J,\ K > M,\ N \leqq 1$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき(ILL＝－90000)。

"＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊"

および、I, J, N, M, Kの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき(ILL＜0)。

1行(または1列)のすべての要素がゼロのとき演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行(または列)番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行(または列)番号の負の値が入っている。

(3) 対角要素の値がゼロに近いとき(ILL＜0)。

掃出し中、対角要素(pivot)の絶対値と最大のものとの比がゼロ判定値以下になると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS ILL CONDITIONED＊＊＊"

および、その対角要素の行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその対角要素の行番号の負の値が入っている。

ゼロ判定値としては、つぎの値を用いている。

$$\text{ゼロ判定値：}\left\{\begin{array}{l}\text{BDETES} \cdots\cdots\cdots 10^{-8} \\ \text{BDETED} \cdots\cdots\cdots 10^{-17}\end{array}\right.$$

(4) 対角要素がいちぢるしく桁落ちしているとき(ILL＞0)。

掃出し中、対角要素の絶対値と最大のものとの比が精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、 ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数,

EPS には絶対値最小と最大の対角要素の比の値

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いが EPS の値によっては計算結果を用いることができる。

精度判定値：{ BDETES ……… 10^{-5}
BDETED ……… 10^{-10}

5. 使用上の注意事項

(1) BDETED を用いるときには、実引数A, P, R, DET は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには必ずILLの値を判定してから計算結果を用いること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、 ILL＝－90000以外のときはAの内容はこわされている。

(4) 行列式の出力には、DETをFタイプ, IEXをIタイプでprintするとよい。

(5) 係数行列が正定値行列でない場合には、サブルーチンSWEEPS, SWEEPD または DETES , DETEDより計算精度は悪くなる。

6. 備　　考

(1) 解　　法

◦ガウスの消去法(Gaussian elimination method)による。

◦ normalizationを行なっている。

(2) 使用組み込み関数

{ BDETES ……… ABS
BDETED ……… DABS

(3) 計算精度(ILL＝0 のとき)

{ BDETES ……… 5～7桁
BDETED ……… 10～15桁

7. 使用例（BDETED）

```
      DOUBLE PRECISION A(300, 50), P(300), R(300), DET
      READ(5, 10)N, M, K
      READ(5, 20)((A(I, J), J=1,M), I=1, N)
      ILL = 0
      CALL BDETED(A, 300, 50, N, M, K, DET, IEX, P, R, ILL)
      IF(ILL.LT.0)STOP
      WRITE(6,30)DET, IEX
      L=K+1
      WRITE(6,40)((A(I,J), J=L, M), I=1, N)
      ......................
   10 FORMAT(............)
   20 FORMAT(............)
   30 FORMAT(.........4HDET=, F20.15, 1HD, I7)
   40 FORMAT(............)
      ......................
```

作成者　大阪大学工学部　林　　　正

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式（対称帯行列）
F4	単精度　CALL YSWEPS(A, I, J, N, M, K, P, ILL) 倍精度　CALL YSWEPD(A, I, J, N, M, K, P, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS BY GAUSS ELIMINATION METHOD (FOR SYMMETRICAL BANDED MATRIX)

1. 目　　的

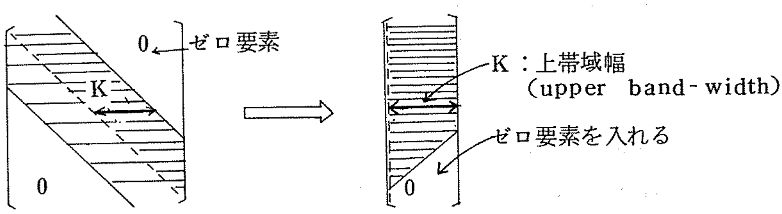
係数行列が対称な帯行列をなすm組の連立一次方程式の解を一度に求める。

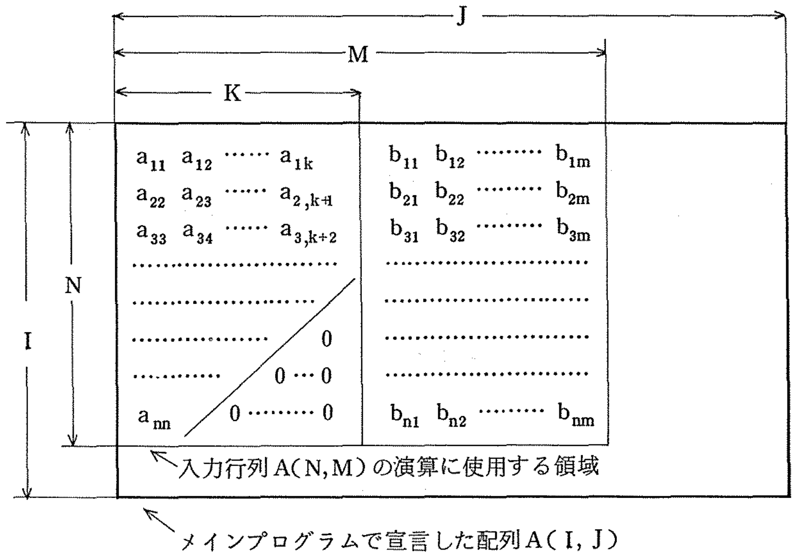
$$
AX = B:\quad
\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & a_{2,k+1} & 0 & \cdots & 0 \\
a_{31} & a_{32} & \cdots & \cdots & a_{3,k+1} & a_{3,k+2} & 0 \cdots & 0 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
0 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
0 \cdots & 0 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
0 \cdots & \cdots & 0 & & a_{n,n-k+1} & \cdots & \cdots & a_{nn}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\
b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\
b_{31} & b_{32} & \cdots & b_{3m} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm}
\end{bmatrix}
$$

