

付録3. ヤコビ(jacobi)法を用いて実対称行列を対角化するFOR-TRANプログラム

```

PROGRAM JCOBTST
IMPLICIT NONE
INTEGER NMAX
PARAMETER (NMAX=100)
REAL*8 A(NMAX,NMAX),U(NMAX,NMAX),E(NMAX)
REAL*8 OME1,F1
REAL*8 AT(NMAX,NMAX),VT(NMAX),T,S,E2
INTEGER I,J,N
C
C  行列要素の生成
C
      N=50
      OME1=0.1D0
      F1=0.001D0
      CALL MKMAT(N,NMAX,A,OME1,F1)
C
      DO I=1,N
        DO J=1,N
          AT(I,J)=A(I,J)
        END DO
      END DO
C
C  対角化
C
      CALL JCOB(N,NMAX,AT,E,U)
C
      WRITE(6,*)' N=',N
      DO I=1,N
C  ここで計算誤差をチェックしている。
          CALL MULM(N,NMAX,U(1,I),A,VT)
          CALL MULV(N,VT,U(1,I),T)
          S=0D0
          DO J=1,N
            S=S+(T*U(J,I)-VT(J))**2
          END DO
          WRITE(6,*)' I=',I,' E=',E(I),' ERR=',SQRT(S/DBLE(N))
        END DO
      END DO

```

```

C
    END
C
C   行列 A とベクトル V1 の積 (結果は V2 に)
C
    SUBROUTINE MULM(N,NMAX,V1,A,V2)
    IMPLICIT NONE
    INTEGER N,NMAX
    REAL*8 V1(N),V2(N),A(NMAX,N),S
    INTEGER I,J
C
    DO I=1,N
        S=0D0
        DO J=1,N
            S=S+A(I,J)*V1(J)
        END DO
        V2(I)=S
    END DO
C
    END
C
C   二つの V1,V2 のベクトルの内積を求める。(結果は S に)
C
    SUBROUTINE MULV(N,V1,V2,S)
    IMPLICIT NONE
    INTEGER N
    REAL*8 V1(N),V2(N),S
    INTEGER I
    S=0D0
    DO I=1,N
        S=S+V1(I)*V2(I)
    END DO
    END
C
C
C
    SUBROUTINE MKMAT(N,NMAX,A,OME1,F1)
    IMPLICIT NONE
    INTEGER N,NMAX

```

```

REAL*8 A(NMAX,N),OME1,F1
INTEGER I,J
C
DO I=1,N
  DO J=1,N
    A(I,J)=0D0
  END DO
END DO
C
DO I=0,N-1
  A(I+1,I+1)=OME1*(DBLE(I)+0.5)
END DO
C
DO I=0,N-2
  A(I+1,I+2)=3D0*F1*SQRT(DBLE(I+1))*DBLE(I+1)
  A(I+2,I+1)=3D0*F1*SQRT(DBLE(I+1))*DBLE(I+1)
END DO
C
DO I=0,N-4
  A(I+1,I+4)=F1*SQRT(DBLE((I+1)*(I+2)*(I+3)))
  A(I+4,I+1)=F1*SQRT(DBLE((I+1)*(I+2)*(I+3)))
END DO
C
END
C
C ヤコビ ( jacobi ) 法を用いて実対称行列を対角化する。
C 入力
C   N   :行列の次元
C   NMAX:二次元配列 A, UN の行数 ( NMAX>=N )
C   A   :対称行列 ( この内容はこのサブルーチン実行後、破壊される )
C 出力
C   UN  :固有ベクトル
C   E   :固有値
C
SUBROUTINE JCOB(N,NMAX,A,E,UN)
IMPLICIT NONE
REAL*8 EPS
INTEGER ITMAX
PARAMETER(EPS=1.0D-15,ITMAX=10000)

```

```

INTEGER N, NMAX
REAL*8 A(NMAX, N), UN(NMAX, N), E(N)
REAL*8 C, S, T, U
INTEGER I, J, K, NCNT, NITA
C
DO I=1, N
  DO J=1, N
    UN(I, J)=ODO
  END DO
END DO
DO I=1, N
  UN(I, I)=1DO
END DO
C
NCNT=1
NITA=0
DO WHILE(NCNT.GT.O.AND.NITA.LT.ITMAX)
  NCNT=0
  DO I=1, N
    DO J=I+1, N
      IF (ABS(A(I, J)).GT.EPS) THEN
        NCNT=NCNT+1
        U=(A(J, J)-A(I, I))/(2DO*A(I, J))
        U=U+SIGN(1DO, U)*SQRT(1DO+U*U)
        S=1DO/SQRT(1DO+U*U)
        C=U*S
C
        DO K=1, N
          T=A(K, I)
          U=A(K, J)
          A(K, I)= C*T-S*U
          A(K, J)= S*T+C*U
        END DO
C
        DO K=1, N
          T=A(I, K)
          U=A(J, K)
          A(I, K)= C*T-S*U
          A(J, K)= S*T+C*U

```

```

        END DO
C
        DO K=1,N
            T=UN(K,I)
            U=UN(K,J)
            UN(K,I)= C*T-S*U
            UN(K,J)= S*T+C*U
        END DO
        END IF
        END DO
        END DO
        NITA=NITA+1
    END DO !WHILE
    IF (NITA.EQ.ITMAX) THEN
        WRITE(6,*)'DID NOT CONVERGE'
    END IF
C
    DO I=1,N
        E(I)=A(I,I)
    END DO
C
    END

```