2. 入 力 デ ー タ

A………実数型2次元配列。A(I, J)。

。対称な帯行列である係数行列Aの右上三角行列を下図のように長方形行列に組み替えたものに、右辺の定数行列Bを加える。このとき、長方形行列の右下の三角形の領域には、ゼロ要素を入れておくこと。





P………実数型一次元配列。P(I)。

。サブルーチン内で作業領域として使用するための配列であるので、データを与える必要はない。

I………メインプログラムで宣言した配列Aの行数および配列Pの次数。

J………メインプログラムで宣言した配列Aの列数。

N………連立一次方程式の次元数(係数行列Aの次数)。

M………係数行列の上帯域幅数と連立一次方程式の組数の和の数。

K………係数行列の上帯域幅数。

。上記の5つの入力パラメータは、いずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

$N \leqq I$, $M \leqq J$, $K < M$, $M \leqq 200$, $N \geqq 2$

ILL……整数型変数。

。エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL = 0 : 4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL > 0 : 4.の(1)～(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL < 0 : 4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A………連立一次方程式の解が、入力時の定数行列Bの位置に入る。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる(エラーメッセージ参照)。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データ I, J, N, M, Kが制約条件に反したとき。

N＞I, M＞J, K≧M, N≦1, M＞200

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ILL＝－90000）。

"＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊"

および、I, J, N, M, Kの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき（ILL＜0）。

1行のすべての要素がゼロのとき演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行番号の負の値が入っている。

(3) 対角要素の値がゼロに近いとき（ILL＜0）。

掃出し中、対角要素（pivot）の絶対値と最大のものとの比がゼロ判定値以下になると演算は打切られて

"＊＊＊MATRIX IS ILL CONDITIONED＊＊＊"

および、その対角要素の行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその対角要素の行番号の負の値が入っている。

ゼロ判定値としては、つぎの値を用いている。

$$\text{ゼロ判定値：}\left\{\begin{array}{l}\text{YSWEPS} \cdots\cdots\cdots 10^{-8} \\ \text{YSWEPD} \cdots\cdots\cdots 10^{-17}\end{array}\right.$$

(4) 対角要素がいちぢるしく桁落ちしているとき（ILL＞0）。

掃出し中、対角要素の絶対値と最大のものとの比が、精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数,

EPS には絶対値最小と最大の対角要素の比の値

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いがEPSの値によっては計算結果を用いることができる。

$$\text{精度判定値：}\left\{\begin{array}{l}\text{YSWEPS} \cdots\cdots\cdots 10^{-5} \\ \text{YSWEPD} \cdots\cdots\cdots 10^{-10}\end{array}\right.$$

5. 使用上の注意事項

(1) YSWEPDを用いるときには、実引数A，Pは倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を使用すること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL＝－90000以外のときにはAの内容はこわされている。

(4) 本サブルーチンの上帯域幅の制限は200までである。

(5) 係数行列が対称でない場合には使用できない。

(6) 係数行列が正定値行列でない場合には、サブルーチンSWEEPS，SWEEPD または DETES，DETEDより計算精度は悪くなる。

6. 備　　考

(1) 解　　法

。ガウスの消去法(Gaussian elimination method)による。

。normalizationを行なっている。

(2) 使用組み込み関数

{ YSWEPS ……… ABS，SQRT
  YSWEPD ……… DABS，DSQRT

(3) 計算精度(ILL＝0 のとき)

{ YSWEPS ……… 5～7桁
  YSWEPD ……… 10～15桁

(4) 本サブルーチンでは、次の作業領域を使用している。

{ YSWEPS …… 単精度実数型1次元配列：B(200)
  YSWEPD …… 倍精度実数型1次元配列：B(200)

7. 使用例(YSWEPS)

```
DIMENSION A(1000, 30), P(1000)
READ(5, 10)N, M, K
READ(5, 20)((A(I,J), J=1, M), I=1, N)
ILL=0
CALL YSWEPS(A, 1000, 30, N, M, K, P, ILL)
IF(ILL.LT.0)STOP
L=K+1
WRITE(6, 30)((A(I,J), J=L, M), I=1, N)
…………………
```

```
10 FORMAT(………… )
20 FORMAT(………… )
30 FORMAT(………… )
   ……………………
```

作成者　大阪大学工学部　林　　　正

分類コード	ガウスの消去法による連立一次方程式・行列式(対称帯行列)
F3, F4	単精度　YDETES(A, I, J, N, M, K, DET, IEX, P, ILL) 倍精度　YDETED(A, I, J, N, M, K, DET, IEX, P, ILL)

SOLUTION OF LINEAR EQUATIONS AND DETERMINANT BY GAUSS ELIMINATION METHOD (FOR SYMMETRICAL BANDED MATRIX)

1. 目　　的

係数行列が対称な帯行列をなすm組の連立一次方程式の解と、係数行列の行列式を同時に求める。

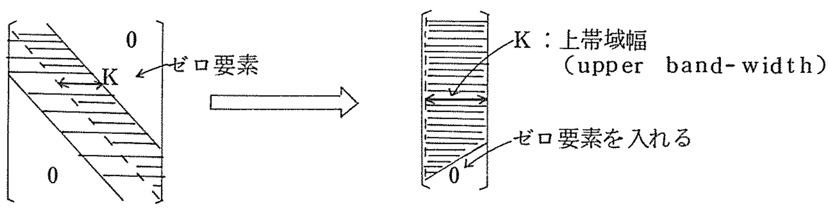
$$
AX=B:\quad
\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & 0 & \cdots & \cdots & 0\\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & a_{2,k+1} & 0 & \cdots & 0\\
a_{31} & a_{32} & \cdots & \cdots & a_{3,k+1} & a_{3,k+2} & 0 \cdots & 0\\
 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\
0 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
0 \cdots 0 & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
0 \cdots & 0 & a_{n,n-k+1} & \cdots & \cdots & \cdots & & a_{nn}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1\\ x_2\\ x_3\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m}\\
b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m}\\
b_{31} & b_{32} & \cdots & b_{3m}\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm}
\end{bmatrix}
$$

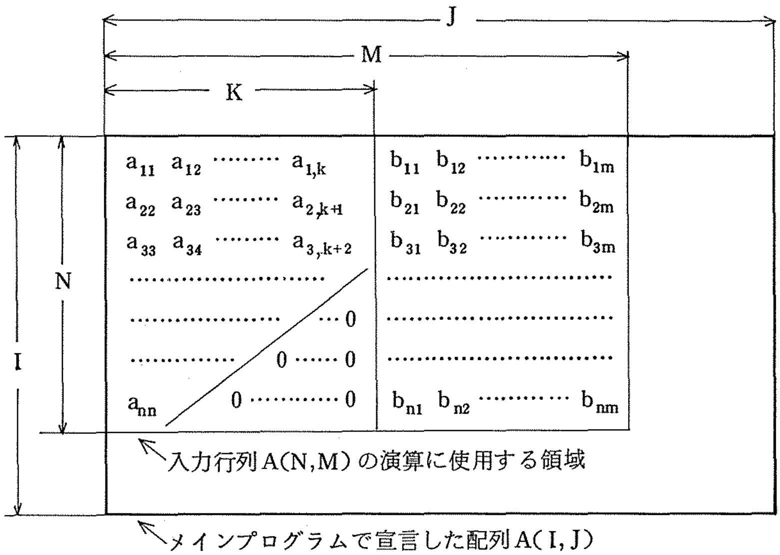
また、帯行列の行列式のみを求めることもできる。

2. 入力データ

A………実数型2次元配列。A(I, J)。

- 対称な帯行列である係数行列Aの右上三角行列を下図のように長方形行列に組み替えたものに、右辺の定数行列Bを加える。このとき、長方形行列の右下の三角形の領域にはゼロ要素を入れておくこと。





P………実数型一次元配列。P(I)。

　o サブルーチン内で作業領域として使用するための配列であるので、データを与える必要はない。

I ………メインプログラムで宣言した配列Aの行数および配列Pの次数。

J ………メインプログラムで宣言した配列Aの列数。

N………連立一次方程式の次元数（係数行列Aの次数）。

M………係数行列の上帯域幅数と連立一次方程式の組数の和の数。

K ………係数行列の上帯域幅数。

　o 上記5つの入力データは、いずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

$$N \leqq I,\ M \leqq J,\ K \leqq M,\ M \leqq 200,\ N \geqq 2$$

　o 行列式のみ求めるときには、K＝Mとする。

ILL……整数型変数。

　o エラーメッセージの印刷を指示する。

ILL＝0　：4.のすべての場合において、エラーメッセージを印刷する。

ILL＞0　：4.の(1)〜(3)の場合、エラーメッセージを印刷する。

ILL＜0　：4.の(1)の場合のみ、エラーメッセージを印刷する。

3. 出力データ

A………連立一次方程式の解が、入力時の定数行列Bの位置に入る。

DET……実数型変数。

◦係数行列の行列式が与えられる。このとき、overflow または under flow防止のために、DETはつぎのような桁数に調整されている。

$$1.0 > |DET| \geqq 0.1$$

IEX……整数型変数。

◦DETの指数部（桁数）が与えられる。

ILL……サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる（エラーメッセージ参照）。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝−90000：入力データ I, J, N, M, Kが制約条件に反したとき。

$N > I$, $M > J$, $K > M$, $N \leqq 1$, $M > 200$

このとき、演算は全く行なわれず、入力データはそのまま保存されている。

ILL＜0　　　：行列Aが特異または擬特異な場合。

ILL＞0　　　：計算結果の精度が悪いとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ILL＝−90000）。

"＊＊＊ INPUT DATA ERROR ＊＊＊"

および、I, J, N, M, Kの値を印刷する。

(2) 行列Aが特異なとき（ILL＜0）。

1行のすべての要素がゼロのとき演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS SINGULAR＊＊＊"

および、その行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその行番号の負の値が入っている。

(3) 対角要素の値がゼロに近いとき（ILL＜0）。

掃出し中、対角要素（pivot）の絶対値と最大のものとの比がゼロ判定値以下になると演算は打切られて、

"＊＊＊MATRIX IS ILL CONDITIONED＊＊＊"

および、その対角要素の行番号の値を印刷する。このとき、ILLにはその対角要素の行番号の負の値が入っている。

ゼロ判定値としてはつぎの値を用いている。

$$\text{ゼロ判定値：}\left\{\begin{array}{l}\text{YDETES} \cdots\cdots\cdots 10^{-8} \\ \text{YDETED} \cdots\cdots\cdots 10^{-17}\end{array}\right.$$

(4) 対角要素がいちぢるしく桁落ちしているとき(ILL > 0)。

掃出し中、対角要素の絶対値と最大のものとの比が精度判定値より小さくなったとき、

"＊＊＊THE SOLUTION IS INACCURATE＊＊＊"

および、ILLとEPSの内容を印刷する。このとき、

ILL には精度判定値より小さくなったときの回数,

EPS には絶対値最小と最大の対角要素の比の値,

が入れられる。しかし、演算は最後まで行なわれているので、解の精度は悪いが EPS の値によっては計算結果を用いることができる。

精度判定値：$\begin{cases} \text{YDETES} \cdots\cdots\cdots & 10^{-5} \\ \text{YDETED} \cdots\cdots\cdots & 10^{-10} \end{cases}$

5. 使用上の注意事項

(1) YDETED を用いるときには、実引数A, P, DET は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ず ILL の値を判定してから計算結果を用いること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL =－90000以外のときはAの内容はこわされている。

(4) 本サブルーチンの上帯域幅の制限は 200 までである。

(5) 係数行列が対称でない場合には使用できない。

(6) 行列式の出力には、DETをFタイプ, IEXをIタイプでprintするとよい。

(7) 係数行列が正定値行列でない場合には、サブルーチン SWEEPS, SWEEPD または DETES, DETEDより計算精度は悪くなる。

6. 備　　考

(1) 解　　法

◦ガウスの消去法(Gaussian elimination method)による。

◦ normalization を行なっている。

(2) 使用組み込み関数

$\begin{cases} \text{YDETES} \cdots\cdots\cdots & \text{ABS, SQRT} \\ \text{YDETED} \cdots\cdots\cdots & \text{DABS, DSQRT} \end{cases}$

(3) 計算精度(ILL = 0 のとき)

$\begin{cases} \text{YDETES} \cdots\cdots\cdots & 5 \sim 7\text{桁} \\ \text{YDETED} \cdots\cdots\cdots & 10 \sim 15\text{桁} \end{cases}$

(4) 本サブルーチンでは、次の作業領域を使用している。

YDETES ……… 単精度実数型1次元配列：B (200)
YDETED ……… 倍精度実数型1次元配列：B (200)

7. 使用例(YDETED)

```
      DOUBLE PRECISION A(1000, 15), P(1000), DET
      ID=1000
      JD=15
      READ(5, 10)N, M, K
      READ(5, 20)((A(I, J), J=1, M), I=1, N)
      ILL=0
      CALL YDETED(A, ID, JD, N, M, K, DET, IEX, P, ILL)
      IF(ILL.NE.0)GO TO 100
      WRITE(6, 30)DET, IEX
      L=K+1
      WRITE(6, 40)((A(I, J), J=L, M), I=1, N)
      ....................
   10 FORMAT(............)
   20 FORMAT(............)
   30 FORMAT(.........,  4HDET=,  F20.15,  1HD,  I7)
   40 FORMAT(............)
  100 ..................
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正

分類コード	べき乗法による固有値と固有ベクトル（対称行列）
F2	単精度　CALL　POWERS(A, I, J, L, N, M, EPS, ISP, S, V, ILL) 倍精度　CALL　POWERD(A, I, J, L, N, M, EPS, ISP, S, V, ILL)

EIGEN VALUES AND VECTORS BY POWER METHOD
(FOR SYMMETRICAL MATRIX)

1. 目　　的

実対称行列の標準型固有値問題において、固有値と対応する固有ベクトルを絶対値最大（または、最小）の固有値から必要な数、m個だけ求める。

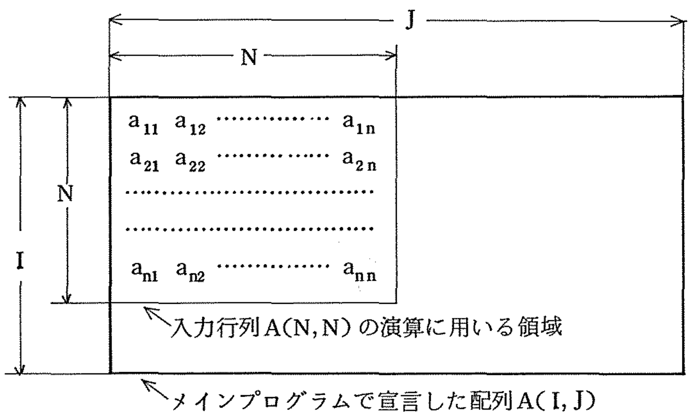
$$Ax = \lambda x$$

ただし、　$\max|\lambda_i| = |\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots\cdots > |\lambda_m|$
（または、$\min|\lambda_i| = |\lambda_1| < |\lambda_2| < \cdots\cdots < |\lambda_m|$）　$\begin{pmatrix} m \leqq n \\ i = 1, 2, \cdots, n \end{pmatrix}$

2. 入力データ

A………実数型２次元配列。A(I, J)。

　。対称行列Aの要素を入れる。



I………メインプログラムで宣言した配列Aの行数および２次元配列Vの行数。

J………　〃　　〃　配列Aの列数。

L………　〃　　〃　１次元配列Sの次数および配列Vの列数。

N………対称行列Aの次数。

M………必要な固有値の数。

　。絶対値最小の固有値から求める場合には負の数を入れる。

以上、５つの入力パラメータはいずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

N≦I， N≦J， |M|≦N， |M|≦L，M≠0， N≦200

EPS …実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○ kを反復回数、aを固有値または固有ベクトルの各成分の近似値とすると、固有値および対応する固有ベクトルのすべての成分が次式の収束判定条件を満たすまで反復計算を行なう。

$$\left|\frac{a^{(k)} - a^{(k-1)}}{a^{(k)}}\right| < EPS$$

○固有値の精度はRayleigh商により（EPS)^{2}まで高められている。

○ EPS の値は所要時間および精度により変えるべきであるが、通常の計算においてはつぎの範囲内の値を用いるとよい。

$$\text{収束判定値}：\begin{cases}\text{単精度} \cdots\cdots\cdots & 10^{-4} \sim 10^{-6} \\ \text{倍精度} \cdots\cdots\cdots & 10^{-6} \sim 10^{-14}\end{cases}$$

ただし、 0.0＜EPS＜1.0 なること。

ISP …整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

○繰返し計算において、反復回数が最大反復回数を越えても収束しないとき、演算を打切る。

○反復回数は所要精度EPSの値と、 行列Aの性質（隣接した固有値の比の値）により一概にはいえないが、大体の値としては

ISP＝50～1000。　　（ただし、 ISP≧2 なること。）

3. 出力データ

S………実数型1次元配列。S(L)。

○絶対値最大（または最小）の固有値から、大きさの順に必要な数M個だけの固有値がが与えられる。

|S(1)| ＞ |S(2)| ＞………＞ |S(M)|

（または、 |S(1)|＜|S(2)|＜……＜ |S(M)|）

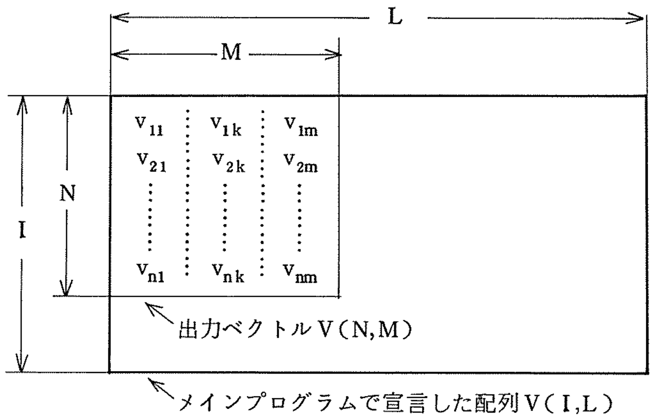
V………実数型2次元配列。V(I, L)。

○第K番目の固有値S(K)に対応した固有ベクトルが

V(J, K)：(J＝1, 2,……, N)

で与えられる。

○各固有ベクトルは、絶対値最大の成分が1になるように規格化されている。



ILL……整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL = 0　　　　：計算が正常に完了したとき。

ILL = − 90000 ：入力データ I, J, L, N, M, ISP, EPS が制約条件に反したとき。

$N > I$, $N > J$, $|M| > N$, $|M| > L$, $M = 0$, $N > 200$,

$ISP < 2$, $EPS \leqq 0.0$, $EPS \geqq 1.0$

ILL ＞ 0　　　　：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき (ILL = − 90000)。

" * * * INPUT DATA ERROR * * * "

および、I, J, L, N, M, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

(2) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき (ILL > 0)。

" * * * CALCULATION DOES NOT CONVERGENCE * * * "

および、そのときの固有値の mode №. と反復回数を印刷する。このとき，ILLには収束しなかった固有値の mode №. が入っている。

ILL の値が 2 以上のときは、収束しなかった mode より低次の固有値および固有ベクトルは正しく求められている。

5. 使用上の注意事項

(1) POWERDを用いるときには、実引数A，EPS，S，Vは倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ず ILL の値を判定してから計算結果を用いること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL = − 90000 または |M| = 1 のときのみAの内容は保存されている。

(4) EPSの値が小さ過ぎると、収束しないことがある。

(5) 累積誤差のため、高位の固有値ほど計算結果の信頼度は低くなる。したがって、Mの値をあまり大きくすると高位の固有値は求まらないことがある。

(6) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(7) 重複固有値がある場合には、固有値は求まるが対応する1次独立な固有ベクトルは1つしか求まらない。

(8) 絶対値最小の固有値から求めたい場合には、行列Aの逆行列を計算してから、A^{-1}を入力として本サブルーチンを用いること。また、Mには負の数を与えること。

6. 備　　考

(1) 解　　法

- べき乗法(power method)による。
- Hotelling's deflation により中間固有値を求めている。
- Rayleigh商により、固有値の精度を上げている。

(2) 使用組込み関数

POWERS ……… IABS, ABS
POWERD ……… IABS, DABS

(3) 本サブルーチンではつぎの作業領域を用いている。

POWERS ……… 単精度実数型1次元配列：VO(200), VN(200)
POWERD ……… 倍精度実数型1次元配列：VO(200), VN(200)

7. 使用例(POWERS)

実対称行列Aの固有値と固有ベクトルを、絶対値最小の固有値からM個求める。このとき、Aの逆行列を求めるために、サブルーチン　INVERS を用いる。

```
      DIMENSION A(100, 110), S(10), V(100, 10)
      ND = 100
      MD = 110
      READ(5, 10) N, M
   10 FORMAT(…………)
      READ(5, 20)((A(I, J), J=1, N), I=1, N)
   20 FORMAT(…………)
      ILL = 0
      CALL INVERS(A, ND, MD, N, N, DET, IEX, ILL)
      IF(ILL.NE.0) STOP
```

```
      CALL POWERS(A, ND, MD, 10, N, -M, 1.0E-5, 300, S, V, ILL)
      IF(ILL.LT.0.OR.ILL.EQ.1)STOP
      IF(ILL.NE.0)M=ILL-1
      DO 30 J=1, M
   30 WRITE(6, 40) S(J), (V(I,J), I=1, N)
   40 FORMAT(…………)
      ……………………
```

作成者　大阪大学工学部　林　　　正

分類コード	べき乗法による固有値と固有ベクトル（非対称行列）
F2	単精度　CALL　UPOWRS(A, I, J, L, N, M, EPS, ISP, S, V, ILL) 倍精度　CALL　UPOWRD(A, I, J, L, N, M, EPS, ISP, S, V, ILL)

EIGEN VALUES AND VECTORS BY POWER METHOD
(FOR UNSYMMETRICAL MATRIX)

1. 目　的

実行列の標準型固有値問題において、固有値と対応する右固有ベクトルを絶対値最大（または最小）の固有値から必要な数、m個だけ求める。

$$\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{x}$$

ただし、　$\max|\lambda_i| = |\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots\cdots > |\lambda_m|$

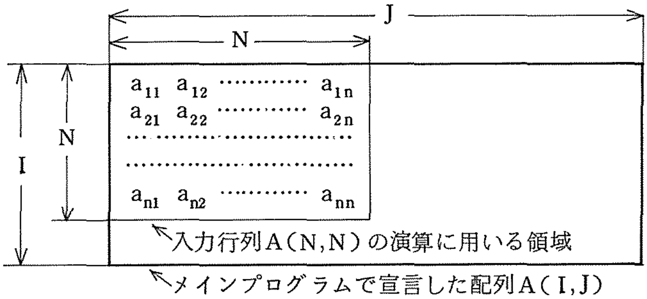
（または、$\min|\lambda_i| = |\lambda_1| < |\lambda_2| < \cdots\cdots < |\lambda_m|$）　$\begin{pmatrix} m \leqq n \\ i = 1, 2, \cdots, n \end{pmatrix}$

。一般固有値問題　$\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{Bx}$　に対して応用できる。

2. 入力データ

A………実数型2次元配列。A(I, J)。

。実行列Aの要素を入れる。



I………メインプログラムで宣言した配列Aの行数および2次元配列Vの行数。

J………　　〃　　　〃　　配列Aの列数。

L………　　〃　　　〃　　1次元配列Sの次数および配列Vの列数。

N………実行列Aの次数。

M………必要な固有値の数。

。絶対値最小の固有値から求める場合には負の数を入れる。

以上、5つの入力パラメータはいずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

$$N \leqq I,\ N \leqq J,\ |M| \leqq N,\ |M| \leqq L,\ M \neq 0,\ N \leqq 200$$

EPS……実数型変数または実数型定数。

◦反復計算における収束精度を与える。

◦ kを反復回数、aを固有値または固有ベクトルの各成分の近似値とすると、固有値および対応する右および左固有ベクトルのすべての成分が次式の収束判定条件を満たすまで反復計算を行なう。

$$\left| \frac{a^{(k)} - a^{(k-1)}}{a^{(k)}} \right| < \mathrm{EPS}$$

◦固有値の精度は Rayleigh 商により$(\mathrm{EPS})^2$ まで高められている。

◦ EPS の値は所要時間および精度により変えるべきであるが、通常の計算においてはつぎの範囲内の値を用いるとよい。

$$\text{収束判定値}：\begin{cases} \text{単精度} \cdots\cdots\cdots \ 10^{-4} \sim 10^{-6} \\ \text{倍精度} \cdots\cdots\cdots \ 10^{-6} \sim 10^{-14} \end{cases}$$

ただし、0.0＜EPS＜1.0 なること。

ISP……整数型変数または整数型定数。

◦最大反復回数を与える。

◦繰返し計算において、反復回数が最大反復回数を越えても収束しないとき、演算を打切る。

◦反復回数は所要精度EPSの値と、行列Aの性質(隣接した固有値の比の値)により一概にはいえないが、大体の値としては

ISP＝50～1000。　(ただし、ISP≧2 なること。)

3. 出力データ

S………実数型1次元配列。S(L)。

◦絶対値最大(または最小)の固有値から、大きさの順に必要な数M個だけの固有値が与えられる。

$$|S(1)| > |S(2)| > \cdots\cdots > |S(M)|$$

$$(\text{または、}\ |S(1)| < |S(2)| < \cdots\cdots < |S(M)|)$$

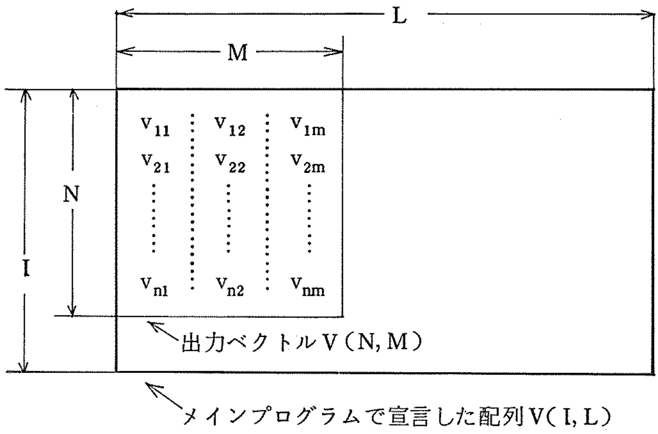
V………実数型2次元配列。V(I, J)。

◦第K番目の固有値S(K)に対応した右固有ベクトルが

V(J, K)：(J＝1, 2,……, N)

で与えられる。

◦各固有ベクトルは、絶対値最大の成分が1になるように規格化されている。



ILL……整数型変数。

　　○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

　　ILL = 0　　　：計算が正常に完了したとき。

　　ILL = −90000：入力データ I, J, L, N, M, ISP, EPSが制約条件に反したとき。

　　　　N＞I，N＞J，|M|＞N，|M|＞L，M= 0，N＞200，

　　　　ISP＜2，EPS≦0.0，EPS≧1.0

　　ILL＞0　　　：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ ILL = − 90000 ）。

　　“ * * * INPUT DATA ERROR * * * ”

および、I, J, L, N, M, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

(2) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき（ ILL＞0 ）。

　　“ * * * CALCULATION DOES NOT CONVERGENCE * * * ”

および、そのときの固有値の mode №と反復回数を印刷する。このとき、ILLには収束しなかった回有値の mode №が入っている。

ILLの値が2以上のときは、収束しなかった mode より低次の固有値および右固有ベクトルは正しく求められている。

5. 使用上の注意事項

(1) UPOWRDを用いるときには、実引数A，EPS，S，V は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を用いること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL=−90000のときのみAの内容は保存されている。

(4) EPSの値が小さ過ぎると、収束しないことがある。

(5) 累積誤差のため、高位の固有値ほど計算結果の信頼度は低くなる。したがって、Mの値をあまり大きくすると高位の固有値は求まらないことがある。

(6) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(7) 重複固有値がある場合には、固有値は求まるが対応する1次独立な固有ベクトルは1つしか求まらない。また、複素固有値に対しては、反復計算は収束しない。

(8) 絶対値最小の固有値から求めたい場合には、行列Aの逆行列を計算してから、A^{-1} を入力として本サブルーチンを用いること。また、Mには負の数を与えること。

(9) 左固有ベクトルを求める場合には、行列Aの転置行列A^{T}を入力すればよい。

(10) 一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ に対して、本サブルーチンを応用することができる(使用例参照)。

6. 備　　考

(1) 解　　法

- べき乗法(power method)による。
- Hotelling's deflation により中間固有値を求めている。
- Rayleigh 商により、固有値の精度を上げている。

(2) 使用組込み関数

UPOWRS ……… IABS, ABS
UPOWRD ……… IABS, DABS

(3) 本サブルーチンではつぎの作業領域を用いている。

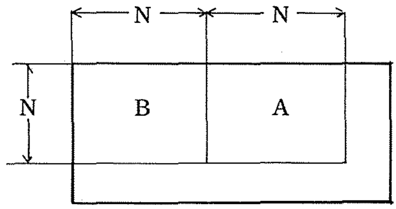
UPOWRS ……… 単精度実数型1次元配列 : VO(200), VN(200), VR(200)
UPOWRD ……… 倍精度実数型1次元配列 : VO(200), VN(200), VR(200)

7. 使用例(UPOWRD)

Bを正則行列とする一般固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

において、固有値と固有ベクトルを絶対値最大の固有値からM個求める。$B^{-1}A$ を求めるために、サブルーチン　SWEEPDを用いる。使用例では、入力データA, Bを配列Aにつぎのように与える。



← メインプログラムで宣言した配列Aの領域

```
   DOUBLE PRECISION A(50, 100), S(10), V(50, 10)
   READ(5, 11)N, M
11 FORMAT(............)
   N2 = 2 * N
   READ(5, 12)((A(I, J), J=1, N2), I=1, N)
12 FORMAT(............)
   ILL = 0
   CALL SWEEPD(A, 50, 100, N, N2, ILL)
   IF(ILL. NE. 0)STOP
   DO 22 J = 1, N
   K = J + N
   DO 22 I = 1, N
22 A(I, J) = A(I, K)
   CALL UPOWRD(A, 50, 100, 10, N, M, 1.0D-6, 300, S, V, ILL)
   IF(ILL. LT. 0. OR. ILL. EQ. 1 ) STOP
   IF(ILL. NE. 0)M= ILL - 1
   DO 23 J = 1, M
23 WRITE(6, 24)S(J), (V(I, J), I=1, N)
24 FORMAT(............)
   ......................
```

作成者　大阪大学工学部　林　　　正

分類コード	べき乗法による $Ax=\lambda Dx$ 型 の固有値と固有ベクトル(対称行列)
F2	単精度　CALL　GPOWRS(A,D,I,J,L,N,M,EPS, ISP, S, V, ILL) 倍精度　CALL　GPOWRD(A,D,I,J,L,N,M,EPS, ISP, S, V, ILL)

EIGEN VALUES AND VECTORS BY POWER METHOD
(FOR SYMMETRICAL MATRIX)

1. 目　　的

実対称行列の一般固有値問題において、固有値と対応する固有ベクトルを絶対値最大(または最小)の固有値から必要な数、m個だけ求める。

$$Ax=\lambda Dx$$

ただし、∘ $\max|\lambda_i|=|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots\cdots\cdots>|\lambda_m|$　$\left(\begin{array}{l} m\leqq n \\ i=1,2,\cdots,n \end{array}\right)$

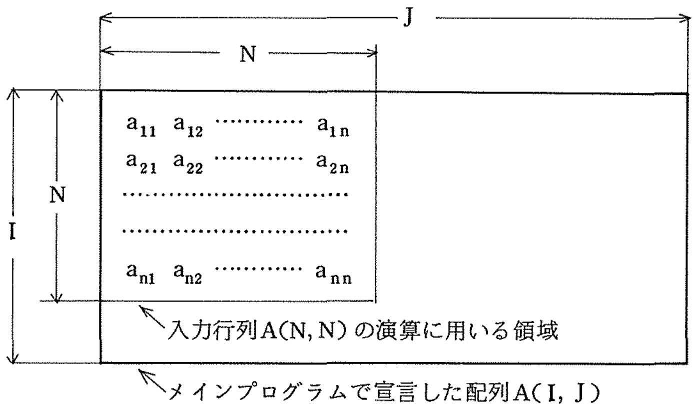
(または、$\min|\lambda_i|=|\lambda_1|<|\lambda_2|<\cdots\cdots\cdots<|\lambda_m|$)

∘ Dは正値対角行列($d_{ii}>0$)。

2. 入力データ

A………実数型2次元配列。A(I, J)。

∘ 対称行列Aの要素を入れる。



D………実数型1次元配列。D(I)。

∘ 対角行列Dの対角要素 d_{ii} を入れる($d_{ii}>0$ なること)。

I………メインプログラムで宣言した配列Aの行数，Dの次数および2次元配列Vの行数。

J………　　〃　　〃　配列Aの列数。

L………　　〃　　〃　1次元配列Sの次数および配列Vの列数。

N………対称行列Aおよび対角行列Dの次数。

M………必要な固有値の数。

○絶対値最小の固有値から求める場合には負の数を入れる。

以上、5つの入力パラメータはいずれも整数型変数または整数型定数で、つぎの制約条件がある。

$N \leqq I$, $N \leqq J$, $|M| \leqq N$, $|M| \leqq L$, $M \neq 0$, $N \leqq 200$

EPS……実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○kを反復回数、aを固有値または固有ベクトルの各成分の近似値とすると、固有値および対応する固有ベクトルのすべての成分が次式の収束判定条件を満たすまで反復計算を行なう。

$$\left| \frac{a^{(k)} - a^{(k-1)}}{a^{(k)}} \right| < \mathrm{EPS}$$

○固有値の精度は Rayleigh 商により $(\mathrm{EPS})^2$ まで高められている。

○EPSの値は所要時間および精度により変えるべきであるが、通常の計算においてはつぎの範囲内の値を用いるとよい。

$$\text{収束判定値：}\begin{cases} \text{単精度} \cdots\cdots\cdots & 10^{-4} \sim 10^{-6} \\ \text{倍精度} \cdots\cdots\cdots & 10^{-6} \sim 10^{-14} \end{cases}$$

ただし、$0.0 < \mathrm{EPS} < 1.0$ なること。

ISP……整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

○繰返し計算において、反復回数が最大反復回数を越えても収束しないとき、演算を打切る。

○反復回数は所要精度EPSの値と、行列Aの性質（隣接した固有値の比の値）により一概にはいえないが、大体の値としては

ISP＝50～1000。　　（ただし、ISP≧2 なること。）

3. 出力データ

S………実数型1次元配列。S(L)。

○絶対値最大（または最小）の固有値から、大きさの順に必要な数M個だけの固有値が与えられる。

$|S(1)| > |S(2)| > \cdots\cdots\cdots > |S(M)|$

（または、$|S(1)| < |S(2)| < \cdots\cdots\cdots < |S(M)|$）

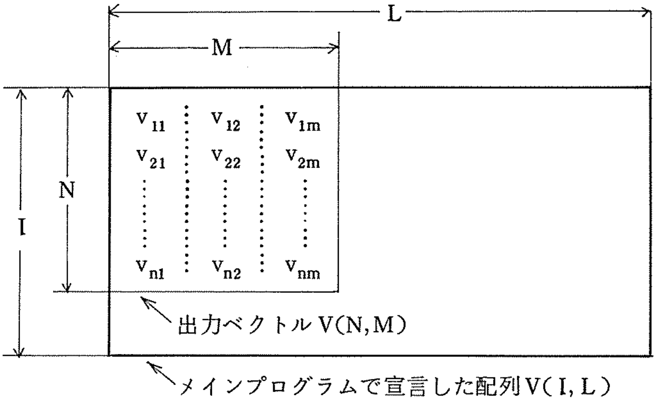
V………実数型2次元配列。V(I,L)。

○第K番目の固有値S(K)に対応した固有ベクトルが

V(J, K)：(J＝1, 2,……, N)

で与えられる。

。各固有ベクトルは、絶対値最大の成分が1になるように規格化されている。



ILL……整数型変数。

。サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に完了したとき。

ILL＝－90000：入力データ I, J, L, N, M, ISP, EPSが制約条件に反したとき。

N＞I，N＞J，|M|＞N，|M|＞L，M＝0，N＞200，

ISP＜2，EPS≦0.0，EPS≧1.0

その他の
ILL＜0　　　：D(I)≦0.0　　（I＝1, 2,……，N）

ILL＞0　　　：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき（ILL＜0，または ILL＝－90000）。

"＊＊＊INPUT DATA ERROR＊＊＊"

および、対角行列Dの非正値の対角要素 d_{ii} とその行番号の値、または I, J, L, N, M, ISP, EPS の値をこの順序で印刷する。

(2) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき（ILL＞0）。

"＊＊＊CALCULATION DOES NOT CONVERGENCE＊＊＊"

および、そのときの固有値の mode No. と反復回数を印刷する。このとき、ILLには収束しなかった固有値の mode No. が入っている。

ILLの値が2以上のときは、収束しなかった mode より低次の固有値および固有ベクトルは正しく求められている。

5. 使用上の注意事項

(1) GPOWRDを用いるときには、実引数A, D, EPS, S, V は倍精度指定の宣言をする必要がある。

(2) サブルーチンから戻ったときには、必ずILLの値を判定してから計算結果を用いること。

(3) サブルーチンから戻ったとき、ILL＜0 のときのみAの内容は保存されている。

(4) EPSの値が小さ過ぎると、収束しないことがある。

(5) 累積誤差のため、高位の固有値ほど計算結果の信頼度は低くなる。したがって、Mの値をあまり大きくすると高位の固有値は求まらないことがある。

(6) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(7) 重複固有値がある場合には、固有値は求まるが対応する1次独立な固有ベクトルは1つしか求まらない。

(8) 絶対値最小の固有値から求めたい場合には、行列Aの逆行列を計算してから、A^{-1} を入力として本サブルーチンを用いること。また、Mには負の数を与えること。

(9) Dが対角行列でない場合は、UPOWRS, UPOWRDの使用例を参照のこと。

6. 備　　考

(1) 解　　法

◦べき乗法(power method)による。

◦Hotelling's deflation により中間固有値を求めている。

◦Rayleigh 商により、固有値の精度を上げている。

(2) 使用組込み関数

GPOWRS ……… IABS, ABS, SQRT
GPOWRD ……… IABS, DABS, DSQRT

(3) 本サブルーチンではつぎの作業領域を用いている。

GPOWRS ……… 単精度実数型1次元配列：VO(200), VN(200)
GPOWRD ……… 倍精度実数型1次元配列：VO(200), VN(200)

7. 使用例(GPOWRS)

Aを実対称行列、Dを正値対角行列とするとき、

$$Ax = \lambda Dx$$

の固有値と固有ベクトルを絶対値最小の固有値からM個求める。このとき、Aの逆行列を求めるために、サブルーチン INVERS を用いる。

```
      DIMENSION A(200, 200), D(200), S(10), V(200, 10)
      READ(5, 10) N, M
```

```
      READ(5, 20)((A(I, J), J=1, N), I=1, N)
      READ(5, 20)(D(I), I=1, N)
   10 FORMAT(…………)
   20 FORMAT(…………)
      ILL=0
      CALL  INVERS(A, 200, 200, N, N, DET, IEX, ILL)
      IF(ILL.NE.0)STOP
      CALL  GPOWRS(A,D,200,200,10,N,-M,1.0E-5,500,S,V,ILL)
      IF(ILL.LT.0.OR.ILL.EQ.1)STOP
      IF(ILL.NE.0)M=ILL-1
      DO 30 J=1, M
   30 WRITE(6, 40)S(J), (V(I, J), I=1, N)
   40 FORMAT(…………)
      ……………………
```

作成者　大阪大学工学部　林　　正